انجمن فیزیک ایران

دانشگاه قم

کنفرانس فیزیک ایران

Annual Physics Conference of Iran

۲ الی ۵ شهریور ۱۴۰۵
دانشگاه قم

24-27 August 2026
University of Qom

کمیته علمی

محمدمهدی اتفاقی (دانشگاه قم)
رضا پورایمانی (دانشگاه اراک)
محمدکاظم توسلی (دانشگاه یزد)
بهرام جزی (دانشگاه کاشان)
محمد خزائی (دانشگاه تهران)
زهرا دهقانی (دانشگاه نیشابور)
علی رضاخانی (دانشگاه صنعتی شریف)
فرهاد شهبازی (دانشگاه صنعتی اصفهان)
زهرا فرائی (دانشگاه تحصیلات تکمیلی زنجان)
آسیه السادات کاظمی (دانشگاه علم و صنعت ایران)
مجتبی مظاهری (دانشگاه همدان)
محمدرضا مظفری (دانشگاه قم)
حسین معینی (دانشگاه شیراز)
عزالدین مهاجرانی (دانشگاه شهید بهشتی)
سید محمدصادق موحد (دانشگاه شهید بهشتی) - **دبیر کمیته**

کمیته اجرایی

محمدمهدی اتفاقی
مهدی غفاریان
وحید جلیلی
سید مهدی فاضلی
لیلا رجایی
محمدرضا مظفری
عباس عابدینی
سید وحید موسوی - **دبیر کمیته**
سید هاشم عارف

دبیرخانه کمیته علمی

تهران، کارگر شمالی، روبروی خیابان ۱۹، دانشکده فیزیک
دانشگاه تهران، دفتر انجمن فیزیک ایران
تلفن: ۸۸۲۲۵۶۹۳-۰۲۱
پست الکترونیکی: physics1405@psi.ir

دبیرخانه کمیته اجرایی

قم، بلوار الغدیر، دانشگاه قم، دانشکده علوم پایه، راهروی A
تلفن: ۳۲۱۰۳۰۸۵-۰۲۵
پست الکترونیکی: apci1405@qom.ac.ir

ثبت نام در : www.psi.ir/f/physics1405

آخرین مهلت ارسال مقاله : ۱۵ اردیبهشت ۱۴۰۵

آخرین مهلت ثبت نام : ۳۱ تیر ۱۴۰۵



ISC

IPM
پژوهشگاه دانش‌های بنیادی

دانشگاه تهران
دانشکده فیزیک

دانشگاه صنعتی شریف

معاونت علمی و فناوری ریاست جمهوری
ستاد توسعه اقتصاد دانش‌بنیان
کواتوم، لیزر و فوتونیک

شرکت مخابرات ایران

۰۵۲۶۰-۹۳۳۱۰

کنفرانس فیزیک ایران

سیزدهمین کنفرانس فیزیک آماری، ماده چگال نرم و سامانه‌های پیچیده

دانشگاه قم – ۲ الی ۵ شهریور ۱۴۰۵

مجموعه مقالات ارائه‌شده در کنفرانس

اعضای کمیته علمی



دکتر محمدمهدی اتفاقی
دانشگاه قم



دکتر رضا پورایمانی
دانشگاه اراک



دکتر محمدکاظم توسلی
دانشگاه یزد



دکتر بهرام جزی
دانشگاه کاشان



دکتر محمد خزائی
دانشگاه تهران



دکتر زهرا دهقانی
دانشگاه نیشابور



دکتر علی رضاخانی
دانشگاه صنعتی شریف



دکتر فرهاد شهبازی
دانشگاه صنعتی اصفهان



دکتر زهرا فرائی
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان



دکتر آسیه السادات کاظمی
دانشگاه علم و صنعت



دکتر مجتبی مظاهری
دانشگاه صنعتی همدان



دکتر حسین معینی
دانشگاه شیراز



دکتر عزالدین مهاجرانی
دانشگاه شهید بهشتی



دکتر سید محمدصادق موحد ا دبیر علمی
دانشگاه شهید بهشتی



دکتر محمدرضا مظفری
دانشگاه قم

پیام دبیر علمی کنفرانس



سید محمدصادق موحد
دانشگاه شهید بهشتی

باسمه تعالی

این مجموعه بخش بسیار کوچکی از برونداد‌های پژوهشی در حوزه‌های مختلف فیزیک در ایران عزیز که در قالب چهل و دومین کنفرانس فیزیک ایران و سیزدهمین کنفرانس فیزیک آماری، ماده چگال نرم و سامانه‌های پیچیده، برگزار شد را نشان می‌دهد. رویداد‌هایی ملی که با هدف ایجاد هم افزایی اندیشمندان و پژوهشگران فیزیک طراحی و اجرا شد و افق گسترده‌ای از موضوعات متنوعی را از فیزیک انرژی‌های بالا و ذرات بنیادی، اختر فیزیک، گرانش و کیهان شناسی، اپتیک و فوتونیک، اطلاعات و محاسبات کوانتومی، ماده چگال نرم و سامانه‌های پیچیده، فیزیک هسته‌ای، پلاسما تا ماده چگال نظری و تجربی، در بر گرفت. یک کاوش هیجان انگیز از دریچه خرد و تعقل به جهان طبیعت.

به عنوان دبیر علمی این کنفرانس از تمامی سخنرانان مدعو، پژوهشگران و شرکت کنندگان تشکر می کنم که با حضور خود به غنای علمی این رویداد افزودند. از همه اعضای کمیته علمی، داوران که با دقتی کم نظیر فرآیند ارزیابی علمی مقالات را به سرانجام رساندند، صمیمانه قدردانی می کنم. این رویداد بدون تلاش‌های بی وقفه همکاران انجمن فیزیک ایران و کمیته اجرایی مستقر در دانشگاه قم، قابل اجرا نبود. برای ایشان آرزوی سلامتی و بهروزی دارم.

در پایان یک بار دیگر خداوندمنان را شاکرم که این توفیق را حاصل کرد تا گامی برای پویایی فضای علمی فیزیک ایران برداریم. امید آنکه این پایان، آغازی دیگر را برای استمرار فعالیت‌های علمی در تراز کیفی تر برای توسعه علمی ایران، رقم بزند.

و آخر دعوانا أن الحمد لله رب العالمین

سید محمد صادق موحد

دبیر علمی کنفرانس

فهرست مقالات

ردیف	شماره	عنوان مقاله و نویسندگان	صفحه
▶ سخنرانی‌های عمومی			
۱		**رمزگشایی از فیزیک چند مقیاسی تکامل کهکشان‌ها و بازخورد هسته‌های فعال کهکشانی در عصر نوین اخترشناسیِ زمانی** راضیه امامی میبدی (پژوهشکده نجوم، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی)	۲
۲		**بوروفین: ماده‌ای دو بعدی با خواص الکتریکی و نوری غیر همسانگرد** یاسر عبدی (دانشگاه تهران)	۴
۳		**محاسبه خصوصیات سیستم‌های نوکلئونی با استفاده از پتانسیل‌های هسته‌ای واقعی: از هسته‌های معین تا ستاره‌های نوترونی** غلامحسین بردبار (دانشگاه شیراز)	۵
۴		**فرمول یادگیری شده کران‌های ال-اچ-سی در برازش‌های جهانی** شهو عبدالسلام (دانشگاه شهید بهشتی)	۶
۵		**روش‌های اپتیکی تصویربرداری مغز: پیشرفت‌ها و افق‌های پیش‌رو** حمید لطیفی (دانشگاه شهید بهشتی)	۷
۶		**بهینه‌سازی با الگوریتم‌هایِ کلاسیکی و کوانتومیِ تقویت شده** ابوالفضل رمضانپور (دانشگاه شیراز)	۸
۷		**همبستگی و اختلال در اندازه‌گیری‌های‌کوانتومی: جلوه‌ای نوین از اصل مکملیت بور و کاربردهای آن** علی اسدیان (دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان)	۹
▶ شاخه: ماده چگال نظری			
۸	۳۸۰	**ناهمسانگردی رسانندگی الکتریکی در شبه فلزات دیراک کج شده** پاک ضمیر، محمد حامد؛ فرایی، زهرا؛ قربانزاده مقدم، علی	۱۱

۹	۴۲۳	**فازهای توپولوژی فلوکه در مواد آلترمغناطیس با تقارن مغناطیسی d_{xy} تحت تابش نور** چراغچی، حسین	۱۵
۱۰	۳۸۸	**تحلیل جامع اصول اولیه آلیاژ هویسلر چهارتایی CoTiIrGe برای کاربردهای اسپینترونیک** اسدی محمد آبادی، احمد ؛ هرمزی نژاد، دستان	۲۰
۱۱	۲۸۲	**مطالعه اثر راستای کج شدگی در تونلزنی کلین ساختارهای دیراکی** پورعلی، فرزانه؛ خضرلو، مریم ؛ گودرزی، هادی؛ لطفی زاده، مهدی	۲۴
۱۲	۳۲۲	**بررسی ترابرد اسپین کالریترونیکی در نانونوارهای استانن با لبه دسته مبلی** کلامی، رضا	۲۸
۱۳	۲۳۱	**القای توپولوژیک حالت‌های لبه‌ای اسپین- قطبی در گرافین دولایه پیچ خورده مجاور عایق توپولوژیک مغناطیسی: رهیافتی برای ترابرد اسپینی بدون اتلاف** اسمعیل پور، فاطمه زهرا ؛ مشحون، سارا	۳۲
۱۴	۱۷۹	**بررسی تحلیلی تانسور هندسی کوانتومی و توپولوژی خاص در سیستمهای دیراک غیرهرمیتی راشبا-درسلهاوس** عبداللهی، ریحانه ؛ زارع، محمد حسین؛ مصدق، حمید	۳۶
۱۵	۱۸۹	**بررسی اثر جهت‌مندی میدان مغناطیسی بر متریک کوانتومی و خمیدگی بری در سیستم‌های راشبا** سعادت‌جو، طاهره ؛ زارع، محمد حسین؛ مصدق، حمید	۴۰
۱۶	۱۹۰	**افزایش غیرعادی متریک کوانتومی و تکینگی های استثنایی در یك سیستم راشبای ناهرمیتی تحت میدان درون صفحه‌ای** سعادت‌جو، طاهره ؛ مصدق، حمید؛ زارع، محمد حسین	۴۵
۱۷	۱۷۸	**هندسه کوانتومی و پاسخ‌های خطی متقاطع در یك سیستم دو نواری تعمیم‌یافته‌ی راشبا-درسلهاوس** عبداللهی، ریحانه ؛ مصدق، حمید؛ زارع، محمد حسین	۴۹
۱۸	۳۴۰	**بررسی اثر تنش مکانیکی بر آمار طیفی در گرافن دولایه: رهیافت آشوب کوانتومی** بابایی دولاما، سوسن؛ فتحی زاده، سمیرا ؛ نعمتی، فاطمه	۵۴
۱۹	۴۲۸	**چهارچوب نظریه بس‌ذره ای برای آمار کوانتومی یکپارچه: توابع گرین و نظریه پاسخ خطی** دورنما، مژگان ؛ اسمعیلی، حبیب؛ بیرامی، محمد؛ نطاق نجفی، مرتضی	۵۸
۲۰	۳۴۱	**بررسی ویژگیهای الکترونی و مغناطیسی اسپینل $NiCo_2O_4$ با استفاده از نظریه تابعی چگالی** مصلح، زهرا	۶۲
۲۱	۲۴۵	**استحراج ضریب ژیالوشینسکی-موریا در FeF_3 به دو روش محاسبات اصول اولیه** جمشیدیان، فاطمه؛ اعلائی، مجتبی	۶۶

۲۲	۷۸	**پاسخ هارمونیک دوم عرضی قابل تنظیم با کرنش در گرافن دولایه قطبیده دره** خیرآبادی، نرجس ؛ شکری، علی اصغر	۷۰
۲۳	۸۳	**بررسی خواص ترموالکتریکی استانن دو بعدی در حضور میدان مغناطیسی** ابراهیمی نژاد، زهرا ؛ عزیزی، فرشاد	۷۴
۲۴	۲۴۶	**تأثیر ساختار موئر در میخکوبی گردشاره‌ها در شبکه کاگومه به منظور افزایش چگالی جریان بحرانی در نوارهای ابررسانا** نجات دشتکی، مریم ؛ حسینی، سید مهدی؛ اوجی فرد، زهرا	۸۰
۲۵	۴۴۳	**میدان بلوری و مغناطش در ترکیب بین فلزی Ce_3PtIn_{11}** ملاباشی، لیلا ؛ جلالی–اسد آبادی، سعید	۸۴
۲۶	۱۹۱	**اثرات اتم‌های لایه پایانی بر ساختار الکترونی تک‌لایه مکسین‌های Sc_2CT_2 (T = F and Br)** مرادی، ابوالفضل ؛ مصطفایی، علیرضا؛ حیدری سمیرمی، ابراهیم	۸۸
۲۷	۱۹۲	**بررسی اثر ابعاد ساختاری بر شکاف انرژی و توزیع فضایی اوربیتال‌ها در مکسین Sc_2CF_2** مرادی، ابوالفضل ؛ مصطفایی، علیرضا؛ حیدری سمیرمی، ابراهیم	۹۲
۲۸	۴۵۷	**حالت‌های مقید مایورانا ناشی از گردشاره درساختارهیبریدی متشکل از ابررسانای آهن‌پایه و نیم‌رسانای با جفت‌شدگی اسپین–مدار** حشمتی، مریم ؛ صحرایی، احمد؛ مشکوری، مهدی	۹۶
۲۹	۳۶۸	**مدل پدیده‌شناختی جریان بحرانی در پیوندگاه جوزفسون تحت تأثیر دما، اختلاف فاز و فشار** اخلاقی قنواتی، بهار ؛ راست خدیو، محمد امین	۱۰۰
۳۰	۲۳۳	**مطالعه اثر دما بر سامانه های میکرومکانیکی ساخته شده از عایق های توپولوژیک دارای ناهمسانگردی تک محوره** شاکر، مریم ؛ تاجیک، فاطمه	۱۰۴
۳۱	۲۶۹	**مطالعه اثر آلایش هافنیوم بر فعالیت کاتالیستی مکسن Mo_2CO_2 در واکنش تولید هیدروژن** بهزادی، فهیمه	۱۰۸
۳۲	۱۳۸	**مطالعه خواص الکتریکی در سامانه نیم‌رسانای ناهگون شامل نقاط کوانتومی متصل به $MAPbI_3$** امینی، محمد ؛ صاحب سرا، پیمان؛ وطنی، فریماه	۱۱۲
۳۳	۴۰۱	**مقایسهٔ خواص الکترونیکی در گرافن تک‌لایه آلاییده با آلومینیوم و قلع با درصد آلایش 1.39%** اسدی محمد آبادی، احمد ؛ هرمزی نژاد، دستان	۱۱۶
۳۴	۳۹۴	**بررسی اثر آلایش ترکیبات چندضلعی کربنی روی خواص ساختاری و الکترونی نانونوارهای نیترید بور با استفاده از محاسبات نظریه‌ی تابعی چگالی** رزم ارا، مصطفی ؛ محمدپور، حکیمه؛ فیروزنیا، آرش	۱۲۰

۳۵	۴۴۵	**مطالعه مونت‌کارلو دینامیک پسماند در مدل آیزینگ دوبعدی تحت میدان مغناطیسی پله‌ای** عظیمیان، عرفان ؛ نوشاد، هوشیار	۱۲۴
۳۶	۴۱۸	**انرژی آزاد غیرتعادلی یک شبکه آیزینگ با سرکوب سیناپسی کوتاه‌مدت** عابدینی، امیرعلی ؛ نوشاد، هوشیار	۱۲۸
۳۷	۳۶۳	**تفکیک مدل‌های سالیتون هایمبورگ-جکسون و پتانسیل عمل هاجکین-هاکسلی با استفاده از میکروسکوپی فاز کمّی (QPM)** عابدینی، امیرعلی ؛ نوشاد، هوشیار	۱۳۲
۳۸	۳۶۰	**اعتبار بسط مرتبه چهارم در مدل سازی ترانسمون و تاثیر آن بر ناهماهنگی و همدوسی کوانتومی** زمانی، نازنین؛ راست خدیو، محمدامین	۱۳۶
۳۹	۱۷۳	**بررسی تحلیلی رسانش الکترونی یک زنجیره اتمی متصل شده به دو هادی از دو جایگاه اختیاری** اکبری چالشتری، تقی ؛ مردانی، محمد؛ ربانی، حسن؛ خلف علی علی، خلدون	۱۴۰
۴۰	۱۳۶	**محاسبه اطلاعات فیشر کوانتومی برای مدل t-U-V** امینی، محمد ؛ صاحب سرا، پیمان	۱۴۳
۴۱	۱۵۴	**ترازهای انرژی نقطه کوانتومی استوانه‌ای در حضور پتانسیل دنگ-فن-اکارت ، میدان‌های مغناطیسی سمتی و شار آهارونوف-بوهم** صادقی، ابراهیم؛ گنجی پور، سید حسین	۱۴۷
۴۲	۱۲۵	**بررسی اثر پهنا بر خواص فیزیکی نانوریبونهای مولیبدن دی سولفاید به روش شبیه سازی** محمد ظاهری، علی حسین	۱۵۱
۴۳	۳۱۰	**بررسی ویژگی‌های نوری ترکیب $C_4H_3FN_2O_2$:رهیافت DFT** آزادپرور، ملیحه	۱۵۵
۴۴	۷۲	**ویژگی‌های اپتیکی پروسکایت‌های Cs_2XInBr_6 $(X = Cu \text{ or } Ag)$ در دو تقریب ذره مستقل و فاز تصادفی** مختاری باغ ابریشمی، علی ؛ نگهداری، فاطمه	۱۶۰
۴۵	۲۲	**اثرات اکسیتونی در طیف جذب اشعه ایکس در نزدیکی ساختار لبه‌ی کالکوژنید تک‌لایه‌ی $BiGaSe_3$** دریکوند، حامد ؛ نجاتی پور، ریحان؛ دادستانی، مهرداد	۱۶۴
۴۶	۲۷۰	**تشدیدهای شبکه‌ای سطحی پلاسمونی با پهنای بسیار باریک در آرایه‌ی دایمرهای نانونیمکره‌ی طلا** آذریان، عباس ؛ نادمی، مریم	۱۶۸

۴۷	۲۲۴	**بررسی متغیرهای هندسی مؤثر بر حسگری پلاسمونیک آرایه نانوذرات پوسته-هسته مبتنی بر آلیاژ گالیم** قدیری، منصوره؛ باقری، مسیح ؛ صاحب سرا، پیمان	۱۷۲
۴۸	۳۹۸	**بررسی ترابرد کوانتومی در نانو نوار نیترید بور در حضور تهی جا** رحمانی ایوریق، نسیم ؛ ستاری، فرهاد	۱۷۶
۴۹	۳۹	**بررسی تأثیر طول شاخه‌ها بر خواص پلاسمونیک نانو ذرات ستاره‌ای شکل طلا استفاده از روش FDTD** آذریان، عباس؛ هاشمی، ریحانه سادات	۱۸۰
۵۰	۲۱۳	**شبیه‌سازی و طراحی حسگر پلاسمونیک حساس مبتنی بر شفافیت القایی پلاسمونیکی در ساختار فلز-فسفر سیاه-گرافن** مرادی، مهرداد ؛ سعادت‌جو، زهرا	۱۸۴
۵۱	۴۳۰	**بررسی تأثیر جانشینی هالوژن بر گاف نواری پروسکایت‌های $MAPbX_3$ $(X = I, Br, Cl)$ با رویکرد بازتحلیل داده‌های تجربی و محاسباتی DFT** مشحون، سارا	۱۸۸
۵۲	۴۴۴	**شبیه‌سازی الگوی پراش بلور گارنت آلومینیوم ایتریوم با نقایص بلوری و آلایش‌های متنوع** کاظمی، زاهده ؛ رضوانی جلال، مسعود؛ سوری، داریوش	۱۹۲
۵۳	۳۸۵	**بررسی رفتار جذب H_2S و CO بر سطح آلیاژ $Pt\text{-}Ru(001)$ با استفاده از محاسبات DFT : بینش‌هایی برای کاربردهای حسگری گاز** یعقوبی نوتاش، مینا	۱۹۶
۵۴	۱۴۵	**مطالعه مقایسه‌ای رفتار جذب گازهای سمی H_2S و CO بر روی سطح $Pt(001)$ با استفاده از محاسبات DFT** یعقوبی نوتاش، مینا	۲۰۰
۵۵	۱۹۳	**نانوپوسته‌های مگنتوپلاسمونیک مبتنی بر هسته آهن یا اکسید آهن با پوسته‌های طلا برای درمان هدفمند سرطان** نعمتی، روح ا... ؛ فرخ نژاد، محسن؛ حسینی فرزاد، محمود	۲۰۴
۵۶	۴۶	**محاسبه رسانش گرمایی دی‌اکسید توریوم با حل معادله ترابرد فونون بولتزمن مبتنی بر تابعی تبادلی-همبستگی بهینه** پیامی شبستر، محمود ؛ شیخی، سمیرا	۲۰۸
۵۷	۱۷۰	**بررسی فراسطح گرافنی با استفاده از یادگیری ماشین-مدل جنگل تصادفی** جودی ،رامین؛ نصیری، مجتبی؛ مددی، ابراهیم	۲۱۳

۵۸	۶۴	**بررسی تاثیر ۴ درصد ناخالصی فلز واسط (آهن، منگنز) بر خواص الکترونیکی و اپتیکی نانونوار لبه دسته صندلی نیترید آلومینیوم** بدیعیان باغ سیاهی، فاطمه ؛ بیرانوند، مهرزاد	۲۱۸
۵۹	۶۳	**اثر آلایش نانو نوار هیدروژنه آلومینیوم نیترید با ناخالصی فلز واسط (آهن، منگنز) بر خواص الکترونیکی و اپتیکی به روش نظریه تابعی چگالی** بدیعیان باغ سیاهی، فاطمه	۲۲۲
۶۰	۷۱	**مطالعه ابتدا به ساکن ویژگی‌های اپتیکی پروسکایت‌های دوگانه آلی-معدنی دارای تهی‌جای منظم: $(K\ or\ NH_4)_2TiCl_6$** مختاری باغ ابریشمی، علی	۲۲۶
۶۱	۲۲۱	**شبیه‌سازی سلول‌های خورشیدی پروسکایتی آلی-غیرآلی آلاییده** باقری، مسیح ؛ روحانی اصفهانی، حورا سادات؛ صاحب سرا، پیمان	۲۳۰
۶۲	۳۷۲	**بررسی هدایت گرمایی فونونی نانو نوارهای آرمچیری کاربید سیلیکون** دشتبانی زاده آرانی، مریم ؛ فرقدان، روح اله	۲۳۴
۶۳	۱۲۳	**بررسی ساختار مکانیکی مکسین کاربید تیتانیوم به روش ابتدا به ساکن** محمد ظاهری، علی حسین	۲۳۸
۶۴	۴۵۹	**محاسبهٔ خواص ساختاری، مکانیکی، ارتعاشی و ترمودینامیکی سوخت راکتور گازی دما بالا با استفاده از روش ابتدا به ساکن** صحافی، محمد حسین ؛ باهنر، مجید	۲۴۲
۶۵	۳۱۵	**تحلیل گرمایی و بررسی کاربرد مدل JMA در شیشه‌های $x MoO_3$-$(60-x)V_2O_5$-$40TeO_2$** حسینی، سیده فاطمه ؛ سوری، داریوش	۲۴۶
۶۶	۴۵۳	**بهبود سوئیچینگ فروالکتریکی $BiFeO_3$ از طریق آلایش همزمان Co و Eu** رحیمی، شهربانو ؛ جلالی اسد آبادی، سعید	۲۵۰
۶۷	۹۹	**بررسی ارتباط آستانه پرکولیشن و ضریب گیج در نانوکامپوزیت‌های پلیمری حاوی نانولوله‌های کربنی با رویکرد میدان میانگین** مظاهری، مجتبی ؛ پاینده پیمان، جواد؛ احمدی، نیکو	۲۵۴
۶۸	۲۷۶	**بررسی ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی ساختار اسپینل $CuMn_2O_4$** یگانه ،محبوبه ؛ واحدی فخرآباد، داود	۲۵۸
۶۹	۳۸۱	**پروب کوانتومی برای زاویه جهت میدان مغناطیسی خارجی سینوسی** پورهاشمی خبیصی، ابوالفضل ؛ حسینی، سید محمد؛ نوروزی، میلاد؛ سید یزدی، جمیله	۲۶۲
۷۰	۲۴۴	**توسعه مدل مبتنی بر یادگیری ماشین برای پیش‌بینی رسانایی یونی در الکترولیت‌های غیر آبی** علیزاده، سارا ؛ گشمرد، حسن؛ هاشمی فر، سید جواد؛ رضایی رکن آبادی، محمود	۲۶۶

۷۱	۲۰۱	**ضریب خودپخشی آب در نانوکانال‌های ساخته شده از بلورهای دو بعدی** انوری فرد، عاطفه ؛ ابراهیمی، فاطمه	۲۷۰
۷۲	۲۵۹	**وابستگی نیروی کاسیمیر در هر دو قطبش امواج الکترومغناطیسی نسبت به ویژگی‌های اپتیکی اجزای سیستم میکروالکترومکانیکی** جهانفر، زیبا ؛ تاجیک، فاطمه	۲۷۴
۷۳	۳۶۴	**برگشت‌پذیری دریچه کانال یونی در عدد رینولدز پایین** عابدینی، امیرعلی ؛ نوشاد، هوشیار	۲۷۸
۷۴	۲۱۹	**شبیه‌سازی رایانه‌ای الگوی پراش XRD نانوذرات گارنت آلومینیوم ایتریوم** کاظمی، زاهده ؛ رضوانی جلال، مسعود؛ سوری، داریوش	۲۸۲
۷۵	۳۵۷	**تاثیر ویژگی های اپتیکی و غلظت نانو ذرات بر اثر کازیمیر در میکرو دستگاه سه لایه‌ای** دادی گیو، زهره	۲۸۶

▶ شاخه: ماده چگال تجربی

۷۶	۳۰۸	**بررسی ساختاری و الکتریکی ساختار دو بعدی N_2V MXene و قدرت جذب اتم های Li توسط آن به عنوان الکترود در باتریهای یون لیتیومی** صورتیان خرم آبادی، سید علیرضا ؛ دوستی، حسین	۲۹۱
۷۷	۷۷	**بررسی تاثیر آلایش نقره بر بهبود عملکرد ابرخازنی الکترود مبتنی بر $NiMoO_4$** کریمی، ارسلان ؛ کاملی، پرویز؛ کاظمی کردابادی، فاطمه؛ مومنی، محمدمحسن؛ اصلی بیگی، باقر	۲۹۵
۷۸	۴۱۶	**سنتز نانوساختارهای آهن–مس بر روی فوم نیکل به عنوان الکتروکاتالیست‌های دوعملکردی کارآمد برای شکافت کامل آب** مروی، کیمیا ؛ ابراهیمی، مهدی	۲۹۹
۷۹	۳۳۰	**ساخت و ارزیابی جمع کننده جریان متخلخل مسی تهیه شده به روش لایه نشانی فیزیکی بخار و آبکاری الکتروشیمیایی برای کاربرد در باتری** نادری، ابوذر؛ مرادی، مهرداد ؛ رحیم آبادی، زهره	۳۰۳
۸۰	۳۱۸	**بهبود عملکرد ابرخازن $NiCo_2O_4$ در اثر آلایش فلوئور** مصلح، زهرا ؛ کاملی، پرویز	۳۰۷
۸۱	۵۰	**بررسی ظرفیت ذخیره‌سازی الکتروشیمیایی هیدروژن در نانوکامپوزیت میل-۱۰۱(آهن)/گرافن اکساید** مالمیر، مریم	۳۱۱
۸۲	۲۲۳	**ساخت و مشخصه‌یابی الکترود انعطاف‌پذیر بر پایه گرافن القاشده توسط لیزر CO_2 به منظور تشخیص همزمان دوپامین و سروتونین** حیدری، مهسا ؛ تقی پور، مجتبی؛ اسدیان، الهام؛ وفایی، محدثه	۳۱۵

۸۳	۲۴۷	تصفیه آب از رنگدانه های آلاینده با استفاده از نانوکامپوزیت های مغناطیسی $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ ملاحسینی، الهام ؛ فرهمندزاده، فرزاد؛ زارع، حکیمه؛ ملایی، مهدی	۳۱۹
۸۴	۳۸۶	اثر هم‌افزایی فعالسازی سطحی و میدان مغناطیسی خارجی در بهبود شکافت فوتوالکتروشیمیایی آب با فوتوآندهای هماتیت آلایش‌یافته با تیتانیوم افشاری، مهدی ؛ قربانی، محمد؛ مشفق، علیرضا؛ ناصری، نعیمه	۳۲۳
۸۵	۱۹۸	مطالعه سینتیک و بهینه‌سازی pH در تخریب فوتوکاتالیستی متیلن آبی توسط نانوکامپوزیت سه جزئی مغناطیسی $Fe_3O_4/ZnO/g\text{-}C_3N_4$ خراسانی پور، ندا ؛ ایرانمنش، پروانه	۳۲۷
۸۶	۱۸۳	سنتز و بررسی کارایی فوتوکاتالیست مغناطیسی $ZnO/CdS_4/FeO_3$ هاشمی نژاد، حلیمه ؛ ایرانمنش، پروانه؛ خراسانی پور، ندا	۳۳۱
۸۷	۴۶۰	طراحی و ساخت سامانه اندازه‌گیری مستقیم اثر مگنتوکالری و ارزیابی عملکرد آن با گادولینیوم عزیپور، مائده ؛ جعفری، منصوره؛ نظیفی، رعنا؛ میرزایی، سید ایمان	۳۳۵
۸۸	۱۳۹	سنتز سبز نانوذرات مغناطیسی Fe_3O_4 با استفاده از عصاره گل ختمی و بررسی ویژگیهای ساختاری، مغناطیسی و فوتوکاتالیستی علیمحمدی، عرفانه ؛ زارعی مقدم، رضا	۳۳۹
۸۹	۷۰	سنتز سبز نانوکامپوزیت $ZnO: Dy(1.5\%)/Fe_3O_4/Biochar$ با استفاده از عصاره گیاه جاجق و بررسی ویژگیهای ساختاری، مغناطیسی و فوتوکاتالیستی منتظری، منیژه ؛ قلی پور شهرکی، مهران؛ صمدی، هستی	۳۴۳
۹۰	۱۲۰	بررسی خواص فوتوکاتالیستی سلنید قلع با سنجش رادیکال‌های آزاد در محیط آبی و تاثیر اکسید گرافن کاهیده درآن با استفاده از دستگاه تشدید اسپین الکترونی ESR قربان شیروی زاده، عزیز	۳۴۷
۹۱	۴۴۷	تاثیر ناخالصی گادولینیوم برساختار و خواص مغناطیسی نقاط کوانتومی مغناطیسی برپایه Fe_3O_4 سلیمانی، صدیقه ؛ زارع، حکیمه؛ دهقانیان، سمیه	۳۵۱
۹۲	۴۰۵	سنتز و مشخصه یابی فریت نیکل-اکسید تیتانیوم $TiO_2/NiFe_2O_4$ مالکی مقدم، میلاد ؛ جمادی، فرناز؛ سیدیزدی، جمیله	۳۵۵
۹۳	۳۹۹	ساخت و مطالعه خواص ساختاری، نوری و فیزیکی ترکیب روی تیتانات آلاییده شده با نیکل به عنوان یک رنگدانه سرامیکی جدید تن سازان، شیما ؛ خواجه امینیان، محسن؛ شهسوای، فاطمه	۳۵۸
۹۴	۲۸۳	بررسی کاربرد هایپرترمیای مغناطیسی نانوذرات اکسید آهن با پوشش کربنی $(Fe_3O_4@C)$ ابراهمیان، ساناز ؛ رحیمی، کوروش	۳۶۲

۹۵	۱۹	**بررسی خواص ساختاری و مغناطیسی مس جایگزین شده در هگزافریت باریم با نسبت‌های مولی مختلف مس به آهن** درازهی، عبدالوهاب ؛ داورپناه، عبدالمحمود	۳۶۶
۹۶	۸۵	**بررسی خواص فوتوکاتالیستی دولایه تیتانیوم دی اکسید/نقره لایه نشانی شده به روش تبخیر حرارتی** گودرزی، مریم ؛ زارعی مقدم، رضا؛ قلی‌پور شهرکی، مهران	۳۷۰
۹۷	۱۲	**مقایسه سنتز سبز نانوکامپوزیت Fe_3O_4/ZnO بانانوذرات ZnO و Fe_3O_4 با عصاره جلبک سبز کره‌ای و بررسی ویژگی های ساختاری و خواص فوتوکاتالیستی و مغناطیسی** صمدی، هستی ؛ زارعی مقدم، رضا؛ قلی‌پور شهرکی، مهران	۳۷۴
۹۸	۲۸۵	**بررسی تأثیر دی‌اکسید تیتانیوم بر خواص ساختاری و دی‌الکتریک سرامیک‌های پایه ویلمیت** ترابی میرزایی، نعیمه ؛ جعفری ندوشن، فاطمه؛ صوابیه، حمیدرضا	۳۷۸
۹۹	۳۶۵	**بررسی اثر دمای کلسیناسیون بر خواص ساختاری و مغناطیسی نانوذرات $La_{0.67}Sr_{0.33}MnO_3$** علی چراغی، لیلا ؛ قاسمی، علی؛ پایمزد، ابراهیم؛	۳۸۲
۱۰۰	۳۹۲	**تأثیر زیرلایه فروالکتریک بر تحرک‌پذیری حامل ها در ترانزیستورهای اثر میدانی گرافنی** بیدمشکی پور، ثمینا ؛ عبدی، یاسر؛ مظاهری، مجتبی	۳۸۶
۱۰۱	۳۷۶	**تاثیر لایه‌نشانی کرایوژنیک اتم‌های مس بر خواص ترابرد گرافن** خادمی، علی	۳۹۰
۱۰۲	۲۶۶	**بررسی اثر ولتاژ گیت بر آشکارسازی نوری گرافن تک‌لایه** زارعی، مهرنوش؛ کاظمی شیخ شبانی، آسیه السادات	۳۹۵
۱۰۳	۳۶۱	**مقایسه عملکرد حسگری هیدروژن در حسگر مقاومتی SnO_2 و نانوکامپوزیت $SnO_2/g\text{-}C_3N_4$** انصاری ،وحیده ؛ کاملی، پرویز؛ مدبراصل، علی؛ رنجبر، مهدی	۳۹۹
۱۰۴	۲۷۵	**مقایسه و بررسی فیلم های نازک YBCO ساخته شده به روش لایه نشانی چرخشی روی زیرلایه های طلا و نقره** مقدم، زهرا ؛ دادرس، صدیقه ؛ سنگ‌پور، پروانه	۴۰۳
۱۰۵	۲۴۰	**تأثیر غلظت لیگاند بر خواص نوری و ساختاری نانوکریستال‌های پروسکایتی** فرخ فال، فاطمه ؛ جودکی، محسن؛ مرندی، مازیار	۴۰۷
۱۰۶	۱۹۶	**رشد و مشخصه یابی ساختاری و اپتیکی نانوساختار دی‌سلنید وانادیوم** خراسانی، فهیمه ؛ ایزدی‌فرد، مرتضی؛ قاضی، محمد ابراهیم	۴۱۱

۱۰۷	۳۱۱	تاثیر افزودنی Sm_2O_3 و $LiNbO_3$ بر مشخصه های دی‌الکتریکی و پیزوالکتریکی سرامیک فروالکتریک PMN-PZT روح الامین، فاطمه ؛ جعفری فشارکی، مرجانه؛ احمدوند، حسین؛ یزدان مهر، محسن	۴۱۵
۱۰۸	۱۵۰	بررسی تاثیر ضخامت لایه فعال تنگستن دی‌سولفید بر عملکرد آشکارسازی نوری آن یزدانی همت آبادی، فاطمه ؛ ستایش مهر، محبوبه؛ خادمی، علی؛ مشفق، علیرضا	۴۱۹
۱۰۹	۲۴	آشکارساز نور خودتوان و سریع مبتنی بر $NiFe_2O_4/p\text{-}Si$ جنتی، سعید ؛ کاملی، پرویز؛ کریمی، ارسلان؛ احمدوند، حسین	۴۲۳
۱۱۰	۲۷۸	ساخت و بررسی حسگر انعطاف پذیر هیدروژن بر پایه لایه نازک پالادیوم/اکسید قلع روی زیرلایه اسپان‌باند با استفاده از روش لایه‌نشانی پالسی لیزری فرزین پور، سید محمد حسین ؛ رنجبر، مهدی؛ شاه آبادی، شهره؛ کیانی، سمیه	۴۲۷
۱۱۱	۲۱۶	بررسی ویژگی‌های ساختاری و نوری ترکیب دوتایی $NiO\text{-}SnO_2$ سنتز شده به روش سل ژل و هیدروترمال جانی‌پور، زینب؛ اردیانیان مهدی؛ باقری محققی، محمدمهدی ؛ فرقرازی، مهسا	۴۳۱
۱۱۲	۲۶۱	بررسی خواص لایه‌های نازک دی اکسید تلوریم تهیه شده با روش ساده تبخیر حرارتی پودر تلوریم توحیدی، توکل ؛ حمدی محمدآباد، پروین؛ طالب زاده، ربابه	۴۳۵
۱۱۳	۴۰۹	پاسخ حسگر تشدید پلاسمون سطحی به غلظت‌های مختلف گلوکز رحیم آبادی، زهره؛ مرادی، مهرداد ؛ طاهری، رمضانعلی	۴۳۹
۱۱۴	۳۴۸	ساخت نانوسیمهای بلوری سربی با استفاده از روش نانوقالب‌گیری مکانیکی-گرمایی احمدی عصربدر، امیررضا ؛ خادمی، علی	۴۴۳
۱۱۵	۲۲۹	LK-99 و چالش های روبرو اصغری، زهرا ؛ دادمهر، وحید	۴۴۷
۱۱۶	۱۴۷	حسگر تشدید پلاسمون سطحی خودتمیزشونده متشکل از آلومینیوم و نانودیسک‌های دی اکسید تیتانیوم برای پایش محیط زیست با حساسیت بالا، هزینه کم و قابلیت استفاده مجدد ستارالعیوب، علی ؛ اخوان، امید؛ خادمی، علی	۴۵۱
۱۱۷	۳۵۹	حسگری کوانتومی میدان مغناطیسی به کمک مراکز نیتروژن-تهی‌جا در الماس قنبری مبارکه، مهرداد ؛ محمدی رنانی، دانیال؛ احمدوند، حسین	۴۵۵
۱۱۸	۲۵۸	بررسی اثر تبدیل همدیس آرایه های پین شدگی کاگومه بر چگالی جریان بحرانی در نوار های ابررسانا نامدار بیلوئی، فائزه ؛ حسینی، سید مهدی؛ اوجی فرد، زهرا	۴۵۹
۱۱۹	۳۹۵	ایده‌های جدید برای حذف آلودگی های زیست محیطی سرانجام ،فاطمه ؛ فرید، منصور؛	۴۶۳

۱۲۰	۲۴۸	طراحی آئروژل‌های فوق‌سبک سلسله‌مراتبی مبتنی بر کیتوسان حاوی $MoSe_2/MMT$ و $MoSe_2/MMT/MWCNT$ با عملکرد تقویت‌شده در جذب امواج مایکروویو دهقانی دشتابی، مهدیه ؛ حکمت آرا، هدی؛ محبی، مسعود؛	۴۶۷
۱۲۱	۳۳۶	ساخت و مشخصه‌یابی نانوحباب‌های مونتاژ شده با نانوذرات سولفید مس دوپ شده با نقره محمودیان، زهرا ؛ احدیان، محمد مهدی؛ مداح حسینی، سید حمیدرضا	۴۷۱
۱۲۲	۹۰	مطالعه خاصیت نوری و فوتوکاتالیستی کربن نیترید گرافیتی آلایش‌شده با دیسپروزیوم، سنتزشده به کمک عصاره شکرتیغال برادران هزاوه، عطیه ؛ قلی پور شهرکی، مهران؛ زارعی مقدم، رضا	۴۷۵
۱۲۳	۱۷۶	تأثیر گروه عاملی فلوئور در تصفیه فلزات سنگین آب (سرب) به‌وسیله نانولوله‌های کربنی ابوالقاسمی، زهرا	۴۷۹
۱۲۴	۱۹۵	بررسی تأثیر زمان سنتز هیدروترمال بر ویژگی‌های نوری نقاط کوانتومی کربنی آلاییده با نیتروژن نادری موحد، فاطمه ؛ رحیمی، کوروش	۴۸۳
۱۲۵	۱۳	اثر دمای الکترولیت برخواص نانوساختاری اکسید روی تهیه شده به روش الکتروکریستالیزاسیون میردریکوندی، سیمین؛ موسیوند، صبا	۴۸۷
۱۲۶	۲۶۰	بررسی اثر آلایش منیزیم بر خواص الکترونیکی نانوورقه‌های SnS_2 با استفاده از اندازه‌گیری و تحلیل مات–شاتکی ستایش مهر، محبوبه ؛ مشفق، علیرضا	۴۹۱
۱۲۷	۷۵	مطالعه تکامل بافت و مکانیزم گذار از زیرلایه در لایه‌نشانی الکتروشیمیایی نیکل روی مس فراهانی، صدف ؛ قاسمی، جواد؛	۴۹۵
۱۲۸	۱۹۹	طراحی و ساخت ممریستور بر پایه مواد آلی (پلیمری) فهندژ، مارال ؛ عباس زاده، داود	۴۹۹
۱۲۹	۱۸	مطالعه اثر غلظت الکترولیت بر ویژگی‌های بلورینگی و مورفولوژی نانوکامپوزیت‌های $GO/Al(OH)_3$ پیری فتح آباد، شیرین؛ موسیوند، صبا	۵۰۳
۱۳۰	۲۳۵	ساخت آلیاژ بین فلزی و غیر استوکیومتری $La_2Mg_{0.62}Y_{0.38}Ni_{10}Mn_{0.5}$ به روش قوس الکتریکی تحت خلا و بررسی خواص ساختاری و هیدرژنی آن سلیقه، زهره ؛ عربی، هادی؛ قربانی، شعبان رضا؛ کمیلی، مجتبی	۵۰۷
۱۳۱	۱۷۷	اندازه‌گیری دینامیک تبخیر مایعات با استفاده از تداخل‌سنج فیبر نوری شریف شاد، نرگس؛ آذریان، عباس؛ عارف، سید هاشم	۵۱۱

۱۳۲	۱۷۲	بررسی خواص مغناطیسی و مورفولوژی نانوکامپوزیت سبز $NiFe_2O_4$ سنتز شده با عصاره بادرنجبویه علي بخشي، سمن ؛ زارعي مقدم، رضا	۵۱۵

▶ شاخه: اپتیک و فوتونیک

۱۳۳	۳۸۹	مهندسی تقارن در دولایه‌های دی‌کلکوژنیدهای فلزات واسطه: مطالعه پایداری و ساختار نواری MoS_2 و $TaX_2(X = S, Se)$ منصوری، معصومه ؛ قلمبر دزفولی، عبدالمحمد	۵۲۰
۱۳۴	۳۴۹	تنظیم‌پذیری پاشندگی سرعت گروه در دی‌کالکوژنیدهای: $TaX_2(X = S, Se)$ نقش مهندسی ضخامت و کالکوژن منصوری، معصومه ؛ قلمبر دزفولی، عبدالمحمد	۵۲۴
۱۳۵	۲۵۱	برآورد تضعیف انرژی خورشیدی توسط ابرها و هواویزها در ایران با استفاده از داده‌های بازتحلیل قمری، خه بات ؛ علی اکبری بیدختی، عباسعلی؛ ثابت قدم، سمانه؛ سیدزاهدی، سیده ئه سرین	۵۲۸
۱۳۶	۲۱۷	مطالعه خواص الکترونی وابسته به تونلزنی کوانتومی القا شده توسط سد میانی و میدان الکتریکی در یك چاه کوانتومی دوگانه سهموی تحت تابش لیزر حقیقی، سهیلا ؛ حقیقت زاده، آزاده؛ عطار زاده، امین	۵۳۲
۱۳۷	۱۷۱	تأثیر میدان مغناطیسی بر خواص الکترونی و تونلزنی کوانتومی القا شده الکتریکی در یك چاه کوانتومی سهموی گالیم آرسنایدآنتیموان نجفی چالشتری، زهرا ؛ حقیقت زاده، آزاده؛ عطار زاده، امین	۵۳۶
۱۳۸	۴۵۸	بررسی تأثیر انرژی فرمی گرافن بر عملکرد یك جاذب فراماده پهنباند در ناحیه تراهرتز فرخی، زهرا ؛ پاکارزاده، حسن	۵۴۰
۱۳۹	۴۵۱	مطالعه عددی اثر جنس و ضخامت پوسته بر ویژگیهای نوری و پلاسمونی نانوذرات هسته- پوسته دو فلزی رحیمی نژاد، فائزه ؛ پناهی بخش،سمیه؛ فرهنگ متین، لاله؛ سماواتی، کتایون	۵۴۴
۱۴۰	۴۴۶	بررسی تغییرات جهتی بلورمایع نماتیك با ناهمسانگردی دیامغناطیسی منفی آلائیده شده با نانوذرات فرومغناطیس صوفی دوش، حسین؛ پورصمد بناب، جعفر؛ دژالود، طاهره	۵۴۸
۱۴۱	۳۴۵	مقایسه عددی رفتار پلاسمونی در آرایه‌های مربعی با تك نانوذره هسته- پوسته دوفلزی رحیمی نژاد، فائزه ؛ پناهی بخش،سمیه؛ فرهنگ متین، لاله؛ سماواتی، کتایون	۵۵۲
۱۴۲	۵۴	طراحی و شبیه سازی آنتنهای اپتیکی پچ محدب و مقعر در قطبش‌های TE و TM استیری، مهدیه ؛ نیکوفرد، محمود	۵۵۶

۱۴۳	۳۱۷	**پلاریتون‌های فونون سطحی جایگزیده در نانوساختارهای کاربید سیلیسیم (SiC)** نوری، مریم	۵۶۲
۱۴۴	۳۰۳	**مدولاتور نوری مبتنی بر ساختار SiCOI با استفاده از ماده تغییر دهنده فاز GST در طول موج 1.55 میکرومتر** عباس پور، مبینا ؛ نیکوفرد، محمود	۵۶۶
۱۴۵	۳۰۱	**طراحی و شبیه‌سازی مدولاتور نوری مبتنی بر موجبر $SiO_2/SiC/SiO_2$ با لایه پوششی Sb_2S_3 قابل تنظیم با تغییر فاز** عباس پور، مبینا ؛ نیکوفرد، محمود	۵۷۰
۱۴۶	۲۷۳	**امکان سنجی ساخت زیست حسگر مبتنی بر بلور فوتونی یك بعدی** فولادی آذر، سجاد ؛ واحدی، علی؛ طالب زاده، ربابه؛ غفوری، محمد؛ فکری اول، صدیقه	۵۷۴
۱۴۷	۲۶۴	**اثر همدوسی فضایی بر جابهجایی گوس- هانچن در بلور فوتونی دارای تشدید فانو با لایه غیرخطی ENZ** باوقار، مهرداد ؛ طالب زاده، ربابه	۵۷۸
۱۴۸	۱۳۱	**تولید رنگ ساختاری با به کارگیری متاسطح‌های دی‌الکتریك سلیکون نیترید** مدرس، محمدحسین ؛ علیان نژادی، مریم	۵۸۲
۱۴۹	۹۳	**شناسایی تومور لیپوما با بهره‌گیری از بلورهای فوتونی آلاییده با ابررسانا** طالب زاده، ربابه ؛ عندلیبی میاندوآب، شبنم	۵۸۶
۱۵۰	۳۶۶	**تبیین ساختار چندزیرپالسی در لیزر فیبری آلاییده به اربیوم کیوسوئیچ فعال با رویکرد امواج رونده** نظری، علی رضا ؛ سیاهوشی، ناصر	۵۹۰
۱۵۱	۲۰۰	**کمینه‌سازی افت حبس‌شدگی در تار مغزی تهی پادتشدیدی با انتخاب مناسب ضخامت مویرگ بر پایه مراتب پادتشدید** پاکارزاده، حسن؛ یکتاپرست، بنفشه ؛ رضائیان کوچی، سلیمان	۵۹۴
۱۵۲	۴۱۴	**بررسی جذب نور در ساختارهای لایه‌ای متشکل از لایه جاذب و بلورهای مایع کلستریک و نماتیک** افشاری ،فائزه ؛ شعاری نژاد، سعید؛ شهشهانی، فاطمه	۵۹۸
۱۵۳	۳۸۳	**محاسبه پارامتر ساختار ضریب شکست جو بر پایه تابع همبستگی سرعت باد** بنام، خسرو ؛ خوشبخت، طاهره	۶۰۲
۱۵۴	۳۶۷	**بررسی اثر اتلاف غیرفعال و جذب حالت برانگیخته بر عملکرد لیزر فیبری آلاییده به اربیوم کیوسوئیچ** نظری، علی رضا ؛ سیاهوشی، ناصر	۶۰۶

۱۵۵	۳۵۳	**بررسی ویژگی های بلور های مایع نماتیک با ناهسانگردی پذیرفتاری دیامغناطیسی منفی آلائیده با نانو ذارت فرو مغناطیس** صوفی دوش، حسین؛ پورصمد بناب، جعفر؛ دژالود، طاهره	۶۱۰
۱۵۶	۲۸۴	**انتشار باریکه لیزر گاوسی و تولید هماهنگ دوم در پلاسمای چند یونی** گودرزی، رضا ؛ جعفری میلانی، محمدرضا	۶۱۴
۱۵۷	۲۸۰	**بررسی عددی انتقال حرارت دوبعدی در مدل تک‌لایه بافت پوست تحت تابش پرتو لیزر مستطیلی** حمزوی، فهیمه ؛ کریمی، محمد جواد؛ بهادران، مهدی	۶۱۸
۱۵۸	۲۳۷	**مدل‌سازی انتقال حرارت زیستی در بافت متخلخل تحت تابش پرتو لیزر گاوسی: ترکیب مدل عدم تعادل حرارتی موضعی با اثر تأخیر فاز دوگانه** حمزوی، فهیمه ؛ کریمی، محمد جواد؛ بهادران، مهدی	۶۲۲
۱۵۹	۱۹۷	**شبیه‌سازی حسگر گازی بر پایه سیلیکون نیتراید در پنجره مخابرات نوری** صبوری، علیرضا ؛ بخشی، زهرا	۶۲۶
۱۶۰	۱۸۲	**طراحی، ساخت و آزمایش میدانی حسگر فیبر نوری توزیعی ارتعاش مدفون** عارف، سید هاشم ؛ محمودی، علی؛ فاضلی، سید مهدی؛ کاظمی، محمد جواد	۶۳۰
۱۶۱	۱۸۱	**پیاده‌سازی آزمایشگاهی ارتعاش سنج توزیعی فیبر نوری و خوانش فاز به روش PGC-DCM** مکتوبیان ،عارفه؛ عارف، سید هاشم	۶۳۴
۱۶۲	۲۰۶	**طراحی و توسعه زنجیره تقویت و آشکارسازی کم‌نویز برای حسگر qPlus در کاربردهای میکروسکوپ پروب روبشی** رجایی گلسفیدی، آرین ؛ چیمه، عباس	۶۳۸
۱۶۳	۹۱	**شبیه سازی فیبر نوری و تاثیر نانو ساختار ها در چگونگی توزیع میدان های الکتریکی و مغناطیسی آن** بخشی، مریم ؛ ضمیر نوری، جاوید؛ ندافان، مرضیه	۶۴۲
۱۶۴	۴۲۵	**بررسی ضریب حساسیت حسگر پلاسمون سطحی در چیدمان کرشمن برای اندازه گیری غلظت گلوکز** فرامرزی، پریزاد ؛ معدنی پور، خسرو	۶۴۶
۱۶۵	۲۳۸	**بررسی عدد اثر ضخامت لایه مکسین بر انتشار نور فیبر نوری پلی متیل متاکریلات به روش تفاضل محدود در حوزه زمان** آقچای، علی محمد ؛ ندافان، مرضیه؛ ضمیرانوری، جاوید؛ پریشانی، مرضیه	۶۵۰
۱۶۶	۲۱۲	**اندازه‌گیری جابجایی عمقی بر پایه تخمین مقیاس شعاعی در تصاویر توری دایره‌ای** صابر، احد؛ آژنگ، آنیا ؛ سیفی، مهسا	۶۵۴

۱۶۷	۱۸۸	**کنترل رفتار جمعی ذرات مغناطیسی با بهرهگیری از انبرک نوری لک و پیس** صدری، محمد هادی ؛ کعبی، ساره؛ مرادی، علی رضا	۶۵۸
۱۶۸	۶۶	**تولید حالتهای غیر کلاسیکی اتم و میدان در یک سامانه اتم-کاواک باز** مجاوری، بشیر ؛ جعفرزاده بهربیگ، رسول؛ خداپرستی، میثم	۶۶۲
۱۶۹	۴۱۲	**انتقال بهینه جمعیت در الگوی جفت شدگی رامان با استفاده از مدل رزن-زنر معکوس** چنگیزی، اسماء ؛ سعادتی نیاری، مقصود	۶۶۶
۱۷۰	۴۰۸	**انتقال باریک‌باند جمعیت در زنجیره‌های کوانتومی با پالس‌های ترکیبی در حضور واکوکی** احسانی، نیّر ؛ سعادتی نیاری، مقصود	۶۷۰
۱۷۱	۱۵۶	**روشی اپتیکی ساده و دقیق برای اندازه‌گیری شعاع کمر پرتو گاوسی بر اساس حداقل توان عبوری در کانون** خلیلی ماهانی، نیلوفر ؛ خان زاده، محمد	۶۷۴
۱۷۲	۱۱۰	**رسم نمایه سه‌بعدی دقیق سطوح با حذف اثرات نامطلوب مدولاسیون فاز در بلورهای پیزو به کمک تحلیل مؤلفه‌های اساسی (PCA)** پروین، پرویز ؛ زیرک، علیرضا؛ صالحی، محمد	۶۷۸
۱۷۳	۸۷	**بهینه‌سازی تولید باریکه‌های لاگر-گاوسی مرتبه بالا با استفاده از توری‌های چنگالی چندحلقه‌ای** خانی، پریسا ؛ امیری، پوریا؛ رسولی، سیف اله	۶۸۲
۱۷۴	۱۷	**تعیین بارتوپولوژیکی باریکه‌های بسل-گاوسی گردابی با استفاده از لکه‌ی پواسون** فتح اله زاده، سمیه؛ شریفی، سیدعلی ؛ رسولی، سیف اله	۶۸۶
۱۷۵	۴۵۲	**تحلیل سازوکارهای افت عملکرد در سلول‌های خورشیدی مبتنی بر پروسکایت سه کاتیونه CsFAMA از طریق مشخصه‌یابی تجربی و مدل‌سازی عددی با SCAPS** کریمی مونه، پریسا ؛ شریفی، نفیسه	۶۹۰
۱۷۶	۲۶۲	**مهندسی فصل مشترک لایه انتقال دهنده الکترون/ پروسکایت با استفاده از عامل اصلاح‌کننده سطحی سولفونیک اسیدی برای افزایش بازده سلول‌های خورشیدی پروسکایتی با الکترود کربنی** غیور، رضا ؛ واحدی، مازیار؛ قاسمی، فاطمه؛ تقوی نیا، نیما	۶۹۴
۱۷۷	۱۴۹	**اندرکنش نیترات سرب با نانوذرات طلا کلوئیدی: پاسخ پالسمونیک و جذب نوری غیرخطی** زحمتکش،الناز؛ شریفی، سهیل ؛ احمدزاده، حسین	۶۹۸
۱۷۸	۱۴۸	**بررسی ضریب جذب غیر خطی و پراکندگی نور شبه الاستیک درنانولوله‌های کربنی چنددیواره** قاسمی، فائزه؛ شریفی، سهیل ؛ شریف مقد، میرزا محمدرضا؛ ایمان پرست، آرمین	۷۰۳
۱۷۹	۱۱۱	**بررسی خواص نوری نانوذرات اکسید نقره و رزبنگال کپسوله‌شده در محیط امولسیون با هدف کاربرد در درمان فتودینامیک** صالح نیا، سجاد؛ شریفی، سهیل ؛ رشیدیان وزیری، محمدرضا	۷۰۷

۱۸۰	۴۳۸	اندازه‌گیری ضرایب شکست و جذب غیرخطی مرتبه سوم کریستال BiB_3O_6 در طول موج 400 نانومتر به روش روبش Z لعلی، سمیرا ؛ پورقباد، دلنیا؛ قطبی، مسعود	۷۱۱
۱۸۱	۲۹۳	یک روش تبادل یونی ساده و به‌صرفه برای کاربردهای تقویت فلورسانس به‌وسیله فلز العبید، زهران ؛ حلاج، رحمان؛ حسن زاده، عبدالله	۷۱۵
۱۸۲	۳۱۹	اصلاح سطح لایه انتقال‌دهنده حفره $CuInS_2$ به کمک پوشش نازک طلا جهت افزایش بازده سلول‌های خورشیدی پروسکایتی با الکترود کربنی قاسمی، فاطمه ؛ غیور، رضا؛ حیدری رامشه، مریم؛ تقوی نیا، نیما؛	۷۱۹
۱۸۳	۵۵	تحلیل نظری و شبیه‌سازی PIC میدان‌های Wakefield ناشی از پرتوهای الکترونی نسبیتی با توزیع Gaussian دوبعدی در پلاسمای مغناطیده مولوی چوبینی، علی اصغر ؛ شاه منصوری، مهران	۷۲۳
۱۸۴	۳۳۱	فیلم‌های نانو کامپوزیت مغناطیسی بر پایه PVA خسرو،سیامند؛ حسن زاده، عبدالله؛ حلاج، رحمان ؛ عزیز، شجاع الدین‌بکر	۷۲۸
۱۸۵	۲۰	بازیابی اطلاعات با استفاده از حالت‌های همدوس فاز-متقارن در ارتباطات کوانتومی همتی، فاطمه ؛ هنرآسا، غلامرضا	۷۳۲
۱۸۶	۱۶	اندازه‌گیری مبتنی بر شدت بار توپولوژیکی باریکه‌های ایری دایروی چرخان با استفاده از توری‌های دامنه‌ای شعاعی شریفی، سیدعلی ؛ فتح اله زاده، سمیه؛ رسولی، سیف اله	۷۳۶
۱۸۷	۱۱	دیش متمرکزکننده خورشیدی مخروطی شکل فولادوند، محمدابراهیم ؛ کرمی، رسول	۷۴۰

► شاخه: سامانه‌های پیچیده، ماده چگال نرم و بیوفیزیک

۱۸۸	۳۰	بررسی مدل کوراموتو با اعمال نیروی میخکوبی در شبکه‌ی تصادفی یداللهی فارسانی، فاطمه ؛ شهبازی، فرهاد	۷۴۵
۱۸۹	۶۸	اثر مهار در همگامی مدل کوراموتوی مرتبه‌ی دوم در شبکه‌های پیچیده همت‌یار طباطبایی، یحیی ؛ شهبازی، فرهاد	۷۴۹
۱۹۰	۵۶	استنتاج احتمالاتی برای تخمین پارامتر قدرت جفت‌شدگی مدل کوراماتو روی شبکه تصادفی با استفاده از شبکه عصبی تخمین‌زننده چگالی احتمال محمدپور، علی ؛ هاشمی، میثم؛ ضیائی مهر، ابوالفضل؛ زارعی، مینا	۷۵۳
۱۹۱	۴۶	ویژگی‌های انحراف بزرگ درختهای پوشای کمینه برای گراف‌های تصادفی ساریخانی، مهدی ؛ هارتمان، الکساندر	۷۵۷

۱۹۲	۷۴	**یادگیری خودنظارتی متغیرهای ترمودینامیکی مدل آیزینگ با استفاده از خودکدگذارپوششی** مالکی، مرتضی ؛ قدرت، ملیحه	۷۶۲
۱۹۳	۵۵	**شواهد رفتار غیرمعمول در ناحیه غیرمغناطیسی مدل بلوم-کاپل در شبکه مربعی دو بعدی با بهره گیری از شبیه سازی مونته کارلو** کیخسروی، کیانوش	۷۶۶
۱۹۴	۸	**اثر حالت های سنگین در شبکه های اجتماعی متوازن بر اساس نظریه هایدر** قریب بلوک، علی ؛ اصانلو، فاطمه؛ کلاه چی، محمد رضا	۷۷۰
۱۹۵	۴۵	**تجزیه‌ی فضای مارکف فرایند موران در گراف حلقه** حسنی، مریم ؛ آقابابائی سامانی، کیوان	۷۷۴
۱۹۶	۲۸	**بررسی رفتار بحرانی در سامانه‌های نورونی با نورون‌های تحریکی و مهاری** عطاالهی، سارا ؛ شهبازی، فرهاد؛ ولی‌زاده، علیرضا	۷۷۸
۱۹۷	۲۸۷	**از مزیت‌های کوچك ژنتیکی تا صفات پیچیده: یك مدل هم تکاملی مبتنی بر بازخورد** خاموشی، سیدآرش ؛ گلبوئی، سید احمد	۷۸۲
۱۹۸	۳۵۲	**اثر حافظه بر دینامیك حرکت افراد** نوزری گلسفید، سپیده ؛ بلباسی، سمیه	۷۸۶
۱۹۹	۸۶	**رویکرد فیزیك آماری در مدلسازی تحلیل تکنیکال در بازارهای سرمایه** پرج، سعید؛ قاسمی نژاد، محسن	۷۹۰
۲۰۰	۶۰	**آنالیز چندفرکتالی توابع موج در مدل آندرسون یك بُعدی با استفاده از رهبرهای موجك** نادری بنی، احمد ؛ بی باك، معصومه؛ مرّی، سجاد؛ میرزا، بهروز	۷۹۴
۲۰۱	۵۲	**آشکارسازی گذار چندفرکتالی در تخلیه سد دی الکتریك غبارآلود با استفاده از آنالیز موجك** نادری بنی، احمد ؛ بی باك، معصومه؛ مرّی، سجاد؛ میرزا، بهروز	۷۹۸
۲۰۲	۳۵۵	**پایداری فاز فرومغناطیس در مدل آیزینگ میدان-تصادفی با توزیع گاوسی حول صفر** برنجکار دریاسری، نگار ؛ دلبری، مطهره؛ دهقان نیری، محمد	۸۰۲
۲۰۳	۲۶۸	**دینامیک بحرانی سامانه‌های دوفازی** سهرابی، شبنم ؛ جعفر پور همدانی، فرهاد	۸۰۶
۲۰۴	۵۷	**شناسایی فاز توپولوژیک در مدل‌های GXY با استفاده از روش بدون نظارت و مبتنی بر ریخت‌شناسی** یوسف زاده، مهدی ؛ خالدی پور، محمد؛ موحد، سید محمدصادق	۸۱۰
۲۰۵	۳۳	**ریخت شناسی مجموعه گشت به عنوان نشانگر گذار فاز و هشدار زودهنگام** خالدی‌پور، محمد ؛ روشندل، سینا؛ موحد، سید محمد صادق	۸۱۴

۲۰۶	۷۹	**وابستگی نرخ رمبش کوانتومی به شدت درهم‌تنیدگی سیستم دستگاه آزمون عددی در مدل آیزینگ مزوسکوپیک** خرقه انداز، میلاد ؛ شفیعی، افشین	۸۱۸
۲۰۷	۳۷	**حل عددی معادله شرودینگر برای یک شبکه عصبی کوانتومی** کدیور، عرفان؛ رضایی حیدری، فاطمه	۸۲۲
۲۰۸	۷۵	**هندسه‌ی ترمودینامیکی آمارهای کلاسیکی و کوانتومی تعمیم‌یافته به روش سودو آنالیز** بایرامی، نگین ؛ محمدزاده، حسین؛ آگاهی، حمزه؛ مهری دهنوی، حسین؛ عبادی، زهرا	۸۲۶
۲۰۹	۴۰	**تقویت همکاری و مهار گسترش همه‌گیری در شبکه‌های پیچیده** نوری، مهران ؛ عظیمی، ناهید؛ سلحشور، محمد	۸۳۰
۲۱۰	۵۹	**ارزیابی گذارهای بحرانی در مدل همه‌گیری تصادفی مرتبه‌کسری توسط آنتروپی همسانی** صفرپور دوبخشری، امین رضا ؛ موحد، سید محمدصادق	۸۳۴
۲۱۱	۴۹	**بررسی انتشار ازدحام ترافیکی در شبکه معابر شهری با معرفی شبکه کارکردی و با استفاده از مدل تپه‌شنی** بهمنی اصل، رضا ؛ اکبرزاده، میثم	۸۳۸
۲۱۲	۸۲	**مطالعه تطبیقی عملکرد الگوریتم های انیلینگ کلاسیک و الهام گرفته از کوانتوم در لبه بحرانی مسئله SAT-3** قنبری مبارکه، مهرداد ؛ احمدوند، حسین	۸۴۲
۲۱۳	۳۸	**هزینه‌ی ترمودینامیکی یادگیری در پرسپترون با قواعد یادگیری هب و اویا** مصطفایی، محمدمهدی ؛ موحد، سید محمدصادق	۸۴۶
۲۱۴	۳۱۴	**بررسی اثر زبری سطح الکترود در مقیاس نانو بر دینامیک شلیک نورون** رضائی کاشانی، نگار نوروزی فر، احسان	۸۵۰
۲۱۵	۳۴۲	**تحلیل رفتار دینامیکی میکروحباب ها در سیال غیرنیوتنی خون** سفیدکار، نرمین؛ بهنیا، سهراب؛ فتحی زاده، سمیرا	۸۵۴
۲۱۶	۲۳۴	**اثر نیروی ناشی از تخلیه بر پویایی دایمر در یک پتانسیل واشبرد** پرویني، میلاد؛ نوری، سمیه؛ مرادیان، علی؛ سیدزاهدی، سیده ئه سرین	۸۵۸
۲۱۷	۳۳۷	**تحلیل توزیع اطلاعات در آرایه‌های حسگر فوتوآکوستیک با استفاده از نقشه آنتروپی جهت شناسایی المان‌های آشکارسازی بهینه** خویش خواه، بهاره ؛ خامسی نائینی، مرتضی علی	۸۶۲
۲۱۸	۸۰	**مدل‌سازی تصادفی توده‌عصبی ریتم آلفای قشر مغز: از نوسان‌گر میرا تا برآورد بیزی پارامترها** کیائی جمالی، مهتاب ؛ هاشمی، میثم؛ ولی‌زاده، علیرضا	۸۶۶

۲۱۹	۴۷	**ناهمگام‌سازی در شبکه عصبی متعادل تحریکی-مهاری با استفاده از منحنی‌های پاسخ فاز و دامنه** احمدی، احسان ؛ ولی‌زاده، علیرضا	۸۷۰
۲۲۰	۴۱	**شبکه نوریستورهای اسپایکی: یادگیری برآمده از طریق انتشار حرارتی و هم‌زمانی** درخشان باهر، آیتن ؛ معنوی نژاد، علیرضا؛ باقری کلهر، مهسا؛ تویبر، یوو؛ جعفری، رضا	۸۷۴
۲۲۱	۳۱	**افزایش وفاداری تله پورت کوانتومی در شبکه‌های فوتونیک نویزی با استفاده از جداسازی دینامیکی** رضائی، رضا ؛ آزادمرزآبادی، مهدی؛ رمزی، امیررضا	۸۷۸
۲۲۲	۷۲	**مدل‌سازی چندمقیاسی نانوکامپوزیت $Fe_3O_4@CoFe_2O_4$: از دینامیک اسپینی تا هایپرترمیا** میرزایی، حوریه ؛ احسانی، محمد حسین؛ رمضانی، علی	۸۸۲
۲۲۳	۲۷	**شبیه سازی عددی رفتار هیدرودینامیکی سیال سوسپانسیون در جریان تیلور-کوئت** صفری، سولماز ؛ حمزه پور، حسین؛ بحرانی، سید امیر	۸۸۶
۲۲۴	۷	**هندسه ترمودینامیکی سامانه ای با آمار کوانتومی میانجی** نقی زاده اردبیلی، محمدحسین ؛ یحیایی منعم، امید؛ محمدزاده، حسین	۸۹۰
۲۲۵	۶۵	**سازوکار مولکولی القای انحنا در غشا توسط نانوقفس‌های پروتئینی؛ بررسی نقش مرتب‌سازی لیپیدی** شادی، رهنما ؛ اجتهادی، محمدرضا	۸۹۴
۲۲۶	۵۸	**حرکت پخشی باکتری در محیط هیدرودینامیکی ناهمگن و ناهمسانگرد کنار دیواره** صحافی، رژین ؛ نجفی، علی؛	۸۹۸
۲۲۷	۳۲	**مطالعه اصطکاک غیرتماسی میان دو لایه سیلیکا با جدایش نانومتری به روش دینامیک مولکولی** ولی زاده درخشان، عرفان ؛ رجب پور، علی؛ منتظری، عباس؛ مرابیا، سامی	۹۰۲
۲۲۸	۸۱	**خواص الکترونی و ترابردی نانو نوارهای سیلیسین لبه نامتقارن** آزادی، الهام؛ فرقدان، روح اله؛	۹۰۶
۲۲۹	۴۸	**بررسی اثر ناهمسانگردی تک‌محوره بر نیروی کاسیمیر در سامانه‌های میکرومکانیکی ساخته شده از عایق‌های توپولوژیک** نصیری، زهرا ؛ تاجیک، فاطمه	۹۱۰
۲۳۰	۲۳	**بررسی سهم چندقطبی‌های الکتریکی و مغناطیسی در یک نانوکره‌ی هسته پوسته‌ی طلا-سیلیسیوم در حضور میدان مغناطیسی پایا** همتی کلی، حمیده ؛ نصیری، مجتبی؛ مددی، ابراهیم	۹۱۴
۲۳۱	۱۷	**بررسی ترمودینامیک آمار تعمیم یافته کلاسیک مبتنی بر تابع گاما** سیفی جگرکندی، مریم ؛ عبادی، زهرا؛ محمدزاده، حسین	۹۱۸

۲۳۲	۷۴	**نمودار فازی بلورهای مایع نماتیک** واشقانی فراهانی، مریم ؛ مظفری، محمدرضا	۹۲۲
۲۳۳	۳۲۰	**راهبردهای مدیریت بار شناختی در آموزش مفاهیم انتزاعی فیزیک: یافته‌هایی از یک سنتزپژوهی** دلاور، محمد ؛ خاکی، پگاه؛ احمدی، فاطمه	۹۲۶
۲۳۴	۵۰	**بررسی کاهش نویز در الگوریتم جستجوی کوانتومی تقویت شده** رمضان پور، ابوالفضل؛ همایونی سنگری، مرجان	۹۳۰
۲۳۵	۳۹۰	**گروه‌های همسانی سطوح زبر ناهمسانگرد** چوپانیان، امید ؛ جلالی کنفی، محمدحسین؛ موحد، سید محمدصادق	۹۳۴
۲۳۶	۳۷۴	**بررسی تحولات سری زمانی تغییرات قیمت سهام با نوفه خارجی با کمک الگوی بلک-شولز با استفاده از روش عددی اویلر-ماریاما مبتنی بر جمع Ito** نجفی، امین ؛طراوتی احمد، پریسا	۹۳۸
۲۳۷	۱۵۲	**همسانی مداومت شبکه فضای حالت به عنوان نشانگر هشدار زودهنگام گذار بحرانی** ایمان نژاد، نازنین ؛ موحد، سید محمدصادق	۹۴۳
۲۳۸	۳۰	**بررسی آلودگی هوا بر اساس توزیع تسالیس** کل العماد، اطهره السادات ؛ علی محمدی، مسعود	۹۴۷

► شاخه: نجوم، گرانش و کیهان‌شناسی

۲۳۹	۲۲۲	**تصحیحات تک حلقه در مدل دو فازی غلتش فوق آرام** نصیری راد، امین؛ شیخ احمدی، حیدر	۹۵۲
۲۴۰	۷۹	**تاثیر میدانهای اسکالر و الکتریکی بر تکینگی‌های جواب‌های دقیق معادلات اینشتین** صادقی، فاطمه ؛ میرزا، بهروز	۹۵۶
۲۴۱	۲۶۷	**شرایط انرژی کرم چاله‌های عبورپذیر منبسط شونده ۵-بُعدی در حضور انرژی تاریک قطب** کرد زنگنه، مهدی ؛ فدعمی، مریم؛ حکمی شلمزاری، مهدی	۹۶۰
۲۴۲	۳۴۳	**بررسی تصحیح فاز تجمعی ناشی از اصل عدم قطعیت تعمیم‌یافته در انتشار امواج و کاربرد آن در مخابرات نوری همدوس** روشن، مریم	۹۶۵
۲۴۳	۱۰۵	**ناپایداری ابرتابشی سیاهچاله‌های کر در نظریه نوین چهاربعدی اینشتین-گاؤس-بونه** رحمانی، افسانه	۹۶۹
۲۴۴	۳۵۶	**مقیدسازی کیهانشناسی کانیاداکیس با استفاده از هسته سازی مهبانگ** شهبازی، آوا ؛ شیخی، احمد	۹۷۳

۲۴۵	۲۱۱	**شواهدی بر جهان باز در داده‌های اخیر کیهانشناسی** طالبیان، علیرضا ؛ رضازاده، کاظم	۹۷۹
۲۴۶	۲۸۸	**سه مقیاس، یك آنتروپی: انتخاب طبیعی آنتروپی تسالیس در دینامیك گرانشی** شاماری، شهریار ؛ شیخی، احمد	۹۸۳
۲۴۷	۱۵۷	**اثر چرخش‌های موضعی کیهانشناسی برآستانه تشکیل و فراوانی سیاهچاله‌های نخستین** حسینی فرد، محمد ؛ مهرآفرین، محمد؛ تقی زاده فیروزجایی، جواد	۹۸۷
۲۴۸	۶۸	**تشکیل سیاهچاله‌های آغازین و امواج گرانشی القایی در مدل تورمی تاکیونی پدیدارشناختی** خاکسار حقانی، پریا ؛ رشیدی، نرگس	۹۹۱
۲۴۹	۸۰	**حل معادله کلاین–گوردون در فضا–زمان ریسمان کیهانی** شیرانی بیدآبادی، میلاد ؛ احمدی کلاته، فاطمه	۹۹۵
۲۵۰	۴۳۶	**اثر ناگوسیت نخستین متساوی‌الاضلاع‌گونه در گروه‌های همسانی میدان‌چگالی ماده‌تاریک** کریمی، ریحانه ؛ جلالی، محمدحسین؛ طالبیان، علیرضا؛ موحد، سید محمدصادق	۹۹۹
۲۵۱	۳۲۷	**گروه‌یابی مبتنی بر میدان چگالی ماده برای شناسایی برهم‌کنش‌های دینامیکی میان سامانه‌های کهکشانی** غفور، پارسا ؛ انصاری فرد، سعید؛ جلالی کنفی، محمد حسین؛ موحد، سید محمدصادق	۱۰۰۳
۲۵۲	۹۵	**بررسی منحنی چرخش کهکشان NGC 2403 در گرانش کانفرمال بدون ماده تاریک** راستکار ثمرین، بهار؛ میرزا، بهروز؛ انجم شعاع، همایون	۱۰۰۷
۲۵۳	۲۱۴	**بررسی اثر دما بر ساختار ستاره‌های نوترونی چرخان با استفاده از معادلع حالت LPB** ریاحی، رشید	۱۰۱۱
۲۵۴	۳۶	**سیاهچاله‌های تاب–نات شبه AdS در گرانش بامبلیبی به عنوان ماشین گرمایی** اسلام‌پناه، بهزاد؛ سلیمان‌نژاد، کسری	۱۰۱۵
۲۵۵	۳	**ترمودینامیک و تحلیل پایداری سیاهچاله‌های چرخان در حضور الکترودینامیک توانی** دهقانی کاظمی، محسن	۱۰۱۹
۲۵۶	۴۲۲	**پیش بینی فراوانی سیاه‌چاله‌های اولیه با برش کیهانی کاوشگراقلیدس** صافی، سارا ؛ فرهنگ، مرضیه	۱۰۲۳
۲۵۷	۲۳۶	**کیهان‌شناسی با مساحی‌هایِ کهکشانیِ انتقال‌به‌سرخ بالا** انصاری فرد، محمد ؛ نیکبخت، بهار؛ نامجو، محمد حسین	۱۰۲۸
۲۵۸	۳۱۶	**طیف توان شار جنگل لیمان آلفا در طیف اختروش‌ها** رضائی دارستانی، سارا ؛ پژوهش، رضا؛ آقائی، علیرضا	۱۰۳۲

۲۵۹	۱۳۴	**تبخیر کوانتومی کرمچاله JNW در حضور پتانسیل کلمن-واینبرگ** دهقانی، سمیرا ؛ غفارنژاد، حسین	۱۰۳۸
۲۶۰	۳۳۳	**پیشرفت نظامند گرمایش شرارهای از نقطه تهی مغناطیسی تا پایه‌های نورسپهری** حسینی، راضیه ؛ یوآن، دینگ؛ توابی، احسان	۱۰۴۲
۲۶۱	۱۲۷	**بهینه‌سازی دقت زاویه‌ای آرایه البرز** خالقی ماکلوانی، سعید ؛ بهمن آبادی، محمود	۱۰۴۶
۲۶۲	۴۱۰	**مطالعه جریان های هم راستا با میدان (FAC) طی توفان ژئومغناطیسی می 2024 با استفاده از داده های Swarm و AMPERE** صابرنیا، محمد ؛ صبری، سمیه	۱۰۵۱
۲۶۳	۲۷۲	**بازنمایی نهان داده‌های نورسنجیِ تلسکوپ اقلیدس با استفاده از خودرمزگذار ماسک‌شده** برهمن، مهسا ؛ وجودی سلمانی، ریحانه؛ انصاری فرد، سعید؛ موحد، سید محمد صادق	۱۰۵۵
۲۶۴	۱۰۳	**تشخیص همگرایی گرانشی در فوران‌های پرتو گاما با استفاده از شبکه‌های عصبی ترکیبی** ناهیدی، علی ؛ ژولیده حقیقی، محمدحسین؛ کلانتری، زینب	۱۰۵۹
۲۶۵	۷۳	**تخمین انتقال‌به‌سرخ فوران‌های پرتو گاما با استفاده از یادگیری ماشین** قنبری، آرمین ؛ ژولیده حقیقی، محمد حسین	۱۰۶۳
۲۶۶	۴۰۶	**کاربست یادگیری ماشین در طبقه بندی ستارگان شیمیایی غیرمعمول** بلوکی، اکرم ؛ وثیق، فاطمه؛ کومار، نیتش؛ گوش، سورات چاندرا؛ ضیاءعلی، الهام؛ جوشی، سانتوش؛ صفری، حسین	۱۰۶۷

▶ شاخه: هسته‌ای

۲۶۷	۴۶۳	**بررسی ضخامت پوسته نوترونی هسته ^{208}Pb توسط برهمکنش اسکایرم OMGA*** ناصرقدسی، امید؛ مقدری امیری، مرتضی	۱۰۷۲
۲۶۸	۲۹۴	**استخراج فراکتال- آنتروپی داده های پرتو ایکس به منظور تشخیص تومور مغز با رویکرد یادگیری عمیق** رضایی، رضا؛ طیبی، جواد؛ رضایی راینی نژاد، محمد رضا	۱۰۷۶
۲۶۹	۴۲۷	**بررسی دزیمتری پیش‌بالینی $[^{113m}$In]In-somatostatin analogue در تصویربرداری SPECT از تومورهای نوروآندوکرین مثبت** ذوالقدری، سمانه ؛ صابری، فاطمه؛ یوسف نیا، حسن	۱۰۸۰
۲۷۰	۴۲۴	**برآورد دز جذبی اندامها برای رادیوداروی بمبزین اصلاح‌شده نشان‌دار با گالیوم-۶۸ بر اساس داده‌های تجربی** یوسف نیا، حسن؛ کریمیان، آرزو؛ ذوالقدری، سمانه	۱۰۸۵

۲۷۱	۳۱۳	**بررسی مقایسه‌ی رسوب انرژی پروتون در بافتهای ماده‌ی سفید و ماده‌ی خاکستری مغز با استفاده از شبیه‌سازی TRIM/SRIM** پاشازاده، مهدی ؛ الماسی فرد، فاطمه	۱۰۸۹
۲۷۲	۱۱۶	**مطالعه مونت‌کارلو اثر محتوای اکسیژن سلول بر بازده آسیب پروتون‌ها** معینی، حسین ؛ مکاری بهبهان، مجتبی	۱۰۹۳
۲۷۳	۱۱۸	**مقایسه مواد کندکننده در شکل‌دهی طیف نوترونی مولد D-T برای کاربرد BNCT با استفاده از MCNPX** اصغری، سنا؛ علوی، علیرضا؛ قپانوری، مریم؛ دهقانی، وحید	۱۰۹۷
۲۷۴	۱۴	**بررسی پراکندگی مزون‌های π^0 و $\pi^{\pm}$ از هسته Pb در چارچوب اصل عدم قطعیت تعمیم یافته** آرمات، آیدا ؛ موسوی نژاد، سید محمد	۱۱۰۱
۲۷۵	۱۶۴	**تحلیل توزیع دز هوای شتابدهنده رادوترون یزد با استفاده از ابزار Geant4** جلیل پور، شاهین؛ رضایی راینی نژاد، محمد رضا ؛ شیر مردی، پژمان؛ ریاحی، آرزو؛ حافظی مقدم، رضا	۱۱۰۵
۲۷۶	۲۰۲	**ارزیابی مشخصات دز جذب‌شده در آب برای باریکه‌ی پروتونی 170 مگاالکترون‌ولت: مقایسه تحلیلی و مونت‌کارلو** حیدرلو، نعمت الله؛ کاظم تبریزی، فاطمه ؛ آقامیری، سیدمحمودرضا	۱۱۰۹
۲۷۷	۱۶۷	**شبیه‌سازی افزایش دز تومور چشمی حاصل از نانوذرات مختلف در پروتون‌درمانی با قله براگ گسترش‌شده 62.8 مگاالکترون‌ولت** حبیبی، فاطمه ؛ پرنگ، زهره؛ حسینی مطلق، نسرین؛ کشاورز، علیرضا؛	۱۱۱۳
۲۷۸	۲۱۸	**ارزیابی عملکرد حفاظ کامپوزیت پلیمری چندلایه سبک در برابر پرتوهای گامای فضا با استفاده از شبیه‌سازی Geant4** دارم، زهرا ؛ کریمیان، علیرضا	۱۱۱۷
۲۷۹	۱۱۷	**نقشه‌برداری مکانی دز نوترون و گاما و ارزیابی کارایی حفاظ پرتوی دستگاه IR – IECF با استفاده از شبیه‌سازی Geant4** قپانوری، مریم ؛ بخشوده پور، فاطمه	۱۱۲۱
۲۸۰	۲۲۷	**اندازه‌گیری غیرمخرب ضخامت و چگالی نئوپان با سامانه عبوری پرتوی گامای Am: – 241 مطالعه تجربی و اعتبارسنجی مونت‌کارلو** حیدرلو، نعمت الله؛ محمدزاده، محمد؛ کاظم تبریزی، فاطمه	۱۱۲۵
۲۸۱	۲۸۱	**محاسبه افت انرژی و اتلاف توان باریکه الکترون در پنجره خروجی یك شتابدهنده صنعتی 800 کیلو الکترون ولت** طالبی، سارا ؛ قاسمی، بهجت؛ قاسمی، فرشاد؛ آقایان، عبدالمهدی	۱۱۲۹
۲۸۲	۲۹۱	**بررسی تأثیر مواد ترمیمی دندانی بر دوز فوتون ثانویه در درمان با الکترون تراپی** کاراموزیان، مرضیه؛ رضایی راینی نژاد، محمد رضا ؛ طیبی، جواد؛ زیدابادی، مجید؛ اتقایی، مرجان	۱۱۳۳

۲۸۳	۲۲۸	تحلیل پاسخ الکتریکی مس تحت تابش یون‌ساز از طریق تلفیق شبیه‌سازی مونت‌کارلو و مدل Drude	۱۱۳۷
		شعبان، امین؛ رضایی راینی نژاد، محمد رضا ؛ زیدآبادی، مجید؛ عباسی، یاسر؛ دریجانی، رضا	
۲۸۴	۱۶۲	سنتز و مشخصه یابی خواص حفاظتی شیشه سرامیک‌های اکسی‌فلوریدی در مقابل تشعشعات گاما: رویکردی نوین در توسعه حفاظ‌های شفاف تابشی	۱۱۴۴
		رحیمی، منیجه ؛ فایقی نیا، آیدا	
۲۸۵	۱۲۹	بررسی اثر تشدید $\Lambda(1405)$ در طیف تکانه و انرژی دوترون های ناشی از برهم کنش $\mathbf{K^-_{stopped}} + {}^3\mathbf{He} \to d + (\Sigma + \pi)$	۱۱۴۸
		مختاری، زهرا ؛ اسماعیلی، جعفر	
۲۸۶	۴۷	استفاده از آشکارساز رانش سیلیکونی چهارقسمتی در آنالیز کمی میکروپیکسی با بهره‌گیری از نرم‌افزار GeoPIXE	۱۱۵۲
		غلامی حاتم، ابراهیم	
۲۸۷	۴۵۴	تعیین تجربی ضریب انرژی سطحی در مدل پتانسیل مجاورت با استفاده از آنالیز سطح مقطع همجوشی در واکنش های $^{37}Cl + {}^{130}Te$ ، $^{37}Cl + {}^{68}Zn$ و $^{30}Si + {}^{142}Ce$	۱۱۵۶
		موسوی چرندابی، میرحسین ؛ قرائی، رضا	
۲۸۸	۳۴۷	محاسبه ترازهای انرژی منیزیم در پتانسیل های برهمکنشی مختلف و مقایسه با نتایج تجربی	۱۱۶۰
		کوهستانی، محسن	
۲۸۹	۳۲۶	بررسی وابستگی دمایی جرم موثر برای برخی ایزوتوپ‌ها و ایزوتون‌های پایدار، زوج-زوج و کروی با استفاده از مدل میدان میانگین نسبیتی	۱۱۶۴
		یغمائی، بامداد ؛ دهقانی، وحید؛ مهمان دوست خواجه داد، علی اکبر	
۲۹۰	۲۸۶	بررسی اثر بار هسته‌ی هدف بر دینامیک فرآیند یونش در برخورد پروتون با اتم هیدروژن و یون اتم هلیوم	۱۱۶۸
		امیری بیدوری، سعیده ؛ فتحی، رضا	
۲۹۱	۲۳۹	اثرات کشش سطحی در گذار فاز باریون-کوارک براساس مدل توماس-فرمی	۱۱۷۲
		شفیعی، سیدسینا ؛ غضنفری مجرد، مهدی؛ قائم مقامی، سیدعلیرضا	
۲۹۲	۳۲۵	محاسبه ریسک ابتلا به سرطان و دز جذبی ناشی از پرتوزایی رادیوایزوتوپ‌های طبیعی و مصنوعی در رسوبات رود گلوگاه	۱۱۷۶
		پورایمانی، رضا ؛ مرتضوی شاهرودی، سید محسن؛ قربانی، روشنک	
۲۹۳	۳۲۳	محاسبه نرخ واکنش اندرکنش گیراندازی تابش گاما $\mathbf{d}(\alpha,\gamma)^6\mathbf{Li}$ در نظریه میدان موثر خوشه‌ای	۱۱۸۱
		نظری، فرزانه ؛ رادین، مهدی؛ معنی آزانی، مهدی	
۲۹۴	۲۷۴	فعالیت‌ها و دستاوردهای تحقیق و توسعه شتاب دهنده خطی رادیو فرکانسی الکترون	۱۱۸۵
		زارعی، سارا ؛ قاسمی، فرشاد؛ صنایع حجری، شاهین؛ آقایان، سید عبدالمهدی؛ لامعی رشتی، محمد؛ عباسی دوانی، فریدون	

۲۹۵	۴۳	**اثر اتساع جرم بر مهار کوانتومی ناپایداری ریلی-تیلور در همجوشی لختی (ICF)** مرادی، زیبا ؛ قاسمی‌زاد، عباس؛ مهرانگیز، مهسا	۱۱۸۹
۲۹۶	۶	**مطالعه فرایند واپاشی هسته ^{224}Th وابسته به انرژی برانگیختگی** امیدوار، زینب ؛ اسلامی زاده، هادی	۱۱۹۳
۲۹۷	۳۰۶	**طراحی پروتوتایپ ساختار شتاب‌دهنده چندسلولی S − Band با گرادیان شتاب‌دهی ثابت** مستاجران، مریم	۱۱۹۷
۲۹۸	۲۰۹	**بهینه‌سازی چشمه الکترونی و شنت‌های مغناطیسی در یک تفنگ الکترونی خمیده ۲۷۰ درجه با آهنربای دائم** مصلحی بهارانچی، الناز ؛ حسنوند، مریم	۱۲۰۱
۲۹۹	۱۱۵	**بازسازی تصویر در تصویربرداری پروتونی با استفاده از موقعیت ورودی و خروجی آن از هدف** حسین، معینی؛ مکاری بهبهان، مجتبی	۱۲۰۵
۳۰۰	۲۱۵	**بررسی انرژی آستانه بازدارندگی همجوشی در سیستمهای ^{48}Ca $+^{48}$ Ca و ^{36}S $+^{64}$ Ni** قاسمی، طاهره ؛ ناصر قدسی، امید	۱۲۰۹
۳۰۱	۳۷	**پتانسیل تک‌ذره‌ای ماده هسته‌ای نامتقارن در چارچوب روش LOCV** زیارتی، زهرا ؛ مشفق، حمیدرضا	۱۲۱۳
۳۰۲	۱۰	**گسیلِ نوترینو از ستاره ی نوترونیِ خارج از تعادل بتا: اثر اندرکنش واقعی نوکلئون ها و حضور هایپرون های آزاد** دهقان نیری، اکرم ؛ مشفق، حمیدرضا	۱۲۱۷
۳۰۳	۱۰۱	**مطالعه افروزش ضربه‌ای سوخت پیشرفته پروتون-بور۱۱ راه‌اندازی شده با باریکه یون سنگین** مومنی، قاسم قاسمی‌زاد، عباس؛ مهرانگیز، مهسا	۱۲۲۱

▶ شاخه: انرژی‌های بالا، ذرات بنیادی و ریاضی فیزیک

۳۰۴	۳۲۹	**بازنگری محتوای کوارک‌های سنگین پروتون در چارچوب فاکتورگیری- k_t** اولنج، نعیمه	۱۲۲۶
۳۰۵	۴۱	**اثرات تصحیحات QED در محاسبه توابع توزیع پارتونی قطبیده** حضرتی ،فهیمه؛ تقوی شهری، فاطمه؛ علیزاده یزدی، زهرا؛ متقی‌زاده مرضیه،	۱۲۳۰
۳۰۶	۲۳	**بررسی تابع ساختار پروتون توسط یادگیری ماشین** آتشبارتهرانی، شاهین؛ استرکی، الهام؛ اربابی‌فر، فاطمه	۱۲۳۴
۳۰۷	۳۳۴	**استفاده از عناصر ماتریسی دامنه‌ی احتمال برای جستجوی نظریه‌ی میدان موثر** قاسمی، عظیمه ؛ بخشیان سهی، حامد	۱۲۳۸

۳۰۸	۳۲۸	**بررسی کسرانشعاب دیفرانسیلی واپاشی $B \to K_0^* \mu^+ \mu^-$ در هولوگرافی جبهه‌ی نوری با دینامیک طولی** همتی، عسری ؛ خسروی، رضا	۱۲۴۲
۳۰۹	۱۶۶	**ساخت نظریه‌های غیرخطی تعمیم یافته‌ی الکترومغناطیس با استفاده از میدان کمکی** کرم دوست، علی ؛ بابائی آقبلاغ، حسین؛ محمدزاده، حسین	۱۲۴۶
۳۱۰	۲۵۵	**دامنه هلیسیتی و کسر هلیسیتی در واپاشی‌های $t \to bV$** احمدی، مریم ؛ منعم زاده، مجید؛ تعظیمی، نرگس	۱۲۵۰
۳۱۱	۱۴۴	**جداسازی پتانسیل نسبیتی برهمکنش مقید در فضازمان مینکوفسکی** جهانشیر، آرزو	۱۲۵۴
۳۱۲	۱۲۲	**محاسبه پهنای واپاشی تابشی باریون های سنگین چارم در مدل کوارکی شبه نسبیتی** قلعه نوی، زهرا ؛ موذن سرخی، معصومه	۱۲۵۸
۳۱۳	۳۳۸	**محاسبه‌ی نیروی کششی کوارک سنگین با کمک یادگیری عمیق ماشین** منصوری، مهدی ؛ بی تقصیر فدافن، کاظم	۱۲۶۲
۳۱۴	۱۵۱	**بررسی تطبیقی محتوای کتابهای درسی فیزیک ایران در زمینه مفاهیم مکانیک کوانتومی با چند کشور منتخب** ربیعی کاشانکی، محیا ؛ احمدی، فاطمه	۱۲۶۶
۳۱۵	۸۹	**کوانتش دوگانه‌ی مکانیک ۳بعدی همراه با پنجره‌ی اضافه‌ی ۲بعدی** قهرمان، زهرا؛ دهقانی، مهدی ؛ منعم زاده، مجید	۱۲۷۰
۳۱۶	۱۶۵	**ریشه میانگین مربع شعاع مولکول‌های مزون-باریون $D^* \Sigma_{c,s,b}$ و $B^* \Sigma_{c,s,b}$** آرمات ،آیدا	۱۲۷۵
۳۱۷	۸۴	**طیف درهم‌تنیدگی در نظریه‌ی میدان نرده‌ای با پتانسیل موضعی** حسینی توچایی، فاطمه ؛ محمدی مظفر، محمدرضا	۱۲۷۹
۳۱۸	۲۰۳	**پدیدارشناسی ذره تک‌تایی η در مدل هیگز مرکب کمینه** اصغرزاده جلودار، رضا ؛ بی تقصیر، کاظم	۱۲۸۳
۳۱۹	۲۰۷	**ویژگی‌های جدید تابع تتای طیفی و کاربردهای آن در مطالعه ناوردایی مشخصه‌های جبرهای نظریه ریسمان های کوانتومی** بهرامی نسب، محمدرضا ؛ قمی نژاد، مهرداد	۱۲۸۷
۳۲۰	۲۹۰	**کران هندسی رشد فضای پیکربندی قابل دسترس در انبساط آزاد زمان‌محدود گاز کامل** خاموشی، سیدآرش ؛ عسگریان، فاطمه	۱۲۹۱

۳۲۱	۱۶۱	بررسی اثر ماده تاریک بوزونی بر تغییرشکل‌پذیری کشندی ستاره‌های کوارکی شگفت در فاز CFL در مدل دو شاره ای صداقت، جلیل ؛ بردبار، غلامحسین؛ حقیقت، منصور؛ زیرجد، سید محمد	۱۲۹۵
۳۲۲	۳۹۷	نقض نامساوی لگت-گارگ در نوسان‌های نوترینو اتمسفری با استفاده از فرمالیسم ماتریس شبه-چگالی اتفاقی، محمد مهدی؛ حاجی پور، هانیه	۱۲۹۹
۳۲۳	۴۵۵	تأثیر ریسمان کیهانی بر خواص طیفی و ترمودینامیک سامانه‌های کوانتومی روشن ضمیر نیکو، محمد	۱۳۰۳
۳۲۴	۴۱۵	تأثیر روش پیش‌بینی-مشاهده-تبیین (POE) و شبیه‌ساز PhET بر درک مفهومی نمودارهای حرکت در دانش‌آموزان: مطالعه‌ای بر مبنای تحلیل داده‌های پیش‌آزمون-پس‌آزمون موسی پور خوئینی، زینب	۱۳۰۷
۳۲۵	۲۳۲	اصلاحات نسبیتی جرم و پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی در طیف جرم هایپر هسته‌ها جهانشیر، آرزو	۱۳۱۱
۳۲۶	۲۰۸	چارچوبی جدید برای توابع بیضوی: اصطلاحات و خواص در جبرهای نظریه ریسمان‌های کوانتومی بهرامی نسب، محمدرضا ؛ قمی نژاد، مهرداد	۱۳۱۵
۳۲۷	۸۲	ذرات با تکانه زاویه‌ای ذاتی در فضازمان FJNW شتابدار انجم شعاع، همایون ؛ میرزا، بهروز؛ راستکار ثمرین، بهار	۱۳۱۹
۳۲۸	۱۵	پهنای واپاشی تابشی باریون‌های Ξ^* با ساختار دو کوارک سنگین آرمات، آیدا ؛ موسوی نژاد، سید محمد	۱۳۲۳
۳۲۹	۳۷۹	مطالعه طیف انرژی پتانسیل تعمیم‌یافته هولتن-هلمن در حضور نقص توپولوژیکی در چارچوب مکانیک کوانتومی روشن ضمیر نیکو، محمد؛	۱۳۲۷
۳۳۰	۴۵۰	اثر ژول-تامسون در سیاهچاله های باردار آنتی دوسیته نظریه الکترودینامیک غیر خطی مهدویان یکتا، داود؛	۱۳۳۱

► شاخه: اطلاعات کوانتومی، محاسبات کوانتومی و اپتیک کوانتومی

۳۳۱	۳۷۳	دینامیک تحول واهمدوسی ساختارهای زیرپلانکی دولتشاهی، ساره ؛ توسلی، محمدکاظم	۱۳۳۶
۳۳۲	۲۶۵	چیدمان فضاییِ اتم‌های دوترازی و انفجارهای ابرتابشی در یک کاواک غیرخطی مرتبه‌دوم لطفی، فرزانه گلشن، محمدمهدی؛	۱۳۴۰

۳۳۳	۱۴۰	**خنک سازی نوسانگرپارامتری اپتیکی تک مد برای تولید حالتهای خالص ایستاوارچلانده گاوسی** فصیحی آقبلاغ، محمدعلی ؛ راشدی، خدیجه	۱۳۴۴
۳۳۴	۱۰۴	**بررسی تأثیر برهمکنش همسایه های اول و دوم بردینامیک یک سیستم چهار ذره‌ای تحت میدان لیزر چرپ شده با شرایط مرزی دوره ای** رستمی‌دوبانی، کوثر ؛حسینی، مهدی	۱۳۴۸
۳۳۵	۲۴۱	**پایدار سازی درهمتنیدگی کل در یک سامانه چند جزئی** فصیحی آقبلاغ، محمدعلی ؛ مجاوری، بشیر؛ محمدی، مهسا	۱۳۵۲
۳۳۶	۵۹	**ترابرد کوانتومی گرمایی در سامانه‌های دوکیوبیتی XXZ با برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا** جاقوری، حکیمه	۱۳۵۶
۳۳۷	۹۷	**تحلیل اطلاعات فیشر کوانتومی حالت‌های GHZ در حضور نویزهای کوانتومی** قنواتی، صغرا ؛ صبور، عباس	۱۳۶۰
۳۳۸	۴۰۷	**تنظیم سریع طول موج در SPOPO غیرهم‌خط BiBO با کنترل طول کاواک و بدون چرخش بلور** پورقباد، دلنیا ؛ قطبی، مسعود	۱۳۶۴
۳۳۹	۱۶۳	**ترابرد کوانتومی ایمن حالت همدوس با منبع فشردهٔ گرمایی در محیط های اتلافی** عباس نژاد، فرخنده ؛ مهربانکار، سمیه؛ افشار، داوود	۱۳۶۸
۳۴۰	۱۲۸	**بررسی جمعیت کوانتومی و بازده تبدیل در مبدل کوانتومی امواج مایکروویو به امواج اپتیکی** کاظمی، علی ؛ کدیور، عرفان	۱۳۷۲
۳۴۱	۳۲	**بهبود دقت پلاریمتری کوانتومی بوسیله اسکن دوبعدی نمونه دوشکستی** بیرژندی، سمانه ؛ نورالهی، حمزه؛ مستاجران، سمانه	۱۳۷۶
۳۴۲	۴۰۲	**تولید حالت‌های نزدیک همدوس مرتبه بالا با تعمیم عملگر تبدیل شرطی** نحوی‌فرد، الهه؛ ؛ بذرافکن، محمدرضا	۱۳۸۰
۳۴۳	۲۳۰	**اثرات غیرخطی کر بر روی تابع احتمال خطا و نسبت سیگنال به نویز در مبدل‌های الکترواپتومکانیک** غفارزاده، محمد رضا ؛ توسلی، محمد کاظم	۱۳۸۴
۳۴۴	۴۳۲	**شبیه‌سازی کوانتومی تغییراتی مدل هابرد با شرایط مرزی متناوب به روش VQE** زینلی، عطیه ؛ بخشی، زهرا	۱۳۸۸
۳۴۵	۳۵۰	**کنترل کوانتومی درهم‌تنیدگی اتم–فوتون در سیستم‌های باز با استفاده از پمپاژ ناهمدوس** محمدی، داود؛ اسدپور، سیدحسین؛ جعفری، محمود	۱۳۹۲

۳۴۶	۹۶	**تحلیل درهم‌تنیدگی چندبخشی در سیستم‌های ستاره‌ای اسپینی هایزنبرگ XY تحت تأثیر میدان مغناطیسی** صبور، عباس؛ قنواتی، صغرا	۱۳۹۶
۳۴۷	۲۱۰	**معرفی حسگری کوانتومی با فوتون‌های آشکارسازی نشده در حالت چند طیفی با دقت بالا** بدری، محمد؛ نوروزی، رحمان	۱۴۰۰
۳۴۸	۱۰۷	**پیاده سازی دروازه های کوانتومی پنج بعدی بل با استفاده از تکانه زاویه‌ای مداری نور** کوثری، مهدی ؛ بابازاده، امین؛ حسینی فرزاد، محمود	۱۴۰۴
۳۴۹	۲۶	**مهندسی توابع همبستگی برای مسدودسازی جفت فوتونهای درهم‌تنیده** دهقانی، علیرضا	۱۴۰۸
۳۵۰	۱۵۳	**انتقال اطلاعات کوانتومی از طریق تبخیر سیاه چاله:پروتکل هیدن-پرسکیل با رمزگشای فاز کوانتومی به کمک یادگیری ماشین** مظفرناصرآباد ،بنیامین	۱۴۱۲
۳۵۱	۵۸	**اطلاعات فیشر کوانتومی محلی و سنجه تلاقی حالت ترابرد شده از طریق زنجیره XXZ هایزنبرگ با برهمکنش دژیالوشینسکی–موریا** جاقوری، حکیمه	۱۴۱۶
۳۵۲	۶۵	**شارژ یک باتری کوانتومی با گربه های شرودینگر** مجاوری، بشیر ؛ فصیحی، محمدعلی؛ عبدی، نسرین	۱۴۲۰
۳۵۳	۲۷	**حالت های همدوس برامده از چندجمله‌ای‌های هرمیت** دهقانی، علیرضا	۱۴۲۴

▶ شاخه: پلاسما

۳۵۴	۱۱۳	**اعتبارسنجی مدل عددی پتانسیل الکتریکی گرید کروی در دستگاه محصورسازی الکتروستاتیکی اینرسی (IECF) با استفاده از حل تحلیلی حلقه باردار** قپانوری، مریم ؛ باقری، علی	۱۴۲۹
۳۵۵	۴۱۷	**مطالعه امکان‌سنجی استخراج لیتیوم از محلول آبی با استفاده از راکتور جت پلاسمای تخلیه سد دی‌الکتریک** محمودیان، محمدرضا ؛ حسن بیگی، علی؛ بخش زاد محمودی، مهدی	۱۴۳۳
۳۵۶	۱۳۰	**بررسی اثر قطبش اسپین و برهمکنش تبادل بر ناپایداری مدولاسیونی امواج یونی ـ صوتی در پلاسمای کوانتومی مغناطیده** رضوانی، امیرحسین ؛ میرابوطالبی، صدیقه؛ رجایی، لیلا؛ شریفیان، محمودرضا	۱۴۳۷
۳۵۷	۳۰۰	**تریگر لیزری وابسته به کاتد در سامانه شکاف جرقه نانو ثانیه‌ای: یک بررسی آزمایشگاهی** مقدسی‌نژاد، السا ؛ قلمبر دزفولی، عبدالمحمد؛ مرشدیان، نادر	۱۴۴۱

۳۵۸	۲۲۰	**بررسی اثر پلاسمای گلاید آرک بر کنترل فساد و افزایش ماندگاری فیله قزل‌آلای رنگین‌کمان**	۱۴۴۵
		سیدالنگی، مائده السادات ؛ ساری، امیرحسین؛ نوروزی، بهاره	
۳۵۹	۲۱	**بررسی پارامترهای پلاسما و شکست الکتریکی در گاف جرقه‌ی مسی تحت تحریک لیزر اگزایمر**	۱۴۴۹
		مقدسی نژاد، السا؛ قلمبر، عبدالمحمد؛ مرشدیان، نادر؛ آتشبارتهرانی، شاهین	

کنفرانس فیزیک ایران

دانشگاه قم – ۲ الی ۵ شهریور ۱۴۰۵

مجموعه مقالات شاخه

سخنرانی‌های عمومی

www.psi.ir/f/physics1405

رمزگشایی از فیزیک چند مقیاسی تکامل کهکشان‌ها و بازخورد هسته‌های فعال کهکشانی در عصر نوین اخترشناسیِ زمانی

امامی میبدی ، راضیه

پژوهشکده نجوم، پژوهشگاه دانشهای بنیادی، باغ لارک، روبروی اراج، بزرگراه ارتش، تهران

چکیده

یکی از پرسش‌های بنیادین در کیهان‌شناسی و اخترفیزیک، چگونگی شکل‌گیری و تکامل کهکشان‌ها در طول زمان کیهانی است. تکامل کهکشانی به ذات خود فرایندی چندمقیاسی است که طیف وسیعی از پدیده‌های فیزیکی را به هم پیوند می‌دهد؛ از اخترفیزیک سیاه‌چاله‌ها در مقیاس افق رویداد، تا فرایندهای باریونی که در مقیاس کهکشانی و پیرامون‌کهکشانی در سراسر تاریخ کیهان فعال هستند.

در این سخنرانی، چارچوبی چندمقیاسی برای مطالعهٔ تکامل کهکشان‌ها ارائه خواهم داد که دامنه‌ای از سیاه‌چاله‌های آبرُپرجرم در مقیاس افق رویداد تا تحول ریخت‌شناختی کهکشان‌ها و فرایندهای بازخورد باریونی را در بر می‌گیرد. این رویکرد با بهره‌گیری از شبیه‌سازی‌های مِگنتوهیدرودینامیکِ نسبیتیِ عام شبیه‌سازی‌های کیهان‌شناختی، و همچنین داده‌های رصدی حاصل از تلسکوپ افق رویداد، پروژهٔ طیف‌سنجی انرژی تاریک، تلسکوپ فضایی جیمز وب و دیگر پیمایش‌های بزرگ نجومی، به بررسی این موضوع می‌پردازد که چگونه فرایندهای فیزیکی در مقیاس‌های بسیار متفاوت، به‌گونه‌ای هم‌افزا بر تکامل کهکشان‌ها در طول زمان کیهانی اثر می‌گذارند.

در مقیاس افق رویداد، چارچوب نوینی مبتنی بر همبستگی ملدهای قطبش E و B معرفی خواهم کرد که به‌منظور بررسی ویژگی‌های سیاه‌چاله‌های آبرُپرجرم، از جمله اسپین و هندسهٔ میدان مغناطیسی در نزدیکی افق رویداد، تدوین شده است. سپس به مقیاس کهکشانی می‌پردازم و بحث خواهم کرد که چگونه از شبیه‌سازی‌های کیهان‌شناختی برای مطالعهٔ تحول ریخت‌شناختی کهکشان‌ها استفاده می‌شود و اینکه توزیع ستارگان چگونه اطلاعات ارزشمندی درباره ماهیت ماده تاریک و تاریخچهٔ سرشت کهکشان‌ها در طول زمان کیهانی در خود نهفته دارد. در ادامه، بازخورد هسته‌های کهکشانی فعال را به‌عنوان سازوکاری کلیدی معرفی خواهم کرد که فیزیک سیاه‌چاله‌ها را به تکامل کهکشان‌ها در مقیاس‌های گوناگون پیوند می‌دهد. در این راستا، به شبیه‌سازی‌های کیهان‌شناختی انجام‌شده با تجویزهای متفاوت بازخورد هسته‌های کهکشانی فعال خواهم پرداخت که به‌گونه‌ای طراحی شده‌اند تا نقش بازخورد در تنظیم ریخت کهکشانی و شکل‌گیری ستارگان را بررسی کنند. در پایان، به این موضوع خواهم پرداخت که چگونه از رصدهای طیف‌سنجی برای ارتقای دانش ما درباره سازوکارهای گوناگون دخیل در غنای فلزی و چرخهٔ مادهٔ باریونی در کهکشان‌ها استفاده می‌شود و نقش جریان‌های گازی ورودی و خروجی در تکامل کهکشانی آشکار می‌گردد.

در مجموع، این پژوهش‌ها در پی آن هستند که درک یکپارچه‌تری از چگونگی تنظیم هم‌زمان تکامل و شکل‌گیری کهکشان‌ها در طول تاریخ کیهان توسط بازخورد هسته‌های کهکشانی فعال و فرایندهای باریونی فراهم آورند.

Unraveling the Multi-Scale Physics of Galaxy Evolution and AGN-Feedback in the Time-Domain Era

Emami Meibody, Razieh[1]

[1] *School of Astronomy, Institute for Research in Fundamental Sciences, Larak Garden, opposite Araj, Artesh Highway, Tehran*

Abstract

One of the outstanding questions in cosmology and astrophysics is how galaxies form and evolve across the cosmic time. Galaxy evolution is inherently a multi-scale process that connects a wide range of physical phenomena, from the horizon-scale black hole (BH) astrophysics to baryonic processes which are widely operating on galactic as well as the circumgalactic scales across the cosmic time.

In this talk, I will present a multi-scale framework for studying galaxy evolution, spanning from horizon-scale supermassive black holes (SMBHs) to the morphological evolution of galaxies and baryonic feedback processes. This approach leverage general relativistic magnetohydrodynamical (GRMHD) simulations, cosmological simulations, as well as the observational data from the Event Horizon Telescope (EHT), DESI, JWST, and other large astronomical surveys to investigate how physical processes across vastly different scales would jointly shape galaxy evolution over the cosmic time.

At horizon scales, I will introduce a novel E/B-mode polarization correlation framework developed to probe SMBH properties, including BH's spin and magnetic field geometry near the event horizon. I will then move to galaxy scales, where I will discuss how cosmological simulations is used to study the morphological evolution of galaxies and reveal how stellar distributions encode valuable information about the nature of dark matter and the assembly history of galaxies across the cosmic time. I will further present the feedback from active galactic nuclei (AGN-feedback) as a key mechanism linking BH physics to galaxy evolution across different scales. In this context, I will discuss cosmological simulations ran with different AGN-feedback prescriptions designed to investigate how feedback regulates galaxy morphology and star formation. Finally, I will address how spectroscopic observations are being used to improve our knowledge on various mechanisms involved in the metallicity enrichment and baryon cycling operating in galaxies, unravelling the role of gaseous inflow and outflows in galactic evolution.

Together, these studies aim to provide a more unified understanding of how AGN-feedback and baryonic processes collectively regulate the formation and evolution of galaxies throughout cosmic time.

بوروفین: ماده ای دو بعدی با خواص الکتریکی و نوری غیر همسانگرد

یاسر عبدی

دانشکده فیزیک دانشگاه تهران

چکیده

در این سخنرانی، ابتدا به معرفی بوروفین به‌عنوان یک نیم‌فلز دوبعدی نوظهور و روش‌های سنتز آن می‌پردازم و سپس جدیدترین دستاوردهای خود را در این زمینه ارائه خواهم داد. برخلاف گرافین که پاسخ فلزی آن به ناحیهٔ فروسرخ محدود می‌شود، بوروفین سنتز شده توسط ما، قابلیت‌های چشمگیری در طیف مرئی از خود نشان می‌دهد. رفتار پلاریتونی این ماده، آن را به کاندیدایی ممتاز برای کاربردهای پلاسمونیک در ناحیهٔ مرئی تبدیل کرده است. در ادامه، نشان خواهم داد که چگونه ترکیب بوروفین غیرهمسانگرد با نانوساختارهای نیم‌رسانا، منجر به افزایش تشدیدی فرایندهای نوری غیرخطی می‌شود. کوپلینگ پلاسمون-اکسیتون در این ساختارهای ناهمگون، تولید هارمونیک دوم را با تقویتی معادل دو مرتبهٔ بزرگی در طول‌موج‌های ۴۰۰ و ۸۰۰ نانومتر ممکن می‌سازد و مسیری تازه برای تبدیل فرکانس در مقیاس نانو فراهم می‌آورد. در بخش پایانی، به طراحی و ساخت آشکارسازهای نوری بر پایهٔ بوروفین با ویژگی‌های اپتوالکترونیک غیرهمسانگرد خواهم پرداخت و نشان خواهم داد که چگونه این ویژگی خاص، بوروفن را به گزینه‌ای برجسته برای ساخت آشکارسازهای نوری با کاربردهای ویژه تبدیل می‌کند .

محاسبه خصوصیات سیستمهای نوکلئونی با استفاده از پتانسیلهای هسته ای واقعی: از هسته های معین تا ستاره های نوترونی

بردبار، غلامحسین

بخش فیزیک، دانشگاه شیراز، میدان ارم، شیراز

چکیده

سیستمهای نوکلئونی مجموعه ای متشکل از نوترونها و پروتونها می باشند که تحت اثر پتانسیل هسته ای قوی با یکدیگر برهمکنش می کنند. با توجه به قدرت بالای این برهمکنش، محاسبه خصوصیات سیستم مذکور ساز و کار مخصوص خودش را دارد که تا حدود زیادی با روشهای محاسباتی در دیگر شاخه های فیزیک متفاوت است. حال در این کار قصد داریم که ابتدا شرح مختصری درمورد خصوصیات برهمکنش بین نوکلئونها ارایه دهیم. سپس نحوه انجام محاسبات برای سیستم نوکلئونی قویا برهمکنش کننده با استفاده از پتانسیلهای هسته ای واقعی را شرح می دهیم. در ادامه کاربرد محاسبات مذکور را در بررسی هسته های معین و سپس خصوصیات ساختاری ستاره های نوترونی مورد بحث قرار داده و نهایتا نتایج کارهای انجام شده را ارائه می دهیم.

Calculation of nucleonic systems properties by employing realistic nuclear potentials: from finite nuclei to neutron stars

Bordbar, Gholam Hossein

Department of Physics, Shiraz University, Shiraz

Abstract

Nucleonic systems are a composition of neutrons and protons that interact with each other under the influence of a strong nuclear potential. Due to the high strength of this interaction, the calculation of properties of mentioned systems needs a special mechanism that is substantially different from computational methods in other branches of physics. Now, in this work, at first, we intend to provide a brief description of the properties of inter-nucleonic interactions. Then, we describe how to perform calculations for a strongly interacting nucleonic system employing the realistic nuclear potentials. Next, we discuss the application of mentioned calculations in the study of finite nuclei and the structure properties of neutron stars. Finally, we present the results of our works in these matters.

فرمول یادگیری شدهٔ کران های ال–اچ–سی در برازش های جهانی

عبدالسلام، شِهو[1]

[1] *دانشکده فیزیک دانشگاه شهید بهشتی، تهران*

چکیده

تحلیل‌های نظری در مدل‌های فراتر از مدل استاندارد ذرات بنیادی با مشکلات جدی در محاسبات پیچیده و زمان بر روبرو هستند که استفاده بهینه از داده‌های آزمایشگاهی را محدود می‌کند. به عنوان راه‌حل، روشی مبتنی بر معادلات ریاضی یاد گرفته شده از داده‌ها را معرفی می‌گردد. این راه‌حلی دقیق، سریع و قابل درک برای چالش ذکر شده می‌تواند تحولی در پژوهش های مقایسه نظریه‌ها با نتایج آزمایشگاهی ایجاد کند. نوآوری اصلی این کار پژوهشی، امکان استفاده مستقیم از محدودیت های تجربی برخورددهنده هادرونی بزرگ (ال–اچ–سی[1]) همزمان با محدودیت‌ها از سایر آزمایش‌های دیگر در برازش‌های جهانی برای نخستین بار است. با حذف نیاز به شبیه سازی های سنگین و زمان‌بر، این رویکرد جدید سرعت تحلیل های نظری را به‌طور چشم گیری افزایش میدهد و راه را برای آزمون کارآمدتر مدل های جدید فیزیک ذرات بنیادی هموار میسازد. روش محاسباتی ارائه شده را میتوان در سایر حوزه‌های علمی و صنعتی که نیازمند تقریب کارآمد داده‌های پیچیده هستند نیز به‌کار گرفت.

Machine-learned formular from LHC limits for global fits

AbdusSalam, Shehu[1]

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

Abstract

Theoretical analyses related to models beyond the Standard Model (BSM) of particle physics face serious challenges due to the complexity and time-consuming nature of certain required computations. This limits the efficient use of experimental data in the global fits of BSMs. As a solution, we introduce a method based on mathematical formulae that can be machine-leaned from data. This approach offers an accurate, fast, and interpretable way to address the mentioned challenges and can transform the way theoretical predictions are compared with experimental results. The main novelty of this research is that, for the first time, it shows how experimental constraints from the Large Hadron Collider (LHC) together with other experimental constraints can be incorporated directly into BSM global fits. This new approach, bypassing computationally intensive and time consuming simulations, accelerates theoretical analyses and paves the way for more efficient tests of new particle physics models. The proposed computational method can also be applied in other scientific and industrial fields that require efficient approximation of complex data.

[1] Large Hadron Collider (LHC)

Optical Approaches to Brain Imagin

Latifi, Hamid[1]

[1] *Department of Physics and Laser and Plasma research Institute, Shahid Beheshti University, Tehran*

Abstract

Modern neuroscience relies on a diverse optical toolkit to probe brain structure and function across spatial and temporal scales. This talk surveys several complementary imaging modalities done at Shahid Beheshti University, outlining their physical principles and applications.
Confocal and light-sheet microscopy provide high-resolution structural imaging—confocal for point-scanned cellular detail, light-sheet for rapid, low-phototoxicity volumetric imaging of larger tissue volumes. For functional readouts, voltage-sensitive dye imaging captures millisecond-scale membrane potential changes across neural populations, while intrinsic optical signal imaging maps activity-driven changes in tissue absorption and scattering without exogenous labels. Vascular dynamics are addressed via laser speckle contrast imaging, which derives blood flow maps from scattered coherent light statistics, and photoacoustic imaging, which pairs optical excitation with ultrasonic detection for deep, high-resolution vascular and oxygenation imaging.
By comparing resolution, penetration depth, and temporal characteristics across these modalities, this talk discusses framework for selecting and combining optical imaging techniques to study neural circuits and neurovascular function.

بهینه سازی با الگوریتم هایِ کلاسیکی وکوانتومیِ تقویت شده

رمضان پور، ابوالفضل[۱]

[۱]بخش فیزیک دانشگاه شیراز ، ارم ، شیراز

چکیده

بسیاری از مساله های مهم مانند پیدا کردن حالت تعادلی یک سیستم فیزیکی و یادگیری شبکه‌های عصبی را می توان به شکل یک مساله ی بهینه سازی فرمول بندی کرد. به خاطر وجود همبستگی های قوی و بلند برد بین متغیرهای سیستم، مخصوصاً در نزدیکی گذار فازها، بدست آوردن یک جواب تقریبی خوب معمولاً از نظر محاسباتی کار دشواری است. مفاهیم و ابزار های فیزیک آماری سیستم‌های نامنظم به ما کمک کرده‌اند تا الگوریتم های کاراتری برای مطالعه ی این نوع مساله ها طراحی کنیم. در این سمینار با بعضی از الگوریتم ها و تکنیک های مهم بهینه سازی آشنا می‌شویم که از مفاهیم فیزیک کلاسیک و کوانتومی استفاده می کنند. به طور مشخص به اهمیت الگوریتم های تقویت شده در بهینه سازی و نقش تقویت الگوریتم در کاهش اثر خطا در شبیه سازی های کوانتومی اشاره می کنیم. در نهایت چشم اندازی از مساله ها و راهکارهای پیش رو برای بررسی آنها ارایه می شود.

Optimization by Classical and Quantum Reinforced Algorithms

Ramezanpour, Abolfazl[1]

[1] *Department of Physics, University of Shiraz, Shiraz,*

Abstract

A wide range of fundamental problems in science—including the determination of equilibrium states in physical systems and the training and analysis of neural networks—can be cast as optimization problems. However, the intrinsic complexity of these systems, particularly near critical points and phase transitions, often renders the computation of even approximate solutions highly demanding. Methods originating from statistical physics, especially those developed for the study of disordered and complex systems, have contributed significantly to the development of more efficient computational strategies for such tasks. In this talk, we review key concepts and algorithmic approaches inspired by classical and quantum statistical mechanics, with an emphasis on recent theoretical developments and practical applications. Special attention is given to reinforcement-based optimization methods and their role in improving solution quality, as well as the implications of reinforcement mechanisms for noise mitigation in quantum systems. We conclude with a discussion of open challenges and promising research directions in the field.

همبستگی و اختلال در اندازه‌گیری‌های کوانتومی: جلوه‌ای نوین از اصل مکملیت بور و کاربردهای آن

علی اسدیان

دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

چکیده

در این ارائه، یک رابطه‌ی دقیق و بنیادینِ مکملیت میان «همبستگی» در اندازه‌گیری‌های کوانتومیِ پیاپی و «اختلال» ناشی از آن‌ها معرفی می‌کنیم. ویژگی‌های تقارنی که این رابطه را برجسته می‌کند، برای تخمین و مشخصه‌یابی پارامترهای اندازه‌گیری بسیار کارآمد هستند.ما این رابطه توازنی را برای کیوبیت فرمول‌بندی می‌کنیم که به‌ویژه در کالیبراسیون و بهینه‌سازی ادوات اندازه‌گیری نقشی کاربردی دارد. همچنین نشان می‌دهیم که چگونه می‌توان از این رابطه برای تخمین مستقیم نویزآشکارسازهای تک‌فوتونی بهره برد. در آخر، برای نشان دادن کارایی طرح پیشنهادی در چیدمان های مختلف، پیاده‌سازی آن را در تداخل‌سنجیِ فوتونی ارائه می‌دهیم که مبتنی بر اندازه‌گیری مشترک درجات آزادیِ قطبش–مسیر یک فوتون است. این تعمیم آشکار می‌سازد که چگونه رابطه‌ی «همبستگی–اختلال» می‌تواند در حوزه ارتباطات کوانتومی تنظیم و بهینه‌سازی شود.





کنفرانس فیزیک ایران

دانشگاه قم – ۲ الی ۵ شهریور ۱۴۰۵

مجموعه مقالات شاخه

ماده چگال نظری

www.psi.ir/f/physics1405

ناهمسانگردی رسانندگی الکتریکی در شبه فلزات دیراک کج شده

پاک ضمیر، محمد حامد[1]؛ فرایی، زهرا[1]؛ قربانزاده مقدم، علی[1]

[1] دانشکده فیزیک دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان ، بلوار پروفسور یوسف ثبوتی ، زنجان

چکیده

در این مقاله با تکیه بر رهیافت کوبو و در تقریب مرتبه اول بورن رسانندگی الکتریکی جریان مستقیم یک شبه فلز دیراک کج شده بررسی شد. در حضور ناخالصی های کوتاه برد و در کل گستره‌ی کج شدگی فرو بحرانی ($t<1$)، بحرانی ($t=1$) و فرا بحرانی ($t>1$) رسانندگی های طولی σ_{xx} و σ_{yy} مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفتند. در ناحیه فرو بحرانی و برای σ_{xx}، رسانندگی مستقل از فرکانس است و با افزایش t به شکل یکنواخت کاهش می یابد. در گستره‌ی فرا بحرانی تا بیشینه‌ای نزدیک به $(t=\sqrt{2})$، σ_{xx} رفتاری افزایشی دارد و سپس به صورت $1/t$ کاهش می یابد در حالیکه σ_{yy} در این ناحیه رفتاری اکیدا افزایشی دارد.

واژه های کلیدی: *شبه فلز دیراک- خود انرژی- رسانندگی الکتریکی- ناهمسانگردی ترابرد- رهیافت کوبو- ناخالصی کوتاه برد.*

Anisotropy of electrical conductivity in tilted Dirac semimetals

Pakzamir, Hamed[1]; Faraei, Zahra[1]; G. Moghaddam, Ali[1]

[1] *Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan 45137-66731, Iran*

Abstract

In this paper, using the Kubo approach within the first-order Born approximation, the direct current electrical conductivity of a tilted Dirac semimetal is investigated. In the presence of short-range impurities and across the entire range of subcritical (t < 1), critical (t = 1), and supercritical (t > 1) tilt, the longitudinal conductivities σ_{xx} and σ_{yy} were analyzed. In the subcritical region and for σ_{xx}, the conductivity is frequency-independent and decreases monotonically with increasing t. In the supercritical region, up to a maximum near (2)^{0.5}, σ_{xx} exhibits an increasing trend and then decreases as 1/t, while σ_{yy} in this region shows a strictly increasing behavior.

***Keywords**: Dirac semimetal, Self-energy, Electrical conductivity, Transport anisotropy, Kubo approach, Short-range impurity*

PACS No. 72

مقدمه

شبه‌فلزات دیراک، دسته‌ای شاخص از مواد توپولوژیک کوانتومی هستند. در این مواد، برانگیختگی‌های کم‌انرژی همانند فرمیون‌های دیراک در فیزیک انرژی‌های بالا، با کمک معادله‌ی نسبیتی بدون جرم دیراک توصیف می‌شوند[1]. چنین شبه‌ذراتی در فیزیک ماده چگال، در محل تلاقی نوارهای انرژی در فضای سه‌بعدی تکانه شکل می‌گیرند. مخروط‌های دیراکی که در این نقاط تشکیل می‌شوند، بر اساس میزان کج‌شدگی در فضای تکانه به سه نوع تقسیم می‌گردند: ناحیه‌ی فروبحرانی ($t<1$) جایی که سطح بسته‌ی فرمی به شکل یک بیضی دیده می‌شود و ناحیه‌ی فرابحرانی ($t>1$) که متناظر با یک سطح فرمی باز(هایپربولیک) است، توسط گذار بحرانی ($t=1$) یا گذار لیفشیتز از هم جدا می‌شوند[2]. مخروطهای دیراک کج‌شده به شکل طبیعی در رساناهای لایه‌ای ارگانیک[3] و شبه فلزات وایل نوع دوم، همچون WTe_2 و $MoTe_2$ دیده می‌شوند[4]. برای فهم درست رسانندگی الکتریکی در چنین سیستمهای کج‌شده‌ای، باید مکانیزم‌های پراکندگی را به درستی شناخت است. به ویژه در فرآیند ترابرد، شناخت اثرات توأمان ناشی از چگالی حالتها و ماهیت ناخالصی‌های پراکننده ضروری است. در تحقیق حاضر، برخلاف رویکرد پدیدارشناختی مطالعات موجود(زمان پراکندگی ثابت فرض می‌شود) [5]، با تکیه بر محاسبه‌ی دقیق خود-انرژی‌ها در تقریب مرتبه اول بورن، بستگی قوی ترابرد ماکروسکوپیک به انرژی و کج‌شدگی در حضور ناخالصی‌های کوتاه برد آشکار شد. به علاوه با بررسی تحلیلی تصحیحات رأس، نقش اساسی آنها در بازبهنجارش سرعتها در رژیمهای فروبحرانی و فرابحرانی مشخص شد.

هامیلتونی انرژی پایین، رسانندگی و فرمول کوبو

هامیلتونی در انرژی‌های پایین برای یک مخروط دیراک دوبعدی کج شده در فضای تکانه، با فرض $v_F = \hbar = 1$ چنین است:

$$H(q) = tq_y \boldsymbol{I}_4 - \tau_z \otimes (q_y\sigma_x + q_x\sigma_y) \quad (1)$$

ماتریس‌های پاؤلی σ و τ به ترتیب بر درجات آزادی داخلی اسپین و نوار عمل می‌کنند و $\boldsymbol{I}_4$ ماتریس واحد 4×4 است. پارامتر بدون بعد t، کج‌شدگی را کنترل می‌کند. جهت کج‌شدگی را در راستای محور y در نظر گرفته‌ایم. طیف انرژی این هامیلتونی به صورت:

$$\varepsilon_s(\boldsymbol{q}) = tq_y + sq, \quad q \equiv \sqrt{{q_x}^2 + {q_y}^2}, \quad s = \pm \quad (2)$$

بدست می‌آید که $s = \pm1$ نشانگر نوارهای رسانش و ظرفیت است. ویژه‌حالت‌های این هامیلتونی عبارتند از:

$$\psi_{i,j} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix}\chi_q\\1\\0\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}-\chi_q\\1\\0\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0\\0\\\chi_q\\1\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0\\0\\-\chi_q\\1\end{pmatrix}\right\} \quad (3)$$

که $\chi_{\boldsymbol{q}} = (q_y - iq_x)/q$ و $i,j = \{+,-\}$. برای محاسبه‌ی رسانندگی طولی در چارچوب فرمالیسم کوبو، عناصر تانسور رسانندگی از طریق عبارت زیر بدست می‌آید[6,7]:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon(-\partial_\varepsilon f)\sum_{\lambda\lambda'}\frac{dq}{(2\pi)^2}\langle\lambda\boldsymbol{q}|\hat{v}_\alpha|\lambda'\boldsymbol{q}\rangle \quad (4)$$

$$\times\langle\lambda'\boldsymbol{q}|\hat{v}_\beta|\lambda\boldsymbol{q}\rangle\,\mathrm{Im}G^R_\lambda(\boldsymbol{q},\varepsilon)\mathrm{Im}G^R_\lambda(\boldsymbol{q},\varepsilon)$$

که در آن اندیس‌های λ' و λ نمایانگر نوارهای رسانش و ظرفیت، $\hat{v}_\alpha = \partial H(\boldsymbol{q})/\partial q_\alpha$ عملگر سرعت و $f(\varepsilon)$ تابع توزیع فرمی است. $G^R_\lambda(\boldsymbol{q},\varepsilon) = 1/(\omega + i0^+ - \varepsilon_\lambda(\boldsymbol{q}) - \Sigma^R_\lambda(\boldsymbol{q},\omega))$ تابع گرین تاخیری و $\Sigma^R_\lambda(\boldsymbol{q},\omega) = n_{imp}V_0^2\int(d^2q'/(2\pi)^2)G^R_0(\boldsymbol{q}',\omega)$ مبنای محاسبه‌ی خود-انرژی است. برای بررسی رسانندگی در حضور پتانسیل کوتاه برد، ناخالصی‌های بدون باری با چگالی n_{imp} در نظر گرفته‌ایم که با توزیع $V(r) = V_0\sum_j\delta(r-P_j)$ در فلز پخش شده‌اند. P_jها جایگاه ناخالصی‌ها در فضای حقیقی هستند. پس از محاسبه‌ی عناصر ماتریسی سرعت و تابع گرین، و جایگذاری آنها در فرمول کوبو (معادله 4):

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d^2q}{(2\pi)^2}\sum_i C^i_{\alpha\alpha}(\boldsymbol{q},\omega=\varepsilon_F) \quad (5)$$

که در راستای xx:

$$C^{(1)}_{xx}(\boldsymbol{q},\omega) = \zeta_y\frac{4\Gamma_{\mathrm{II}}\Gamma_{\mathrm{I}}}{({\Gamma_{\mathrm{II}}}^2 + {\xi_-}^2)({\Gamma_{\mathrm{I}}}^2 + {\xi_+}^2)} \quad (6)$$

$$C^{(2)}_{xx}(\boldsymbol{q},\omega) = \zeta_x\frac{2{\Gamma_{\mathrm{II}}}^2}{({\Gamma_{\mathrm{II}}}^2 + {\xi_-}^2)^2} \quad (7)$$

$$C^{(3)}_{xx}(\boldsymbol{q},\omega) = \zeta_x\frac{2{\Gamma_{\mathrm{I}}}^2}{({\Gamma_{\mathrm{I}}}^2 + {\xi_+}^2)^2} \quad (8)$$

و $\Gamma_\lambda = \mathrm{Im}\Sigma^R_\lambda(\boldsymbol{q},\omega)$ معرف پهن‌شدگی شبه ذرات یا همان نرخ پراکندگی است. برای $i = \{x,y\}$، ζ_i و $\xi_\pm$ به صورت $\zeta_i = (q_i/q)^2$ و $\xi_\pm = \omega - tq_y \mp q$ تعریف می‌شوند. برای محاسبه σ_{yy} ضریب ζ_y در $C^{(1)}_{xx}$ را با ζ_x و ضریب ζ_x در $C^{(2)}_{xx}$ و $C^{(3)}_{xx}$ را به ترتیب با $(t+\frac{q_y}{q})$ و $(t-\frac{q_y}{q})$ جایگزین می‌کنیم.

حالت فروبحرانی $(t < 1)$

در $t < 1$ سطح فرمی یک بیضی بسته در صفحه‌ی (q_x, q_y) است. چگالی حالتها برای این سطح فرمی بسته متناهی است و در نتیجه، حل بخش موهومی خود-انرژی در تقریب مرتبه‌ی اول بورن به صورت زیر خواهد بود:

$$\Gamma_{\mathrm{I,II}} = -\gamma_{imp}\frac{|\omega|\Theta(\pm\omega)}{(1-t^2)^{3/2}} \quad (9)$$

که Γ_{I} متناظر با نوار رسانش $(\omega > 0)$ و Γ_{II} متناظر با نوار ظرفیت $(\omega < 0)$ است و پارامتر $\gamma_{imp} = n_{imp}V_0^2/2\pi$ قدرت ناخالصی را تعیین می‌کند. در این رابطه $\Theta(\pm\omega)$ به این معناست که در دمای صفر فقط یک نوار می‌تواند پر باشد و گذار بین‌نواری بر اساس اصل طرد پاؤلی ممنوع است$(C^{(1)}_{xx} = 0)$.

رسانندگی σ_{xx} بر اساس معادله‌ی (5)، برای $t < 1$ و $\omega > 0$ در مختصات قطبی به فرم زیر نوشته می‌شود:

$$\sigma_{xx} = \frac{-e^2}{4\pi^3}\int d\theta\,\mathcal{I}_t(\theta)\left[\frac{{\Gamma_{\mathrm{I}}}^2 + \varepsilon_F\Delta_q}{{\Gamma_{\mathrm{I}}}^2 + \Delta_q^2} + \frac{\varepsilon_F}{\Gamma_{\mathrm{I}}}\tan^{-1}\frac{\Delta_q}{\Gamma_{\mathrm{I}}}\right]_0^{q_F} \quad (10)$$

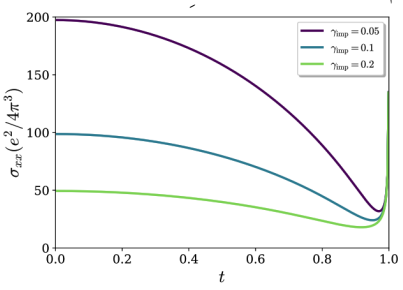
$\mathcal{I}_t(\theta) = (\cos\theta/1 + t\sin\theta)^2$ و $\Delta_q = \varepsilon_F - (1+t\sin\theta)q$.

در $q_F \to \infty$ وابستگی σ_{xx} به انرژی از بین می‌رود، بنابراین:

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{4\pi^3}\int d\theta\,\mathcal{I}_t(\theta)\left[1 + \frac{\varepsilon_F}{\Gamma_{\mathrm{I}}}\left(\frac{\pi}{2} + \tan^{-1}\frac{\Delta_q}{\Gamma_{\mathrm{I}}}\right)\right] \quad (11)$$

بنابراین رسانندگی فقط با پارامتر کج‌شدگی t و قدرت ناخالصی γ_{imp} کنترل می‌شود. عبارت داخل براکت از دو بخش تشکیل شده است: بخش اول، که صرفاً کوانتم مکانیکی است و حتی در حد بالای ناخالصی نیز باقی می‌ماند. بخش دوم، متناسب با $\varepsilon_F/\Gamma_{\mathrm{I}} \propto \tau_{imp}$ است و مشابه با رسانندگی شبه کلاسیکی درود می‌باشد.

برای مقادیر $\gamma_{imp} = 0.05, 0.1, 0.2$ رسانندگی بر حسب پارامتر کج‌شدگی t در شکل (1) رسم شده است. با افزایش t، مقدار ε_F/Γ_I و بزرگی رسانندگی کاهش می‌یابند. بخش کاهشی به واسطه‌ی تغییر شکل هندسی سطح فرمی است. در حالی که تکینگی مشاهده شده در مجاورت $(t = 1^-)$ ناشی از غلبه‌ی انتگرال $\int d\theta\, \mathcal{I}_t(\theta)$ است، یعنی سیستم به سمت خطوط فرمیِ باز متمایل می‌شود.



شکل 1 : رسانندگی σ_{xx} برای مقادیر $\gamma_{imp} = 0.5, 0.1, 0.2$ برحسب پارامتر کج شدگی (t)

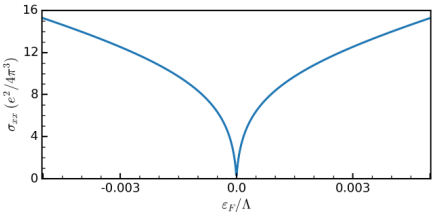
بر پایه‌ی این نتایج، در بازه‌ی $0 \le t < 1$ با ضریب $(1-t^2)^{-\frac{3}{2}}$ چگالی حالات افزایش می‌یابد و با افزایش نرخ پراکندگی، کاهش رسانندگی را شاهد هستیم.

حالت بحرانی $(t = 1)$

در گذار لیفشیتز $(t = 1)$ طبیعت پراکندگی به شکل چشم گیری تغییر می‌کند. برای فرکانس قطع (Λ) و انرژیهای $\omega \ll \Lambda$ حل تحلیلی دقیق برای خود–انرژی به صورت زیر است:

$$\Gamma_{I,II} = \gamma_{imp}\Theta(\pm\omega)\frac{(\Lambda + 2|\omega|)\sqrt{|\omega|(2\Lambda + |\omega|)}}{-3|\omega|} \qquad (12)$$

در حد $\omega \ll \Lambda$ رفتار واگرای خود–انرژی متناسب با $\Lambda^{3/2}/\sqrt{|\omega|}$ است که به شدت روی رسانندگی اثر می‌گذارد. محاسبه‌ی عددی انتگرال رسانندگی نیز چنین رفتاری را به خوبی نشان می‌دهد. در شکل (2) یک فرورفتگی به شدت جایگزیده در اطراف نقطه دیراک مشاهده می‌شود که مشخصه‌ی یک گذار توپولوژیک است.



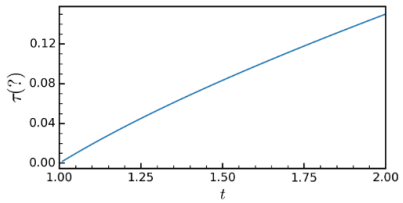
شکل 2 : رسانندگی σ_{xx} در گذار لیفشیتز $(t = 1)$ در اطراف نقطه‌ی دیراک و در بازه‌ی $\varepsilon_F/\Lambda = [-0.005, +0.005]$

حالت فرابحرانی $(t > 1)$

در حالت فروبحرانی عدم وابستگی رسانندگی به انرژی برای پتانسیل کوتاه برد، مشابه با اثرات ناخالصی‌های نقطه‌ای در گرافین است [1]. در حالی‌که وابستگی رژیم فرابحرانی به انرژی فرمی (ε_F) و تکانه‌ی قطع (Λ) غیربدیهی و بسیار متمایزتر از حالت فروبحرانی است. دلیل این تفاوت آنست که با گذار لیفشیتز هندسه سطح فرمی از بیضی بسته به یک هذلولی باز تبدیل می‌شود. در این رژیم، نوار ظرفیت با حرکت به سمت انرژیهای مثبت $(\omega > 0)$ منجر به تشکیل بسته‌های الکترون–حفره می‌شود که ویژگی شاخص مواد دیراکی نوع دوم است. برای پیشگیری از واگرایی با اعمال تکانه قطع در راستای عمود بر کج شدگی $(q_x \le \Lambda)$، تابع پهن‌شدگی به صورت زیر محاسبه شد:

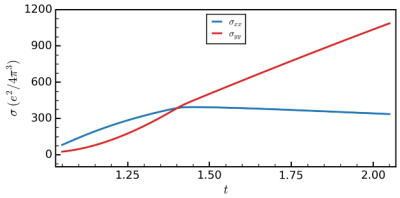
$$\Gamma_{I,II} \approx -\gamma_{imp}\frac{t\Lambda}{g} \qquad (13)$$

که $g = t^2 - 1$ و حالت تقریبی برای $\omega \ll \Lambda$ محاسبه شده است. عکس معادله‌ی (12) یا همان زمان آزاد واهش در شکل (3) رسم شده است که به وضوح با افزایش t کاهش می‌یابد[4].



شکل 3 : ناهمسانگردی رسانندگی جریان مستقیم در رژیم فرابحرانی و برای $\gamma_{imp} = 0.1$

در مقادیر $t > 1$ بخاطر حضور $tq_y \mp q$ در مخرج انتگرالدهِ رسانندگی، مکان هندسی نقاط متناظر با $\sin\theta = 1/t$ در صفحه‌ی (q_x, q_y) موجب واگرایی می‌شود. در این حالت، علاوه بر خود–انرژی، انتگرال رسانندگی هم در کرانهای محدود $(\sim\Lambda)$ باید حساب شود. در چنین چارچوبی، طیف انرژی در تکانه‌های به قدر کافی بزرگ معتبر می‌ماند و چگالی حالتها هم متناهی خواهد شد. در سیستمهای ماده چگال حقیقی این واگرایی به واسطه‌ی طبیعت شبکه کریستالی از بین می‌رود. بدین شکل که در حضور پتانسیل شبکه و ناحیه‌ی بریلوئنِ متناهی، فرکانس قطع محدود می‌شود $(\Lambda \approx \pi/a)$ و مشاهده پذیرهای فیزیکی متناهی می‌مانند.



شکل4: محاسبه عددی ناهمسانگردی رسانندگی جریان مستقیم در رژیم فرابحرانی و برای $\gamma_{imp} = 0.1$

نتایج محاسبات عددی برای رسانندگی‌های σ_{xx} و σ_{yy} در شکل (5) رسم شده است. رسانندگی در راستای عمود بر کج شدگی، σ_{xx}، رفتاری غیر یکنوا با بیشینه‌ای نزدیک به $t = \sqrt{2}$ دارد که در ادامه با آهنگ $1/t$ کاهش می‌یابد. در نگاهی تحلیلی به چنین رفتاری با تعریف جریان آغاز می‌کنیم:

$$J_x = -e \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} v_x(k) f(k) \qquad (13)$$

طبق معادله بولتزمن تغییرات تابع توزیع فرمی–دیراک عبارت است:

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{\partial f}{\partial t} + \left(\frac{d\vec{r}}{dt}.\vec{\nabla}_r f\right) + \left(\frac{d\vec{p}}{dt}.\vec{\nabla}_p f\right) \qquad (14)$$

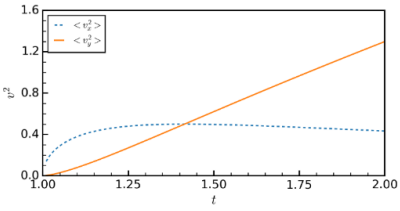
و با توجه به رسانندگی DC، $\partial f/\partial t = 0$. فضا همگن است پس $\vec{\nabla}_r f = 0$ و نیروی الکتریکی $\vec{F} = -e\vec{E}$ می‌باشد. در تقریب زمان واهلش داریم $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = -\frac{f-f_0}{\tau} = -\frac{\delta f}{\tau}$، بنابراین:

$$-eE_x = \frac{\partial f}{\partial p_x} = -\frac{\delta f}{\tau} \rightarrow \delta f = e\tau E_x v_x \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \qquad (15)$$

$$\xrightarrow{f(k)=f_0+\delta f} J_x = e^2 \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} {v_x}^2 \tau E_x \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \qquad (16)$$

$$\xrightarrow{T=0} \frac{J_x}{E_x} = \sigma_{xx} = e^2 \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} {v_x}^2 \tau \delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$$
$$= e^2 DOS(\varepsilon_F)\tau(\varepsilon_F)\langle {v_x}^2\rangle_{F.S} \qquad (17)$$

به طور خلاصه می‌توان نوشت: $\sigma_{xx} \propto \langle {v_x}^2\rangle$ و $\sigma_{yy} \propto \langle {v_y}^2\rangle$. متوسط مجذور سرعت با استفاده از $\langle {v_x}^2\rangle = \int d^2q\, \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) {v_x}^2$ به چگالی حالتها مرتبط می‌شود [8]، شکل (5).

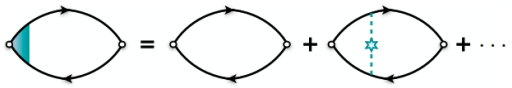


شکل5 : نتایج تحلیلی برای $\langle {v_x}^2\rangle$ در مقابل $\langle {v_y}^2\rangle$

تصحیحات ورتِکس

در سیستم‌هایی با تقارن وارونی زمانی $H(\boldsymbol{k}) = H^*(-\boldsymbol{k})$ تصحیحات ورتکس صفر است[7]، اما برای هامیلتونی 1 به دلیل حضور جمله‌ی $tq_y \boldsymbol{I}_4$ چنین تقارنی می‌شکند. محاسبه‌ی این تصحیحات برای $\varepsilon_F \ll \Lambda$ و در تقریب مرتبه اول بورن به صورت یک ضریب مقیاس با تابعیت t ظاهر می‌شود [8]:

$$\sigma_{xx}(\varepsilon_F) \approx {\sigma_{xx}}^{(0)}(\varepsilon_F)\left[1 + \frac{2t^2}{t^2-1}\right] \qquad (14)$$



شکل5 : تصحیح ورتکس در تقریب مرتبه اول بورن

نتیجه گیری

آنچه در رژیم فروبحرانی با افزایش پارامتر چرخش رخ می‌دهد، کاهش یکنوای رسانندگی طولی با تابعیتی مستقل از انرژی است. در گذار بحرانی شاهد یک تکینگی به فرم $\sim 1/\sqrt{|\omega|}$ در خود–انرژی هستیم که موجب یک افت شدید و موضعی در رسانندگی جریان مستقیم شده است. نهایتا در حالت فرابحرانی به واسطه‌ی ماهیت هایپربولیک سطح فرمی، با اعمال تکانه‌ی قطع (Λ) در محاسبات، رفتار σ_{xx} و σ_{yy} را تحلیل کردیم. رفتار σ_{xx} از تانسور رسانندگی تا $t \approx \sqrt{2}$ افزایشی و پس از آن متناسب با $1/t$ کاهشی شد، در حالیکه برای σ_{yy} رسانندگی یکنوا و بدون کران افزایش می‌یابد.

مرجع‌ها

[1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. Katsnelson, I. Grigorieva, S. Dubonos, and A. Firsov, Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene, Nature 438, 197 (2005).
[2] Wehling, Tim O., Annica M. Black-Schaffer, and Alexander V. Balatsky. "Dirac materials." *Advances in Physics* 63.1 (2014): 1-76.
[3] M. O. Goerbig, J.-N. Fuchs, G. Montambaux, and F. Pi´echon, Tilted anisotropic dirac cones in quinoidtype graphene and α–(BEDT-TTF)2 i3, Phys. Rev. B 78, 045415 (2008)
[4] A. A. Soluyanov, D. Gresch, Z. Wang, Q. Wu, M. Troyer, X. Dai, and B. A. Bernevig, Type-II Weyl semimetals, Nature 527, 495 (2015).
[5] S. Rostamzadeh, i. d. I. m. c. Adagideli, and M. O. Goerbig, Large enhancement of conductivity in weyl semimetals with tilted cones: Pseudorelativity and linear response, Phys. Rev. B 100, 075438 (2019).
[6] Bruus, Henrik, and Karsten Flensberg. *Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction*. Oxford university press, 2004.
[7] A. Burkov, M. Hook, and L. Balents, Physical Review B Condensed Matter and Materials Physics 84, 235126 (2011)
[8] Pakzamir MH, Faraei Z, Moghaddam AG. DC conductivity of tilted Dirac Fermions across the Lifshitz Transition: short-versus long-range impurities. arXiv preprint arXiv:2606.08010. 2026 Jun 6.

فازهای توپولوژی فلوکه در مواد آلترمغناطیس با تقارن مغناطیسی $\mathbf{d_{xy}}$ تحت تابش نور

حسین چراغچی[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه دامغان

چکیده

در این مطالعه به فازهای توپولوژی فلوکه در آلترمغناطیسهای دوبعدی با تقارن مغناطیسی d_{xy} می پردازیم که تحت تابش نور با قطبش دایروی قرار گرفته است. فرض شده است که یک مغناطش خارجی حاصل از مجاورت یک بستر فرومغناطیس در آلترمغناطیس القا شود. در این مقاله، دیاگرام فازی غنی از فازهای با عدد چرن بالا در بازه های خاص شدت تابش و نیز مغناطش اعمالی در رژیم غیر تشدیدی (فرکانس بالا) گزارش می شوند. با استفاده از فرمول بندی فلوکه روی شبکه دوبعدی، نشان می دهیم که پارامتر بدون بعد محرک β ، شرایط بسته شدن گاف و نیز ظهور فازهای توپولوژی را کنترل می کند. به ازای $|\beta| > 1$ خواص توپولوژی ناشی از نقاط دیراک ناهمسانگرد واقع در نقاط پرتقارن منطقه اول بریلوئن خواهد بود که منجر به اعداد چرن $|C|=2$ می شود، حال آنکه، به ازای $|\beta| < 1$، نقاط دیراک ناهمسانگرد خارج از نقاط پرتقارن، در نقاط G رخ خواهند داد که منجر به اعداد چرن بالایی تا مرتبه $|C|=4$ خواهد شد. در رژیم فلزی، این فازهای توپولوژیک در شکافهای انرژی موضعی یک انباشتگی انحنای بری تولید می کنند که می تواند در اندازه گیریهای رسانندگی هال غیر عادی ردپای قابل مشاهده ای داشته باشند.

واژه های کلیدی: فاز توپولوژی فلوکه، آلترمغناطیس، رژیم غیر تشدید، فاز بری، عدد چرن، رسانندگی هال غیر عادی.

Floquet Topological Phases and Anomalous Hall Signatures in Irradiated Two-dimensional $\mathbf{d_{xy}}$ -Wave Altermagnets

Cheraghchi, Hosein[1]

[1] *School of Physics, Damghan University*

Abstract

We study Floquet topological phases in two-dimensional d_{xy} -wave altermagnets driven by off-resonant circularly polarized light and subject to an out-of-plane magnetization induced via extrinsic exchange coupling from a proximate ferromagnet. Using a lattice Floquet formulation, we show that the system is governed by a driving parameter β that controls the emergence of distinct gap-closing points and associated topological phases. For $|\beta| > 1$, topology is dominated by anisotropic Dirac points at TRIM[1], leading to Chern phases with $|C|=2$. For $|\beta| < 1$, light-induced off-symmetry G points appear in four families in the Brillouine zone, enabling higher Chern phases up to $|C|=4$. In the metallic regime, the anomalous Hall conductivity provides an experimental signature of these Floquet topological phases, exhibiting sharp features associated with Berry curvature accumulation near local gap-closing regions.

Keywords: *Altermagnet, Floquet topological phase, Irradiation, Anomalous Hall Conductivity*

PACS No. ۸۱ ،۷۱ ،۶۸

مقدمه

آلترمغناطیسها [۳-۱] به عنوان گونه سوم از مواد مغناطیس که با نوع مرسوم فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس متفاوتند اخیرا توجه

Time-Reversal Invariant Momenta [1]

پژوهشگران ماده چگال را چه از جنبه فیزیک بنیادی و چه از نظر کاربردهای بالقوه در قطعات الکترونیکی به خود جلب کرده است. مشخصه آلترمغناطیسها، شکافتگی اسپینی قوی متناوب و غیرنسبیتی وابسته به جهت اندازه حرکت بلوری در منطقه اول بریلوین می باشد. در فضای حقیقی البته ممانهای مغناطیسی، هم راستا و در جهت های مخالف روی زیرشبکه های متفاوت قرار می گیرند. به عبارتی مغناطش یک آلترمغناطیس، شبیه آنتی فرومغاطیس صفر است حال آنکه همانند فرومغناطیسها دارای شکافتگی اسپینی قوی می باشند. در آنتی فرومغناطیسها ترکیب دو تقارن وارونی زمانی و نیز وارونی فضایی باعث می شود نوارهای انرژی مربوط به هر دو اسپین تبهگن باشند. حال آنکه در آلترمغناطیسها تقارن بلوری خاصی (انواع خاصی از تقارن دورانی و تقارن لغزشی) این تبهگنی را می شکند به گونه ای که همچنان مغناطش صفر باقی می ماند[۳]. این اثر یک اثر غیرنسبیتی است و ناشی از برهم کنش تبادلی مغناطیسی است نه جفت شدگی اسپین مدار. این شکافتگی ناشی از انرژی تبادلی ای در همان مرتبه بزرگی فرومغناطیسها یعنی حدود الکترون–ولت می باشد[۱]. چگالی مغناطیسی در آلترمغناطیسها می توانند بصورت d-wave یا g-wave یا i-wave دیده شوند.

یکی از کاربردهای آلترمغناطیسها در قطعات حافظه می باشد به گونه ای که همانند آنتی فرومغناطیسها قابل خوانش سریع و پایدارند و همانند فرومغناطیسها قابلیت خواندن و نوشتن آسانی روی حافظه دارند. همچنین این مواد در قطعات با سرعت کلیدزنی بالا مورد استفاده قرار می گیرند. سنسورهای حساس و نیز بیتهای کوانتومی پایدار نیز از جمله کاربردهای این مواد می باشند.

در این مقاله، نشان می دهیم که آلترمغناطیسهای تحت تابش نور لیزر تراهرتز با قطبش دایروی می توانند انباشتگی انحنای بری و در نتیجه بار توپولوژیک را حول و حوش نقاط بدون گاف دیراکی (چه در نقاط پرتقارن TRIM و چه در نقاط خارج از تقارن– نقاط G) فراهم آورد. در زمانیکه گاف انرژی عمومی ای در ماده نداریم آشکارسازی این فازهای توپولوژیک، یک چالش اندازه گیری محسوب می شود. در این حالت، فی الواقع عایق توپولوژیک نداریم بلکه با یک رژیم فلزی مواجه ایم که انباشتگی انحنای بری در گافهای موضعی دارد.

هامیلتونی و نمودار فازهای توپولوژیک

هامیلتونی دو نواری برای یک آلترمغناطیس دوبعدی با تقارن مغناطیسی d_{xy} در حالت تعادل نور بصورت زیر پیشنهاد می شود[۱و۲]:

$$H_{Static}(k_x,k_y) = 2t[2-\cos(k_x a)-\cos(k_y a)]\sigma_0 + 2J\sin(k_x a)\sin(k_y a)\,\sigma_z + \lambda[\sin(k_x a)\,\sigma_y - \sin(k_y a)\,\sigma_x] + M_z\,\sigma_z \qquad (1)$$

که در آن جمله اول انرژی جنبشی روی یک شبکه مربعی با انرژی جهش t تعریف شده، و جمله دوم حاصل از میدان تبادلی آلترمغناطیس است که شکافتگی اسپینی آن وابسته به اندازه حرکت با تغییر علامتهای متناوب می باشد. جفت شدگی اسپین–مدار راشبا در جمله سوم ظاهر شده و نهایتا یک مغناطش خارجی یکنواخت در جلمه آخر جهت کنترل خواص توپولوژیک مورد نیاز می باشد. به سادگی می توان نشان داد که نقاط پرتقارن در منطقه اول بریلوئن دارای انباشتگی انحنای بری نیستند لذا عدد چرن حاصل از آنها صفر است. $\vec{\sigma} = (\sigma_0, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ به ترتیب ماتریس یکه و ماتریسهای پاولی می باشند.

حال اگر یک نور پرفرکانس Ω با قطبش دایروی بتابانیم فازهای هال نابهنجار کوانتومی در آنها پدیدار می شوند. پتانسیل برداری حاصل از این تابش بصورت $\vec{A} = A_0(\sin(\Omega t), \cos(\Omega t))$ می باشد. جفت شدگی نور–ماده با استفاده از جانشانی پایرلز $\vec{k} \to \vec{k} + \vec{A}(t)$ صورت می پذیرد. با استفاده از نظریه فلوکه و در رژیم غیرتشدیدی (فرکانسهای بالا)، هامیلتونی موثر می تواند بصورت $H_{\text{eff}} = \vec{d}.\vec{\sigma}$ ارایه شود[٤]:

$$\begin{aligned} d_0^{\text{eff}} &= 4t - 2t\mathcal{J}_0[\cos(k_x a)+\cos(k_y a)] \\ d_x^{\text{eff}} &= -\mathcal{J}_0\lambda\sin(k_y a) + \lambda'\sin(2k_x a)\cos(k_y a) \\ d_y^{\text{eff}} &= \mathcal{J}_0\lambda\sin(k_x a) - \lambda'\sin(2k_y a)\cos(k_x a) \\ d_z^{\text{eff}} &= J\mathcal{J}_0\sin(k_x a)\sin(k_y a) + J'\cos(k_x a)\cos(k_y a) + M_z \end{aligned} \qquad (۲)$$

که در آن پارامترهایی همانند t, λ, J توسط تابع بسل نرمالیزه شده اند. قدرت جمله تصحیح جفت شدگی اسپین–مدار و نیز شکافتگی اسپینی القایی توسط نور بصورت زیر تعریف می شوند:

$$\lambda' = \frac{2\lambda J}{\Omega}\mathcal{S}_\lambda(a\mathcal{A}_0) \qquad J' = \frac{4\lambda^2}{\Omega}\mathcal{S}_J(a\mathcal{A}_0)$$

که توابع نوسانی S در آنها بصورت زیر می باشند:

$$\mathcal{S}_\lambda(x) = \sum_{m=1}^{\infty}(-1)^{(m+1)}\sin(m\pi/4)\mathcal{J}_m^2(x)/m,$$
$$\mathcal{S}_J(x) = \sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m\mathcal{J}_{2m+1}^2(x)/(2m+1).$$

که در آنها $\mathcal{J}_n$ تابع بسل نوع اول می باشد. هامیلتونی ۲ در صورتی که نور خاموش شود به هامیلتونی ۱ تبدیل می شود. شکل ۱(a)، نمودار فازهای توپولوژیک یک آلترمغناطیس با تقارن مغناطیسی d_{xy} را نشان می دهد که تحت تابش نور با شدت A_0 با قطبش دایروی راستگرد و در حضور یک مغناطش عمودی خارجی می باشد. مرزهای ترسیم شده در نمودار فاز، از بسته شدن گاف انرژی در نقاط پرتقارن $\Gamma(0,0), M(\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}), X(\frac{\pi}{a},0), Y(0,\frac{\pi}{a})$ و نیز نقاط خانواده G ($G^{(1)},\dots,G^{(4)}$) بدست می آیند. موقعیت این نقاط که در آنها گاف انرژی بسته می شود در شکل ۱(b) نشان داده شده است. در ناحیه با پارامتر محرک $|\beta| > 1$، انحنای بری فقط نزدیک نقاط پرتقارن جایگزیده است اما در بازه ای که در آن $|\beta| < 1$ ، انحنای بری علاوه بر نقاط پرتقارن حول نقاط خانواده G نیز انباشتگی پیدا می کند. پارامتر محرک که ناشی از تابش نور می باشد بصورت زیر تعریف می شود:

$$\beta \equiv \frac{\mathcal{J}_0\lambda}{2\lambda'}$$

در ناحیه ای که $|\beta| > 1$ عدد چرن ناشی از انتگرال انحنای بری حداکثر مقدار ۲ را می گیرد حال آنکه در ناحیه ای با $|\beta| < 1$ عدد چرن تا ٤ هم بالا می رود. بار توپولوژیک حول هر یک از نقاط با شکاف انرژی صفر را می توان از حاصلضرب علامت دستوارگی حول نقاط دیراک در علامت جمله جرمی ضربدر ۰.۵ بصورت تحلیلی محاسبه کرد. همچنین با استفاده از گسسته سازی منطقه اول بریلوئن، صحت اعداد چرن حاصله بصورت عددی با استفاده از روش Fukui–Hatsugai–Suzuki بازتولید شدند [٥].

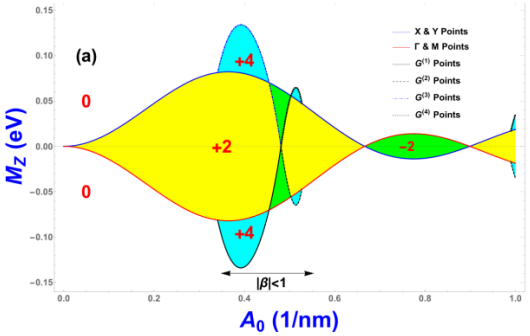
توپولوژی در رسانندگی هال غیرعادی یک رسانا

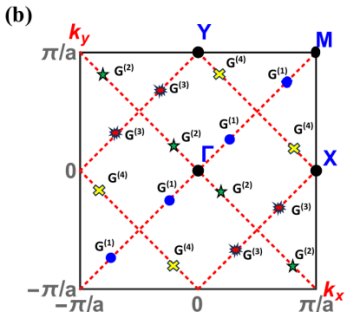
نکته ای که در هامیلتونی ۲ وجود دارد این است که با افزایش انرژی جنبشی (t) عملا شکاف انرژی عمومی در سیستم مشاهده نمی شود اما شکافهای انرژی موضعی در نقاط پرتقارن یا نقاط خارج از تقارن G همچنان دارای انباشتگی انحنای بری زیادی می باشند. به عبارت دیگر بر چنین موادی نمی توان نام "عایق توپولوژیک" اطلاق کرد بلکه آنها فلزات یا نیمه فلزات توپولوژیک هستند. هالدین اثبات کرد که ویژگیهای توپولوژیک در چنین شکافهای انرژی با اندازه گیری رسانندگی هال غیرعادی (AHC) قابل ردگیری هستند. به عبارت دیگر رسانندگی هال غیرعادی در چنین سیستمهایی دیگر کوانتیزه نیست بلکه در انرژیهای فرمی ای که معادل شکاف انرژی با انباشتگی انحنای بری می باشند[٦]، در نمودار رسانندگی هال غیرعادی، قله یا تغییرات سریع و یا حتی تغییر علامت دیده می شود.

رسانندگی هال غیرعادی ذاتی در دمای محدود با استفاده از فرمول

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar}\sum_n\int_{\mathrm{BZ}}\frac{d^2k}{(2\pi)^2}\,\Omega_{n,z}(\mathbf{k})\,f(\varepsilon_{n\mathbf{k}})$$

بدست می آید که در آن $\Omega_{n,z}(\mathbf{k})$ انحنای بری مربوط به نوار n ام و $f(\varepsilon) = (e^{(\varepsilon-E_F)/k_BT}+1)^{-1}$ تابع فرمی–دیراک می باشد. انحنای بری با استفاده از فرمول کوبو حاصل می شود[٤]. با استفاده از انتگرال گیریهای عددی دقیق، در جملات انرژی جهش متفاوت، رسانندگی هال غیرعادی ذاتی بر حسب پارامترهای مختلف محاسبه و در شکل ۲ ترسیم شده اند. در شکل ۲(a)، σ_{xy} بر حسب مغناطش به ازای مقدار ثابت شدت نور که معادل پارامتر محرک $\beta = 0.63 < 1$ ترسیم شده است. در این پارامتر محرک، هر دو نقاط پرتقارن و نقاط G در محاسبات عدد چرن دارای اهمیت هستند. σ_{xy} در شکل ۲(a) دقیقا ناورداهای توپولوژیک مندرج در نمودار فاز شکل ۱(a) را تبعیت می کند. با این حال با افزایش مقدار انرژی جهش، اگرچه σ_{xy} کاهش را نشان می دهد اما همچنان رفتار نشانگر مناطق با اعداد چرن ۲ و ٤ می باشند.





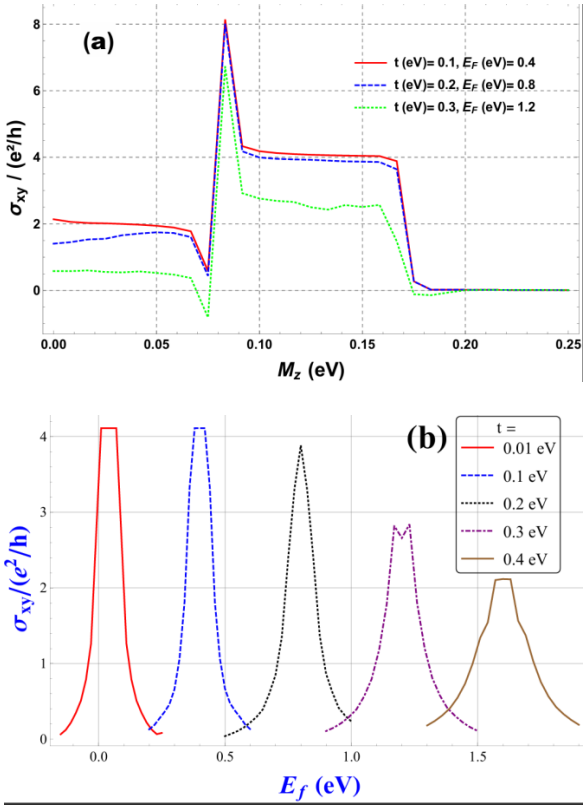
شکل۱ : a) نمودار فاز آلترمغناطیس با تقارن مغناطیسی d_{xy} تحت تابش نور با قطبش دایروی راستگرد در حضور مغناطش خارجی عمود بر صفحه. مرزهای فازهای توپولوژیک توسط شروط صفر شدگی شکاف انرژی در هر یک از نقاط دیراک TRIM و نیز نقاط خارج از تقارن G تعیین می شوند. b) نقاطی که گاف انرژی در آنها صفر می شود. نقاط خانواده G، خارج از نقاط پرتقارن رخ می دهند. نقاط G مسئول تولید انباشتگی انحنای بری اعداد چرن بالا ٤ می باشند. پارامترها برابرند با $J = 1\ eV, \lambda = 0.35\ eV, \Omega = 2\ eV$. انرژی جهش هیچ تاثیری در انحنای بری یا دیاگرام فاز ندارد.

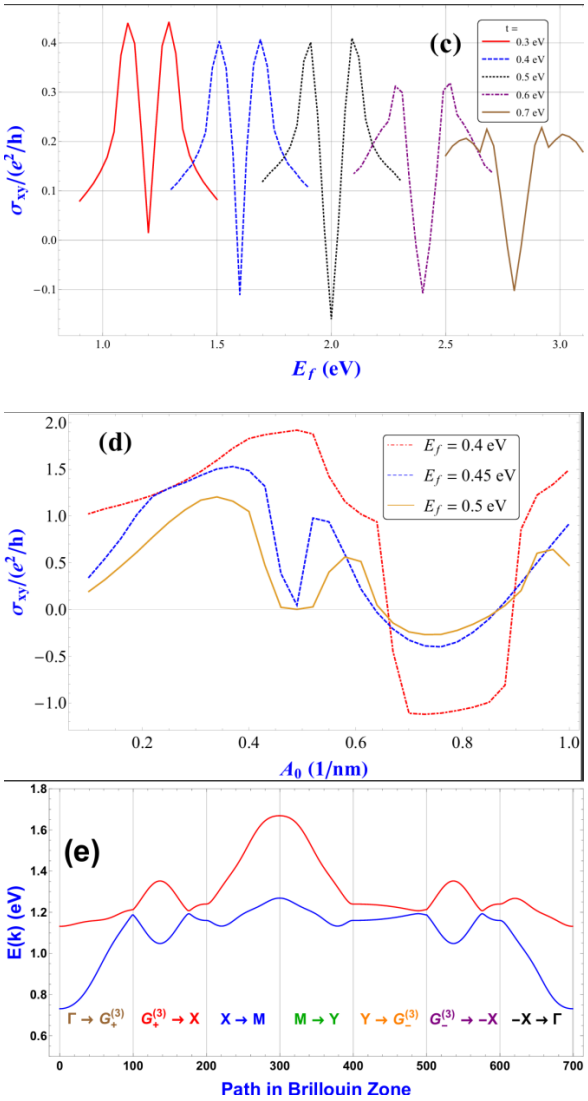
شکل ۲(b,c)، σ_{xy} بر حسب انرژی فرمی به ازای دو مقدار مغناطش به ازای انرژیهای جهش متفاوت ترسیم شده است. مغناطش ۰.۱۲ الکترون–ولت در ناحیه ای می افتد که عدد چرن برابر ٤ می باشد. در انرژی جهش کوچک، گاف عمومی در سیستم پدیدار می شود که در نتیجه کوانتیزه بودن σ_{xy} درون گاف در شکل ۲(b) دیده می شود. با افزایش انرژی جهش و از بین رفتن گاف عمومی، مقدار قله σ_{xy} کاهشی می شود اما هچنان قله در آن مشهود است که نشانگر تجمع بار توپولوژیک در گافهای موضعی است. به عنوان شاهد، σ_{xy} به ازای مغناطش ۰.۲ الکترون–ولت نیز محاسبه شده است که با توجه به نمودار فاز ۱(a)، سیستم باید دارای عدد چرن صفر باشد. شکل ۲(c) بجای قله، دره را در σ_{xy} نشان می دهد که نشانه ای از همان عدد چرن صفر می باشد.

در شکل ۲(d)، σ_{xy} بر حسب شدت نور و به ازای مغناطش خارجی صفر رسم شده است. طبق نمودار فاز ۱(a) انتظار داریم دو ناحیه با گذار $C = 2 \Rightarrow -2$ داشته باشیم. در شکل ۲(d) این گذار به وضوح در انرژی فرمی ۰.٤ الکترون–ولت دیده می شود. ساختار نواری در ناحیه با پارامتر محرک $|\beta| < 1$ در شکل ۲(e) ترسیم شده است. ساختار نواری نشان می دهد که گاف انرژی بصورت عمومی وجود ندارد اما در نقاط پرتقارن و نقاط خارج از تقارن G می تواند تجمع انحنای بری وجود داشته باشد.

نتیجه گیری

آلترمغناطیسهای دو بعدی با تقارن مغناطیسی d_{xy}، در حالت تعادل ویژگی توپولوژیک ندارند اما با تابش نور با قطبش دایروی، توپولوژی می تواند در آنها در شرایط غیر تعادلی القا شود. در این مقاله نشان می دهیم که این مواد وقتی تحت تابش قرار می گیرند می توانند عددهای چرن بالایی را تا عدد ٤ داشته باشند. اما مشکل مربوط به جمله انرژی جنبشی است که گاه گاف انرژی عمومی در سیستم بسته می شود. در این مقاله ثابت می کنیم با اندازه گیری رسانندگی هال غیرعادی ذاتی می توان تجمع و انباشتگی انحنای بری را در نقاط دیراکی با گاف موضعی مشاهده کرد.





شکل۲ : a) رسانندگی هال غیرعادی بر حسب مغناطش به ازای شدت نور ثابت $A_0 = 0.4\, nm^{-1}$ برای مقدار انرژی جهش متفاوت. b,c) رسانندگی هال غیرعادی بر حسب انرژی فرمی به ازای مغناطشهای عمودی به ترتیب ۰.۱۲ و ۰.۲ الکترون–ولت. d) رسانندگی هال غیرعادی بر حسب شدت نور به ازای مغناطش خارجی صفر و انرژی های فرمی متفاوت. e) ساختار نواری به ازای شدت نور $A_0 = 0.4\, nm^{-1}$ و مغناطش ۰.۱۲ الکترون–ولت و انرژی جهش ۰.۳ الکترون–ولت. در این شدت نور پارامتر محرک $|\beta| < 1$. بقیه پارامترها برابرند با $J = 1\, eV, \lambda = 0.35\, eV, \Omega = 2\, eV$.

مرجع‌ها

[1] L. Smejkal, J. Sinova, and T. Jungwirth, Beyond Conventional Ferromagnetism and Antiferromagnetism: A Phase with Nonrelativistic Spin and Crystal Rotation Symmetry, Phys.Rev.X, **12**, 031042 (2022).
[2] L. Smejkal, J. Sinova, and T. Jungwirth, Emerging Research Landscape of Altermagnetism, Phys. Rev. X. **12**, 040501 (2022).
[3] C. Song, H. Bai, Z. Zhou, L. Han, H. Reichlova, J. Hugo Dil, J. Liu, X. Chen, and F. Pan, Altermagnets as a New Class of Functional Materials, Nat. Rev. Mater. **10**, 473 (2025).
[4] H. Cheraghchi, Floquet-Engineered Chern Insulator in two-dimensional $d_{x^2-y^2}$-Wave Altermagnets, Phys. Rev. B. **15**, 155439 (2026).
[5] T. Fukui, Y. Hatsugai, and H. Suzuki, Chern Numbers in Discretized Brillouin Zone: Efficient Method of Computing (Spin) Hall Conductances, J.~Phys.~Soc.~Jpn. **74**, 1674 (2005).
[6] F. D. M. Haldane, Berry Curvature on the Fermi Surface: Anomalous Hall Effect as a Topological Fermi-Liquid Property, Phys. Rev. Lett. **93**, 206602 (2004).

تحلیل جامع اصول اولیه آلیاژ هویسلر چهارتایی CoTiIrGe برای کاربردهای اسپینترونیک

اسدی محمدآبادی، احمد[۱]، هرمزی نژاد، دستان[۲]

۱ گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، صندوق پستی ۳۶۹۷-۱۹۳۹۵، تهران، ایران

۲ دکترای فیزیک، وزارت آموزش و پرورش، تهران صندوق پستی ۳۳۳٤-۱٤۱۵۵، ایران

چکیده

در این تحقیق، خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژ هویسلر چهارتایی CoTiIrGe با استفاده از بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو بر پایه نظریه تابعی چگالی و با در نظر گرفتن تقریب شیب تعمیم یافته مورد مطالعه قرار گرفت. با تغییر موقعیت اتم‌ها، محاسبات برای سه ساختار فرضی انجام شد. نتایج به دست آمده نشان دادند که فقط یکی از ساختارها (ساختار نوع ۲) دارای قطبش اسپینی ۱۰۰٪ و نیم‌فلز می‌باشد. بنابراین آلیاژ مذکور می‌تواند به عنوان گزینه مناسب برای کاربردهای اسپینترونیک معرفی شود.

واژه های کلیدی: *آلیاژ هویسلر، کوانتوم اسپرسو، نیم‌فلز، نظریه تابعی چگالی*

Comprehensive first-principles analysis of the quaternary Heusler alloy for spintronics applications

Asadi Mohammad Abadi, Ahmad[1], Hormozinejad, Dastan[2]

[1] Department of Physics, Faculty of science, Payame Noor university, P.O. Box 19395-3697, Tehran, Iran
[2] Ph.D. in Physics, Ministry of Education, P.O. Box 14155-3334, Tehran, Iran

Abstract

In this study, the structural, electronic and magnetic properties of the quaternary Heusler alloy CoTiIrGe were studied using the Quantum Espresso software package based on density functional theory and considering the generalized gradient approximation. Interchanging the positions of the atoms, calculations were performed for three hypothetical structures. The results obtained showed that only one of the structures (type 2 structure) has 100% spin polarization and is half-metal. Therefore, the mentioned alloy can be introduced as a suitable option for spintronics applications.

***Keywords**: Heusler Alloy, Quantum Espresso, Half-Metal, Density Functional Theory*

PACS No. 71

مقدمه

در طول دو دهه گذشته، آلیاژهای هویسلر از نظر تئوری و تجربی توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده‌اند. این توجه به دلیل ساختار الکترونی و خواص مغناطیسی منحصر به فرد، قطبش اسپینی و دمای کوری بالا می‌باشد. در میان آن‌ها، آلیاژهای هویسلر فرومغناطیس نیم‌فلز مطلوب هستند، چراکه آن‌ها به عنوان فیلترهای اسپینی کارآمد عمل می‌کنند و جریان‌های قطبیده اسپینی بالا را ممکن می‌سازند و نقش حیاتی در پدیده‌های مختلف وابسته به اسپین مانند مقاومت مغناطیسی تونلی و تزریق اسپین به نیمرساناها ایفا می‌کنند. این مواد از طریق محاسبات ساختار نواری وابسته به اسپین شناسایی می‌شوند و به عنوان منابع و تحلیل‌کننده‌های الکترون‌های قطبیده در دستگاه‌های اسپینترونیکی اهمیت بالقوه‌ای دارند [۳-۱]. نکته قابل توجه در آلیاژهای هویسلر این است که اگرچه عناصر تشکیل دهنده آن‌ها ممکن است در دمای محیطی مغناطیسی نباشند، اما ترکیب آن‌ها می‌تواند تبدیل به یک فرومغناطیس شود. ساختار الکترونی و خواص فیزیکی این آلیاژها به شدت به نظم ساختاری و توزیع اتم‌ها در شبکه وابسته است [٤]. آلیاژهای هویسلر به دو دسته کلی آلیاژهای تمام هویسلر

(با فرمول کلی X_2YZ) و نیم‌هویسلر (با فرمول کلی XYZ) تقسیم‌بندی می‌شوند که در آن‌ها X و Y معمولاً اتم‌های فلزی کاتیونی هستند و Z از عناصر آنیونی یکی از گروه‌های اصلی ۳ تا ۵ انتخاب می‌شود. آلیاژهای چهارتایی با فرمول XX'YZ آلیاژهای جدیدی هستند که با جایگزینی یکی از اتم‌های X با X' در آلیاژهای تمام هویسلر می‌توان ایجاد کرد و در واقع با این عمل طیف گسترده‌ای از آلیاژهای جدید به وجود می‌آید [۵]. تمام این ساختارها از چهار زیرشبکه fcc تشکیل شده‌اند که این زیرشبکه‌ها به اندازه یک چهارم در راستای قطر اصلی در هم نفوذ کرده‌اند. در این مقاله با استفاده از محاسبات اصول اولیه بر پایه نظریه تابعی چگالی، خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژ هویسلر چهارتایی CoTiIrGe مورد مطالعه قرار گرفته است.

جزئیات محاسبات

محاسبات اصول اولیه بر پایه نظریه تابعی چگالی با استفاده از کد pwscf از بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو انجام شد. برای برهم‌کنش تبادلی- همبستگی از روش شبه‌پتانسیل موج تخت با تقریب گرادیان تعمیم یافته استفاده شد. در میان شبه‌پتانسیل‌های موجود، شبه‌پتانسیل فوق نرم برای تعیین برهم‌کنش بین هسته و الکترون‌های ظرفیت انتخاب شد. در تمامی محاسبات انرژی قطع ۸۵Ry برای کوتاه کردن بسط توابع موج کوهن- شم به کار گرفته شد. تقسیم‌بندی منطقه اول بریلوئن کاهش یافته به روش منخورست- پک انجام شد و تعداد نقاط k بهینه شده ۱۲×۱۲×۱۲ در محاسبات مورد استفاده قرار گرفت. همچنین محاسبات خودسازگار با دقت همگرایی 10^{-5}Ry در نظر گرفته شد.

نتایج و بحث

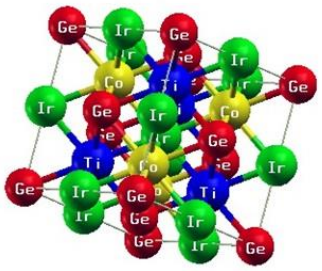
آلیاژ چهارتایی هویسلرXX'YZ دارای ساختار کریستالی از نوع LiMgPdSn با گروه فضایی F43m است [۶]. آلیاژ هویسلر چهارتایی CoTiIrGe دارای ۴ مختصه مکانی 4a(۰،۰،۰)، 4b(۰/۲۵، ۰/۲۵، ۰/۲۵)، 4c(۰/۵، ۰/۵، ۰/۵) و 4d(۰/۷۵، ۰/۷۵، ۰/۷۵) است. با جابه‌جایی مکان اتم‌ها سه نوع از این آلیاژ می‌تواند وجود داشته باشد که در جدول ۱ آورده شده است.

محاسبات با ۱۶ اتم در سلول واحد (هر عنصر شامل ۴ اتم) در فاز مکعبی انجام شد.

جدول ۱: موقعیت اتمی در سه ساختار فرضی آلیاژ CoTiIrGe

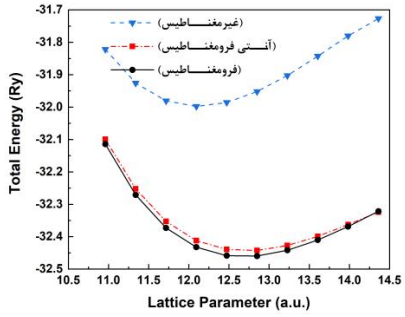
	نوع۱	نوع۲	نوع۳
4a(۰،۰،۰)	Ge	Ge	Ge
4b(۱/۴، ۱/۴، ۱/۴)	Ir	Co	Ti
4c(۱/۲، ۱/۲، ۱/۲)	Co	Ti	Ir
4d(۳/۴، ۳/۴، ۳/۴)	Ti	Ir	Co

اما به دلیل آن‌که فقط ساختار نوع دو در بین آن‌ها خاصیت نیم‌فلزی دارد، در ادامه، فقط خواص مربوط به این ساختار مورد بحث قرار گرفته است. در شکل ۱ ساختار هندسی آلیاژ هویسلر چهارتایی CoTiIrGe در نوع دو نشان داده شده است.



شکل ۱: ساختار هندسی آلیاژ هویسلر چهارتایی CoTiIrGe (نوع دو)

در ابتدا برای مشخص شدن نوع نظم مغناطیسی آلیاژ، نمودار انرژی بر حسب ثابت شبکه برای سه فاز غیرمغناطیسی، آنتی‌فرومغناطیسی و فرومغناطیسی رسم شد (شکل ۲). با توجه به این شکل می‌توان گفت که آلیاژ مورد مطالعه فرومغناطیس است، زیرا حالت فرومغناطیس انرژی کمتری نسبت به دو حالت دیگر دارد.



شکل ۲: نمودار انرژی بر حسب ثابت شبکه آلیاژ CoTiIrGe

در ادامه محاسبات، نمودار انرژی کل بر حسب ثابت شبکه را با معادله حالت مورناگان برازش داده و پارامترهای ساختاری را به دست آوردیم. این معادله به فرم زیر است [۷]:

$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0\beta_0}{16}\left\{\left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{2}{3}}-1\right]^3\beta'_0 + \left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{2}{3}}-1\right]^2\left[6-4\left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{2}{3}}\right]\right\} \quad (۱)$$

که در این رابطه، E_0 انرژی حالت پایه، β_0 مدول حجمی در دمای صفر کلوین، β'_0 مشتق مدول حجمی بر حسب فشار و V_0 حجم تعادلی است. برای بررسی پایداری آلیاژ، می‌توان انرژی بستگی را که از رابطه ۲ به دست می‌آید محاسبه نمود:

$$E_{coh} = E_{tot} - E_{Co}^{atom} - E_{Ti}^{atom} - E_{Ir}^{atom} - E_{Ge}^{atom} \quad (۲)$$

در این رابطه E_{coh} انرژی بستگی و E_{tot} انرژی کل می‌باشد. با توجه به مقدار منفی به دست آمده برای انرژی بستگی می‌توان گفت که این آلیاژ به لحاظ ساختاری پایدار می‌باشد. در جدول ۲ پارامترهای ساختاری محاسبه شده آورده شده است.

جدول ۲: برخی پارامترهای ساختار آلیاژ CoTiIrGe

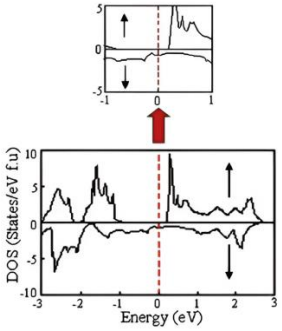
نام آلیاژ	CoTiIrGe
E_{coh}(eV)	-۶۱/۶۵۷
β_0(GPa)	۵۳۲/۸۷
β'_0	۶/۵۸
a(A°)	۶/۶۰

مقدار گشتاور مغناطیسی اسپینی کل در هر سلول واحد، تفاوت بین تعداد حالت‌های اشغال‌شده با اسپین بالا و پایین است. برای آلیاژهای هویسلر چهارتایی، رابطه بین گشتاور مغناطیسی اسپینی کل (μ_t) و تعداد کل الکترون‌های ظرفیت (Z_t) در هر سلول واحد از قانون اسلیتر-پائولی ($\mu_t=Z_t-24$) پیروی می‌کند [۸]. آلیاژ هویسلر چهارتایی CoTiIrGe دارای ۲۶ الکترون ظرفیت است بنابراین گشتاور مغناطیسی کل طبق این قانون $2\mu_B$/f.u به دست می‌آید که با مقدار به دست آمده از محاسبات تطابق خوبی دارد. همچنین نتایج به دست آمده در جدول ۳ نشان می‌دهد که اتم Ti بیشترین سهم را در گشتاورهای مغناطیسی اسپینی کل دارد.

در ادامه محاسبات برای تعیین خاصیت نیم‌فلزی آلیاژ مذکور، ساختار الکترونی برای هر سه ساختار فرضی مورد بررسی قرار گرفت، اما فقط نمودار چگالی حالت‌های کل برای ساختار نوع دو در شکل ۳ نشان داده شده است.

جدول۳: گشتاور مغناطیسی کل آلیاژ CoTiIrGe و گشتاور مغناطیسی اتم‌های تشکیل دهنده آن

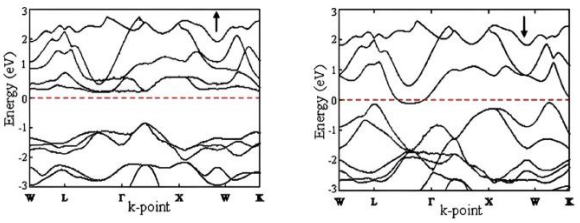
نام آلیاژ	$\mu_a(\mu_B/atom)$				$\mu_t(\mu_B/f.u)$
	Co	Ti	Ir	Ge	
CoTiIrGe	۰/۵۸	۰/۹۹	۰/۴۱	۰/۰۳	۲/۰۱



شکل ۳: چگالی حالت‌های الکترونی آلیاژ CoTiIrGe (ساختار نوع دو)

با توجه به این نمودار دیده می‌شود که ساختار فرضی نوع دو به دلیل وجود همپوشانی بین نوار ظرفیت و رسانش فقط برای اسپین پایین، نیم‌فلز کامل است (لازم به ذکر است که دو ساختار فرضی دیگر خاصیت نیم‌فلزی نداشتند.). بنابراین آلیاژ CoTiIrGe در ساختار نوع دو می‌تواند گزینه مناسبی برای کاربرد در قطعات اسپینترونیک باشد.

برای بررسی دقیق‌تر، ساختار نواری آلیاژ CoTiIrGe در ثابت شبکه تعادلی و در راستای مسیرهای پرتقارن در ناحیه اول بریلوئن در شکل ٤ نشان داده شده است.



شکل ٤: ساختار نواری اسپین بالا و پایین آلیاژ CoTiIrGe

با توجه به نمودار می‌توان گفت که نوارهای رسانش و ظرفیت در تراز فرمی برای کانال اسپین بالا همپوشانی ندارند. همچنین نتایج حاصل از محاسبات نشان می‌دهد که حداکثر نوار ظرفیت[1] و حداقل نوار رسانش[2] ساختار نوار اسپین بالا به ترتیب ۰/۹۲ و ۰/۱۹ الکترون‌ولت هستند. بنابراین یک گاف نواری غیرمستقیم ۱/۱۱ الکترون‌ولت در جهت Γ-X وجود دارد.

نتیجه‌گیری

خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژ هویسلر چهارتایی CoTiIrGe در سه ساختار فرضی با استفاده از بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو بر پایه نظریه تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج به دست آمده نشان دادند که ساختار نوع دو از ساختارهای دیگر پایدارتر است و فقط این ساختار با گاف نواری قابل ملاحظه (۱/۱۱eV) یک نیم‌فلز ایده‌آل است. همچنین با بررسی خواص مغناطیسی مشخص شد که آلیاژ مذکور فرومغناطیس است و گشتاور مغناطیسی کل آن (۲μ_B/f.u) با قانون اسلاتر– پائولی سازگار است. بنابراین آلیاژ CoTiIrGe یک فرومغناطیس نیم‌فلز است و اگر در عمل این آلیاژ قابل سنتز و تولید باشد، می‌تواند به عنوان یک گزینه مناسب برای کاربرد در قطعات اسپینترونیک مورد استفاده قرار بگیرد.

مرجع‌ها

[۱] A.Melloul, I. Bensehil, H. Baaziz, Z. Charifi, and T. Ghellab, " First-principles investigation of structural, elastic, and magnetoelectronic properties of FeVNbGa and MnVNbSn quaternary Heusler alloys" Chemical Physics, **610**, (2026) p.113296.

[۲] H. Xu, H. Xi, X. Wang, "Atomic site occupations, electronic structures, magnetic properties and martensitic transformations in all-d-metal heusler alloys Cd_2MnY (Y= Fe, Ru, Os, Co, Rh, Ir, Ni, Pd, Pt)" Computational and Theoretical Chemistry. (2023) Jun 1;1224:114002.

[۳] S. Matth, S. Pandey, and H. Pandey, "Ab-initio optimization of CoHfSi Half-Heusler alloy" Materials Today: Proceedings (2023).

[۴] A. Amirabadizadeh, S.A. Emami, Z. Nourbakhsh, S.M. Sadr,S.M.Baizaee, "The effect of substitution of As for Ga on the topological phase and structural, electronic and magnetic properties of Mn_2ZrGa Heusler alloy" J. Super Nove Magn. **30**, (2017) 1-8.

[۵] PN. Namboodiri, B. Natesan "First principle calculation of structural, electronic, magnetic, and elastic properties of ferromagnetic Cu_2MnZ (Z= Pb, P, As, Bi, S, Se, and Te) Heusler alloys" Physica B: Condensed Matter. (2023) Mar 15; 653:414673.

[۶] XP. Wei, TY. Cao, XW.Sun, Q. Gao, P. Gao, ZL. Gao, XM. Tao "Structural, electronic, and magnetic properties of quaternary Heusler CrZrCoZ compounds: A first-principles study." Chinese Physics B. (2020) 1;29(7):077105.

[۷] VG. Tyuterev, N. Vast, "Murnaghan's equation of state for the electronic ground state energy" Computational materials science. (2006) Dec 1;38(2):350-3.

[۸] S. Skaftouros, K. Ozdogan, E. Şaşıoglu , I. GalanakisI. "Generalized Slater-Pauling rule for the inverse Heusler compounds" Physical Review B,Condensed Matter and Materials Physics. (2013) Jan 1;87(2):024420.

[1] Valance band maximum
[2] Conduction band minimum

مطالعه اثر راستای کج شدگی در تونل‌زنی کلین ساختارهای دیراکی

پورعلی ، فرزانه[۱] ؛ خضرلو ، مریم[۲]؛ گودرزی ، هادی[۱] ؛ لطفی‌زاده ، مهدی[۱]

۱ گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ارومیه

۲ گروه فیزیک، دانشکده علوم و فناوری‌های نوین، دانشگاه صنعتی ارومیه

چکیده

تونل زنی کلین، که پدیده‌ای کوانتومی نسبیتی بارز است، عبور کامل حامل‌های بار از سدهای پتانسیل را امکان‌پذیر می‌سازد و بر خلاف شهود کلاسیک عمل می‌کند. در سال‌های اخیر، ظهور موادی با ساختارهای نواری شبه‌دیراک به‌ویژه سیستم‌های دوبعدی نظیر گرافین بستری کارآمد برای بررسی این اثر در شرایط واقعی فراهم آورده است؛ که به‌شکلی جالب توجه در چندین کار پیشین مورد بررسی قرار گرفته است. در میان عوامل گوناگونی که بر اثر تونل‌زنی کلین در این مواد تأثیر می‌گذارند، کج شدگی مخروط های دیراک که از روابط ناهمسانگرد انرژی-تکانه ناشی می‌شود، می‌تواند توجه فزاینده‌ای را به خود جلب کند. دامنه نوسانات رسانندگی ناشی از تونل زنی برای کج شدگی هم جهت با حرکت حامل ها افزایش و برای کج شدگی عمود بر جهت حرکت حامل ها کاهش می یابد. در پژوهش حاضر، تأثیر جهت کج‌شدگی بر تونل‌زنی کلین در ساختارهای دیراک تحت شرایط مرزی مناسب مقایسه شده و پیامدهای بالقوه آن بررسی می‌شود.

واژه های کلیدی: *مخروط دیراک کج شده، تونل زنی کلین، سرعت گروه، تونل زنی ناهمسانگرد*

Study of the effect of tilt direction on Klein tunneling in Dirac structures

Pourali, Farzaneh[1]; Khezerlou, Maryam[2]; Goudarzi, Hadi[1]; Lotfizadeh, Mehdi[1]

1 Department of Physics, Faculty of Science, Urmia University, Urmia

2 Department of Physics, Faculty of Science and Modern Technologies, Urmia University of Technology

Abstract

Klein tunneling, a quintessential relativistic quantum phenomenon enables perfect transmission of charge carriers through potential barriers, defying classical intuition. In recent years, the emergence of materials with Dirac-like band structures, particularly two-dimensional systems such as graphene, has provided a fertile platform for exploring this effect under realistic conditions, which has been interesting acted in several works earlier. Among the various factors affecting Klein tunneling in these materials, the tilting of Dirac cones, which arises from the anisotropic energy-momentum relations, can attract increasing attention. The amplitude of the tunneling-induced conductance fluctuations increases for tilting parallel to the direction of carrier motion and decreases for tilting perpendicular to the direction of carrier motion. In the present study, the effect of the tilt direction on Klein tunneling in Dirac structures under appropriate boundary conditions is compared, and its potential consequences are investigated.

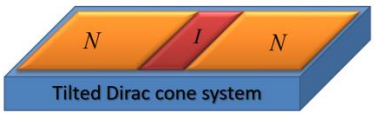
***Keywords**: Tilted Dirac cone; Klein tunneling; Group velocity; Anisotropic tunneling*
PACS No. 68-72

مقدمه

پدیده تونل‌زنی کوانتومی یکی از جالب‌ترین جلوه‌های مکانیک کوانتومی است که در آن ذرات می‌توانند با احتمال غیرصفر از سدهای پتانسیلی عبور کنند که از دیدگاه کلاسیک غیرقابل نفوذ هستند. این پدیده در انواع مختلف سیستم‌های فیزیکی از جمله ساختارهای نیمه‌رسانا، ابررساناها و اخیراً مواد دوبعدی با ساختار نواری دیراکی مانند گرافین مورد مطالعه قرار گرفته است [۱,۲]. در این مواد، حامل‌های بار از معادله دیراک بدون جرم تبعیت می‌کنند و پدیده ویژه‌ای به نام تونل‌زنی کلین مشاهده می‌شود که در آن عبور ذرات از سد پتانسیل در زاویه تابش عمودی به احتمال واحد می‌رسد، رفتاری که با پیش‌بینی‌های غیرنسبیتی در تضاد است [۳].
یکی از ویژگی‌های مهمی که می‌تواند رفتار ترابردی این مواد را به طور اساسی دگرگون کند، ناهمسانگردی مخروط دیراک است [۴]. در این میان، پژوهش‌های گسترده عمدتاً با تمرکز بر شدت کج شدگی انجام شده است [۵،۶]. در این بین اثر جهت کج شدگی کمتر مورد توجه قرار گرفته است. در کار حاضر رفتار تونل‌زنی در یک اتصال نرمال-عایق-نرمال (N/I/N)، بسته به اینکه بردار کج شدگی در امتداد x (عمود بر پیوندگاه) یا در امتداد y (موازی با پیوندگاه) باشد، مورد ارزیابی قرار گرفته است. به عبارت دیگر، اثر جهت کج شدگی بر تقویت تونل‌زنی کلین یا سرکوب آن بررسی می شود.
نتایج نشان می‌دهند که جهت کج‌شدگی می‌تواند به عنوان یک پارامتر کنترلی کلیدی در طراحی سوئیچ‌های کوانتومی مبتنی بر مواد دیراکی کج‌شده مورد استفاده قرار گیرد. اهداف اصلی این پژوهش عبارتند از: (الف) بررسی تونل‌زنی کلین در ساختار N/I/N با کج شدگی یکسان در همه نواحی، (ب) مقایسه کمی رفتار تونل‌زنی در دو حالت کج شدگی موازی و عمود بر پیوندگاه، و (ج) آشکارسازی نقش جهت کج شدگی به عنوان یک پارامتر کنترلی کلیدی در دستگاه‌های الکترونیکی مبتنی بر مواد دیراکی کج‌شده.

تئوری و مدل

ساختاری که قصد داریم بررسی کنیم، یک ساختار N/I/N بر پایه ی مواد دیراک دارای کج‌شدگی است که در شکل ۱ نشان داده شده است. در این ساختار، الکترون‌ها می‌توانند از طریق تونل‌زنی کوانتومی از یک لایه N به لایه دیگر عبور کنند. بخش عایق به لایه میانی اشاره دارد که در آن پتانسیل انرژی الکترون‌ها بسیار بالا است و حرکت الکترون‌ها در آن محدود می‌شود.



شکل ۱. ساختار N/I/N برپایه مواد دیراک کج شده

این ساختار می تواند به دلیل کج شدن مخروط دیراک خواص الکترونیکی منحصر به فردی از خود نشان دهد.
همیلتونی مؤثر برای شبه‌ذرات دیراکی بدون جرم در حضور کج‌شدگی مخروط به صورت زیر است.

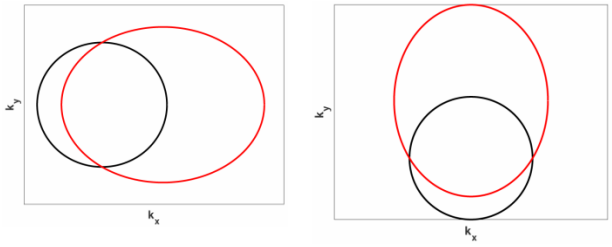
$$\mathrm{H}_{\mathrm{tilt}} = \sum_{j=x,y} \left(v_j k_j \sigma_j + u_j k_j \hat{1} \right) \quad (۱)$$

در رابطه فوق، $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ بردار موج دوبعدی ذره در صفحه است. پارامتر v_j سرعت فرمی را نشان می‌دهد و $\hat{1}$ ماتریس یکه 2×2 است. مؤلفه‌های u_x و u_y، بردار کج شدگی را در راستای x و y مشخص می‌کنند. اگر $u_y = u_{x=0}$ ، همیلتونی به حالت استاندارد گرافین (مخروط عمودی) کاهش می‌یابد. با حل معادله مقدار ویژه $\mathrm{H}_{\mathrm{tilt}}\Psi = E\Psi$، ویژه مقادیر انرژی برای دو حالت کج شدگی موازی با پیوندگاه و کج شدگی عمود بر پیوندگاه به دست می‌آید:

$$E_{\pm}^{x\text{-tilt}} = u_x k_x \pm \sqrt{v_x^2 k_x^2 + v_y^2 k_y^2}, \qquad E_{\pm}^{y\text{-tilt}} = u_y k_y \pm \sqrt{v_x^2 k_x^2 + v_y^2 k_y^2} \quad (۲)$$

سطح فرمی مخروط دیراک کج را از معادله (۲) می توان به دست آورد که یک بیضی خواهد بود. در شکل ۲(الف)و(ب) سطح فرمی برای دو حالت بدون کج شدگی و دارای کج شدگی رسم شده

است منحنی مشکی دایره و مربوط به حالت غیر کج شده و منحنی قرمز بیضی و مربوط به حالت کج شده می باشند.



(ب) (الف)

شکل ۲(الف)و(ب). سطوح فرمی مخروط های دیراک برای کج‌شدگی راستای x (الف)وy (ب). خط سیاه، سطح فرمی مخروط دیراک بدون کج‌شدگی را نشان می‌دهد.

اسپینورهای نواحی نرمال چپ، عایق و نرمال راست به ترتیب به صورت زیر بدست می آید:

$$\Psi_{\mathrm{L}}(x)=\begin{pmatrix}1\\ \tau e^{i\theta}\end{pmatrix}e^{ik_x x}+r\begin{pmatrix}1\\ \tau e^{-i\theta}\end{pmatrix}e^{-ik_x x}$$

$$\Psi_{\mathrm{I}}(x)=a\begin{pmatrix}1\\ \tau e^{i\phi}\end{pmatrix}e^{iq_x x}+b\begin{pmatrix}1\\ \tau e^{-i\phi}\end{pmatrix}e^{-iq_x x}$$

$$\Psi_{\mathrm{R}}(x)=t\begin{pmatrix}1\\ \tau e^{i\theta}\end{pmatrix}e^{ik_x x}$$

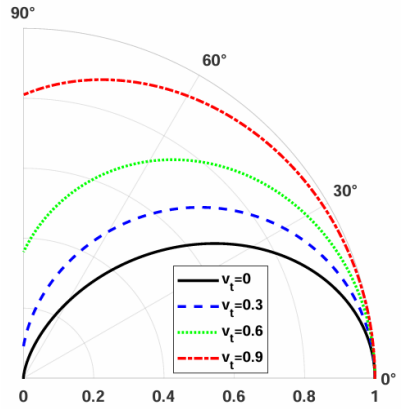
(۳)

که در آن $\tau=\pm1$ به ترتیب نشان‌دهنده نوار رسانش و ظرفیت است، θ زاویه تابش در ناحیه نرمال و ϕ زاویه عبور در ناحیه عایق می‌باشد.

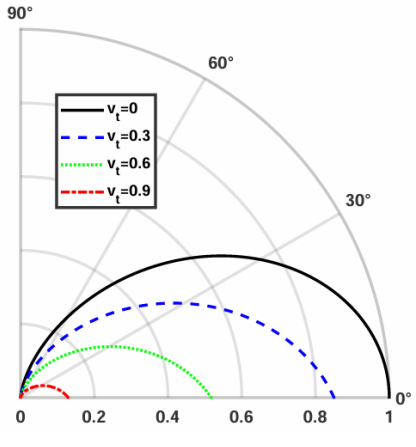
با اعمال شرایط مرزی در $x=0$ و $x=L$ ضرایب بازتاب r و عبور t به دست می‌آیند. شدت سد پتانسیل با پارامتر بدون‌بعد $Z=q_xL$ تعریف می‌شود که در آن L عرض ناحیه عایق است. احتمال عبور ذرات از رابطه $T=|t|^2$ محاسبه می‌شود. در این بخش تأثیر جهت کج شدگی (موازی و عمود بر پیوندگاه) بر احتمال عبور و رسانندگی مطالعه شده است.

برای مشخص کردن قدرت کج‌شدگی مخروط دیراک، یک سرعت مؤثر کج‌شدگی به نام v_t معرفی می‌کنیم. اگرچه v_t نماد یک سرعت را دارد، اما در واقع یک کمیت بدون‌بعد است که سهم نسبی عبارت‌های کج‌شدگی u_x و u_y را نسبت به سرعت‌های فرمی v_x و v_y می‌سنجد.

شکل های ۳ (الف)و (ب) به ترتیب احتمال گذار بر حسب زاویه تابش را برای جهت‌های کج شدگی در راستای x (عمود بر پیوندگاه) و y (موازی با پیوندگاه) برای مقادیر مختلف پارامتر کج شدگی v_t نشان می‌دهند.



(الف)

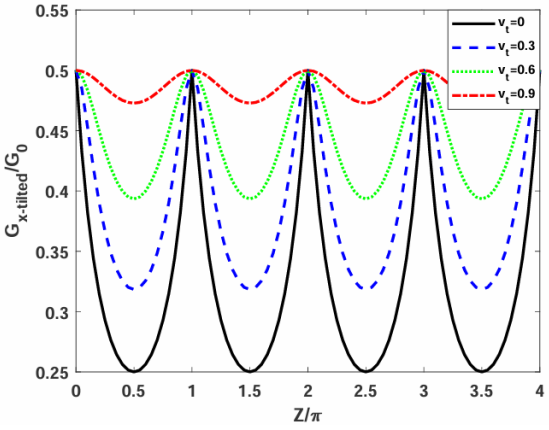


(ب)

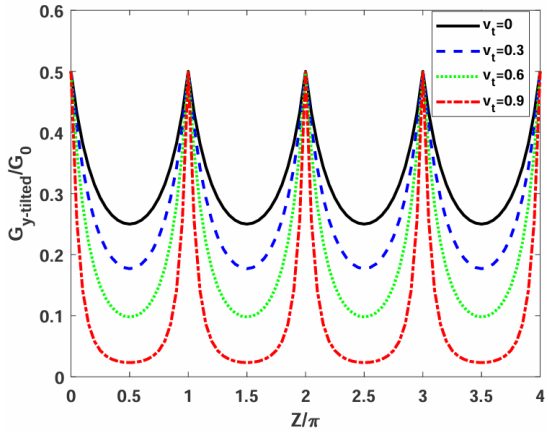
شکل ۳ (الف)و (ب). رفتار تونل زنی بر حسب زاویه تابش برای جهت‌های کج شدگیx(الف)و y (ب)

در کج شدگی راستای y گذار کامل در زاویه صفر در حضور کج شدگی هیچگاه به یک نمی‌رسد این در حالیست که برای کج شدگی راستای x همواره شاهد گذار کامل در زاویه تابش صفر می باشیم. علت این موضوع ریشه در محاسبه سرعت گروه دارد زیرا که شرط تونل‌زنی کامل کلین، عمود بودن سرعت گروه بر سد

است. در کج‌شدگی راستای y ، سرعت گروهی دارای مؤلفه‌ای در راستای موازی با پیوندگاه است و در نتیجه در زاویه‌ی تابش صفر سرعت گروه بر سد پتانسیل عمود نمی‌باشد. لذا در این حالت احتمال گذار به یک نمی‌رسد. در زاویه ۹۰ درجه به ازای تمامی مقادیر کج شدگی احتمال گذار برابر صفر است در کل می‌توان نتیجه گرفت که احتمال گذار در ساختار با کج شدگی راستای y کاهش می‌یابد و به ازای بیشترین مقدار v_t کمترین مقدار گذار اتفاق می‌افتد. شکل های ۴(الف) و(ب) رسانندگی ناشی از تونل زنی برحسب شدت سد Z را به ازای انواع کج شدگی برای دو جهت عمود بر هم نشان می‌دهد



(الف)



(ب)

شکل۴ (الف)و(ب): وابستگی رسانندگی ناشی از تونل‌زنی به شدت سد برای چندین مقدار کج‌شدگی در امتداد محور

همانطور که مشاهده می کنیم، الگوی نوسانی احتمال تونل‌زنی نسبت به شدت سد، مستقل از جهت و مقدار کج شدگی است. هر دو حالت، نوسانی با دوره تناوب π از خود نشان می‌دهند. در $Z=n\pi$ بیشترین مقدار رسانندگی حتی در حضور بیشترین میزان کج شدگی راستای x اتفاق می‌افتد. اما برای کج شدگی در راستای محور y ، کاهش رسانندگی مشاهده می شود که میزان این کاهش با مقدار کج شدگی رابطه مستقیم دارد. در این حالت کمینه مقدار رسانندگی که در $Z= n\pi/2$ اتفاق می‌افتد با افزایش کج شدگی تغییر می‌کند و در بیشترین مقادیر کج شدگی راستای y حتی رسانندگی به صفر میل می‌کند.

نتیجه گیری

در این پژوهش، تأثیر جهت کج شدگی مخروط دیراک بر پدیده تونل‌زنی کلین در یک ساختار نرمال–عایق–نرمال بررسی شد. در این کار دو جهت متمایز کج شدگی، یعنی کج‌شدگی عمود بر پیوندگاه (امتداد x) و کج‌شدگی موازی با پیوندگاه (امتداد y)، به طور سیستماتیک با یکدیگر مقایسه گردید. مشاهده می‌کنیم که رفتار رسانندگی بر حسب شدت سد یک رفتار نوسانی منظم است. و به ازای $Z=n\pi$ همواره بیشترین مقدار رسانندگی مستقل از مقدار کج شدگی رخ می‌دهد.

مرجع‌ها

[۱] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, "The electronic properties of graphene," Reviews of Modern Physics, vol. 81, no. 1, pp. 109–162, 2009.

[۲] H. Goudarzi, M. Khezerlou, and T. Dezhaloud, "Valley permitted Klein tunneling and magnetoresistance in ferromagnetic monolayer MoS_2," Superlattices and Microstructures, vol. 86, pp. 243–249, 2015.

[۳] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, "Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene," Nature Physics, vol. 2, no. 9, pp. 620–625, 2006.

[۴] M. O. Goerbig, J.-N. Fuchs, G. Montambaux, and F. Piéchon, "Tilted anisotropic Dirac cones in quinoid-type graphene and α-$(BEDT\text{-}TTF)_2I_3$," Physical Review B, vol. 78, no. 4, pp. 045415, 2008.

[۵] V. H. Nguyen and J.-C. Charlier, "Klein tunneling and electron optics in Dirac-Weyl fermion systems with tilted energy dispersion," Physical Review B, vol. 97, no. 23, pp. 235113, 2018.

[۶] R. Al-Marzoog, A. Rezaei, Z. Noorinejad, M. Amini, E. Ghanbari-Adivi, and S. A. Jafari, "Tilted Dirac cones in two-dimensional materials: Impact on electron transmission and pseudospin dynamics," Physical Review B, vol. 110, no. 16, pp. 165427, 2024.

بررسی ترابرد اسپین کالریترونیکی در نانونوارهای استانن با لبه دسته‌مبلی

کلامی ، رضا

دانشکده فیزیک دانشگاه سمنان، سمنان، ایران

چکیده

در این پژوهش، خواص ترابرد اسپین کالریترونیکی نانونوارهای استانن با لبه دسته‌مبلی و عرض‌های مختلف با استفاده از مدل تنگ بست و روش تابع گرین غیرتعادلی مورد مطالعه قرار گرفته است. با اعمال میدان تبادلی مؤثر در ناحیه مرکزی و ایجاد اختلاف دما بین دو الکترود، جریان‌های اسپینی و باری القاشده حرارتی، وابستگی جریان‌ها به ولتاژ گیت و قطبش اسپینی جریان بررسی شد. نتایج نشان می‌دهد که عرض نانونوار تأثیر تعیین‌کننده‌ای بر ویژگی‌های ترابردی و اسپینی سیستم دارد. نانونوار با عرض (N=4) بیشترین فیلترشدگی اسپینی و قطبش را نشان می‌دهد، در حالی که ساختار (N=5) به دلیل گاف انرژی کوچک‌تر، بیشترین جریان‌های حرارتی را تولید می‌کند. همچنین ساختار (N=6) رفتار متعادل و پایداری از خود نشان می‌دهد. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که نانونوارهای استانن گزینه‌های مناسبی برای طراحی ادوات اسپینترونیکی و ترموالکتریکی نسل آینده هستند.

واژه های کلیدی: *استانن، اسپین کالریترونیک، نانونوار دسته‌مبلی، تابع گرین غیرتعادلی، قطبش اسپینی جریان*

Spin-Caloritronic Transport in Armchair Stanene Nanoribbons

Kalami, Reza

Faculty of Physics, Semnan University, Semnan, Iran

Abstract

In this work, the spin-caloritronic transport properties of armchair stanene nanoribbons with different widths are investigated using the tight-binding model and the nonequilibrium Green's function (NEGF) formalism. The effects of an exchange field and a temperature gradient on the electronic and spin-dependent transport characteristics are analyzed. The thermally induced charge and spin currents, gate-voltage-dependent transport behavior, and spin polarization are systematically studied. The results reveal that the ribbon width plays a crucial role in determining the transport properties of the system. The nanoribbon with width N=4 exhibits strong spin-filtering behavior and nearly perfect spin polarization, while the N=5 structure generates the largest thermally induced spin current due to its smaller energy gap. The N=6 nanoribbon demonstrates a balanced and stable transport response. Furthermore, the gate voltage provides an efficient way to control charge and spin currents. These findings suggest that stanene nanoribbons are promising candidates for future spintronic and thermoelectric nanoelectronic devices.

***Keywords**: Stanene Nanoribbon, Spin Caloritronics, Nonequilibrium Green's Function, Spin Polarization*

PACS No. *72*

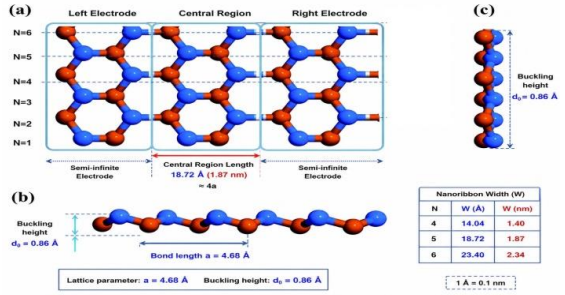
مقدمه

در سال‌های اخیر، استفاده از درجه آزادی اسپین الکترون در کنار بار الکتریکی، زمینه شکل‌گیری شاخه‌ای نوین از الکترونیک موسوم به اسپینترونیک را فراهم کرده است [۱]. یکی از زیرشاخه‌های مهم این حوزه، اسپین کالریترونیک است که به بررسی برهم‌کنش میان انتقال اسپین و گرادیان‌های دمایی می‌پردازد. در چنین سامانه‌هایی می‌توان بدون اعمال ولتاژ خارجی و تنها از طریق اختلاف دما، جریان‌های اسپینی تولید کرد [۲].

مواد دوبعدی به دلیل خواص الکترونیکی و اسپینی منحصر به فرد، بستر مناسبی برای توسعه ادوات اسپینترونیکی محسوب می‌شوند. استانن، به عنوان همتای قلع‌محور گرافن، دارای برهم‌کنش اسپین–مدار قوی و قابلیت تنظیم ساختار نواری است. این ویژگی‌ها

موجب شده‌اند که نانونوارهای استانن به عنوان گزینه‌ای مناسب برای کاربردهای اسپینترونیکی و ترموالکتریکی مورد توجه قرار گیرند [۳].

در این پژوهش اثر عرض نانونوارهای استانن با لبه دسته‌مبلی بر خواص ترابرد اسپین کالریترونیکی بررسی شده و نقش ولتاژ گیت و اختلاف دما در کنترل جریان‌های بار و اسپین مطالعه می‌شود. ساختار مورد مطالعه شامل یک نانونوار استانن با لبه دسته‌مبلی است که بین دو الکترود نیمه‌بی‌نهایت قرار گرفته است. در ناحیه مرکزی یک میدان تبادلی مؤثر اعمال می‌شود.



شکل ۱: مدل نانونوار استانن با لبه دسته‌مبلی متصل به دو الکترود چپ و راست.

مدل و روش محاسبه

برای توصیف سامانه از مدل تنگ بست استفاده شده است. هامیلتونی سیستم به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H_C = H_0 + H_{SO} + H_B \qquad (۲)$$

در این رابطه هامیلتونی H_0 با در نظر گرفتن تقریب نزدیکترین همسایه و با استفاده از تقریب تنگ بست به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H_0 = \epsilon_0 \sum_i c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}) \qquad (۳)$$

که در آن $c_i^{\dagger}$ (c_i) عملگر خلق (نابودی) الکترون با اسپین $\sigma = \uparrow, \downarrow$ در جایگاه i ام است. همچنین σ بیانگر جهت‌گیری اسپین الکترون بوده و تمامی محاسبات برای دو کانال اسپینی بالا و پایین انجام شده است. i و j اشاره به برهم‌کنش نزدیکترین همسایه‌ها دارد. $\epsilon_0 = 0ev$ انرژی جایگاهی و $t = -0.79ev$ پارامتر پرش الکترون بین جایگاه‌های همسایه است. همچنین هامیلتونی برهمکنش اسپین مدار در استانن به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H_{SO} = i\frac{\lambda_{SO}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} v_{ij} c_{i\alpha}^{\dagger} \sigma_{\alpha\beta}^{z} c_{j\beta} \qquad (۴)$$

که در آن λ_{SO}=64.4 meV بیانگر شدت برهم‌کنش اسپین–مدار ذاتی استانن است، α و β اندیس‌های اسپینی را نشان می‌دهند و v_{ij}=±1 به مسیر پرش بین همسایه‌های مرتبه دوم وابسته است؛ به‌گونه‌ای که برای مسیر پادساعتگرد مقدار +1 و برای مسیر ساعتگرد مقدار -1 اختیار می‌کند[۴]. وقتی ناحیه مرکزی نانو نوار روی یک زیرلایه فرومغناطیس قرار می‌گیرد، هامیلتونی آن به صورت زیر نوشته می شود:

$$H_B = -\vec{\sigma}.\vec{h} \qquad (۵)$$

که در آن انرژی تبادلی $h = 1ev$ در نظر گرفته شده است [۷].

هامیلتونی الکترودهای راست و چپ و نیز هامیلتونی ناشی از بر هم کنش الکترودها با ناحیه مرکزی به صورت زیر بیان می‌شود:

$$H_{\beta} = \epsilon_0 \sum_i c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}) \qquad (۶)$$

$$H_{C\beta} = t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}) \qquad (۷)$$

در رابطه (۳)، (۶) و (۷) نماد $\langle i,j \rangle$ بیانگر جمع روی تمامی جفت‌های نزدیک‌ترین همسایه در شبکه استانن است؛ بنابراین جمله پرش الکترون تنها بین اتم‌های مجاور در نظر گرفته شده است. در جمله برهم‌کنش اسپین–مدار، نماد $\langle\langle i,j \rangle\rangle$ نشان‌دهنده جمع روی تمامی جفت‌های همسایه‌های دوم است.

تابع گرین سطحی تأخیری و نیز خود– انرژی الکترودها به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$g_{\beta}^{r}(E) = \left[(E + i\eta)I - H_{\beta}\right]^{-1} \qquad (۸)$$

$$\Sigma_{\beta}^{r}(E) = H_{C\beta} g_{\beta}^{r}(E) H_{\beta C} \qquad (۹)$$

که در این روابط $\beta = L, R$ و η یک مقدار بسیار کوچک و I ماتریس یکه ای در ابعاد هامیلتونی می‌باشد. با توجه به پارامترها و معادلات معرفی شده، می‌توان تابع گرین تأخیری و تابع پهن شدگی Γ را تعریف و در محاسبات تابع انتقال مورد استفاده قرار داد:

$$G^{r}(E) = [(E + i\eta)I - H_C - \Sigma_L^{r}(E) - \Sigma_R^{r}(E)]^{-1} \qquad (۱۰)$$

$$\Gamma_{\beta}(E) = i\left[\Sigma_{\beta}^{r}(E) - (\Sigma_{\beta}^{r}(E))^{\dagger}\right] \qquad (۱۱)$$

تابع انتقال برای اسپین های بالا و پایین به صورت زیر بیان می‌شوند:

$$T_\sigma(E) = \mathrm{Re}\{Tr_\sigma[\Gamma_L . G^r . \Gamma_R . (G^r)^\dagger]\} \quad (۱۱)$$

که در این روابط $\sigma = \uparrow, \downarrow$ نمایش جهت‌گیری اسپین‌های بالا و پایین است. برای محاسبه ترابرد اسپینی ناشی از اختلاف انرژی گرمایی، می‌توان رابطه لانداور – بوتیکر را به صورت زیر در نظر گرفت:

$$I_\sigma = \frac{e}{h}\int T_\sigma(E)[f_L(E) - f_R(E)]dE \quad (۱۲)$$

در ترابرد اسپینی ناشی از اختلاف انرژی گرمایی به جای اعمال یک ولتاژ خارجی بین دو الکترود، پتانسیل شیمیایی دو الکترود را یکسان و در اینجا $\mu = \mu_L = \mu_R = 0$ در نظر گرفته و یک اختلاف دما بین الکترودها اعمال می شود و لذا در رابطه لانداور – بوتیکر تنها تابع توزیع فرمی–دیراک است که تغییر می‌کند. پس اختلاف تابع توزیع‌های دو الکترود بصورت زیر خواهد بود:

$$f_L(E) - f_R(E) = \frac{1}{1+e^{E-\mu/K_B T_L}} - \frac{1}{1+e^{E-\mu/K_B T_R}} \quad (۱۳)$$

لذا جریان‌های اسپین بالا و پایین را به طور جداگانه می‌توان توسط رابطه بالا بدست آورد. با تعیین جریان‌های بار الکتریکی و جریان اسپینی، می‌توان قطبش اسپینی جریان وابسته به دما را نیز از روابط زیر بدست آورد [۵].

$$I_{charge} = I_\uparrow + I_\downarrow \quad (۱۴)$$

$$I_{spin} = I_\uparrow - I_\downarrow \quad (۱۵)$$

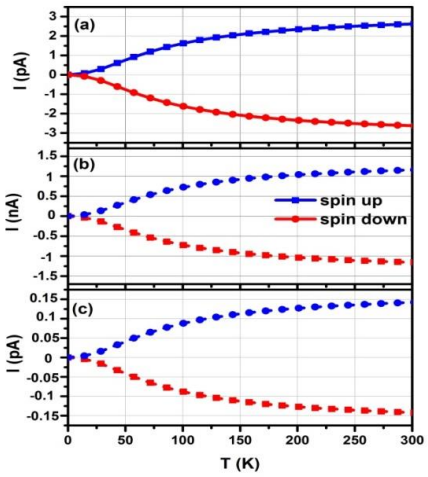
$$SP\% = \frac{|I_\uparrow| - |I_\downarrow|}{|I_\uparrow| + |I_\downarrow|} \times 100 \quad (۱۶)$$

نتایج و بحث

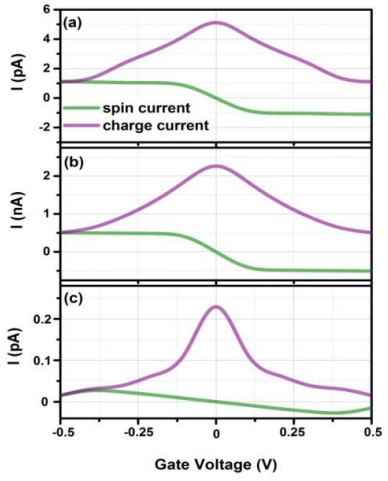
برای بررسی اثر گرادیان دما، دمای الکترود چپ افزایش داده شده و الکترود راست در دمای مرجع نگه داشته شده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش اختلاف دما، شدت جریان‌های اسپین-های بالا و پایین افزایش می‌یابد.

همان‌گونه که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، ساختار (N=5) بیشترین مقدار جریان حرارتی را تولید می‌کند. علت این رفتار، کاهش گاف انرژی و افزایش تابع انتقال در نزدیکی سطح فرمی است. در مقابل، نانونوار (N=4) به دلیل محدود بودن پنجره انتقال، جریان کمتری تولید می‌کند. ساختار (N=6) نیز پاسخ میانی و نسبتاً پایداری ارائه می‌دهد. افزایش دما موجب پهن‌تر شدن پنجره حرارتی شده و تعداد بیشتری از حالت‌های الکترونی در فرآیند انتقال مشارکت می‌کنند.

برای بررسی امکان کنترل الکتریکی سامانه، ولتاژ گیت تنها به ناحیه مرکزی نانونوار اعمال شد و جریان‌های بار و اسپین در حضور ولتاژ گیت محاسبه شدند.



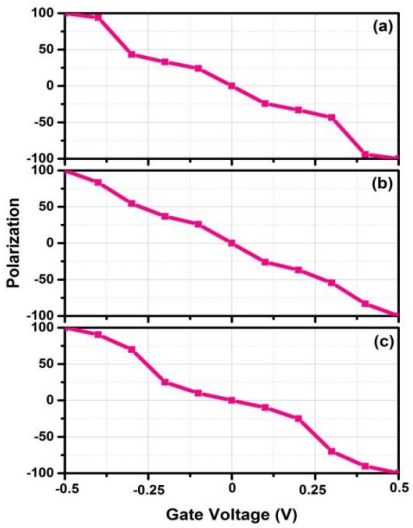
شکل۲: جریان اسپین‌های بالا و پایین بر حسب اختلاف دما برای نانونوارهای استانن با عرض‌های مختلف (a) N=4 (b) N=5 (c) N=6 با فرض دمای مرجع الکترود راست $T_R \approx 0K$.



شکل۳: جریان بار و جریان اسپین بر حسب ولتاژ گیت برای نانونوارهای استانن با عرض‌های مختلف (a) N=4 (b) N=5 (c) N=6

همان‌گونه که در شکل ۳ مشاهده می‌شود، ولتاژ گیت با جابه‌جا کردن سطح فرمی نسبت به طیف انتقال، سهم هر کانال اسپینی را تغییر می‌دهد. در ساختار (N=4) تغییرات شدید و وارونگی علامت جریان اسپینی مشاهده می‌شود که بیانگر حساسیت زیاد سامانه به کنترل الکتریکی است. در نانونوار (N=5) دامنه جریان‌های بار و اسپین بزرگ‌تر بوده و در بازه وسیع‌تری از ولتاژ گیت حفظ می‌شود. این ویژگی نشان‌دهنده قابلیت بالای این ساختار برای تولید جریان‌های اسپینی قابل تنظیم است. در ساختار (N=6)تغییرات نرم‌تر و پایدارتر مشاهده می‌شود.

قطبش اسپینی جریان یکی از مهم‌ترین کمیت‌های مورد استفاده در ادوات اسپینترونیکی است و از اختلاف جریان‌های اسپین بالا و پایین به دست می‌آید.



شکل۴: قطبش اسپینی جریان بر حسب ولتاژ گیت برای نانونوارهای استانن با عرض‌های مختلف (a) N=4 (b) N=5 (c) N=6

مطابق شکل ۴، نانونوار (N=4) در برخی ولتاژها قطبشی نزدیک به ۱۰۰ درصد ایجاد می‌کند که نشان‌دهنده فیلترشدگی تقریباً کامل اسپین است. در نانونوار (N=5) نیز قطبش بالا در بازه وسیعی از ولتاژ گیت حفظ می‌شود و در بسیاری از نقاط از ۸۰ درصد بیشتر است. این ویژگی برای تولید جریان‌های اسپینی پایدار اهمیت زیادی دارد. در ساختار (N=6) مقدار قطبش کمتر اما رفتار آن یکنواخت‌تر و پایدارتر است.

تایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که عرض نانونوار پارامتر بسیار مهمی در طراحی ادوات اسپینترونیکی مبتنی بر استانن است. ساختار (N=4) برای فیلترهای اسپینی و عناصر منطقی اسپینی مناسب است، در حالی که ساختار (N=5) بهترین عملکرد را برای تولید جریان‌های اسپینی حرارتی و کاربردهای برداشت انرژی ارائه می‌دهد. ساختار (N=6) نیز به دلیل پایداری بالا برای ادوات عملی و مقیاس‌پذیر مناسب است.

نتیجه گیری

در این پژوهش خواص اسپین کالریترونیکی نانونوارهای استانن با لبه دسته‌مبلی و عرض‌های مختلف به کمک مدل تنگ بست و روش تابع گرین غیرتعادلی بررسی شد. نتایج نشان داد که عرض نانونوار تأثیر تعیین‌کننده‌ای بر ساختار نواری، تابع انتقال، جریان‌های حرارتی و قطبش اسپینی جریان دارد. نانونوار (N=4) بیشترین فیلترشدگی اسپینی و قطبش را ایجاد می‌کند، در حالی که ساختار (N=5) به دلیل گاف انرژی کوچک‌تر بیشترین جریان‌های بار و اسپین القاشده حرارتی را تولید می‌کند. همچنین ساختار (N=6) رفتار متعادل و پایداری از نظر کنترل‌پذیری و پاسخ اسپینی ارائه می‌دهد. نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که با انتخاب مناسب عرض نانونوار و اعمال ولتاژ گیت می‌توان منابع جریان اسپینی بدون بایاس و ادوات اسپینترونیکی کارآمد مبتنی بر استانن طراحی کرد.

مرجع‌ها

[۱] Guo, L., Hu, S., Gu, X., Zhang, R., Wang, K., Yan, W., & Sun, X. (2024). Emerging spintronic materials and functionalities. *Advanced Materials*, *36*(22), 2301854.

[۲] Uchida, K. I., & Hirai, T. (2026). Spin caloritronics: history and future prospects of experiments. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 174195.

[۳] Lü, X. L., & Xie, H. (2022). Topological edge states and transport properties in zigzag stanene nanoribbons with magnetism. *New Journal of Physics*, *24*(3), 033010.

[۴] Datta, S., "*Electronic transport in mesoscopic systems*". Cambridge university press (1997).

[۵] Fakhrabad, D. V., Shahtahmassebi, N., Askari, M., Ashhadi, M., & Ketabi, S. A. (2010). Tunnel magnetoresistance of the system of ferromagnetic electrode/polyacetylene/ferromagnetic electrode: A Green's function approach. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, *43*(2), 620-624.

القای توپولوژیک حالت‌های لبه‌ای اسپین-قطبی در گرافین دولایه پیچ‌خورده مجاور عایق توپولوژیک مغناطیسی: رهیافتی برای ترابرد اسپینی بدون اتلاف

اسمعیل پور، فاطمه زهرا[1] ؛ مشحون، سارا [1*]

ادانشکده فیزیك دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، خیابان شریعتی، بالاتر از پل سیدخندان، خیابان مجتبایی، خیابان کاویان شرقی، تهران
**mashhoun@kntu.ac.ir*

چکیده

تشکیل ابرشبکه‌های موری در گرافین دولایه پیچ خورده، بستری منحصربه‌فرد برای مهندسی فازهای کوانتومی نوظهور فراهم کرده است. در این مقاله، القای حالت‌های لبه‌ای توپولوژیک با قطبش اسپینی در گرافین دولایه با زاویه جادویی ($\theta \approx 1.05°$) در مجاورت یک عایق توپولوژیک مغناطیسی به‌صورت نظری بررسی می‌شود یا استفاده از مدل همیلتونی مؤثر بیشتریتزر-مک دونالد و رهیافت تنگ‌بست، اثر همزمان میدان تبادلی القایی و جرم توپولوژیک بر ساختار نواری موری مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که جفت‌شدگی مجاورتی موجب شکست همزمان تقارن وارونگی زمانی و تقارن زیرشبکه‌ای شده و در نتیجه یک گاف انرژی توپولوژیک در نقاط دیراک موری باز می‌شود. این فرآیند به ظهور نوارهای مسطح با عدد چرن کوانتیزه ($C = 1$) منجر می‌گردد.شبیه‌سازی‌های ترابرد کوانتومی بر اساس فرمالیسم لاندائر–بوتیکر نشان می‌دهد که حالت‌های لبه‌ای کایرال با قطبش کامل اسپین درون گاف توپولوژیک شکل می‌گیرند که رسانندگی کوانتیده e^2/h و ترابرد بدون اتلاف را ایجاد می‌کنند. همچنین، نمودار فاز توپولوژیک پایداری فاز اثر هال کوانتومی غیرعادی را در بازه وسیعی از زوایای پیچش و شدت میدان تبادلی تأیید می‌کند.این نتایج نشان می‌دهد که ناهمساختار پیشنهادی می‌تواند بستری مناسب برای طراحی ادوات اسپینترونیکی توپولوژیک با مصرف انرژی بسیار پایین و پایداری عملی در دماهای بالاتر باشد..

واژه های کلیدی:
گرافین دولایه پیچ‌خورده، عایق توپولوژیک مغناطیسی، اثر مجاورتی، نوار مسطح موری، اثر هال کوانتومی غیرعادی، ترابرد اسپینی بدون اتلاف.

Topological Induction of Spin-Polarized Edge States in Twisted Bilayer Graphene Adjacent to a Magnetic Topological Insulator: An Approach for Dissipationless Spin Transport

Esmaeilpour, Fatemeh Zahra[1];Mashhoun, Sara[1*]

[1] Department of Physics, K. N. Toosi University of Technology, Tehran
[*] mashhoun@kntu.ac.ir

Abstract

Moiré superlattices in twisted bilayer graphene provide a unique platform for engineering emergent quantum phases. In this work, the induction of spin-polarized topological edge states in magic-angle twisted bilayer graphene ($\theta \approx 1.05°$) in proximity to a magnetic topological insulator is investigated theoretically.Using the effective Bistritzer–MacDonald continuum model and a tight-binding approach, the combined effects of the proximity-induced exchange field and topological mass on the moiré band structure are systematically studied. The results show that proximity coupling simultaneously breaks time-reversal and sublattice symmetries, leading to the opening of a topological energy gap at the moiré Dirac points. This mechanism gives rise to flat bands characterized by a quantized Chern number ($C = 1$).Quantum transport simulations based on the Landauer–Büttiker formalism demonstrate the emergence of chiral, fully spin-polarized edge states within the topological gap, resulting in quantized conductance of (e^2/h) and dissipationless transport. Furthermore, the calculated topological phase diagram confirms the robustness of the quantum anomalous Hall phase over a wide range of twist angles and exchange field strengths.These results indicate that the proposed heterostructure provides a promising platform for designing low-power topological spintronic devices with practical stability at elevated temperatures..

***Keywords**: Twisted bilayer graphene, magnetic topological insulator, proximity effect, moiré flat bands, quantum anomalous Hall effect, dissipationless spin transport.*

PACS No. 73

مقدمه

ابرشبکه‌های موری در ناهم‌ساختارهای واندروالسی، بستری قدرتمند برای مهندسی ساختار نواری و ظهور فازهای کوانتومی نوظهور فراهم کرده‌اند [1]. در میان این سامانه‌ها، گرافین دولایه پیچ خورده در زاویه جادویی (~1.1°) به دلیل تشکیل نوارهای مسطح و تقویت برهمکنش‌های الکترونی، منجر به ظهور فازهای همبسته از جمله ابررسانایی نامتعارف و اثر هال کوانتومی غیرعادی شده است [5,2].ویژگی مهم این ساختارها، حساسیت بالای آن‌ها به اثر مجاورتی با مواد مغناطیسی یا توپولوژیک است که می‌تواند از طریق القای میدان تبادلی و برهمکنش اسپین–مدار مؤثر، به کنترل ساختار نواری و ایجاد گاف‌های توپولوژیک منجر شود[7,6]. در این راستا، ناهم‌ساختارهای مبتنی بر گرافین با مواد مغناطیسی دوبعدی مانند CrI_3 امکان تنظیم فازهای توپولوژیک و کنترل قطبش اسپینی را فراهم کرده‌اند [8]. همچنین، اثر مجاورتی اسپین–مدار در برخی سیستم‌ها منجر به شکل‌گیری نوارهای مسطح با ویژگی‌های توپولوژیک غیرعادی شده است [9].در مقابل، عایق‌های توپولوژیک مغناطیسی مانند Cr-doped $(Bi,Sb)_2Te_3$ به دلیل برخورداری همزمان از نظم مغناطیسی و ساختار باند توپولوژیک، قادرند به‌طور همزمان میدان تبادلی و جرم توپولوژیک را در سامانه مجاور القا کنند [10و12]. این ویژگی منجر به شکستن همزمان تقارن وارونگی زمانی و تقارن زیرشبکه‌ای و در نتیجه باز شدن گاف توپولوژیک در نقاط دیراک می‌شود.در این مقاله، ناهم‌ساختار گرافین دولایه پیچ‌خورده در مجاورت یک عایق توپولوژیک مغناطیسی به‌صورت نظری مورد بررسی قرار گرفته است. نشان داده می‌شود که اثر همزمان میدان تبادلی و جرم توپولوژیک منجر به گذار فاز به حالت هال کوانتومی غیرعادی با عدد چرن کوانتیزه ($C = 1$) می‌شود. همچنین، وجود حالت‌های لبه کایرال با قطبش کامل اسپین و رسانندگی کوانتیده (e^2/h) در چارچوب مدل بیشتریتزر-مک دونالد و فرمالیسم لاندائر-بوتیکر تحلیل شده است. در نهایت، نمودار فاز توپولوژیک پایداری این فاز را در بازه وسیعی از زاویه پیچش و شدت میدان تبادلی تأیید می‌کند.

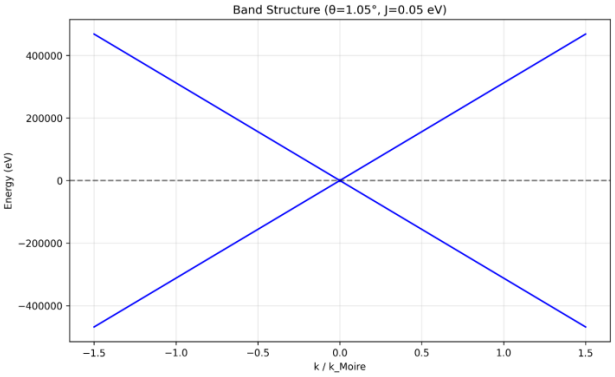
روش تحقیق

مدل نظری مبتنی بر همیلتونی پیوستار بیشتریتزر-مک دونالد برای توصیف گرافین دولایه پیچ خورده با زاویه جادویی است [13]. همیلتونی کل سیستم به صورت ($H = H_{TBG} + V_{prox}$) در نظر گرفته می‌شود که در آن جمله مجاورتی ناشی از عایق توپولوژیک مغناطیسی به شکل ($V_{prox} = J\sigma_z s_z + m_0 \sigma_z$) تعریف می‌شود. در این رابطه، میدان تبادلی (ناشی از شکست تقارن وارونگی زمانی) و جرم توپولوژیک (ناشی از گاف کایرال عایق توپولوژیک مغناطیسی) است. محاسبات عددی در فضای تکانه با شبکه‌بندی ($N\times N$) از ناحیه اول بریلوئن موری انجام شد. عدد چرن برای تشخیص فاز توپولوژیک با الگوریتم فاکویی-هاتسوگای-سوزوکی محاسبه گردید [4]. شبیه‌سازی ترابرد کوانتومی برای تحلیل حالت‌های لبه و رسانندگی با روش لاندائر-بوتیکر و بسته نرم‌افزاری Kwant انجام شد [3]. شرایط مرزی دوره‌ای برای محاسبات توده‌ای و شرایط مرزی باز برای محاسبات لبه اعمال گردید. پارامترهای اصلی شامل سرعت فرمی ($v_F = 10^6$ m/s) و انرژی‌های پرش (w_0=75 meV) و (w_1=110 meV) می‌باشند.

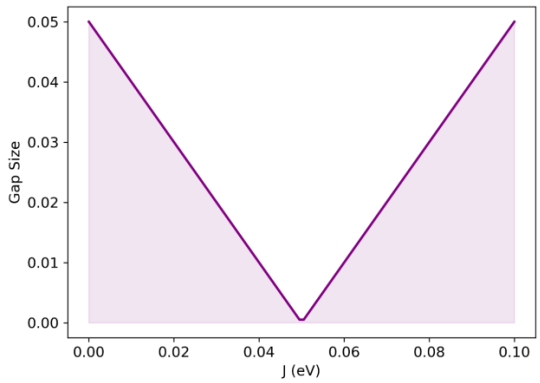
نتایج و بحث

ساختار نواری و گاف توپولوژیک

در زاویه جادویی ($\theta \approx 1.05°$) و در غیاب اثر مجاورتی، نوارهای مسطح موری با پهنای انرژی بسیار کم مطابق مدل بیشتریتزر-مک دونالد ظاهر می‌شوند [13]. این نوارهای مسطح ناشی از تداخل کوانتومی بین لایه‌ها و کوپلینگ موری هستند که موجب کاهش شدید سرعت گروهی الکترون‌ها می‌شود.با اعمال همزمان میدان تبادلی و جرم توپولوژیک ناشی از لایه عایق مغناطیسی توپولوژیک، تقارن‌های وارونگی زمانی و زیرشبکه‌ای شکسته می‌شوند. این شکست تقارن‌ها موجب باز شدن یک گاف انرژی توپولوژیک در نقاط دیراک موری می‌شود (شکل 2). از دید فیزیکی، این گاف ناشی از ایجاد کوپلینگ موثر بین اسپین و زیرشبکه است که موجب جداسازی باندها با توپولوژی متفاوت می‌شود.در نتیجه، نوار مسطح از نظر توپولوژیک از سایر باندها جدا شده و سیستم وارد فاز هال کوانتومی غیرعادی با عدد چرن غیرصفر می‌شود.



شکل 1: ساختار نواری الکترونی در رژیم زاویه جادویی

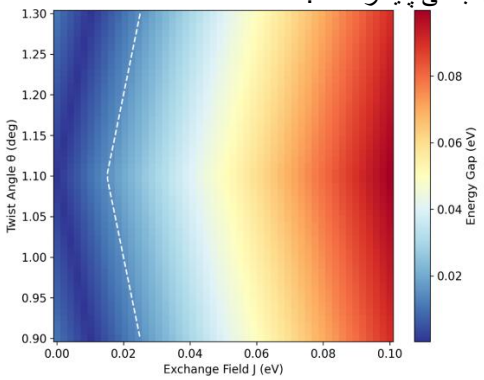


شکل 2 : بسته شدن و باز شدن مجدد گاف انرژی (گذار فاز)

گذار فاز و عدد چرن

نمودار فاز در فضای (J, θ) (شکل 1) گذار از عایق معمولی به فاز اثر هال کوانتومی غیرعادی را نشان می‌دهد. عدد چرن با الگوریتم فاکویی-هاتسوگای-سوزوکی برای نوارهای اشغال‌شده محاسبه شد و در رژیم بهینه مقدار $(C = 1)$ به دست آمد. این مقدار غیرصفر نشان‌دهنده فاز توپولوژیک نابدیهی است.

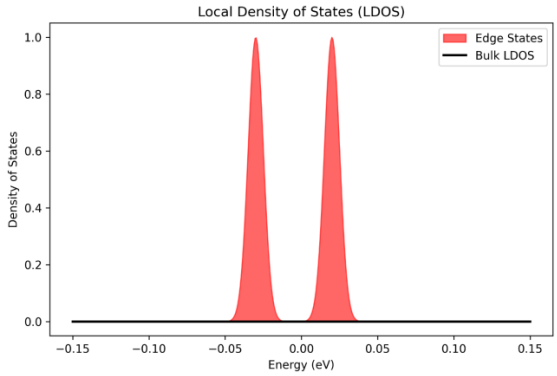
منشأ این توپولوژی به بازتوزیع خمیدگی بری در ناحیه اول بریلوئن موری مربوط است که در اثر شکست تقارن‌ها ایجاد می‌شود. در نتیجه، فاز اثر هال کوانتومی غیرعادی در بازه وسیعی از زاویه پیچش و میدان تبادلی پایدار باقی می‌ماند اثر هال کوانتومی غیرعادی در بازه وسیعی از زوایای پیچش و میدان تبادلی پایدار است.



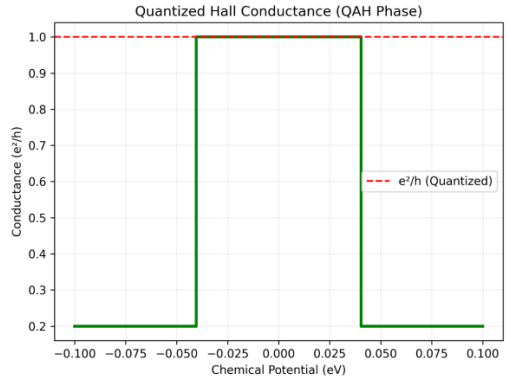
شکل 3 : نمودار فاز توپولوژیک

حالت‌های لبه اسپین‌قطبی و ترابرد بدون اتلاف

حالت‌های لبه کایرال با قطبش اسپینی کامل (تنها برای اسپین بالا) درون گاف توپولوژیک ظاهر می‌شوند (شکل‌های 2 و 4). شبیه‌سازی ترابرد به روش لاندائر-بوتیکر رسانندگی کوانتیده (e^2/h) را نشان می‌دهد (شکل3). این رفتار حاکی از مصونیت کانال‌های لبه در برابر بازپراکندگی ناشی از نقص‌ها و ناخالصی‌های غیرمغناطیسی است. وجود گاف بزرگ، پایداری این ترابرد اسپینی بدون اتلاف را در دماهای تجربی قابل دسترس نوید می‌دهد.



شکل 4 : چگالی حالات توده‌ای و حالت‌های لبه‌ای در ناهم ساختار در گرافین دولایه پیچ‌خورده/ عایق توپولوژیک مغناطیسی



شکل 5 :رسانندگی کوانتیزه و اثبات ترابرد توپولوژیک

جدول 1 : مقایسه تطبیقی ویژگی‌های توپولوژیک و ترابردی ناهم‌ساختار پیشنهادی با سایر سیستم‌های استاندارد بر پایه گرافین

سیستم ناهم‌ساختار	عامل القایی	گاف انرژی (تخمینی)	دمای کاری احتمالی	ترابرد اسپینی
Graphene/h-BN	پتانسیل موری	بسیار کوچک	بسیار پایین ($K > 4$)	ندارد
MATBG (بدون زیرلایه)	برهمکنش‌های همبسته	کوچک	پایین	ضعیف
MATBG/CrI3	میدان تبادلی	متوسط	متوسط	قطبش جزئی
MATBG/MTI (این کار)	تبادلی + جرم توپولوژیک	بزرگ (توسط MTI)	بالا (قابل توجه)	تک‌اسپین (بدون اتلاف)

نتیجه گیری

در این پژوهش، ما با استفاده از مدل‌سازی عددی وهمیلتونی موثر موری، القای فازهای توپولوژیک نابدیهی را در ناهم‌ساختار گرافین دولایه پیچ خورده مجاور عایق توپولوژیک مغناطیسی مورد مطالعه قرار دادیم. یافته‌های اصلی این تحقیق به شرح زیر خلاصه می‌شوند:1. مهندسی نوارهای مسطح: نشان داده شد که در رژیم زاویه جادویی، اندرکنش‌های مجاورتی ناشی از عایق توپولوژیک مغناطیسی منجر به شکست تقارن وارونگی زمانی و زیرشبکه‌ای شده و باعث باز شدن

یک گاف انرژی توپولوژیک در نقاط دیراک موری می‌گردد. این پدیده امکان جداسازی و بهره‌برداری از نوارهای مسطح توپولوژیک را فراهم می‌آورد.2. پایداری فاز اثر هال کوانتومی غیرعادی: بر اساس محاسبات عدد چرن (C=1)، ثابت شد که این ناهم‌ساختار میزبان فاز عایق هال کوانتومی غیرعادی است. ترسیم نمودار فاز توپولوژیک نشان داد که این فاز در بازه وسیعی از میدان‌های تبادلی و زوایای پیچش پایدار است که صلبیت سیستم را در برابر عدم‌قطعیت‌های آزمایشگاهی تأیید می‌کند.3. ترابرد اسپینی بدون اتلاف: شبیه‌سازی‌های ترابرد کوانتومی ظهور حالت‌های لبه‌ای کایرال با قطبش اسپینی کامل را اثبات کرد. رسانندگی کوانتیده در مقدار(e^2/h) نشان‌دهنده ترابرد الکترون بدون اتلاف انرژی و مصونیت در برابر بازپراکندگی است.نتایج این مطالعه بینش جدیدی برای طراحی دستگاه‌های اسپینترونیک نسل جدید ارائه می‌دهد. وجود گاف انرژی القایی بزرگ در این سیستم، پتانسیل بالایی را برای تحقق اثر هال کوانتومی در دماهای بالاتر نسبت به سیستم‌های مشابه فراهم می‌کند. از نگاه آینده، بررسی اثرات همبستگی قوی الکترون-الکترون و همچنین اثر پتانسیل گیت عمودی بر روی غنی‌سازی فازهای توپولوژیک در این ناهم‌ساختار، مسیرهای جذابی برای تحقیقات آتی خواهد بود.

.سپاسگزاری:

ف.ز.اسمعیل پور از همکاري آقاي دکتر فرشاد اجاقی صمیمانه تشکر مي‌کند. اینکار با پشتیباني معنوی ایشان انجام شد.

مرجع‌ها

[1] T. Li, D. Zhang, and Q. Xue, “Twisted bilayer systems: A versatile platform for exploring emergent quantum phenomena,” *National Science Review*, **vol. 13**, no. 4, nwaf057, 2026. https://doi.org/10.1093/nsr/nwaf057

[2] Park, J. M. (2023). Correlated insulating states and superconductivity in twisted bilayer graphene: A brief review. *Chinese Physics B*, 32(2), 027401.

[3] Groth, C. W., Wimmer, M., Akhmerov, A. R., & Waintal, X. (2014). Kwant: A software package for quantum transport. *New Journal of Physics*, 16(6), 063065. https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/6/063065

[4] T. Fukui, Y. Hatsugai, and H. Suzuki, “Chern numbers in discretized Brillouin zone: Efficient method of computing (spin) Hall conductances,” *Journal of the Physical Society of Japan*, **vol. 74**, no. 6, pp. 1674–1677, 2005. https://doi.org/10.1143/JPSJ.74.1674

[5] Li, Q., Zhang, H., Wang, Y., Chen, W., Bao, C., Liu, Q., ... Zhang, S. (2024). Evolution of flat band and role of lattice relaxations in twisted bilayer graphene. *Nature Communications*, 15, 10552.

[6] M. Jafari, M. Gmitra, and A. Dyrdał, “Exchange and spin–orbit proximity-driven topological and transport phenomena in twisted graphene/CrI_3 heterostructures,” arXiv preprint.(2025) https://arxiv.org/abs/2509.11670.

[7] M. Y. Kagan, M. M. Korovushkin, and V. Mitskan, “Anomalous superconductivity and unusual normal state properties of bilayer and twisted graphene *(Brief review)*,” JETP Letters, **vol. 121**, pp. 709–718, 2025.

[8] Jafari, M., Gmitra, M., & Dyrdał, A. (2026). Exchange and spin–orbit proximity-driven topological and transport phenomena in twisted graphene/CrI_3 heterostructures. *2D Materials*, 13(2), 025008. https://doi.org/10.1088/2053-1583/ae44ab

[9] Tan, Y., & Das Sarma, S. (2024). Exceptional magic angles in non-Hermitian twisted bilayer graphene. arXiv preprint, *arXiv*:2406.18644

[10] Chaudhary, G., Burkov, A., & Heinonen, O. (2022). Twisted bilayers of thin film magnetic topological insulators. *Physical Review Research*, 4(4), 043034. https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.4.043034

[11] Bistritzer, R., & MacDonald, A. H. (2011). Moiré bands in twisted double-layer graphene. *Proceedings of the National Academy of Sciences*,108(30),12233–12237. https://doi.org/10.1073/pnas.1108174108

بررسی تحلیلی تانسور هندسی کوانتومی و توپولوژی خاص در سامانه‌های دیراک غیرهرمیتی راشبا–درسلهاوس

عبداللهی، ریحانه [۱]؛ زارع، محمد حسین [۲]؛ مصدق، حمید [۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

[۲] دانشکده فیزیک ، دانشگاه صنعتی قم ، قم

چکیده

در این مقاله، خواص هندسی و توپولوژیکی یک سامانه دیراک دونواری غیرهرمیتی با برهم‌کنش اسپین–مدار تعمیم‌یافته مورد بررسی قرار گرفته است. مدل مورد مطالعه شامل برهم‌کنش‌های راشبا و درسلهاوس به همراه یک جمله جرم مختلط است که اثرات غیرهرمیتی و اتلاف را در سامانه توصیف می‌کند. با استفاده از چارچوب هندسه کوانتومی غیرهرمیتی، روابط تحلیلی برای متریک کوانتومی، انحنای بری، حجم کوانتومی و عدد چرن استخراج شده و وابستگی این کمیت‌ها به پارامترهای برهم‌کنش اسپین–مدار، جرم و پارامتر غیرهرمیتی بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که حضور جمله غیرهرمیتی موجب ایجاد رفتار مختلط در کمیت‌های هندسی و تغییر ویژگی‌های توپولوژیکی سامانه می‌شود. همچنین، حجم کوانتومی و عدد چرن حساسیت قابل توجهی به تغییر پارامترهای مدل و نواحی بحران سامانه نشان می‌دهند و می‌توانند به‌عنوان شاخص‌های مناسبی برای شناسایی گذارهای هندسی و توپولوژیکی در سامانه‌های غیرهرمیتی مورد استفاده قرار گیرند. نتایج این پژوهش درک عمیق‌تری از ارتباط میان هندسه کوانتومی، توپولوژی و غیرهرمیتی بودن ارائه می‌دهد و می‌تواند در طراحی و تحلیل سامانه‌های اسپینترونیکی و فوتونیکی غیرهرمیتی مفید باشد.

واژه‌های کلیدی: *هندسه کوانتومی، انحنای بری، متریک کوانتومی،عدد چرن مختلط، سامانه دیراک، راشبا–درسلهاوس.*

Analytical Approach to the Quantum Geometric Tensor and Exceptional Topology in Non-Hermitian Rashba-Dresselhaus Dirac Systems

Abdollahi, Reyhaneh[1]; Zare , Mohammad Hossein[2]; Mosadegh, Hamid [1]

[1] Department of Physics, Faculty of Science, University of Shahrkord, Shahrkord

[2] Department of Physics, Qom University of Technology, Qom.

Abstract

In this paper, the geometric and topological properties of a non-Hermitian two-band Dirac system with generalized spin–orbit coupling are investigated. The proposed model incorporates Rashba and Dresselhaus spin–orbit interactions together with a complex mass term, which accounts for non-Hermitian effects and dissipation in the system. Within the framework of non-Hermitian quantum geometry, analytical expressions for the quantum metric, Berry curvature, quantum volume, and Chern number are derived, and their dependence on the spin–orbit coupling parameters, mass, and non-Hermitian parameter is systematically analyzed. The results demonstrate that the non-Hermitian term induces complex geometric quantities and significantly modifies the topological characteristics of the system. Furthermore, the quantum volume and Chern number exhibit remarkable sensitivity to variations in the model parameters and critical regions, indicating that they can serve as effective geometric and topological indicators for characterizing non-Hermitian phase transitions. These findings provide deeper insight into the interplay between quantum geometry, topology, and non-Hermiticity, and may offer useful guidance for the design and analysis of non-Hermitian spintronic and photonic systems.

Keywords*: Quantum Geometry, Berry Curvature, Quantum Metric, Complex Chern Number, Dirac system, Rashba-Dresselhaus.*

PACS No:70

مقدمه

در سال‌های اخیر، سامانه‌های غیرهرمیتی به یکی از فعال‌ترین حوزه‌های پژوهشی در فیزیک ماده چگال، اپتیک کوانتومی و سامانه‌های باز کوانتومی تبدیل شده‌اند. برخلاف سامانه‌های هرمیتی که طیف انرژی آن‌ها حقیقی بوده و تحول زمانی در آن‌ها یکانی است، سامانه‌های غیرهرمیتی امکان توصیف اثرات ناشی از اتلاف، بهره و برهم‌کنش با محیط را فراهم می‌کنند. همین ویژگی سبب ظهور پدیده‌های جدیدی نظیر نقاط استثنایی، پوستهٔ غیرهرمیتی، گذارهای فاز توپولوژیکی و رفتارهای دینامیکی غیرمتعارف شده است؛ پدیده‌هایی که در چارچوب هامیلتونی‌های هرمیتی قابل توصیف نیستند[۳-۱]. از سوی دیگر، برهم‌کنش اسپین–مدار یکی از مهم‌ترین سازوکارهای حاکم بر خواص الکترونی و توپولوژیکی سامانه‌های دوبعدی محسوب می‌شود و نقش تعیین‌کننده‌ای در پدیده‌هایی نظیر اثر هال کوانتومی اسپین، انتقال اسپینی و طراحی ادوات اسپینترونیکی دارد. دو برهم‌کنش شناخته‌شده راشبا و درسلهاوس، که به‌ترتیب از شکست تقارن وارونگی ساختاری و ناهمسانگردی بلوری ناشی می‌شوند، امکان کنترل مؤثر درجه آزادی اسپینی را فراهم می‌کنند. ترکیب این برهم‌کنش‌ها با جمله‌های غیرهرمیتی، افق جدیدی برای مطالعه ساختار نواری، خواص توپولوژیکی و هندسه کوانتومی در سامانه‌های باز ایجاد کرده است؛ به‌ویژه آن که حضور اتلاف یا بهره می‌تواند به ظهور نقاط استثنایی و گذارهای توپولوژیکی جدید منجر شود[٤].

در این مقاله، یک مدل دیراک دونواری غیرهرمیتی شامل برهم‌کنش‌های اسپین–مدار راشبا و درسلهاوس در حضور یک جمله جرم مختلط $(m + i\gamma)$ مورد بررسی قرار می‌گیرد. با استفاده از چارچوب هندسه کوانتومی در سامانه‌های غیرهرمیتی، روابط تحلیلی دقیقی برای تانسور هندسی کوانتومی، متریک کوانتومی، انحنای بری، حجم کوانتومی و عدد چرن مختلط استخراج می‌شود. سپس اثر هم‌زمان برهم‌کنش‌های اسپین–مدار و پارامتر غیرهرمیتی بر رفتار این کمیت‌ها تحلیل شده و نقش نقاط استثنایی در واگرایی کمیت‌های هندسی و گذارهای فاز توپولوژیکی مورد بررسی قرار می‌گیرد. این مطالعه تصویری تحلیلی از ارتباط میان هندسه کوانتومی و توپولوژی در سامانه‌های دیراک غیرهرمیتی ارائه می‌دهد و می‌تواند مبنایی برای طراحی سامانه‌های اسپینترونیکی و فوتونیکی مبتنی بر اتلاف کنترل‌پذیر باشد.

با وجود پیشرفت‌های قابل توجه در مطالعه توپولوژی و هندسه کوانتومی در سامانه‌های غیرهرمیتی، اغلب پژوهش‌های موجود بر مدل‌های ساده دونواری یا برهم‌کنش‌های اسپین–مدار منفرد متمرکز بوده‌اند. در مقابل، بررسی تحلیلی هم‌زمان اثر برهم‌کنش‌های راشبا و درسلهاوس بر تانسور هندسی کوانتومی و کمیت‌های توپولوژیکی در حضور جرم مختلط، کمتر مورد توجه قرار گرفته است. این خلأ، انگیزه اصلی پژوهش حاضر را تشکیل می‌دهد.

در این مقاله، یک سامانه دیراک دونواری غیرهرمیتی با برهم‌کنش اسپین–مدار تعمیم‌یافته مورد مطالعه قرار می‌گیرد. این مدل از سه مؤلفه اصلی تشکیل شده است: جمله راشبا که ناشی از شکست تقارن وارونگی ساختاری است، جمله درسلهاوس که ناهمسانگردی برهم‌کنش اسپین–مدار را توصیف می‌کند، و جمله جرم مختلط که از یک بخش حقیقی و یک بخش موهومی تشکیل شده و اثرات غیرهرمیتی ناشی از اتلاف را مدل‌سازی می‌کند. هدف این پژوهش، استخراج و تحلیل کمیت‌های هندسی کوانتومی و توپولوژیکی این سیستم و بررسی تأثیر پارامترهای مختلف بر رفتار آن‌ها است.

در ادامه، ابتدا مدل غیرهرمیتی و چارچوب نظری مورد استفاده معرفی می‌شود. سپس کمیت‌های هندسی و توپولوژیکی شامل اتصال و انحنای بری، متریک کوانتومی، حجم کوانتومی و عدد چرن به‌صورت تحلیلی استخراج و رفتار آن‌ها در رژیم‌های مختلف بررسی می‌شود. در نهایت، نقش نقاط استثنایی در گذارهای فاز توپولوژیکی و کاربردهای بالقوه نتایج مورد بحث قرار می‌گیرد.

روش محاسباتی

برای بررسی اثر هم‌زمان برهم‌کنش‌های اسپین–مدار و غیرهرمیتی بودن سامانه بر خواص هندسی و توپولوژیکی، یک هامیلتونی مؤثر دیراک دونواری در فضای تکانه در نظر گرفته می‌شود. این هامیلتونی علاوه بر برهم‌کنش‌های راشبا و درسلهاوس، شامل یک جمله جرم مختلط است که اثر اتلاف را در چارچوب یک مدل غیرهرمیتی مؤثر توصیف می‌کند. این مدل امکان مطالعه تحلیلی تانسور هندسی کوانتومی و کمیت‌های توپولوژیکی را فراهم می‌آورد.

$$H(K) = \alpha(K \times \sigma)_z + \beta(k_x\sigma_x - k_y\sigma_y) + (m + i\gamma)\sigma_z \quad (۱)$$

در رابطه (۱)، α و β به‌ترتیب شدت برهم‌کنش‌های اسپین–مدار راشبا و درسلهاوس را نشان می‌دهند. پارامتر m جرم مؤثر سامانه و γ پارامتر غیرهرمیتی متناظر با اتلاف است. در حالت $\gamma=0$، هامیلتونی به مدل هرمیتی معمول کاهش می‌یابد. صورت کلی هامیلتونی به شرح زیر است.

$$H(\mathbf{k}) = h_0(\mathbf{k}) + \sigma.\boldsymbol{h}(\mathbf{k}) \quad (۲)$$

که در آن

$$h_0(\mathbf{k}) = h_{0Re}(\boldsymbol{k}) + ih_{0Im}(\mathbf{k}) \quad (۳)$$

$$\boldsymbol{h}(\mathbf{k}) = \boldsymbol{h}_{Re}(\boldsymbol{k}) + i\boldsymbol{h}_{Im}(\mathbf{k}) \quad (۴)$$

$h_0(\mathbf{k})$ و $\boldsymbol{h}(\mathbf{k})$ توابع مختلط ، شامل قسمت های موهومی و حقیقی هستند. انرژی سامانه به صورت زیر داده می شود.

$$\varepsilon_\pm = h_0(\mathbf{k}) \pm \sqrt{\boldsymbol{h}^2(\boldsymbol{k})} \quad (۵)$$

که در آن

$$\boldsymbol{h}^2(\boldsymbol{k}) = h_x^2(\boldsymbol{k}) + h_y^2(\boldsymbol{k}) + h_z^2(\boldsymbol{k}) \quad (۶)$$

$n(\mathrm{k})$ بردار بهنجار به صورت زیرتعریف می شود.

$$n(\mathrm{k}) \equiv \frac{\boldsymbol{h}(\boldsymbol{k})}{\sqrt{\boldsymbol{h}^2(k)}} \quad (۷)$$

باید توجه کنیم که در سامانه غیرهرمیتی $\sqrt{h^2(k)} \neq |h(K)|$ است.

از حل معادله ویژه‌مقدار برای هامیلتونی غیرهرمیتی، دو شاخه انرژی متناظر با نوارهای رسانش و ظرفیت به دست می‌آید. از آنجا که هامیلتونی غیرهرمیتی است، ویژه‌بردارهای راست و چپ مستقل از یکدیگر بوده و هر دو برای تعریف کمیت‌های هندسی مورد نیاز هستند.

ویژه توابع راست و چپ به‌صورت زیر است.

$$\left|\psi_\pm^R\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_\pm(\varepsilon_\pm - h_z)}}(h_x - ih_y, \varepsilon_\pm - h_z)^T \quad (۸)$$

$$\left|\psi_\pm^L\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_\pm(\varepsilon_\pm - h_z)}}(h_x + ih_y, \varepsilon_\pm - h_z) \quad (۹)$$

ویژه‌بردارهای راست و چپ به گونه‌ای نرمال‌سازی شده‌اند که شرط دومتعامدی $\langle\psi_\pm^L|\psi_\pm^R\rangle = 1$ برقرار باشد.

کمیت‌های هندسی

با در اختیار داشتن ویژه‌بردارهای چپ و راست، کمیت‌های هندسی در چارچوب فضای دومتعامدی تعریف می‌شوند. نخست اتصال بری غیرهرمیتی مطابق رابطه زیر معرفی می‌شود[۵].

$$a_{nm}^\mu = -i\left\langle\psi_n^L\middle|\partial_{k_\mu}\middle|\psi_m^R\right\rangle \quad (۱۰)$$

با استفاده از مشتق‌گیری نسبت به مؤلفه‌های تکانه و اعمال تعریف اتصال بری، مؤلفه‌های انحنای بری به‌صورت تحلیلی محاسبه شدند[۶].

$$a_\pm^\mu = \frac{h_x\partial_{k_\mu}h_y - h_y\partial_{k_\mu}h_x}{\varepsilon_\pm(\varepsilon_\pm - h_z)} \quad (۱۱)$$

بنابراین نتیجه نهایی به صورت زیر است.

$$a_\pm^x = \frac{(\beta^2-\alpha^2)k_y}{\varepsilon_\pm(\varepsilon_\pm - h_z)} \quad (۱۲)$$

$$a_\pm^y = \frac{(\alpha^2-\beta^2)k_x}{\varepsilon_\pm(\varepsilon_\pm - h_z)} \quad (۱۳)$$

برای یک سامانه غیرهرمیتی، انحنای بری به‌صورت زیر تعریف می‌شود[۷].

$$\Omega_\pm = \nabla \times a_\pm(K) = \frac{1}{2\varepsilon_\pm^3}\in_{\mu\nu\rho} h_\mu\partial_{k_x}h_\nu\partial_{k_y}h_\rho \quad (۱۴)$$

$\in_{\mu\nu\rho}$ نماد لویی‌چیویتا است و برای یک سامانه دونواری می توان به شکل زیرساده‌سازی کرد[۸].

$$\Omega_\pm^{xy} = \mp\frac{1}{2}n.\left(\partial_{k_x}n \times \partial_{k_y}n\right) \quad (۱۵)$$

برای این سامانه به صورت زیر به‌دست می آید

$$\Omega_\pm^{xy} = \pm\frac{(m+i\gamma)(\alpha^2-\beta^2)}{2[Pk^2 - Mk_xk_y + (m+i\gamma)^2]^{3/2}} \quad (۱۶)$$

که در آن

$$P = \alpha^2 + \beta^2 \ , \ M = 4\alpha\beta \quad (۱۷)$$

از آنجا که تانسور هندسی کوانتومی شامل بخش موهومی (انحنای بری) و بخش حقیقی (متریک کوانتومی) است، پس از محاسبه انحنای بری، متریک کوانتومی سامانه نیز به‌صورت زیر به دست می‌آید[۹].

$$g_\pm^{\mu\nu} = \pm\frac{1}{2}\left(\partial_{k_\mu}n\right).\left(\partial_{k_\nu}n\right) \quad (۱۸)$$

بنابراین نتایج به شکل زیر حاصل می‌شود.

$$g_\pm^{xx} = \pm\frac{PD - (Pk_x - \frac{M}{2}k_y)^2}{2D^2} \quad (۱۹)$$

$$g_\pm^{yy} = \pm\frac{PD - (Pk_y - \frac{M}{2}k_x)^2}{2D^2} \quad (۲۰)$$

$$g_\pm^{xy} = \pm\frac{-\frac{M}{2}D - (Pk_x - \frac{M}{2}k_y)(Pk_y - \frac{M}{2}k_x)}{2D^2} \quad (۲۱)$$

که در آن

$$D = Pk^2 - Mk_xk_y + (m+i\gamma)^2 \quad (۲۲)$$

با استفاده از دترمینان متریک کوانتومی، حجم کوانتومی روی منطقه بریلوئن از رابطه زیر به‌دست می‌آید[۱۰].

$$\int_{BZ} d^2k\sqrt{detg^{\mu\nu}(K)} = \frac{\pi(\alpha^2-\beta^2)}{8(m+i\gamma)^2} \quad (۲۳)$$

نشان می‌دهد که حجم کوانتومی درسامانه غیرهرمیتی یک کمیت مختلط است و مقدار آن به پارامترهای جرم مختلط و برهم‌کنش‌های اسپین–مدار وابسته است. این کمیت با افزایش $|m+i\gamma|$ کاهش می‌یابد و در حالت $\alpha=\beta$ به صفر می‌رسد. همچنین، در نزدیکی نقاط استثنایی (D=0)، به دلیل واگرایی متریک کوانتومی، حجم کوانتومی نیز افزایش چشمگیری یافته و رفتار بحرانی از خود نشان می‌دهد. این نتایج نشان می‌دهد که حجم کوانتومی شاخص مناسبی برای آشکارسازی تغییرات هندسی و گذارهای غیرهرمیتی در این سامانه است. عدد چرن این سامانه به‌صورت زیر است.

$$C = \pm\frac{\alpha^2-\beta^2}{2(\alpha^2+\beta^2)}\cdot\frac{m+i\gamma}{|m+i\gamma|} \quad (۲٤)$$

رابطه (۲٤) نشان می‌دهد که عدد چرن در سامانه غیرهرمیتی مورد بررسی، علاوه بر وابستگی به برهم‌کنش‌های اسپین–مدار، تحت تأثیر پارامتر غیرهرمیتی نیز قرار دارد. در حد هرمیتی $(\gamma=0)$ ، این کمیت به مقدار متناظر در سامانه هرمیتی کاهش می‌یابد، در حالی که افزایش پارامتر غیرهرمیتی موجب تغییر رفتار توپولوژیکی سامانه می‌شود. همچنین، در نزدیکی نقاط استثنایی که شکاف انرژی بسته شده و ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارها همگرا می‌شوند، تغییرات شدید انحنای بری می‌تواند منجر به تغییر عدد چرن و وقوع گذارهای فاز توپولوژیکی شود. بنابراین، عدد چرن در این مدل شاخص مناسبی برای بررسی ارتباط میان توپولوژی و اثرات غیرهرمیتی بوده و نقش مهمی در شناسایی گذارهای توپولوژیکی ناشی از اتلاف ایفا می‌کند.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، یک مدل دیراک دونواری غیرهرمیتی شامل برهم‌کنش‌های اسپین_مدار راشبا و درسلهاوس در حضور جرم مختلط مورد بررسی قرار گرفت. با استفاده از چارچوب هندسه کوانتومی غیرهرمیتی، روابط تحلیلی کمیت‌های هندسی و توپولوژیکی شامل اتصال بری، انحنای بری، متریک کوانتومی، حجم کوانتومی و عدد چرن استخراج شدند. نتایج نشان دادند که حضور جمله غیرهرمیتی، ساختار هندسی فضای حالت را به طور قابل توجهی تغییر داده و موجب مختلط شدن کمیت‌های هندسی و توپولوژیکی می‌شود. تحلیل متریک کوانتومی و حجم کوانتومی نشان داد که این کمیت‌ها به شدت به پارامترهای اسپین–مدار و جمله جرم مختلط وابسته هستند و در نزدیکی نقاط استثنایی رفتار بحرانی از خود نشان می‌دهند. همچنین مشاهده شد که نقاط استثنایی نقش مهمی در تقویت پاسخ هندسی سیستم ایفا کرده و می‌توانند به عنوان منشأ گذارهای غیرهرمیتی در نظر گرفته شوند. از سوی دیگر، بررسی عدد چرن نشان داد که اثرات غیرهرمیتی قادرند ویژگی‌های توپولوژیکی سامانه را تغییر داده و شرایط لازم برای وقوع گذارهای فاز توپولوژیکی را فراهم کنند. به طور کلی، نتایج این مطالعه بیانگر ارتباط عمیق میان هندسه کوانتومی، توپولوژی و غیرهرمیتی بودن در سامانه‌های دیراک دونواریی است. چارچوب ارائه‌شده می‌تواند در مطالعه سامانه‌های اسپینترونیکی، فوتونیکی و مواد کوانتومی باز مورد استفاده قرار گیرد و دیدگاه مناسبی برای بررسی اثرات اتلاف و نقاط استثنایی بر خواص هندسی و توپولوژیکی این سامانه‌ها فراهم سازد.

مرجع‌ها

[1] E. J. Bergholtz, J. C. Budich, and F. K. Kunst, *"Exceptional topology of non-Hermitian systems", Rev. Mod. Phys.* **93**, 015005 (2021).
[2] Y.-M. R. Hu, E. A. Ostrovskaya, and E. Estrecho, *"Quantum geometric tensor and wavepacket dynamics in two-dimensional non-Hermitian systems"*, *Phys. Rev. Research* **7**, L012067 (2025).
[3] Y.-M. Robin Hu, Elena A. Ostrovskaya, and Eliezer Estrecho, *Generalized quantum geometric tensor in a non-Hermitian exciton-polariton system*, *Optical Materials Express* **14**, 664 (2024).
[4] K. Zhang et al., *"Spin-momentum locking in locally noncentrosymmetric quantum materials", Rep. Prog. Phys.* **88**, 10 (2025).
[5] Frank Wilczek and A. Zee, *Appearance of Gauge Structure in Simple Dynamical Systems*, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 2111 (1984).
[6] H. Jiang, C. Yang and S. Chen, *Topological invariants and phase diagrams for one-dimensional two-band non-Hermitian systems without chiral symmetry*, *Phys. Rev. A* **98**, 052116 (2018).
[7] M. Ezawa, *Electric circuits for non-Hermitian Chern insulators*, *Phys. Rev. B* **100**, 081401(R) (2019).
[8] Doru Sticlet, Frederic Piechon, Jean-Noel Fuchs, Pavel Kalugin, and Pascal Simon, *Geometrical engineering of a two-band Chern insulator in two dimensions with arbitrary topological index*, *Phys. Rev. B* **85**, 165456 (2012).
[9] M. Ezawa, *Analytic approach to quantum metric and optical conductivity in Dirac models with parabolic mass in arbitrary dimensions*, *Phys. Rev. B* **110**, 195437 (2024).
[10] M. Ezawa, *Quantum geometry and X-wave magnets with X = p, d, f, g, I*, *Appl. Phys. Express* **19** 030101 (2026).

بررسی اثر جهت‌مندی میدان مغناطیسی بر متریک کوانتومی و خمیدگی بری در سیستم‌های راشبا

سعادت‌جو، طاهره[۱]؛ زارع، محمدحسین[۲]؛ مصدق، حمید[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی قم ، قم

چکیده

در این پژوهش، پاسخ هندسه کوانتومی یک سیستم دوبعدی راشبا در حضور میدان زیمان درون‌صفحه‌ای (راستای x) بررسی و با پیکربندی عمود بر صفحه (راستای z) مقایسه شده است. نتایج نشان می‌دهد اعمال میدان درون‌صفحه‌ای با جابه‌جایی مرکز بافت اسپینی در فضای تکانه، تقارن دورانی را شکسته و به ظهور مؤلفه‌های ناهمسانگرد در متریک کوانتومی می‌انجامد. یافته محوری این کار نشان می‌دهد که در میدان درون‌صفحه‌ای، علی‌رغم صفر شدن خمیدگی بری، تکانه‌های غیرصفرِ متریک کوانتومی در رژیم دینامیکی سبب ایجاد جریان الکتریکی ژیروتروپیک درون‌صفحه‌ای می‌شوند. این سیستم به عنوان یک فیلتر هندسی، پاسخ‌های دینامیکی غیرهم‌فاز را صرفاً به کانال‌های برون‌صفحه‌ای هدایت می‌کند که برای طراحی افزونه‌های اسپینترونیکی حساس به جهت میدان کاربرد دارد .

واژه‌های کلیدی: *برهم‌کنش راشبا، هندسه کوانتومی، میدان زیمان، متریک کوانتومی، خمیدگی بری، جریان ژیروتروپیک .*

Investigation of Magnetic Field Orientation Effects on Quantum Metric and Berry Curvature in Rashba Systems

Saadatjoo, Tahere [1]; Zare, Mohammad-Hossein[2]; Mosadegh, Hamid [1]

[1] Department of Physics, Faculty of Science, Shahrekord University, Shahrekord, Iran
[2] Department of Physics, Qom University of Technology, Qom, Iran.

Abstract

We investigate the quantum geometry of a 2D Rashba system under an in-plane Zeeman field (x-axis) versus an out-of-plane configuration (z-axis). The in-plane field breaks rotational symmetry by shifting the spin-texture center in momentum space, inducing anisotropy in the quantum metric. Crucially, despite a vanishing Berry curvature, non-zero quantum metric moments in the dynamic regime generate an in-plane gyrotropic current. This system acts as a geometric filter, routing out-of-phase dynamic responses solely into out-of-plane channels, which is promising for field-direction-sensitive spintronics.

Keywords: *Rashba interaction, Quantum geometry, Zeeman field, Quantum metric, Berry curvature, Gyrotropic current*

PACS No 72

مقدمه

هندسه کوانتومی نوارهای انرژی، شامل متریک کوانتومی و خمیدگی بری، مفاهیمی بنیادین در فیزیک ماده چگال هستند که پدیده‌های نوظهوری مانند رسانش هندسی و پاسخ‌های اسپینی را فراتر از تقریب نیمه‌کلاسیک توصیف می‌کنند. در این میان،

سیستم‌های دوبعدی با برهم‌کنش اسپین–مدار راشبا بستری ایده‌آل برای مطالعه این ویژگی‌ها فراهم می‌کنند، چرا که ترکیب جفت‌شدگی اسپینی و میدان‌های مغناطیسی خارجی در آن‌ها، به ساختارهای پیچیده و قابل‌تنظیمی در فضای تکانه منجر می‌شود. اعمال میدان زیمان عمود بر صفحه (راستای z) ساختاری با تقارن دورانی در فضای تکانه ایجاد می‌کند که به هندسه کوانتومی و پاسخ‌های همسانگرد می‌انجامد و تاکنون به‌خوبی مطالعه شده است [۱–۶]. در مقابل، اعمال میدان زیمان درون‌صفحه‌ای (راستای x) با جابه‌جا کردن مرکز بافت اسپینی، این تقارن دورانی را می‌شکند و با ایجاد ناهمسانگردی شدید در متریک کوانتومی، پاسخ‌های مغناطیسی دینامیکی سیستم را به‌طور ساختاری تغییر می‌دهد؛ موضوعی که علیرغم اهمیت کاربردی در هتروساختارهای اسپینترونیکی، کمتر مورد بررسی قرار گرفته است.

هدف این پژوهش، ارائه یک بررسی جامع و تحلیلی از هندسه کوانتومی سیستم راشبا در حضور میدان زیمان درون‌صفحه‌ای (x) و مقایسه سیستماتیک آن با حالت عمود بر صفحه (z) است. بدین منظور، پس از استخراج ساختار نواری و کمیت‌های هندسی ناظر بر سیستم، با استفاده از فرمالیسم پاسخ خطی به محاسبه تانسور پاسخ دینامیکی می‌پردازیم. در نهایت نشان می‌دهیم که چگونه شکست تقارن دورانی به ظهور پاسخ‌های هندسی ناهمسانگرد می‌انجامد و راهکاری برای مهندسی افزونه‌های اسپینترونیکی حساس به جهت میدان ارائه می‌دهد.

سیستم راشبا

در سیستم راشبا در دمای صفر، با میدان زیمان، هامیلتونی به صورت زیر داده می‌شود:

$$H(\mathrm{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \lambda(k \times \sigma)_z + B\sigma_z \qquad (۱)$$

که در آن λ ثابت راشبا و $B = g\mu_B B$ و σ_i ماتریس‌های پائولی

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \lambda\left(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y\right) + B\sigma_z \qquad (۲)$$

بردار مؤثر:

$$\mathrm{d}(\mathrm{k}) = \left(\lambda k_y, -\lambda k_x, B\right) \text{ و } d = \sqrt{\lambda^2 k^2 + B^2} \qquad (۳)$$

و بردار واحد:

$$\mathrm{n} = \frac{\mathrm{d}}{|\mathrm{d}|} \qquad (۴)$$

$$n_x = \frac{\lambda k_y}{d}. \qquad n_y = \frac{-\lambda k_x}{d}, \qquad n_z = \frac{B}{d} \qquad (۵)$$

در سیستم دو بانده، تانسور هندسه کوانتومی به‌صورت بسیار زیبایی نوشته می‌شود:

$$T_{ij} = g_{ij} + \frac{i}{2}\Omega_{ij} \qquad (۶)$$

درخمیدگی بری زیمان z داریم:

$$\Omega_{nm}^{ab} = \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}\cdot(\partial_a \mathrm{d}\times\partial_b \mathrm{d})}{|\mathrm{d}|^3} \qquad (۷)$$

روی پوسته فرمی (دو دایره با شعاع k_η^x):

$$\Omega^{xy} = -\frac{B\lambda^2}{2(\lambda^2k^2+B^2)^{3/2}} \qquad (۸)$$

حال اگر در راشبا جایگزینی زیر را در نظر بگیریم(زیمان x)

$$B\sigma_z \to B\sigma_x \qquad (۹)$$

برای زیمان x ، یعنی هامیلتونی جدید:

$$H(\mathrm{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \lambda\left(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y\right) + B\sigma_x \qquad (۱۰)$$

کمیت مؤثرِ دو–ترازی به صورت زیر است:

$$\mathrm{d}(\mathrm{k}) = \left(d_x, d_y, d_z\right) = \left(\lambda k_y + B, -\lambda k_x, 0\right) \qquad (۱۱)$$

$$d = \sqrt{(\lambda k_y + B)^2 + \lambda^2 k_x^2} \qquad (۱۲)$$

بردار واحد جدید

$$n_x = \frac{\lambda k_y + B}{d}, \qquad n_y = \frac{-\lambda k_x}{d}, \qquad n_z = 0 \qquad (۱۳)$$

مقادیر ویژه نوارها به صورت:

$$\varepsilon_\eta(k) = \frac{k^2}{2m} + \eta d \qquad (۱۴)$$

$$d = \sqrt{(\lambda k_y + B)^2 + \lambda^2 k_x^2} \quad \eta = \pm 1 \qquad (۱۵)$$

$\eta = +1$ برای سطح فرمی خارجی و $\eta = -1$ برای سطح فرمی داخلی در نظر گرفته شده است. در نتیجه، سطح فرمی دیگر دایره‌ای نیست، بلکه به علت جابه‌جایی در راستای k_yبه شکل ناهمسانگرد در می‌آید. این ناهمسانگردی هندسی منشأ اصلی تفاوت حالت درون صفحه‌ای زیمان x با زیمان z است. در این مدل خمیدگی بری مقدار صفررا نشان میدهد واین یکی از تفاوت های مهم با زیمان z است.

$$\Omega^{xy} = 0 \qquad (۱۶)$$

متریک کوانتومی g_{ij} دراین حالت مقدارهای زیر را خواهد داشت:

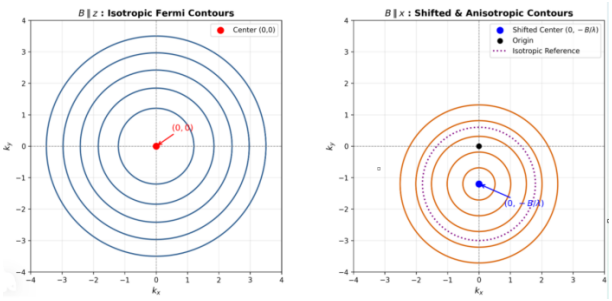
$$g_{xy}^{\pm} = \frac{1}{4}\frac{\lambda k_x(\lambda k_y + B)}{\left[(\lambda k_y + B)^2 + \lambda^2 k_x^2\right]^2} \qquad (۱۷)$$

$$g_{yy}^{\pm} = \frac{1}{4}\frac{\lambda^2 k_x^2}{\left[(\lambda k_y + B)^2 + \lambda^2 k_x^2\right]^2} \qquad (۱۸)$$

$$g_{yx}^{+-} = g_{xy}^{+-} = \frac{1}{4}\frac{\lambda k_x(\lambda k_y + B)}{\left[(\lambda k_y + B)^2 + \lambda^2 k_x^2\right]^2} \qquad (۱۹)$$

$$g_{xx}^{\pm} = \frac{1}{4}\frac{\lambda^2(\lambda k_y + B)^2(\lambda^2 k^2 + B^2 + 2\lambda B k_y)}{\left[(\lambda k_y + \mathrm{B})^2 + \lambda^2 k_x^2\right]^2} \qquad (۲۰)$$

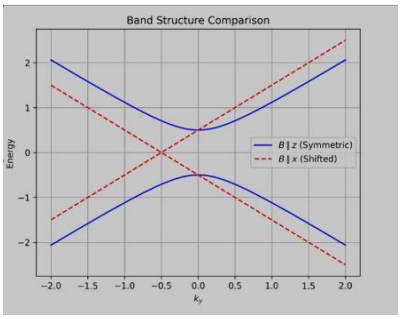
نمودارها



شکل ۱–مقایسه‌ی کانتورهای انرژی در صفحه‌ی تکانه (k_x, k_y) برای دو جهت متفاوت میدان زیمان.

همانطور که در شکل (۱) دیده می‌شود،در حالتی که میدان در راستای عمود بر صفحه $(B \parallel z)$اعمال می‌شود، کانتورهای انرژی دارای تقارن دورانی بوده و مرکز آن‌ها در مبدأ فضای تکانه $(0,0)$قرار دارد. در مقابل، هنگامی که میدان در راستای درون‌صفحه‌ای $(B \parallel x)$قرار می‌گیرد، برهم‌کنش میان میدان زیمان و برهم‌کنش اسپین–مدار موجب جابه‌جایی مرکز حلقه‌های انرژی در امتداد محور k_y می‌شود. این انتقال که با پیکان در شکل مشخص شده است، به نقطه‌ی $\left(0, -\frac{B}{\lambda}\right)$منتهی می‌شود و نشان‌دهنده‌ی شکست تقارن دورانی و پیدایش ناهمسانگردی در ساختار انرژی سامانه است.

در شکل۲، اعمال میدان درون‌صفحه‌ای باعث جابه‌جایی نوارها در فضای تکانه و شکست تقارن دورانی می‌شود.



شکل ۲، ساختار نواری در سیستم راشبا

جریان ژیروتروپیک الکتریکی در دمای صفر بر روی کل ناحیه اول بریلوئن می‌شود[۱]:

$$\frac{J^{\mu;\nu}}{E_\nu} = \int_{K_-}^{K_+}\int_0^{2\pi} d\varphi\, dk \sum_{n>m} f_{nm}\left[\Omega_{\mu\nu}^{nm}\cos\omega t + \frac{2g_{\mu\nu}^{nm}\omega}{\varepsilon_{mn}}\sin\omega t\right] \quad (۲۱)$$

$$\frac{J^{xx}}{E_x} \neq 0 \text{ و } \frac{J^{yy}}{E_y} \neq 0 \quad (۲۲)$$

$$\frac{J^{xy}}{E_y} = \frac{J^{yx}}{E_x} = 0 \quad (۲۳)$$

پس با اینکه خمیدگی بری صفراست ولی متریک کوانتومی غیر صفر در حالت دینامیکی یعنی($\omega \neq ۰$) باعث ایجاد جریان ژیروتروپیک الکتریکی می‌شود.برای دو نوار $(-,+)$، متریک کوانتومی اسپینی و خمیدگی بری اسپینی عبارتند از:

$$S_{\mu\nu}^{+-} = \delta_{\mu\nu} - n_\mu n_\nu, \quad (۲۴)$$

$$A_{\mu\nu}^{+-} = -2\sum_\rho \epsilon_{\mu\nu\rho}\, n_\rho, \quad (۲۵)$$

$$S^{+-} = \begin{pmatrix} 1-n_x^2 & -n_x n_y & 0 \\ -n_y n_x & 1-n_y^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (۲۶)$$

$$A^{+-} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -2n_y \\ 0 & 0 & 2n_x \\ 2n_y & -2n_x & 0 \end{pmatrix}. \quad (۲۷)$$

این نتایج دو نکته مهم را نشان می‌دهند. نخست آن‌که در حالت درون صفحه‌ای زیمان x، مؤلفه‌های درگیر با محور z به‌طور اساسی ظاهر نمی‌شوند یا در برخی پاسخ‌ها حذف می‌گردند. دوم آن‌که مؤلفه‌های قطری و غیرقطری متریک کوانتومی هم‌زمان نقش دارند و لذا پاسخ‌ها به‌شدت جهت‌دار می‌شوند.

پاسخ اسپینی ناشی از میدان مغناطیسی نوسانی توسط تانسورهای هندسی زیمان کنترل می‌شود[۱–۲].

$$Z_{\mu\nu}^{+-} = \partial_{k_\mu} n_\nu, \quad (۲۸)$$

$$Q_{\mu\nu}^{+-} = \frac{1}{2}\sum_{\rho\sigma} \epsilon_{\nu\rho\sigma}\, n_\rho\, \partial_{k_\mu} n_\sigma. \quad (۲۹)$$

در حالت زیمان x، مشتقات صریح عبارتند از:

$$Z_{xx} = -\frac{(\lambda^2 k_x)(\lambda k_y + B)}{d^3} \text{ و } Z_{yx} = \frac{\lambda}{d} - \frac{\lambda(\lambda k_y + \mathrm{B})^2}{d^3}$$

$$Z_{xy} = -\frac{\lambda}{d} + \frac{\lambda^3 k_x^2}{d^3} \text{ و } Z_{yy} = \frac{\lambda^2 k_x(\lambda k_y + \mathrm{B})}{d^3}$$

$$Z_{xz} = Z_{yz} = 0 \quad (۳۰)$$

متریک زیمان نیز به صورت:

$$Q_{xx} = Q_{yy} = Q_{xy} = Q_{yx} = 0,$$

$$Q_{xz} = -\frac{\lambda(\lambda k_y + B)}{2d^2}, Q_{yz} = -\frac{\lambda^2 k_x}{2d^2} \quad (۳۱)$$

ناپدید شدن مؤلفه‌های درون‌صفحه‌ایِ تانسور Q، سیستم را به یک فیلتر هندسی تبدیل می‌کند که پاسخ‌های دینامیکیِ غیرهم‌فاز را صرفاً به کانال‌های برون‌صفحه‌ای هدایت می‌نماید. نتایج تحلیلی ما نشان می‌دهد که تقارنِ ناشی از میدان حالت درون صفحه‌ای زیمان x موجب تک‌بعدی شدن پاسخ مغناطیسی درون‌صفحه‌ای می‌گردد،

به‌طوری‌که تانسور $Q_{\mu\nu}$ تنها در کانال‌های خارج از صفحه (Q_{xz}, Q_{yz}) دارای مؤلفه‌های فعال است. این تمایز ساختاری، یک امضای هندسی متمایز برای سیستم‌های راشبا در حضور میدان‌های مغناطیسی ناهمسانگرد ایجاد می‌کند که می‌تواند در طراحی حسگرهای اسپینیِ حساس به جهت میدان، مورد بهره‌برداری قرار گیرد.بر اساس روابط مقاله، پاسخ اسپینی القایی توسط میدان الکتریکی و مغناطیسی به‌ترتیب از نوع

$$\frac{S^{\mu;\nu}}{B_\nu} = g\mu_B \int_{K_-}^{K_+}\int_0^{2\pi} d\varphi\, dk \sum_{n>m} f_{nm}\left[S_{\mu\nu}^{nm}\cos\omega t + \frac{2A_{\mu\nu}^{nm}\omega}{\varepsilon_{mn}}\sin\omega t\right] \quad (۳۲)$$

$$\frac{S^{\mu;\nu}}{E_\nu} = -\int_{K_-}^{K_+}\int_0^{2\pi} d\varphi\, dk \sum_{n>m} f_{nm}\left[\frac{2Q_{\mu\nu}^{nm}\omega}{\varepsilon_{mn}}\cos\omega t + \frac{Z_{\mu\nu}^{nm}\omega}{{\varepsilon_{mn}}^2}\sin\omega t\right] \quad (۳۳)$$

به‌دست می‌آید. در حالت ω=۰ مؤلفه‌های عرضی مانند $S^{x;y}$ و $S^{y;x}$به دلیل تقارن‌های زوج/فرد در فضای k در بسیاری از شرایط انتگرال‌گیری حذف می‌شوند، مولفه $S^{z;y}$ که نشان دهنده تولید اسپین در جهت عمود بر میدان مغناطیسی است نیز غیر صفر است. سهم‌های قطری $S^{x;x}$ و $S^{z;z}, S^{y;y}$ معمولاً غالب‌اند و بیشترین وزن را در پاسخ هندسی دارند.

$$\frac{S^{xy}}{B_y} = \frac{S^{xz}}{B_z} = \frac{S^{yx}}{B_x} = \frac{S^{zx}}{B_x} = 0\,,$$

$$\frac{S^{x,x}}{B_x} = -g\mu_B\,\lambda^2\pi \sum_{\eta=\pm1}\left[\frac{\eta}{\sqrt{\left(\lambda^2(k_\chi^\eta)^2 + B^2\right)^2 - 4\lambda^2(k_\chi^\eta)B^2}}\right] \quad (34)$$

$$\frac{S^{\mu;\nu}}{B_\nu} = \begin{pmatrix} \neq 0 & 0 & 0 \\ 0 & \neq 0 & \neq 0 \\ 0 & \neq 0 & \neq 0 \end{pmatrix} \quad (۳۵)$$

مولفه های قطری، پذیرفتاری مغناطیسی را تولید می‌کند.به دلیل تقارن شکسته شده توسط میدان مقدار پاسخ های S^{xz} و S^{zx} با هم متفاوت است و این نشان می‌دهد که هندسه کوانتومی می تواند اسپین را به جهات غیر بدیهی بچرخاند.مهم ترین پاسخ، به پاسخ قطری S^{ii} مربوط می‌شود که خواص پارا مغناطیس را شامل می‌شود.در پاسخ مغناطیسی، سهم $Z_{\mu\nu}^{+-}$ و $Q_{\mu\nu}^{+-}$ نیز ناهمسانگرد بوده و به‌ویژه به جابه جایی مرکز بافت اسپینی در راستای k_y حساس‌اند. در نتیجه، در زیمان x ، پاسخ‌های هندسی به جای آن‌که صرفاً تابع اندازه k باشند، به جهت میدان و مؤلفه‌های تکانه وابسته‌اند. این موضوع به‌طور مستقیم تفاوت آن با زیمان z را نشان می‌دهد؛ زیرا در زیمان z ساختار پاسخ‌ها عمدتاً دورانی و متقارن‌تر است. پاسخ هندسی مغناطیسی از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$\frac{J^{\mu;\nu}}{B_\nu} \sim g\mu_B \int_{K_-}^{K_+}\int_0^{2\pi} d\varphi\, dk \sum_{n>m} f_{nm}\left[Z_{\mu\nu}^{nm}\cos\omega t + \frac{2Q_{\mu\nu}^{nm}\omega}{\varepsilon_{mn}}\sin\omega t\right] \quad (۳۶)$$

این فرم نشان می‌دهد که بخش کسینوسی عمدتاً از متریک کوانتومی می‌آید، در حالی که بخش سینوسی به خمیدگی بری وابسته است. متریک کوانتومی سهم غالب در پاسخ هم‌فاز با تحریک خارجی را دارد.خمیدگی بری سهم ناپیوسته‌تر و فاز شیفت‌دار را کنترل می‌کند. در زیمان x ، ناهمسانگردی باعث می‌شود وزن نسبی این دو سهم به جهت میدان و راستای اندازه‌گیری وابسته شود. از دید فیزیکی، این به آن معناست که چرخش میدان زیمان از zبه xمی‌تواند پاسخ اسپینی را از یک پاسخ شبه‌همسانگرد به یک پاسخ جهت‌دار و قطبیده در صفحه تبدیل کند.در این رابطه با محاسبه $Z_{\mu\nu}^{nm}$ ها و $Q_{\mu\nu}^{nm}$ های غیرصفر در حالت ایستا ω=۰ **مولفه**$\frac{J^{xy}}{B_y} \neq 0$و در حالت دینامیکی یعنی(ω ≠۰) فقط $\frac{J^{yz}}{B_z} \neq 0$ و بقیه مولفه ها صفر هستند.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، هندسه کوانتومی نوارهای انرژی و تانسور پاسخ سیستم دوبعدی راشبا در حضور میدان زیمان درون‌صفحه‌ای (x) بررسی و با حالت عمود بر صفحه (z) مقایسه شد. نتایج نشان می‌دهد جهت‌گیری میدان مغناطیسی، ابزاری کارآمد برای مهندسی کمیت‌های هندسی است؛ به طوری که میدان درون‌صفحه‌ای با جابه‌جایی مرکز بافت اسپینی در فضای تکانه، تقارن دورانی را شکسته و به ظهور مؤلفه‌های شدیداً ناهمسانگرد در تانسور متریک کوانتومی می‌انجامد. یافته محوری این کار اثبات می‌کند که در پیکربندی درون‌صفحه‌ای، علی‌رغم صفر شدن خمیدگی بری، تکانه‌های غیرصفرِ متریک کوانتومی در رژیم دینامیکی منجر به تولید جریان الکتریکی ژیروترویپک درون‌صفحه‌ای هم‌فاز با تحریک خارجی می‌شوند. این تمایز ساختاری، سیستم را به یک فیلتر هندسی تبدیل می‌کند که پاسخ‌های دینامیکی غیرهم‌فاز را صرفاً به کانال‌های برون‌صفحه‌ای هدایت می‌نماید.درمجموع، کنترل‌پذیری هندسه کوانتومی از این طریق، افق‌های نوینی را در طراحی افزونه‌های اسپینترونیکی حساس به جهت میدان می‌گشاید.

مرجع‌ها

[1] M. Ezawa; “Quantum geometry and X-wave magnets with X = p, d, f, g, i”; (2025) 11-14
[2] M. Ezawa. Detecting the Neel vector of altermagnets in heterostructures with a topological insulator and a crystalline valley-edge insulator, Physical Review B 109 (24), 245306
[3] Arnab Bose, Nathaniel J. Schreiber, Rakshit Jain, Ding-Fu Shao, Hari P. Nair, Jiaxin Sun, Xiyue S. Zhang, David A. Muller, Evgeny Y. Tsymbal, Darrell G. Schlom & Daniel C.
[4] Longjun Xiang, Hao Jin, and Jian Wang, Spin Transport Revealed by Spin Quantum Geometry, Phys. Rev. Let. 135, 146303 (2025).
[5] Longjun Xiang, Jinxiong Jia, Fuming Xu, Zhenhua Qiao, and Jian Wang, Intrinsic Gyrotropic Magnetic Current from Zeeman Quantum Geometry, Phys. Rev. Let.. 134, 116301 (2025).
[6] Longjun Xiang, Bin Wang, Yadong Wei, Zhenhua Qiao, and Jian Wang, Linear displacement current solely driven by the quantum metric, Phys. Rev. B 109, 115121 (2024).

افزایش نابهنجار متریک کوانتومی و تکینگی‌های استثنایی در یک سیستم راشبای غیرهرمیتی تحت میدان درون‌صفحه‌ای

سعادت‌جو، طاهره[۱]؛ مصدق، حمید[۱] ؛ زارع، محمدحسین[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی قم ، قم

چکیده

در این پژوهش، هندسه کوانتومی یک سیستم الکترونی دو بعدی با برهمکنش اسپین–مدار راشبا در حضور میدان زیمان درون‌صفحه‌ای را مطالعه کرده و سپس تعمیم غیرهرمیتی آن را با افزودن ترم اتلاف $i\gamma\sigma_x$ بررسی می‌کنیم. در حالت هرمیتی، به دلیل صفر بودن مؤلفه عمودی بردار مؤثر $h_z = 0$ ، انحنای بری در کل فضای تکانه صفر می‌ماند، در حالی که متریک کوانتومی اطلاعات هندسی جابه‌جایی بین‌باندی را حمل می‌کند. در رژیم غیرهرمیتی، با استفاده از چارچوب دومتعامدی اثبات می‌کنیم که انحنای بری همچنان صفر باقی مانده و عدد چرن باند صفر می‌شود. با این حال، غیرهرمیتی بودن منجر به ظهور نقاط تبهگنی در فضای تکانه می‌گردد که در مجاورت نقاط بحرانی، متریک کوانتومی دچار واگرایی شدید می‌شود. یافته‌های ما نشان می‌دهد که در این کلاس از مدل‌ها، غیرهرمیتی به تنهایی توپولوژی چرن ایجاد نمی‌کند، اما هندسه اطلاعاتی را به طور چشمگیری تقویت کرده و بستر را برای فیزیک نوظهور حول نقاط استثنایی فراهم می‌آورد.

واژه‌های کلیدی: *برهم‌کنش راشبا، هندسه کوانتومی، میدان زیمان، متریک کوانتومی، خمیدگی بری، غیرهرمیتی ، تانسور هندسه کوانتومی.*

Anomalous Enhancement of the Quantum Metric and Exceptional Singularities in a Non-Hermitian In-Plane Rashba System

Saadatjoo, Tahere [1]; Mosadegh, Hamid ;[1] Zare, Mohammad-Hossein[2]

[1] Department of Physics, Faculty of Science, Shahrekord University, Shahrekord, Iran

[2] Department of Physics, Qom University of Technology, Qom, Iran.

Abstract

In this work,We study the quantum geometry of a 2D Rashba electron system under an in-plane Zeeman field, extended to the non-Hermitian regime via a dissipative term ($i\gamma\sigma_x$). In the Hermitian limit, due to the planar effective field $h_z = 0$, the Berry curvature vanishes identically while the quantum metric encodes interband transition information. In the non-Hermitian regime, utilizing a biorthogonal framework, we show that the Berry curvature remains zero, The Chern number of the band is zero. However, non-Hermiticity leads to the emergence of non-Hermitian degeneracy points in momentum space, near which the quantum metric exhibits strong asymptotic divergence in the vicinity of critical points. Our findings reveal that while non-Hermiticity alone does not generate Chern topology in this class of models, it dramatically amplifies the information geometry around exceptional points.

Keywords: *Rashba interaction, quantum geometry, Zeeman field, quantum metric, Berry curvature, non-Hermiticity, quantum geometric tensor.*

PACS No. 72

مقدمه

هندسه کوانتومی نوارهای انرژی، شامل متریک کوانتومی و خمیدگی بری، مفاهیمی بنیادین در فیزیک ماده چگال هستند و دستگاه‌های دوبعدی با برهم‌کنش اسپین–مدار راشبا بستری ایده‌آل برای مطالعه این ویژگی‌ها فراهم می‌کنند.در سال‌های اخیر،

سیستم‌های غیرهرمیتی به‌عنوان توصیف مؤثر سامانه‌های باز که با محیط تبادل انرژی/ذره دارند (مانند اتلاف، پمپاژ، یا پهن‌شدگی ترازها) اهمیت ویژه‌ای یافته‌اند. در این سامانه‌ها هامیلتونی لزوماً برابر مزدوجِ ترانهاده خود نیست و بنابراین ویژه‌مقادیر می‌توانند مختلط شوند؛ بخش حقیقی، انرژی مؤثر و بخش موهومی، نرخ رشد/میرایی حالت را مشخص می‌کند. به‌طور بنیادین، در غیرهرمیتی بردارهای ویژه راست و چپ مستقل‌اند و باید از چارچوب دو–سمتی[1] برای نرمال‌سازی و تعریف کمیت‌های هندسی استفاده کرد. یکی از پدیده‌های شاخص غیرهرمیتی، ظهور نقاط استثنایی[2] (EPs) است؛ نقاطی در فضای پارامتر/تکانه که در آن‌ها نه‌تنها ویژه‌مقادیر به هم می‌رسند، بلکه ویژه‌بردارها نیز همگرا می‌شوند و هامیلتونی به‌صورت غیرقطری در می‌آید. EPها با «تقاطع‌های معمول» در سیستم‌های هرمیتی تفاوت دارند: در هرمیتی، تبهگنی‌ها معمولاً از نوع دیابولیک[3] هستند که بردارهای ویژه مستقل باقی می‌مانند، اما در EP، بعد فضای ویژه کاهش می‌یابد و تکینگی واقعی در منیفلد حالت رخ می‌دهد. به همین دلیل، کمیت‌های فیزیکی و هندسی در نزدیکی EP می‌توانند رفتار بحرانی نشان دهند؛ برای مثال حساسیت، پاسخ‌پذیری و کمیت‌هایی مانند متریک کوانتومی ممکن است شدیداً تقویت یا حتی واگرا شوند.

در مقابل، در سیستم‌های هرمیتی طیف انرژی حقیقی است، تکامل زمانی یکانی بوده و ساختار بردارهای ویژه کامل و متعامد است؛ بنابراین تعریف استاندارد فاز بری، انحنای بری و عدد چرن روی باندهای جداشده به‌صورت مستقیم برقرار است. در سیستم‌های غیرهرمیتی، به‌دلیل وجود بخش موهومی طیف و امکان بسته‌شدن شکاف مختلط، مفهوم «گاف» می‌تواند به دو شکل شکاف خطی یا شکاف نقطه‌ای تعریف شود و توپولوژی نیز ممکن است به ناوردایی‌های متفاوتی (مانند پیچش) وابسته گردد. به‌طور خلاصه، اگرچه هرمیتی معمولاً توپولوژی را با ناوردایی‌های چرن و انحنای بری پیوند می‌دهد، غیرهرمیتی علاوه بر این‌ها می‌تواند تکینگی‌های EP و مکانیزم‌های جدیدی برای تغییر فاز (از طریق همگرایی ویژه‌حالت‌ها و بادشدگی) ایجاد کند. این مقایسه نشان می‌دهد که حتی در مدل‌هایی که انحنای بری کلاسیک صفر می‌ماند، غیرهرمیتی می‌تواند از مسیر هندسه اطلاعاتی (مانند متریک کوانتومی) اثرات عمیق و قابل‌اندازه‌گیری بر پاسخ‌های سیستم برجای گذارد.

هدف این پژوهش، ارائه یک بررسی جامع و تحلیلی از هندسه کوانتومی سیستم راشبا در حضور میدان زیمان درون‌صفحه‌ای (x) در حالت هرمیتی و غیر هرمیتی است. بدین منظور،ابتدا مدل راشبا با میدان زیمان درون‌صفحه‌ای در راستای xرا در چارچوب هرمیتی مرور می‌کنیم، سپس با افزودن ترم ناهرمیتی $i\gamma\sigma_x$ هندسه کوانتومی را به‌صورت دو–سمتی محاسبه می‌کنیم. در نهایت، نتایج را با مقاله/تحلیل قبلی (حالت هرمیتی) مقایسه کرده و پیامدهای فیزیکی را استخراج می‌کنیم.

سیستم راشبا

هامیلتونی سیستم دیراک دو نواری $\mathrm{n} = \pm$ به صورت زیر در نظر گرفته شده است (سیستم راشبا در حالت **هرمیتی** با میدان زیمان):

$$H(\mathrm{k}) = \lambda(k \times \sigma)_z + B\sigma_z \qquad (۱)$$

که در آن λ شدت برهم کنش راشبا و σ_i ماتریس‌های پائولی

$$H = \lambda\left(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y\right) + B\sigma_z \qquad (۲)$$

بردار مؤثر:

$$\mathrm{d}(\mathrm{k}) = \left(\lambda k_y\,, -\lambda k_x\,, B\right) \qquad (۳)$$

و بردار واحد:

$$\mathrm{n} = \frac{\mathrm{d}}{|\mathrm{d}|} \qquad (۴)$$

یعنی:

$$n_x = \frac{\lambda k_y}{d}. \qquad n_y = \frac{-\lambda k_x}{d}, \qquad n_z = \frac{B}{d} \qquad (۵)$$

که در آن:

$$d = \sqrt{\lambda^2 k^2 + B^2} \qquad (۶)$$

[1] Biorthogonal
[2] Exceptional Points
[3] diabolic points

در سیستم دو باندی، تانسور هندسه کوانتومی به‌صورت بسیار زیبایی نوشته می‌شود:

$$T_{ij} = g_{ij} + \frac{i}{2}\Omega_{ij} \quad (۷)$$

درخمیدگی بری زیمان z داریم:

$$\Omega^{ab}_{nm} = \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}\cdot(\partial_a \mathrm{d}\times\partial_b \mathrm{d})}{|\mathrm{d}|^3} \quad (۸)$$

$$\Omega^{xy} = -\frac{B\lambda^2}{2(\lambda^2k^2+B^2)^{3/2}} \quad (۹)$$

حال اگر در راشبا جایگزینی زیر را در نظر بگیریم(زیمان x)

$$B\sigma_z \to B\sigma_x \quad (۱۰)$$

برای زیمان x در حالت هرمیتی، یعنی هامیلتونی جدید:

$$H(\mathrm{k}) = \lambda\left(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y\right) + B\sigma_x \quad (۱۱)$$

کمیت مؤثرِ دو–ترازی به صورت

$$\mathrm{d}(\mathrm{k}) = \left(d_x, d_y, d_z\right) = \left(\lambda k_y + B, -\lambda k_x, 0\right) \quad (۱۲)$$

است و بنابراین

$$d = \sqrt{(\lambda k_y+B)^2+\lambda^2k_x^2} \quad (۱۳)$$

بردار واحد جدید

$$n_x = \frac{\lambda k_y+B}{d}, \quad n_y = \frac{-\lambda k_x}{d}, \quad n_z = 0 \quad (۱۴)$$

این مهم‌ترین تغییردر کل مسئله است:

$$n_z = 0$$

این ویژگی نقش تعیین‌کننده‌ای در ساده‌سازی ساختار هندسی و حذف بخشی از پاسخ‌های اسپینی دارد.

مقادیر ویژه نوارها به صورت:

$$\varepsilon_\eta(k) = \eta d \qquad \eta = \pm 1 \quad (۱۵)$$

$$d = \sqrt{(\lambda k_y+B)^2+\lambda^2k_x^2} \quad (۱۶)$$

به دست می‌آیند. در نتیجه، سطح فرمی دیگر دایره‌ای نیست، بلکه به علت جابه‌جایی به شکل ناهمسانگرد در می‌آید. این ناهمسانگردی هندسی منشأ اصلی تفاوت حالت درون صفحه‌ای زیمان x با زیمان z است. در این مدل خمیدگی بری مقدار فاصله را نشان میدهد.

$$\Omega^{xy} = 0 \quad (۱۷)$$

واین یکی از تفاوت های مهم با زیمان z است.متریک کوانتومی g_{ij} دراین حالت مقدارهای زیر را خواهد داشت:

$$g^{\pm}_{xy} = \frac{1}{2}\frac{\lambda k_x(\lambda k_y+B)}{\left[(\lambda k_y+B)^2+\lambda^2k_x^2\right]^2} \quad (۱۸)$$

$$g^{\pm}_{yy} = \frac{1}{2}\frac{\lambda^2 k_x^2}{\left[(\lambda k_y+B)^2+\lambda^2k_x^2\right]^2} \quad (۱۹)$$

$$g^{\pm}_{yx} = g^{+-}_{xy} = \frac{1}{2}\frac{\lambda k_x(\lambda k_y+B)}{\left[(\lambda k_y+B)^2+\lambda^2k_x^2\right]^2} \quad (۲۰)$$

$$g^{\pm}_{xx} = \frac{1}{2}\frac{\lambda^2(\lambda k_y++B)^4}{\left[(\lambda k_y+B)^2+\lambda^2k_x^2\right]^3} \quad (۲۱)$$

کمیت‌های هندسی بنیادی: متریک، انحنای بری در حالت غیرهرمیتی

برای بررسی اثر غیرهرمیتی، یک ترم اتلاف/تقویت مؤثر را به همان کانال اسپینی σ_x اضافه می‌کنیم $(m+i\,\gamma)$ جرم مختلط است و هامیلتونی مؤثر الکترون دوبعدی با اسپین–مدار راشبا و میدان زیمانِ درون‌صفحه‌ای در راستای x را به صورت زیر می‌نویسیم [۱–۵]:

$$H(\mathrm{k}) = \lambda(k\times\sigma)_z + (m+i\,\gamma)\sigma_x \quad (۲۲)$$

$$H(\mathrm{k}) = \lambda\left(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y\right) + (m+i\,\gamma)\sigma_x \quad (۲۳)$$

$$\mathrm{h}(\mathrm{k}) = \left(h_x, h_y, h_z\right) = \left(\lambda k_y + m + i\,\gamma, -\lambda k_x, 0\right) \quad (۲۴)$$

برای هامیلتونی دو–باندی غیرهرمیتی از نوع $\mathrm{h}(k)\cdot\sigma$، که $\mathrm{h}(k)$ تابعی مختلط می‌باشد،ویژه‌مقادیرانرژی از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$E_\pm = \pm\sqrt{h(k)^2} \quad (۲۵)$$

که $\mathrm{h}\cdot\mathrm{h} = h_x^2+h_y^2+h_z^2$ است.(باید توجه کنیم که در سیستم غیرهرمیتی $\sqrt{h(k)^2} \neq |h(k)|$ است).

اینجا:

$$n = \frac{h(k)}{\sqrt{h(k)^2}}$$

$$\sqrt{h(k)^2} = \sqrt{(\lambda k_y + m + i\,\gamma)^2 + (-\lambda k_x)^2} \quad (۲۶)$$

نقطه/خط استثنایی (EP) وقتی رخ می‌دهد که شرط زیر برقرار باشد:

$$(\lambda k_y + m + i\,\gamma)^2 + (-\lambda k_x)^2 = 0 \quad (۲۷)$$

پس دو EP داریم:

$$(k_x, k_y) = \left(\pm\frac{\gamma}{\lambda}, -\frac{m}{\lambda}\right). \quad (۲۸)$$

ویژه‌حالت‌های راست و چپ از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$H'\,|\,\psi^R_\pm\rangle = E_\pm\,|\,\psi^R_\pm\rangle, \langle\psi^L_\pm\,|\,H' = \langle\psi^L_\pm\,|\,E_\pm,$$

$$\langle\psi^L_n\,|\,\psi^R_m\rangle = \delta_{nm}. \quad (۲۹)$$

اتصال بری ویلچک–زی غیر هرمیتی به صورت زیر تعریف شود[۱]:

$$\mathcal{A}^{(n)}_\mu = -i\langle\psi^L_n\,|\,\partial_{k_\mu}\psi^R_n\rangle, \quad (۳۰)$$

و انحنای بری برای سیستم دونواری از رابطه زیر بدست می‌آید [۱–۵]:

$$\Omega^{(n)}_{\mu\nu} = \partial_{k_\mu}\mathcal{A}^{(n)}_\nu - \partial_{k_\nu}\mathcal{A}^{(n)}_\mu. \quad (۳۱)$$

$$\Omega^{(\pm)}_{k_xk_y} = \mp\frac{1}{2}\,n\cdot\left(\partial_{k_x}\mathrm{n}\times\partial_{k_y}\mathrm{n}\right) \quad (۳۲)$$

برای این سامانه خواهیم داشت:

$$\Omega^{(\pm)}_{k_x k_y} = 0 \qquad (۳۳)$$

نتیجه: برای این مدل با $h_z = 0$، انحنای بری در صفحه (k_x, k_y)به طور موضعی صفر است.

عدد چرن برای باند n:

$$C_n = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathrm{BZ}} \Omega^{(n)}_{k_x k_y}\, d^2k. \qquad (۳۴)$$

در مدل پیوسته هم معمولاً به صورت انتگرال روی صفحه k یا روی سطح بسته تعریف می‌کنند؛ اما چون:

در همه جا به جزدر تکینگی‌های EP ،مقدار $\Omega = 0$ است

و این مدل شکاف توپولوژیک (با $h_z = 0$) ندارد،

نتیجه استاندارد این است که:

$$C_{\pm} = 0 \qquad (۳۵)$$

اما در غیرهرمیتی نزدیک EPها، کمیت‌های توپولوژیک دیگری مطرح می‌شود مثل عدد پیچش پیرامون EP ،که می‌تواند غیرصفر باشد. یعنی «توپولوژی» از نوع چرنِ دوبعدی نیست، بلکه از نوع بادشدگی پیرامون EP است.

در غیرهرمیتی، تانسور هندسی کوانتومی (QGT) برای باند n معمولاً چنین تعریف می‌شود:

$$\mathcal{T}^{(n)}_{\mu\nu} = \langle \partial_\mu \psi^L_n \,|\, (1 - |\psi^R_n\rangle\langle\psi^L_n|) \,|\, \partial_\nu \psi^R_n \rangle, \qquad (۳۶)$$

$$g^{(n)}_{\mu\nu} = \mathrm{Re}\, \mathcal{T}^{(n)}_{\mu\nu} \qquad (۳۷)$$

$$\Omega^{(n)}_{\mu\nu} = -2\,\mathrm{Im}\, \mathcal{T}^{(n)}_{\mu\nu}. \qquad (۳۸)$$

$$g^{(\pm)}_{\mu\nu} = \frac{1}{4}\, \partial_{k_\mu}\hat{n} \cdot \partial_{k_\nu}\hat{n} \qquad (۳۹)$$

برای سامانه مورد نظر، متریک کوانتومی از روابط زیر بدست می‌آید:

$$g_{xx} = \frac{1}{4}\left[\frac{\lambda^2}{h^2} - \frac{\lambda^4 k_x^2}{h^4}\right] \qquad (۴۰)$$

$$g_{yy} = \frac{1}{4}\left[\frac{\lambda^2}{h^2} - \frac{\lambda^2(\lambda k_y + m + i\gamma)^2}{h^4}\right] \qquad (۴۱)$$

$$g_{xy} = -\frac{\lambda^3 k_x\,(\lambda k_y + m + i\gamma)}{4h^4} \qquad (۴۲)$$

چون $h^2 \to 0$ در نقاط EP:

$$g_{\mu\nu} \to \infty \qquad (۴۳)$$

یعنی واگرایی شدید متریک کوانتومی نزدیک EP ها رخ می‌دهد. این یک اثر فیزیکی شاخص غیرهرمیتی است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، هندسه کوانتومی سیستم دوبعدی راشبا در حضور میدان زیمان درون‌صفحه‌ای و تعمیم غیرهرمیتی آن به صورت تحلیلی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که به دلیل حفظ شرط $h_z = 0$ ، انحنای بری و عدد چرن در تمامی نقاطِ دور از تکینگی صفر باقی می‌مانند و غیرهرمیتی به تنهایی قادر به تولید توپولوژی چرن در این کلاس از مدل‌ها نیست. با این حال، اثر کیفی و بنیادین غیرهرمیتی در هندسه اطلاعاتی سیستم و ظهور نقاط استثنایی EP آشکار گردید. ما اثبات کردیم که در مجاورت این نقاط بحرانی، متریک کوانتومی با رفتار مجانبی دچار واگرایی شدید می‌شود که گویای افزایش نابهنجار حساسیت خم حالت کوانتومی و پاسخ‌پذیری سیستم است.

مرجع‌ها

[1] M. Ezawa; “Quantum geometry and X-wave magnets with X = p, d, f, g, i”; (2025) 11-14
[2] M. Ezawa, “Detecting the Neel vector of altermagnets in heterostructures with a topological insulator and a crystalline valley-edge insulator,” Phys.Rev. B 109, 245306 (2024).
[3] Y.-M. R. Hu, E. A. Ostrovskaya, and E. Estrecho, “Generalized quantum geometric tensor in a non-Hermitian exciton-polariton system,” Opt. Mater. Express 14, 664 (2024).
[4] Navot Silberstein, Jan Behrends, Moshe Goldstein, and Roni Ilan, Berry connection induced anomalous wave-packet dynamics in non-Hermitian systems, Phys. Rev. B 102, 245147 (2020)
[5] Jan Behrends, Roni Ilan, and Moshe Goldstein, Quantum geometry of non-Hermitian systems, arXiv:2503.13604

هندسه کوانتومی و پاسخ‌های خطی متقاطع در یک سامانه دونواری تعمیم‌یافته‌ی راشبا–درسلهاوس

عبداللهی، ریحانه [۱]؛ مصدق، حمید[۱]؛ زارع، محمدحسین[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

[۲]دانشکده فیزیک ، دانشگاه صنعتی قم ، قم

چکیده

در این پژوهش، خواص هندسی کوانتومی و پاسخ‌های خطی متقاطع در یک سامانه دو نواری دو بعدی با هندسه جفت‌شدگی اسپین–مدار تعمیم‌یافته شامل جملات راشبا و درسلهاوس در حضور یک میدان مغناطیسی زیمن به صورت تحلیلی بررسی شده است. با بهره‌گیری از چارچوب هندسه کوانتومی زیمن، کمیت‌های هندسی بنیادین سامانه، شامل انحنای بری، متریک کوانتومی، انحنای بری زیمن، متریک کوانتومی زیمن، انحنای بری اسپین و متریک کوانتومی اسپین، به‌صورت تحلیلی استخراج شدند. بر پایه این کمیت‌های هندسی، پاسخ‌های ترابردی متقاطع سامانه شامل جریان هال ذاتی و جریان ژیروتروپیک مغناطیسی ذاتی ناشی از میدان الکتریکی و مغناطیسی خارجی محاسبه گردیدند. نتایج نشان می‌دهد که پارامتر جفت‌شدگی درسلهاوس نقشی کلیدی در پدید آمدن پاسخ‌های متقاطع جدید ایفا می‌کند، در حالی که پارامتر راشبا جفت‌شده با میدان مغناطیسی مسئول اصلی تعیین خواص توپولوژیک و عدد چرن نیم–صحیح سامانه است. علاوه بر این، رفتارهای ترابردی سامانه در حالت‌های راشبای خالص، درسلهاوس خالص و حالت تقارن بین برهم‌کنش‌های راشبا و درسلهاوس بررسی شد. در این حالت، سامانه به نقطه بحرانی رسیده و گذار از فاز توپولوژیک به فاز غیرتوپولوژیک را تجربه می‌کند. یافته‌های این تحقیق، چشم‌اندازهای جدیدی را برای کنترل و مهندسی جریان‌های هال و پاسخ‌های اسپینی در مواد اسپینترونیک و حسگرهای مغناطیسی فراهم می‌آورد.

واژه های کلیدی: *هندسه کوانتومی، جفت‌شدگی اسپین–مدار، پاسخ متقاطع، انحنای بری، متریک کوانتومی، راشبا–درسلهاوس.*

Quantum Geometry and Linear Cross-Responses in a Generalized Rashba-Dresselhaus Two-Band System

Abdollahi, Reyhaneh[1]; Mosadegh, Hamid [1] ; Zare , Mohammad- Hossein[2]

[1]Department of Physics, Faculty of Science, Shahrekord University, Shahrekord, Iran

[2]Department of Physics, Qom University of Technology, Qom, Iran.

Abstract

In this work, the quantum geometric properties and linear cross-responses of a two-dimensional two-band system with generalized spin–orbit coupling, incorporating both Rashba and Dresselhaus interactions, are investigated analytically in the presence of a Zeeman magnetic field. Within the framework of Zeeman quantum geometry, the fundamental quantum geometric quantities of the system, including the Berry curvature, quantum metric, Zeeman Berry curvature, Zeeman quantum metric, spin Berry curvature, and spin quantum metric, are derived analytically. Based on these geometric quantities, the cross-transport responses of the system, including the intrinsic Hall current and the intrinsic magnetogyrotropic current induced by external electric and magnetic fields, are evaluated. The results demonstrate that the Dresselhaus spin–orbit coupling plays a crucial role in generating novel cross-responses, whereas the Rashba spin–orbit coupling, in conjunction with the Zeeman magnetic field, is primarily responsible for determining the topological properties and the half-integer Chern number of the system. Furthermore, the transport properties of the system are examined in the limiting cases of pure Rashba coupling, pure Dresselhaus coupling, and the symmetric regime where the Rashba and Dresselhaus interactions are equal. At this symmetry point, the system reaches a critical point and undergoes a transition from a topological phase to a non-topological phase. These findings provide new insights into the control and engineering of Hall currents and spin-dependent responses in spintronic materials and magnetic sensing devices.

.Keywords: *Quantum geometry, Spin-orbit coupling, Cross-response, Berry curvature, Quantum metric, Rashba-Dresselhaus.*

PACS No:70,72

مقدمه

در سال‌های اخیر، هندسه کوانتومی به یکی از مفاهیم بنیادی در فیزیک ماده چگال تبدیل شده است، زیرا چارچوبی مناسب برای توصیف خواص هندسی و توپولوژیکی نوارهای الکترونی فراهم می‌کند. کمیت‌هایی نظیر انحنای بری و متریک کوانتومی نه‌تنها ساختار هندسی فضای تکانه را مشخص می‌کنند، بلکه نقش تعیین‌کننده‌ای در بسیاری از پدیده‌های ترابردی از جمله اثر هال ذاتی، اثر هال اسپینی، جریان‌های غیرخطی و پاسخ‌های نوری ایفا می‌کنند. در سال‌های اخیر، اهمیت این کمیت‌ها فراتر از سامانه‌های توپولوژیکی گسترش یافته و در مطالعه مواد دوبعدی، نیمرساناها و سامانه‌های دارای برهم‌کنش اسپین–مدار نیز مورد توجه گسترده قرار گرفته است [۱،۲].

برهم‌کنش اسپین_مدار یکی از مهم‌ترین سازوکارهای ایجاد جفت شدگی میان درجه آزادی اسپین و حرکت الکترون‌ها است و نقش اساسی در عملکرد بسیاری از ادوات اسپینترونیکی دارد. در میان مدل‌های مختلف، برهم‌کنش راشبا به دلیل منشأ ناشی از شکست تقارن وارونگی ساختاری، یکی از شناخته‌شده‌ترین مدل‌ها برای توصیف سامانه‌های دوبعدی به‌شمار می‌رود [۳]. با این حال، در بسیاری از مواد واقعی، شکست تقارن وارونگی حجمی نیز وجود دارد که منجر به ظهور برهم‌کنش درسلهاوس می‌شود[٤].

حضور هم‌زمان این دو برهم‌کنش، ساختار نواری سامانه را ناهمسان‌گرد کرده و زمینه بروز پدیده‌های جدید هندسی و ترابردی را فراهم می‌کند که در مدل‌های ساده‌تر قابل توصیف نیستند. در سال‌های اخیر، توسعه مفهوم هندسه کوانتومی زیمن، افق جدیدی برای مطالعه پاسخ‌های الکترونی در حضور میدان مغناطیسی گشوده است. در این چارچوب، علاوه بر انحنای بری و متریک کوانتومی متداول، کمیت‌های هندسی جدیدی نظیر انحنای بری زیمن، متریک کوانتومی زیمن، انحنای بری اسپین و متریک کوانتومی اسپین معرفی شده‌اند که اطلاعات دقیق‌تری از پاسخ سامانه به میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی ارائه می‌کنند. این کمیت‌ها ارتباط مستقیمی با پاسخ‌های ترابردی نوظهور، از جمله جریان هال و جریان ژیروتروپیک مغناطیسی و سایر پاسخ‌های متقاطع دارند و مطالعه آن‌ها در سال‌های اخیر مورد توجه فراوان قرار گرفته است [۵–۱۰].

با وجود پیشرفت‌های اخیر، بیشتر مطالعات پیشین بر سامانه‌هایی با تنها یک نوع برهم‌کنش اسپین_مدار یا بر بررسی بخشی از کمیت‌های هندسی متمرکز بوده‌اند. ازاین‌رو، مطالعه هم‌زمان تمامی کمیت‌های هندسه کوانتومی زیمن در سامانه‌ای شامل هر دو برهم‌کنش راشبا و درسلهاوس، به‌ویژه در حضور میدان مغناطیسی زیمن، همچنان کمتر مورد بررسی قرار گرفته است. علاوه بر این، نقش مستقل هر یک از پارامترهای راشبا و درسلهاوس در تعیین پاسخ‌های متقاطع و ویژگی‌های توپولوژیکی سامانه هنوز به‌طور کامل روشن نشده است.

در این پژوهش، یک سامانه دوبعدی دونواری با برهم‌کنش اسپین_مدار تعمیم‌یافته شامل جملات راشبا و درسلهاوس در حضور میدان مغناطیسی زیمن به‌صورت تحلیلی بررسی می‌شود. ابتدا تمامی کمیت‌های بنیادی هندسه کوانتومی، شامل انحنای بری، متریک کوانتومی، انحنای بری زیمن، متریک کوانتومی زیمن، انحنای بری اسپین و متریک کوانتومی اسپین استخراج می‌شوند. سپس، با استفاده از این کمیت‌ها، پاسخ‌های خطی متقاطع سامانه، از جمله جریان هال ذاتی و جریان ژیروتروپیک مغناطیسی ذاتی، محاسبه و نقش پارامترهای راشبا و درسلهاوس در رفتار توپولوژیکی و ترابردی سامانه بررسی می‌شود. همچنین، رفتار سامانه درحالت‌های حدی شامل راشبای خالص، درسلهاوس خالص و نقطه تقارن میان این دو برهم‌کنش مورد مطالعه قرار می‌گیرد.

روش محاسباتی

هامیلتونی سامانه به‌صورت زیر در نظر گرفته شده‌است

$$H(\mathrm{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \alpha(\mathrm{k}\times\sigma)_z + \beta\left(k_x\sigma_x - k_y\sigma_y\right) + B\sigma_z \quad (۱)$$

α و β به‌ترتیب ضرایب جفت‌شدگی راشبا و درسلهاوس هستند و B انرژی زیمن متناظر با میدان مغناطیسی عمود بر صفحه را نشان می‌دهد که به صورت $B = g\mu_B B_Z$ (g ضریب لاندائو و μ_B مگنتون بور) تعریف می‌شود.

هامیلتونی را می‌توان به‌صورت کلی به شکل زیر نوشت.

$$H(\mathrm{k}) = h_0(\mathrm{k}) + \sigma.\mathrm{h}(\mathrm{k}) \qquad (۲)$$

$\mathrm{n}(\mathrm{k})$ بردار واحد میدان مؤثر به صورت زیرتعریف می‌شود.

$$\mathrm{n}(\mathrm{k}) = \frac{\mathrm{h}(\mathrm{k})}{|\mathrm{h}(\mathrm{k})|} \qquad (۳)$$

انرژی سامانه از رابطه زیر به‌دست می‌آید.

$$E_\chi(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \chi\sqrt{(\alpha^2+\beta^2)k^2 - 4\alpha\beta k_x k_y + B^2} \qquad (٤)$$

در اینجا $\chi=\pm 1$ شاخص دو نوار انرژی است که در آن $k_x = k\cos\phi$ و $k_y = k\sin\phi$ است.

در دمای صفر، حدود انتگرال‌گیری توسط سطح فرمی هر شاخه تعیین می‌شوند که از شرط $E_\chi(k,\phi) = \mu$ (μ پتانسیل شیمیایی) به‌دست می‌آید. از آنجا که حضور هم‌زمان برهم‌کنش‌های راشبا و درسلهاوس باعث ناهمسانگردی ساختار نواری می‌شود، بردار فرمی به زاویه $k_F^\chi(\phi)$ وابسته است.

کمیت‌های هندسی

برای یک سامانه دونواری، انحنای بری را می‌توان به‌صورت زیر تعریف کرد [۵].

$$\Omega_\pm^{xy} = \mp\frac{1}{2} n.\left(\partial_{k_x} n \times \partial_{k_y} n\right) \qquad (۵)$$

برای این سامانه

$$\Omega_\pm^{xy} = \mp\frac{B(\alpha^2-\beta^2)}{2\left[Pk^2 - Mk_x k_y + B^2\right]^{3/2}} \qquad (٦)$$

که در آن

$$P = \alpha^2+\beta^2 \ , \ M = 4\alpha\beta \qquad (۷)$$

در اینجا، متریک کوانتومی مطابق با تعریف ارائه‌شده در مرجع[٦] نوشته شده‌است. این تعریف در چارچوب هندسه کوانتومی زیمن ارائه شده و با تعریف متداول متریک کوانتومی در سامانه‌های دونواری تفاوت دارد و به صورت زیرتعریف می‌شود.

$$g_\pm^{\mu\nu} = \pm\frac{1}{2}\left(\partial_{k_\mu} n\right).\left(\partial_{k_\nu} n\right) \qquad (۸)$$

در نهایت نتایج زیر حاصل می‌شوند.

$$g_\pm^{xx} = \pm\frac{(\alpha^2-\beta^2)^2 k_y^2 + PB^2}{2D^2} \qquad (۹)$$

$$g_\pm^{yy} = \pm\frac{(\alpha^2-\beta^2)^2 k_x^2 + PB^2}{2D^2} \qquad (۱۰)$$

$$g_\pm^{xy} = \mp\frac{P^2 k_x k_y + MB^2}{2D^2} \qquad (۱۱)$$

که در آن

$$D = Pk^2 - Mk_x k_y + B^2 \qquad (۱۲)$$

انحنای بری زیمن به‌صورت زیر محاسبه می‌شود[۷].

$$Z_{+-}^{\mu\nu} = \frac{\partial n_\nu}{\partial k_\mu}$$

$$Z_{+-}^{xx} = \frac{\beta D - A(Pk_x - Mk_y)}{D^{3/2}}$$

$$Z_{+-}^{xy} = \frac{\alpha D - C(Pk_x - Mk_y)}{D^{3/2}}$$

$$Z_{+-}^{xz} = \frac{-B(Pk_x - Mk_y)}{D^{3/2}} \qquad (۱۳)$$

$$A = \beta k_x - \alpha k_y \ , \quad C = \alpha k_x - \beta k_y \qquad (۱٤)$$

متریک کوانتومی زیمن به‌صورت زیر تعریف می‌شود[۸].

$$Q_{+-}^{\mu\nu} = \frac{1}{2}\sum_{\rho\sigma}\epsilon_{\nu\rho\sigma} n_\rho \frac{\partial n_\sigma}{\partial k_\mu} \qquad (۱۵)$$

$\epsilon_{\nu\rho\sigma}$ نماد لویی‌چیویتا است. در نتیجه خواهیم داشت.

$$Q_{+-}^{xx} = Q_{+-}^{yy} = -\frac{\alpha B}{2D}$$

$$Q_{+-}^{xy} = Q_{+-}^{yx} = \frac{\beta B}{2D}$$

$$Q_{+-}^{xz} = -\frac{(\alpha^2-\beta^2)k_y}{2D}$$

$$Q_{+-}^{yz} = \frac{(\alpha^2-\beta^2)k_x}{2D} \qquad (۱٦)$$

انحنای بری اسپینی به‌شکل زیرتعریف می‌شود[۹].

$$\mathcal{A}_{+-}^{\mu\nu} = -2\sum_\rho \epsilon_{\mu\nu\rho} n_\rho \qquad (۱۷)$$

$\mathcal{A}_\pm^{\mu\nu}$ مستقیماً در قطبش اسپین ناشی از میدان مغناطیسی ظاهر شده و نقش مهمی در اثر هال اسپین و دینامیک اسپین ایفا می‌کند.

بنابراین

$$\mathcal{A}_{+-}^{xy} = -\mathcal{A}_{+-}^{yx} = -\frac{2B}{\sqrt{D}} \qquad (۱۸)$$

$$\mathcal{A}_{+-}^{xz} = -\mathcal{A}_{+-}^{zx} = \frac{2(\alpha k_x - \beta k_y)}{\sqrt{D}}$$

$$\mathcal{A}_{+-}^{yz} = -\mathcal{A}_{+-}^{zy} = -\frac{2(\beta k_x - \alpha k_y)}{\sqrt{D}}$$

متریک کوانتومی اسپینی به‌صورت زیر تعریف می‌شود[۹].

$$S_{+-}^{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} - n_\mu n_\nu \qquad (۱۹)$$

کمیت‌ها به‌صورت زیر نوشته می‌شوند.

مؤلفه‌های قطری

$$S_{+-}^{xx} = 1 - \frac{A^2}{D}, S_{+-}^{yy} = 1 - \frac{C^2}{D}, S_{+-}^{zz} = \frac{D-B^2}{D} \quad (۲۰)$$

مؤلفه‌های غیرقطری

$$S_{+-}^{xy} = -\frac{AC}{D}, S_{+-}^{xz} = -\frac{AB}{D}, S_{+-}^{yz} = -\frac{CB}{D} \quad (۲۱)$$

$S_{\pm}^{\mu\nu}$ در قطبش اسپین القاشده توسط میدان مغناطیسی ظاهر شده و نقش مهمی در توصیف پاسخ اسپین به میدان مغناطیسی ایفا می‌کند.

پاسخ‌های ناشی از هندسه زیمن

در ادامه، با استفاده از چارچوب هندسه کوانتومی زیمن، پاسخ‌های خطی سامانه به‌صورت تحلیلی استخراج شده و وابستگی آن‌ها به پارامترهای α و β بررسی می‌شود. در روابط زیر $k_F^{\pm}(\phi)$ ریشه‌های معادله $\mathrm{E}\chi(k,\phi)$ هستند. در شکل (۱) ساختار نواری و گذار فاز توپولوژی رسم شده‌است. نقاط تقاطع نوار χ سطح فرمی را مشخص می‌کنند. $f_{nm} = f(E_n) - f(E_m)$ که اختلاف توابع توزیع فرمی–دیراک دونوار و $\varepsilon_{mn} = E_m - E_n$ اختلاف انرژی نوارها و ω فرکانس میدان الکتریکی (مغناطیسی) اعمالی و $e = \hbar = 1$ است. در چارچوب نظریه پاسخ خطی، روابط زیر برای جریان هال ذاتی و جریان ژیروتروپیک مغناطیسی ذاتی ناشی از میدان مغناطیسی(الکتریکی) ایستا به‌دست می‌آیند. [۱۰]

در حالت کلی جریان ناشی از میدان الکتریکی به‌صورت زیر است

$$\frac{J^{\mu;\nu}}{E^{\nu}} = \mathrm{g}\mu_B \int_0^{2\pi} d\phi \int_{k_F^-(\phi)}^{k_F^+(\phi)} kdk \sum_{n>m} f_{nm} \left[\Omega_{\pm}^{\mu\nu} cos\omega t + g_{mn}^{\mu\nu} \frac{\omega\, sin\omega t}{\varepsilon_{mn}}\right] \quad (۲۲)$$

جمله اول جریان هال تولید شده توسط انحنای بری و در جمله دوم متریک کوانتومی به صورت پاسخ نوسانی ظاهر می‌شود.

جریان هال ناشی از میدان ایستا به شکل زیر حاصل می‌شود

$$\frac{J^{x;y}}{E^{y}} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{k_F^-(\phi)}^{k_F^+(\phi)} kdk \sum_{n>m} f_{nm} \Omega_{\pm}^{xy} \quad (۲۳)$$

$$= \mp \frac{B(\alpha^2-\beta^2)}{2} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{A(\phi)} \left[\frac{1}{\sqrt{A(\phi)k_F^{-2} + B^2}} - \frac{1}{\sqrt{A(\phi)k_F^{+2} + B^2}}\right]$$

$$A(\phi) = P - \frac{M}{2} sin2\phi \quad (۲۴)$$

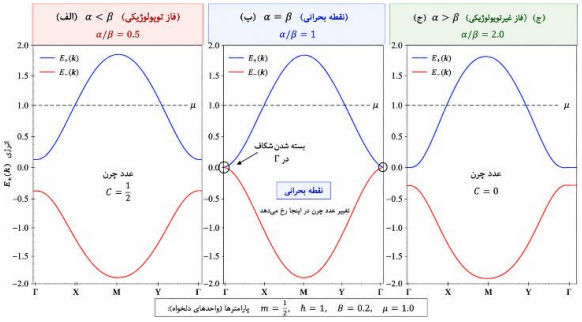
و جریان ژیروتروپیک مغناطیسی ناشی از میدان مغناطیسی ایستا به شکل زیر بدست می‌آید

$$\frac{J^{\mu;\nu}}{B^{\nu}} = g\mu_B \int_0^{2\pi} d\phi \int_{k_F^-(\phi)}^{k_F^+(\phi)} kdk \sum_{n>m} f_{nm} Z_{+-}^{\mu\nu} \quad (۲۵)$$

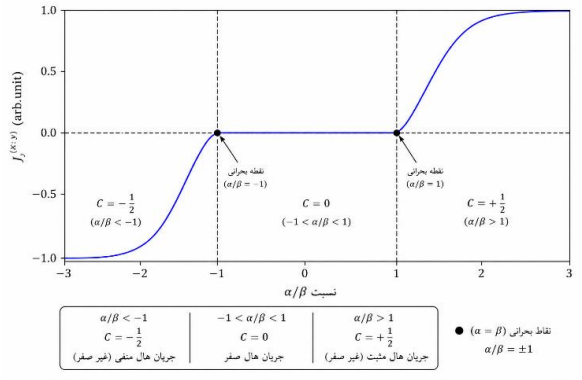
بررسی حالت های حدی نشان می‌دهد در حالت راشبای خالص $\frac{J_{xy}}{B_y}$ غیرصفر و $\frac{J_{xx}}{B_x}$ صفر است. در حالت درسلهاوس خالص $\frac{J_{xx}}{B_x}$ غیرصفر و $\frac{J_{xy}}{B_y}$ صفر است. جریان هال در این سامانه ناشی از انحنای بری در غیاب میدان مغناطیسی یا در حالت α=β صفر می‌شود(شکل ۲). در این حالت گذار فاز توپولوژیکی اتفاق می‌افتد. در حالت کلی $(\alpha^2 \neq \beta^2)$ انحنای بری غیرصفر است و عدد چرن به‌صورت زیر است

$$C = \pm\frac{1}{2} sgn[B(\alpha^2 - \beta^2)] \quad (۲۶)$$

عدد چرن فقط به علامت B و علامت $(\alpha^2 - \beta^2)$ وابسته است و به مقدار دقیق α ، β و B وابسته نیست. درحالت خاص $\alpha^2 = \beta^2$ شامل α=±β عدد چرن صفر است.



شکل ۱: ساختار نواری و گذار فاز توپولوژی



شکل۲:جریان هال ذاتی برحسب α/β در مدل راشبا–درسلهاوس در حضور میدان زیمن.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، خواص هندسی کوانتومی و پاسخ‌های خطی متقاطع یک سامانه دوبعدی دونواری با جفت‌شدگی اسپین–مدار تعمیم‌یافته شامل برهم‌کنش‌های راشبا و درسلهاوس، در حضور

میدان مغناطیسی زیمن، به‌صورت تحلیلی بررسی شد. در چارچوب هندسه کوانتومی زیمن، تمامی کمیت‌های هندسی بنیادی سامانه، شامل انحنای بری، متریک کوانتومی، انحنای بری زیمن، متریک کوانتومی زیمن، انحنای بری اسپین و متریک کوانتومی اسپین، به‌طور صریح استخراج شدند. بر پایه این کمیت‌ها، روابط تحلیلی مربوط به پاسخ‌های ترابردی متقاطع، از جمله جریان هال ذاتی و جریان ژیروتروپیک مغناطیسی ذاتی، به‌دست آمد و وابستگی آن‌ها به پارامترهای جفت‌شدگی اسپین–مدار بررسی شد.

نتایج نشان داد که برهم‌کنش درسلهاوس نقش تعیین‌کننده‌ای در ایجاد پاسخ‌های متقاطع جدید ایفا می‌کند، در حالی که برهم‌کنش راشبا، همراه با میدان مغناطیسی زیمن، عامل اصلی تعیین ویژگی‌های توپولوژیکی سامانه و مقدار عدد چرن نیم‌صحیح است. همچنین بررسی حالت‌های حدی شامل راشبای خالص، درسلهاوس خالص و حالت متقارن ($\alpha = \beta$) نشان داد که هر یک از این پیکربندی‌ها رفتار ترابردی متفاوتی از خود نشان می‌دهند. به‌ویژه، در نقطه تقارن، انحنای بری و عدد چرن به صفر می‌رسند و سامانه از فاز توپولوژیک به فاز غیرتوپولوژیک گذار می‌کند، در حالی که پاسخ‌های وابسته به متریک کوانتومی همچنان غیرصفر باقی می‌مانند. این نتیجه بیانگر آن است که بخشی از پاسخ‌های ترابردی سامانه مستقل از ویژگی‌های توپولوژیکی بوده و منشأ آن‌ها در ساختار هندسی فضای حالت نهفته است.

روابط تحلیلی به‌دست‌آمده در این پژوهش امکان بررسی و کنترل پاسخ‌های ترابردی را از طریق تنظیم پارامترهای راشبا، درسلهاوس و میدان مغناطیسی فراهم می‌کنند. ازاین‌رو، نتایج این مطالعه می‌تواند مبنایی نظری برای طراحی ادوات اسپینترونیکی، حسگرهای مغناطیسی و سامانه‌های مبتنی بر کنترل جریان‌های هال و پاسخ‌های اسپینی در مواد دوبعدی باشد. افزون بر این، چارچوب ارائه‌شده می‌تواند برای مطالعه سامانه‌های پیچیده‌تر، از جمله مواد توپولوژیکی چندنواری و سامانه‌های برهم‌کنشی، گسترش یابد و در بررسی پاسخ‌های کوانتومی نوظهور مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع‌ها

[1] D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, Rev. *Mod. Phys*. **82**, 1959 (2010).
[2]A. Gao, N. Nagaosa, N. Ni, and S.-Y Xu, *arXiv:**2508.00469*** (2025).
[3] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **17**, 6039 (1984).
[4] G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
[5] Yugo Onishi and Liang Fu, *Fundamental Bound on Topological Gap, Phys. Rev***. X 14**, 011052 (2024)
[6] Y.-M. Robin Hu, Elena A. Ostrovskaya, and Eliezer Estrecho, *Generalized quantum geometric tensor in a non-Hermitian exciton-polariton system, Optical Materials Express* **14**, 664(2024).
[7] Wei Chen, *Quantum geometrical properties of topological materials,J. Phys.: Condens. Matter* **37** 025605 (2025).
[8] Longjun Xiang, Hao Jin, and Jian Wang, *Spin Transport Revealed by Spin Quantum Geometry, Phys. Rev. Let***. 135**, 146303 (2025).
[9] Longjun Xiang, Jinxiong Jia, Fuming Xu, Zhenhua Qiao, and Jian Wang, *Intrinsic Gyrotropic Magnetic Current from Zeeman Quantum Geometry, Phys. Rev. Let.* **134**, 116301 (2025)
[10] Longjun Xiang, Bin Wang, Yadong Wei, Zhenhua Qiao, and Jian Wang, *Linear displacement current solely driven by the quantum metric, Phys. Rev. B* **109**, 115121 (2024).

بررسی اثر کرنش مکانیکی بر آمار طیفی در گرافن دولایه: رهیافت آشوب کوانتومی

بابایی دولاما، سوسن ؛ فتحی زاده، سمیرا؛ نعمتی، فاطمه

گروه فیزیک، دانشکده علوم و فناوری های نوین، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه

چکیده

در این پژوهش، خواص ترابرد الکترونی و آشوب کوانتومی در گرافن دولایه تحت تأثیر کرنش مکانیکی، تغییر ابعاد لایه‌ها و حضور ناخالصی‌های بور، نیتروژن و سیلیسیم با استفاده از مدل تنگ‌بست و نظریه ماتریس‌های تصادفی بررسی شده است. تحلیل آماری طیف انرژی از طریق توزیع فاصله ترازهای مجاور و پارامتر برودی نشان می‌دهد که اعمال کرنش مکانیکی با تغییر پارامترهای پرش الکترون و شکستن تقارن‌های شبکه، موجب افزایش همبستگی‌های طیفی و تقویت آشوب کوانتومی می‌شود. نتایج حاکی از گذار تدریجی سامانه از رفتار شبه‌پواسونی به آمار ویگنر–دایسون بوده و نشان می‌دهد که کرنش مکانیکی ابزاری مؤثر برای مهندسی آشوب کوانتومی در گرافن دولایه است.

واژه های کلیدی: *گرافن دولایه، آشوب کوانتومی، نظریه ماتریس‌های تصادفی، کرنش مکانیکی.*

Effect of Mechanical Strain on Spectral Statistics in Bilayer Graphene: A Quantum Chaos Approach

Babaei Dolama, Sousan; Fathizadeh, Samira; Nemati, Fatemeh

Department of Physics, Faculty of Modern Sciences and Technologies, Urmia University of Technology, Urmia

Abstract

In this study, the electron transport properties and quantum chaos in bilayer graphene under the influence of mechanical strain, changing the dimensions of the layers and the presence of boron, nitrogen and silicon impurities have been investigated using the tight-binding model and the theory of random matrices. Statistical analysis of the energy spectrum through the distribution of the distance between adjacent levels and the Brody parameter shows that applying mechanical strain by changing the hopping parameters and breaking the lattice symmetries increases spectral correlations and enhances quantum chaos. The results indicate a gradual transition of the system from quasi-Poisson behavior to Wigner-Dyson statistics and show that mechanical strain is an effective tool for engineering quantum chaos in bilayer graphene.

***Keywords**: Bilayer graphene, quantum chaos, Random matrix theory, mechanical strain*
***PACS No**: 70, 72, 73*

مقدمه

گرافن دولایه یکی از مهم‌ترین سامانه‌های دوبعدی در فیزیک ماده چگال است که به دلیل قابلیت کنترل ساختار نواری و خواص ترابردی، توجه گسترده‌ای را در سال‌های اخیر به خود جلب کرده است. برخلاف گرافن تک‌لایه که دارای طیف خطی دیراک است، در گرافن دولایه امکان ایجاد گاف انرژی از طریق میدان الکتریکی خارجی و کرنش مکانیکی وجود دارد [1]. این ویژگی‌ها موجب شده‌اند که گرافن دولایه به بستری مناسب برای توسعه ادوات نانوالکترونیکی و استرین‌ترونیکی تبدیل شود[2] .مطالعه آشوب کوانتومی در سامانه‌های مزوسکوپی و مواد دوبعدی یکی از موضوعات فعال پژوهشی در دو دهه اخیر بوده است. در مکانیک کلاسیک، آشوب از طریق حساسیت نمایی به شرایط اولیه تعریف می‌شود، اما در مکانیک کوانتومی به علت اصل عدم قطعیت هایزنبرگ و فقدان مسیرهای مشخص کلاسیکی، این تعریف قابل استفاده نیست[3]. از این رو، آشوب کوانتومی معمولاً از طریق ویژگی‌های آماری طیف انرژی، ساختار توابع موج و همبستگی‌های طیفی مورد بررسی قرار می‌گیرد[4] . نظریه ماتریس‌های تصادفی (RMT) یکی از موفق‌ترین چارچوب‌های نظری برای مطالعه آشوب کوانتومی است. بر اساس این نظریه، سیستم‌های کوانتومی متناظر با دینامیک کلاسیکی آشوبناک از آمار ویگنر–دایسون پیروی می‌کنند، در حالی که سیستم‌های انتگرال‌پذیر دارای توزیع پواسون هستند. بنابراین بررسی توزیع فاصله ترازهای انرژی مجاور می‌تواند اطلاعات ارزشمندی درباره ماهیت آشوب یا نظم سیستم فراهم کند. اگرچه مطالعات متعددی اثر کرنش مکانیکی، میدان الکتریکی و ناخالصی‌ها را بر ساختار الکترونی گرافن دولایه بررسی کرده‌اند، اما

ارتباط مستقیم میان آشوب کوانتومی و گذار فلز–عایق در این سیستم هنوز به طور کامل روشن نشده است. هدف این پژوهش بررسی نقش کرنش مکانیکی به همراه ناخالصی‌های جانشینی و میدان الکتریکی خارجی بر خواص آماری طیف انرژی و ارتباط آن با مهندسی آشوب کوانتومی در گرافن *دولایه* است.

مدل و روش

ساختار مورد مطالعه شامل دو لایه گرافن با آرایش برنال است که در لایه (B_2) در لایه پایین و (A_1) در آن اتم‌های زیرشبکه بالا به‌صورت عمودی بر روی یکدیگر قرار دارند. برای توصیف خواص الکترونی سیستم از مدل تنگ بست استفاده شده است که یکی از موفق‌ترین روش‌ها برای مطالعه مواد دوبعدی مبتنی بر کربن محسوب می‌شود. هامیلتونی کلی سیستم را می‌توان به صورت مجموع برهم‌کنش‌های درون‌لایه‌ای، بین‌لایه‌ای و اثر میدان الکتریکی خارجی به صورت زیر نوشت:

$$H = H_1 + H_2 + H_3 + H_4 \qquad (۱)$$

در رابطه بالا H_1 توصیف کننده هامیلتونی پرش الکترون ها درون لایه‌ای می باشد. این بخش از هامیلتونی به شکل زیر است[5].

$$H_1 = \gamma_0 \sum_{l=1}^{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{l,i}^{\dagger} c_{l,j} + H.C) \qquad (۲)$$

که در آن $\gamma_0 \approx 3ev$ انرژی هوپینگ بین همسایگان نزدیک است.هامیلتونی H_2 که توصیف کننده هامیلتونی بین‌لایه‌ای است به فرم زیر می باشد:

$$H_2 = -\gamma_1 \sum_i \left(c_{A,i,1}^{\dagger} c_{B,i,2} + H.C\right) - \gamma_2 \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{\boldsymbol{B},i,1}^{\dagger} c_{A,j,2} + H.C) - \gamma_3 \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{\boldsymbol{A},i,1}^{\dagger} c_{A,j,2} + c_{\boldsymbol{B},i,1}^{\dagger} c_{B,j,2} + H.C) \qquad (۳)$$

در این رابطه γ_1جهش بین اتم‌های $(A_1 - B_2)$، γ_2 جهش مورب بین$(B_1 - A_2)$ وγ_3 جهش ضعیف‌تر بین$(B_1 - B_2)$ ، $(A_1 - A_2)$ می باشد[5]. H_3 توصیف کننده هامیلتونی اختلاف پتانسیل لایه‌ها می باشد. در حضور میدان الکتریکی عمودی پتانسیل دو لایه متفاوت خواهد بود:

$$H_3 = \frac{u}{2} \sum_i (c_{i1}{}^{\dagger} c_{i1} - c_{i2}{}^{\dagger} c_{i2}) \qquad (۴)$$

در این رابطه u اختلاف پتانسیل بین دو لایه است. این ترم امکان ایجاد شکاف انرژی در ساختار نواری را فراهم می‌آورد. به منظور بررسی اثر ناخالصی‌های جانشینی، در هامیلتونی کل سیستم H_4بیانگر اثر ناخالصی‌ها می باشد. در این روش، تعدادی از اتم‌های کربن به‌صورت تصادفی با اتم‌های بور، نیتروژن یا سیلیسیم جایگزین می شوند. حضور ناخالصی‌ها از طریق تغییر انرژی آن‌سایت اتم جانشین و اصلاح پارامترهای هوپینگ پیوندهای مجاور آن در مدل تنگ‌بست وارد شده است. در حالت بدون کرنش ، بردار پیوند بین سایت‌های i و j با $\boldsymbol{\delta}_{ij}^{(0)}$نمایش داده می‌شود که طول آن برای همسایه‌های نزدیک برابر با طول پیوند کربن–کربن a_0است. در حضور کرنش مکانیکی، این بردار به‌صورت زیر تغییر می‌کند:

$$\boldsymbol{\delta}_{ij} = (I + \epsilon)\, \boldsymbol{\delta}_{ij}^{(0)} \qquad (۵)$$

که در آن $\mathbf{I}$ماتریس واحد و $\boldsymbol{\varepsilon}$تانسور کرنش دوبعدی است:

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} \end{pmatrix} \qquad (۶)$$

در نتیجه، طول پیوند تغییر کرده است$(\boldsymbol{\delta}_{ij}^{(0)} \neq a_0)$. این تغییر طول، منشأ اصلی تصحیح پارامترهای هوپینگ در مدل هامیلتونی می باشد. بنابراین سایر پارامترهای هوپینگ نیز تصحیح پیدا می کنند[8]. پارامتر هوپینگ درون‌لایه‌ای γ_0، که جفت‌شدگی بین همسایه‌های نزدیک در هر لایه را توصیف می‌کند، تحت کرنش مکانیکی به‌صورت وابسته به بردار پیوند اصلاح می‌شود:

$$\gamma_0^{ij} = \gamma_0 \exp\left(-\mu \left(\frac{|\delta_{ij}|}{a_0} - 1\right)\right) \qquad (۷)$$

که در آن μپارامتر گرونایزن الکترونی است که میزان حساسیت پارامترهای هوپینگ الکترونی به تغییرات کرنش–القاشده در طول پیوندهای شبکه را توصیف می‌کند و برای گرافن معمولاً در بازه $\mu \approx 2$ -3قرار دارد[6].کوپلینگ بین‌لایه‌ای γ_1، متناظر با پرش عمودی بین سایت‌های دایمری B_1و A_2، نیز تحت کرنش مکانیکی به فرم زیر باز نرمال‌سازی می‌شود:

$$\gamma_1^{ij} = \gamma_1 \exp\left(-\mu \left(\frac{|d_{ij}|}{d_0} - 1\right)\right) \qquad (۸)$$

در رابطه فوق بردار d_0 پیوند متناظر با پرش عمودی بین سایت‌های دایمری بوده و دارای مؤلفه عمودی غالب است که مقدار آن برای گرافن دو لایه، مقدار تجربی و پذیرفته‌شده $d_0 = 3.35A^{\circ}$ می باشد، همچنین بردار d_{ij} تعیین‌کننده هم‌پوشانی اوربیتال‌های p_zدو اتم دایمری در لایه‌های مختلف است و مستقیماً مقدار پارامتر هوپینگ بین‌لایه‌ای γ_1را کنترل و تحت کرنش مکانیکی به صورت زیر تغییر می کند:

$$\boldsymbol{d}_{ij} = (I + \epsilon)\, \boldsymbol{d}_{ij}^{(0)} \qquad (۹)$$

که در آن $\mathbf{I}$ماتریس واحد برای مختصات درون‌صفحه‌ای و $\boldsymbol{\varepsilon}$تانسور کرنش دوبعدی است. پارامتر γ_2، که پرش مایل بین سایت‌های غیردایمری A_1 و B_2را توصیف می‌کند، نسبت به کرنش مکانیکی حساسیت بالایی دارد. این ترم نقش کلیدی در تقویت ناهمسانگردی طیف انرژی و تغییر توپولوژی سطح فرمی در حضور کرنش ایفا می‌کند. تصحیح این پارامترها به‌صورت زیر مدل‌سازی می‌شود:

$$\gamma_2^{ij} = \gamma_2 \exp\left(-\mu\left(\frac{|\delta_{ij}|}{\delta_0} - 1\right)\right) \qquad (۱۰)$$

و در نهایت، پارامتر γ_3، که مسئول اصلاح عدم تقارن الکترون–حفره می باشد، گرچه γ_3از نظر عددی کوچک‌تر از γ_1و γ_2است، اما در حضور کرنش مکانیکی می‌تواند به‌طور قابل‌توجهی بر خواص ترابردی و ناهمسانگردی رسانندگی اثر بگذارد. این پارامتر نیز تحت کرنش مکانیکی به فرم زیر بازنرمال‌سازی می‌شود:

$$\gamma_3^{ij} = \gamma_3 \exp\left(-\mu\left(\frac{|\delta_{ij}|}{\delta_0} - 1\right)\right) \qquad (۱۱)$$

در رابطه (۱۰)و(۱۱)عبارت δ_{ij} نشان دهنده هوپینگ های مایل بین‌لایه‌ای می باشد، این بردار اتصال به مؤلفه‌های درون‌صفحه‌ای و عمود بر صفحه ($\delta_{ij} = \delta_{ij}^{\perp} + \delta_{ij}^{\parallel}$)تجزیه می‌شوند. مؤلفه عمود بر صفحه $\boldsymbol{\delta}_{ij}^{\perp}$در تقریب مرتبه اول ثابت باقی می‌ماند، در حالی که مؤلفه درون‌صفحه‌ای دستخوش تغییر شده. در زمان اعمال کرنش مکانیکی $\delta_{ij}^{\parallel}$ تغییر می‌کند:

$$\delta_{ij}{}^{\parallel} = (I + \epsilon)\, \delta_{ij}^{\parallel(0)} \qquad (۱۲)$$

که در آن $\boldsymbol{I}$ماتریس واحد برای مختصات درون‌صفحه‌ای و $\boldsymbol{\varepsilon}$تانسور کرنش دوبعدی است[5,7].یکی از مهم‌ترین ابزارهای مطالعه آشوب کوانتومی، بررسی ویژگی‌های آماری طیف انرژی سامانه است. در این میان، توزیع فاصله بین ترازهای انرژی اطلاعات ارزشمندی درباره ماهیت دینامیکی سیستم در اختیار قرار می‌دهد. بر اساس نظریه ماتریس‌های تصادفی، سامانه‌های منظم و انتگرال‌پذیر دارای ترازهای انرژی مستقل بوده و توزیع فاصله ترازهای آن‌ها از آمار پواسون تبعیت می‌کند. در مقابل، در سامانه‌های آشوبناک به دلیل وجود دافعه ترازها، توزیع فاصله ترازهای انرژی به آمار ویگنر–دایسون نزدیک می‌شود .برای توصیف گذار پیوسته میان این دو رژیم آماری، معمولاً از توزیع بروادی استفاده می‌شود که به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$P_\beta(s) = A s^\beta exp\,(-\alpha s^{\beta+1}) \qquad (۱۳)$$

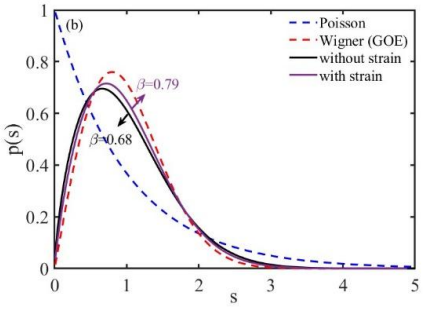
$$A = (1+\beta)\alpha \qquad (۱۴)$$

$$\alpha = \left[\Gamma\left(\frac{\beta+2}{\beta+1}\right)\right]^{\beta+1} \qquad (۱۵)$$

در روابط فوق، sفاصله نرمال‌شده بین دو تراز انرژی مجاور پس از فرآیند آنفولدینگ طیف و Γتابع گاما است. پارامتر β (پارامتر بروادی) میزان آشوب کوانتومی سامانه را مشخص می‌کند؛ به‌طوری‌که در $\beta=0$ توزیع به پواسون کاهش یافته و بیانگر سامانه‌های منظم و حالت‌های جایگزیده است، در حالی‌که در $\beta=1$توزیع به ویگنر–دایسون نزدیک شده و نشان‌دهنده سامانه‌های آشوبی و حالت‌های ناجایگزیده است. بنابراین، βشاخص مناسبی برای توصیف گذار از نظم به آشوب کوانتومی و نیز گذار جایگزیدگی به ناجایگزیدگی محسوب می‌شود.[4]

نتایج و بحث

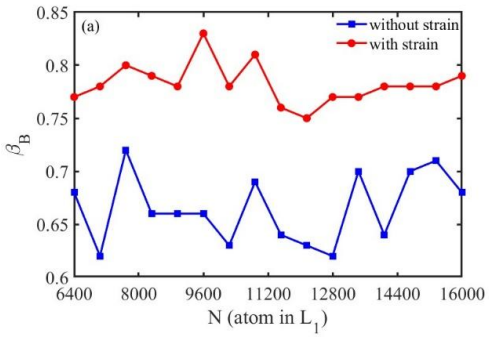
به منظور بررسی اثر کرنش مکانیکی بر خواص آماری طیف انرژی گرافن دولایه، ابتدا توزیع فاصله ترازهای انرژی مجاور و پارامتر بروادی برای ساختارهای مختلف محاسبه شد. نتایج نشان می‌دهند که اعمال کرنش مکانیکی تغییرات قابل توجهی در آمار طیفی سامانه ایجاد کرده و موجب افزایش همبستگی میان ترازهای انرژی می‌شود.



شکل ۱: نمودار P(s) برای دو حالت بدون کرنش و حالت تحت کرنش به مقدار $\boldsymbol{s = 1}$ همسان در هر دو لایه . $\boldsymbol{V_b = 0.5v}$ و N=20000

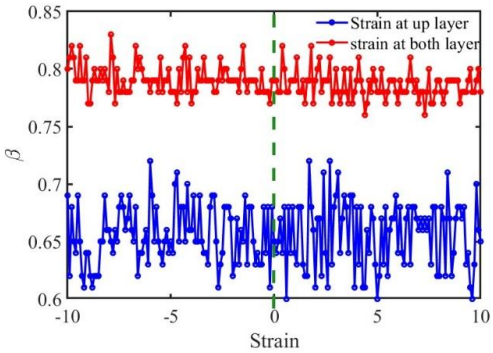
مطابق شکل ۱، در حالت بدون کرنش، توزیع فاصله ترازها انحراف محسوسی از توزیع ویگنر–دایسون داشته و سامانه در یک رژیم میانی میان رفتار پواسونی و ویگنری قرار دارد. با اعمال کرنش مکانیکی، قله توزیع به سمت شکل مشخصه توزیع ویگنر–دایسون حرکت کرده و دافعه ترازها افزایش می‌یابد. این رفتار بیانگر افزایش آشوب کوانتومی و تقویت همبستگی‌های طیفی در سامانه است.به منظورمطالعه و کمی‌سازی اثر تغییرات ابعاد شبکه گرافن دولایه،

پارامتر برودی از برازش توزیع فاصله ترازها استخراج شد. مطابق شکل ۲، مقدار پارامتر برودی در تمامی ابعاد بررسی‌شده در حضور کرنش افزایش می‌یابد. این نتیجه نشان می‌دهد که کرنش مکانیکی با تغییر ساختار هندسی شبکه و اصلاح پارامترهای هوپینگ، سامانه را به سمت رژیم‌های آشوبی‌تر سوق می‌دهد.

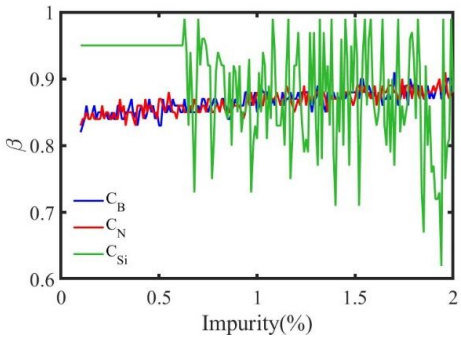


شکل۲: نمودار تغییرات پارامترβ نسبت به ابعاد شبکه در هر لایه در دو حالت، بدون اعمال کرنش مکانیکی و همراه با کرنش به مقدار $s = 1$

در ادامه، اثر نحوه توزیع کرنش بر آشوب کوانتومی مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج آمده از شکل ۳ نشان می‌دهد که اعمال کرنش به هر دو لایه نسبت به کرنش تک‌لایه‌ای تأثیر قوی‌تری بر افزایش پارامتر برودی دارد. در این حالت، مقدار پارامتر برودی به مقادیر نزدیک‌تر به حد ویگنر–دایسون رسیده و بیانگر افزایش دافعه ترازها و گسترش بیشتر توابع موج الکترونی است. به منظور بررسی نقش ناخالصی‌ها، اثر جانشینی اتم‌های بور، نیتروژن و سیلیسیم در ساختار تحت کرنش مطالعه شد (شکل ۴).



شکل ۳: نمودار تغییرات پارامترβ هر دو لایه گرافن به طور متقارن و یکسان تحت کرنش مکانیکی **به مقدار $s = 1$** و زمانی که تنها لایه بالایی تحت کرنش$s = 1$ قرار دارد(N=10000 و v V=0.5،)



شکل۴: نمودار تغییرات پارامتر آشوب β در برابر غلظت سه نوع ناخالصی مختلف بور (B)، نیتروژن (N) وسیلیسیم (Si) هر دو لایه تحت کرنش$s = 1$

نتایج نشان می‌دهد که بور و نیتروژن با افزایش پارامتر برودی، موجب تقویت رفتار آشوبی و افزایش ارگودیسیتی کوانتومی می‌شوند. در مقابل، سیلیسیم باعث کاهش پارامتر برودی به‌دلیل اعوجاج موضعی شبکه و افزایش پراکندگی الکترونی می‌گردد، هرچند سامانه همچنان به طور کامل به رژیم پواسونی وارد نمی‌شود.

نتیجه‌گیری

نتایج نشان میدهند که کرنش مکانیکی یکی از مؤثرترین عوامل کنترل آمار طیفی در گرافن دولایه بوده و با افزایش دافعه ترازها و تقویت همبستگی های طیفی، آشوب کوانتومی را در این سامانه افزایش میدهد. همچنین اثر ناخالصیها به نوع اتم جانشین وابسته بوده و میتواند موجب تقویت یا تضعیف رفتار آشوبی سیستم شود.

مرجع‌ها

[1] Lee, Changgu, Xiaoding Wei, Jeffrey W. Kysar, and James Hone. *Science* 321, no. 5887 (2008): 385-388.
[۲] Hou, Yuan, Jingzhuo Zhou, Minmin Xue, Maolin Yu, Ying Han, Zhuhua Zhang, and Yang Lu. *Small* 21, no. 28 (2025): 2311185.
[۳] Behnia, S., R. HabibpourBisafar, and F. Rahimi. *Superlattices and Microstructures* 142 (2020): 106498.
[۴] Haake, Fritz. "Quantum signatures of chaos." In *Quantum coherence in mesoscopic systems*, pp. 583-595. Boston, MA: Springer US, 1991.
[۵] McCann, Edward, and Mikito Koshino. *Reports on Progress in physics* 76, no. 5 (2013): 056503.
[۶] Pereira, Vitor M., A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres. *Physical Review B* 80, no. 4 (2009): 045401.
[۷] Wong, Jen-Hsien, Bi-Ru Wu, and Ming-Fa Lin. *The Journal of Physical Chemistry C* 116, no. 14 (2012): 8271-8277.

چهارچوب نظریه بس‌ذره ای برای آمار کوانتومی یکپارچه: توابع گرین و نظریه پاسخ خطی

دورنما، مژگان[۱]؛ اسمعیلی، حبیب[۲]؛ بیرامی، محمد[۳]؛ نطاق نجفی، مرتضی[۴]

[۱] دانشکده علوم پایه دانشگاه محقق اردبیلی، خیابان دانشگاه، اردبیل

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل

چکیده

در این پژوهش، نظریه‌ی بس‌ذره ای برای ذرات با آمار کوانتومی یکپارچه (کیوان‌ها) در دماهای صفر و غیرصفر توسعه شده است. با استفاده از بسط ماتریس S و قضیه ویک تعمیم‌یافته، تابع گرین تک‌ذره ای در فرمالیسم ماتسوبارا محاسبه شده و فرکانس‌های ماتسوبارای تعمیم‌یافته به دست می‌آیند که به پارامتر آماری δ وابسته هستند. در توصیف مایع فرمی، تابع طیفی و چگالی حالت‌ها محاسبه شده و وابستگی آن‌ها به δ نشان داده شده است. همچنین تابع دی‌الکتریک در تقریب RPA استخراج گردیده که نشان می دهد رفتار مجانبی آن در امواج بلند به تقریب توماس- فرمی تعمیم‌یافته پوششی و در امواج کوتاه به پاسخ ذرات لخت میل می‌کند. نتایج نشان می‌دهد که با کاهش δ، بردار موج توماس-فرمی افزایش یافته و قدرت پوششی بیشتر می‌شود.

واژه‌های کلیدی : *آمار کوانتومی یکپارچه، تابع گرین ماتسوبارا، قضیه ویک تعمیم‌یافته، تابع دی‌الکتریک، تقریب فاز تصادفی، مایع فرمی.*

Framework of Many-Body Theory for Quantum Unified Statistics: Green Functions and Linear Response Theory

Dournama, Mozhgan[1]; Esmaili, Habib[2]; Beyrami, Mohammad[3]; Nattagh Najafi, Morteza[4]

[1] Faculty of Basic Sciences, University of Mohaghegh Ardabili, Daneshgah Street, Ardabil, Iran

2 Department of Physics, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil, Iran

In this research, a many-body theory has been developed for particles with unified quantum statistics (quons) at zero and non-zero temperatures. Using the S-matrix expansion and the generalized Wick's theorem, the single-particle Green's function in the Matsubara formalism is calculated, and generalized Matsubara frequencies are obtained, which depend on the statistical parameter δ. In the description of the Fermi liquid, the spectral function and the density of states are computed, and their dependence on δ is shown. Furthermore, the dielectric function within the RPA approximation is derived, indicating that its asymptotic behavior in the long-wavelength limit approaches a generalized Thomas–Fermi screening, while in the short-wavelength limit it tends to the bare particle response. The results show that as δ decreases, the Thomas–Fermi wave vector increases and the screening becomes stronger.

Keywords: *Quantum unified statistics, Matsubara Green's function, Generalized Wick's theorem, Dielectric function, Random phase approximation (RPA), Fermi liquid.*

PACS No.(70)

مقدمه

درک خواص ماکروسکوپیک ماده به قوانین آماری حاکم بر ذرات بنیادی وابسته است. بسط چارچوب‌های معمولی بوز–اینشتین و فرمی–دیراک به سیستم‌های با ابعاد پایین، توپولوژیک و همبسته قوی، محدودیت‌های این پارادایم را آشکار ساخته است. این محدودیت‌ها منجر به جستجو برای ساختارهای آماری تعمیم‌یافته،

از جمله آمار کوانتومی بینهایت شده است که با حذف کامل قیود تقارنی جایگشت ذرات، فضای نظری جدیدی برای کشف پدیده‌های کوانتومی می‌گشاید. پیش‌زمینه این تحولات شامل معرفی آنیون‌ها توسط ویلچک (آمار کسری در دو بعد، پایه‌گذار اثر هال کوانتومی کسری) ، آمار طرد کسری هالدین (تعمیم اصل پائولی ، و نیز آمار بینهایت یا کیوآن[۱] توسط گرینبرگ (با رابطه جابجایی تعمیم‌یافته) است که مدل‌سازی سیستم‌هایی با اشغال نامحدود حالت‌های کوانتومی را ممکن می‌سازد. با وجود پیشرفت در نظریه آمار کسری و آنیون‌ها، توسعه یک چارچوب بس‌ذره ای منسجم برای آمار بینهایت همچنان یک چالش باز است. کارهای اولیه عمدتاً بر جنبه‌های جبری متمرکز بودند و تلاش‌ها برای ساخت نظریه میدان کوانتومی دمای متناهی برای کیوآن‌ها به فرمول‌بندی‌های پایه محدود مانده و به نظریه اختلال عملیاتی یا ابزارهای محاسباتی منجر نشده است [۳،۴]. هدف اصلی این تحقیق، پر کردن این شکاف با ارائه یک نظریه بس‌ذره ای قابل اعمال و مجهز به محاسبات برای آمار بینهایت است که بتواند بین ساختار جبری ارتباط برقرار کند.

در این پژوهش، یک نظریه بس‌ذره ای منسجم برای ذرات با آمار کوانتومی یکپارچه (کیوان‌ها) ارائه می‌دهیم. با معرفی عملگر آماری ($\hat{q}$) یا پارامتر (δ)، فضای فاخ تعمیم‌یافته را ساخته و روابط جابجایی وابسته به اعداد اشغال را فرمول‌بندی می‌کنیم. سپس نشان می‌دهیم توزیع اشغال میانگین در حد $\delta=1$ به آمار فرمی–دیراک و در حد $\delta=0$ به آمار بوز–اینشتین کاهش می‌یابد. با استفاده از بسط S ماتریس و قضیه ویک تعمیم‌یافته، تابع گرین تک‌ذره ای را در نمایش زمان موهومی (فرمالیسم ماتسوبارا) محاسبه کرده و فرکانس‌های ماتسوبارای تعمیم‌یافته را به دست می‌آوریم. در ادامه، تابع دی‌الکتریک را در تقریب فاز تصادفی[۲] استخراج کرده و رفتار آن را در حدود امواج بلند و کوتاه تحلیل می‌نماییم[۹،۱۰]. همچنین چگالی حالت‌ها و اثر پارامتر آماری بر غربالگری توماس–فرمی و پاسخ دی‌الکتریک استاتیک را مورد بررسی قرار می دهیم[۸]. این چارچوب ابزاری توانمند برای ارتباط دادن پارامتر آماری به پاسخ الکترونی و مطالعه سیستم‌های با آمار میانی فراهم می‌آورد. در این کار، ذراتی با آمار کوانتومی تعمیم‌یافته (یکپارچه) بررسی می‌شوند که در آن تبادل دو ذره توسط عملگر آماری $\hat{q}$ توصیف می‌شود [۱]:

$$\hat{\Psi}(\xi_1 \dots \xi_j \dots \xi_i \dots \xi_N) = \hat{q}_{ij}\hat{\Psi}(\xi_1 \dots \xi_j \dots \xi_i \dots \xi_N) \quad (1)$$

مقادیر ویژه عملگر $\hat{q}$ برابر با ± 1 بوده و امکان درونیابی بین رفتارهای بوزونی و فرمیونی را فراهم می‌کند. عملگرهای خلق و فنا از رابطه جابجایی $[A.B]_{\hat{q}} \equiv AB - \hat{q}BA$ تبعیت می‌کنند[۳] :

$$\left[\hat{a}_v . \hat{a}^{\dagger}_{v'}\right]_{\hat{q}} = {}_1\hat{q}\delta_{vv'} \quad (2)$$

${}_1\hat{q}$ یک عملگر همانی وابسته به پیکربندی است که برای حالت‌های با بیش از یک ذره در یک حالت به صورت [۱]:

$${}_1\hat{q} = \begin{cases} 1 & if\ all\ n_{v_i} = 0\ or\ . \\ \frac{1}{2}(1+\hat{q}) & otherwise. \end{cases} \quad (3)$$

است. با تعریف عملگرهای خلق و فنا، فضای فاخ روی حالت خلأ ساخته می شود. برای یک گاز ایده‌آل از این ذرات، تابع پارش بزرگ‌کانونی به صورت زیر است [۱]:

$$\mathcal{Z}(\delta) = \prod_v \frac{1-\delta z^2 e^{-2\beta\epsilon_v}}{1- ze^{-\beta\epsilon_v}} \quad (4)$$

که در آن δ پارامتر آماری سیستم است. از این تابع پارش، توزیع اشغال میانگین بر اساس $\langle n_v \rangle = \frac{1}{\beta}\frac{\partial \ln Z_n}{\partial \mu}$ استخراج می‌شود:

$$\langle n_v \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_v-\mu)}-1} - \frac{2\delta}{e^{2\beta(\epsilon_v-\mu)}-\delta} \quad (5)$$

که در حد $\delta=0$ به توزیع بوز–اینشتین و در حد $\delta=1$ به توزیع فرمی–دیراک تبدیل می‌شود[۱] . عملگر ترتیب زمانی تعمیم‌یافته را به صورت زیر معرفی می کنیم:[۴]

$$T_{\hat{q}}[\hat{O}_1(t)\hat{O}_2(t')] = \Theta(t-t')\hat{O}_1(t)\hat{O}_2(t') + \hat{q}^m\Theta(t'-t)\hat{O}_2(t')\hat{O}_1(t) + \cdots \quad (6)$$

که در آن m تعداد جابجایی‌های لازم بین عملگرها است. بر اساس این تعریف، تابع گرین تک‌ذره‌ای سیستم به صورت خواهد بود[۶]:

$$iG_{\hat{q}}(p;t.t') = \frac{\langle\Psi_o|T_q\left[a_p(t)a_p^{\dagger}(t')\right]|\Psi_o\rangle}{\langle\Psi_o|\Psi_o\rangle} \quad (7)$$

به این ترتیب می توان عملگر تکامل زمانی S(t,t′) را از طریق بسط دایسون به صورت زیر نوشت:

$$S(t.t') = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i)^n}{n!}\int_{t'}^{t}dt_1\int_{t'}^{t}dt_{12}\dots\int_{t'}^{t}dt_n \times T[H_{int}(t_1)H_{int}(t_2)\dots H_{int}(t_n)] \quad (8)$$

[۱] Quon

[۲] RPA

با تعریف عملگر تکامل $S(t,t')$، مقدار انتظاری زمانی‌مرتب‌شده‌ی دو عملگر در حالت پایه‌ی برهم‌کنشی $(|\Psi 0\rangle)$ به صورت زیر به بسط اختلالی بر حسب حالت پایه‌ی غیربرهم‌کنشی $(|\Phi 0\rangle)$ تبدیل می‌شود (قضیه‌ی گل-مان و لو)[۶]:

$$\frac{\langle\Psi_o|T_{\hat{q}}\left[\hat{O}_H^{(1)}(t)\,\hat{O}_H^{(2)}(t')\right]|\Psi_o\rangle}{\langle\Psi_o|\Psi_o\rangle}$$
$$=\frac{\Theta(t-t')}{\langle\Psi_o|\hat{S}|\Psi_o\rangle}\langle\Phi_o\left|\sum_{v=0}^{\infty}(-i)^v\frac{1}{v!}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\ldots\int_{-\infty}^{\infty}dt_v\right.$$
$$\times\,{}^1\hat{q}T\left[\hat{H}_{int}(t_1)\ldots\hat{H}_{int}(t_v)\,\hat{O}_{int}^{(1)}(t)\hat{O}_{int}^{(2)}(t')\right]|\Phi_o\rangle$$
$$+\frac{\langle\hat{q}\rangle^m\Theta(t'-t)}{\langle\Psi_o|\hat{S}|\Psi_o\rangle}\langle\Phi_o\left|\sum_{v=0}^{\infty}(-i)^v\frac{1}{v!}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\ldots\int_{-\infty}^{\infty}dt_v\right.\times$$
$$\left.{}^1\hat{q}T\left[\hat{H}_{int}(t_1)\ldots\hat{H}_{int}(t_v)\,\hat{O}_{int}^{(1)}(t')\hat{O}_{int}^{(2)}(t)\right]|\Phi_o\rangle\right. \qquad (۹)$$

این فرمول‌بندی، پایه‌ی لازم برای بسط اختلالی، به‌کارگیری قضیه ویک تعمیم‌یافته و در نهایت محاسبه توابع گرین و توابع پاسخ در نظریه بس‌ذره ای کیوآن‌ها را فراهم می‌کند. قضیه ویک تعمیم‌یافته بیان می‌دارد، یک حاصلضرب ترتیب زمانی از چند میدان برابر با مجموع همه کانترکشن های زوج (جفت‌شدگی‌ها) است [۵]. هر کانترکشن بین عملگر فنا و خلق در حالت غیر برهمکنشی متناسب با تابع گرین غیر برهمکنشی(آزاد) است [۸]:

$$\widehat{\hat{\psi}_I(X\tau)\hat{\psi}_I^{\dagger}(X'\tau')}=-G_{\hat{q}}^{\cdot}(X\tau.X'\tau') \qquad (۱۰)$$

توابع پاسخ سیستم

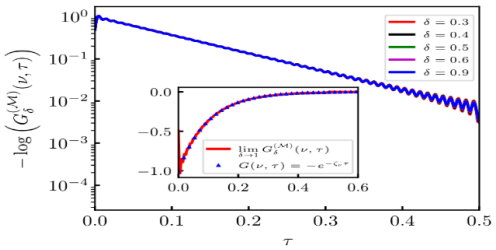
تابع گرین ماتسوبارای تک‌ذره‌ای در زمان موهومی به صورت میانگین آماری حاصلضرب دو میدان تعریف می‌شود[۶]:

$$G_{\hat{q}}^{M}(X\tau.X'\tau)=-\langle T_{\hat{q}}\left[\hat{\psi}_I(X\tau)\hat{\psi}_I^{\dagger}(X'\tau')\right]\rangle$$
$$=-\frac{1}{Z_{\hat{q}}}Tr\left(e^{-\beta(H-\mu N)}T_{\hat{q}}\left[\hat{\psi}_I(X\tau)\hat{\psi}_I^{\dagger}(X'\tau')\right]\right) \qquad (۱۱)$$

تعریف می شود. تبدیل فوریه این تابع، نمایش فرکانسی تابع گرین است و قطب‌های آن، فرکانس‌های ماتسوبارای تعمیم‌یافته هستند. فرکانس‌های ماتسوبارا به پارامتر آماری (δ) وابستگی دارند[۷] :

$$i\beta\omega_n^{(j)}=(2-j)2\,in\pi+(-1+j)\frac{i(2\,n\pi)+\ln\delta}{2} \qquad (۱۲)$$

ازاین‌رو، تمام کمیت های بس ذره ای مبتنی بر تابع گرین، اثرات پارامتر آماری (δ) را نشان می دهند.



شکل ۱ : وابستگی فرکانس‌های ماتسوبارای تعمیم‌یافته به پارامتر آماری (δ)

در شـــکل (۱) مشـــاهده می‌شـــود با تغییر پارامتر آماری، مکان قطب‌های تابع گرین تغییر کرده و طیف فرکانســی ســامانه از رفتار بوزونی به رفتار فرمیونی گذار می‌کند. تابع گرین دمای متناهی با اســتفاده از فرمالیســم ماتســوبارا با اســتفاده از عدد اشــغال در زمان موهومی به صورت زیر است[۱]:

$$G_\delta^{M0}(v.\tau)=-e^{-\xi v^T}\left(1+(1-2\,\delta)\left(\frac{1}{e^{\beta\xi v}-1}-\frac{1}{e^{2\beta\xi v}-\delta}\right)\right)$$
$$=-e^{-\xi v^T}(1+\vartheta n_v) \qquad (۱۳)$$

با فرض وجود تناظر یک به یک بین حالت‌های سامانه‌غیربرهم‌کنش (با آمار تغییرشکل‌یافته) و سامانه برهم‌کنشی (با آمار معمولی)، تابع گرین تک ذره ای در تقریب دایسون به صورت زیر است[۸]:

$$\mathcal{G}^R\left(p.i\omega_n^{(j)}\right)=\frac{\left(1+\vartheta n(\xi_p.T)\right)}{i\omega_n^{(j)}-\xi_p\,\Sigma\left(p.i\omega_n^{(j)}\right)} \qquad (۱۴)$$

که Σ خودانرژی ا ست. با بـ سط خود انرژی حول قطب شبه‌ذره و اعمال شـــرط روی-پوســـته، عامل بازبهنجارش تابع موج به دســـت می‌آید[۸]:

$$Z_p=\frac{\left(1+\vartheta n\left(\xi_p.T\right)\right)}{1-\frac{\partial\Sigma}{\partial(i\omega_n^{(j)})}\Big|_{i\omega_n^{(j)}=\bar{\xi}_p}} \qquad (۱۶)$$

پس از **گسترش تحلیلی**[۳] به فرکانس‌های حقیقی، تابع طیفی به صورت یک قله دلتایی در انرژی بازبهنجارش ظاهر می‌شود. این عامل بازبهنجارش به پارامتر آماری δ و توزیع اشغال تعمیم‌یافته وابسته است. چگالی حالت‌ها نیز با ضریبی متناسب با F تصحیح می‌شود. در حد $\delta=1$ ، تمام نتایج به حالت استاندارد فرمیونی (مدل مایع فرمی لاندائو) کاهش می‌یابد[۸]:

$$DOS_{(\epsilon)}=F(\epsilon)\frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2\,m}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\epsilon} \qquad (۱۷)$$

که چگالی حالات تعیمی یافته است[۲].

[۳] analytic continuation

برای بررسی پاسخ الکترونی، تابع دی‌الکتریک در تقریب فاز تصافی با تعریف تابع قطبش مرتبه‌ی صفر (به صورت ضرب دو تابع گرین تک‌ذره ای) محاسبه شده است و پس از تبدیل به فضای تکانه–فرکانس ماتسوبارا به شکل زیر درمی‌آید[۸]:

$$\prod_{\delta}^{\cdot}\left(Q.\omega_n^{(j)}\right)=\frac{\vartheta}{\beta}\sum_{j\prime.m}\int\frac{d^{\mathrm{r}}p}{(\mathrm{r}\,\pi)^{\mathrm{r}}}\left(-\frac{B_{\delta(p)}\left(e^{\beta(i\epsilon_m^{(j\prime)}-\xi p)}-\mathrm{1}\right)}{i\epsilon_m^{(j^{\cdot})}-\xi_p}\right)$$
$$\times\left(-\frac{B_{\delta(p+Q)}\left(e^{\beta(i\epsilon_m^{(j\prime)}+i\omega_n^{(j)}-\xi_{p+Q})}-\mathrm{1}\right)}{i\epsilon_m^{(j\prime)}+i\omega_n^{(j)}-\xi_{p+Q}}\right) \qquad (۱۸)$$

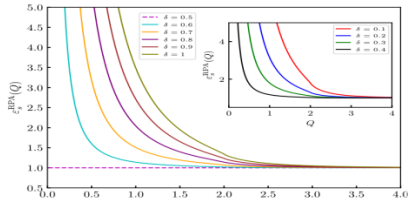
با اعمال تقریب فاز تصادفی، تابع دی‌الکتریک دینامیکی به دست می‌آید:

$$\epsilon^{RPA}\left(\omega_n^{(j)}.Q\right)=\mathrm{1}-v.(Q)\prod_{\delta}^{\cdot}\left(\omega_n^{(j)}.Q\right)$$
$$=\mathrm{1}-\frac{\mathrm{r}me^{\mathrm{r}}B_{\delta}^{\mathrm{r}}p_E^{(\delta)}}{h^{\mathrm{r}}\pi Q^{\mathrm{r}}}\left(\frac{p_E^{(\delta)}}{\mathrm{r}\,Q}\right)\sum_{i=\mathrm{1}}^{\mathrm{r}}S_i(\delta)\left(Z_i+\frac{\mathrm{1}-Z_i^{\mathrm{r}}}{\mathrm{r}}\ln\frac{Z_i+\mathrm{1}}{Z_i-\mathrm{1}}\right) \qquad (۱۹)$$

در حد ایستا $(\omega\to 0)$ و برای یک گاز فرمی تعمیم‌یافته، نتیجه به شکل زیر ساده می‌شود[۱۰]:

$$\varepsilon_s^{RPA}(Q)\equiv\varepsilon_{\mathrm{1}}^{RPA}(\cdot.Q)=\mathrm{1}+\left(\frac{Q_{TF}^{(\delta)}}{Q^{\mathrm{r}}}\right)^{\mathrm{r}}F(x_\delta) \qquad (۲۰)$$

در امواج بسیار بلند، تابع دی‌الکتریک به پوشش[۴] کامل توماس–فرمی همگن میل می کند. در امواج بسیار کوتاه، تابع دی‌الکتریک متناسب با پاسخ ذرات لخت (غیربرهم‌کنشی) عمل می کند. هرچه δ از ۱ به ۱– کاهش یابد، بردار موج توماس- فرمی تعمیم یافته $\mathrm{QTF}(\delta)$ افزایش می‌یابد، یعنی قدرت پوششی بیشتر می‌شود و سیستم شبیه‌تر به بوزون‌های پوششی می‌گردد[۱۰] .



شکل ۲: وابستگی تابع دی‌الکتریک ایستا به تکانه و پارامتر آماری

در **شکل ۲** در تکانه‌های کوچک با کاهش δ از۱ به سمت مقادیر کوچک‌تر، $\epsilon 1$به شدت افزایش می‌یابد. این یعنی قدرت پوششی قوی‌تر می‌شود. در تکانه‌های بزرگ تمام منحنی‌ها به مقدار ۱ نزدیک می‌شوند. این نشان می‌دهد که در مقیاس‌های کوچک، پاسخ سیستم به پاسخ ذرات غیربرهم‌کنشی (لخت) میل می‌کند.

نتیجه گیری

در این پژوهش نشان دادیم که با توسعه نظریه‌ی بس‌ذره ای برای کیوآن ها و استفاده از قضیه ویک تعمیم‌یافته [۵]و تابع گرین تک‌ذره ای در فرمالیسم ماتسوبارا [۶] می توان پاسخ الکترونی سیستم های با آمار میانی را بدست آورد. این چارچوب نظری، نه تنها امکان محاسبه کمیتهای پایه مانند چگالی حالتها و رسانندگی الکتریکی را فراهم می آورد، بلکه به دلیل حفظ ساختار جبری کیوآنها، قابلیت بسط به سیستمهای ناهمگن و برهمکنشی قوی را نیز داراست. نتایج نشان می‌دهد که پارامتر آماری δ تأثیر مستقیمی بر فرکانس‌های ماتسوبارا [۷]، تابع طیفی و پاسخ دی‌الکتریک [۹، ۱۰] دارد و در حد امواج بلند، غربالگری توماس–فرمی تقویت می‌شود که نشان‌دهنده‌ی جاذبه‌ی آماری مؤثر در این سیستم‌هاست[۲].

مرجع‌ها

[1] Yan, C.-T. (2021). Statistical model describing Bose-Einstein and Fermi-Dirac statistics. *Physical Review E*, 104(6), 064118.
[2] Esmaili, H., Mohammadzadeh, H., Biderang, M., & Nattagh Najafi, M. (2024). Thermodynamic geometry of a system with unified quantum statistics. *Physical Review E* (accepted).
[3] Greenberg, O. W. (1991). Example of infinite statistics. *Physical Review D*, 43(12), 4111.
[4] Lu, Y. (2024). A new interacting Fock space, the Quon algebra with operator parameter and its Wick's theorem. *arXiv preprint*, 2401.12345.
[5] Kong, L., Nooijen, M., & Mukherjee, D. (2010). An algebraic proof of generalized Wick theorem. The Journal of Chemical Physics, 132(23), 234107.
[6] Fetter, A. L., & Walecka, J. D. Quantum Theory of Many-Particle Systems. Dover Publications, 2003.
[7] Seifi, M., Ebadi, Z., Agahi, H., Mehri-Dehnavi, H., & *Mohammadzadeh, H. (2025). Mittag-Leffler* quantum statistics and thermodynamic anomalies. *Physical Review E*, 111, 054114.
[8] Mahan, G. D. (2000). *Many-Particle Physics*. Springer.
[9] Fetter, A. L., & Walecka, J. D. (2003). *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. Dover Publications.
[10] Naghizadeh Ardabili, M. H., Yahyayi Monem, O., Nattagh Najafi, M., & Mohammadzadeh, H. (2025). Haldane-Inspired Generalized Statistics. *arXiv preprint*, 2511.02546

[۴] screening

بررسی ویژگی‌های الکترونی و مغناطیسی اسپینل $NiCo_2O_4$ با استفاده از نظریه تابعی چگالی

مصلح، زهرا [۱و۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان 84156-83111 ایران
[۲] ایران- تهران- دانشگاه جامع علمی کاربردی- مرکز علمی کاربردی پیام

چکیده

محاسبات ابتدا به ساکن ابزار مناسبی برای بررسی ساختار و درک خصوصیات مواد است و می‌تواند گام موثری در حرکت به سمت ساخت آزمایشگاهی مواد جدید باشد. در این مقاله ویژگی‌های ساختاری $NiCo_2O_4$ با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن مورد بررسی قرار گرفته است. بررسی این ماده به دلیل پیچیدگی‌های ساختاری با چالش‌های زیادی روبرو بود. در نهایت نتایج نشان داد این ماده یک ماده نیم‌فلز با گاف ۱٫۴۵ الکترون ولت است. همچنین محاسبات اسپین‌قطبیده وجود رفتار مغناطیسی قابل توجه در این ترکیب را تأیید کرد. این نتایج بیانگر نقش مؤثر یون‌های فلزی در تعیین خواص الکترونی و مغناطیسی این ماده است.

واژه های کلیدی: *محاسبات ابتدا به ساکن، بررسی ویژگی‌های الکترونی و مغناطیسی، ساختار اسپینلی.*

First principles study of the electronic structure and magnetic properties of spinel $NiCo_2O_4$

Mosleh, Zahra[1,2]

[1] *Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran.*
[2] *Center of Payam- University of Applied Science and Technology- Tehran- Iran.*

Abstract

First principles calculations are a valuable tool for probing the structure and properties of materials and can serve as an effective step toward the laboratory synthesis of new compounds. In this paper, we investigate the structural properties of $NiCo_2O_4$ using first principles calculations. Despite challenges arising from the material's structural complexity, our results show that $NiCo_2O_4$ is a semiconductor with a band gap of 1.45 eV. Additionally, spin polarized calculations revealed considerable magnetic behavior in this compound. These findings highlight the crucial role of metal ions in governing the electronic and magnetic properties of the material.

Keywords: Density Functional Theory, Electronic and magnetic properties, Spinel structure.
PACS No 75

مقدمه

تقاضای جهانی رو به رشد برای منابع انرژی و کاهش سوخت‌های فسیلی یکی از مسائل عمده جهانی است. علاوه بر این بهره‌برداری از سوخت‌های فسیلی در طیف وسیعی از بخش‌های حمل و نقل، صنعتی و خانگی، با ایجاد آلودگی محیط زیست و گرمایش جهانی، گازهای نامطلوبی به ویژه CO_2 تولید می‌کند [۱].

امروزه با افزایش تقاضا به‌منظور ذخیره‌سازی انرژی و استفاده کارآمدتر از انواع انرژی توسعه دستگاه‌های ذخیره‌سازی انرژی با چگالی توان بالا و طول عمر زیاد به یکی از موضوعات مهم در علم مواد تبدیل شده است. در این میان ابرخازن‌ها به دلیل توان بالا، نرخ شارژ/ دشارژ سریع و پایداری چرخه‌ای عالی توجه زیادی را به خود معطوف کرده است. نتایج حاکی از آن است که عملکرد ابرخازن‌ها تا حد زیادی به ماده الکترود بستگی دارد از این رو یافتن موادی با

ظرفیت ویژه بالا، رسانندگی عالی و پایداری شیمیایی مناسب چالش کلیدی محسوب می‌شود.[۲].

در سال‌های اخیر اکسیدهای دوتایی فلزات واسطه (مانند $NiCo_2O_4$) به دلیل خواص الکتروشیمیایی مناسب و قیمت پایین به عنوان گزینه مناسب برای ابرخازن مطرح شده است. در چنین ساختارهایی یون‌های فلزی در دو جایگاه مختلف چهاروجهی و هشت‌وجهی قرار می‌گیرند. این آرایش ساختاری و نیز دارا بودن چندین حالت اکسایش برای یون‌های فلزی باعث می‌شود این مواد واکنش‌های ردوکس فعالی از خود نشان دهد. علاوه بر این ماهیت نیم‌رسانایی این مواد امکان تنظیم خواص الکترونی را از طریق آلایش در ساختار ممکن می‌سازد. این ویژگی‌ها این مواد را به عنوان گزینه مناسبی برای کاربردهای ابرخازنی تبدیل کرده است [۳].

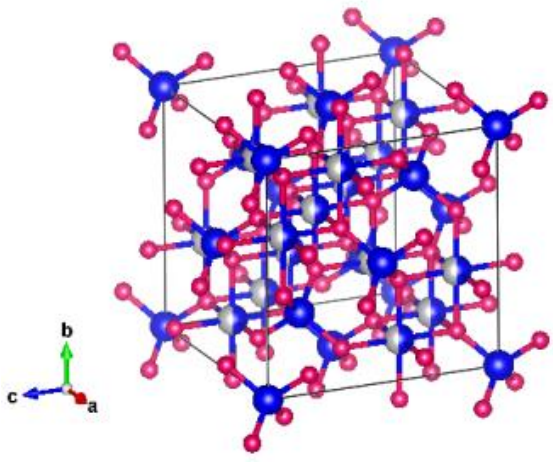
در این مقاله با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی $NiCo_2O_4$ مورد بررسی قرار گرفته است.

روش انجام محاسبات

در این مقاله به بررسی ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی $NiCo_2O_4$ پرداخته شده است. این ماده ساختار اسپینل با گروه فضایی Fd-3m دارد [۱]. محاسبات ابتدا به ساکن با استفاده از کد کوانتوم اسپرسو انجام شد و از شبه‌پتانسیل‌های GBRV استفاده شد. در ضمن با توجه به مغناطیسی بودن نمونه مورد بررسی محاسبات به صورت قطبیده اسپینی انجام شد. با توجه به اینکه ترکیب مورد بررسی شامل عناصر واسطه $3d$ است به منظور توصیف دقیق‌تر اثرات همبستگی الکترونی مربوط به الکترون‌های موجود در اوربیتال d تصحیح همبسته قوی GGA+U مورد استفاده قرار گرفت. پارامتر هابارد برای اتم نیکل و کبالت با استفاده از مقالات قبلی [٤] به ترتیب ٦ و ٥٫١٥ الکترون‌ولت انتخاب شد. در انجام تمام محاسبات از پارامتر شبکه تجربی (a=b=c=۸٫۲۱) استفاده شده است [۵]. در انجام محاسبات انرژی قطع بسط تابع موج و انرژی قطع بسط چگالی بار به ترتیب ٤٠ و ٤٠٠ ریدبرگ انتخاب شد. معیار همگرایی انرژی 10^{-6} ریدبرگ انتخاب شد. همچنین مش‌بندی ناحیه اول بریلوئن با روش مورنخوست- پک تعیین شد. این مش‌بندی به نحوی انجام شد که فاصله نقاط ۰٫۱۵ بر آنگستروم باشد.

نتایج و بحث

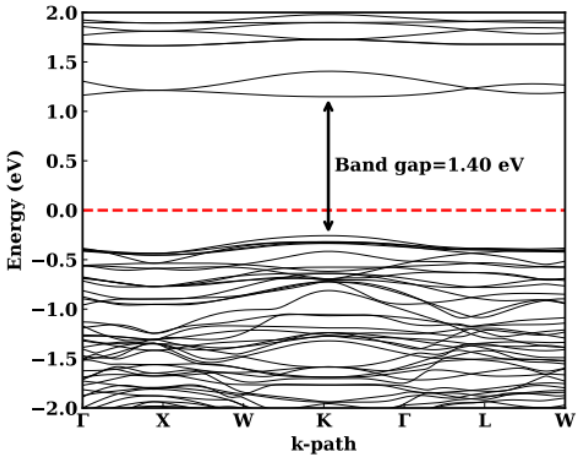
ترکیب $NiCo_2O_4$ همان‌طور که در شکل (۱) نشان داده شده است یکی از ترکیباتی است که به دلیل اشغال کسری برخی از مکان‌ها در این مواد ساختارهای مستقل قابل توجهی برای هر ترکیب یافت می‌شود. در این شکل اتم‌های به رنگ آبی مربوط به یون کبالت، اتم‌های به رنگ خاکستری متعلق به یون نیکل و اتم‌های صورتی شکل معرف یون‌های اکسیژن هستند. همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود برخی مکان‌ها همزمان با اتم‌های نیکل و کبالت اشغال شده است. بنابراین ما از برنامه سوپرسل استفاده کردیم تا پیکربندی‌های اتمی غیرمعادل برای این ساختار را به دست آوریم. این برنامه ابتدا تمام پیکربندی‌های اتمی یک ترکیب را درون سلول ایجاد می‌کند و سپس پیکربندی‌های اتمی را تشخیص می‌دهد و آن‌ها را به وسیله عملگرهای تقارنی به هم مربوط می‌کند. در نهایت پیکربندی‌های غیرمعادل متقارن تولید می‌شوند[٦]. برای مثال با استفاده از این برنامه تعداد ساختارهای ممکن برای ترکیب مورد نظر ۹٦ پیکربندی به دست آمد. در ادامه با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن انرژی تک تک این ساختارها محاسبه و ساختار با کمترین انرژی به عنوان ساختار پایه در نظر گرفته شد.



شکل۱ : ساختار کریستالی نمونه $NiCo_2O_4$.

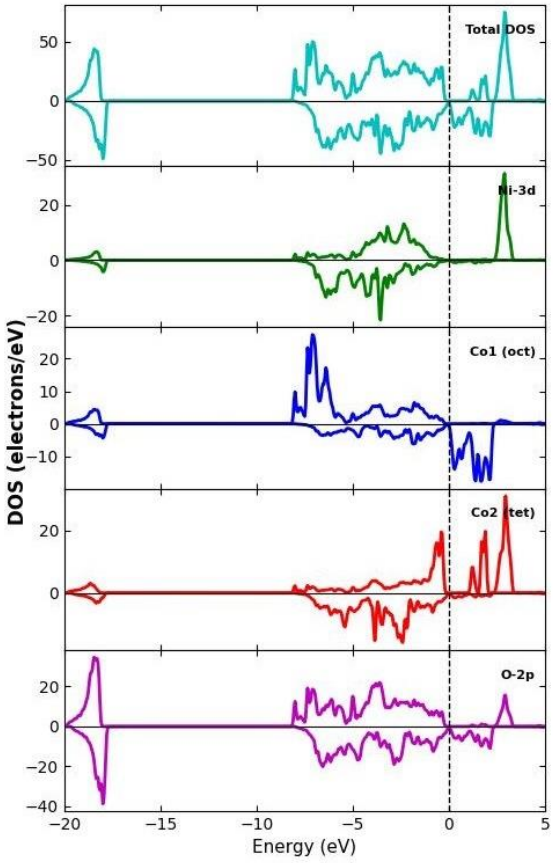
با مشخص شدن ساختار پایه در نهایت به بررسی ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی پرداختیم. در گام نخست ساختار نواری این

ماده را مورد بررسی قرار دادیم. ساختار نواری این ماده برای حالت اسپین بالا در شکل (۲) نشان داده شده است. لازم به ذکر است بررسی ساختار نواری این ماده در حالت اسپین پایین هیچ گافی نشان نداد که رفتار نیم‌فلز بودن این ماده را نشان می‌دهد و با سایر مطالعات انجام شده همخوانی دارد. مطابق شکل (۲) نشان گاف نواری این ماده برابر ۱٫۴۰ الکترون‌ولت است که با مقدار گزارش شده در مقالات (۱٫۴۵ الکترون‌ولت) توافق خوبی دارد [۷].



شکل۲ : ساختار نواری $NiCo_2O_4$.

به منظور بررسی بیشتر این ترکیب نمودار چگالی حالات جزئی را مورد بررسی قرار دادیم. این ترکیب همان‌طور که پیش‌تر بیان شد ساختار اسپینل معکوس دارد. بر این اساس کبالت در دو جایگاه مختلف چهاروجهی و هشت‌وجهی درون ساختار قرار می‌گیرد. شکل (۳) نمودار چگالی حالات جزئی مربوط به هر کدام از یون‌ها و چگالی حالات کل را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود در حالت اسپین بالا ساختار دارای گاف است و در حالت اسپین پایین هیچ گافی مشاهده نمی‌شود که به خوبی رفتار نیم‌فلزی این ماده را نشان می‌دهد. بدیهی است که حالت‌های اطراف سطح فرمی عمدتا تحت تاثیر اوربیتال d فلز واسطه هستند. در ضمن با توجه به شکل می‌توان دریافت که یون‌های نیکل، کبالت (واقع در مکان تتراهدرال) و اکسیژن بیشترین سهم را در حالت‌های نزدیک سطح فرمی دارند.



شکل ۳ : نمودار چگالی حالات $NiCo_2O_4$.

در نهایت ویژگی‌های مغناطیسی این ماده مورد بررسی قرار گرفت. همان‌طور که بیش از این بیان شد این ماده ساختار اسپینل معکوس دارد. نتایج محاسبات اسپین‌قطبیده نشان‌دهنده وجود قطبش مغناطیسی قابل توجه در این ترکیب است. همچنین نتایج نشان داد که یون نیکل ۱٫۶۵ مگنتون بوهر مغناطش دارد. این در حالی است که مجموع مغناطش یون کبالت در دو جایگاه تترا و اکتاهدرال ۳٫۳۶ مگنتون بوهر به دست آمده است. همچنین تحلیل بار بیدر نشان داد توزیع بار الکترونی در جایگاه‌های مختلف بلوری یکسان نیست. نتایج نشان می‌دهد میزان بار مؤثر اتم‌های واقع در جایگاه‌های چهاروجهی با اتم‌های قرارگرفته در جایگاه‌های هشت‌وجهی تفاوت دارد که بیانگر تفاوت در محیط شیمیایی و برهم‌کنش‌های الکترونی این جایگاه‌ها است. این نتایج می‌تواند در درک بهتر نقش جایگاه‌های

مختلف بلوری در تعیین خواص الکترونی و مغناطیسی $NiCo_2O_4$ مفید باشد .

نتیجه گیری

نتایج حاصل از این مقاله نشان داد که $NiCo_2O_4$ نیم‌فلزی با گاف نواری ۱/٤۰ الکترون ولت است. بررسی نمودار چگالی حالات مشارکت اوربیتال‌های d در اطراف سطح فرمی را نشان داد. نتایج محاسبات نظم مغناطیسی موجود در این نمونه را تایید کرد و نشان داد که میزان بار موثر کاتیون‌های واقع در مکان چهاروجهی با میزان بار مربوط به کاتیون‌های واقع در مکان هشت‌وجهی تفاوت دارد. بررسی مطالعات اخیر نشان داده است این ماده در دهه‌های اخیر به عنوان الکترود در ابرخازن‌ها مورد استفاده قرار گرفته است.

مرجع‌ها

[1] Nasser R, et al. "*Cooperation of F-doping and oxygen vacancies enhancing the electrochemical performances of $NiCo_2O_4$ for supercapacitor application*" Journal of Power Sources. **625** (2025).
[2] Gao, Kun, and Shu-Dal, Li. " *Hollow fibrous $NiCo_2O_4$ electrodes with controllable Zn substitution sites for supercapacitors* " Journal of Alloys and Compounds **832** (2020).
[3] Jiahao Wu, et al. "*Exploration of cobalt-based spinel oxide nanocatalysts MCo_2O_4 (M= Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) for glucose electrochemical sensing: $NiCo_2O_4$ exhibits largest Faradaic current*" Chemical Engineering Journal. **499** (2024).
[4] Gupta, V., et al., "*Cross-property deep transfer learning framework for enhanced predictive analytics on small materials data"* Nature communications, **12**(1) (2021).
[5] Nagarajan, V., K. Padmashri, and R. Chandiramouli, "*Mechanical and electronic properties of $NiCo_2O_4$ under high pressure: a first-principles calculation"* Processing and Application of Ceramics, **17**(3) (2023).
[6] Yaghoobi, M and Alaei, M. "*Machine learning for compositional disorder: a comparison between different descriptors and machine learning frameworks*" Computational Materials Science. **207** (2022).
[7] Kizhepat, S, et al. "*Unveiling the impact of Mott-Schottky nn junction in $NiCo_2O_4$/Co (OH) 2FeOOH heterostructure for enhanced supercapacitor performance*" Journal of Power Sources **649** (2025).

استخراج ضریب برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا در FeF_3 به دو روش محاسبات اصول اولیه

جمشیدیان، فاطمه ؛ اعلائی، مجتبی

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۳۱۱۱–۸۴۱۵۶

چکیده

در این پژوهش، ضریب برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا در بلور پیروکلور FeF_3 با استفاده از محاسبات اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی و با در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین–مدار استخراج شد. دو روش اصول اولیه، شامل نگاشت انرژی کل و محاسبات مارپیچ اسپین، به کار گرفته شده و نتایج حاصل از آن‌ها با یکدیگر مقایسه گردید. نتایج، وجود برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا در FeF_3 را تأیید می‌کنند. همچنین، محدودیت‌های روش اسپین‌مارپیچ در استخراج این ضریب مورد بحث قرار گرفته است.

واژه‌های کلیدی: *برهم‌کنش ژیالوشینسکی موریا، محاسبات اصول اولیه، جفت‌شدگی اسپین–مدار، نظریه تابعی چگالی، اسپین‌مارپیچ*

Extraction of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction parameter in FeF_3 via two first-principles approaches

Jamshidian, Fatemeh; Alaei, Mojtaba
Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111

Abstract

In this study, the Dzyaloshinskii–Moriya interaction parameter in pyrochlore lattice FeF_3 was extracted using first-principles calculations based on density functional theory, incorporating spin–orbit coupling. Two approaches, namely total-energy mapping and spin-spiral calculations, were employed and their results were compared. The results confirm the presence of the Dzyaloshinskii–Moriya interaction in FeF_3. Furthermore, the limitations of the spin-spiral approach for determining this parameter are discussed.

***Keywords**: Dzyaloshinskii-Moriya interaction, First-principles calculations, spin-orbit coupling, Density functional theory, Spin-Spiral*

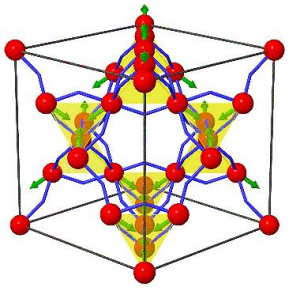
PACS No. (70, 75)

مقدمه

برهم‌کنش‌های مغناطیسی میان اسپین‌های یک بلور از جمله پدیده‌های بنیادی و مهم در فیزیک ماده چگال به شمار می‌آید که نقش مهمی در درک رفتار جمعی اسپین‌ها و ظهور فازهای مغناطیسی گوناگون و نوین ایفا می‌کند. در بسیاری از مواد مغناطیسی، برهم‌کنش هایزنبرگ مهم‌ترین عامل در تعیین آرایش اسپینی هم‌خط و حالت پایه مغناطیسی است. با این حال، در سیستم‌هایی که اثرات نسبیتی ناشی از جفت‌شدگی اسپین–مدار قابل توجه بوده و تقارن وارونگی در مسیر تبادلی میان دو اسپین شکسته شود، برهم‌کنشی موسوم به برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا ظاهر می‌شود. این برهم‌کنش، ناهمسانگرد و نامتقارن بوده و منشأ اصلی بسیاری از پیکربندی‌های مغناطیسی ناهم‌خط و نوین در مواد مغناطیسی است. شکل هامیلتونی مؤثر اسپینی در سیستم مغناطیسی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\mathcal{H}_{DMI} = \sum_{i,j} \boldsymbol{D}_{ij} \cdot (\boldsymbol{S}_i \times \boldsymbol{S}_j) \qquad (۱)$$

در این رابطه، $\mathbf{D}_{ij}$ بردار ژیالوشینسکی–موریا است و S_i و S_j اسپین الکترون‌ها در موقعیت‌های i و j از شبکه بلوری هستند[۱]. از سوی دیگر، مواد مغناطیسی دارای شبکه‌های هندسی ناکام مانند



شکل ۱. نمایش ساختار بلوری پایروکلور FeF_3 و آرایش مغناطیسی All-in/All-out [۳]

ساختارهای مثلثی یا پایروکلور متشکل از چهاروجهی‌های گوشه‌مشترک، به دلیل رقابت بین برهم‌کنش‌های مختلف برای ایجاد پیکربندی حالت پایه، دارای تبهگنی در انرژی حالت پایه هستند[۲].

برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا علی‌رغم کوچک بودن مقدار آن در این مواد به دلیل منشا آن در جفت‌شدگی اسپین–مدار و ماهیت ناهمسانگرد خود، قادر است نقشی تعیین‌کننده در انتخاب حالت پایه و شکستن تبهگنی ایفا کند[۳]. هدف این پژوهش، تعیین ضریب برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا در FeF_3 به دو روش اصول اولیه، شامل نگاشت انرژی کل و روش اسپین‌مارپیچ (Spin-Spiral) است. همچنین، مقایسه نتایج حاصل از این دو روش به‌منظور بررسی دقت و سازگاری آن‌ها، انجام شده است.

روش‌های محاسباتی

محاسبات اصول اولیه در چارچوب نظریه تابعی چگالی با استفاده از بسته محاسباتی FLEUR و رویکرد امواج تخت تقویت‌شده خطی با پتانسیل کامل (FLAPW) انجام شده است[٤]. در هر دو روش این پژوهش، محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT) بوده و با حل معادلات کان–شم مغناطش غیرهم‌خط طبق رابطه زیر توصیف می‌شود:

$$\left\{\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\mathbf{I}_{2\times2}+\mathbf{V}\right\}\Psi_\nu=\epsilon_\nu\Psi_\nu \qquad (۲)$$

در این معادله، تابع موج Ψ_ν به صورت یک اسپینور وابسته به درجه آزادی اسپینی الکترون‌ها بیان می‌شود و پتانسیل مؤثر دارای جمله ماتریس چگالی (در مغناطش هم‌خط و غیرهم‌خط) است. این چارچوب امکان توصیف آرایش‌های مغناطیسی غیرهم‌خط و بررسی اثر جفت‌شدگی اسپین–مدار را فراهم می‌کند[۵]. برای توصیف برهم‌کنش تبادلی–همبستگی از تقریب GGA، تابعی PBE و برای لحاظ کردن همبستگی الکترون‌های اوربیتال 3d یون‌های مغناطیسی آهن از تصحیح هابارد (U) استفاده شده است. با اعمال جفت‌شدگی اسپین–مدار (SOC)، به صورت خودسازگار، اختلاف انرژی کل محاسبه‌شده با و بدون در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین–مدار برای یاخته واحد برابر با ۸۰,۲۲۳– میلی الکترون‌ولت به دست آمده است. با وجود چهار اتم آهن در یاخته واحد، سهم این انرژی در هر اتم آهن برابر با ۲۰,۰۵۵– میلی الکترون‌ولت می‌شود.

در روش نگاشت انرژی کل، به‌منظور محاسبه ضریب ژیالوشینسکی موریا، حالت پایه All-in/All-out (AIAO) به عنوان پیکربندی مرجع در نظر گرفته شده است(شکل ۱). سپس، تمامی ممان‌های مغناطیسی در یاخته واحد به طور یکنواخت حول محور z دوران داده شدند، به گونه‌ای که زاویه سمتی از ۱۰° تا ۱۸۰° با گام ۱۰° تغییر نمودند، در حالی که زاویه‌های قطبی تمامی اتم‌ها در یاخته واحد ثابت نگه داشته شدند. برای کمینه شدن انرژی کل؛ جهت ممان مغناطیسی فلوئور اهمیت اساسی دارد. برای هر پیوند Fe–F–Fe جهت آن باید متناسب با دو یون آهن مجاور خود انتخاب شود، به همین دلیل زاویه‌های سمتی اتم‌های فلوئور نیز، متناسب با هر گام چرخش مانند اتم‌های آهن تغییر می‌کنند[۳].

طبق رابطه (۳) ابتدا اختلاف انرژی هر پیکربندی به ازای هر ۱۰° چرخش نسبت به حالت AIAO محاسبه، سپس مقادیر انرژی محاسبه شده در روش نگاشت انرژی کل طبق رابطه زیر

$$E_{\theta^\circ}^{(DFT)}-E_{AIAO}^{(DFT)}=D\cdot\left(E_{\theta^\circ}^{(DMI)}-E_{AIAO}^{(DMI)}\right). \qquad (۳)$$

بوده که در اینجا E به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$E^{DMI}=\sum_{i,j}\hat{d}_{ij}\cdot(\hat{S}_i\times\hat{S}_j) \qquad (٤)$$

با استفاده از روش برازش کمترین مربعات به جمله ژیالوشینسکی–موریا در هامیلتونی موثر اسپینی، مقدار ضریب استخراج گردید.

در پژوهش‌های قبلی برای FeF_3 از تقریب چگالی موضعی برای استخراج ضریب‌های برهم‌کنش‌های تبادلی استفاده شده است[۳]، در مطالعات پیشین، نشان داده شده است که در اکسید فلزهای واسطه، GGA+U در بسیاری از موارد توصیف بهتری از

برهم‌کنش‌های مغناطیسی نسبت به LDA+U ارائه می‌دهد[٦]. از این رو، در این بخش از پژوهش از تابعی PBE در چارچوب GGA+U استفاده شده است.

در تمامی محاسبات، داده‌های تجربی مربوط به پارامتر شبکه یاخته واحد (۱۰,۳۲۵ Å)[۷]، موقعیت یون‌ها و بردارهای $\boldsymbol{D}_{ij}$ در هامیلتونی موثر از بسته محاسباتی ESpinsS استفاده شدند[۸].

در روش اسپین مارپیچ، ساختار مغناطیسی به صورت یک حالت مارپیچی همگن با بردار موج q در نظر گرفته می‌شود که در آن، جهت اسپین‌ها به طور پیوسته در فضا تغییر می‌کند. این محاسبات، در چارچوب LDA+U و تابعی PZ، انرژی حالت‌های مارپیچی با در نظر گرفتن جفت‌شدگی اسپین–مدار به‌عنوان یک اختلال مرتبه اول در محاسبات اعمال می‌شود. در این چارچوب، سهم انرژی ناشی از برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا از جمع روی ویژه حالت‌های الکترونی به ازای ±q به‌دست می‌آید:

$$E_{DMI} = \frac{E_{spin}(q) - E_{spin}(-q)}{2} \qquad (۵)$$

و در حد طول موج‌های بلند ($q \to 0$)، انرژی ژیالوشینسکی–موریا به صورت خطی با q به شکل رابطه زیر خواهد بود:

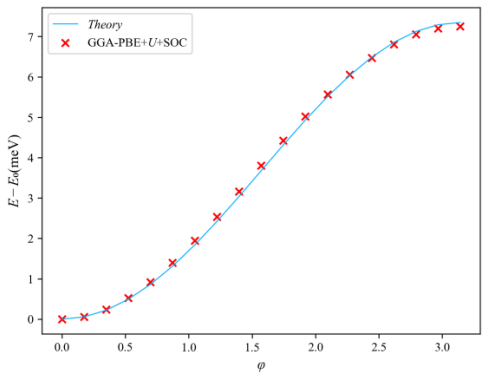
$$E_{DMI} \propto Dq \qquad (٦)$$

بنابراین، با محاسبه انرژی اسپین‌مارپیچ برای بردار موج‌های مثبت و منفی و در نظر گرفتن اختلاف انرژی دو حالت طبق رابطه (٤)، ضریب برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا با برازش خطی انرژی بر حسب بردار موج با استفاده از رابطه (۵) استخراج می‌شود.

بحث و نتایج

به‌منظور بررسی ضریب ژیالوشینسکی–موریا در FeF_3، با استفاده از دو رویکرد مستقل، شامل محاسبات نگاشت انرژی کل و روش اسپین‌مارپیچ تعیین شده است. استفاده از دو روش متفاوت امکان بررسی و مقایسه نتایج به‌دست‌آمده را فراهم می‌کند. در ادامه، ابتدا نتایج حاصل از دو رویکرد نگاشت انرژی کل و اسپین مارپیچ آورده و مقایسه می‌شوند.

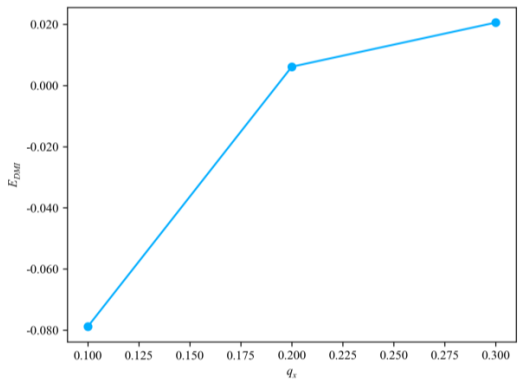
در شکل (۲)، تغییرات انرژی کل میان پیکربندی AIAO و پیکربندی دوران‌یافته‌ای که به اندازه زاویه سمتی φ چرخانده شده است و دارای همخوانی خوبی میان حاصل از محاسبات نگاشت انرژی کل با منحنی حاصل از هامیلتونی موثر اسپینی است. این همخوانی نشان می‌دهد که سهم غالب تغییرات انرژی ناشی از جمله ژیالوشینسکی–موریا به‌خوبی توسط هامیلتونی مورد استفاده (رابطه



شکل ۲. اختلاف انرژی پیکربندی‌های مغناطیسی نسبت به آرایش AIAO در روش نگاشت انرژی کل

٤) توصیف می‌شود. همچنین، از برازش کمترین مربعات داده‌ها طبق رابطه (۳) مقدار ضریب ژیالوشینسکی–موریا منجر به مقدار ۰,٤۸۷ میلی الکترون‌ولت می‌شود.

برای بررسی مستقل نتایج حاصل از روش نگاشت انرژی کل، محاسبات اسپین‌مارپیچ نیز انجام شد. در این روش، پیکربندی اسپین‌مارپیچ متناظر با حالت پایه AIAO با بردارهای موج ۰، ±۰,۱، ±۰,۲، ±۰,۳ در راستای x در کل یاخته واحد در نظر گرفته شده و انرژی پیکربندی اسپینی کل برای هر بردار موج محاسبه گردید. از آنجا که سهم انرژی ژیالوشینسکی–موریا از اختلاف انرژی بین پیکربندی‌های بسیار نزدیک به هم استخراج می‌شود و مقدار آن در ناحیه بردار موج‌های کوچک بسیار ناچیز است، برای کاهش خطاهای عددی و دستیابی به دقت کافی پارامترهای همگرایی



شکل ۳. انرژی ژیالوشینسکی–موریا بر حسب بردار موج q_x در روش اسپین‌مارپیچ

سخت‌گیرانه‌تری نسبت به روش نگاشت انرژی کل به‌کار گرفته شد. به ازای هر بردار موج، سهم انرژی ژیالوشینسکی–موریا از رابطه (۵) محاسبه شد. مطابق پیش‌بینی نظری، در حد بردارهای موج کوچک و نزدیک به صفر، انرژی ژیالوشینسکی–موریا با بردار موج رابطه‌ای تقریبا خطی، مطابق رابطه (٦)، دارد. شکل(۳) تغییرات انرژی ژیالوشینسکی–موریا بر حسب سه مقدار مثبت بردار موج نشان می‌دهد. به منظور استخراج ضریب این برهم‌کنش، داده‌های شکل (۳) با استفاده از روش کمترین مربعات به یک تابع خطی برازش شدند. خط برازش‌شده با استفاده از رابطه (٦) به ضریب این برهم‌کنش مرتبط بوده و مقدار ۰٫۴۹۷ میلی الکترون به‌دست آمده است.

جدول ۱ پارامترهای محاسباتی مورد استفاده و مقدار ضریب ژیالوشینسکی موریا بدست آمده در هر روش را نشان می‌دهد. مقادیر پارامتر هابارد (U) و پارامتر تبادلی هوند (J_H) در هر دو روش بر اساس مطالعات پیشین انتخاب شدند، تا اثر همبستگی

جدول ۱. پارامترهای محاسباتی مورد استفاده، در دو روش نگاشت انرژی کل و اسپین‌مارپیچ

پارامتر محاسبات	نگاشت انرژی کل	اسپین‌مارپیچ
U (eV)	۲٫۸	۲٫۸
J_H (eV)	۱٫۰	۱٫۰
Kmax	٤٫۰۰	٤٫۵۲
Gmax	۹٫۵	۱۲٫۰۰
Gmaxxc	۱۰٫۰۰	۱۲٫۰۰
k-points	٤×٤×٤	٤×٤×٤
D (meV)	۰٫٤۸۷	۰٫٤۹۷

الکترون‌های اوربیتال جایگزیده 3d یون‌های مغناطیسی آهن را به درستی لحاظ شود[۳]. همچنین، در محاسبات مربوط به نگاشت انرژی کل پارامترهای مربوط به رویکرد FLAPW طبق مطالعات پیشین انتخاب شد[۹].

نتیجه گیری

در این پژوهش، برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا در ساختار پایروکلور FeF_3 در چارچوب نظریه تابعی چگالی، و با درنظرگرفتن اثرات جفت‌شدگی اسپین–مدار مورد بررسی قرار گرفت. نتایج به‌دست‌آمده نشان داد که این برهم‌کنش دارای مقدار غیرصفر بوده و از این رو، می‌تواند در کنار سایر برهم‌کنش‌های مغناطیسی موجود در FeF_3 در تعیین حالت پایه و رفع تبهگنی انرژی حالت پایه ناشی از ناکامی هندسی نقش مؤثری ایفا کند.

نتایج حاصل از روش نگاشت انرژی کل از نظر کیفی با مطالعات پیشین در پیش‌بینی وجود برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا در FeF_3 سازگار است، هرچند مقدار عددی آن به دلیل تفاوت در تقریب تبادلی–همبستگی به‌کار رفته با مقادیر گزارش شده قبلی یکسان نیست.

در روش اسپین‌مارپیچ، ضریب ژیالوشینسکی–موریا از برازش تغییرات انرژی ناشی از برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا بر حسب بردار موج‌های نزدیک به صفر استخراج گردید. با این حال، به دلیل محدود بودن تعداد نقاط حاصل از داده‌های محاسبات انجام‌شده و همچنین مشاهده انحراف از رفتار خطی مورد انتظار، برازش انجام‌شده با عدم‌قطعیت همراه است. از این رو، مقدار به‌دست آمده از این روش را نمی‌توان به‌عنوان یک برآورد کمی دقیق در نظر گرفت و برای ارزیابی قابل اعتمادتر این روش، محاسبات و بررسی‌های تکمیلی ضروری است.

مرجع‌ها

[۱] Yang, H., Liang, J., and Cui, Q., “First-principles calculations for dzyaloshinskii–moriya interaction”, *Nature Reviews Physics*, **Vol. 5**, pp. 43–61, Jan. 2023.

[۲] Lacroix, C., Mendels, P., and Mila, F., eds., *Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory*, **Vol. 164** of Springer Series in Solid-State Sciences, Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2011.

[۳] Sadeghi, A., Alaei, M., Shahbazi, F., and Gingras, M. J. P., “Spin hamiltonian, order out of a coulomb phase, and pseudocriticality in the frustrated pyrochlore heisenberg antiferromagnet FeF_3”, *Physical Review B*, **Vol. 91**, p. 140407(R), Apr. 2015.

[٤] https://www.flapw.de/MaX-7.0

[٥] Martin, R. M., *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2004.

[٦] Alaei, Mojtaba, and Homa Karimi. “A Deep Investigation of NiO and MnO through the First Principle Calculations and Monte Carlo Simulations.” *arXiv*, July 25, 2022. https://arxiv.org/abs/2207.12143

[۷] E. Gaudin, J. E. Greedan, S. Raju, Z. Dun, H. D. Zhou, and C. R. Wiebe, “Glassy Statics and Dynamics in the Chemically Ordered Pyrochlore Antiferromagnet $Y_2Mo_2O_7$,” *Phys. Rev. Lett.* **83**, 211 (1999).

[۸] https://github.com/nafiserb/ESpinS

[۹] M. Amirabbasi, N. Rezaei, M. Alaei, F. Shahbazi, and H. Akbarzadeh, “Crossover between tricritical and Lifshitz points in pyrochlore FeF_3” *arXiv*, October 20, 2018. https://arxiv.org/pdf/1810.03457

پاسخ هارمونیک دوم عرضی قابل تنظیم با کرنش در گرافن دولایه قطبیده دره

خیرآبادی ، نرجس[1]؛ شکری، علی اصغر[1]
[1] گروه فیزیک، دانشگاه الزهرا، تهران

چکیده

در این کار، پاسخ هارمونیک دوم عرضی در گرافن دولایه با قطبش دره و تحت تأثیر کرنش تک‌محوری مطالعه شده است. با حل معادله جنبشی کوانتومی و استفاده از هامیلتونی کم‌انرژی شامل پرش مورب بین‌لایه‌ای و ناهمسانگردی ناشی از کرنش، حساسیت غیرخطی غیرقطری محاسبه شده است. نتایج نشان می‌دهد قطبش دره به تنهایی باعث ظهور جریان هارمونیک دوم عرضی می‌شود و کرنش شدت و حتی جهت آن را تغییر می‌دهد. برای کرنش منفی ($w<0$) با افزایش کرنش جریان افزایش می‌یابد، اما برای کرنش مثبت ($0<w$) در برخی مقادیر جهت جریان معکوس می‌شود. رزونانس‌هایی در ناحیه مادون قرمز میانی نزدیک $\hbar\omega \approx E_f$ و $\hbar\omega \approx 2E_f$ مشاهده می‌شود که نشان‌دهنده قابلیت تنظیم‌پذیری با کرنش است.

واژه های کلیدی: ***گرافن دولایه***، *پاسخ هارمونیک دوم*، ***کرنش***، ***قطبیده دره***.

Strain-Tunable Transverse Second-Harmonic Response in Valley-Polarized Bilayer Graphene

Kheirabadi, Narjes[1]; Shokri, Ali Asghar[1]

[1] *Department of Physics, Alzahra University, Tehran*

Abstract

In this study, the strain-tunable transverse second-harmonic response in valley-polarized bilayer graphene is theoretically investigated. Using an effective low-energy Hamiltonian that includes interlayer skew hopping (trigonal warping) and uniaxial strain-induced anisotropy, the quantum kinetic equation is solved to calculate the second-order density matrix and the off-diagonal nonlinear optical conductivity. The results show that in the presence of valley polarization, a nonzero transverse second-harmonic current appears even at zero strain. Applying uniaxial strain significantly modulates the magnitude and even the sign of the second-harmonic current by deforming the Dirac cones and shifting the Dirac points in the Brillouin zone. For negative strain ($w<0$), where Dirac points align along the y-axis, increasing strain enhances the transverse current, while for positive strain ($w>0$), the behavior is more complex, and current reversal occurs for certain strain values. Resonances in the mid-infrared region are observed at photon energies $\hbar\omega \approx E_f$ and $\hbar\omega \approx 2E_f$. The calculated second-harmonic current magnitude is on the order of nm²/V. These findings demonstrate that strain provides an efficient mechanism for controlling nonlinear optical currents in valley-polarized bilayer graphene.

Keywords:*Bilayer graphene, Second harmonic generation, Strain, valley polarization.*

PACS No. 70,72

مقدمه

گرافن دولایه، برخلاف گرافن تک‌لایه، ساختار نواری کم‌انرژی آن توسط میدان الکتریکی عمود، کرنش و اعوجاج قابل تنظیم است [1و2]. برهمکنش کوپلینگ بین‌لایه‌ای، تاب‌خوردگی مثلثی و کرنش منجر به ساختاری غنی شامل گذارهای لیفشیتز و تغییرات توپولوژیکی سطح فرمی می‌شود [3]. در سیستم‌های مرکزمتقارن، پاسخ‌های مرتبه دوم مانند هارمونیک دوم به دلیل تقارن وارونگی ممنوع هستند؛ بنابراین گرافن دولایه بکر هارمونیک دوم ناچیزی نشان می‌دهد [4]. با این حال، با گیتینگ، مهندسی زیرلایه، زاویه

پیچش، کرنش یا قطبش دره می‌توان تقارن را شکست و جریان‌های نوری غیرخطی ایجاد کرد [5 و 6] .

در گرافین دولایه بایاس شده، میدان عمود پاسخ هارمونیک قوی در مادون قرمز میانی القا می‌کند [7]. گرافن دولایه پیچ خورده نیز هارمونیک دوم وابسته به زاویه پیچش نشان می‌دهد [6]. مهندسی کرنش نیز با اعوجاج شبکه و قطبش زیرشبکه، هارمونیک دوم قوی و افزایش چشمگیر پذیرفتاری غیرخطی را فعال می‌کند [8]. در میان مکانیسم‌های تنظیم، کرنش تک‌محوری بسیار قدرتمند است: دامنه‌های پرش درون‌لایه‌ای را تغییر داده، باعث تغییر شکل ناهمسانگرد ساختار نواری، جابه‌جایی نقاط دیراک و اصلاح تاب‌خوردگی مثلثی می‌شود [8]. این اثرات، گذارهای نوری بین‌باند رزونانسی و پاسخ‌های مرتبه دوم در مادون قرمز میانی را به طور قابل توجهی تغییر می‌دهند.

علیرغم مطالعات گسترده، نقش اعوجاج مخروط دیراک ناشی از کرنش و عدم تقارن دره در پاسخ مرتبه دوم گرافن دولایه به اندازه کافی بررسی نشده است. تعامل بین قطبش دره، شکست تقارن معکوس، تاب‌خوردگی مثلثی و ناهمسانگردی ناشی از کرنش می‌تواند جریان‌های مرتبه دوم عرضی حتی بدون میدان مغناطیسی ایجاد کند [9 و 10]. در سیستم‌های متعادل دره، سهم دره‌ها حذف می‌شود، اما قطبش دره این حذف را تضعیف کرده و پاسخ غیرقطری محدودی حتی در کرنش صفر باقی می‌ماند [10 و 11].

در این کار، ما وابستگی به کرنش در پاسخ هارمونیک دوم عرضی در گرافن دولایه با قطبش دره را در یک چارچوب جنبشی کوانتومی بررسی می‌کنیم. با شروع از یک هامیلتونی دو باندی کم انرژی موثر که شامل تابیدگی مثلثی و ناهمسانگردی ناشی از کرنش است، پاسخ ماتریس چگالی مرتبه دوم و رسانایی نوری غیرخطی غیرقطری مرتبط را محاسبه می‌کنیم. ما نشان می‌دهیم که کرنش تک محوری، گذارهای نوری تفکیک‌شده دره را از طریق مخروط‌های دیراک جابجا شده با کرنش به شدت تغییر می‌دهد و منجر به یک پاسخ هارمونیک دوم عرضی ناهمسانگرد قابل تنظیم می‌شود. علاوه بر این، ما نشان می‌دهیم که رسانایی نوری غیرخطی، هنگامی که انرژی فوتون به انرژی‌های گذار بین باندی مشخصه نزدیک می‌شود، افزایش رزونانس قابل توجهی را در رژیم مادون قرمز میانی نشان می‌دهد. نتایج ما نشان می‌دهد که چگونه می‌توان از تعامل بین قطبش دره، شکست تقارن معکوس و کرنش برای کنترل پدیده‌های نوری غیرخطی در گرافن دولایه استفاده کرد، که کاربردهای امیدوارکننده‌ای را در دستگاه‌های فوتونیک و اپتوالکترونیکی قابل تنظیم در مادون قرمز میانی نشان می‌دهد.

هامیلتونی و روش محاسباتی

هامیلتونی کم-انرژی گرافین دو لایه تحت کرنش تک محوری بصورت زیر است [12]:

$$H = \left[\frac{-1}{2m}\left(k_x{}^2 - k_y{}^2\right) + \upsilon v_3 k_x + w\right]\sigma_x - \left[\frac{1}{m}k_x k_y + \upsilon v_3 k_y\right]\sigma_y, \qquad (1)$$

که در اینجا σ_i ماتریس‌های پائولی است که در فضای زیرشبکه با انرژی کم عمل می‌کنند و υ دو دره را از هم تفکیک می‌کند. همچنین داریم:

$$m = \gamma_1/2v_0^2,\ v_0 = \sqrt{3}a\gamma_0/2\hbar,\ v_3 = \sqrt{3}a\gamma_3/2\hbar,$$

که در اینجا a ، γ_0 ، γ_1 و γ_3 به ترتیب عبارتند از ثاب شبکه، دامنه‌های پرش بین لایه‌ای نزدیک‌ترین همسایه، بین لایه‌ای عمودی و بین لایه‌ای مورب [2]. عامل شکننده‌ی تقارن با فرض عدم اعمال ولتاژ بایاس ($\Delta = 0$) عبارتست از [12]

$$w = 3/4\gamma_3\left(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}\right)\left(\gamma_3 - \gamma_1\right) \qquad (2)$$

در این رابطه ϵ_{ij} مربوط به تانسور کرنش است. علامت w جهت ناهمسانگردی کرنش را تعیین می‌کند : $w > 0$ مربوط به $\epsilon_{xx} > \epsilon_{yy}$ است، یعنی تغییر شکل کششی قوی‌تر در امتداد جهت x در حالی که $w < 0$ مربوط به $\epsilon_{xx} < \epsilon_{yy}$ است که منجر به جهت‌گیری مخالف سطح فرمی با تاب مثلثی می‌شود.

فرض کرده‌ایم که میدان الکتریکی موازی صفحه‌ی گرافین دولایه و درجهت لبه‌ی آرمچیر (y) است. معادله‌ی جنبشی کوانتومی نیز به صورت زیر است [9]:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[H + V, \rho] + St\ \rho, \qquad (3)$$

در اینجا ρ ماتریس چگالی، V هامیلتونین مربوط به برهم‌کنش الکترون-فوتون که وابسته به میدان الکتریکی و بسامد زاویه‌ایی مربوط به آن ω است و $St\ \rho$ عبارتست از انتگرال برخورد است. اگر فرض کنیم ماتریس چگالی به فرم کلی زیر است

$$\rho(t) = \rho^0 + [\rho^1\, e^{-i\omega t} + c.c] + [\rho^2\, e^{-2i\omega t} + c.c] + \cdots \quad (4)$$

می‌توان نشان داد که قطبش وابسته به فرکانس دوم (2ω) عبارتست از:

$$p(2\omega) = \frac{e\, g_s}{2\, i\, \omega} \sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{v}} Tr(\rho^2 \boldsymbol{v}), \quad (5)$$

که در اینجا e بار الکترون g_s ضریب چند گانگی اسپین و $\boldsymbol{v}$ ماتریس سرعت ذره می‌باشد.

از آنجا که گرافین دولایه تحت کرنش مفروض، دارای گروه نقطه‌ای $C_2(x)$ است لذا جریان عرضی در جهت لبه‌ی زیگزاگی آن وابسته به میدان الکتریکی در جهت لبه‌ی آرمچیر است و می‌توان نوشت:

$$p_x(2\omega) = \chi_{xyy} {E_y}^2. \quad (6)$$

χ_{xyy} حساسیت به میدان الکتریکی مرتبه‌ی دوم را بیان می‌دارد. می‌توان نشان داد که در معادله‌ی (5) عناصر ماتریس چگالی عبارتند از

$$\rho_{cc}^{(2)} = -\frac{(e/\omega)^2 (E(\omega)\cdot v_{cv})(E(\omega)\cdot v_{vc})}{(\hbar\omega - E_{cv} + i\gamma)(\hbar\omega + E_{cv} + i\gamma)}(f_c - f_v)$$

$$\rho_{cv}^{(2)} = \frac{2(e/\omega)^2 (E(\omega)\cdot v_{cv})(E(\omega)\cdot v_{cc})}{(2\hbar\omega - E_{cv} + i\gamma)(\hbar\omega + E_{cv} + i\gamma)}(f_c - f_v) + \frac{(e/\omega)^2 \sum_{\alpha\beta}(\partial v_\alpha / \partial p_\beta)_{cv} E_\alpha(\omega) E_\beta(\omega)}{2(2\hbar\omega - E_{cv} + i\gamma)}(f_c - f_v), \quad (7)$$

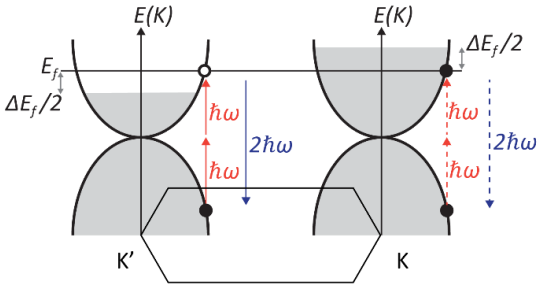
در اینجا، فرض کرده‌ایم که $\gamma/\hbar$ نرخ واپاشی مؤلفه بین‌باندی ماتریس چگالی است، E_{cv} نشان‌دهنده شکاف نواری بین نوارهای ظرفیت و رسانش است، f_v و f_c نشان‌دهنده توزیع‌های تعادلی در نوارهای ظرفیت و رسانش هستند و $v_{cc} = -v_{vv}$ به دلیل در نظر گرفتن تقارن الکترون–حفره برقرار است. علاوه بر این داریم

$$\rho_{vc}^{(2)}(\omega) = \left[\rho_{cv}^{(2)}(-\omega)\right]^*, \rho_{cc}^{(2)} = -\rho_{vv}^{(2)}, \rho_{vv}^{(2)} = -\rho_{cc}^2$$

بر این اساس حساسیت مرتبه دوم را برای هر دره جداگانه محاسبه می‌کنیم و کل حساسیت مرتبه دوم، نتیجه‌ی مجموع این دو حاصل برای هر دره است.

نتایج

در این مطالعه ما فرض نموده‌ایم که میزان تفاوت انرژی یا همان فاکتور قطبیدگی بین دو دره برابر است با $\Delta E_f = 1\ meV$ (شکل 1). همچنین جمع بندی معادله‌ی (5) روی شبکه‌ایی 500 در 500 در ناحیه‌ی بریلوئن و نزدیک سطح فرمی انجام شده است. مشابه نمونه‌ی گرافین تک لایه این قطبیدگی دره دلیل اصلی ایجاد جریان عرضی است (9).

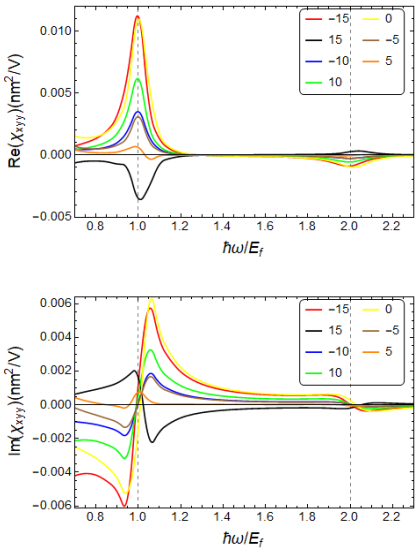


شکل 1. تفاوت انرژی دو دره برابر است با ΔE_f و سطح انرژی دره K بالاتر از دره‌ی K' است. لذا تقارن بین دو دره شکسته شده است. بنابراین انتقال هارمونیک دوم برای الکترون دره‌ی K غیر مجاز است و برای الکترون دره‌ی K' مجاز است.

مطابق شکل 2، هفت مقدار متفاوت برای کمیت مربوط به کرنش w در نظر گرفته شده و حساسیت به نور با قطبش خطی ذکر شده که متناسب با جریان عرضی است در آن محاسبه شده است.

مطابق شکل جهت جریان عرضی هارمونیک مرتبه دوم وابسته به بزرگی و جهت کرنش وارده است و با مقدار و جهت کرنش وارده این جریان نیز کم یا زیاد شده و حتی برای کرنش $w = 15\ meV$ معکوس شده است. دلیل این امر بخاطر تغییر سطح فرمی و محل نقاط دیراک با تغییر کرنش و جهت آن بصورتی که در شکل (3) آمده است می‌باشد. وقتی کرنش بگونه ایی است که فاکتور کرنش منفی است، دو نقطه دیراک در امتداد محور $\boldsymbol{k_y}$ قرار می‌گیرند و هرچه این کرنش بزرگتر باشد مطابق شکل (3) جریان بیشتری در گرافین دولایه با قطبیدگی دره ایجاد می‌شود. حال آنکه مقدار مثبت فاکتور کرنش باعث جهت گیری نقاط دیراک در جهت محور $\boldsymbol{k_x}$ است. برای کرنش‌های اعمالی، رزونانسهایی برای دو مقدار $\omega \approx E_f/\hbar$ و $\omega \approx 2E_f/\hbar$ مشاهده می‌شود. بزرگی جریان بوجود آمده از مرتبه‌ی بزرگی جریان بوجود آمده در گرافین تک لایه با قطبش دره و از مرتبه‌ی nm^2/V است [9]. این جریان که ناشی

از در نظرگرفتن پرش مورب الکترون بین لایه‌ایی است با صفر شدن آن حذف شده و وابستگی مستقیمی به قطبش دره‌ایی دارد و عدم در نظر گرفتن این دو فاکتور باعث حذف این جریان است.



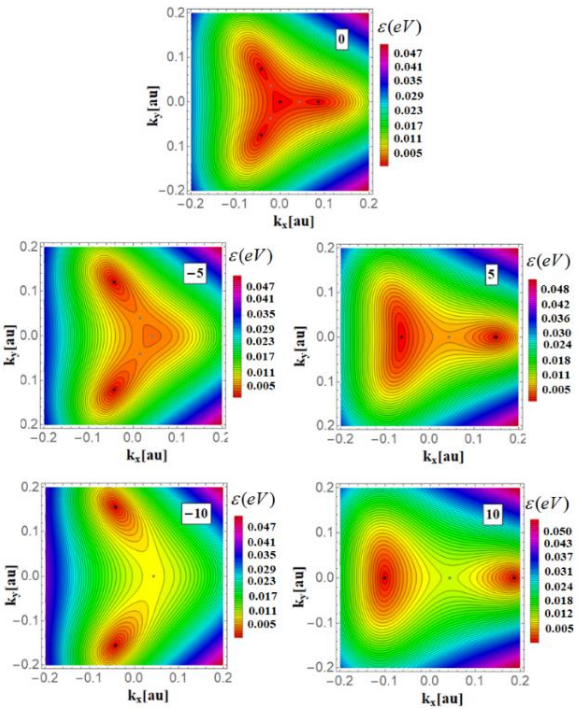
شکل 2. وابستگی قسمت حقیقی و موهومی χ_{xyy} به انرژی فوتون اعمالی بر گرافین دولایه تحت قطبش دره. ΔE_f و E_f به ترتیب 1 و 100 میلی الکترون ولت می‌باشند. محل رزونانس با خطوط عمودی در شکل نشان داده شده است.

نتیجه گیری

در نتیجه‌ی در نظر گرفتن پرش مورب الکترون بین لایه‌ایی (γ_3) در گرافین دولایه با قطبش دره‌ایی در توزیع سطح فرمی، یک جریان هارمونیک دوم عرضی مورد محاسبه قرار گرفت. اساس این محاسبه معادله‌ی جنبشی کوانتومی بود و براین اساس نشان دادیم که چگونه می‌توان جریان قابل تنظیمی با کرنش اعمالی بر گرافین دو لایه داشت. با اعمال کرنش بگونه‌ایی که دو نقطه دیراک در جهت محور k_y قرار داشتند، افزایش کرنش باعث افزایش جریان می‌شد اما برای جهت دیگر و کرنش $w>0$ سیستم رفتار پیچیده تری داشت تا آنجا که برای برخی از مقادیر w جهت جریان معکوس می‌گشت.

سپاسگزاری

از همکاری مرکز محاسباتی دانشگاه شریف، hpc، کمال تشکر را داریم.



شکل 3. مخروط‌های دیراک تحت تأثیر کرنش، تغییر شکلی ناهمسانگرد در ناحیه بریلوئن ایجاد می‌کنند که به طور حساسی به علامت پارامتر $w\ (meV)$ وابسته است. برای ($w > 0$)، خطوط تراز انرژی و نقاط دیراک عمدتاً در امتداد k_x کشیده می‌شوند، در حالی که برای ($w < 0$) تغییر شکل بیشتر در امتداد k_y رخ می‌دهد. نقاط خاکستری روی شکل نقاط زینی و نقاط مشکی محل نقاط دیراک را مشخص می‌کنند.

مرجع‌ها

[1] M. Yankowitz et al., “Electric field effect in bilayer graphene,” *Nature Physics* **8**, 382–386 (2012).
[2] E. McCann & M. Koshino, “The electronic properties of bilayer graphene,” *Reports on Progress in Physics* **76**, 056503 (2013).
[3] A. H. MacDonald et al., “Bilayer graphene’s topological and Lifshitz transitions,” *Physical Review B* **81**, 241415 (2010).
[4] F. Xia et al., “The origins and limits of optical nonlinearity in graphene,” *Nature Photonics* **4**, 839–843 (2010).
[5] S. Wu et al., “Quantum-enhanced tunable second-order optical nonlinearity in bilayer graphene,” *Nano Letters* **12**, 2032–2036 (2012).
[6] S. Ha et al., “Enhanced third-harmonic generation by manipulating twist angle of bilayer graphene,” *Light: Science & Applications* **10**, 19 (2021).
[7] G. Yang et al., “Electric-field tuned second harmonic generation in twisted bilayer graphene,” *Optics Express* **33**, 7862–7872 (2025).
[8] W. Yan et al., “Strain-induced evolution of electronic band structures in twisted graphene bilayer,” *arXiv preprint* (2012).
[9] L. E. Golub & S. A. Tarasenko, “Valley polarization induced second harmonic generation in graphene,” *arXiv preprint* (2014).
[10] J. Liu & X. Dai, “Nonlinear optical properties of twisted graphene systems,” *npj Computational Materials* **6**, 57 (2020).
[11] X. Liao et al., “Nonlinear valley and spin valves in bilayer graphene,” *arXiv preprint* (2024).
[12] R. Battilomo, et al., Berry Curvature Dipole in Strained Graphene: A Fermi Surface Warping Effect,” *Physical Review Letters* ***123****, 196403 (2019).*

بررسی خواص ترموالکتریکی استانن دو بعدی در حضور میدان مغناطیسی

ابراهیمی نژاد، زهرا[۱]؛ عزیزی، فرشاد[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی جندی شاپور دزفول، دزفول، ایران.

[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی جندی شاپور دزفول، ایران – azizi.f@jsu.ac.ir

چکیده

استانن به‌عنوان ماده دوبعدی توپولوژیک گروه چهارم، به‌دلیل گاف انرژی ذاتی ناشی از برهم‌کنش اسپین–مدار قوی، کاندیدایی ایده‌آل برای کاربردهای اسپینترونیک و ترموالکتریک است. با این وجود، درک رفتار ترمودینامیکی آن تحت میدان مغناطیسی خارجی همچنان یک چالش نظری محسوب می‌شود. این پژوهش با بهره‌گیری از مدل کین–مله، فرمالیسم تابع گرین ماتسوبارا و نظریه پاسخ خطی کوبو، به بررسی سیستماتیک خواص ترابری و ترمودینامیکی استانن تحت تأثیر همزمان برهم‌کنش اسپین–مدار و میدان مغناطیسی عمود بر صفحه می‌پردازد. نتایج عددی نشان می‌دهد رسانندگی گرمایی الکترونی رفتاری تک‌قله‌ای با بیشینه در $k_BT/t \approx 0.5 - 0.9$ دارد. پتانسیل شیمیایی امکان مهندسی دامنه و موقعیت دمایی این پاسخ را فراهم می‌سازد، در حالی که برهم‌کنش اسپین–مدار نقشی تقویتی و سیستماتیک بر پایداری حرارتی ایفا می‌کند. میدان مغناطیسی نیز پاسخی غیرخطی با بیشینه بهینه در $g\mu_BB/t \approx 1$ و سرکوب پاسخ در میدان‌های قوی ایجاد می‌نماید. این یافته‌ها با تبیین مکانیسم‌های کوانتومی حاکم بر ترابرد انرژی، چارچوبی نظری برای بهینه‌سازی پارامتر شایستگی ترموالکتریک (ZT) از طریق تنظیم همزمان دوپینگ، گاف توپولوژیک و میدان مغناطیسی کنترل‌شده ارائه می‌دهند و مسیر طراحی دستگاه‌های کارآمد تبدیل انرژی را هموار می‌سازند.

واژه های کلیدی: *استانن، برهم‌کنش اسپین–مدار، میدان مغناطیسی، خواص ترموالکتریک، مدل کین–مله.*

Investigation of the Thermoelectric Properties of Two-Dimensional Stanene in the Presence of a Magnetic Field

Ebrahimi Nezhad, Zahra[1]; Azizi, Farshad[2]

[1] *Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Jundi-Shapur University of Technology, Dezful, Iran.*

[2] *Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Jundi-Shapur University of Technology, Dezful, Iran.(azizi.f@jsu.ac.ir)*

Abstract

Stanene, as a topological two-dimensional material from group IV, is an ideal candidate for spintronic and thermoelectric applications due to its intrinsic energy gap induced by strong spin-orbit coupling (SOC). However, understanding its thermodynamic behavior under an external magnetic field remains a theoretical challenge. This study systematically investigates the transport and thermodynamic properties of stanene under the simultaneous influence of SOC and a perpendicular magnetic field, employing the Kane-Mele model, Matsubara Green's function formalism, and Kubo linear response theory. Numerical results reveal that the electronic thermal conductivity exhibits a universal single-peak behavior with a maximum at $k_BT/t \approx 0.5 – 0.9$. The chemical potential serves as a tunable control parameter, enabling precise engineering of the amplitude and temperature position of the thermal response, while SOC exerts a systematic, enhancing effect on thermal stability. The magnetic field induces a nonlinear response characterized by an optimal peak at $g\mu_BB/t \approx 1$, followed by suppression in strong-field regimes. These findings elucidate the quantum mechanisms governing energy transport in stanene and provide a theoretical framework for optimizing the thermoelectric figure of merit (ZT) through concurrent engineering of doping, topological gap, and controlled magnetic fields. Consequently, this work paves the way for designing high-efficiency energy conversion devices based on two-dimensional topological materials.

***Keywords**:Stanene, Spin-orbit coupling, Magnetic field, Thermoelectric properties, Kane-Mele model.*

PACS No.

مقدمه

کشف گرافن به‌عنوان نخستین ماده دوبعدی با ساختار شش‌ضلعی، انقلابی در علوم مواد و فناوری‌های نوظهور ایجاد کرد[۱]. با این حال، فقدان گاف انرژی در نقاط دیراک، کاربرد گرافن را در دستگاه‌های سوئیچینگ الکترونیکی با محدودیت مواجه ساخت. این چالش، توجه پژوهشگران را به نسل دوم مواد دوبعدی گروه IV جدول تناوبی (سیلیسین، ژرمانن و استانن) معطوف کرد که با وجود ساختار شبکه‌ای مشابه، خواص الکترونیکی متمایزی از خود نشان می‌دهند[۲]. در این میان، استانن به‌دلیل جرم اتمی بالای قلع ($Z = 50$) و ساختار باکلینگ ذاتی، برهم‌کنش اسپین–مدار (SOC) بسیار قوی‌تری نسبت به هم‌خانواده‌های خود داراست[۳]. این برهم‌کنش نسبیتی، گاف انرژی ذاتی در محدوده 0.1 - 0.3 eV را در نقاط دیراک ایجاد کرده و استانن را به یک کاندیدای ایده‌آل برای اثر هال اسپینی کوانتومی (QSHE) و کاربردهای اسپینترونیک تبدیل می‌کند[۴].

اگرچه مطالعات گسترده‌ای بر روی خواص الکترونیکی، نوری و توپولوژیکی استانن انجام شده است، اما بررسی سیستماتیک خواص ترمودینامیکی و ترموالکتریک آن در حضور همزمان میدان مغناطیسی خارجی و SOC همچنان به‌عنوان یک شکاف تحقیقاتی مهم مطرح است[۵]. میدان مغناطیسی عمود بر صفحه با کوانتیزه کردن ترازهای انرژی به سطوح لاندائو، چگالی حالت‌ها را به‌طور چشمگیری تعدیل کرده و از طریق اثر زیمان، تقارن اسپینی را می‌شکند[۶]. تداخل این اثرات با SOC می‌تواند منجر به تغییرات غیرخطی در ضریب سیبک، رسانندگی الکتریکی و گرمایی شود که مستقیماً بر پارامتر شایستگی ترموالکتریک (ZT) تأثیر می‌گذارد[۷]. با توجه به اهمیت روزافزون مواد با کارایی بالا در تبدیل انرژی حرارتی به الکتریکی، درک مکانیسم‌های کوانتومی حاکم بر رفتار ترموالکتریک استانن در شرایط میدان‌های خارجی، ضرورتی اجتناب‌ناپذیر است[۸].

اهداف پژوهش شامل بررسی تأثیر همزمان SOC و میدان مغناطیسی بر ساختار نواری، تحلیل رفتار ضرایب ترابری و ترمودینامیکی، و شناسایی رابطه بین گذارهای فاز توپولوژیکی و بهینه‌سازی ZT است. این پژوهش با ارائه یک چارچوب نظری یکپارچه مبتنی بر تابع گرین و نظریه پاسخ خطی، زمینه‌ساز طراحی آزمایش‌های تجربی و بهینه‌سازی دستگاه‌های ترموالکتریک مبتنی بر استانن خواهد بود.

چارچوب نظری و روش محاسبه

هامیلتونی مؤثر استانن در مدل کین–مله

ساختار بلوری استانن از یک شبکه هگزاگونال دو زیرشبکه‌ای با فاصله عمودی بین اتم‌های A و B تشکیل شده است. هامیلتونی مؤثر پایین‌انرژی در چارچوب مدل کین–مله و تقریب تنگ‌بست، شامل سه جمله اصلی است:

۱) پرش الکترونی بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها با ثابت جهش t،
۲) برهم‌کنش اسپین–مدار ذاتی با پارامتر λ_{SO} که مسئول ایجاد گاف توپولوژیک است.
۳) پتانسیل الکتریکی عمودی Δ ناشی از ساختار باکلینگ یا اعمال میدان خارجی.

در حضور میدان مغناطیسی عمود بر صفحه ($\mathbf{B} = B\hat{z}$)، اثر زیمان نیز به هامیلتونی افزوده می‌شود. در فضای تکانه $\mathbf{k}$ و پایه اسپینوری $\Psi_{\mathbf{k}} = (c_{kA\uparrow}, c_{\mathbf{k}B\uparrow}, c_{\mathbf{k}A\downarrow}, c_{\mathbf{k}B\downarrow})^T$، هامیلتونی به فرم ماتریسی 4×4 معادله (۱) نوشته می‌شود:

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \Delta + \lambda_{SO} s_z \sigma_z & tf(\mathbf{k}) \\ tf^*(\mathbf{k}) & -\Delta - \lambda_{SO} s_z \sigma_z \end{pmatrix} + \frac{1}{2} g\mu_B B \sigma_z \qquad (۱)$$

که در آن؛ $f(\mathbf{k}) = \sum_{j=1}^{3} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_j}$ فاکتور ساختاری شبکه هگزاگونال، σ_z و s_z به ترتیب ماتریس‌های پائولی در فضای زیرشبکه و اسپین، و $g\mu_B$ گشتاور مغناطیسی مؤثر الکترون است. با اعمال تبدیل فاز پی‌رلز ($t \to t\, e^{i\phi_{ij}}$)، اثر مداری میدان مغناطیسی به‌طور خودکار در جمله جهش گنجانده شده و منجر به تشکیل سطوح لاندائو می‌گردد.

فرمالیسم تابع گرین و چگالی حالت‌ها

برای سیستم‌های برهم‌کنش‌پذیر در دمای محدود، از فرمالیسم ماتسوبارا استفاده می‌شود. تابع گرین تک‌ذره‌ای پیشرونده در فضای تکانه–فرکانس به صورت معادله (۲) تعریف می‌گردد:

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \left[i\omega_n + \mu - H(\mathbf{k}) \right]^{-1} \qquad (۲)$$

که در آن $\omega_n = (2n+1)\pi k_B T$ فرکانس‌های ماتسوبارا فرمیونی و μ پتانسیل شیمیایی است. پس از ادامه تحلیلی $i\omega_n \to E + i0^+$،

تابع گرین تأخیری $G^R(\mathbf{k}, E)$ به‌دست آمده و چگالی حالت‌ها (DOS) از رابطه (۳) محاسبه می‌شود:

$$D(E) = -\frac{1}{\pi}\int_{\mathrm{BZ}} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \mathrm{Im}\left[\mathrm{Tr} G^R(\mathbf{k}, E)\right] \qquad (۳)$$

در حضور میدان مغناطیسی قوی، طیف انرژی به ترازهای لاندائو با اثر زیمان $E_{n,\sigma} = \hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right) \pm \frac{1}{2} g\mu_B B$ کوانتیزه شده و $D(E)$ به‌صورت قله‌های شارپ (تک‌حالت) درمی‌آید که پاسخ ترموالکتریک را به‌شدت تحت تأثیر قرار می‌دهد.

محاسبه خواص ترابری و ترمودینامیکی

در چارچوب نظریه پاسخ خطی و فرمول کوبو، ضرایب ترابری L_{ij} از توابع همبستگی جریان بار و گرما به فرم معادله (۴) استخراج می‌شوند:

$$L_{ij} = \frac{1}{V}\int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E}\right) \mathcal{T}(E) \Xi_{ij}(E) \qquad (۴)$$

که در آن $f(E)$ تابع توزیع فرمی–دیراک، $T(E)$ تابع عبور موثر، $\Xi_{11}=1,\ \Xi_{12}=\Xi_{21}=\frac{E-\mu}{T},\ \Xi_{22}=\frac{(E-\mu)^2}{T^2}$، وزن‌های ترابری هستند. خواص ماکروسکوپی ترموالکتریک از روابط (۵) به‌دست می‌آیند:

$$\sigma = e^2 L_{11},\quad S = -\frac{1}{eT}\frac{L_{12}}{L_{11}},\quad \kappa_e = \frac{1}{T}\left(L_{22} - \frac{L_{12}^2}{L_{11}}\right) \qquad (۵)$$

پارامتر شایستگی ترموالکتریک به صورت $ZT = \frac{S^2\sigma T}{\kappa_e + \kappa_{ph}}$ تعریف می‌شود. ظرفیت گرمایی الکترونی (۶) و ممان مغناطیسی (۷) نیز از مشتق‌های پتانسیل گراندکانونیکال Ω به فرم معادله (۸) استخراج می‌گردند:

$$C_V = -T\left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial T^2}\right)_{V,\mu} \qquad (۶)$$

$$M = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial B}\right)_{T,\mu} \qquad (۷)$$

$$\Omega = -k_B T \sum_{n,\mathbf{k}} \ln\left[1 + \exp\left(-\frac{E_{n,\mathbf{k}} - \mu}{k_B T}\right)\right] \qquad (۸)$$

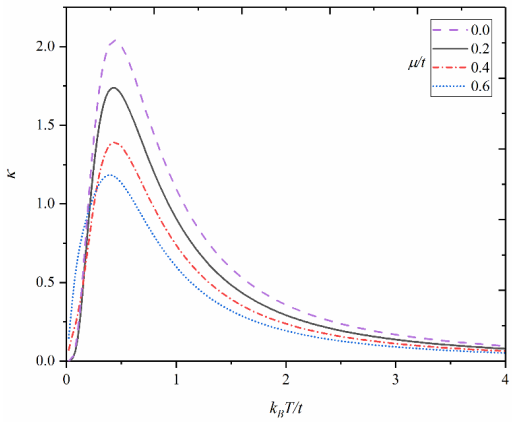
محاسبات عددی با دیاگونال‌سازی $H(\mathbf{k})$ در شبکه $N\times N$ تکانه‌ها، انتگرال‌گیری روی ناحیه اول بریلوئن و تکرار برای ترکیبات مختلف $(T, B, \mu, \lambda_{SO})$ انجام می‌پذیرد.

روش‌شناسی محاسباتی

این مطالعه نظری–محاسباتی، رفتار ترموالکتریک استانن را در چارچوب مدل کین–مله و تقریب تنگ‌بست، با هامیلتونی مؤثر ۴×۴ شامل اثرات باکلینگ ذاتی، برهم‌کنش اسپین–مدار و میدان مغناطیسی عمود بر صفحه بررسی می‌کند. کمیت‌های ترابری و ترمودینامیکی با بهره‌گیری از فرمالیسم تابع گرین (رویکرد ماتسوبارا) و نظریه پاسخ خطی کوبو، به‌صورت خودسازگار استخراج می‌شوند. محاسبات در بازه‌های دمایی $0 < T < 300$ کلوین)، میدان مغناطیسی $0 < B < 10$ تسلا) و پارامتر اسپین–مدار $\lambda_{SO} = 0.1 - 0.5$ الکترون‌ولت) و با گسسته‌سازی دقیق ناحیه اول بریلوئن ($N \geq 500$) انجام و همگرایی نتایج با کنترل خطای نسبی ($< 10^{-4}$) تضمین شده است. اعتبارسنجی مدل از طریق مقایسه با داده‌های مستند گرافن و ژرمانن و انطباق با حدود ترمودینامیکی میدان صفر صورت پذیرفته است. این چارچوب، مبنایی کمّی برای تحلیل اثرات رقابتی میدان مغناطیسی و اسپین–مدار بر کارایی ترموالکتریک استانن فراهم می‌آورد.

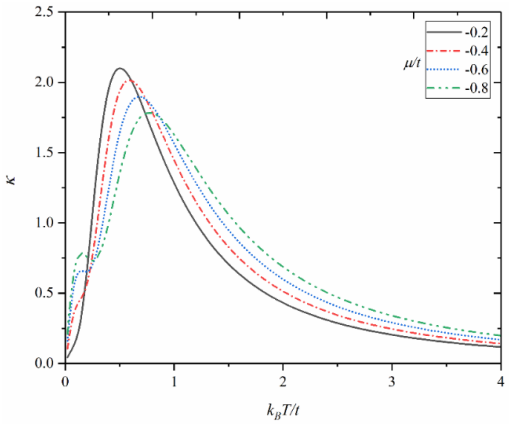
نتایج و بحث

در نمودار(۱)، رسانندگی گرمایی الکترونی استانن دوبعدی تحت برهم‌کنش اسپین–مدار ضعیف ($\lambda/t = 0.1$) و غیاب میدان مغناطیسی، بر حسب دمای بی‌بُعد و پتانسیل شیمیایی تحلیل شده است. نتایج نشان می‌دهد که رسانندگی گرمایی (k) رفتاری تک‌قله‌ای دارد: شروع از مقادیر ناچیز در دماهای پایین، دستیابی به بیشینه در $k_BT/t \sim 0.5 - 0.7$، و کاهش یکنواخت در دماهای بالاتر. این الگو بازتاب رقابت میان افزایش برانگیختگی‌های حامل در دماهای پایین و پهن‌شدگی توزیع فرمی در دماهای بالاست. افزایش پتانسیل شیمیایی $(\mu > 0)$ به‌عنوان مکانیزم دوپینگ الکترونی، با افزایش چگالی حامل‌های فعال نزدیک سطح فرمی، موجب تقویت محسوس k در کل بازه دمایی می‌شود؛ اثری که در ناحیه بیشینه آشکارتر است. در مجموع، تنظیم μ راهکاری کارآمد برای بهینه‌سازی ترابرد گرمایی در استانن دوبعدی تحت شرایط یادشده است.



نمودار۱: رسانندگی گرمایی الکترونی k استانن دوبعدی بر حسب دمای بی‌بُعد k_BT/tبرای مقادیر مختلف پتانسیل شیمیایی μ/t در غیاب میدان مغناطیسی و با برهم‌کنش اسپین–مدار ثابت $\lambda/t = 0.1$. افزایش μ (دوپینگ الکترونی) موجب افزایش دامنه بیشینه و تقویت رسانندگی گرمایی در کل بازه دمایی می‌شود.

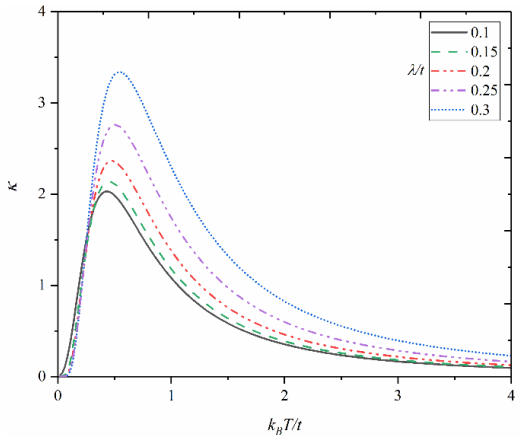
در نمودار(۲)، وابستگی رسانندگی گرمایی الکترونی (k) استانن دوبعدی به دمای بی‌بُعد (k_BT/t) برای مقادیر منفی پتانسیل شیمیایی $(\mu/t = -0.2 - -0.8)$، تحت برهم‌کنش اسپین–مدار ثابت $(\lambda/t = 0.1)$ و غیاب میدان مغناطیسی بررسی شده است. کلیه منحنی‌ها رفتار تک‌قله‌ای یکسانی نشان می‌دهند: رشد سریع k از مقادیر ناچیز در دماهای پایین، دستیابی به بیشینه در بازه $k_BT/t \sim 0.6 - 0.9$، و کاهش تدریجی در دماهای بالاتر که ناشی از رقابت میان افزایش برانگیختگی حامل‌ها و پهن‌شدگی توزیع فرمی است. با منفی‌تر شدن μ، ارتفاع قله کاهش یافته و موقعیت آن به دماهای بالاتر منتقل می‌شود؛ پدیده‌ای که بیانگر تغییر پهنای ناحیه مؤثر ترابرد گرما تحت تأثیر دوپینگ حفره‌ای است. با این حال، در دماهای بالا $(k_BT/t \geq 2)$، مقادیر بزرگ‌تر $|\mu|$ منجر به رسانندگی گرمایی بالاتری می‌شوند که حاکی از افزایش سهم حامل‌های مؤثر در انتقال انرژی در این رژیم دمایی است. در مجموع، نتایج مؤید آن است که تنظیم پتانسیل شیمیایی منفی به‌عنوان مکانیزم دوپینگ حفره‌ای، ابزاری کارآمد برای مهندسی همزمان دامنه، موقعیت دمایی و پهنای باند ترابرد گرمایی در استانن دوبعدی محسوب می‌شود.



نمودار۲: رسانندگی گرمایی الکترونی k بر حسب دمای بی‌بُعد k_BT/t برای استانن دوبعدی در غیاب میدان مغناطیسی و با برهم‌کنش اسپین–مدار ثابت $\lambda/t = 0.1$. منحنی‌ها مربوط به مقادیر مختلف پتانسیل شیمیایی منفی μ/t هستند که نشان می‌دهند تغییر μ موجب جابه‌جایی موقعیت بیشینه و تغییر دامنه رسانندگی گرمایی می‌شود.

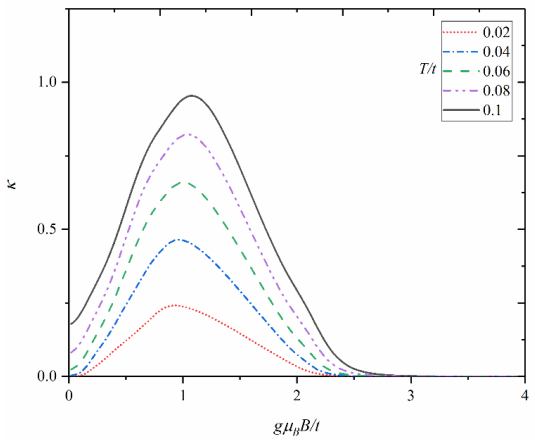
در نمودار(۳)، وابستگی رسانندگی گرمایی الکترونی (k) استانن دوبعدی به دمای بی‌بُعد (k_BT/t) برای مقادیر مختلف برهم‌کنش اسپین–مدار $(\lambda/t = 0.1 - 0.3)$، در شرایط پتانسیل شیمیایی صفر $(\mu = 0)$ و غیاب میدان مغناطیسی بررسی شده است. کلیه منحنی‌ها از یک الگوی تک‌قله‌ای پیروی می‌کنند: رشد سریع k از مقادیر ناچیز در دماهای پایین، دستیابی به بیشینه در بازه $k_BT/t \approx 0.5 - 0.7$ و کاهش یکنواخت در دماهای بالاتر که ناشی از رقابت میان افزایش برانگیختگی حامل‌های گرمایی و پهن‌شدگی توزیع فرمی است. اثر برهم‌کنش اسپین–مدار کاملاً تقویتی و سیستماتیک است؛ بدین‌ترتیب که با افزایش λ/t دامنه بیشینه k به‌طور محسوسی ارتقا یافته (از حدود 2 در $\lambda/t = 0.1$ به حدود 3.3 در $\lambda/t = 0.3$) و موقعیت قله اندکی به دماهای بالاتر منتقل می‌شود که بیانگر پایداری حرارتی افزوده در حضور SOC قوی‌تر است. در دماهای بالا $(k_BT/t \geq 2)$، اگرچه روندهای کاهشی همگرا می‌شوند، اما ترتیب دامنه منحنی‌ها حفظ شده و مقادیر بزرگ‌تر λ کماکان رسانندگی گرمایی بالاتری را تضمین می‌کنند. در مجموع، نتایج مؤید آن است که برهم‌کنش اسپین–مدار در حالت نصف‌پر و بدون میدان، نقشی سازنده در بهینه‌سازی ترابرد گرمایی استانن دوبعدی ایفا کرده و با

تقویت همزمان دامنه بیشینه و گستره دمایی عملکرد مؤثر، امکان مهندسی پاسخ گرمایی سیستم را فراهم می‌سازد.



نمودار۳: رسانندگی گرمایی الکترونی k استانن دوبعدی بر حسب دمای بی‌بُعد k_BT/t در غیاب میدان مغناطیسی و برای مقادیر مختلف برهم‌کنش اسپین–مدار λ/t با $\mu = 0$. افزایش λ/t موجب افزایش مقدار بیشینه k و تقویت پاسخ گرمایی در کل بازه دمایی می‌شود.

در نمودار(۴)، وابستگی کمیت ترمودینامیکی (k) استانن دوبعدی به میدان مغناطیسی نرمال‌شده $(g\mu_BB/t)$ در دماهای مختلف، با فرض برهم‌کنش اسپین–مدار ثابت $(\lambda/t = 0.1)$ و پتانسیل شیمیایی در نقطه نصف‌پر $(\mu = 0)$ تحلیل شده است. نتایج بیانگر رفتار غیرخطی مشخصی در پاسخ سیستم به میدان مغناطیسی است: در میدان‌های ضعیف، k با افزایش میدان رشد تدریجی دارد که ناشی از بازتوزیع حالت‌های الکترونی نزدیک سطح فرمی و تقویت سهم حالت‌های قابل‌دسترس در پاسخ ترمودینامیکی است؛ این روند تا دستیابی به بیشینه‌ای در $g\mu_BB/t \approx 1$ ادامه می‌یابد که بازتاب‌دهنده نقطه بهینه رقابت میان انرژی مغناطیسی و برهم‌کنش‌های درونی برای بازآرایی طیفی و حداکثرسازی مشارکت حالت‌های مؤثر است. در میدان‌های قوی‌تر، k به‌سرعت کاهش یافته و در $g\mu_BB/t \geq 2.5$ به سمت صفر همگرا می‌شود که حاکی از سرکوب پاسخ ترمودینامیکی تحت غلبه انرژی مغناطیسی بر سایر مقیاس‌های انرژی سیستم است. از منظر دمایی، افزایش دما موجب تقویت یکنواخت دامنه پاسخ (ارتفاع قله) بدون جابه‌جایی محسوس در موقعیت بیشینه می‌گردد؛ پدیده‌ای که مؤید نقش برانگیختگی‌های حرارتی در افزایش مشارکت حالت‌های الکترونی، و نیز تعیین‌شدن مکان بهینه میدان توسط پارامترهای بنیادی (ساختار باندی و برهم‌کنش اسپین–مدار) است. در مجموع، میدان مغناطیسی به‌عنوان پارامتر کنترل‌کننده غیرخطی، امکان تنظیم پاسخ ترمودینامیکی استانن دوبعدی را از طریق تقویت در میدان‌های متوسط و سرکوب در میدان‌های قوی فراهم می‌سازد، در حالی‌که دما صرفاً بر دامنه این پاسخ اثرگذار است.



نمودار۴: وابستگی کمیت k به میدان مغناطیسی نرمال‌شده $g\mu_BB/t$ برای دماهای مختلف $(T/t = 0.02 - 0.1)$ در حضور برهم‌کنش اسپین–مدار $\lambda/t = 0.1$ و در حالت نیمه‌پر $\mu = 0$ با افزایش دما مقدار بیشینه k افزایش یافته، در حالی که در میدان‌های مغناطیسی قوی پاسخ سیستم به طور قابل توجهی سرکوب می‌شود.

نتیجه گیری

این پژوهش با بهره‌گیری از مدل کین–مله، فرمالیسم تابع گرین ماتسوبارا و نظریه پاسخ خطی کوبو، به بررسی سیستماتیک خواص ترمودینامیکی و ترموالکتریک استانن دوبعدی تحت تأثیر همزمان برهم‌کنش اسپین–مدار ذاتی و میدان مغناطیسی عمود بر صفحه پرداخته است. یافته‌ها نشان می‌دهد که رسانندگی گرمایی الکترونی از یک الگوی تک‌قله‌ای جهانی پیروی می‌کند که نقطه بهینه عملکرد ترموالکتریک را در بازه $k_BT/t \approx 0.5 - 0.9$ تعیین می‌نماید؛ همچنین پتانسیل شیمیایی و برهم‌کنش اسپین–مدار به‌عنوان پارامترهای کنترل‌پذیر، امکان مهندسی دقیق دامنه و موقعیت دمایی پاسخ گرمایی را فراهم می‌سازند، در حالی که میدان مغناطیسی رفتاری غیرخطی با بیشینه بهینه در $g\mu_BB/t \approx 1$ و سرکوب پاسخ در میدان‌های قوی ایجاد می‌کند. این نتایج، با تبیین مکانیسم‌های

کوانتومی حاکم بر ترابرد انرژی در استانن، چارچوبی نظری برای بهینه‌سازی پارامتر شایستگی ترموالکتریک(ZT) از طریق تنظیم همزمان دوپینگ، بهره‌گیری از گاف توپولوژیک ناشی از اسپین–مدار و اعمال میدان مغناطیسی کنترل‌شده ارائه می‌دهد و مسیر طراحی نسل آینده دستگاه‌های اسپینترونیک–ترموالکتریک مبتنی بر مواد دوبعدی گروه چهارم را هموار می‌سازد.

سپاسگزاری

بدین‌وسیله نویسندگان از حمایت‌های پژوهشی و زیرساخت‌های فراهم‌شده توسط دانشگاه صنعتی جندی‌شاپور دزفول صمیمانه تقدیر می‌نمایند.

مرجع‌ها

[۱] Liu, C. C., Jiang, H., & Yao, Y. (2011). Low-energy effective Hamiltonian involving spin-orbit coupling in silicene and two-dimensional germanium and tin. Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics, 84(19), p.195430.

[۲] Cahangirov, S., Topsakal, M., Aktürk, E., Şahin, H., & Ciraci, S. (2009). Two-and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium. Physical review letters, 102(23), p.236804.

[۳] Sahoo, S. K., & Wei, K. H. (2019). A perspective on recent advances in 2D stanene nanosheets. Advanced materials interfaces, 6(18), p.1900752.

[۴] Saxena, S., Chaudhary, R. P., & Shukla, S. (2016). Stanene: atomically thick free-standing layer of 2D hexagonal tin. Scientific reports, 6(1), p.31073.

[۵] Azizi, F., & Rezania, H. (2021). Effects of spin-orbit coupling and magnetic field on electronic properties of Germanene structure. Synthetic Metals, 273, p.116707.

[۶] Wang, T. H. (2024). Ideal two-dimensional electronic structure in bulk lead titanate for superior thermoelectrics. Results in Physics, 62, p.107850.

[۷] Wu, L., Lu, P., Bi, J., Yang, C., Song, Y., Guan, P., & Wang, S. (2016). Structural and electronic properties of two-dimensional stanene and graphene heterostructure. Nanoscale Research Letters, 11(1), p.525.

[۸] Yu, X. L., Fu, P. H., & Wu, J. (2022). Response of quantum spin Hall insulators to Zeeman fields, and device design based on stanene. Physical Review B, 105(12), p.125107.

تأثیر ساختار موئر در میخکوبی گردشاره‌ها در شبکه کاگومه به منظور افزایش چگالی جریان بحرانی در نوارهای ابررسانا

نجات دشتکی، مریم[1]؛ حسینی، سید مهدی[1]؛ اوجی‌فرد، زهرا[1]

[1] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز ، بلوار مدرس، شیراز

چکیده

در این پژوهش، تأثیر ساختار موئر بر شبکه میخکوبی کاگومه بر چگالی جریان بحرانی نوارهای ابررسانای نوع دوم بررسی شده است. با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و حل معادلات لانژوین، دینامیک گردشاره‌ها برای زوایای چرخش ۰°، ۵°، ۱۰° و ۱۵° در سه ناحیه میدان‌های پایین، متوسط و بالا محاسبه شده‌است. نتایج نشان می‌دهد که در میدان‌های پایین، زاویه صفر درجه بیشترین چگالی جریان بحرانی را دارد. در میدان‌های بالا، زاویه ۵° بهترین عملکرد را ارائه می‌دهد و در میدان متوسط، تأثیر زاویه ناچیز است. این یافته‌ها نشان می‌دهد که ساختار موئر با زاویه بهینه می‌تواند میخکوبی گردشاره‌ها را در میدان‌های مغناطیسی بالا بهبود بخشد.

واژه های کلیدی: *نوارهای ابررسانا، شبکه کاگومه، ساختارموئر، چگالی جریان بحرانی*

Effect of Moiré Structure on Vortex Pinning in a Kagome Lattice for Enhancing Critical Current Density in Superconductor Tapes

Nejat Dashtaki, Maryam[1]; Hosseini, Seyyed Mehdi[1]; Owjifard, Zahra[1]

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

Abstract

In this study, the effect of Moiré structure on a Kagome pinning array on the critical current density of type-II superconductor tapes is investigated. Using molecular dynamics simulation and solving Langevin equations, vortex dynamics are calculated for twist angles of 0°, 5°, 10°, and 15° in low, medium, and high magnetic field regimes. The results show that at low fields, the zero-degree angle yields the highest critical current density. At high fields, the 5° twist angle provides the best pinning performance. At medium fields, the twist angle effect is negligible. These findings demonstrate that an optimal Moiré twist angle can enhance vortex pinning in high magnetic fields.

Keywords: *Superconductor tapes, Kagome lattice, Moiré structure, Critical current density*

PACS No. (74)

مقدمه

میخکوبی گردشاره‌ها یکی از مهم‌ترین عوامل تعیین‌کننده عملکرد ابررساناهای نوع دوم است، زیرا حرکت گردابه‌های شار در اثر نیروی لورنتس منجر به اتلاف انرژی و کاهش چگالی جریان بحرانی می‌شود. از این‌رو، کنترل و مهار دینامیک گردشاره‌ها از طریق مراکز میخکوبی، نقشی اساسی در ارتقای کارایی این مواد دارد. مراکز میخکوبی، نواحی یا ناهمگنی‌های ساختاری درون ابررسانا هستند که با مهار و تثبیت گردشاره‌ها، از جابه‌جایی آن‌ها تحت تأثیر نیروی لورنتس جلوگیری می‌کنند. این فرآیند موجب کاهش اتلاف انرژی و در نهایت افزایش چگالی جریان بحرانی در ابررساناهای نوع دوم می‌شود.[۱،۲،۳] این مراکز می‌توانند هندسه‌های گوناگونی داشته باشند، از جمله شبکه‌های مثلثی[۴]، مربعی[۵،۶]، کاگومه[۷]، لانه‌زنبوری[۸]، ، همدیس، موئر[۳] و غیره. در میان آرایش‌های گوناگون، شبکه کاگومه به دلیل

ویژگی‌های توپولوژیکی و ساختار منحصربه‌فردش توجه زیادی را به خود جلب کرده‌است. این شبکه از مثلث‌های به هم‌پیوسته تشکیل شده که حفره‌های شش‌ضلعی ایجاد می‌کنند و منجر به پیدایش نوارهای انرژی مسطح و برهم‌کنش‌های قوی می‌شود. ساختار اتمی کاگومه از پیش در طبیعت وجود داشت، اما کاربرد آن در ابررسانایی به سال‌های اخیر بازمی‌گردد.[۹، ۱۰] با کشف فلزات کاگومه در ۲۰۱۸ و مشاهده ابررسانایی در خانواده AV_3Sb_5 در ۲۰۲۰،[۱۱،۱۲] ایده استفاده از شبکه کاگومه به عنوان یک آرایه مصنوعی از مراکز میخکوبی مطرح شد. مطالعات نظری و تجربی نشان داده‌اند که این هندسه به دلیل وجود زیرشبکه‌های درهم‌تنیده، می‌تواند گردشاره‌ها را در نواحی بیشتری به دام بیندازد و در مقایسه با آرایه‌های ساده‌تر، میخکوبی مؤثرتری ارائه دهد. در این پژوهش، با هدف بررسی تأثیر آرایش ترکیبی بر چگالی جریان بحرانی، ساختار موثر بر روی شبکه کاگومه اعمال شده است. شبکه موثر از برهم‌نهی دو شبکه تناوبی با زاویه چرخش نسبی تشکیل می‌شود و قادر است الگوهای دوره‌ای با مقیاس بزرگ و تقارن‌های نوظهور ایجاد کند. در این پژوهش، ساختار موثر در زوایای چرخش ۰°، ۵°، ۱۰°و ۱۵° بر روی شبکه پایه کاگومه اعمال شده و اثر این آرایش‌های ترکیبی بر چگالی جریان بحرانی ابرساناهای نوع دوم مورد بررسی قرار گرفته است.[۱۳، ۱۴]

جزئیات شبیه‌سازی

رفتار دینامیکی گردابه‌ها در یک سلول شبیه‌سازی دوبعدی با استفاده از معادله حرکت نیوتنی و در حضور محیطی با ویسکوزیته بالا به صورت زیر توصیف می‌شود.

$$\eta v_i = f_i = f_i^{vv} + f_i^{vp} + f_i^{T} \qquad (۱)$$

که به آن معادله لانژوین می‌گویند [۷،۱۵] و در آن η ویسکوزیته را نشان می‌دهد، v_i سرعت گردابه iام، f_i نیروی کل به ازای واحد طول وارد بر گردابه i است، f_i^{vv} نیروی برهمکنش گردشاره–گردشاره، f_i^{vp} نیروی برهم کنش گردشاره–میخکوبی، f_i^{T} نیروی افت و خیز گرمایی می‌باشد.

$$f_i^{vv} = f_0 K_1\left(\frac{|r_i - r_j|}{\lambda}\right)\hat{r}_{ij} \qquad (۲)$$

که در آن K_1 تابع بسل اصلاح شده نوع دوم از مرتبه یک است، λ عمق نفوذ، r_i و r_j مکان گردابه‌ها می‌باشد. مقدار f_0 دامنه نیروی گردابه –گردابه است و از رابطه زیر محاسبه می‌گردد:

$$f_0 = \frac{\phi_0^2}{8\pi^2\lambda^3} \qquad (۳)$$

$$f_i^{vp} = \frac{f_p}{r_p} r_{ik}^{(P)} \Theta\left(\frac{r_p - r_{ik}^{(P)}}{\lambda}\right)\hat{r}_{ik}^{(P)} \qquad (۴)$$

$$r_{ik}^{(P)} = \left|r_i - r_k^{(P)}\right| \qquad (۵)$$

f_pدامنه نیروی میخکوبی، r_p شعاع مراکز میخکوبی، $r_k^{(P)}$ یک بردار است که مکان یا موقعیت هندسی نقطه میخکوبی kام را در فضا نشان می‌دهد.

$$\left\langle f_i^T(t)\right\rangle = 0 \qquad (۶)$$

$$\left\langle f_i^T(t) f_i^T(t')\right\rangle = 2\eta K_B T \delta_{ij}\delta(t-t') \qquad (۷)$$

K_B ثابت بولتزمن، δ_{ij} تابع دلتای کرونکر، $\delta(t)$ تابع دلتای دیراک می‌باشند.

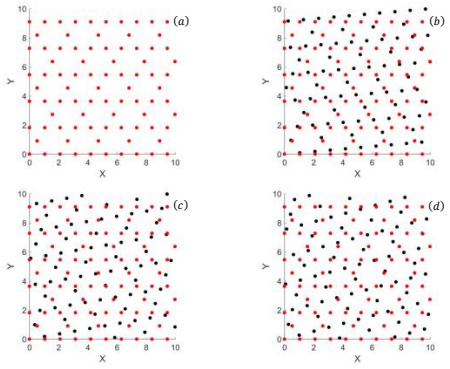
$$J_c(\phi) \propto \frac{N_v^p(\phi)}{N_v(\phi)} \qquad (۸)$$

که در آن J_c چگالی جریان بحرانی است که متناسب با $N_v^p(\varphi)$ تعداد گردابه‌های میخکوب شده به تعداد کل گردابه‌ها $N_v(\varphi)$ است. بنابراین J_c یک کمیت بدون بعد است. در این مطالعه، عبارت $Normalized\ J_c$ به همین نسبت اشاره دارد.

در این مطالعه، شبیه‌سازی‌ها در دمای نیتروژن مایع در یک سلول مربعی با ابعاد $10\lambda\times10\lambda$ با شرایط مرزی دوره‌ای (Periodic Boundary Conditions) انجام شد. معادله لانژوین در رژیم بیش‌میرایی با استفاده از روش انتگرال‌گیری اویلر و گام زمانی $\Delta t=0.02$ حل گردید. در این شبیه‌سازی، زمان کل برابر $T=100$ و تعداد گام‌های زمانی $N_t=5000$ در نظر گرفته شد. دامنه نیروی گرمایی برابر $f_T=0.5f_0$ و پارامترهای ثابت شامل $\lambda=1, \eta=1$ $r_p=0.2\lambda$ ،$f_p=2$است و تعداد گردابه‌ها بین ۰ تا ۲۰۰ تغییر می‌کند. همچنین تمامی طول‌ها نسبت به λ و تمامی نیروها نسبت به نیروی مشخصه برهم‌کنش گردشاره–گردشاره f_0 بهنجار شدند.

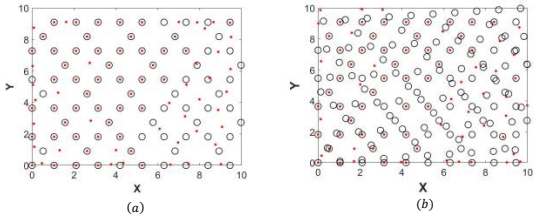
نتایج و بحث

در این پژوهش مقدار $r_p=0.2$ در نظر گرفته شده‌است و ثابت شبکه $a=2.1$ است.



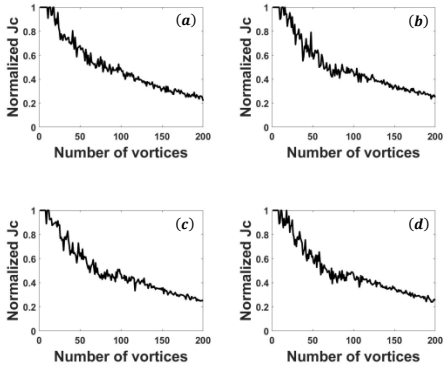
شکل۱ : آرایه میخکوبی موثر کاگومه برای زوایه‌های $(a)\theta=0,(b)\theta=5,(c)\theta=10,(d)\theta=15$

شکل ۱ آرایه پین‌شدگی موثر کاگومه را برای زوایای $(a)\theta=0,(b)\theta=5,(c)\theta=10,(d)\theta=15$ را نشان می‌دهد.



شکل۲ : ساختار گردشاره‌ها و میخکوبی برای آرایه موثر کاگومه برای نیروی میخکوبی $f_p=2$ زوایای $(a)\theta=0,(b)\theta=5$ و $N_v=100$.

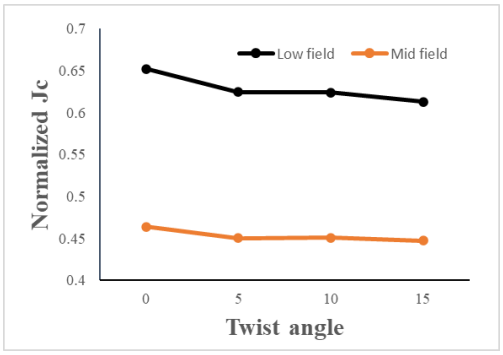
در شکل۲ گردشاره‌ها و میخکوبی برای آرایه موثر کاگومه برای برای زوایای $(a)\theta=0,(b)\theta=5$ رسم شده‌است، در این شکل نقاط قرمز رنگ، گردشاره‌ها و دایره‌های توخالی مشکی رنگ، نقاط میخکوبی هستند.



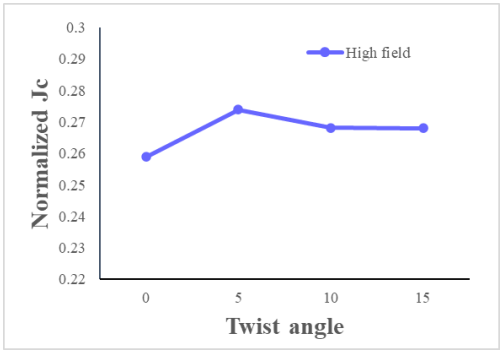
شکل۳ : چگالی جریان بحرانی بر حسب تعداد گردشاره‌ها برای زوایای $(a)\theta=0,(b)\theta=5,(C)\theta=10,(d)\theta=15$.

در شکل ۳ چگالی جریان بحرانی بر حسب تعداد گردشاره‌ها برای نیروی میخکوبی $f_p=2$ نشان داده شده‌است. با افزایش تعداد گردشاره‌ها، چگالی جریان بحرانی در همه زوایای چرخش به طور یکنواخت و تدریجی کاهش می‌یابد.

برای بررسی دقیق‌تر چگالی جریان بحرانی را در میدان‌های پایین (تعداد گردابه‌های ۶۰–۴۰) ، میدان‌های متوسط (۱۱۰–۹۰) و میدان‌های بالا (۲۰۰–۱۸۰) با میانگین‌گیری از چگالی جریان بحرانی در میدان‌های مربوطه به‌دست آوردیم.



شکل۴ : نمودارهای چگالی جریان بحرانی بر حسب زاویای چرخش برای میدان‌های متوسط و پایین



شکل۵ : نمودارهای چگالی جریان بحرانی بر حسب زاویای چرخش برای میدان‌های بالا

در شکل۴ نمودارهای چگالی جریان بحرانی بر حسب زاویه در میدان‌های متوسط و پایین رسم شده‌است. نتایج نشان می‌دهد که در هر دو میدان پایین و متوسط، زاویه صفر درجه بیشترین چگالی جریان بحرانی را دارد و با افزایش زاویه چرخش، مقدار J_c کاهش می‌یابد. در شکل۵ نمودارهای چگالی جریان بحرانی در میدان‌های بالا رسم شده‌است. در میدان بالا، زاویه صفر کمترین مقدار J_c را دارد و چرخش 5° بهترین عملکرد را ارائه می‌دهد. در میدان‌های

مغناطیسی پایین، آرایش بدون چرخش بیشترین چگالی جریان بحرانی را نشان می‌دهد و با افزایش زاویه چرخش، مقدار J_c به‌تدریج کاهش می‌یابد. این نتیجه نشان می‌دهد که در میدان‌های مغناطیسی پایین، آرایش منظم کاگومه بدون چرخش برای میخکوبی گردشاره‌ها کارآمد است. در میدان‌های متوسط نیز اگرچه آرایش بدون چرخش همچنان عملکرد بهتری از خود نشان می‌دهد، اختلاف بین زوایای مختلف بسیار ناچیز است که نشان‌دهنده کاهش حساسیت J_c نسبت به زاویه چرخش در این بازه میدان است. در میدان‌های مغناطیسی بالا، رفتار سیستم تغییر کرده و آرایش با زاویه چرخش $^{\circ}$۵، افزایش در چگالی جریان بحرانی نسبت به حالت بدون چرخش را نشان می‌دهد. همچنین زوایای $^{\circ}$۱۰و $^{\circ}$ ۱۵ نیز عملکردی بهتر از آرایش بدون چرخش دارند. این رفتار را می‌توان به نقش ساختار موئر در بازآرایی مراکز میخکوبی نسبت داد؛ به‌گونه‌ای که در چگالی بالای گردشاره‌ها، الگوی موئر حاصل از چرخش‌های کوچک، به‌ویژه در زاویه $^{\circ}$۵، با ایجاد توزیع مناسب‌تر مراکز میخکوبی و کاهش مسیرهای آزاد حرکت گردشاره‌ها، احتمال جابه‌جایی آن‌ها را کاهش داده و در نتیجه موجب افزایش چگالی جریان بحرانی می‌شود.

نتیجه گیری

در این پژوهش، اثر زاویه چرخش در ساختارهای موئر مبتنی بر آرایه کاگومه بر چگالی جریان بحرانی بررسی شد. نتایج نشان داد که وابستگی عملکرد میخکوبی به زاویه چرخش به شدت میدان مغناطیسی وابسته است؛ به‌طوری‌که در میدان‌های پایین آرایش بدون چرخش عملکرد بهتری دارد، در حالی که در میدان‌های بالا، زاویه چرخش $^{\circ}$۵ بیشترین بهبود را در چگالی جریان بحرانی ایجاد می‌کند. این نتایج نشان می‌دهد که مهندسی هندسی آرایه‌های میخکوبی با استفاده از ساختارهای موئر می‌تواند روشی مؤثر برای بهینه‌سازی عملکرد ابررساناها در میدان‌های مغناطیسی بالا باشد.

مرجع‌ها

[۱] Tinkham M., Introduction to Superconductivity, 2nd ed., Dover Publications, Mineola, NY(2004).
[۲] Blatter G., Feigel'man M. V., Geshkenbein V. B., Larkin A. I., Vinokur V. M., "Vortices in high-temperature superconductors", Rev. Mod. Phys. 66, 1125–1388 (1994).
[۳] Li W., Reichhardt C. J. O., Reichhardt C., "Vortex dynamics, pinning, and angle-dependent motion on moiré patterns", Phys. Rev. B 104, 024504(2021).
[۴] Berdiyorov G., Milošević M. V., Peeters F. M., "Novel commensurability effects in superconducting films with antidot arrays", Phys. Rev. Lett. 96, 207001 (2006).
[۵] García-Santiago A., Hernandez J. M., Tejada J., Vanacken J., Moshchalkov V. V., "Observation of commensurability effects in a patterned thin superconducting Pb film using microwave reflection spectrometry", Phys. Rev. B 89, 054517 (2014).
[۶] Zoveydavi S., Hosseini M., Owjifard Z., Moftakharzadeh A., "Investigation of the effect of conformal pinning array on critical current density in infinitely long superconductors", Physica C 620, 1354498 (2024).
[۷] Reichhardt C., Reichhardt C. J. O., "Vortex molecular crystal and vortex plastic crystal states in honeycomb and kagome pinning arrays", Phys. Rev. B 76, 094512 (2007).
[۸] He S. K., Zhang W. J., Wen Z. C., Xiao H., Han X. F., Gu C. Z., Qiu X. G., "Interstitial vortex in superconducting film with periodic hole arrays", Chin. Phys. B 21, 087401 (2012).
[۹] Shores M. P., Nytko E. A., Bartlett B. M., Nocera D. G., "A structurally perfect S = 1/2 kagome antiferromagnet", J. Am. Chem. Soc. 127, 13462–13463 (2005).
[۱۰] Smith G. F. H., "On the composition of paratacamite", Mineral. Mag. 14, 170–177 (1906).
[۱۱] Ortiz B. R., Gomes L. C., Morey J. R., Winiarski M., Bordelon M., Mangum J. S., Oswald I. W. H., Rodriguez-Rivera J. A., Neilson J. R., Wilson S. D., Ertekin E., McQueen T. M., Toberer E. S., "New kagome prototype materials: Discovery of KV_3Sb_5, RbV_3Sb_5, and CsV_3Sb_5", Phys. Rev. Mater. 3, 094407(2019).
[۱۲] Ortiz B. R., Teicher S. M. L., Hu Y., Zuo J. L., Sarte P. M., Schueller E. C., Abeykoon A. M. M., Krogstad M. J., Rosenkranz S., Osborn R., Seshadri R., Balents L., He J., Wilson S. D., "CsV_3Sb_5: A Z_2 topological kagome metal with a superconducting ground state", Phys. Rev. Lett. 125, 247002 (2020).
[۱۳] Owjifard Z., Tavana A., Hosseini M., "Critical current density enhancement in superconductor tapes using moiré pinning centers for device and power applications", J. Alloys Compd. 1029, 180676 (2025).
[۱۴] Owjifard Z., Tavana A., Hosseini M., "Geometric engineering of pinning arrays in superconductor tapes for critical current density enhancement using conformal transformation", AIP Adv. 15, 025103 (2025).
[۱۵] Menezes R. M., Silva C. C., "Conformal vortex crystals", Sci. Rep. 7, 1 (2017).

میدان بلوری و مغناطش در ترکیب بین فلزی Ce_3PtIn_{11}

ملاباشی، لیلا؛ جلالی اسدآبادی، سعید[۱]

[۱]گروه فیزیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه اصفهان

چکیده

در این مقاله با یک روش ابتدا به ساکن بر پایه‌ی توابع وانیر و با استفاده از نظریه تابعی چگالی، پارامترهای میدان بلوری برای دو یون سریم ناهم‌ارز در ترکیب بین فلزی Ce_3PtIn_{11} محاسبه شده‌اند. سپس، با استفاده از پارامترهای به‌دست آمده و جایگذاری آن‌ها در یک هامیلتونی مؤثر شکافتگی ترازهای انرژی یون‌های Ce^{+3} در این ماده محاسبه شده‌اند. شکافتگی‌های به‌دست آمده در توافق با پیش‌بینی نظریه‌ی گروه اند. در ادامه با در نظر گرفتن جمله زیمان در هامیلتونی مورد نظر ویژه‌مقدارهای انرژی در حضور میدان مغناطیسی خارجی تعیین شده‌اند و با استفاده از آن‌ها و همچنین آمار بولتزمن وابستگی دمایی مغناطش هر کدام از یون‌ها در حضور میدان مغناطیسی خارجی نیم تسلا محاسبه شده‌اند.

واژه های کلیدی: *پارامترهای میدان بلوری، نظریه تابعی چگالی، توابع وانیر، اثر زیمان، وابستگی دمایی مغناطش*

Crystal field and magnetism in Ce_3PtIn_{11} intermetallic compound

Mollabashi, Leila[1]; Jalali-Asadabadi, Saied[1]

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

Abstract

In this paper, crystal field parameters for two nonequivalent cerium ions in the intermetallic compound Ce_3PtIn_{11} have been calculated using an ab initio method based on Wannier functions and density functional theory. Then, using the obtained parameters and inserting them into an effective Hamiltonian, the energy level splittings of Ce^{3+} ions in this material have been calculated. The obtained splittings are in agreement with group theory predictions. Furthermore, by including the Zemman term in the Hamiltonian, the energy eigenvalues in the presence of an external magnetic field have been determined. Using these eigenvalues and Boltzmann statistics, the temperature dependence of the magnetization for each of the ions in the presence of an external magnetic field of half a tesla has been calculated.

***Keywords**: Crystal field parameters, Density functional theory, Wannier functions, Zemman Effect, Temperature dependence of magnetism*

PACS No. 70.75

مقدمه

ترکیب‌های فرمیونی سنگین $Ce_mT_nIn_{3m+2n}$ (که در آن T نماینده عنصرهای واسطه، ۲ و۱=m و ۲ و۱و۰=n) ساختارهای چهارگوشه تشکیل شده از m تا $CeIn_3$ و n تا TIn_2 تشکیل می‌دهند. این دسته مواد به دلیل خواص جالب توجه‌شان مانند ابررسانایی، خواص مغناطیسی و اثر کوندو بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند [۱-۶]. در این میان ترکیب $CeIn_3$ و دسته ترکیبات $CeTIn_5$ از اهمیت ویژه‌ای برخوردار بوده‌اند.

بیشتر ترکیبات فرمیون سنگین بر پایه سریم که تا به امروز مورد مطالعه قرار گرفته‌اند، دارای یک جایگاه بلورشناختی برای یون‌های سریم هستند. در ترکیباتی با دو یا چند جایگاه ناهم‌ارز، محیط موضعی متفاوت مربوط به یون‌های سریم باعث برهمکنش متفاوت حالت‌های ۴f سریم با لیگاندهای اطراف و حالت‌های رسانش

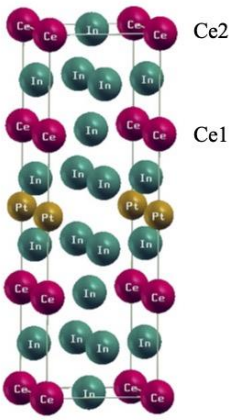
می‌شود. در نتیجه، در این ترکیبات سریم دارای چندین جایگاه، ممکن است پدیده‌های جدید و پیچیده‌ای انتظار رود، جایی که حالت پایه با همزیستی حالت‌های الکترونی و مغناطیسی مختلف در مقیاس میکروسکوپی مشخص می‌شود.

در مواد دارای یون خاکی کمیاب خواص جالب توجه، معمولا ناشی از اوربیتال بخش‌پر f آن‌هاست بنابراین، یکی از روش‌های مفید بررسی خواص فیزیکی این ترکیبات استفاده از هامیلتونی مؤثر یونی می‌تواند باشد. این هامیلتونی نیازمند پارامترهایی است که می‌توانند با استفاده از برازش داده‌های تجربی یا محاسبات ابتدا به ساکن تعیین شوند.

در این مقاله ما با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن براساس نظریه تابعی چگالی و توابع وانیر پارامترهای میدان بلوری ترکیب Ce_3PtIn_{11} را تعیین می‌کنیم. سپس با تشکیل هامیلتونی مؤثر وحل آن شکافتگی‌های ترازهای انرژی حالت‌های ٤f سریم را به‌دست می‌آوریم و در نهایت با درنظر گرفتن برهمکنش زیمان و آمار بولتزمن بستگی مغناطش هر یک از یون‌ها در حضور میدان مغناطیسی خارجی را بررسی می‌کنیم.

ساختار بلوری و هامیلتونی میدان بلوری

ترکیب Ce_3PtIn_{11} با ساختار چهاروجهی و گروه فضایی P4/mmm با شماره ۱۲۳ متبلور می‌شود.



شکل ۱: ساختار یاخته‌ی Ce_3PtIn_{11}. دو یون غیرهم ارز سریم به صورت Ce1 و Ce2 مشخص شده‌اند.

همان‌طور که در شکل (۱) نشان داده شده است در این یاخته دو یون سریم در یک جایگاه هم ارز و یون سریم سوم در یک جایگاه ناهم‌ارز دیگر قرار دارند. تقارن نقطه‌ای سریم نوع اول و سریم نوع دوم به‌ترتیب C_{4v} و D_{4h} می‌باشد.

برای الکترون‌های f هامیلتونی مؤثری به شکل زیر می‌توان نوشت:

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_Z + \hat{H}_{CF}\,, \qquad (۱)$$

که در آن $\hat{H}_A$ [۷] هامیلتونی یون آزاد (در مجموع شامل نوزده پارامتر) [۷]، $\hat{H}_Z$ برهمکنش زیمان و $\hat{H}_{CF}$ پتانسیل میدان بلوری می‌باشند. برهمکنش اسپین–مدار در هامیلتونی یون آزاد گنجانده شده است. این برهمکنش حالت الکترون‌های ٤f را به ترازهایی از مرتبه الکترون ولت که با گشتاور مداری L، اسپین S و گشتاور کل J معین می‌شوند می‌شکافد. سپس، میدان بلوری شکافتگی‌هایی از مرتبه میلی الکترون ولت با توجه به تقارن جایگاه یون لانتانیدی در ترازهای انرژی ایجاد می‌کند. هامیلتونی میدان بلوری در نمادگذاری وایبورن فشرده به شکل زیر نمایش داده می‌شود [۸]:

$$\hat{H}_{CF} = \sum_{k=0}^{k_{max}} \sum_{q=-k}^{q=k} B_q^k \hat{C}_q^k, \qquad (۲)$$

که در آن B_q^k پارامترهای میدان بلوری می‌باشند. در حالت کلی این پارامترهای میدان بلوری مختلط‌اند.

$$\hat{C}_q^k = \left(\frac{4\pi}{2k+1}\right)^{1/2} Y_{kq}, \qquad (۳)$$

که در آن Y_{kq} هماهنگ‌های کروی هستند. $\hat{C}_q^k$ تانسور کروی مرتبه k است. به دلیل حقیقی و هرمیتی بودن پتانسیل داریم:

$$B_q^k = (-1)^q B_{-q}^{k^*}, \qquad (٤)$$

برای الکترون‌های f مقدار k_{max} برابر ٦ است [۸]. علاوه بر این، برای پیکربندی‌هایی که فقط شامل الکترون‌های f هستند، همه‌ی جملات با k فرد حذف می‌شوند [۸]. همچنین با توجه به تقارن گروه نقطه‌ای فقط تعدادی از پارامترها غیر صفر هستند، زیرا پتانسیل بلور باید تحت تمام عمل‌های تقارنی گروه تقارنی نقطه‌ای ناوردا باشد [۸].

با توجه به موارد گفته شده در تقارن C_{4v} و D_{4h} هامیلتونی میدان بلوری به شکل زیر است:

(۵)
$$\hat{H}_{CF} = \sum_{k=2,4,6} B_0^k \hat{C}_0^k + B_{-4}^4 \hat{C}_{-4}^4 + B_4^4 \hat{C}_4^4 + B_{-4}^6 \hat{C}_{-4}^6 + B_4^6 \hat{C}_4^6,$$

که در آن همه‌ی پارامترها به دلیل وجود صفحات تقارنی بازتاب حقیقی‌اند. بنابراین، با توجه به رابطه‌ی (٤) هامیلتونی میدان بلوری دارای پنج پارامتر مستقل می‌باشد.

روش انجام محاسبه

روش اجرا شامل چندین گام است [۹]. مرحله نخست حل خودسازگار استاندارد معادله‌های کوهن–شم براساس نظریه‌ی تابعی چگالی بر پایه روش امواج تخت بهبود یافته می‌باشد. ما در اینجا از برنامه WIEN2k استفاده کرده‌ایم [۱۰]. برای تابعی انرژی تبادلی– همبستگی تقریب شیب تعمیم یافته GGA-PBE در نظر گرفته‌ایم. انرژی جداسازی بین حالت‌های ظرفیت و مغزه را ۹– ریدبرگ و تعداد نقاط بهینه در منطقه‌ی اول بریلوین را 700 انتخاب کرده‌ایم. پارامترهای محاسباتی $R_{MT}K_{max}$= ۸ و $Bohr^{-1}$ G_{max}= ۱٦ در نظر گرفته شده‌اند. محاسبه غیر اسپین– قطبیده با در نظر گرفتن الکترون‌های ٤f در مغزه به دلیل غلبه بر مشکل خودبرهمکنش صورت گرفته است. نتیجه‌ی این مرحله پتانسیلی است که آن را در مرحله‌ی بعدی استفاده می‌کنیم.

در مرحله‌ی دوم الکترون‌های ٤f را به ناحیه‌ی ظرفیت باز می‌گردانیم و سایر الکترون‌های ظرفیت را از ناحیه‌ی ظرفیت خارج می‌کنیم.

در ادامه هایمیلتونی موضعی الکترون‌های f در پایه‌های وانیر را با تبدیل حالت‌های بلاخ به توابع وانیر با استفاده از کد WANNIER90 [۱۱] استخراج می‌کنیم. قسمت بدون رد این هایملتونی، هامیلتونی میدان بلوری می‌باشد. با بسط هامیلتونی به‌دست آمده بر اساس تانسورهای کروی، ضرایب بسط، پارامترهای میدان بلوری در نماد گذاری وایبورن، به دست می‌آیند. سپس با قرار دادن پارامترهای میدان بلوری در هامیلتونی مؤثر معادله (۱) یکبار بدون در نظر گرفتن جمله‌ی زیمان و یکبار با در نظر گرفتن جمله‌ی زیمان ترازهای انرژی شکافته شده توسط میدان بلوری را به دست می‌آوریم. با استفاده از ترازهای انرژی در حضور میدان مغناطیسی و استفاده از آمار بولتزمن وابستگی دمایی مغناطش یون‌های مورد نظر را محاسبه می‌کنیم. جزییات بیشتر این روش را می‌توان در مرجع [۱۲] مشاهده کرد. محور x–ها را در جهت محور a بلور و محور z–ها رادر جهت محور c بلور در نظر گرفته‌ایم.

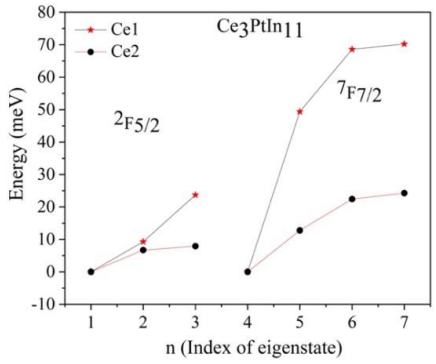
نتایج و بحث

پارامترهای میدان بلوری محاسبه شده برای دو جایگاه یون‌های Ce^{3+} در جدول (۱) آورده شده‌اند. همانطور که انتظار داشتیم پنج پارامتر مستقل حقیقی برای هر یک از جایگاه‌ها به‌دست آمده‌اند.

جدول ۱: پارامترهای میدان بلوری ترکیب Ce_3PtIn_{11} همه پارامترها در واحد Cm^{-1}.

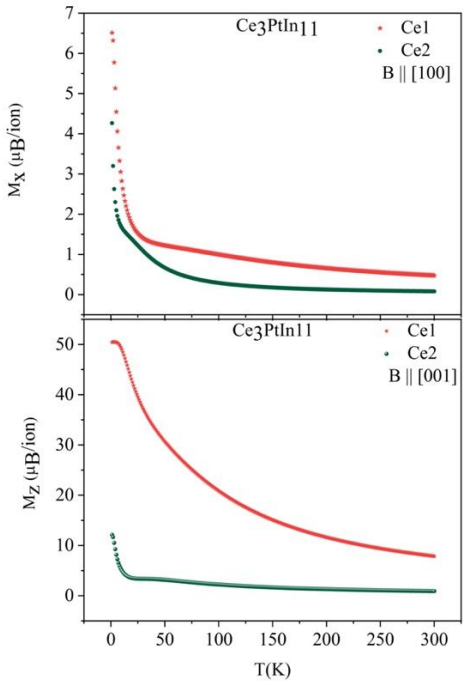
kq	۲۰	٤۰	٤٤	٦۰	٦٦
Ce1	107	-128	-74	-335	**683**
Ce2	٥۳٥	-۷۷٦	۳٥۸	١٤	۷۷۷

پیکربندی یون Ce^{3+} شامل یک الکترون ٤f است. از اینرو اندازه حرکت مداری آن برابر ۳ و اسپین آن برابر ۱/۲ می‌باشد. درنتیجه با توجه به قوانین هوند حالت پایه به صورت $^2F_{5/2}$ با اندازه حرکت زاویه‌ای کل ٥/۲ است. از آنجایی که تبهگنی کرامرز ناشی از فرد بودن تعداد الکترون هاست، انتظار می‌رود میدان الکتریکی قادر به حذف کامل این تبهگنی‌ها نباشد. در شکل (۲) ترازهای انرژی شکافته شده‌ی حالت پایه $^2F_{5/2}$ و حالت برانگیخته $^2F_{7/2}$ برای هر کدام از جایگاه‌ها نشان داده شده‌اند. مطابق انتظار حالت پایه به سه تراز دوبار تبهگن و حالت برانگیخته به چهار تراز دوگانه شکافته شده‌اند که در توافق با نظریه‌ی گروه در تقارن چهارگوشی هستند. با اعمال میدان مغناطیسی خارجی تبهگنی کرامرز از بین می‌رود. ترازهای انرژی سریم یک مقدارهای بالاتری دارند.



شکل ۲: ترازهای انرژی شکافته شده یون Ce^{3+}

در شکل (۳) مغناطش برحسب دما در حضور میدان مغناطیسی خارجی به‌برزگی نیم تسلا در جهت‌های [۱۰۰] و [۰۰۱] داده شده است. مغناطش یون سریم نوع اول در هر دوجهت به‌ویژه در دماهای پایین بزرگتر از سریم نوع دوم می‌باشد. با افزایش دما مغناطش در هر دو جهت محاسبه شده کاهش یافته و به مقدار ثابتی میل می‌کند. مغناطش در جهت a یک مرتبه‌ی بزرگی بزرگتر از جهت c است. مغناطش یون‌های سریم در حالت بدون اعمال میدان مغناطیسی خارجی حدود ۲/۵ مگنتون بوهر گزارش شده است [۱۳، ۱٤]؛ با این‌حال، برای بررسی کامل مغناطیس ترکیب Ce_3Ptin_{11} آزمایش‌های پراکندگی نوترون ضروری به‌نظر می‌رسند.



ل

شکل ۳: وابستگی مغناطش به دما در حضور میدان مغناطیسی ۰/۵ تسلا در جهت‌های [۱۰۰] و [۰۰۱]

نتیجه گیری

ما در این کار با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن پارامترهای میدان بلوری یون های Ce^{3+} در ترکیب Ce_3PtIn_{11} را به‌دست آوردیم. همچنین شکافتگی‌های میدان بلوری ترازهای انرژی یون های Ce^{3+} در توافق با پیش‌بینی نظریه‌ی گروه تعیین شدند. اندازه شکافتگی‌های ترازهای انرژی یون سریم نوع یک بیشتر از نوع دو به‌دست آمد. سپس، با استفاده از ویژه مقدارهای انرژی در حضور میدان مغناطیسی نیم تسلا در جهت‌های a و c و آمار بولتزمن وابستگی دمایی مغناطش تعیین شده است. نتایج مغناطش بزرگتری را برای یون سریم نوع اول در هر دوجهت نشان می‌دهند. برای همه یون‌های سریم مغناطش در جهت a یک مرتبه بزرگی بزرگتر از جهت c به‌دست آمده‌اند.

مرجع‌ها

[1] T. Takeuchi, T. Inoue, K. Sugiyama, D. Aoki, Y. Tokiwa, Y. Haga, K. Kindo, and Y. Onuki; "Magnetic and thermal properties of CeIrIn5 and $CeRhIn_5$"; *Journal of the Physical Society of Japan* **70**, (2001) 877-883.
[۲] G. Chen, S. Ohara, M. Hedo, Y. Uwatoko, K. Saito, M. Sorai, and I. Sakamoto; "Observation of superconductivity in heavy-fermion compounds of Ce_2CoIn_8"; *Journal of the Physical Society of Japan* **71**, (2002) 2836-2838.
[۳] M. Nicklas, V. A. Sidorov, H. A. Borges, P. G. Pagliuso, C. Petrovic, Z. Fisk, J. L. Sarrao, and J. D. Thompson; "Magnetism and superconductivity in Ce_2RhIn_8"; *Phys. Rev. B* **67**, (2003) 020506.
[٤] D. Kaczorowski, A. P. Pikul, D. Gnida, and V. H. Tran; "Emergence of a Superconducting State from an Antiferromagnetic Phase in Single Crystals of the Heavy Fermion Compound Ce_2PdIn_8"; *Phys. Rev. Lett.* **103**, (2009) 027003.
[٥] M. Matusiak, D. Gnida, and D. Kaczorowski; "Quantum criticality in Ce_2PdIn_8: A thermoelectric study"; *Phys. Rev. B* **84**, (2011) 115110.
[٦] M. Kratochvilova, M. Dusek, K. Uhlirova, A. Rudajevova, J. Prokleska, B. Vondrackova, J. Custers, and V. Sechovsky; "Single crystal study of the layered heavy fermion compounds Ce_2PdIn_8, Ce_3PdIn_{11}, Ce_2PtIn_8 and Ce_3PtIn_{11}"; *Journal of Crystal Growth* **397**, (2014) 47-52.
[۷] W. T. Carnall, G. L. Goodman, K. Rajnak, and R. S. Rana; "A systematic analysis of the spectra of the lanthanides doped into single crystal LaF_3"; *The Journal of Chemical Physics* **90**, (1989) 3443-3457.
[۸] B. G. Wybourne; *"Spectroscopic properties of rare earths";* (Interscience Publishers New York), (1965).
[۹] P. Novák, K. Knížek, and J. Kuneš; "Crystal field parameters with Wannier functions: Application to rare-earth aluminates"; *Physical Review B* **87**, (2013) 205139.
[۱۰] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, R. Laskowski, F. Tran and L. D. Marks; WIEN2k, *"An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties";* (Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria), (2018). ISBN 3-9501031-1-2.
[۱۱] A. A. Mostofi, J. R. Yates, Y.-S. Lee, I. Souza, D. Vanderbilt, and N. Marzari; "wannier90: A tool for obtaining maximally-localised Wannier functions"; *Computer Physics Communications* **178**, (2008) 685-699.
[۱۲] L. Mollabashi, S. Jalali-Asadabadi, C. Rudowicz, M. Acikgoz, Z. Ghasemi-Dorcheh, R. Ebrahimi-Jaberi, M. Jalali-Asadabadi, S. Rahimi, and F. Jalali-Asadabadi, "Numerical study of the temperature-dependent magnetization and susceptibility of Tm3+ in LiTmF4"; *Phys. Rev. B* **110**, (2024) 054440.
[۱۳] H. Fukazawa, K. Kumeda, N. Shioda, Y. Lee, Y. Kohori, K. Sugimoto, D. Das, J. Bławat, and D. Kaczorowski, "Successive magnetic transitions in the heavy-fermion superconductor Ce_3PtIn_{11} studied by ^{115}In nuclear quadrupole resonance"; *Phys. Rev. B* **102**, 165124 (2020).
[۱٤] N. Shioda, K. Kumeda, H. Fukazawa, T. Ohama, Y. Kohori, D. Das, J. Bławat, D. Kaczorowski, and K. Sugimoto, *Phys. Rev. B* **104**, 245119 (2021).

اثرات اتم های لایه پایانی بر ساختار الکترونی تک لایه مکسین‌های Sc_2CT_2 (T = Br and F)

نویسندگان: مرادی، ابوالفضل [1]؛ مصطفایی، علیرضا [2]؛ حیدری سمیرمی ،ابراهیم [1]

[1] گروه فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

[2] گروه فیزیک، دانشگاه تهران،تهران، ایران

چکیده

در این پژوهش، خواص الکترونی و سهم اوربیتال‌های اتمی در مکسین‌های دوبعدی Sc_2CT_2 (T = Br, F) با استفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT) مورد بررسی قرار گرفته است. ساختار نواری با تفکیک اوربیتالی نشان می‌دهد که رفتار الکترونی این ترکیبات به شدت تحت تأثیر برهم‌کنش میان اوربیتال‌های d عنصر اسکاندیم و اوربیتال‌های p اتم‌کربن قرار دارد. نتایج نشان می‌دهد که نزدیک تراز فرمی، سهم غالب مربوط به اوربیتال‌های Sc-3d بوده و با تغییر گروه عاملی از Br به F شکاف انرژی افزایش می‌یابد. مقادیر شکاف انرژی برای ترکیبات Sc_2CBr_2 و Sc_2CF_2 به ترتیب برابر با 0.96 و 1.43 الکترون‌ولت به‌دست آمد. افزایش شکاف انرژی ناشی از افزایش الکترونگاتیوی گروه‌های عاملی و تقویت هیبریداسیون اوربیتالی است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که کنترل گروه‌های سطحی می‌تواند روشی مؤثر برای تنظیم خواص الکترونی مکسین‌ها در کاربردهای نانوالکترونیک و اسپینترونیک باشد.

کلیدواژه‌ها: *مکسین، نظریه تابعی چگالی، چگالی حالت، نانومواد دوبعدی، ساختار نواری با تفکیک اوربیتالی*

Surface termination effects on the electronic structure of the Sc_2CT_2 (T=Br and F) MXene monolayers

Abolfazl ,Moradi[1]; Mostafaei, Alireza[2]; Ebrahim ,Heidari Semiromi[1]

[1] *Department of Physics, University of Kashan, Kashan, 87317-53153, Iran*

[2] *Department of Physics, University of Tehran, Tehran14395547, Iran*

Abstract

In this study, the electronic properties and contributions of atomic orbitals in two-dimensional Sc_2CT_2 (T = Br, F) mxenes have been investigated using density functional theory (DFT) calculations. The band structure with orbital separation shows that the electronic behavior of these compounds is strongly influenced by the interaction between the d orbitals of scandium and the p orbitals of surface atoms. The results show that near the Fermi level, the dominant contribution is from the Sc-3d orbitals and the energy gap increases with the change of functional group from Br to F. The energy gap values for Sc_2CBr_2 and Sc_2CF_2 were obtained to be 0.96and 1.43 eV, respectively. The increase in the energy gap is due to the increase in electronegativity of the functional groups and the strengthening of orbital hybridization. The results of this research show that controlling surface groups can be an effective way to tune the electronic properties of mxenes in nanoelectronic and spintronic applications.

Keywords: *Mxene, Density Functional Theory, Density of States,Two-dimensional Nanomaterials, Orbital-Separated Band Structure*

مقدمه

با کشف مواد دو بعدی و ویژگی‌های خاصی که از خود نشان دادند، علاقه‌ی محققان برای مطالعه‌ی خواص و توسعه‌ی فیزیکی این مواد افزایش یافت. در سال 2011 میلادی، ترکیبات مکسین به خانواده‌ی مواد دوبعدی افزوده شدند [1]. در اغلب روش‌های سنتز، ترکیبات دوبعدی مکسین با فرمول شیمیایی $M_{n+1}AX_n$ از سنتز مواد توده‌ای به‌نام مکس فازها حاصل می‌شوند. که در آن M از عناصر واسطه، A به‌طور عمده از عناصرگروه 13 و 14 جدول تناوبی و X عنصر کربن یا نیتروژن است. n نیز مقداری بین 1 تا 3 را دارد[2]. از طرفی مکس فازها از عناصر فلزی و غیرفلزی ساخته شده‌اند و در دماهای بالا سنتز و معمولاً به‌عنوان یک سرامیک در نظر گرفته می‌شوند. این مواد دارای خاصیت مکانیکی، حرارتی و پایداری بالایی هستند. که می‌توانند در شرایط سخت، مقاومت خود را در برابر شوک حرارتی، فرسودگی یا اکسیداسیون حفظ کنند که برای افزایش کاربردهای این مواد بسیار مهم است. در ترکیبات مکس فاز، پیوند بین اتم‌های M و A بسیار ضعیف‌تر از پیوند بین M و X است. از این رو، لایه‌ی A با استفاده از مواد اسیدی (همچون HF و HCl) حذف می‌شود و ترکیب مکسین با فرمول شیمیایی $M_{n+1}X_n$ به‌دست می‌آید. به‌طور عمده، اغلب مواد مکسین از خود خاصیت فلزی نشان می‌دهند. اما برخی از این مواد می‌توانند با افزودن لایه‌ی پایانی از عناصری مانند O، OH، F، Cl به عنصر M (مانند Sc_2CCl_2 و Sc_2CO_2) خاصیت نیم‌رسانایی داشته باشند [3]. طبق مطالعه‌های تجربی و تئوری، مکسین‌ها کاربردهای مختلفی در زمینه ذخیره‌ی انرژی (الکترود باتری‌های لیتیوم یونی و سدیم یونی) ترموالکتریک، اپتوالکترونیک، پیزوالکتریک و فوتوکاتالیست دارند [4]. در این پژوهش، ساختار الکترونی دو مکسین Sc_2CF_2 و Sc_2CBr_2 مورد بررسی قرار گرفته است. تمرکز اصلی بر تحلیل اثرات لایه پایانی مختلف در ساختار الکترونی و تنظیم شکاف نواری و نواحی نزدیک به تراز فرمی است.

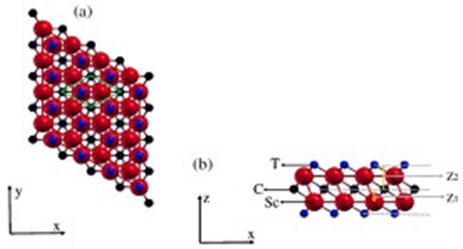
روش محاسباتی

محاسبات با استفاده از امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل و اوربیتال موضعی (FP-LAPW+lo) در چارچوب نظریه تابعی چگالی انجام شده است. برای محاسبه انرژی تبادلی- همبستگی از تقریب پتانسیل بک- جانسون اصلاح شده [5] (TB-mBJ) در بسته‌ی محاسباتی WIEN2k استفاده شده است. برای جلوگیری از برهم‌کنش بین تک‌لایه‌های مکسین در امتداد محور z ، خلاء معادل 20 Å در نظر گرفته شد. تعداد توابع پایه در ناحیه بین جایگاهی با مقدار$R_{MT}K_{max}$ =8 (R_{MT} کوچک-ترین شعاع کره‌ی مافین-تین و K_{max} اندازه‌ی بیشینه‌ی بردار موج شبکه معکوس) تعیین می‌شود که برای Sc_2CF_2 وSc_2CBr_2 انتخاب شد. چگالی الکترونی و پتانسیل داخل کره‌ی مافین‌تین برحسب توابع هارمونیک کروی با شعاع قطع l_{max} =10 و در ناحیه بین‌جایگاهی با استفاده از بسط فوریه محاسبه شدند. بردار موج قطع برای بسط فوریه چگالی بار و پتانسیل G_{max} =14 انتخاب شد. تعداد نقاط k مورد استفاده در منطقه بریلوئن برابر 3000 انتخاب شد. میزان انرژی جداکننده‌ی الکترون از هسته برای تمام ساختارها -6.0 Ry تنظیم شد. مکسین های Sc_2CT_2(T=Br,F) یک ساختار شبکه شش ضلعی را دارا می باشند. (همانطور که در شکل 1 نشان داده شده است) که شامل یک Sc2C دو بعدی (در آن یک لایه کربن بین دو لایه Sc قرار گرفته است) و در دو طرف توسط انتهای F یا Br عامل‌دار شده است. پارامترهای شبکه بهینه (a = b) به ترتیب 3.26 و 3.5Å برای Sc_2CF_2 و Sc_2CBr_2 هستند.(جدول1) این مقادیر با گزارش‌های نظری قبلی سازگاری خوبی دارد. [6]

نتایج و بحث

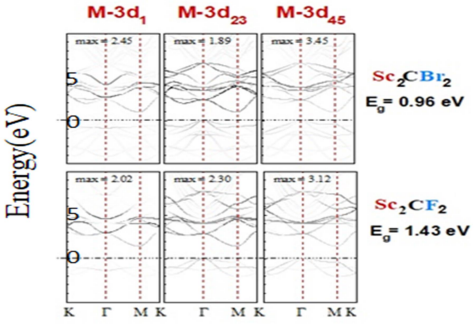
ساختار نواری با تفکیک اوربیتالی

مطالعات گذشته نشان می‌دهد که مواد نیمه رسانای مکسین به دلیل خواص الکترونی و ساختاری منحصربه‌فرد، نقشی حیاتی در پیشرفت فناوری‌های نوین ایفا می‌کنند. در این پژوهش برای شناخت اثرات اتمهای لایه پایانی برساختارالکترونی به بررسی ساختار نواری می پردازیم و در پژوهشهای آینده جوانب دیگر مساله نیز مورد بررسی قرار خواهدگرفت. نتایج ساختار نواری نشان می‌دهد که هر دو ترکیب مورد مطالعه Sc_2CF_2 و Sc_2CBr_2 نیمه رسانا با شکاف انرژی 1.43 و 0.96 هستند(جدول1).در ابتدا نتایج به وضوح بیان می کنند که تغییر اتم لایه پایانی منتج به تغییرات در اندازه شکاف انرژی خواهد بود. برای بینش بیشتر ما اربیتالهای با سهم مشارکت بالا در اطراف تراز فرمی را مطالعه کردیم تا اثرات این تغییرات را بیشتر نشان دهیم. نتایج نشان می دهد نوارهای اطراف تراز فرمی بیشترین سهم را به اربیتالهای Sc-3d و C-p اختصاص می دهند. این موضوع بیانگر نقش کلیدی اتم اسکاندیم و کربن در هدایت الکترونی است.



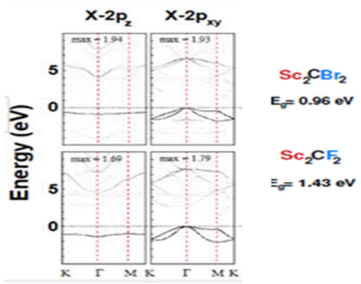
شکل1: جزئیات ساختاری وهندسی تک لایه های مکسین Sc_2CF_2 و Sc_2CBr_2 (الف) نمای بالا و (ب) نمای جانبی

شکل دو نشان میدهد که اربیتالهای اطراف تراز فرمی در اسکاندیوم dz^2 ، $d_{x^2-y^2}/d_{xy}$ و d_{yz}/d_{zx} است که بیشترین سهم را بر اساس نتایج محاسبه شده به اربیتالهای $d_{x^2-y^2}$ و d_{xy} اختصاص می دهد. یعنی اینکه بیشترین سهم برای تنظیم رفتارهای ساختار الکترونی دراتم اسکاندیوم مکسین های مورد مطالعه به اربیتالهای $d_{x^2-y^2}$ و d_{xy} وابسته است.



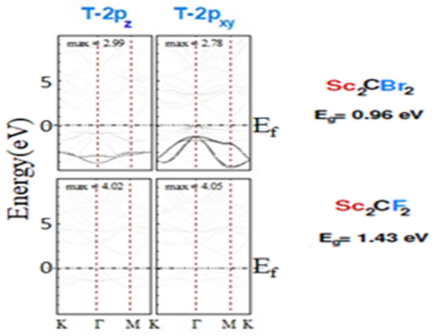
شکل2. ساختار نواری جزیی بر حسب اوربیتال‌های dz^2 ، $d_{x^2-y^2}/d_{xy}$ و d_{yz}/d_{zx} (در مدل تنگ بست ، ما قرارداد اندیس‌گذاری اوربیتال‌ها را برای اوربیتال‌های d به صورت زیر اتخاذ می‌کنیم: $dz^2 = d_1$، $dx^2-y^2 = d_2$، $dxy = d_3$، $dyz = d_4$ و $dzx = d_5$) اتم اسکاندیوم برای مکسین‌های دوبعدی Sc_2CBr_2 و Sc_2CF_2 در امتداد مسیر تقارنی K–Γ–M–K در ناحیه بریلوئن. خطوط قرمز نقطه‌چین نقاط با تقارن بالا را نشان می‌دهند.

شکل سه نشان می دهد که اربیتالهای p_x، p_y و p_z اتم کربن در نوارهای ظرفیت نزدیک به تراز فرمی سهم موثری را تشکیل می دهند. اما نتایج نشان می دهد که بیشترین سهم مربوط می شود به اربیتالهای p_x و p_y که می تواند در مطالعات تعیین اثرات اتمی و رهیافت های جدید مانند تنگ بست کمک اساسی را برای شناخت از ساختارها داشته باشد.



شکل3. ساختار نواری جزیی، بر حسب اوربیتال‌های سطحی C-2p(z) و C-2p(xy) برای مکسین‌های دوبعدی Sc_2CBr_2و Sc_2CF_2 .

شکل چهار نشان می دهد که اتم های لایه پایانی اثرات قابل توجهی را در اطراف تراز فرمی نشان نمی دهند اما به وضوح می بینیم که تغییرات در پهنای نوارهای ظرفیت در زیر خط فرمی تحت تاثیر این اتم ها می باشد . پس می توان به این نتیجه رسید که اثرات اتم های لایه پایانی اثرات ثانویه بر تنظیم اندازه شکاف نواری را خواهد داشت که نتایج نیز این را نشان می دهد. از طرفی اندازه اتمی در لایه های پایانی باعث می شوند که امکان انتقال الکترون با انرژی کمتر در Sc_2CBr_2 نسبت به Sc_2CF_2 اتفاق بیافتد که این موضوع مستقیما در اندازه شکاف نواری گزارش شده بر اساس نتایج در این پژوهش قابل مشاهده است.



شکل 4. ساختار نواری تفکیک‌شده بر حسب اوربیتال‌های اتمهای لایه سطحی شامل T-2pz و T-2pxy برای مکسین‌های دوبعدی Sc_2CBr_2 و Sc_2CF_2

جدول 1: ثابت شبکه (Å) و شکاف انرژی (eV) برای مکسین‌های دوبعدی Sc_2CT_2 (T = Br, F)

مکسین تک لایه	ثابت $a= b$ (Å) شبکه	شکاف انرژی (eV)
Sc_2CBr_2	3.5	0.96
Sc_2CF_2	3.26	1.43

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، خواص الکترونی مکسین‌های Sc_2CF_2 و Sc_2CBr_2 با استفاده از محاسبات DFT مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که اوربیتال‌های Sc-3d نقش اصلی در رفتار الکترونی دارند.همچنین در نوارهای ظرفیت نزدیک به تراز فرمی بیشترین سهم مربوط به اربیتالهای p_x و p_y اتم کربن می باشد. با افزایش الکترونگاتیوی عامل سطحی، در Sc_2CF_2 نسبت به Sc_2CBr_2 شدت هیبریداسیون افزایش یافته وموجب افزایش شکاف انرژی می‌شود.ساختارهای مورد مطالعه دارای قابلیت تنظیم خواص الکترونی از طریق عامل‌دارسازی سطحی هستند.این نتایج می‌تواند در طراحی مواد دوبعدی جدید برای کاربردهای الکترونیکی و اسپینترونیکی مورد استفاده قرار گیرد.

سپاسگزاری: این اثر تحت حمایت مادی بنیاد ملی علم ایران(INSF) برگرفته شده از طرح شماره 4033638 انجام شده است. تجهیزات کامپیوتری این پژوهش توسط معاونت پژوهشی دانشگاه کاشان تأمین شده است.

منابع:

1. M. Naguib, M. Kurtoglu, V. Presser, J. Lu, J. Niu, M. Heon, L. Hultman, Y. Gogotsi and M. W. Barsoum, “Two-Dimensional Nanocrystals Produced by Exfoliation of Ti_3AlC_2”, *Adv. Mater.* **23**, (2011) 4248–53.
2. [2]M. Khazaei, R. Ahmad, A. Masao, S. Taizo, and Y. Seiji, “Electronic properties and applications of MXenes: a theoretical review”, J. Mater. Chem. C 5, No. 10 (2017) 2488-2503.
3. A. Mostafaei, and M. Abbasnejad, “Computational studies on the structural, electronic and optical properties of M_2CT_2 (M= Y, Sc and T= F, Cl) MXene monolayer”, *J. Alloys Compd.*, **857** (2021) 157982.
4. M. Khazaei, M. Avanish, S. V. Natarajan, K. S. Abhishek, and Y. Seiji, “Recent advances in MXenes: from fundamentals to applications.”, *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* **23**, No. 3 (2019) 164-178.
5. F. Tran and P. Blaha P., “Accurate Band Gaps of Semiconductors and Insulators with a Semilocal Exchange-Correlation Potential”, *Phys. Rev. Lett.* **102**, (2009) 226401.
6. A. Mostafaei and E. Heidari Semiromi, “A tight-binding model for the electronic structure of MXene monolayers,” Nanoscale, vol. 14, pp. 11760–11769, 2022

بررسی اثر ابعاد ساختاری بر شکاف انرژی و توزیع فضایی اوربیتال‌ها در مکسین Sc_2CF_2

نویسندگان: مرادی، ابوالفضل[1]؛ مصطفایی، علیرضا [2]؛ حیدری سمیرمی ،ابراهیم [1]

[1] گروه فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

[2] گروه فیزیک، دانشگاه تهران،تهران، ایران

چکیده

نقاط کوانتومی مکسین (MXene Quantum Dots, MQDs) به‌عنوان یکی از مهم‌ترین نانوساختارهای صفربُعدی خانواده مکسین، به دلیل اثرات محصورسازی کوانتومی، نسبت سطح به حجم بالا و قابلیت تنظیم شیمی سطح، توجه فراوانی را در میان پژوهشگران علوم مواد، فیزیک نانومقیاس و نانوالکترونیک به خود جلب کرده‌اند. در این مقاله، اثر ابعاد بر خواص الکترونی و توزیع فضایی اوربیتال‌های مرزی نقاط کوانتومی مکسین با استفاده از مدل‌سازی تنگ بست، بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که با کاهش اندازه نقطه کوانتومی از 6.6 نانومتر به 1.65 نانومتر، شکاف باند به‌طور معناداری افزایش می‌یابد که این رفتار با گزارش‌های قبلی درباره وابستگی به اندازه، در نقاط کوانتومی مکسین هم‌خوانی دارد. این نتایج نشان می‌دهد که نقاط کوانتومی مکسین را می‌توان از طریق مهندسی ابعاد ، برای کاربردهای اسپینترونیک، حسگری، فوتوکاتالیز و ادوات اپتوالکترونیک به‌صورت هدفمند طراحی کرد.

کلیدواژه‌ها: *نقاط کوانتومی مکسین، اثر اندازه ، شکاف باند، محصورسازی کوانتومی، چگالی حالات،تنگ بست*

Investigation of the effect of structural dimensions on the energy gap and spatial distribution of frontier orbitals in Sc_2CF_2 mxene

Abolfazl ,Moradi[1]; Mostafaei, Alireza[2]; Ebrahim ,Heidari Semiromi[1]

[1] *Department of Physics, University of Kashan, Kashan, 87317-53153, Iran*

[2] *Department of Physics, University of ,Tehran, Tehran, Iran*

Abstract

MXene quantum dots (MQDs), as one of the most important zero-dimensional nanostructures of the MXene family, have attracted much attention among researchers in materials science, nanoscale physics, and nanoelectronics due to their quantum confinement effects, high surface-to-volume ratio, and tunable surface chemistry. In this paper, the effect of size on the electronic properties and spatial distribution of frontier orbitals of MXene quantum dots is investigated using tight-binding model. The results show that by reducing the quantum dot size from 6.6 nm to 1.65 nm, the band gap increases significantly, which is consistent with previous reports on the size dependence of MXene quantum dots. These results indicate that MXene quantum dots can be purposefully designed for spintronics, sensing, photocatalysis, and optoelectronic device applications through size engineering.

Keywords: *Mxene quantum dots, size effect, band gap, quantum confinement, density of states, tide-bonding*

مقدمه

با کشف مواد دو بعدی و ویژگی‌های خاصی که از خود نشان دادند، علاقه‌ی محققان برای مطالعه‌ی خواص و توسعه‌ی فیزیکی این مواد افزایش یافت. در سال 2011 میلادی، ترکیبات مکسین به خانواده‌ی مواد دوبعدی افزوده شدند [1]. در اغلب روش‌های سنتز، ترکیبات دوبعدی مکسین با فرمول شیمیایی $M_{n+1}AX_n$ از سنتز مواد توده‌ای به‌نام مکس فازها حاصل می‌شوند که در آن، M از عناصر واسطه، A به‌طور عمده از عناصرگروه 13 و 14 جدول تناوبی، X عنصر کربن یا نیتروژن است و n نیز مقداری بین 1 تا 3 را دارد[2]. به‌طور عمده، اغلب مواد مکسین از خود خاصیت فلزی نشان می‌دهند. اما، برخی از این مواد می‌توانند با افزودن لایه‌ی پایانی از عناصری مانند O، OH، F و Cl به عنصر M (مانند Sc_2CF_2 و Sc_2CO_2) خاصیت نیم‌رسانایی داشته باشند. با کاهش بُعد مکسین‌ها از ساختار دوبعدی به نقاط کوانتومی صفربُعدی، رفتار الکترونی و نوری آن‌ها به‌شدت تغییر می‌کند. در مقیاس نانومتری، محصورسازی کوانتومی باعث گسسته شدن سطوح انرژی و تغییر قابل‌توجه در شکاف باند می‌شود. مطالعات پیشین نشان داده‌اند که در نقاط کوانتومی مکسین ، کوچک شدن اندازه جانبی موجب افزایش شکاف باند و جابه‌جایی طیف جذب به سمت طول موج‌های کوتاه‌تر می‌شود. علاوه بر اندازه، نوع اشباع سطحی و حضور نقص‌ها نیز نقش مهمی در تعیین خواص این نانوذرات دارد[3] . در مطالعه خواص الکترونیکی مواد، به‌ویژه در چارچوب محاسبات نظریه تابعی چگالی(DFT) ، سطوح انرژی HOMO و LUMO نقش کلیدی در تعیین رفتار الکترونی سیستم دارند (HOMO بالاترین تراز انرژی اشغال‌شده توسط الکترون‌ها و LUMO پایین‌ترین تراز انرژی خالی در ساختار الکترونی ماده است). اختلاف انرژی بین این دو سطح که به آن شکاف انرژی (HOMO/LUMO-gap) گفته می‌شود، معیاری مهم برای پیش‌بینی ویژگی‌های الکترونیکی، از جمله رسانایی، نیمه‌رسانایی یا عایق بودن مواد محسوب می‌شود. به‌طور کلی کاهش این شکاف، نشان‌دهنده افزایش رسانایی الکترونی و بهبود برهم‌کنش‌های انتقال بار در ماده است. در نانوساختارهای دوبعدی، تغییر اندازه و اصلاحات ساختاری می‌تواند به‌طور قابل توجهی موقعیت HOMO و LUMO را تغییر داده و در نتیجه خواص الکترونیکی سیستم را بهینه‌سازی کند. با وجود این پیشرفت‌ها، هنوز یک مطالعه جامع که به‌طور هم‌زمان اثر ابعاد را بر خواص الکترونی نقاط کوانتومی مکسین بررسی کند، کمتر گزارش شده است. از این‌رو، هدف این مقاله ارائه یک چارچوب محاسباتی برای تحلیل این عامل و تبیین مکانیسم‌های فیزیکی حاکم بر رفتار نقاط کوانتومی مکسین است.

روش محاسبات

مدل‌سازی ساختاری

در این مطالعه، نقاط کوانتومی مکسین با اندازه‌های 1.65، 3.26 و 6.6 نانومتر در نظر گرفته شدند(جدول شماره1). ساختار پایه از نوع Sc_2CF_2 انتخاب شد، زیرا این خانواده از مکسین‌ها یکی از شناخته‌شده‌ترین و پرکاربردترین سیستم‌ها در مطالعات محاسباتی و تجربی است. برای شبیه‌سازی شرایط واقعی،لبه‌ها با گروه عاملی F پایدار شدند.

مدل تنگ بست

برای توصیف الکترون‌های ظرفیت، از مدل تنگ بست همسایه‌نزدیک(NN) استفاده شد. هامیلتونی کلی سیستم به‌صورت زیر نوشته می‌شود.[4]

$$H = \sum_{i,\alpha} \varepsilon_\alpha c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha} + \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha,\beta} t_{i\alpha,j\beta} \left(c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta} + h.c. \right)$$

در این رابطه، ϵi انرژی درجا، $t$ij ضریب پرش بین سایت‌های مجاور، و $c^\dagger$i و ci به‌ترتیب عملگرهای ایجاد و نابودی الکترون هستند.

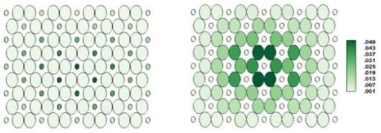
نتایج و بحث

در این پژوهش، تأثیر ابعاد کوانتوم‌دات‌های مکسین بر شکاف انرژی و توزیع فضایی اربیتال‌های مرزی با استفاده از مدل‌سازی تنگ بست بررسی شد. نتایج نشان می‌دهد که با کاهش اندازه ساختار، اثر محدودشدگی کوانتومی تقویت شده و این امر به تغییر محسوس در شکاف انرژی و افزایش تمرکز چگالی اربیتالی در نواحی مشخصی از نانوذره منجر می‌شود. در مقابل، با افزایش ابعاد کوانتوم‌دات، توزیع اربیتال‌ها گسترده‌تر و یکنواخت‌تر شده و رفتار سامانه به‌تدریج به حالت شبه‌توده‌ای نزدیک می‌شود. همچنین مشاهده شد که اربیتال‌های مرزی در ساختارهای کوچک‌تر تحت تأثیر چشمگیر اثرات لبه و هندسه قرار دارند، به‌گونه‌ای که سهم نواحی مرکزی و پیرامونی در توزیع چگالی الکترونی به‌صورت ناهمسان تغییر می‌کند. این یافته‌ها بیانگر آن است که ابعاد نانوذره نقش تعیین‌کننده‌ای در مهندسی خواص الکترونیکی نقاط کوانتومی مکسین دارد و می‌توان از طریق کنترل اندازه، شکاف انرژی و الگوی توزیع اربیتال‌ها را به‌طور مؤثر تنظیم کرد. در مجموع، نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که وابستگی خواص الکترونیکی به اندازه، نه‌تنها یک پدیده بنیادی ناشی از محدودشدگی کوانتومی است، بلکه ابزاری کارآمد برای مهندسی عملکرد نقاط کوانتومی مکسین در مقیاس نانومتری نیز محسوب می‌شود. نتایج محاسباتی نشان می‌دهد که با کاهش اندازه نقاط کوانتومی مکسین ، شکاف باند به‌طور منظم افزایش می‌یابد(جدول1). این رفتار با اثر محصورسازی کوانتومی سازگار است و با گزارش‌های منتشرشده درباره Sc_2CF_2 و دیگر نقاط کوانتومی مکسین، مطابقت دارد[5] . برای نمونه، در ساختار 6.6 نانومتری شکاف باند کمترین مقدار(1.87eV) را دارد، در حالی که در ساختار 1.65 نانومتری، به‌دلیل افزایش محدودیت فضایی، سطوح انرژی گسسته‌تر شده و شکاف باند به بیشترین مقدار(2.04eV) می‌رسد. علاوه برساختارهای مربعی، ساختارهای مستطیل شکل(5*10، 10*5 وغیره) نیز مورد مطالعه قرارگرفت. نتایج حاصل برای شکاف انرژی با ساختارهای مربعی مشابهت دارد(شکل4). این تغییرات بیانگر آن است که نقاط کوانتومی مکسین را می‌توان به‌عنوان یک بسترقابل‌تنظیم برای طراحی مواد با انرژی نوری هدفمند در نظر گرفت.

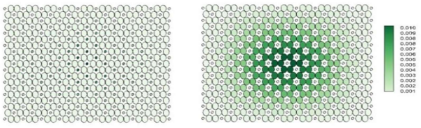
جدول ۱- تغییرات شکاف نواری (eV) و شاخص اندازه (nm) در ساختارهای مختلف برحسب تعداداتم کربن(5×5، 10×10 و 20×20) و مقایسه اثر اندازه بر خواص الکترونیکی ماده

ابعاد ساختار Sc_2CF_2 (برحسب تعداد اتم کربن)	اندازه (nm)	شکاف باند(eV)
5*5	1.65	2.04
10*10	3.26	1.88
20*20	6.6	1.87

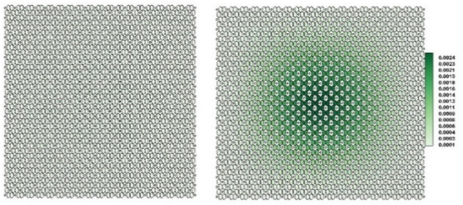
با کاهش ابعاد نقاط کوانتومی مکسین[6]، به دلیل افزایش اثر محصورسازی کوانتومی و افزایش سهم اتم‌های سطحی، چگالی حالت‌های نزدیک به LUMO به‌تدریج از توزیع گسترده در کل ساختار به حالت‌های موضعی متمرکز بر اتم‌های فلزی سطحی تبدیل می‌شود. این تغییر نشان می‌دهد که اوربیتال‌های d فلزات واسطه نقش غالبی در تعیین تراز LUMO دارند.(شکل های1 و2، 3)



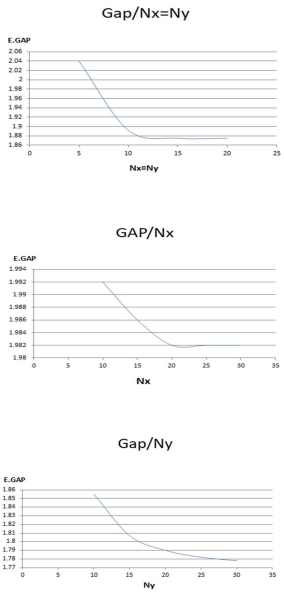
شکل 1 .توزیع فضایی اوربیتال‌های مرزی به ترتیب چپ و راست: HOMO و LUMO در نقطه کوانتومی مکسین Sc_2CF_2 باابعادبرحسب تعداداتم کربن - 5×5 و اندازه جانبی 1.65 نانومتر. همانگونه که مشاهده می‌شود، اوربیتال‌های مرزی دارای الگوی موضعی‌شدن مشخصی در ناحیه مرکزی ساختار هستند.



شکل 2.توزیع فضایی اوربیتال‌های مرزی به ترتیب چپ و راست: HOMO و LUMOدر نقطه کوانتومی مکسین Sc_2CF_2 - 10×10با اندازه جانبی 3.3 نانومتر.



شکل 3.توزیع فضایی اوربیتال‌های مرزی به ترتیب چپ و راست: HOMO و LUMOدر نقطه کوانتومی مکسین Sc_2CF_2 - 20×20با اندازه جانبی 6.6 نانومتر.



شکل 4.وابستگی شکاف انرژی به ابعاد نقطه کوانتومی مکسین، که نشان‌دهنده اثر محدودیت کوانتومی بر ساختار الکترونی سامانه است.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، اثر ابعاد بر خواص الکترونی سطوح HOMO/LUMO نقاط کوانتومی مکسین بررسی شد. نتایج نشان داد که با کاهش اندازه نقاط کوانتومی مکسین ، شکاف باند افزایش می‌یابد و رفتار کوانتومی پررنگ‌تر می‌شود. چون محصورسازی کوانتومی قوی‌تر می‌شود. این یعنی ترازهای انرژی از حالت تقریباً پیوسته به حالت گسسته می‌روند.وهمچنین، چگالی حالت‌های نزدیک به LUMO به‌تدریج از توزیع گسترده در کل ساختار به حالت‌های موضعی متمرکز بر اتم‌های فلزی سطحی تبدیل می‌شود. این تغییر نشان می‌دهد که اوربیتال‌های d فلزات واسطه نقش غالبی در تعیین تراز LUMO دارند.بنابراینمی توان گفت که انتخاب مناسب اندازه می‌تواند نقاط کوانتومی مکسین را برای کاربردهای اسپینترونیک، حسگری بهینه کند.نتایج این مطالعه با گزارش‌های پیشین درباره وابستگی خواص نقاط کوانتومی مکسین به اندازه دارد.در مجموع، یافته‌های این کار نشان می‌دهد که مهندسی ابعاد، راهبردی مؤثر برای طراحی نقاط کوانتومی مکسین با خواص سفارشی است.

سپاسگزاری

این اثر تحت حمایت مادی بنیاد ملی علم ایران(INSF) برگرفته شده از طرح شماره 4033638 انجام شده است. تجهیزات کامپیوتری این پژوهش توسط معاونت پژوهشی دانشگاه کاشان تأمین شده است.

مراجع:

[1] M. Naguib, M. Kurtoglu, V. Presser, J. Lu, J. Niu, M. Heon, L. Hultman, Y. Gogotsi and M. W. Barsoum, “Two-Dimensional Nanocrystals Produced by xfoliation of Ti_3AlC_2”, *Adv. Mater.* 23, (2011) 4248–53.

[2]M. Khazaei, R. Ahmad, A. Masao, S. Taizo, and Y. Seiji, “Electronic properties and applications of MXenes: a theoretical review”, J. Mater. Chem. C 5, No. 10 (2017) 2488-2503.

[3] H. Zhang, M. Li, and X. Wang, “Electronic structure engineering in functionalized MXenes,” *Computational Materials Science*, vol. 170, p. 109231, 2019.

[4] B. Anasori, M. R. Lukatskaya, and Y. Gogotsi, “2D metal carbides and nitrides (MXenes) for energy storage,” *Nature Reviews Materials*, vol. 2, pp. 16098, 2017.

[5] A. Mostafaei and E. Heidari Semiromi, “A tight-binding model for the electronic structure of MXene monolayers,” *Nanoscale*, vol. 14, pp. 11760–11769, 2022

[6] J. Zhou, X. Gao, R. Wang, and Q. Zhang, “Quantum confinement effects in MXene quantum dots,” *Journal of Physical Chemistry C*, vol. 123, no. 15, pp. 9876–9884, 2019.

حالت‌های مقید مایورانا ناشی از گردشاره درساختارهیبریدی متشکل ازابررسانای‌آهن‌پایه و نیمرسانای با جفت‌شدگی اسپین–مدار

حشمتی، مریم؛ صحرایی، احمد؛ مشکوری، مهدی

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیر الدین طوسی، تهران

چکیده

در این مقاله به بررسی عددی حالات انرژی صفر مایورانا در سامانه‌ای هیبریدی متشکل از یک ابررسانای نامتعارف آهن‌پایه، یک لایه با برهم‌کنش اسپین–مدار قوی و یک لایه عایق مغناطیسی پرداخته شده است. با حل عددی معادله‌ی بوگولیوبوف–دژن برای گردشاره در هندسه‌ی استوانه‌ای، اثر پارامتر ناهمسانگردی ناشی از جفت‌شدگی موج‌s- توسعه یافته بر توزیع حالات انرژی صفر و مقادیر گاف کوچک در کانال‌های مختلف تکانه زاویه‌ای $l=-4$ تا $l=+4$ مطالعه شده است. نتایج محاسبات ما نشان می‌دهد که وارد کردن جفت‌شدگی ناهمسانگرد هم علامت با جفت‌شدگی همسانگرد به جایگزیده‌تر شدن حالت‌های مایورانا کمک می‌کند. در مقابل در نظر گرفتن جفت‌شدگی ناهمسانگرد با علامت مخالف جفت‌شدگی همسانگرد جایگزیدگی حالت‌های مایورانا در مرکز گردشاره را شدیدا کاهش می‌دهد.

واژگان کلیدی: *ابررسانای آهن‌پایه، سامانه هیبریدی، گاف کوچک، ابررسانای توپولوژیک*

Majorana Bound States induced by a Vortex in a Hybrid Structure of Iron-Based Superconductor and Spin-Orbit Coupled Semiconductor

Heshmati, Maryam; Sahrayi, Ahmad; Mashkoori, Mahdi

Department of Physics, K.N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran.

Abstract

This article presents a numerical investigation of the minigap associated with Majorana zero-energy states in a hybrid system composed of an unconventional iron-based superconductor, a layer with strong spin–orbit coupling, and a magnetic insulator. By numerically solving the Bogoliubov–de Gennes (BdG) equation for a vortex in a cylindrical geometry, the effect of the anisotropy parameter γ on the distribution of zero-energy states and the values of the minigap in different angular momentum channels from $l=-4$ to $l=+4$ is examined. The results indicate that for negative values of γ, the Majorana zero-energy states become much less localized to the core of vortex, whereas for positive values of γ, Majorana zero-energy states become more localized.

***Keywords**: Iron-based supercondcutor, Hybrid-strucutre, minigap, Topological superconductor*

مقدمه

ذرات مایورانا به عنوان فرمیون‌هایی که پادذره‌ی خودشان هستند، از زمان پیش‌بینی آنها توسط اتوره مایورانا در سال ۱۹۳۷ مورد توجه ویژه‌ی فیزیک‌دانان بوده‌اند. این ذرات در سال‌های اخیر به دلیل خواص منحصربه‌فرد آمار غیرآبلی، به عنوان یکی از کاندیداهای اصلی برای محاسبات کوانتومی توپولوژیک شناخته شده‌اند[۱,۲].

مزیت اساسی محاسبات کوانتومی توپولوژیک، تاب‌آوری بالا در برابر انواع اختلالات محیطی است که تاب‌آوری حالت‌های توپولوژیک مایورانا آن را تامین می‌کند. برخلاف سامانه‌های کوانتومی معمولی که به‌شدت حساس به نوفه هستند، اطلاعات

کوانتومی در سامانه‌های توپولوژیک در درجات آزادی غیرموضعی ذخیره می‌شود که در برابر اختلالات موضعی مقاوم است[۳,٤]. سامانه‌های فیزیک ماده چگال بستری مناسب برای مشاهده شبه‌ذرات مایورانا به عنوان حالت‌های لبه‌ای در ابررساناهای توپولوژیک فراهم می‌کند. پژوهش‌های پیش‌گامانه‌ی کیتائف با ارائه‌ی مدل‌های یک‌بعدی و دوبعدی پدیدار شدن برانگیختگی‌های مایورانا را به لحاظ نظری پیش‌بینی و آزمایش‌های متعدد تجربی و مطالعات نظری پس از آن بستری غنی برای مشاهده‌ی تجربی و بررسی‌های نظری این حالت‌ها را فراهم آورده است. در این مقاله به مطالعه حالت‌های مایورانا در حضور گردشاره در سامانه‌ی هیبریدی مبتنی بر ابررسانایی آهن‌پایه می‌پردازیم.

مدل و روش عددی

ساختار هیبریدی موردنظر، یک سامانه‌ی چند لایه‌ای است که از سه جزء اصلی تشکیل شده است: یک لایه ابررسانای نامتعارف آهن‌پایه با تقارن $s\pm-wave$ ، یک نیمرسانا با جفت‌شدگی اسپین–مدار راشبای قوی، و یک لایه عایق مغناطیسی برای القای میدان زیمان. لایه‌ی ابررسانا از طریق اثر مجاورت، جفت‌شدگی ابررسانایی *extended s-wave* را در نیمرسانا القا می‌کند.

شکل ۱. نمای شماتیک از



سامانه هیبریدی متشکل از ابررسانای آهن پایه

نیمرسانا که هسته‌ی اصلی این ساختار هیبریدی است، عموما از موادی مانند ایندیوم آرسنید یا ایندیوم آنتیموان ساخته می‌شود. جفت‌شدگی اسپین–مدار راشبا(α) در لایه‌ی نیمرسانا نقش کلیدی ایفا می‌کند، زیرا با شکستن تقارن اسپین، شرایط لازم برای ظهور فاز توپولوژیکی را فراهم می‌سازد. پتانسیل شیمیایی (μ) نیمرسانا به‌گونه‌ای تنظیم شده که سطح فرمی در نزدیکی کف نوار رسانش قرار گیرد و تعداد حالات کوانتومی فعال در طیف انرژی بهینه شود. لایه عایق مغناطیسی، برای القای میدان زیمان (V_z) موثر به کار می‌رود. این لایه در زیر نیمرسانا قرار می‌گیرد تا از طریق اثرمجاورت، یک میدان مغناطیسی موضعی در لایه‌ی نیمرسانا ایجاد کند. این میدان زیمان، همراه با جفت‌شدگی اسپین–مدار، شکاف توپولوژیکی را در طیف انرژی باز کرده و امکان ظهور حالت‌های مایورانا را فراهم می‌سازد. شار مغناطیسی اعمال شده در مرکز سامانه‌ی هیبریدی منجر به تشکیل گردشاره شده و از طریق شرایط مرزی روی پارامتر نظم ابررسانایی مدل‌سازی می‌شود[۵,٦].

همیلتونی این سامانه در غیاب لایه ابررسانا به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H_{\cdot}=\frac{P^{2}}{2m^{*}}-\alpha\left(p_x\sigma_y-p_y\sigma_x\right)+V_z\sigma_z-\mu \quad (۱)$$

که در آن قسمت اول مربوط به انرژی جنبشی با جرم موثر m^* می‌باشد. جملات بعد به ترتیب مربوط به جفت‌شدگی اسپین–مدار، جفت‌شدگی زیمان و پتانسیل شیمیایی هستند. در حضور لایه ابررسانا و در نمایش BdG معادله شرودینگر در فضای حقیقی برای این سامانه بصورت معادله ماتریسی زیر نوشته می‌شود:

$$\begin{pmatrix} H_{\cdot} & \Delta_S(r) \\ \Delta_S(r)^* & -\sigma_y H_{\cdot}^{*}\sigma_y \end{pmatrix}\varphi_n(r)=E_n\phi_n(r) \quad (۲)$$

که در این معادله $\varphi_n(r)$ ویژه حالت n - ام و E_n ویژه مقدار n – ام است.

با در نظر گرفتن جابه‌جایی همیلتونی این سامانه با تکانه زاویه‌ای، می‌توان توابع موج را در کانال‌های مختلف تکانه زاویه‌ای به شکل معادله‌ی ۳ بسط داد.

$$\phi_{lj}(r)=\frac{\sqrt{2}}{R}\frac{J_l(\beta_{lj}r/R)}{J_{l+1}(\beta_{lj})} \quad (۳)$$

در این جا J_l تابع بسل مرتبه l و β_{lj} ریشه j –ام این تابع است. همچنین می‌دانیم با در نظر گرفتن حضور یک گردشاره در این سامانه پارامتر نظم به صورت زیر داده می‌شود:

$$\Delta_s(r,\theta) = \Delta_s(r)e^{i\theta} \qquad (٤)$$

که در معادله فوق مقدار پارامتر نظم در مرکز و در لبه‌ی گردشاره برابر صفر است و از حل خودسازگار معادلات BdG به دست می‌آید[۵] . در نهایت با بسط u_l^n و v_l^n ها بر حسب تابع بسل به معادله‌ی ماتریسی زیر می‌رسیم:

(۵)

$$\begin{pmatrix} T_l^+ & S_l & \Delta_l & \cdot \\ S_l^T & T_{l+1}^- & \cdot & \Delta_{l+1} \\ \Delta_l^T & \cdot & -T_{l-1}^- & -S_{l-1} \\ \cdot & \Delta_{l+1}^T & -S_{l-1}^T & -T_l^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{n\uparrow}^l \\ u_{n\downarrow}^{l+1} \\ v_{n\downarrow}^{l-1} \\ -v_{n\uparrow}^l \end{pmatrix} = E_{nl} \begin{pmatrix} u_{n\uparrow}^l \\ u_{n\downarrow}^{l+1} \\ v_{n\downarrow}^{l-1} \\ -v_{n\uparrow}^l \end{pmatrix}$$

که در این معادله v و u و Δ و S و T عبارتند از :

$$(T_l^{\pm})_{ij} = (\frac{\beta_{lj}^2}{R^2} \pm V_z - \mu)\delta_{ij} \qquad (٦)$$

$$(S_l)_{ij} = \alpha \int_0^R r\phi_{li}(r)\left(\partial_r + \frac{l+1}{r}\right)\phi_{l+1,j}(r)dr \qquad (٧)$$

$$(\Delta_l)_{ij} = \int_0^R r\Delta_s(r)\phi_{li}(r)\phi_{l-1,j}(r)dr \qquad (٨)$$

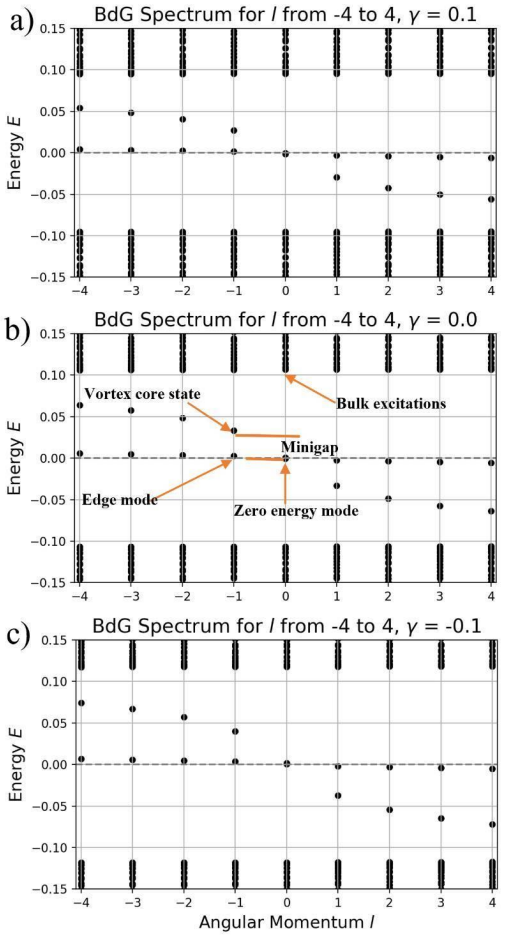
$$u_{n\sigma}^l = [u_{n\sigma 1}^l, \dots, u_{n\sigma j}^l, \dots]^T \qquad (٩)$$

$$v_{n\sigma}^l = [v_{n\sigma 1}^l, \dots, v_{n\sigma j}^l, \dots]^T \qquad (١٠)$$

وابستگی شعاعی پارامتر نظم ابررسانایی در این سامانه به دلیل حضور
ابررسانایی *extended s-wave* بصورت زیر پدیدار می‌شود که که پارامترگاما (γ) بیانگر نسبت جفت‌شدگی ناهمسانگرد به جفت‌شدگی همسانگرد (Δ_1/Δ_0) است. در حد گاما به سمت صفر معادله توصیف کننده ابررسانایی متعارف *s-wave* خواهد بود.

$$\Delta_s(r) = \Delta(r)\left(1 - \gamma\left(\frac{\beta_{l-1,j}}{R}\right)^2\right) \qquad (١١)$$

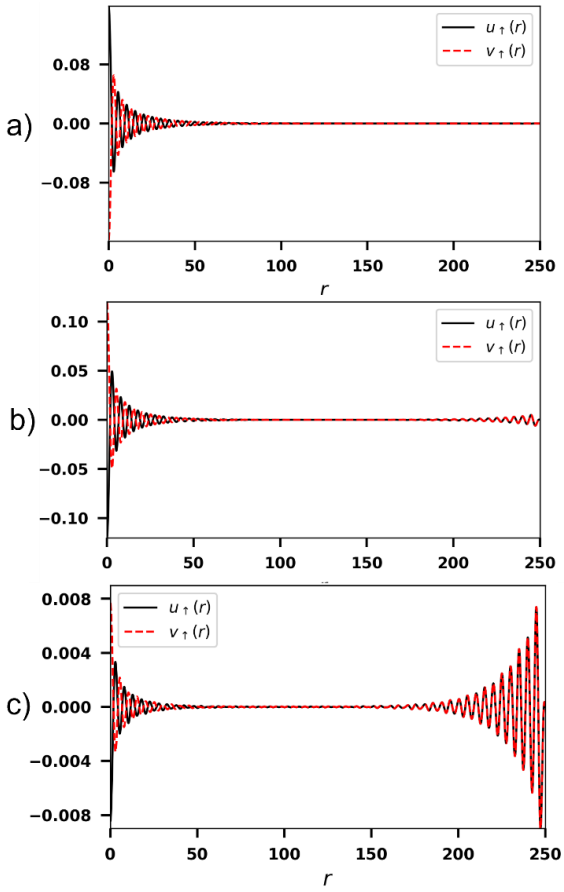
در ادامه با محاسبه‌ی عددی ویژه مقادیر و ویژه‌حالت‌های این ماتریس به بررسی حالتهای مایورانای القا شده در این سامانه می‌پردازیم.



شکل ۲ . در این شکل ویژه مقادیر همیلتونی معادله (٥) به ازای $\alpha = 1$ و $V_z = 0.3$ و $\mu = 0$ و برای مقادیر گاما $\gamma = +1, 0, -1$ به ترتیب در شکل a و b و c نمایش داده شده است.

شکل ۲ طیف انرژی شبه ذرات را به ازای نسبتهای مختلف(Δ_1/Δ_0) و در حضور گردشاره‌ها به‌ازای کانال‌های تکانه زاویه‌ای مختلف از $l = -4$ تا $l = +4$ نشان می‌دهد. در هر سه شکل حالت مایورانا به‌طور منحصربه‌فرد در کانال $l = 0$ و در

انرژی صفر پدیدار می‌شود. طیف پیوسته مربوط به برانگیختگی‌های توده سامانه است که گاف ابررسانای توپولوژیک را مشخص می‌کند. در کانال‌های مربوط به تکانه‌های زاویه‌ای غیر صفر $(l \neq 0)$، دو حالت داخل گاف مشاهده می‌شود که حالت نزدیک به انرژی صفر مربوط به حالت لبه‌ای و حالت با انرژی دورتر از انرژی صفر مربوط به حالت‌های مقید درون مرکز گردشاره است. همانطور که مشاهده می‌شود ، محاسبات به ازای γ برابر با۰ و۱ /۰ و ۱ /۰− تکرار شد ومجددا طیف انرژی شبه ذرات مورد بررسی قرار گرفت.



شکل ۳ توابع موج مایورانا به ازای سه مقدار متفاوت γ. در شکل a: $\gamma = +0.1$ ، شکل b: $\gamma = 0$ و شکل c: $\gamma = -0.1$ در نظر گرفته شد.

نتایج

نتایج محاسبات نشان می‌دهد که پارامتر γ تأثیر قابل توجهی بر روی حالات انرژی صفر مایورانا دارد. محاسبه عددی ویژه مقادیر ماتریس معادله (۵) به ازای $V_z = ۰.۳$ و $\alpha = ۱$ و $\mu = ۰$ در شکل ۲ نمایش داده می‌شود. این شکل طیف همیلتونی را به ازای سه مقدار γ برابر ۰ و۱/ ۰و۱ /۰− نمایش می‌دهد. همان‌گونه که مشاهده می‌کنیم به ازای مقادیر منفی γ گاف کوچک[۱] افزایش پیدا کرده و به ازای مقادیر مثبت گاما این کمیت کاهش پیدا کرده است .همچنین محاسبات ما نشان می‌دهد با وارد کردن جفت‌شدگی *extended s-wave* میزان جایگزیدگی حالت‌های مایورانا تغییر خواهد کرد. لذا در نظر گرفتن ابررسانایی آهن‌پایه می‌تواند جایگزیدگی حالت‌های مایورانا در گردشاره را افزایش یا کاهش دهد .این موضوع در شکل ۳ نمایش داده شده است. همانگونه که در این تصویر مشاهده می‌شود به ازای $\gamma = +۱$ حالت مایورانا در مرکز گردشاره به نسبت حالت $\gamma = ۰$ جایگزیده‌تر می‌گردد. در مقابل به ازای $\gamma = -۱$ جایگزیدگی حالت مایورانا در مرکز گردشاره تا حدود زیادی از بین رفته و به نسبت حالت $\gamma = ۰$ جایگزیدگی به شدت کاهش می‌یابد.

مرجع‌ها

[۱] C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman and S. Das Sarma; "*Non-Abelian anyons and topological quantum computation*"; Reviews of Modern Physics, ۸۰(۳). (۲۰۰۸) ۱۰۸۳-۱۱۵۹
[۲] M. Sato, Y. Takahashi and S. Fujimoto; "*Non-Abelian Topological Orders and Majorana Fermions in Spin-Singlet Superconductors*"; arXiv:۱۰۰۶,٤٤٨٧. (۲۰۱۰)
[۳] A. Kitaev; "*Unpaired Majorana fermions in quantum wires*"; Physics-Uspekhi, ٤٤(۱۰S). (۲۰۰۱) ۱۳۱-۱۳٦
[٤] M. Sigrist; "*Introduction to Unconventional Superconductivity*"; AIP Conference Proceedings, ۷۸۹. (۲۰۰٥) ۱٦٥-۲٤۳
[٥] L. Mao and C. Zhang; "*Robustness of Majorana modes and minigaps in a spin-orbit-coupled semiconductor-superconductor heterostructure*"; Physical Review B, ۸۲(۱۷). (۲۰۱۰) ۱۷٤٥۰٦
[٦] M. Sato and Y. Ando; "*Topological superconductors: a review*"; Reports on Progress in Physics, ۸۰(۷). (۲۰۱۷) ۰۷٦٥۰۱

[۱] Mini-gap

مدل پدیده‌شناختی جریان بحرانی در پیوندگاه جوزفسون تحت تأثیر دما، اختلاف فاز و فشار

اخلاقی قنواتی ، بهار ؛ راست‌خدیو، محمّدامین

مرکز آموزش عالی استهبان–دانشگاه شیراز، استهبان، ایران

چکیده

در این مقاله، رفتار جریان بحرانی در پیوندگاه جوزفسون با در نظر گرفتن هم‌زمان اثرات دما، اختلاف فاز نسبی میان دو ابررسانا و فشار خارجی مورد بررسی قرار می‌گیرد. برای این منظور، یک مدل پدیده‌شناختی ارائه می‌شود که در آن وابستگی دمایی جریان بحرانی بر اساس رابطه‌ی آمبگاوکار–باراتوف توصیف شده و نقش اختلاف فاز از طریق یک تابع گاوسی مؤثر در کوپلینگ تونلی لحاظ می‌گردد. همچنین، اثر فشار به‌واسطه‌ی تغییر در ویژگی‌های سد تونلی و در نتیجه تأثیر بر احتمال تونل‌زنی زوج‌های کوپر در مدل وارد می‌شود. مدل پیشنهادی قادر است وابستگی جریان بحرانی به دما، فاز و فشار را به‌صورت یک چارچوب واحد ارائه دهد. نتایج ما نشان می‌دهند که تغییرات فشار و فاز می‌تواند به‌طور قابل‌توجهی پاسخ جریان بحرانی پیوندگاه را اصلاح کرده و منجر به تغییر در بیشینه جریان بحرانی شود. این چارچوب می‌تواند به‌عنوان مبنایی برای تحلیل‌های پیشرفته‌تر در طراحی سامانه های مبتنی بر پیوندگاه‌های جوزفسون، به‌ویژه در شرایط محیطی متغیر، مورد استفاده قرار گیرد.

PACS No: 74, 73

واژه‌های کلیدی: *پیوندگاه جوزفسون، جریان بحرانی، اختلاف فاز ، فشار*

A Phenomenological Model for the Critical Current in Josephson Junctions under the Influence of Temperature, Phase Difference, and Pressure

Akhlaghi Ghanavati, Bahar ; Rastkhadiv, Mohammad Amin

Estahban Higher Education Center-Shiraz University, Estahban, Iran

Abstract

In this paper, the behavior of the critical current in a Josephson junction is systematically investigated by simultaneously considering the effects of temperature, the relative phase difference between the two superconductors, and external pressure. To this end, a comprehensive phenomenological model is proposed, in which the temperature dependence of the critical current is described based on the Ambegaokar–Baratoff relation, while the role of the phase difference is incorporated through an effective Gaussian function in the tunneling coupling. Furthermore, the effect of pressure is introduced via modifications in the properties of the tunneling barrier, thereby influencing the tunneling probability of Cooper pairs. The proposed model provides a unified framework for describing the dependence of the critical current on temperature, phase, and pressure. The results indicate that variations in pressure and phase can significantly modify the critical current response of the junction, leading to changes in its maximum value. This framework can serve as a foundation for more advanced analyses in the design of systems based on Josephson junctions, particularly under varying environmental conditions.

***Keywords**: Josephson junction, critical current, phase difference, pressure*

مقدمه

پیوندگاه جوزفسون یکی از مفاهیم بنیادی در ابررسانایی است که در آن، دو ابررسانا توسط یک سدّ نازک از یکدیگر جدا می‌شوند [۱,۲]. این سد نازک می‌تواند از جنس‌های مختلفی مانند عایق یا فلز نرمال باشد. ضخامت این سد معمولاً در حد چند نانو متر است [۳,٤]. به‌دلیل تونل‌زنی کوانتومی، جفت‌های کوپر از این سد عبور می‌کنند. در این پدیده، جریان بدون اعمال

هیچ‌گونه ولتاژ خارجی ایجاد می‌شود [۵]. این جریان ناشی از همبستگی کوانتومی بین دو ابررسانا و اختلاف فاز پارامتر نظم در دو طرف پیوندگاه است. همپوشانی تابع موج ابررسانایی در ناحیهٔ پیوند باعث می‌شود زوج‌های کوپر بتوانند از طریق سد نازک عبور کنند و در نتیجه، جریان جوزفسونی بدون افت انرژی در پیوندگاه برقرار شود.

حداکثر مقدار جریان قابل عبور از پیوندگاه جوزفسون با I_C نمایش داده می‌شود که به آن جریان بحرانی می‌گویند. آمبگاوکار و باراتوف رابطه‌ای نظری برای توصیف وابستگی دمایی جریان بحرانی در پیوندگاه تونلی جوزفسون مطرح کردند [٦]. رابطه‌ی نظری آمبگاوکار–باراتوف بیان می‌کند که جریان بحرانی پیوندگاه جوزفسون به گاف انرژی ابررسانایی (Δ) و مقاومت حالت نرمال پیوندگاه (R_n) وابسته است. امّا به‌طور کلی، جریان بحرانی به دما، فاز مؤثرِ ساختاری و فشار نیز وابسته است؛ زیرا این عوامل می‌توانند بر کوپلینگ جوزفسونی و ویژگی‌های سد تونلی اثر بگذارند و آن را بطور قابل ملاحظه‌ای تغییر دهند [۷].

هدف از این مقاله ارائه‌ی یک رابطه‌ی پدیده‌شناسی برای جریان بحرانی جوزفسون برحسب دما، فاز مؤثرِ ساختاری و فشار است. به بیان دیگر، قصد داریم اثرات فاز مؤثرِ ساختاری و فشار را به جملهٔ دمایی رابطهٔ آمبگاوکار-باراتوف اضافه کنیم تا توصیف دقیق‌تری از جریان بحرانی در پیوندگاه جوزفسون به دست آید.

روش

در این مقاله، جریان بحرانی جوزفسون به صورت حاصل‌ضرب سه عامل مستقل در نظر گرفته می‌شود،

$$I_C(T.\theta.p) = I(T)F(\theta)G(P). \qquad (۱)$$

که در آن، $I(T)$ وابستگی دمایی، $F(\theta)$ جملهٔ وابسته به فاز و $G(P)$ جملهٔ وابسته به فشار را نشان می‌دهد. جمله‌ی اوّل، وابستگی دمایی جریان بحرانی است که از رابطه‌ی نظری آمبگاوکار–باراتوف برای پیوندگاه تونلی ابررسانا–عایق–ابررسانا $(S-I-S)$ به دست می‌آید

$$I(T) = \frac{\pi\,\Delta(T)}{2\,eR_n} tanh\left(\frac{\Delta(T)}{2k_BT}\right). \qquad (۲)$$

در این رابطه، $\Delta(T)$ گاف انرژی ابررسانایی، R_n مقاومت حالت نرمال، e بار الکترون و k_B ثابت بولتزمن است. گاف انرژی ابررسانایی، حداقل انرژی لازم برای شکستن زوج‌های کوپر و انتقال سامانه از حالت ابررسانا به حالت نرمال می‌باشد. مقاومت حالت نرمال به مقاومتی گفته می‌شود که رفتار ابررسانایی از بین برود و انتقال بار از طریق حامل‌های الکترون‌های معمولی (بدون زوج کوپر) در ناحیه پیوندگاه انجام شود. اگرچه رابطه‌ی (۲) مستقیماً به‌صورت تابعی از فشار نوشته نشده است، امّا فشار می‌تواند با تأثیر بر گاف ابررسانایی، به‌صورت غیرمستقیم بر این رابطه اثر بگذارد. از آنجا که R_n به هندسه‌ی پیوندگاه و ابعاد ناحیه‌ی تونلی سامانه وابسته است، R_n نیز در عمل می‌تواند تحت تأثیر تغییرات فشار قرار گیرد.

جمله‌ی دوم، $F(\theta)$، به فاز مؤثرِ ساختاری وابسته است. این جمله وابستگی جریان بحرانی به جهت‌گیری نسبی دو طرف پیوندگاه جوزفسون را نشان می‌دهد. جریان جوزفسون با هم‌پوشانی تابع موج جفت‌های کوپر در دو طرف پیوندگاه ارتباط مستقیم دارد. برای توصیف این وابستگی، می‌توان از رویکردهای مختلفی مانند ضریب هم‌پوشانی تابع موج و ناهم‌راستایی ساختاری استفاده کرد. با این حال، هر یک از این توصیف‌ها دارای محدودیت‌هایی هستند. ضریب هم‌پوشانی تابع موج اگرچه از نظر فیزیکی مناسب است، اما مقدار آن به‌صورت مستقیم قابل تعیین نیست لذا برای محاسبهٔ آن به یک مدل میکروسکوپی میانگین نیاز است که از دقّت محاسبات می‌کاهد. از سوی دیگر، مفهوم ناهم‌راستایی ساختاری نیز یک تقریب نه‌چندان مطلوب است که شکل دقیقی از وابستگی جریان بحرانی به فاز را نشان نمی‌دهد. بنابراین، در این مدل پدیده‌شناسی، از فاز مؤثرِ ساختاری با نماد θ استفاده می‌شود؛

زیرا این پارامتر می‌تواند اثر جهت‌گیری نسبی دو طرف پیوندگاه و تغییر هم‌پوشانی تابع موج جفت‌های کوپر را به سادگی در مدل وارد کند.

اگر دو طرف پیوندگاه نسبت به یکدیگر دارای اختلاف فاز ساختاری θ باشند، هم‌پوشانی تابع موج جفت‌های کوپر در دو طرف پیوندگاه یکسان نخواهد بود. از آنجا که جریان بحرانی به میزان این هم‌پوشانی وابسته است، تغییر فاز مؤثرِ ساختاری باعث تغییر جریان بحرانی می‌شود. در این کار، وابستگی جریان بحرانی به فاز مؤثرِ ساختاری را به‌صورت $I_c \propto F(\theta)$ در نظر می‌گیریم.

برای یک فاز خاص θ_m، هم‌پوشانی و در نتیجه جریان بحرانی بیشینه می‌شود. با دور شدن از این فاز بهینه، هم‌پوشانی کاهش یافته و جریان بحرانی نیز افت می‌کند. برای مدل‌سازی چنین رفتاری، باید تابعی انتخاب شود که در $\theta = \theta_m$ بیشینه باشد و با دور شدن از θ_m کاهش یابد. باتوجه به این ویژگی‌ها، تابع گاوسی انتخابی مناسب می‌باشد

$$F(\theta) = e^{\left(-\frac{(\theta-\theta_m)^2}{2\sigma^2}\right)}. \qquad (۳)$$

در این رابطه، θ_m فاز متناظر با بیشینه‌ی جریان بحرانی و σ پهنای فازی تابع گاوسی است. اگر σ کوچک باشد، جریان بحرانی نسبت به تغییرات فاز حساسیت بیشتری دارد در حالی که با بزرگ‌تر شدن σ، این حساسیت کاهش می‌یابد.

اکنون می‌خواهیم جمله‌ای مناسب برای $G(P)$ را بیابیم. احتمال تونل‌زنی کوانتومی (T_{tun})، نسبت به ضخامت مؤثر سد (d_{eff})، رفتار نمایی دارد. برای توضیحات بیشتر به منبع [٤] مراجعه شود. بنابراین با افزایش ضخامت مؤثر سد، احتمال عبور کوانتومی ذرات از سد به‌سرعت کاهش می‌یابد. برای توصیف این رفتار می‌توان نوشت،

$$T_{tun} \propto e^{(-2\,\kappa\, d_{eff})}. \qquad (٤)$$

در این رابطه، پارامتر κ سرعت کاهش دامنه‌ی تابع موج را در ناحیه‌ی سد مشخص می‌کند [۸]. از آنجا که جریان بحرانی جوزفسون ناشی از تونل‌زنی کوانتومی جفت‌های کوپر میان دو طرف پیوندگاه است پس مقدار آن به احتمال تونل‌زنی وابسته باشد. به بیان دیگر، با افزایش احتمال تونل‌زنی جفت‌های کوپر، مقدار جریان بحرانی نیز افزایش می‌یابد. حال با این فرض که تغییرات ضخامت مؤثر سد در فشارهای مورد بررسی، کوچک باشند، می‌توان وابستگی d_{eff} به فشار را در تقریب مرتبه‌ی اوّل به‌صورت خطی در نظر گرفت. در این حالت داریم

$$d_{eff} = d_0 + \beta\, p. \qquad (۵)$$

که در آن d_0 بیانگر ضخامت اوّلیه سد و β ضریب تغییر ضخامت با فشار می باشد. در نتیجه $I_c(p)$ به صورت

$$I_c(p) \propto e^{-2\,\kappa\,(d_0+\beta p)}. \qquad (۶)$$

به‌دست می‌آید. به‌طور معادل، $I_c(p)$ را می‌توان به‌صورت

$$I_c(p) \propto e^{-2\kappa d_0}\, e^{-2\,\kappa\,\beta p}. \qquad (۷)$$

بازنویسی کرد. عامل اول در رابطه‌ی (۷)، به دلیل مستقل‌بودن از فشار، می‌تواند در ضریب جریان بحرانی جذب شود. بنابراین، جمله‌ی وابسته به فشار را می توان به صورت

$$G(P) = e^{-\alpha p}. \qquad (۸)$$

تعریف کرد که در آن $\alpha = 2\,\kappa\,\beta$ می‌باشد. در این رابطه، α ضریب حساسیت فشاری است. اگر $\alpha > 0$ باشد، افزایش فشار باعث کاهش جریان بحرانی شده امّا اگر $\alpha < 0$ باشد، موجب افزایش جریان بحرانی می‌شود.

در جمله‌ی وابسته به فشار، $G(p)$، پارامترهای دیگری مانند کرنش مکانیکی و تغییرات ساختاری نیز مؤثر هستند امّا از آنجا که تعیین دقیق آن‌ها به جزئیات میکروسکوپی ساختار پیوندگاه جوزفسون وابسته است، ما از آنها صرفه نظر می‌کنیم. در کار پیشرو، فشار یک پارامتر خارجیِ قابل‌کنترل است که می‌تواند

از طریق تغییر ضخامت مؤثر سد، احتمال تونل‌زنی و در نتیجه جریان بحرانی را نیز کنترل کرد. هدف این مقاله، ارائهٔ یک رابطه‌ی پیشنهادی برای جریان بحرانی جوزفسون با ترکیب سه جمله‌ی دمایی، فاز مؤثرِ ساختاری و فشاری است که به صورت

$$I_c(T.\theta.p) = \left[\frac{\pi\,\Delta(T)}{2\,eR_n}\tanh\left(\frac{\Delta(T)}{2K_BT}\right)\right] \exp\left(-\frac{(\theta-\theta_m)^2}{2\sigma^2}\right)\exp(-\alpha p) \qquad (۹)$$

به دست می‌آید. تمام مراحل نحوهٔ محاسبهٔ رابطهٔ (۹) در مرجع [۸] آورده شده است. مدل پدیده‌شناختی ارائه‌شده در این کار از رابطهٔ آمبگاوکار–باراتوف برای توصیف وابستگی دمایی جریان بحرانی استفاده می‌کند بنابراین، اعتبار این مدل ارائه شده به پیوندگاه‌های جوزفسون مبتنی بر ابر ساناهای متعارف محدود می‌شود.

نتیجه گیری

در این مقاله، یک مدل پدیده‌شناختی برای توصیف جریان بحرانی در پیوندگاه جوزفسون با در نظر گرفتن هم‌زمان اثرات دما، فاز مؤثرِ ساختاری و فشار ارائه شده است. در این مدل، وابستگی دمایی جریان بحرانی بر پایه‌ی رابطه‌ی آمبگاوکار–باراتوف در نظر گرفته شده است، اثر فاز مؤثرِ ساختاری با استفاده از یک تابع گاوسی مدل‌سازی گردیده است و وابستگی فشاری نیز از طریق تغییرات احتمال تونل‌زنی کوانتومی و ضخامت مؤثر سد تونلی وارد رابطه شده است.

اگرچه در این کار از یک روش پدیده‌شناختی استفاده شده و برخی جزئیات میکروسکوپی مانند ناهمگنی ساختاری و برهم‌کنش‌های دقیق الکترونی در نظر گرفته نشده‌اند، امّا رابطه‌ی پیشنهادی برای جریان بحرانی می‌تواند چارچوبی ساده‌ای برای تحلیل‌های نظری و مقایسه با داده‌های تجربی فراهم آورد. همچنین، این مدل می‌تواند در مطالعات آینده برای بررسی پیوندگاه‌های جوزفسون در ساختارهای پیچیده‌تر، مواد ناهمسانگرد و سامانه‌های تحت فشارهای بالا به عنوان یک مدل مبنا به‌کار گرفته شود.

مرجع‌ها

[1] B. D. Josephson; "Possible new effects in superconductive tunnelling"; *Phys. Lett.* **1**, No. 7 (1962) 251–253.
[2] D. O. Oriekhov, Y. Cheipesh, and C. W. J. Beenakker; "Voltage Staircase in a Current-Biased Quantum-Dot Josephson Junction"; *Phys. Rev. B* **103**, No. 9 (2021) 662-669.
[3] T. Vakhtel and B. Van Heck; "Quantum Phase Slips in a Resonant Josephson Junction"; *Phys. Rev. B* **107**, No. 19 (2023) 195-204.
[4] A. V. Rozhkov and D. P. Arovas; "Josephson Coupling through a Magnetic Impurity"; *Phys. Rev. Lett.* **82**, No. 14 (1999) 2788–2791.
[5] V. Meden; "The Anderson–Josephson Quantum Dot-A Theory Perspective"; *J. Phys. Condens. Matter* **31**, No. 12 (2019) 159-168.
[6] V. Ambegaokar and A. Baratoff; "Tunneling between superconductors"; *Phys. Rev. Lett.* **10**, No. 11 (1963) 486-489.
[7] A. Barone and G. Paternò; "*Physics and Applications of the Josephson Effect*"; Wiley, New York (1982).
[8]https://github.com/bahar1383-akh/Bahar-Formula/blob/main/Bahar%20formula_compressed_medium-1%20Compressed%20Compressed.pdf

مطالعه اثر دما بر سامانه های میکرومکانیکی شامل عایق های توپولوژیک دارای ناهمسانگردی تک محوره تحت تاثیر نیروی کازیمیر

شاکر، مریم[1]؛ تاجیک، فاطمه[1]

[1] گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک دانشگاه الزهرا، تهران

چکیده

در سامانه‌های میکروالکترومکانیکی، نیروی کازیمیر تاثیر غیرقابل‌چشم‌پوشی بر بازدهی سامانه دارد؛ به‌طوری‌که گزینش دقیق ماده می‌تواند محدوده عملکرد پایدار را عمیقاً تغییر دهد. در این مطالعه، صفحات میکروسامانه از جنس عایق توپولوژیک ودارای ناهمسانگردی تک‌محوره در نظر گرفته شده است. هدف مطالعه وابستگی اثر کازیمیر جاذبه و دافعه نسبت به دمادر این سامانه میکرومکانیکی ناهمسانگرد است. نتایج نشان می دهد در رژیم مغناطش‌های کوچک، افزایش ناهمسانگردی که به تقویت پاسخ دی‌الکتریک می‌انجامد حساسیت دمایی نیروی جاذبه را تشدید کرده و در برهمکنش دافعه نیز محدوده‌ی ایجاد ان را به شدت تابع دما می‌کند. در رژیم مغناطش‌های بزرگ دیده شده است، در حضور هرگونه ناهمسانگردی وابستگی برهمکنش های جاذبه و دافعه به تغییرات دما بسیار ضعیف می شود.

واژه های کلیدی: *نیروی کازیمیر، عایق های توپولوژیک، ناهمسانگردی، افت و خیزهای دمایی*

Investigation of Temperature Effects on Micromechanical Systems Based on Uniaxially Anisotropic Topological Insulators Subjected to the Casimir Forse

Shaker, Maryam[1]; Tajik, Fatemeh[1]

[1] *Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Physics Alzahra University, Tehran*

Abstract

In microelectromechanical systems (MEMS), the Casimir force reveals inevitable influence on system performance, so *the precise selection of materials can profoundly alter the stable operating regime and the threshold for the onset of chaotic behavior. In this study, the plates of the microsystem are considered to be made of topological insulators with uniaxial anisotropy to evaluate the sensitivity of the Casimir force on temperature. The results demonstrate that in the low-magnetization regime, an increase in anisotropy—which leads to an enhanced dielectric response—heightens the temperature sensitivity of the attractive force and renders the range of the repulsive interaction highly temperature-dependent. Conversely, in the high-magnetization regime, it is observed that the presence of any anisotropy significantly suppresses the temperature dependence of both attractive and repulsive interactions.*

***Keywords**: Casimir force, topological insulator, anisotropy, thermal fluctuations*

PACS No. 12.20.Ds, 73.20.-r , 68.65.-k

مقدمه

در سال‌های اخیر، توسعه مواد پیشرفته نقش بسزایی در ارتقای کارایی و بهینه‌سازی طراحی سامانه‌های میکرو/نانوالکترومکانیکی (MEMS/NEMS) ایفا کرده است. در این مقیاس، با کاهش ابعاد هندسی و غلبه نسبت سطح به حجم، رفتار سامانه به شدت تحت تأثیر شرایط مرزی قرار می‌گیرد. در این میان، نیروی کازیمیر به‌عنوان یک برهمکنش منحصر به فرد کوانتومی، اثری تعیین‌کننده و اجتناب ناپذیر بر رفتار دینامیکی این سامانه‌ها دارد [1]. از این

رو، تحلیل دقیق و کنترل این نیروی ماکروسکوپیک برای دستیابی به عملکرد پایدار و بهینه در این میکروسامانه‌ها الزامی است.

برهمکنش کازیمیر، به عنوان اثری ماکروسکوپیک از الکترودینامیک کوانتومی، در سال 1948 توسط هندریک کاسیمیر به صورت نظری پیشبینی شد [2]. منشأ فیزیکی این نیرو، نوسانات نقطه صفر میدان الکترومغناطیسی است. در دهه 1950، لیفشیتز و همکارانش با تعمیم این ایده به ساختارهای دی الکتریک، گام مهمی در توسعه این مبحث برداشتند [3]. این نظریه بر پایه قضیه افت‌وخیز–اتلاف استوار است که نوسانات میدان الکترومغناطیسی را با ویژگی‌های اتلافی و قطبش‌پذیری دوقطبی‌های درون صفحات مرتبط می‌سازد. این نظریه، توصیفی یکپارچه از برهمکنش‌های ناشی از نوسانات کوانتومی و افت‌وخیزهای دمایی در تمام فواصل ارائه می‌دهد که رژیم‌های کوتاه‌برد (واندروالس) و بلندبرد (کازیمیر) را به طور همزمان در بر می‌گیرد [4,5].

بر اساس نظریه لیفشیتز، وابستگی نیروی کازیمیر به ویژگی‌های اپتیکی مواد، سازوکار لازم برای تنظیم و کنترل عملکرد اجزای متحرک در میکروسامانه‌ها را فراهم می‌آورد [6,7]. بکارگیری عایق‌های توپولوژیک به دلیل اثر مگنتوالکتریک که به تغییر پاسخ الکتریکی و مغناطیسی این گروه از مواد می‌انجامد، امکان تنظیم بزرگی و تغییر جهت نیرو یعنی تغییر از جاذبه به دافعه را فراهم می‌سازد [8]. مطالعات نشان می‌دهند پوشاندن سطح صفحات عایق توپولوژیک از یک لایه فرومغناطیس باعث میشود در فواصل کوتاه (نسبت به طول موج گرمایی شرایط تولید) رشد نیروی دافعه تحت کنترل قرار گیرد. به طوری که اعمال مغناطش موازی صفحات منجر به نیروی جاذبه و مغناطش پادموازی سبب بروز نیروی دافعه کاسیمیر می‌شود [8]. این سازوکار دافعه، گزینه‌ای ایده‌آل برای ارتقای پایداری دینامیکی و غلبه بر چسبندگی ناخواسته اجزا در سامانه‌های میکروالکترومکانیکی است.

هدف این پژوهش، بررسی پایداری عملکردی در سامانه‌های میکروساختار متشکل از عایق‌های توپولوژیک دارای ناهمسانگردی تک‌محوره با در نظر گرفتن شرایط دمایی است. در این راستا، با در نظر گرفتن یک میکروسامانه بدون اتلاف انرژی، این پرسش مطرح می‌شود که بزرگی نیروی کازیمیر جاذبه و متعاقبا ایجاد چسبندگی بین اجزا ، چگونه با تغییرات دما در حضور بزرگی های متفاوت مغناطش صفحات دگرگون می‌شود. همچنین آستانه رسیدن به برهمکنش دافعه بین اجزا چگونه وابسته به این شرایط است.

روش محاسبات

در این مطالعه، میکروسامانه متشکل از دو صفحه ی موازی از جنس عایق توپولوژیک Bi_2Se_3 با در نظر گرفتن افت و خیزهای دمایی مورد بررسی قرار گرفته است. هر یک از اجزا با لایه نازک مغناطیسی پوشش داده شده اند. انرژی کازیمیر بین دو صفحه موازی بنا بر نظریه لیفشیتز به صورت زیر محاسبه می شود[8]:

$$E(z)=\frac{k_BT}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty'}\int_0^{\infty}dk_\perp k_\perp \log\det[-R_1R_2\,exp(-2k_0z)] \quad (1)$$

در این رابطه $k_\perp$ بردار موج درون صفحه را نشان می دهد، و بردار موج عمود بر صفحات از رابطه زیر به دست می آید:

$$k_i=\sqrt{\varepsilon_i(\xi)\frac{\xi^2}{c^2}+{k_\perp}^2} \qquad (i=0,1,2) \qquad (2)$$

در این رابطه، ξ بیانگر بسامد موهومی است$(\omega=i\xi)$. ماتریس های بازتاب در صفحات اول و دوم، با ضرایب فرنل تعیین می شوند و آن ها را با R_1 و R_2 نشان می دهیم. در یک صفحه عایق توپولوژیکی بدون پوشش مغناطیسی، ماتریس‌های بازتاب قطری هستند، با پوشش یک لایه مغناطیسی و بروز اثر مگنتوالکتریک و شکستن تقارن وارون زمانی، جملات غیرقطری با قطبش‌های آمیخته در ماتریس ظاهر می شوند. r_s^i ، r_p^i و r_{sp}^i ضرایب بازتاب فرنل هستند که به ترتیب مربوط به قطبش عرضی الکتریکی(TE)، قطبش عرضی مغناطیسی (TM) و قطبش آمیخته (TEM) هستند. در ماتریس بازتاب r_s^i و r_p^i عناصر قطری و r_{sp}^i عناصر غیر قطری می باشند که برای هر یک از صفحات عایق توپولوژیک غیر مغناطیسی $(\mu=1)$ به این صورت تعریف می شوند:

$$r_s^i=\frac{(k_0-k_i)(\varepsilon k_0+k_i)-k_ik_0\tilde{\alpha}_i^2}{(k_0+k_i)(\varepsilon k_0+k_i)+k_ik_0\tilde{\alpha}_i^2} \qquad (3)$$

$$r_p^i=\frac{(k_0+k_i)(\varepsilon k_0-k_i)-k_ik_0\tilde{\alpha}_i^2}{(k_0+k_i)(\varepsilon k_0+k_i)+k_ik_0\tilde{\alpha}_i^2} \qquad (4)$$

$$r_{sp}^i=\frac{2k_ik_0\tilde{\alpha}_i}{(k_0+k_i)(\varepsilon k_0+k_i)+k_ik_0\tilde{\alpha}_i^2} \qquad (5)$$

در این روابط $\tilde{\alpha}_i=\alpha\theta_i/\pi$ است. $\alpha=1/137$، ثابت ساختار ریز و θ_i مشخصه اثر مگنتوالکتریک در هر یک از اجزا می باشند که با توجه به رعایت تقارن های موجود در عایق توپولوژیک توسط

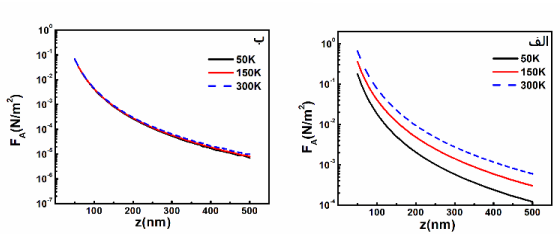
$\theta(\tilde{n}) = \tilde{n}\pi$ توصیف می شود، که $\tilde{n}$ عددی صحیح و فرد می باشد . با مشتق گیری از انرژی، نیروی کازیمیر به دست می آید$(F(z)/A = -dE(z)/dz)$. با وجود ماتریس بازتاب غیر قطری، علاوه بر اندازه نیرو, جهت نیروی کازیمیر قابل تغییر بوده که منجربه ایجاد نیروی جاذبه و یا دافعه می شود، به طوری که با توجه به رابطه بالا، در حالتی که برهم‌کنش دافعه داریم مقادیر مثبت برای F به دست می‌آید و بالعکس، مقادیر منفی نشان‌دهنده نیروی جاذبه خواهد بود؛ این تغییر علامت فیزیکی، همان‌طور که پیش‌تر اشاره شد، از طریق تنظیم مغناطشهای موازی (برای حالت جاذبه) و پادموازی (برای حالت دافعه) میسر می‌گردد.. قسمت موهومی تابع دی الکتریک در بسامد موهومی به صورت زیر ارائه می شود[8]:

$$\varepsilon_i(\xi) = 1 + \frac{\omega_{e_i}^2}{\xi^2 + \omega_{R_i}^2 + \gamma\xi} \qquad (i = \parallel, \perp) \qquad (6)$$

در این رابطه ω_R بسامد تشدید و ω_e نشان دهنده قدرت نوسان الکترون های ماده است. برای عایق توپولوژیک Bi_2Se_3 مقدار بسامد تشدید برابر $56\ cm^{-1}$ است[8]، همچنین در این تحقیق به منظور بررسی تغییرات ناهمسانگردی بر سامانه، نسبت ناهمسانگردی که با $\sigma(=\omega_{e_\perp}/\omega_{e_\parallel})$ مشخص می شود برابر 9 و $1/9$ در نظر گرفته میشود که $\omega_{e_\perp}$ و $\omega_{e_\parallel}$ به ترتیب مربوط به قدرت نوسان در دو راستای درون و خارج صفحه می باشند. γ ضریب میرایی است که مقدار آن بسیار کوچکتر از بسامد تشدید در نظر گرفته می شود بنابراین قابل چشم پوشی است. اعمال لایه نازک مغناطیسی با ضخامتی بسیار کمتر از فاصله ی بین صفحات فرض می شود که بتوان اثرات نیروی کازیمیر ناشی از آن را نادیده گرفت[8]. اندازه مغناطش لایه مغناطیسی قابل کنترل بوده و این ویژگی منجر به تسلط بر بزرگی و جهت نیروی تولید شده می شود.

نتایج

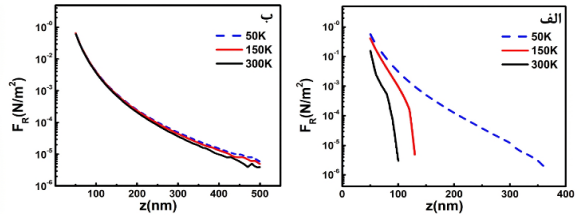
شکل 1 بزرگی نیروی کازیمیر جاذبه در واحد سطح نسبت به فاصله بین دو صفحه را برای مغناطش‌های کوچک، برای $\sigma = 9, 1/9$ در دماهای مختلف نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در حالتی از ناهمسانگردی که پاسخ دی‌الکتریک محیط قوی است، با افزایش دما برهمکنش جاذبه به شدت تقویت می‌شود. دلیل فیزیکی این پدیده در هم‌افزایی اثر دما و خواص ماده نهفته است. افزایش بخش موهومی تابع دی‌الکتریک نشان‌دهنده‌ی افزایش جذب و اتلاف در ماده است و بالا رفتن دما نیز افت و خیز امواج الکترومغناطیسی محیط و متعاقباً فشار الکترومغناطیسی محیط بیرونی صفحات را تشدید میکند. از سوی دیگر، وقتی تابع دی‌الکتریک قوی‌تر می‌شود، باعث می‌شود که جذب سامانه در برابر افت و خیز های دمایی امواج بیشتر شود؛ در نتیجه، با افزایش دما، اختلاف فشار الکترومغناطیسی بین صفحات نسبت به فضای بیرون بیشتر شده و منجر به تولید نیروی جاذبه‌ی قوی می شود.



شکل 1 : نمودار نیروی جاذبه کازیمیر برحسب فاصله بین صفحات با مغناطش موازی متناسب با $\tilde{n} = 5$ در دماهای متفاوت. الف) $\sigma = 9$ ب) $\sigma = 1/9$.

شکل 2 بزرگی نیروی کازیمیر دافعه در واحد سطح نسبت به فاصله بین دو صفحه را برای مغناطش‌های کوچک، برای $\sigma = 9, 1/9$ در دماهای متفاوت نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، افزایش دما برخلاف برهمکنش جاذبه، منجر به تضعیف نیروی دافعه و انقباض محدوده‌ی ایجاد آن می‌شود. درحالتی که پاسخ دی‌الکتریک محیط ضعیف است$(\sigma = 1/9)$، نیروی دافعه به ویژه در فواصل کوتاه پایداری بالایی دربرابر تغییرات دما نشان می‌دهد. اما در شرایطی که پاسخ دی‌الکتریک تقویت شده‌است مرزهای حضور نیروی دافعه به شدت تحت تأثیر دما قرار می‌گیرد؛ به طوری که با افزایش دما، برهم‌کنش دافعه تنها در فواصل بسیار کوتاه تری دوام می‌آورد. دلیل فیزیکی این رفتار آن است که با بالا رفتن دما، افت‌وخیزهای حرارتی در فواصل بزرگ انقدر قوی می‌شوند که اثر دافعه‌ی سامانه را به طور کامل مهار می‌کنند؛ این هم‌افزایی حرارتی در محیط‌های با دی‌الکتریک قوی‌تر باعث می‌شود غلبه‌ی نیروی جاذبه بر دافعه در فواصل کوتاه‌تری رخ دهد.

شکل ۳ نسبت نیروی کازیمیر دافعه به جاذبه بر حسب مقادیر مختلف مغناطش $(\tilde{n})$ را در فاصله 200nm و در دماهای متفاوت برای برای $\sigma = 9, 1/9$ نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود، درمقادیر

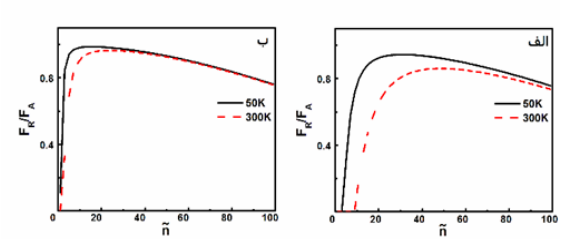


شکل2 : نمودار نیروی دافعه کازیمیر برحسب فاصله بین صفحات در مغناطش پادموازی متناسب با $\tilde{n} = 5$ در دماهای متفاوت.الف) $\sigma = 9$ ب) $\sigma = 1/9$.

بزرگ $\tilde{n}$ (رژیم مغناطش‌های قوی)، منحنی‌های مربوط به دماهای مختلف بر یکدیگر منطبق می‌شوند؛ این امر نشان می‌دهد که با غلبه‌ی مطلق اثر مگنتوالکتریک بر سامانه، افت‌وخیزهای دمایی دیگر تأثیر محسوسی بر رفتار نیرو ندارند که این انطباق در حالت دی‌الکتریک ضعیف‌تر ($\sigma = 1/9$) به دلیل مدیریت بیشتر اثر مگنتوالکتریک توسط مغناطش بر رفتار نیرو، مشهودتر است. از سوی دیگر، با افزایش مغناطش، مؤلفه‌های غیرقطری ماتریس بازتاب که منشأ تولید برهمکنش دافعه هستند تقویت شده و نیروی دافعه در یک مغناطش خاص متناسب با $\tilde{n}_{max}$ بیشینه میشود. تحلیل اثر دما بر موقعیت این مغناطش نشان می‌دهد که در حالت دی‌الکتریک قوی ($\sigma = 9$)، افت‌وخیزهای دمایی به شدت بر برهمکنش‌های سامانه اثر گذاشته و مقدار $\tilde{n}_{max}$ را با افزایش دما به طرز محسوسی به سمت مقادیر بزرگتر جابه‌جا می‌کنند که نشان‌دهنده تأثیر مستقیم دما بر مغناطش آستانه برای رسیدن به بیشینه دافعه است؛ در حالی که در حالت دی‌الکتریک ضعیف، موقعیت این بیشینه در برابر تغییرات دما پایدار است. علاوه بر این، مغناطش آستانه‌ای که به ازای مقادیر کمتر از آن، برهم‌کنش دافعه به‌طور کامل توسط فاز جاذبه امکان بروز پیدا نمی‌کند متناسب با $\tilde{n}_c$ تعریف می‌شود. با بررسی رفتار منحنی‌ها مشخص می‌شود در حللت دی‌الکتریک قوی ، با افزایش دما مقدار این مغناطش بحرانی افزایش می‌یابد؛ این امر نشان‌دهنده لزوم اعمال مغناطش بزرگتر برای غلبه بر افت‌وخیزهای حرارتی است. در مقابل، در حالت دی‌الکتریک ضعیف ، مقدار $\tilde{n}_c$ تقریباً مستقل از دما می باشد.

نتیجه گیری

در این پژوهش، نقش ناهمسانگردی تک‌محوره بر رفتار نیروی کازیمیر در سامانه های میکروالکترومکانیکی متشکل از عایق‌های



شکل3 : نسبت نیروی کازیمیر دافعه به جاذبه بر حسب مقادیر مختلف مغناطش الف) $\sigma = 9$ ب) $\sigma = 1/9$. فاصله بین صفحات 200 nm میباشد.

توپولوژیک مورد بررسی قرار گرفت. مشخص گردید که چطور اثرات ناهمسانگردی و مگنتوالکتریک در دماهای مختلف، بزرگی و جهت نیروی کازیمیر را دستخوش تغییر قرار می‌دهند. یافته‌ها نشان می‌دهند که در مغناطش‌های کوچک، افزایش نسبت ناهمسانگردی که منجر به تقویت پاسخ دی‌الکتریک می‌شود حساسیت دمایی نیروی جاذبه را تقویت می‌کند. در بخش برهمکنش دافعه نیز علاوه بر قدرت نیروی دافعه، محدوده‌ی شکل‌گیری آن به شدت تابع دما می‌گردد. در این رژیم، دو پارامتر کلیدی سیستم یعنی $\tilde{n}_{max}$ متناظر با مغناطشی که منجر به تولید بیشینه نیروی دافعه میشود و $\tilde{n}_c$ متناظر با مغناطش بحرانی که به ازای مقادیر کمتر از آن هیچ نیروی دافعه‌ای مشاهده نمی‌شود، با افزایش نسبت ناهمسانگردی، وابستگی شدیدی به دما نشان می‌دهند. در رژیم مغناطش‌های بزرگ، به دلیل غلبه‌ی اثرات مگنتوالکتریک، حضور هرگونه ناهمسانگردی تک‌محوره تأثیر محدودی داشته و وابستگی برهم‌کنش‌های جاذبه و دافعه به تغییرات دما بسیار ضعیف و ناچیز می‌شود. این یافته‌ها دیدگاه فیزیکی عمیقی را برای طراحی بهینه ادوات میکروالکترومکانیکی تحریک‌شده با نیروی کازیمیر فراهم می‌آورد.

مرجع‌ها

[1] A. W. Rodriguez, F. Capasso, and S. G. Johnson, Nature Photonics, 5 (2011) 211.
[2] H. B. G. Casimir;Proceedings of the Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen, 51 (1948) 793.
[3] E. M. Lifshitz; Soviet Physics JETP, 2 (1956) 73.
[4] G. L. Klimchitskaya, U. Mohideen, and V. M. Mostepanenko, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 40, (2007) 841.
[5] G. L. Klimchitskaya and V. M. Mostepanenko, Physical Review B, 89, (2014) 035407.
[6] F. Tajik, A. A. Masoudi, Z. Babamahdi, M. Sedighi, and G. Palasantz, Chaos, 30, (2020) 023123.
[7] F. Tajik, M. Sedighi, M. Khorrami, A. A. Masoudi, and G. Palasantzas, Physical Review E, 96, (2017) 042215.
[8] A. G. Grushin and A. Cortijo, Physical Review Letters, 106, (2011) 020403.

مطالعه اثر آلایش هافنیوم بر فعالیت کاتالیستی مکسن Mo_2CO_2 در واکنش تولید هیدروژن

بهزادی، فهیمه

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه فسا، میدان بهمن بیگی، فسا

چکیده

در این پژوهش، اثر آلایش هافنیوم بر فعالیت کاتالیستی مکسن Mo_2CO_2 در واکنش تولید هیدروژن با استفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی بررسی شد. نتایج نشان داد که در ساختار خالص، جذب هیدروژن نسبتاً قوی است و اکسیژن‌های پایانه ای سطح به‌عنوان مکان فعال اصلی جهت جذب عمل می‌کنند. آلایش هافنیوم با ایجاد تغییر در ساختار الکترونی و تعدیل برهم‌کنش سطح–هیدروژن، مقدار انرژی آزاد هیدروژن ΔG_H را از ۰,۶۲ eV- به ۰,۴۵ eV- می رساند و عملکرد کاتالیستی را بهبود می بخشد. این نتایج نشان می‌دهد که آلایش هافنیوم می‌تواند راهکاری مؤثر برای بهینه‌سازی مکسن Mo_2CO_2 در واکنش تولید هیدروژن باشد.

واژه های کلیدی: *مکسن Mo_2CO_2، واکنش تولید هیدروژن، هافنیوم، انرژی آزاد جذب هیدروژن، آلایش.*

Study of the Effect of Hafnium Doping on the Catalytic Activity of Mo_2CO_2 MXene for the Hydrogen Evolution Reaction

Behzadi, Fahimeh

Department of Physics, Faculty of Science, Fasa University, Fasa

Abstract

In this study, the effect of hafnium doping on the catalytic activity of Mo_2CO_2 MXene for the hydrogen evolution reaction (HER) was investigated using density functional theory (DFT) calculations. The results indicate that in the pristine structure, hydrogen adsorption is relatively strong, with surface oxygen atoms serving as the primary active sites. Hafnium doping modifies the electronic structure and weakens the surface–hydrogen interaction, shifting the hydrogen adsorption free energy (ΔG_H) from −0.62eV to −0.45 eV, closer to the thermoneutral value. This adjustment enhances the catalytic performance of the material. These findings suggest that hafnium doping provides an effective strategy for tuning the electronic properties of Mo_2CO_2 MXene and improving its HER catalytic activity.

Keywords: *Mo_2CO_2 MXene, hydrogen evolution reaction (HER), Hf, hydrogen adsorption free energy, Doping.*

PACS No. 73

مقدمه

با افزایش نگرانی‌های زیست–محیطی و نیاز به منابع انرژی پاک، هیدروژن به عنوان یکی از مهم‌ترین حامل‌های انرژی آینده مورد توجه قرار گرفته است. یکی از روش‌های مؤثر برای تولید هیدروژن، از طریق الکترولیز آب می باشد که قسمتی از آن واکنش تولید هیدروژن (HER) است. با این حال، اگرچه کاتالیست‌های مبتنی بر فلزات نجیب مانند پلاتین، بهترین عملکرد را در واکنش تولید هیدروژن نشان می‌دهند، اما هزینه بالا و محدودیت منابع، مانع استفاده گسترده آن‌ها در مقیاس صنعتی شده است [۱ و۲]. بنابراین توسعه کاتالیست‌های کارآمد و کم‌هزینه به یکی از موضوعات مهم در تحقیقات الکتروکاتالیز تبدیل شده است.

در سال‌های اخیر، مواد دوبعدی به ویژه مکسن ها به دلیل رسانایی

الکتریکی بالا، سطح فعال گسترده و قابلیت تنظیم ساختار الکترونی، به عنوان کاتالیست‌های امیدوارکننده برای واکنش تولید هیدروژن مطرح شده‌اند. مکسن ها از سونش انتخابی فازهای MAX به دست می‌آیند. آنها دارای فرمول کلی $M_{n+1}X_nT_x$ می باشند که در آن M فلز واسطه، X کربن یا نیتروژن و T_x گروه‌های عاملی سطحی مانند O، OH و F است [۳،٤]. وجود این گروه‌های عاملی، امکان مهندسی شیمی سطح و کنترل رفتار کاتالیستی مکسن ها را فراهم می‌کند.

مطالعات اخیر نشان داده‌اند که اصلاح ساختار مکسن ها می‌تواند فعالیت کاتالیستی آن‌ها را به طور قابل توجهی بهبود دهد. برای مثال، اصلاح شیمی سطح و تغییر ترکیب مکسن های مولیبدنیومی می‌تواند رفتار جذب گونه‌های واکنشی و فعالیت HER را تنظیم کند [۵،٦]. همچنین مرورهای جدید نشان می‌دهند که مکسن ها و مواد مشتق‌شده از آن‌ها به دلیل ساختار قابل مهندسی و وجود سایت‌های فعال متنوع، از کاتالیست‌های امیدوارکننده برای تولید هیدروژن محسوب می‌شوند [۷]. علاوه بر این، ایجاد ساختارهای ناهمگن و ترکیب مکسن ها با عناصر فلزی می‌تواند انتقال بار و فعال‌سازی واکنش‌ها را تسهیل کند و فعالیت واکنش تولید هیدروژن را افزایش دهد [۸،۹].

یکی از روش‌های مؤثر برای تنظیم خواص الکترونی مکسن ها، آلایش فلزی است که می‌تواند توزیع چگالی الکترونی و قدرت برهم‌کنش میان سطح و هیدروژن را تغییر دهد. در این پژوهش، اثر آلایش هافنیوم (Hf) بر ساختار الکترونی و انرژی آزاد جذب هیدروژن در مکسن Mo_2CO_2 بااستفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفته است. هدف این مطالعه بررسی این است که آیا آلایش عنصر هافنیوم می‌تواند انرژی جذب هیدروژن را به مقدار بهینه برای واکنش تولید هیدروژن نزدیک‌تر کند و در نتیجه عملکرد کاتالیستی این سیستم را بهبود بخشد.

روش محاسباتی

در این پژوهش، محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگال با استفاده از بسته نرم‌افزاری سیستا[۱۰] انجام شده است. جهت توصیف برهم‌کنش‌های تبادلی-همبستگی از تقریب گرادیان تعمیم‌یافته با تابع همبستگی تبادلی پردو-بورک-ارنزرهوف (PBE)[۱۱] به صورت قطبیده مغناطیسی استفاده گردید. برهم‌کنش میان هسته و الکترون‌های ظرفیت با استفاده از شبه‌پتانسیل‌های استاندارد PseudoDojo توصیف شد. تابع موج برای تمام اتمها بر پایه قطبش دوگانه زتا (DZP) بسط داده شده است. انرژی قطع ۱۰۵ هارتری، دمای الکترون‌ها ۳۰۰ K درنظر گرفته شده است. برای محاسبات خودسازگار حد مجاز محاسبات عددی 10^{-5} فرض شده است. ساختارها بگونه‌ای بهینه شده‌اند که نیروی وارد بر هر اتم کمتر از ۰،۰۵ eV/Å باشد. ساختار شش گوشه مکسن Mo_2CO_2 در یک ابر سلول ۱×٤×٤ مدلسازی گردید. چگالی تعداد نقاط نمونه گیری k در فضای بریلوین ۱×۱۰×۱۰ درنظر گرفته شده است. جهت جلوگیری از برهمکنش لایه ساختار با لایه های مجاور در راستای z حداقل ۱۳ Å لایه خلاء، لحاظ شده است. برای محاسبات چگالی الکترونی چگالی تعداد نقاط k را ۱×۱۰×۱۰ در نظر گرفتیم. برای بررسی پایداری ترمودینامیکی مدل آلایش‌یافته، انرژی تشکیل از رابطه زیر محاسبه می گردد

$$E_{form}=E_{Hf-doped}-E_{pure}-\mu_{Hf}+\mu_{Mo} \quad (۱)$$

که در آن $E_{Hf-doped}$ و E_{pure} انرژی کل سیستم آلایش‌یافته و خالص، و μ_{Hf} و μ_{Mo} پتانسیل شیمیایی اتم‌های هافنیوم و مولیبدنیوم است. همچنین فعالیت کاتالیستی برای واکنش تولید هیدروژن با محاسبه انرژی آزاد جذب هیدروژن از فرمول زیر محاسبه می گردد

$$\Delta G_H=\Delta E_H+\Delta E_{ZPE}-T\Delta S \quad (۲)$$

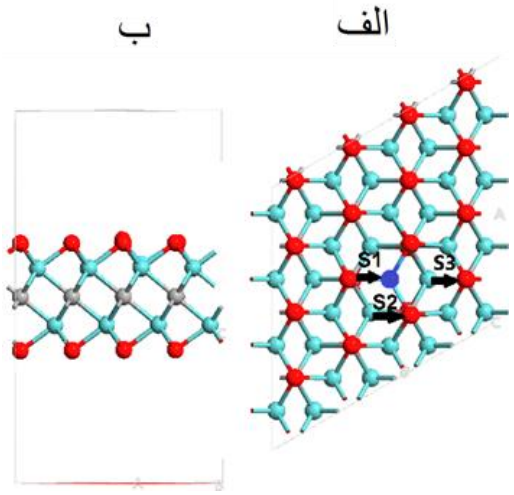
در این رابطه، ΔE_H انرژی جذب، ΔE_{ZPE} انرژی نقطه صفر و $T\Delta S$ سهم آنتروپی در دمای استاندارد است.

بحث و نتایج

ساختار مکسن Mo_2CO_2 آلاییده شده با Hf، در شکل ۱ نشان داده شده است. از آنجاییکه شعاع اتمی هافنیوم و مولیبدینیوم به هم نزدیک است عنصر هافنیوم بخوبی در ساختار جانشانی می شود. برای بررسی پایداری ساختار آلاییده، از رابطه ۱ مقدار انرژی تشکیل محاسبه گردید که مقدار آن برابر با ۱،٤۹ eV-

بدست آمد. به دلیل اینکه، انرژی تشکیل ساختار کمتر از مقدار ۱- eV است، سیستم از نظر ترمودینامیکی بسیار پایدار است.

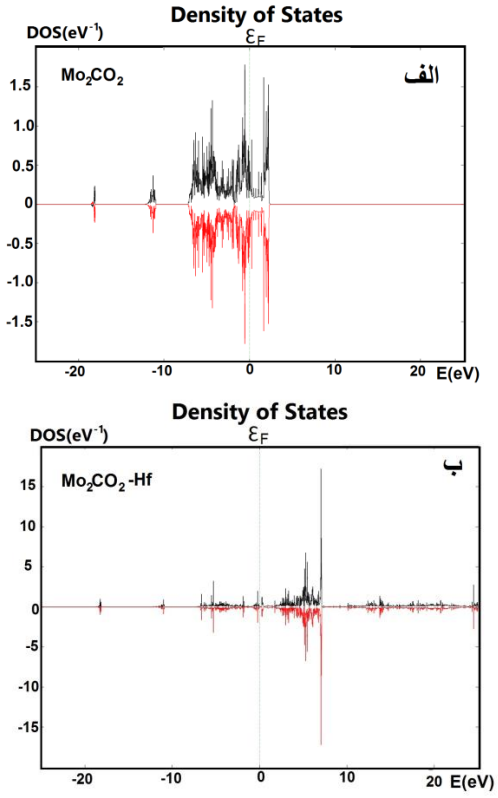
برای بررسی واکنش تولید هیدروژن، مکانهای S1، S2 و S3 جهت قرار دادن هیدروژن در نزدیکی آن انتخاب شده اند.



شکل ۱: ساختار مکسن Mo_2CO_2 که با عنصر هافنیوم (رنگ آبی) آلاییده شده است الف- از دید بالا ب- از دیدکنار. مکانهای S1، S2 و S3 مربوط به مکانهایی است که اتم هیدروژن در آن مکانها قرار می گیرد. عناصر قرمز، اکسیژن و عناصر آبی مایل به سبز، مولیبدنیوم هستند.

برای مکسن خالص مکان S1 (بالای عنصر مولیبدینیوم) و S2 (بالای عنصر اکسیژن) انتخاب و ساختارها بهینه گردید. برای مکان S1، هیدروژن از بالای مولیبدینیوم به سمت اکسیژن حرکت کرد. در مکان S2 (بالای اکسیژن) انرژی آزاد جذب هیدروژن با توجه به رابطه ۲ محاسبه گردید که مقدار آن ΔG_H=-۰,۶۲ eV بدست آمد. قابل ذکر است مقدار $\Delta E_{ZPE}-T\Delta S$ تقریبا ۰,۲۴ eV در نظر گرفته شده است. علت حرکت هیدروژن از مکان S1 به مکان S2 ناپایداری این اتم با توجه به سطح انرژی این مکان است و هیدروژن تمایل دارد به مکانی با چاه پتانسیل عمیق تر برود. از طرفی اتمهای اکسیژن پایانه در این ساختار، دارای جفت الکترونهای غیرپیوندی و الکترونگاتیویته بالاتری نسبت به مولیبدینیوم دارند و درنتیجه اتم هیدروژن تمایل دارد پیوند O-H را تشکیل دهد.

مقدار نسبتا بالای انرژی آزاد جذب هیدروژن در مکسن خالص



شکل ۲: نمودار چگالی حالتها مربوط به اوربیتال d، الف-در مکسن خالص برای عنصر Mo و ب- در مکسن آلاییده با هافنیوم برای عنصر Hf.

بیانگر جذب قوی هیدروژن توسط اکسیژن های پایانه و درنتیجه دشواری در مرحله واجذب است. این مقدار برای حالت بهینه در واکنش تولید هیدروژن نزدیک به صفر ($\Delta G_H \approx 0$) است.

در مکسن Mo_2CO_2 آلاییده با هافنیوم، انرژی آزاد جذب برای مکانهای بالای عنصر هافنیوم (S1)، بالای اکسیژنی که با هافنیوم پیوند دارد (S2) و بالای اکسیژنی که دورتر از هافنیوم (S3) قرار دارد، محاسبه گردید. این مقادیر برای مکانهای S1، S2 و S3 به ترتیب برابر با ۲,۵۰ eV+، ۰,۴۵ eV- و ۰,۵۱ eV- بدست آمد. با توجه به مقدار مثبت و بزرگ انرژی آزاد جذب هیدروژن در مکان S1، این فرایند یک فرایند غیرخودبه خودی است اما در مکان‌های S2 وS3 جذب هیدروژن به طور خودبه خودی اتفاق می افتد. با توجه به داده‌های انرژی آزاد جذب، این مقدار برای مکان S2 نسبت به مکان S3 به صفر نزدیک تر است و برای واکنش

تولید هیدروژن مناسب تر است. در واقع با آلایش مکسن Mo_2CO_2با هافنیوم، انرژی آزاد جذب هیدروژن از ۰٫۶۵ eV- به ۰٫۴۵ eV- افزایش یافته است که نشان می دهد واکنش تولید هیدروژن به اندازه تقریبا ٪۲۷ بهبود یافته است.

شکل ۲، نمودار چگالی حالتها مربوط به اوربیتال‌های d یک عنصر Mo در مکسن خالص و عنصر Hf در مکسن آلاییده را نشان می دهد. همانطور که در شکل ۲ب نسبت به شکل ۲ الف مشاهده می شود چگالی حالات نمونه آلاییده بیشتر از نمونه خالص است زیرا اوربیتال های d مربوط به عنصر Hf نسبت به اوربیتالهای d عنصر Mo بیشتر است. با توجه به این شکل، اوربیتال های d در نزدیکی تراز فرمی بازتوزیع می‌شوند و موجب تغییر در چگالی حالات فلزات مجاور می‌گردند. حضور Hf باعث جابجایی مرکز باند d شده و چگالی الکترونی در مکان‌های اکسیژن را کاهش می‌دهد. به عبارتی دیگر در پیوند فلز–اکسیژن، چگالی الکترونی اکسیژن، نسبت به مولیبدینیوم بیشتر به سمت هافنیوم کشیده می شود. این بازآرایی الکترونی منجر به تضعیف برهم‌کنش O–H و در نتیجه کاهش قدرت جذب بیش از حد هیدروژن می‌شود. بنابراین، مکان بالای هافنیوم نه به‌عنوان مکان فعال مستقیم، بلکه به‌عنوان یک تعدیل‌کننده الکترونی عمل می‌کند و نهایتا مکان اکسیژن های نزدیک هافنیوم، کمترین مقدار انرژی آزاد جذب هیدروژن را دارا خواهد بود.

نتیجه گیری

در این مطالعه، اثر آلایش هافنیوم بر ویژگی‌های ساختاری و الکترونی مکسن Mo_2CO_2 و عملکرد آن در واکنش تولید هیدروژن بررسی شد. نتایج محاسبات DFT نشان داد که در ساختار خالص، اکسیژن‌های پایانه‌ای نقش سایت‌های فعال اصلی جذب هیدروژن را ایفا می‌کنند و مقدار منفی بزرگ ΔG_H=-0.62 eV بیانگر جذب بیش ازحد هیدروژن توسط اکسیژن است. آلایش هافنیوم با ایجاد بازآرایی در ساختار الکترونی و جابه‌جایی مرکز نوار انرژی مربوط به اوربیتال d فلزات مجاور، موجب تعدیل برهم‌کنش O–H و افزایش ۲۷ درصدی انرژی آزاد جذب هیدروژن و نزدیک شدن به مقدار بهینه گردید.

بررسی چگالی حالات جزئی نشان می‌دهد که هافنیوم مستقیماً در فرآیند جذب مشارکت ندارد، بلکه به‌عنوان یک تعدیل‌کننده الکترونی عمل کرده و با کنترل قدرت پیوند سطح–هیدروژن، شرایط مناسب‌تری برای مرحله واجذب فراهم می‌کند. این نتایج بیانگر آن است که آلایش هدفمند می‌تواند راهبردی مؤثر برای بهبود فعالیت کاتالیستی مکسن‌ها در واکنش تولید هیدروژن باشد.

مرجع‌ها

[1] J. K. Nørskov, T. Bligaard, A. Logadottir, J. R. Kitchin, J. G. Chen, S. Pandelov and U. Stimming; “Trends in the Exchange Current for Hydrogen Evolution”; Journal of The Electrochemical Society 152, No. 3 (2005) J23-J26.

[2] Z. W. Seh, J. Kibsgaard, C. F. Dickens, I. Chorkendorff, J. K. Nørskov and T. F. Jaramillo; “Combining Theory and Experiment in Electrocatalysis: Insights into Materials Design”; Science 355, No. ٦٣٢١ (٢٠١٧) □□□□٤٩٩٨.

[3] M. Naguib, M. Kurtoglu, V. Presser, J. Lu, J. Niu, M. Heon and Y. Gogotsi; “Two Dimensional Nanocrystals Produced by Exfoliation of Ti_3AlC_2”; Advanced Materials 23, No. 37 (2011) 4248-4253.

[4] B. Anasori, M. R. Lukatskaya and Y. Gogotsi; “2D Metal Carbides and Nitrides (MXenes) for Energy Storage”; Nature Reviews Materials 2 (2017) 16098.

[5] Ponnalagar, Dineshkumar, Da-Ren Hang, Chi-Te Liang, and Mitch MC Chou. "Recent advances and future prospects of low-dimensional Mo2C MXene-based electrode for flexible electrochemical energy storage devices." Progress in Materials Science 145 (2024): 101308.

[6] M. Khan, A. Hussain, M. T. Saleh, M. Ibrahim, F. Attique, X. Sun, H. E. Unalan, M. Shafi, Y. Khan, I. Khan, A. H. Ragab, A. A. Hassan, R. Ali, Z. Ali, A. J. Khan and A. Zada; “Cutting-edge Advancements in MXene-derived Materials: Revolutionary Electrocatalysts for Hydrogen Evolution and High-performance Energy Storage”; Coordination Chemistry Reviews (2024).

[7] M. Zehtab Salmasi, A. Omidkar, H. M. Nguyen and H. Song; “MXenes as Electrocatalysts for Hydrogen Production through the Electrocatalytic Water Splitting Process: A Mini Review”; Energy Reviews (2024).

[8] Y. Ren, X. Zhang, H. Song, C. Pi, J. Li, X. Liu, C. Lin and P. K. Chu; “MoOC–Mo_2C/C Heterojunction Enabling Fast Water Dissociation for Efficient Alkaline Hydrogen Evolution Reaction”; Journal of Power Sources 647 (2025) 237306.

[9] Y. Shi, P. Liu, Z. Yuan, X. Wang, Q. Peng, S. Han, Y. Fan and B. Liu; “Enhancing Effect of Mo_2C MXene and Ru Nanoparticles for Efficient Hydrogen Production from Ammonia Borane”; International Journal of Hydrogen Energy (2025).

[10] J. M. Soler; “The SIESTA Method for Ab Initio Order-N Materials Simulation”; J. Phys.: Condensed Matter 14 (2002) 2745-2779.

[11] J. P. Perdew; “Generalized Gradient Approximation Made Simple”; Physical Review Letters 77 (1996) 3865-3868.

مطالعه خواص الکتریکی در سامانه نیم‌رسانای ناهگون شامل نقاط کوانتومی متصل به $MAPbI_3$

امینی، محمد؛ صاحب‌سرا، پیمان؛ وطنی، فریماه

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

در این پژوهش، خواص الکتریکی نیم‌رسانای با ساختار ناهمگون مورد بررسی قرار گرفت. ابتدا، توزیع مکانی حامل‌های اقلیت در نیم‌رساناها تحت شرایط تزریق خارجی بررسی شد و سپس پهنای ناحیه تهی در فصل مشترک نیم‌رساناها با استفاده از معادلات پیوستگی و پواسون محاسبه شد. در ادامه، با افزودن نقاط کوانتومی به ساختار، جریان الکتریکی عبوری سامانه در حضور نیم‌رساناهای مختلف بررسی شد. برای این منظور، از سازوکار تابع گرین غیرتعادلی و فرمول لاندائر–بوتیکر جهت محاسبه جریان استفاده شد و نقاط کوانتومی در حضور برهم‌کنش کولنی درون‌جایگاهی با مدل هابارد توصیف شدند. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که تنظیم نوع نیم‌رسانا و ویژگی‌های نقاط کوانتومی می‌تواند راهکاری مؤثر برای کنترل جریان الکتریکی و بهینه‌سازی عملکرد ادوات الکترونیکی و فوتوولتائیک مبتنی بر نقاط کوانتومی باشد.

واژه های کلیدی: *نیم‌رسانای ناهمگون، نقاط کوانتومی، تابع گرین غیرتعادلی، مدل هابارد*

Study of the Electrical Properties of a Heterostructure Semiconductor System with Quantum Dots Coupled to $MAPbI_3$

Amini, Mohammad; Sahebsara, Peyman; Vatani, Farimah

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

In this study, the electrical properties of a semiconductor heterostructure were investigated. First, the spatial distribution of minority carriers in semiconductors under external injection conditions was examined, and subsequently, the depletion region width at the semiconductor interface was calculated using the continuity and Poisson equations. Next, by incorporating quantum dots into the structure, the electrical current through the system in the presence of different semiconductors was analyzed. For this purpose, the nonequilibrium Green's function formalism and the Landauer–Büttiker approach were employed to calculate the current, while the quantum dots were described using the Hubbard model in the presence of on-site Coulomb interaction. Overall, the findings suggest that tuning the semiconductor type and quantum dot characteristics provides an effective strategy for controlling electrical current and optimizing the performance of quantum-dot-based electronic and photovoltaic devices.

***Keywords**: Heterostructure Semiconductor, Quantum Dots, Non-Equilibrium Green's function, Hubbard model*

PACS No. 72, 81

مقدمه

نیم‌رساناهای با ساختار ناهمگون از اتصال دو یا چند نیم‌رسانا با شکاف انرژی متفاوت تشکیل می‌شوند و به دلیل بهبود انتقال حامل‌ها، کاربرد گسترده‌ای در ادوات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی، دارند. از مهم‌ترین کاربردهای این ساختارها در دیودهای نوری و سلول‌های خورشیدی است [۱و۷]. در سال‌های اخیر، مواد پروسکایتی به دلیل افزایش چشمگیر بازده تبدیل توان بالا، هزینه ساخت پایین و امکان تولید از طریق روش‌های ساده و کم‌هزینه،

جدول ۱. پارامترهای فیزیکی و الکترونیکی مواد مورد استفاده در شبیه‌سازی، شامل شکاف انرژی (E_g)، الکترون‌خواهی (χ)، ثابت دی‌الکتریک نسبی (ϵ_r)، چگالی مؤثر حالت‌ها در نوار رسانش (N_c) و نوار ظرفیت(N_v)، و غلظت ناخالصی‌های پذیرنده (N_A) و دهنده (N_D)[۵].

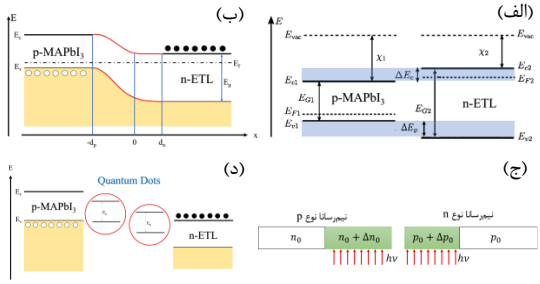
مشخصات	$MAPbI_3$	CeO_2	WS_2	C_{60}	IGZO
$E_g(eV)$	1.5	3.5	1.8	1.7	3.05
$\chi(eV)$	3.9	4.6	3.95	3.9	4.16
ϵ_r	6.5	9	13.6	4.2	10
$N_c(cm^{-3})$	$2.2E18$	$1E20$	$1E18$	$8E19$	$5E18$
$N_v(cm^{-3})$	$2.2E18$	$2E21$	$2.4E19$	$8E19$	$5E18$
$N_A(cm^{-3})$	$1E16$	0	0	0	0
$N_D(cm^{-3})$	0	$1E21$	$1E18$	$1E17$	$1E17$

توجه گسترده‌ای را در این حوزه به خود جلب کرده‌اند. با این حال، چالش‌هایی نظیر ناپایداری ذاتی همچنان از موانع اصلی تجاری‌سازی این مواد به شمار می‌روند [۲و۳]. در میان این مواد، پروسکایت متیل‌آمونیوم سرب یدید $MAPbI_3$ با شکاف نواری مستقیم حدود 1.5eV ، ضریب جذب نوری بالا و طول نفوذ مناسب حامل‌ها، به‌عنوان ماده پروسکایتی مناسبی برای این ساختار شناخته می‌شود [۳و۴].

برای دستیابی به عملکرد مطلوب، هم‌ترازی مناسب نوارهای انرژی در فصل مشترک لایه‌های مختلف از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. همان‌گونه که در شکل ۱(الف) و (ب) نشان داده شده است، اختلاف ترازهای انرژی دو نیم‌رسانا پیش از تشکیل پیوند، موجب ایجاد افست نوار رسانش (ΔE_c) و ظرفیت (ΔE_v) می‌شود و پس از برقراری اتصال، به‌دلیل هم‌تراز شدن تراز فرمی، خمش نواری در فصل مشترک به‌وجود می‌آید. این هم‌ترازی نقش مهمی در انتقال حامل‌ها میان دو نیم‌رسانا و کاهش بازترکیب ایفا می‌کند [۲و۷]. همچنین، مطابق شکل ۱(د)، استفاده از نقاط کوانتومی در فصل مشترک به‌عنوان یکی از راهکارهای بهبود هم‌ترازی نوارهای انرژی، می‌تواند انتقال حامل‌ها را تسهیل، بازترکیب را کاهش و پایداری ساختار را بهبود دهد؛ ازاین‌رو، این روش در سال‌های اخیر مورد توجه قرار گرفته است [۳و۶].

بر این اساس، برای شبیه‌سازی ساختار ناهمگون، انتخاب مواد با پارامترهای فیزیکی و الکترونیکی مناسب ضروری است. مشخصات مواد به‌کاررفته در این پژوهش در جدول ۱ ارائه شده است.

بررسی کلاسیکی نیم‌رسانای ناهمگون



شکل ۱. (الف) ساختار نواری دو نیم‌رسانای منفرد (ب) اتصال دو نیم‌رسانا و ایجاد خمش نواری (ج) اعمال منبع خارجی به نیم‌رسانا (د) قرار دادن نقاط کوانتومی بین دو نیم‌رسانای نا همگون.

ما یک نیم‌رسانا از نوع p-$MAPbI_3$ داریم و برای نیم‌رسانای نوع n از مواد مختلف مطابق جدول۱ انتخاب می‌کنیم. اعمال منبع خارجی (مثل نور) به این مواد، مطابق شکل ۱ج باعث ایجاد غلظت اضافی از حفره‌ها Δp و الکترون‌ها Δn می‌شود. برای نیم‌رسانای نوع n غلظت اضافه از حفره را می‌خواهیم حساب کنیم.

معادله پیوستگی برای حفره‌ها در شرایط پایا به صورت زیر ساده می‌شود [۷]:

$$D_p \frac{d^2p}{dx^2} - \frac{\Delta p}{\tau_p} = 0 \qquad (۱)$$

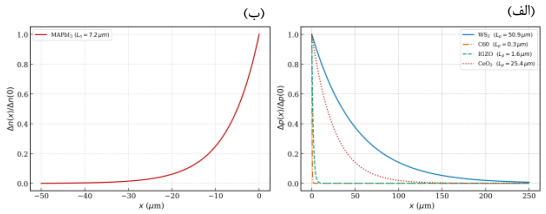
که در آن D_p ضریب پخش حفره‌ها، p_0 غلظت تعادلی حفره‌ها و $\Delta p(x) = p(x) - p_0$ غلظت اضافی حفره‌ها است [۷].

با اعمال شرایط مرزی ابتدا در جایی که از آنجا به بعد منبع خارجی نیست می‌توان نوشت : $p(0) = p_0 + \Delta p(0)$ و در $x \to \infty$ (چون دور از منبع، همه حامل‌های اضافی بازترکیب می‌شوند) داریم: $p(\infty) = p_0$. جواب معادله دیفرانسیل مرتبه دوم با این شرایط $\Delta p(x) = \Delta p(0)\, e^{-x/L_p}$ است. که در آن: $L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$ طول پخش حامل اقلیت است. برای نیم‌رسانای نوع p هم می‌توان محاسبات را برای حامل اضافه الکترون انجام داد [۷].

نتیجه محاسبات در شکل ۲ آورده شد. غلظت حامل‌های اقلیت به‌صورت نمایی با فاصله کاهش می‌یابد و نرخ افت توسط طول نفوذ حامل اقلیت تعیین می‌شود.

بعد از حل معادله پواسون برای این مسئله پتانسیل الکتروستاتیک را می‌توان به صورت زیر نوشت [۷]:

$$\phi(x) = \begin{cases} \dfrac{eN_a}{2\varepsilon_1}(x + d_p)^2 & -d_p \le x \le 0 \\ \phi_{bi} - \dfrac{eN_d}{2\varepsilon_2}(x - d_n)^2 & 0 \le x \le d_n \end{cases} \qquad (۲)$$



شکل ۲. (الف) تغییرات مکانی غلظت بهنجارشده حامل‌های اقلیت حفره‌ای، $\Delta p(x)/\Delta p(0)$، در نیم‌رساناهای نوع n شامل WS_2، C60، IGZO و CeO_2 (ب) تغییرات مکانی غلظت بهنجارشده الکترون‌های اقلیت، $\Delta n(x)/\Delta n(0)$، در نیم‌رسانای نوع p از جنس $MAPbI_3$ در شرایط تزریق پایا.

در فصل مشترک دو نیم‌رسانا شرط پیوستگی پتانسیل: $\phi(0^-) = \phi(0^+)$ و پیوستگی جابجایی الکتریکی: $\varepsilon_1\mathcal{E}(0^-) = \varepsilon_2\mathcal{E}(0^+)$ را اعمال می‌کنیم. پهنای ناحیه تهی به صورت زیر می‌شود:

$$d_p = \left[\frac{N_d}{N_a}\frac{2\varepsilon_1\varepsilon_2\phi_{bi}}{e(\varepsilon_1 N_a + \varepsilon_2 N_d)}\right]^{1/2} \qquad (۳\text{ الف})$$

$$d_n = \left[\frac{N_a}{N_d}\frac{2\varepsilon_1\varepsilon_2\phi_{bi}}{e(\varepsilon_1 N_a + \varepsilon_2 N_d)}\right]^{1/2} \qquad (۳\text{ ب})$$

بنابراین بأزای هر ماده‌ی نیم‌رسانای نوع n عرض ناحیه تهی مطابق جدول۲ بدست آمد.

بررسی کوانتومی نیم‌رسانای ناهمگون

حال به این سامانه نیم‌رسانای ناهمگون، نقاط کوانتومی با انرژی‌های مختلف اضافه می‌کنیم. نقاط کوانتومی را در حضور برهم‌کنش کولنی درون‌جایگاهی در نظر می‌گیریم. هامیلتونی نقاط کوانتومی را طبق مدل هابارد به گونه زیر تعریف می‌کنیم:

$$H = \sum_{i,\sigma}\varepsilon_i(\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{i\sigma}) + \sum_{i,j,\sigma}t_{ij}(\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{i\sigma}) + U\sum_{i}\hat{n}_{i\downarrow}\hat{n}_{i\uparrow} \qquad (۴)$$

در این هامیلتونی شاخص i و j معرف مکان فضایی شبکه (جایگاه) و شاخص σ معرف اسپین الکترون است؛ t بیانگر دامنه پرش بین نقاط کوانتومی است که عملگرهای c_i و $c_i^{\dagger}$ به ترتیب عملگرهای فنا و خلق فرمیونی در جایگاه i هستند، U انرژی ناشی از دافعه کولنی درون جایگاهی است؛ $\hat{n}_{i\sigma}$ عدد اشغال الکترون است که به صورت $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{i\sigma}$ تعریف می‌شود [۸].

ابتدا برای بررسی خواص ترابردی سامانه اثر نیم‌رساناهای p و n بر نقاط کوانتومی از طریق خودانرژی‌های (Σ_L) و (Σ_R) در نظر گرفته می‌شود. و به صورت $\Sigma_{L,R} = \tau_{L,R}^{\dagger}g_{L,R}\tau_{L,R}$ تعریف می‌شود

جدول ۲. محاسبه عرض ناحیه تهی به ازای نیم‌رساناهای متفاوت

ماده نوع n	d_p(nm)	d_n(nm)	$W = d_p + d_n$
WS_2	321.98	3.21	325.20
C_{60}	294.14	29.41	323.55
IGZO	333.62	33.36	366.98

که در آن $g_{L,R}$ تابع گرین نیم‌رساناهای چپ و راست و τ جفت‌شدگی الکترودها با نقاط کوانتومی است. در این چارچوب، تابع گرین تأخیری سامانه به طور کلی به‌صورت

$$G^r(E) = [EI - H - \Sigma(E)]^{-1} \qquad (۵)$$

تعریف می‌شود و برای حل آن می‌توان از روش معادله حرکت استفاده کرد [۹]. تابع گرین اطلاعات کاملی درباره حالت‌های الکترونی و فرآیندهای انتقال بار در سامانه فراهم می‌کند.

برای محاسبه احتمال عبور الکترون‌ها از سامانه، از تابع ترابرد استفاده می‌شود که به صورت

$$T(E) = \mathrm{Tr}[\Gamma_L G^r \Gamma_R G^a] \qquad (۶)$$

تعریف می‌شود. در رابطه (۶) $\Gamma_{L,R} = i(\Sigma_{L,R} - \Sigma_{L,R}^{\dagger})$ میزان جفت‌شدگی نقاط کوانتومی با نیم‌رساناهای چپ و راست را نشان می‌دهد و $G^a = (G^r)^{\dagger}$ تابع گرین پیشرفته است [۱۰].

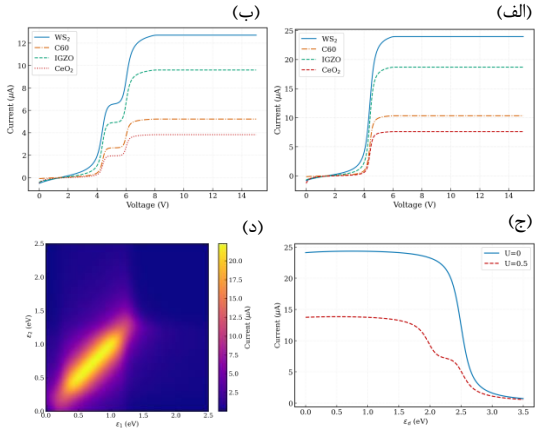
پس از محاسبه تابع ترابرد، جریان عبوری از سامانه با استفاده از فرمول لاندائر–بوتیکر به دست می‌آید:

$$I = \frac{2e}{h}\int_{-\infty}^{+\infty}T(E)[f_L(E) - f_R(E)]dE \qquad (۷)$$

که در آن $f_L(E)$ و $f_R(E)$ به ترتیب توابع توزیع فرمی–دیراک نیم‌رساناهای چپ و راست هستند [۱۰]. این رابطه نشان می‌دهد که جریان الکتریکی علاوه بر اختلاف پتانسیل اعمال‌شده، به شدت برهم‌کنش کولنی (U)، دامنه پرش (t) و میزان جفت‌شدگی با الکترودها وابسته است.

نتایج

ابتدا با استفاده از رابطه (۱) غلظت حامل‌های اقلیت محاسبه شد؛ شکل ۲ نشان می‌دهد که توزیع مکانی حامل‌های اقلیت رفتار نمایی داشته و طول نفوذ آن‌ها به تحرک حامل و ضریب نفوذ ماده وابسته است. در میان نیم‌رساناهای نوع n، WS_2 بیشترین طول نفوذ و C60 کمترین طول نفوذ حامل‌های اقلیت را نشان می‌دهد که بر بازده جمع‌آوری حامل و خواص ترابردی سامانه اثرگذار است.



شکل۳. (الف) مشخصه جریان–ولتاژ (I–V) برای سامانه با یک نقطه کوانتومی و مواد نیم‌رسانای نوع n مختلف در $U = 0$ (با انرژی نقطه کوانتومی $\varepsilon_d = 2.2\ \text{eV}$). (ب) مشخصه جریان–ولتاژ برای همان سامانه در $U = 0.5$. (ج) وابستگی جریان عبوری به انرژی نقطه کوانتومی برای ساختار مبتنی بر WS_2 و دو مقدار مختلف برهم‌کنش کولنی U. (د) نقشه حرارتی جریان عبوری بر حسب انرژی دو نقطه کوانتومی برای ساختار مبتنی بر WS_2، با قدرت پرش بین نقاط کوانتومی $t = 0.15\ \text{eV}$.

نتایج محاسبه عرض ناحیه تهی نشان می‌دهد که بخش عمده ناحیه تخلیه در نیم‌رسانای p-$MAPbI_3$ تشکیل می‌شود، در حالی که سهم نیم‌رساناهای نوع n نسبتاً کوچک است. این رفتار ناشی از اختلاف قابل‌توجه غلظت ناخالصی‌ها در دو سمت اتصال است؛ به‌طوری‌که به دلیل غلظت پذیرنده کمتر در p-$MAPbI_3$، ناحیه تهی عمدتاً در این ماده گسترش می‌یابد.

نتایج شکل ۳ نشان می‌دهد که نوع نیم‌رسانای n تأثیر قابل‌توجهی بر پاسخ ترابردی و جریان سامانه دارد. در هر دو ساختار تک‌نقطه‌ای و دونقطه‌ای، WS_2 بیشترین جریان عبوری را ایجاد می‌کند. این رفتار ناشی از هم‌ترازی مناسب‌تر ترازهای انرژی و اختلاف پتانسیل شیمیایی مؤثر با نقاط کوانتومی است.

علاوه بر این، افزایش برهم‌کنش کولنی U موجب کاهش جریان و جابه‌جایی ناحیه رسانش می‌شود که ناشی از پدیده انسداد کولنی و کاهش احتمال اشغال همزمان الکترون‌ها در نقاط کوانتومی است. در شکل ۳ (د) نقشه حرارتی جریان نشان می‌دهد که بیشینه جریان زمانی رخ می‌دهد که انرژی دو نقطه کوانتومی تقریباً هم‌تراز باشند، که بیانگر افزایش تونل‌زنی تشدیدی میان نقاط کوانتومی است. با فاصله گرفتن ترازهای انرژی از این ناحیه، جریان به‌طور محسوسی کاهش می‌یابد.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، بررسی ناحیه تهی نشان داد که بخش عمده ناحیه تخلیه در سمت p-$MAPbI_3$ تشکیل می‌شود. نتایج دیگر این پژوهش نشان داد که ماده WS_2 در مقایسه با سایر مواد بررسی‌شده، گزینه مناسب‌تری برای کاربردهایی است که در آن‌ها دستیابی به جریان بالاتر مدنظر باشد. همچنین مشخص شد که با استفاده از نقاط کوانتومی با ترازهای انرژی مناسب، می‌توان میزان جریان را کنترل کرد. افزون بر این، استفاده از دو نقطه کوانتومی با ترازهای انرژی یکسان منجر به ایجاد حالت‌های تشدیدی در سامانه می‌شود که می‌تواند نقش مؤثری در بهبود ویژگی‌های ترابردی ایفا کند.

علاوه بر این، نتایج نشان داد که وجود برهم‌کنش کولنی موجب می‌شود جریان اشباع در ولتاژ بایاس بالاتری رخ دهد. از سوی دیگر، پدیده انسداد کولنی می‌تواند با محدود کردن انتقال حامل‌ها، موجب کاهش مقدار جریان در سامانه شود.

مرجع‌ها

[1] Y. Oh, S. Song, and J. Bae; "A Review of Bandgap Engineering and Prediction in 2D Material Heterostructures: A DFT Perspective"; *International Journal of Molecular Sciences*, **25**, No. 23, p. 13104 (2024).
[2] Y. Zhou *et al.*; "Application of Quantum Dot Interface Modification Layer in Perovskite Solar Cells: Progress and Perspectives"; *Nanomaterials*, **12**, No. 12, p. 2102 (2022).
[3] Ahmaid and A. A. Jangher; "Multiscale Simulation of Nanostructured TiO_2, ZnO, and $MAPbI_3$: Bridging DFT Electronic Properties with Optical Absorption Modeling" (2026).
[4] N. Filipoiu *et al.*; "Impact of Interface Defects on the Band Alignment and Performance of TiO_2/MAPI/Cu_2O Perovskite Solar Cells"; *arXiv preprint*, arXiv:2406.19594 (2026).
[5] V. L. Devi *et al.*; "Machine Learning-Driven Optimization of Transport Layers in $MAPbI_3$ Perovskite Solar Cells for Enhanced Performance"; *IEEE Access*, **12**, pp. 179546–179565 (2024).
[6] G. A. Nowsherwan *et al.*; "Performance and Stability Improvements in $MAPbI_3$ Perovskite Photovoltaics with $CsPbI_3$ Quantum Dots"; *Multiscale and Multidisciplinary Modeling, Experiments and Design*, **8**, No. 1, p. 10 (2025).
[7] G. Grosso and G. P. Parravicini; *Solid State Physics*; Academic Press (2013).
[8] S. Rühle and R. T. Scalettar; "An Introduction to the Hubbard Hamiltonian"; *Quantum Materials: Experiments and Theory*, **6** (2016).
[9] H. Bruus and K. Flensberg; *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*; Oxford University Press, Oxford (2004).
[10] S. Datta; *Quantum Transport: Atom to Transistor*; Cambridge University Press, Cambridge (2005).

مقایسهٔ خواص الکترونیکی در گرافن تک‌لایه آلاییده با آلومینیوم و قلع با درصد آلایش ۱/۳۹٪

اسدی محمدآبادی، احمد[۱]، هرمزی نژاد، دستان[۲]

۱ گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، صندوق پستی ۳۶۹۷-۱۹۳۹۵، تهران، ایران

۲ دکترای فیزیک، وزارت آموزش و پرورش، تهران صندوق پستی ۳۳۳۴-۱۴۱۵۵، ایران

چکیده

در این پژوهش، تأثیر جایگزینی یک اتم کربن با آلومینیوم (Al) و قلع (Sn) را بر رفتار الکترونی گرافن تک‌لایه بررسی می‌کنیم. محاسبات بر پایه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) و با استفاده از بسته‌ی نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو انجام شده است. درصد آلایش ۱/۳۹٪ در نظر گرفته شد که معادل جایگزینی یک اتم در ابرسلول ۷۲ اتمی است. نتایج بهینه‌سازی ساختاری نشان می‌دهد که ثابت شبکه از ۲/۴۶ آنگستروم در گرافن خالص به ۲/۵۴ آنگستروم در نمونه‌ی آلاییده با آلومینیوم و به ۲/۵۹ آنگستروم در نمونه‌ی آلاییده با قلع افزایش می‌یابد. گرافن خالص دارای شکاف نواری صفر است، در حالی که آلایش با آلومینیوم شکاف بسیار کوچکی حدود ۰/۰۵ الکترون‌ولت ایجاد می‌کند؛ در مقابل، آلایش با قلع شکاف چشم‌گیرتری به اندازه‌ی حدود ۰/۴۸ الکترون‌ولت در نزدیکی نقطه‌ی K در ناحیه‌ی بریلوئن پدید می‌آورد. چگالی حالت‌های محاسبه‌شده نشان می‌دهد که در هر دو سیستم آلاییده، سطح فرمی به سمت نوار ظرفیت جابه‌جا می‌شود که نشانه‌ی آشکاری از رسانایی نوع p است. یافته‌های ما حاکی از آن است که قلع، به‌عنوان یک فلز سنگین پس‌گذار با اوربیتال‌های 5p گسترده، هیبریداسیون قوی‌تری با حالت‌های 2p کربن نسبت به آلومینیوم دارد و به‌نظر می‌رسد همین هیبریداسیون قوی‌تر، عامل اصلی شکاف نواری بزرگ‌تر در نمونه‌ی آلاییده با قلع باشد. در مجموع، نتایج نشان می‌دهد که آلایش با قلع می‌تواند رویکردی امیدوارکننده برای مهندسی رفتار نیم‌رسانایی گرافن باشد که برای کاربردهای الکترونیکی آینده حائز اهمیت است.

واژه های کلیدی: *آلایش گرافن، آلایش آلومینیوم، آلایش قلع، نوار ممنوعه، نظریه تابعی چگالی، کوانتوم اسپرسو*

Comparison of Electronic Properties of Monolayer Graphene Doped with Aluminum and Tin at 1.39% Doping Concentration

Asadi Mohammad Abadi, Ahmad[1], Hormozinejad, Dastan[2]

1. *Department of Physics, Faculty of science, Payame Noor university, P.O. Box 19395-3697, Tehran, Iran*
2. *Ph.D. in Physics, Ministry of Education, P.O. Box 14155-3334, Tehran, Iran*

Abstract

In this work, we explore how replacing a single carbon atom with either aluminum (Al) and tin (Sn) affects the electronic behavior of monolayer graphene. Using first-principles calculations based on Density Functional Theory (DFT) as implemented in the Quantum ESPRESSO package, we considered a doping level of 1.39%, which corresponds to substituting one atom in a 72-atom supercell. Our structural optimizations show that the lattice constant expands from 2.46 Å in pristine graphene to 2.54 Å in the Al-doped system and to 2.59 Å in the Sn-doped one. While pristine graphene has a zero band gap, Al doping opens a very small gap of about 0.05 eV, whereas Sn doping induces a more substantial gap of roughly 0.48 eV around the K point in the Brillouin zone. The calculated density of states (DOS) reveals that in both doped systems, the Fermi level shifts toward the valence band a clear signature of p-type conductivity. Our findings suggest that tin, being a heavy post-transition metal with extended 5p orbitals, hybridizes more strongly with the carbon 2p states than aluminum does. This stronger hybridization appears to be the key factor behind the larger band gap observed in the Sn-doped sample. Overall, our results indicate that Sn doping holds promise for engineering semiconducting behavior in graphene, which could be of interest for future electronic devices.

***Keywords**: Graphene doping, Aluminum doping, Tin doping, Band gap, Density functional theory, Quantum ESPRESSO*

PACSNo.71

مقدمه

گرافن تک‌لایه، شامل یک صفحه دو بعدی از اتم‌های کربن با هیبریداسیون sp^2 و ساختار لانه‌زنبوری، به دلیل خواص الکترونیکی، مکانیکی و گرمایی استثنایی خود از جمله تحرک پذیری بالای حامل‌های بار، استحکام مکانیکی فوق‌العاده و رسانندگی گرمایی بالا ، توجه گسترده‌ای را در دو دهه اخیر به خود جلب کرده است. با این حال، یکی از مهم‌ترین محدودیت‌های گرافن خالص برای کاربردهای الکترونیکی، نبود نوار ممنوعه (شکاف انرژی صفر) در ساختار نواری آن است [۱]. به عبارت دیگر، گرافن خالص رفتاری نیم‌فلزی از خود نشان می‌دهد که در آن نوار ظرفیت و نوار رسانش در نقطه‌ی K مرز منطقه بریلوئن یکدیگر را لمس می‌کنند. این ویژگی اگرچه برای برخی کاربردهای اپتوالکترونیکی سریع مفید است، اما برای ساخت ترانزیستورهای اثر میدانی که نیاز به نسبت جریان روشن به خاموش بالا دارند، یک مانع اساسی محسوب می‌شود [۲]. بنابراین، راهکارهای مختلفی برای گشودن شکاف نواری در گرافن پیشنهاد شده است که از آن جمله می‌توان به ایجاد نانوریبون‌ها، اعمال کرنش مکانیکی، جذب سطحی مولکول‌ها، و مهم‌تر از همه آلایش با اتم‌های خارجی اشاره کرد.

در میان روش‌های آلایش، جایگزینی اتمی به دلیل پایداری بلندمدت و کنترل پذیری بهتر، مورد توجه ویژه قرار دارد. در این روش، برخی از اتم‌های کربن با عناصر دیگری که دارای تعداد الکترون ظرفیت متفاوت هستند جایگزین می‌شوند. آلایش با عناصر گروه ۳ مانند بور و آلومینیوم باعث ایجاد حفره و رسانایی نوع p می‌شود، در حالی که عناصر گروه ۵ مانند نیتروژن و فسفر الکترون اضافی وارد کرده و رسانایی نوع n ایجاد می‌کنند. با این حال، عناصر گروه ٤ مانند سیلیسیم، ژرمانیم و قلع نیز به دلیل شباهت ساختاری نسبی با کربن، می‌توانند به عنوان آلاینده عمل کرده و شکاف نواری ایجاد کنند. نکته حائز اهمیت این است که اثر آلایش به شدت به شعاع اتمی، الکترونگاتیوی و ساختار الکترونی لایه‌های ظرفیت عنصر آلاینده بستگی دارد [۵-۳].

در این مقاله، تأثیر دو عنصر آلومینیوم و قلع فلز با درصد آلایش یکسان (۱/۳۹٪) بر خواص الکترونی گرافن مقایسه شده است. هدف، تعیین این است که کدام عنصر شکاف نواری بزرگتری ایجاد می‌کند و رفتار نیم‌رسانایی مطلوب‌تری دارد.

روش محاسبه

محاسبات ابتدا به ساکن بر پایه نظریه تابعی چگالی با استفاده از کد pwscf از بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو انجام شد. برای برهم‌کنش تبادلی- همبستگی از روش شبه‌پتانسیل موج تخت با تقریب شیب تعمیم یافته استفاده شد. در میان شبه‌پتانسیل‌های موجود، شبه‌پتانسیل فوق نرم برای تعیین برهم‌کنش بین هسته و الکترون‌های ظرفیت انتخاب شد. ابرسلول ٦×٦ (۷۲ اتم کربن) با جایگزینی یک اتم کربن با Al یا Sn ساخته شد. انرژی قطع صفحه‌موج ٦۰Ry و مش بندی ۱×۲۲×۲۲ استفاده شد. به منظور جلوگیری از اندرکنش بین لایه‌های مجازی در راستای عمود، ضخامت خلأ برابر با ۲۰ آنگستروم انتخاب شد. ابتدا بهینه‌سازی ساختاری (relax) و سپس محاسبات خودسازگار (SCF) و ساختار نواری (bands) انجام شد.

نتایج و بحث

نتایج بهینه‌سازی ساختاری (جدول ۱) نشان داد که ثابت شبکه تعادلی گرافن خالص برابر ۲/٤٦ آنگستروم است که با مقادیر تجربی و محاسباتی پیشین مطابقت خوبی دارد. پس از جایگزینی یک اتم کربن با آلومینیوم، ثابت شبکه به ۲/٥٤ آنگستروم افزایش یافت. این افزایش به دلیل شعاع کووالانسی بزرگتر آلومینیوم (۱۲۱ پیکومتر) نسبت به کربن (۷۷ پیکومتر) و همچنین طول پیوند بلندتر Al-C (حدود ۱/۸۹ آنگستروم) در مقایسه با پیوند C-C (حدود ۱/٤۲ آنگستروم) است. در مورد قلع که شعاع کووالانسی آن (۱٤۰ پیکومتر) حتی از آلومینیوم نیز بزرگتر است، افزایش چشمگیرتری مشاهده شد و ثابت شبکه به ۲/۵۹ آنگستروم رسید. طول پیوند Sn-C حدود ۲/۱۵ آنگستروم محاسبه شد که نشان‌دهنده کشیدگی قابل توجه شبکه در اطراف ناخالصی است. نکته قابل توجه اینکه علی‌رغم این اعوجاج‌های موضعی، ساختار کلی لانه‌زنبوری گرافن در هر دو نمونه حفظ شده و هیچ گونه بازآرایی توپولوژیکی (مانند تشکیل نانولوله یا ساختار آمورف) مشاهده نشد. نیروی نهایی پس از انجام بهینه‌سازی برای نمونه

آلومینیوم به Ry/Bohr ۰/۰۰۰۱۵۶ و برای نمونه قلع به Ry/Bohr ۰/۰۰۰۱۷۸ رسید که هر دو کمتر از آستانه همگرایی معمول (Ry/Bohr ۰/۰۰۱) هستند و بیانگر دقت مناسب محاسبات است.

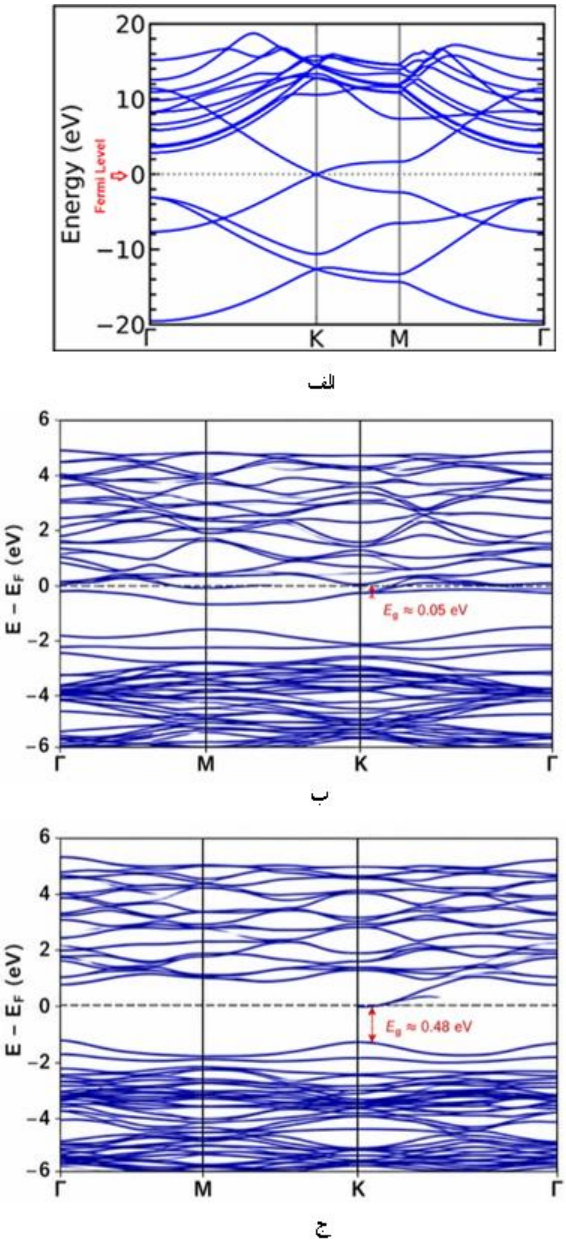
جدول ۱: مقایسه ویژگی‌های ساختاری و الکترونی گرافن خالص، آلاییده با Al و آلاییده با Sn (۱/۳۹٪)

گرافن–قلع	گرافن–آلومینیوم	گرافن خالص	کمیت
۲/۵۹	۲/۵٤	۲/٤٦	ثابت شبکه بهینه (Å)
۰/٤۸	۰/۰۵	۰	نوار ممنوعه (eV)
۰	۰	۰	موقعیت سطح فرمی (eV)
۰/۰۵	۰/۰۱	۰/۰۰	چگالی حالت‌ها (states/eV)
p-type	p-type	–	نوع رسانایی

همچنین با انجام محاسبات ساختار نواری مشخص شد که گرافن خالص در نقطه k، شکاف صفر دارد. آلومینیوم شکاف کوچک(۰/۰۵eV) ایجاد می‌کند. قلع با اوربیتال‌های p خود و به دلیل هیبریداسیون قوی‌تر، شکاف قابل توجه ۰/٤۸ eV در حوالی نقطه K باز می‌کند (شکل ۱). ساختار نواری هر دو سیستم نشان می‌دهد که آلایش جانشینی موجب شکستن تقارن زیرشبکه گرافن و حذف رفتار ایده‌آل مخروط دیراک شده است. با این حال، شدت این تغییر در سیستم آلاییده با Sn به‌مراتب بیشتر از نمونه آلاییده با Alاست. در سیستم گرافن آلاییده با Sn، فاصله مشخصی میان بالاترین نوار ظرفیت و پایین‌ترین نوار رسانش مشاهده می‌شود که بیانگر تشکیل یک شکاف نواری کوچک (در حدود چند دهم الکترون‌ولت) و تبدیل گرافن به یک نیمه‌رسانا است. درحالی‌که، در گرافن آلاییده با Al، تنها یک شکاف بسیار کوچک یا شبه‌شکاف در نزدیکی سطح فرمی نشان می‌دهد.

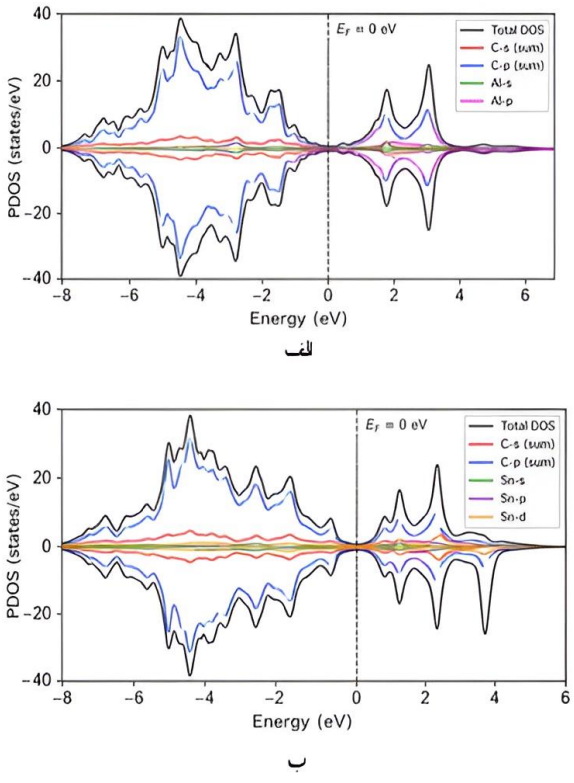
این شکاف برای کاربردهای حس‌گرهای نوری و قطعات الکترونیکی مناسب‌تر از آلومینیوم است.

در شکل ۲ نمودارهای چگالی حالت‌های جزئی برای گرافن آلاییده با قلع (Sn) و آلومینیوم (Al) نشان داده شده است.



شکل ۱: مقایسه ساختار نواری گرافن (الف) خالص، (ب) آلاییده با Al ، (ج) آلاییده با Sn

به وضوح دیده می‌شود که در هر دو سیستم، اوربیتال‌های C-2p سهم غالب را در ناحیه اطراف سطح فرمی دارند، در حالی که سهم اوربیتال‌های آلاینده عمدتاً به صورت حالت‌های هیبریدی در نزدیکی نوارهای ظرفیت و رسانش ظاهر می‌شود. در گرافن آلاییده با قلع (Sn)، مشارکت اوربیتال‌های Sn-p در نزدیکی سطح فرمی نسبت به Al محسوس‌تر است و همین هیبریداسیون قوی‌تر با اوربیتال‌های C-2p را می‌توان عامل اصلی افزایش شکاف انرژی و تغییرات ساختار نواری دانست. در هر دو سیستم، چگالی حالت‌ها در انرژی فرمی بسیار کوچک است که با رفتار نیمه‌رسانایی یا شبه‌نیمه‌رسانایی مشاهده‌شده در ساختار نواری سازگار است. همچنین تطابق ویژگی‌های PDOS با ساختار نواری، منشأ اوربیتالی نوارهای نزدیک سطح فرمی را به‌خوبی تأیید می‌کند.



الف

ب

شکل ۲: چگالی حالات جزئی گرافن الف- آلاییده با Al و ب- آلاییده با Sn

نتیجه‌گیری

نتایج این مطالعه به وضوح نشان می‌دهد که آلایش گرافن با Sn اثر قوی‌تری نسبت به Al بر ساختار الکترونیکی گرافن دارد و موجب بازشدن شکاف نواری و افزایش هیبریداسیون اوربیتال‌ها می‌شود، در حالی که آلایش با Al تنها تغییرات محدودی در نوارهای نزدیک سطح فرمی ایجاد کرده و ویژگی‌های ذاتی گرافن را تا حد زیادی حفظ می‌کند. پیشنهاد می‌شود در کارهای آینده تأثیر درصدهای بالاتر آلایش قلع (مثلاً ۵/۵۶٪) و همچنین اثر کرنش مکانیکی روی این ساختارها بررسی شود.

مرجع‌ها

[۱] H. Ti, N. Su, J. Wang, H. Lu, Q. Zhang, M. Li, “ Coexistence of doping and strain to tune electronic and optical properties of monolayer graphene.” Micro and Nanostructures, 188, (2024) 207762.
[۲] M.E. Federl, M. Gmitra, J. Fabian, “Non-equilibrium carrier dynamics and band structure of graphene on 2D tin.” arXiv, (2024), 2405.01075.
[۳] Y.Zhou, X. He, M. Li, “Roles of doping in enhancing the performance of graphene/graphene-like semiconductors.” AIP Advances, 15(1), (2025), 010701.
[۴] D.V. Zav'yalov, S.V. Kryuchkov, “Spin-orbit coupling in monolayer graphene doped by Cd and Te atoms.” (2024) Carbon, 230, 119571.
[۵] F.Liu, G. Wei, B. Hu, “A review on n-type chemical doping of graphene films: preparation, characterization and applications.” Nanoscale, 17, (2025), 21291–21328

بررسی اثر آلایش ترکیبات چندضلعی کربنی روی خواص ساختاری و الکترونی نانونوارهای نیترید بور با استفاده از محاسبات نظریه‌ی تابعی چگالی

رزم‌آرا، مصطفی[۱]؛ محمدپور، حکیمه[۱]؛ فیروزنیا، آرش[۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز

چکیده

ویژگی‌های ساختاری و الکترونی نانونوارهای نیترید بور آلاییده با چندضلعی‌های کربنی با روش نظریه‌ی تابعی چگالی بررسی می‌شود. ۳، ٤، ٥ و ٦ اتم کربن به صورت سه، چهار، پنج و شش‌ضلعی به عنوان آلاینده در نظر گرفته شده‌اند که به اختصار 3C، 4C، 5C و 6C نام‌گذاری شده‌اند. طبق نتایج محاسبات نانونوار نیترید بور آلاییده با 3C پایدارترین حالت را بین ساختارهای مورد بررسی دارد و آلایش نانونوارهای نیترید بور با آلاینده‌های چندضلعی کربنی، گاف نواری نیترید بور خالص را بسیار کاهش داده از ٤/٦ الکترون‌ولت به ۱/۱۲ تا ۲/٦٦ الکترون‌ولت (بسته به نوع آلاینده‌ی چندضلعی) کاهش می‌دهد. علاوه‌براین، آلاینده‌ی 3C کم‌ترین گاف نواری را نشان می‌دهد و نانونوار آلاییده با آن مانند یک نیمرسانای ذاتی رفتار می‌کند در حالی که آلاینده‌های 4C، 5C و 6C نانونوار نیترید بور را به‌ترتیب به نیمرسانای نوع n، نوع p و نوع n تبدیل می‌کنند. نتایج این مطالعه نشان می‌دهند که آلایش نانونوار نیترید بور با چندضلعی‌های کربنی روش مؤثری برای طراحی ابزارهای نانوالکترونیک و اپتوالکترونیک دوبعدی ارائه می‌دهد.

واژه‌های کلیدی: مدل‌سازی اتمی، نانونوار نیترید بور، آلایش با چندضلعی کربنی، نظریه‌ی تابعی چگالی، پایداری، خواص ساختاری، خواص الکترونی.

The effect of n-gonal carbon doping on structural and electronic properties of boron nitride nanoribbons from first-principles study

Razmara, Mostafa[1]; Mohammadpour, Hakimeh[1]; Phirouznia, Arash[1]

[1] *Department of Physics, Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz*

Abstract

The structural and electronic properties of n-gonal carbon-doped boron nitride nanoribbons are studied by the density functional theory. 3-, 4-, 5- and six-gonal carbon atoms are considered as dopants which are short-named as 3C, 4C, 5C and 6C. Results indicate that 3C doped boron nitride nanoribbon has the lowest formation energy and the highest stability. Polygonal carbon incorporation, reduces the pristine bandgap from 4.6 eV to 1.12-2.66 eV (depending on polygon size). In addition, the 3C-doped boron nitride nanoribbon, has the smallest band gap and intrinsic semiconductor behavior while other 4C, 5C and 6C carbon dopants turn the pristine boron nitride nanoribbons into n-type, p-type and n-type semiconductors, respectively. According to the results n-gonal carbon-doping of boron nitride nanoribbons offer an effective way for designing tunable 2D boron nitride nanoribbon-based nanoelectronic and optoelectronic devices.

***Keywords**: Atomic modelling, Boron nitride nanoribbon, n-gonal carbon doping, Density functional theory, Stability, Structural properties, Electronic properties.*

PACS No. 61, 73, 81

مقدمه

از زمان اولین ساخت موفق گرافن در ۲۰۰٤، پژوهش‌های گسترده‌ای روی گرافن و نانوساختارهای دوبعدی دیگر انجام شده است [۱–۲]. با الهام از گرافن، نانومواد دوبعدی به‌خصوص نیترید بور تخت موسوم به گرافن سفید، به دلیل دارا بودن خواص فیزیکی و شیمیایی منحصربه‌فرد توجه زیادی را به خود جلب کرده و کاربرد بالقوه‌ای در ادوات اپتوالکترونیک، حسگرهای الکتروشیمیایی، کاتالیزورها، ترانزیستورهای اثر–میدانی، نانوفیلترها، بسترهای عایق برای ساخت نانولوله‌های کربنی و گرافن، روکش‌های محافظ، آشکارسازها و گسیلنده‌های ماوراء بنفش و سیستم‌های نانوفوتونیک و نانوالکترونیک مختلف دارد [۲–٤]. از نظر ساختاری، نانونوار نیترید بور آرایشی شش‌ضلعی شبکه‌ی لانه زنبوری تخت مشابه با گرافن دارد اما برخلاف گرافن، دارای گاف نواری بزرگ ٥–٦ eV است [٥–٦] که برای کاربردهای عملی باید آن را کاهش داد. روش‌های عامل‌دار کردن و مهندسی نقص در شبکه برای اصلاح گاف نواری بررسی شده‌اند [٦–۸]. در این مطالعه به بررسی ویژگی‌های ساختاری و الکترونی نانونوارهای نیترید بور آلاییده با چندضلعی‌های3C-6C می‌پردازیم. مطالعات پیشین عمدتاً روی تنظیم گاف نواری نانونوارهای نیترید بور با آلایش از طریق جایگزینی آلاینده به‌جای اتم‌های بور و نیتروژن انجام شده‌اند اما در این پژوهش با رهیافتی متفاوت، چندضلعی‌های کربنی، خارج از صفحه‌ی نانونوار نیتریدبور قرار می‌گیرند و یک اتم بور و یک اتم نیتروژن با دو اتم کربن از چندضلعی جایگزین می‌شوند.

مدل‌سازی و روش انجام محاسبات

بهینه‌سازی ساختاری، چگالی حالت‌ها و ساختار نواری با نظریه تابعی چگالی و نرم‌افزار OPENMX انجام شده است [۹–۱۰]. از شبه‌پتانسیل‌های نُرم‌پایسته [۱۱–۱۳] و توابع پایه–جایگزیده شبه‌اتمی [۹] به‌ترتیب برای توصیف برهمکنش بین الکترون‌های هسته و ظرفیت و نمایش اوربیتال الکترون‌های ظرفیت استفاده شده است. مجموعه های پایه‌ی N6.0-s3p2d2، B7.0-s3p2d2 و C6.0-s3p2d2 به‌ترتیب برای اتم‌های نیتروژن، بور و کربن استفاده شده‌اند. از روش تقریب شیب تعمیم یافته‌ی GGA-PBE برای محاسبه‌ی انرژی تبادلی–همبستگی استفاده شده است[١٤]. تقسیم‌بندی منطقه‌ی اول بریلوئن با توزیع ۳×۱×۳ به روش مونخورست–پک [۱٥] با انرژی قطع ۱۹۰Ry صورت گرفته است. ساختار به صورت یک ابرسلول ٤×۱×٦ زیگزاگ با یک فاصله‌ی خلأ ۳۰ آنگسترومی در امتداد محور y و شرایط مرزی دوره‌ای در امتداد محورهای x و z در نظر گرفته شده است. فرآیند کامل واهلش قبل از محاسبه‌ی ویژگی‌های ساختاری و الکترونی برای تمام ساختارها انجام شد تا بیشینه نیروی وارد بر هر اتم به ۰/۰۰۰۱ Ha/Bohr برسد. برای مقایسه‌ی پایداری نسبی ساختارهای مورد مطالعه، انرژی تشکیل آن‌ها به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$E_{form} = E_T[BNNR + nC] - E_T[BNNR] - n\mu_C + \mu_B + \mu_N$$

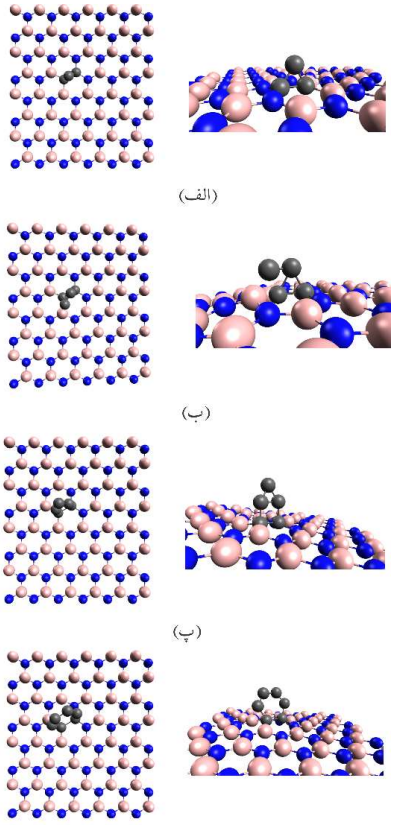
$E_T[BNNR + nC]$ انرژی کل ابرسلول نانونوار نیترید بور آلاییده با n اتم کربن، $E_T[BNNR]$ انرژی کل نانونوار نیترید بور و μ_B ،μ_C و μ_N به‌ترتیب، پتانسیل شیمیایی کربن، بور و نیتروژن هستند.

نتایج مدل‌سازی و بحث

نماهای بالایی و جانبی پیکربندی‌های بهینه شده‌ی آلاییده با چندضلعی‌های کربنی 3C-6C نانونوارهای زیگزاگ در شکل ۱ نشان داده شده‌اند. در تمام ساختارها، یک اتم بور و یک اتم کربن نانونوار نیترید بور خالص، با دو اتم کربن (C_B و C_N) جایگزین شده‌اند و اتم‌های کربن دیگر به این دو اتم متصل شده‌اند تا چندضلعی‌های آلاینده‌ی کربنی تشکیل شوند. در شکل ۲، طول پیوندهای مربوط به آلاینده‌های چندضلعی و طول پیوندهای بین این آلاینده‌ها و اتم‌های نیتروژن و بور مجاور نشان داده شده است که ساختارهای بهینه شده در شکل ۱ را تأیید می‌کند. انرژی‌های تشکیل محاسبه شده برای ساختارهای آلاییده در شکل ۳ نشان داده شده‌اند. مشاهده می‌شود که تمامی مقادیر این انرژی‌ها مثبت می‌باشند که به معنی گرماگیر بودن فرآیند آلایش است[١٦]. این انرژی‌ها به طور یکنوا از ۱۱/۳٦ eV برای 3C به ۱۳/۱۹ eV برای 4C، ۱٦/٥۹ eV برای 5C و ۱۷/۷۷ eV برای 6C افزایش می‌یابد و پایداری نسبی با افزایش تعداد اتم‌های کربن چندضلعی کاهش می‌یابد.

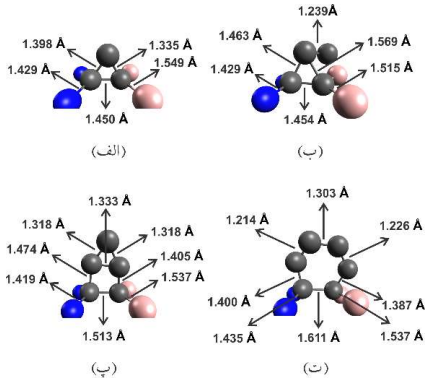
نمودار چگالی حالات و ساختارهای نواری الکترونی به‌ترتیب در

شکل‌های ٤ (الف–ت) و ٥ (الف–ث)، در بازه‌ی انرژی ۱۰– تا ۱۰



(الف) (ب) (پ) (ت)

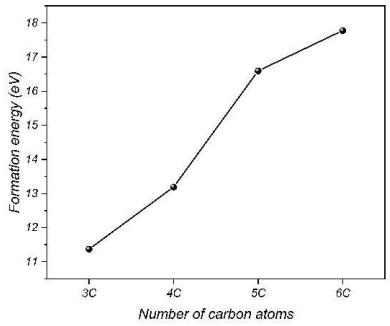
شکل۱ : نمای بالایی و جانبی نانونوارهای نیترید بور آلاییده با (الف) 3C (ب) 4C (پ) 5C (ت) 6C. (صورتی: اتم‌های بور آبی: اتم‌های نیتروژن)



(الف) (ب) (پ) (ت)

شکل۲: طول پیوند آلاینده‌های (الف) 3C (ب) 4C (پ) 5C (ت) 6C.

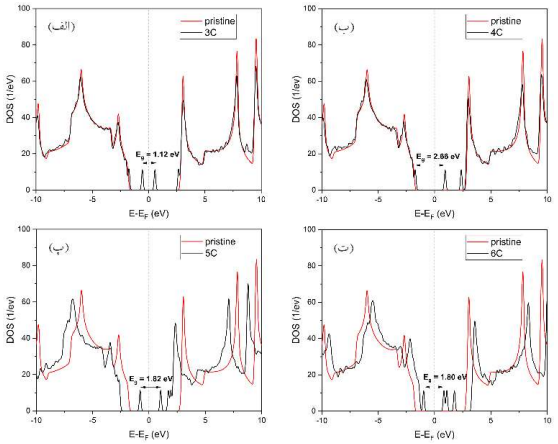
و ٤– تا ٤ الکترون ولت حول تراز فرمی رسم شده‌اند. با توجه به این‌که حضور اتم‌های ناخالصی کربن، در ساختار نانونیترید بور خالص، ترازهای ناخالصی پر و خالی در دو طرف تراز فرمی ایجاد می‌کنند، کاهش مشهودی در گاف نواری ساختارهای آلاییده مشاهده می‌شود. در نانونوار نیترید بور خالص (شکل ٥ الف)، با بیشینه‌ی نوار ظرفیت و کمینه‌ی نوار رسانش به‌ترتیب در ۱/۷۸ eV– و ۲/۸۲eV، گاف نواری ٤/٦۰eV است.



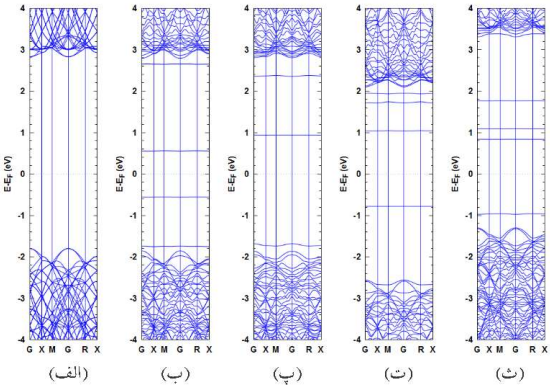
شکل۳ : انرژی‌های تشکیل نانونوارهای آلاییده با چندضلعی‌های کربنی.

در نانونوار نیتریدبور آلاییده با 3C، چهار تراز آلایشی متمایز در گاف نواری با دو تراز متقارن در نزدیک تراز فرمی در ۰/٥٦ eV– و ۰/٥٦ eV ظاهر می‌شوند که گاف نواری را به ۱/۱۲ eV کاهش می‌دهد (شکل‌های ٤الف و ٥ب). دو تراز دیگر نیز در ۱/۷٦ eV– (نزدیک نوار ظرفیت) و ۲/٦٤ eV (نزدیک نوار رسانش) واقع شده‌اند. این ساختار یک نیمرسانای ذاتی با تراز فرمی در وسط دو تراز ناخالصی است. در ساختار آلاییده با 4C، سه تراز آلایشی ایجاد می‌شوند (شکل‌های ٤ ب و پ): دو تراز نامتقارن در ۱/۷۲eV– و ۰/۹٤eV گاف نواری ۲/٦٦ eV ایجاد می‌کنند و تراز سوم در۲/۳٦eV قرار دارد. جابه‌جایی تراز فرمی به سمت نوار رسانش نشان‌دهنده‌ی ساختار نیمرسانای نوع n است. در ساختار آلاییده با 5C، چهار تراز ناخالصی درگاف نواری ایجاد می‌شوند (شکل‌های ٤ پ و ٥ت) طوری که دو تراز ناخالصی در ۰/۷۸eV– و ۱/۰٤ eV، گاف نواری ۱/۸۲eV را ایجاد کرده و دو تراز ناخالصی دیگر در ۱/۷۲ eV و ۱/۹٤ eV نزدیک نوار رسانش قرار دارند. در این ساختار تراز فرمی اندکی به سمت نوار ظرفیت جابه‌جا شده رفتار نیمرسانای نوع p را نشان می‌دهد. برای ساختار آلاییده با 6C، چهار تراز

ناخالصی در داخل گاف نواری ایجاد می‌شوند (شکل‌های ٤ت و ٥ث).



شکل ٤ : چگالی حالت‌های نانونوارهای نیترید بور آلاییده با (الف) 3C (ب) 4C (پ) 5C (ت) 6C. (تراز فرمی با مقدار انرژی صفر منطبق شده است.)



شکل ٥ : ساختار نواری نانونوارهای نیترید بور آلاییده با (الف) 3C (ب) 4C (پ) 5C (ت) 6C. (تراز فرمی بر مقدار انرژی صفر منطبق شده است.)

دو تراز ناخالصی در ۰/۹٦ eV- و ۰/۸٤ eV مقدار گاف نواری ۱/۸۰eV را نتیجه می‌دهند و دو تراز ناخالصی دیگر در ۱/۱۰eV و ۱/۷٦eV بالای تراز فرمی ظاهر می‌شوند. جابه‌جایی تراز فرمی به سمت نوار رسانش نشان‌دهنده‌ی رفتار نوع n ساختار حاصل است.

نتیجه گیری

خواص ساختاری و الکترونی نانونوارهای نیترید بور آلاییده با چندضلعی‌های کربنی مورد بررسی قرار گرفت. تمام ساختارهای حاصل، رفتار نیمرسانا با گاف‌های نواری قابل تنظیم را نشان دادند. ساختار آلاییده با 3C کم‌ترین انرژی تشکیل، بالاترین پایداری و کم‌ترین گاف نواری را در بین ساختارهای بررسی شده نشان می‌دهد. اما ساختار آلاییده با 4C بالاترین گاف نواری را نشان می‌دهد. چندضلعی‌های بزرگ‌تر 5C و 6C واپیچش‌های قوی‌تری را در محل اتصال با نانونوار نیترید بور نشان می‌دهند. طبق نتایج این مطالعه آلایش نانونوارهای نیترید بور با چندضلعی‌های کربنی به‌طور مؤثری گاف نواری و نوع نیمرسانا را تغییر داده رهیافت نوینی برای توسعه‌ی ادوات نانوالکترونیک و اپتوالکترونیک دوبعدی مبتنی بر نانونوار نیترید بور ارائه می‌دهد.

مرجع‌ها

[۱] Q. Li, T. Gao, K. Zhang, X. Che and G. Ni; ``*Tuning Electronic Structure and Optical Properties of Monolayered h-BN by Doping C, Cu and Al*", *Molecules* **30** (2025) 192.

[۲] S. Angizi, M. Khalaj, S. A. A. Alem, A. Pakdel, M. Willander, A. Hatamie and A. Simchi; ``*Review—Towards the Two-Dimensional Hexagonal Boron Nitride (2D h-BN) Electrochemical Sensing Platforms*", *J. Electrochem. Soc* **167** (2020) 126513.

[۳] K. Zhang, Y. Feng, F. Wang, Z. Yang and J. Wang; ``*Two dimensional hexagonal boron nitride (2D-hBN): synthesis, properties and applications*", *J. Mater. Chem. C* **5** (2017) 11992-12022.

[٤] K. Ba, W. Jiang, J. Cheng, J. Bao, N. Xuan, Y. Sun, B. Liu, A. Xie, S. Wu and Z. Sun; ``*Chemical and Band gap Engineering in Monolayer Hexagonal Boron Nitride*", *Sci Rep* **7** (2017) 45584.

[٥] G. Cassabois, P. Valvin and B. Gil; ``*Hexagonal boron nitride is an indirect bandgap semiconductor*", *Nature Photon* **10** (2016) 262-266.

[٦] S. K. Gupta, H. He, D. Banyai, M. Si, R. Pandey and S. P. Karna; ``*Effect of Si doping on the electronic properties of BN monolayer*", *Nanoscale* **6** (2014) 5526-5531.

[۷] S. K. Gupta, H. He, I. Lukačević and R. Pandey; ``*Spin-dependent electron transport in C and Ge doped BN monolayers*", *Phys. Chem. Chem. Phys* **19** (2017) 30370-30380.

[۸] T. Pelini, C. Elias, R. Page, L. Xue, S. Liu, J. Li, J. H. Edgar, A. Dréau, V. Jacques, P. Valvin, B. Gil and G. Cassabois; ``*Shallow and deep levels in carbon-doped hexagonal boron nitride crystals*", *Phys. Rev. Materials* **3** (2019) 094001.

[۹] T. Ozaki; ``*Variationally optimized atomic orbitals for large-scale electronic structures*", *Phys. Rev. B* **67** (2003) 155108.

[۱۰] T. Ozaki and H. Kino; ``*Efficient projector expansion for the ab initio LCAO method*", *Phys. Rev. B* **72** (2005) 045121.

[۱۱] N. Troullier and J. L. Martins; ``*Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations*", *Phys. Rev. B* **43** (1991) 1993-2006.

[۱۲] P. E. Blöchl; ``*Generalized separable potentials for electronic-structure calculations*", *Phys. Rev. B* **41** (1990) 5414-5416.

[۱۳] I. Morrison, D. M. Bylander and L. Kleinman; ``*Nonlocal Hermitian norm-conserving Vanderbilt pseudopotential*", *Phys. Rev. B* **47** (1993) 6728-6731.

[۱٤] J. P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof; ``*Generalized Gradient Approximation Made Simple*", *Phys. Rev. Lett* **77** (1996) 3865-3868.

[۱٥] H. J. Monkhorst and J. D. Pack; ``*Special points for Brillouin-zone integrations*", *Phys. Rev. B* **13** (1976) 5188-5192.

[۱۶] C.J. Rupp, J. Rossato, R. José Baierle, ``*First-principles study of oxidized BC 2 N nanotubes*", Int J of Quantum Chemistry 112 (2012) 3312-3319.

مطالعه مونت‌کارلو دینامیک پسماند در مدل آیزینگ دوبعدی تحت میدان مغناطیسی پله‌ای

عظیمیان ، عرفان؛ نوشاد، هوشیار

دانشکده فیزیک و مهندسی انرژی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی‌تکنیک تهران)، خیابان حافظ، تهران، ایران

چکیده

در این پژوهش ما رفتار پسماند دینامیکی مدل آیزینگ دوبعدی را تحت یک میدان مغناطیسی که هم چرخه‌ای و هم پله‌ای است، با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو و الگوریتم متروپولیس بررسی کرده‌ایم. بسیاری از پژوهش‌های دیگر معمولاً از میدان پیوسته استفاده می‌کنند، ولی ما میدان را به صورت گسسته (پله‌ای) در نظر گرفتیم. دلیل این امر این بود که بتوانیم اثر ارتفاع پله‌ها ΔH و تعداد گام مونت کارلو در هر پله (n) را روی دینامیک سیستم بهتر و دقیق‌تر آنالیز کنیم. در ادامه، وابستگی چند کمیت غیرتعادلی مثل مساحت حلقه پسماند (A) و میدان وادارندگی(H_c) را به دما (T) و اندازه شبکه (L) حساب کرده‌ایم. نتایج بدست آمده نشان میدهد که یک رقابت سیستماتیک بین زمانی که طول میکشد تا اسپین‌ها وارونه بشوند و نرخی که میدان با گام‌های گسسته تغییر میکند، وجود دارد. این رقابت باعث می‌شود شواهدی اولیه از یک رفتار غیرتعادلی نسبتاً متفاوتی ببینیم؛ هرچند اثبات قطعی این رفتار نیازمند محاسبه پارامترهای نظم دینامیکی است. جالب اینجاست که این سیستم، به‌جای افت نمایی ساده، الگوهای مقیاسبندی توانی هم از خود نشان میدهد که با نتایجی که در میدان‌های پیوسته کلاسیک می‌بینیم فرق دارد.

واژه های کلیدی: *مدل آیزینگ دوبعدی، شبیه‌سازی مونت‌کارلو، پسماند مغناطیسی، میدان مغناطیسی پله‌ای، میدان وادارندگی*

Monte Carlo Study of Dynamic Hysteresis in the 2D Ising Model under a Stepwise Cyclic Magnetic Field

Azimiyan, Erfan; Noshad, Houshyar

Department of Physics and Energy Engineering, Amirkabir University of Technology (Tehran Polytechnic), Hafez Avenue, Tehran, Iran

Abstract

In this study, we have investigated the dynamic hysteresis behavior of the 2D Ising model under a magnetic field that is both cyclic and stepwise, using Monte Carlo simulations and the Metropolis algorithm. Many other studies usually use a continuous field, but we considered the field as discrete (stepwise). The reason for this was to be able to better and more accurately analyze the effect of the step height (ΔH) and the number of Monte Carlo steps per step (n) on the dynamics of the system. In the following, we have calculated the dependence of several non-equilibrium quantities such as the hysteresis loop area (A) and the coercive field (H_c),on temperature (T) and lattice size (L). The results obtained show that there is a systematic competition between the time it takes for the spins to flip and the rate at which the field changes with discrete steps. This competition gives rise to preliminary indications of a somewhat distinct nonequilibrium behavior; however, a definitive characterization of this behavior requires the calculation of dynamic order parameters and related quantities. Interestingly, this system also exhibits power-law scaling patterns, rather than a simple exponential decay, that differ from the results we see in classical continuous fields.

***Keywords**: 2D Ising Model, Monte Carlo Simulation, Magnetic Hysteresis, stepwise Magnetic Field, Coercive Field*

PACS No. 75, 05

مقدمه

بررسی پاسخ دینامیکی سیستم‌های مغناطیسی به میدان‌های خارجی وابسته به زمان، یکی از موضوعات مهم در فیزیک آماری غیرتعادلی است. هنگامی که یک سیستم فرومغناطیس تحت تأثیر یک میدان مغناطیسی نوسانی قرار می‌گیرد، به دلیل رقابت میان زمان رهاسازی سیستم و دوره تناوب میدان خارجی، پدیده‌ای تحت عنوان پسماند دینامیکی رخ می‌دهد. در این شرایط، سیستم نمی‌تواند به طور لحظه‌ای خود را با تغییرات میدان تطبیق دهد و این تأخیر فاز، منجر به شکل‌گیری حلقه پسماند می‌شود[۱]. مدل آیزینگ که از پرکاربردترین مدل‌های مکانیک آماری محسوب می‌شود، ابزار مناسبی برای مطالعه این مسائل است[۲]. طی چند دهه اخیر، مطالعات متعددی روی پسماند دینامیکی در مدل آیزینگ کار کرده‌اند. ولی تقریباً در بیشتر این پژوهش‌ها، از میدان‌های مغناطیسی پیوسته مثل سینوسی یا مثلثی استفاده شده است. در این نوع میدان‌ها، شدت میدان مدام در حال تغییر است. همین موضوع باعث می‌شود که نتوانیم به راحتی بفهمیم کدام بخش از رفتار سیستم مربوط به زمان رهاسازی ذاتی خودش و کدام بخش ناشی از تغییرات پیوسته میدان است. در مقابل، استفاده از میدان‌های چرخه‌ای گسسته (پله‌ای) خیلی کمتر مورد توجه قرار گرفته است، در حالی که رویکرد جالبی است. در این روش، میدان خارجی به صورت پله‌های مجزا با ارتفاع مشخص (ΔH) تغییر می‌کند، و در هر پله برای مدت ثابتی (که معادل n گام مونت‌کارلو است) بدون تغییر می‌ماند[۳]. این شرایط پله‌ای باعث می‌شود اسپین‌ها در هر مرحله، فرصت کافی برای رها شدن در یک میدان ثابت را داشته باشند، قبل از اینکه میدان دوباره تغییر کند. این ایده می‌تواند امکان بررسی دقیق‌تر رفتار پسماند دینامیکی را فراهم کرده و پیش زمینه ای برای مطالعه دقیق‌تر گذار فاز دینامیکی ایجاد کند. در این پژوهش، با شبیه‌سازی مونت‌کارلو و الگوریتم متروپولیس، رفتار دینامیکی مدل آیزینگ دوبعدی را زیر یک میدان مغناطیسی چرخه‌ای پله‌ای بررسی کرده‌ایم. هدف این بود که ببینیم کمیت‌هایی مثل مساحت حلقه (A) و میدان وادارندگی (H_c) به دما T ، اندازه شبکه L و زمان توقف در هر پله (n) وابسته هستند. پیش‌بینی می‌کنیم که رقابت بین زمان رهاسازی اسپین‌ها و نرخ گسسته تغییرات میدان، به بروز قوانین مقیاسبندی توانی به فرم $A \propto n^{-\beta}$ و $H_c \propto n^{-\gamma}$ منجر می‌شود که نسبت به حالت کلاسیک:

$$A = KH_{\circ}^{\alpha}\omega^{\beta}T^{\gamma} \qquad (۱)$$

متفاوت است. این نتایج می‌تواند به درک بهتر رفتار غیرتعادلی مواد مغناطیسی در برابر تحریک‌های گسسته کمک کند.

روش محاسباتی

در این پژوهش، مدل آیزینگ فرومغناطیس دوبعدی را روی یک شبکه مربعی به ابعاد $L \times L$ درنظر گرفتیم. برای اینکه اثرات ناشی از اندازه محدود شبکه را تا حد ممکن کم کنیم، از شرایط مرزی دوره‌ای استفاده کردیم. هامیلتونی سیستم وقتی یک میدان مغناطیسی وابسته به زمان به آن اعمال شود، به این شکل نوشته می‌شود [۴]:

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle} S_i S_j - H(t)\sum_{i=1}^{N} S_i \qquad (۲)$$

$S_i = \pm 1$ همان اسپین آیزینگ در جایگاه i است، $J \succ 0$ ثابت برهمکنش تبادلی بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها است و آن را برای سادگی برابر با ۱ گرفتیم، و H(t) میدان مغناطیسی خارجی یکنواخت متغیر زمانی است. جمع اول روی همه جفت های نزدیک‌ترین همسایه انجام می‌شود و $L^{2} = N$ تعداد کل اسپین‌های شبکه است. برای شبیه‌سازی دینامیک سیستم، از روش مونت کارلو و الگوریتم متروپولیس [۵] با دینامیک وارونگی تک اسپینی استفاده کردیم. در هر گام آزمایشی، یک اسپین S_i را بصورت تصادفی انتخاب و تغییر انرژی ناشی از وارونگی آن را محاسبه می‌کنیم. برای سادگی $K_B = 1$ در نظر گرفته شده است. باید توجه داشت که واحد زمان دراین روش، گام مونت‌کارلو بر اسپین است که ماهیتی تصادفی و الگوریتمی دارد و برای تبدیل این زمان به زمان مشخصه میکروسکوپی τ نیاز است:

$$t = \tau \times t_{MC} \qquad (۳)$$

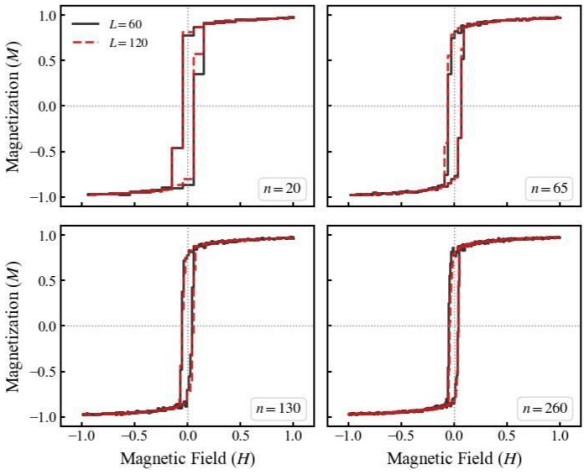
لذا در این پژوهش فرکانس‌های ذکر شده ماهیت الگوریتمی(f_{MC}) دارند. برخلاف خیلی از پژوهش‌های قبلی که معمولاً از میدان‌های سینوسی پیوسته استفاده می‌کنند، ما اینجا یک میدان چرخه‌ای از نوع پله‌ای داریم[۶]. میدان بین $-H_{.}$ و $+H_{.}$ با گام‌های گسسته dH نوسان می‌کند. در هر گام، سیستم به مدت nگام مونت‌کارلو در معرض میدان ثابت قرار می‌گیرد. بنابراین، دوره تناوب یک چرخه پسماند بصورت $T = \left(۴H_{.}/\Delta H\right)n$ و فرکانس متناظر آن $f = \frac{۱}{P}$ تعریف می‌شود. در شبیه‌سازی‌ها، دامنه میدان را $H_{.} = ۰.۲$ و گام‌های میدان را $dH = ۰.۰۲$ گرفتیم؛ شبکه هم به اندازه $L = ۶۰,۱۲۰$ درنظر گرفته شده‌اند تا اثر اندازه محدود را ببینیم. دماها را $T = ۱/۸, T = ۲/۲$ و $T = ۲/۶$ انتخاب کردیم که به ترتیب مربوط به فاز منظم، ناحیه بحرانی و فاز پارامغناطیس هستند و زمان ماندگاری در هر پله میدان نیز $n = ۲۰,۶۵,۱۳۰,۲۶۰$ بررسی شد. برای رسیدن سیستم به حالت پایدار دینامیکی ، در هر اجرا ابتدا ۴ چرخه اولیه کنار گذاشته شده و میانگین‌گیری را تنها روی چرخه‌های بعدی انجام دادیم، سپس کمیت‌هایی مانند مساحت حلقه پسماند دینامیکی A که برابر است با:

$$A = \oint M dH \qquad (۴)$$

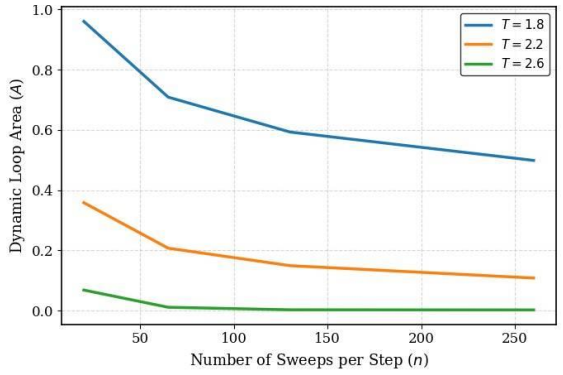
میدان وادارندگی H_c از روی چرخه‌های پایدار بعدی استخراج و میانگین‌گیری شدند. H_c با استفاده از روش میان‌یابی خطی محاسبه گردید. در نهایت، جهت محاسبه خطاهای آماری، تمامی نتایج بر روی ۱۰۰۰ اجرای مستقل با شرایط اولیه تصادفی میانگین‌گیری شده‌اند. خطاهای آماری از خطا استاندارد میانگین بر روی ۱۰۰۰ اجرای مستقل محاسبه شدند و کوچکتر از اندازه نمادهای داده در نمودارها بوده‌اند.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، رفتار غیر تعادلی و پسماند مغناطیسی را در مدل آیزینگ دوبعدی با استفاده از شبیه‌سازی مونت‌کارلو و الگوریتم متروپولیس بررسی کردیم. نکته جدیدی که در این پژوهش وجود دارد این است که به‌جای میدان‌های پیوسته معمول، از یک میدان مغناطیسی چرخه‌ای پله‌ای استفاده کردیم. این روش به ما اجازه داد تا بتوانیم دینامیک مغناطش و فرآیندهای مرتبط با پیکربندی‌های اسپینی را در مقادیر ثابت میدان، با دقت خوبی دنبال کنیم. با بررسی نتایج شبیه‌سازی مشخص شد که رقابت بین سه عامل برهمکنش‌های تبادلی، نوسانات گرمایی و نرخ تغییرات میدان خارجی تغییر می‌کند که نقش مهمی در تعیین ویژگی‌های ماکروسکوپیک سیستم دارد.

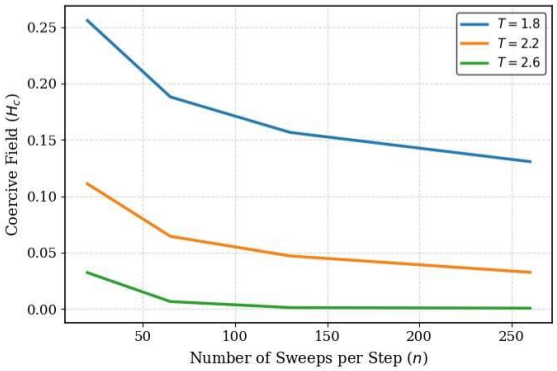


شکل۱ : حلقه‌*ای پسماند دینامیکی پله‌ای در دمای* $T = ۱/۸$ (یکاهای بدون بعد) برای زمان‌های مختلف n، مغناطش نرمالایز شده برحسب میدان خارجی رسم شده و ماهیت پله‌ای میدان، آرامش تدریجی اسپین‌ها به سمت تعادل را نشان می‌دهد



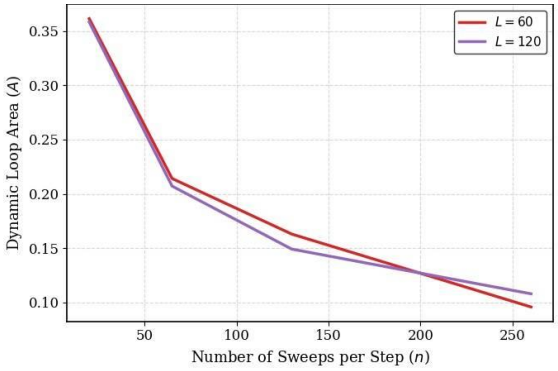
شکل۲ : افت نمایی مساحت حلقه پسماند A با افزایش n در دماهای مختلف(همه کمیت‌ها بدون بعد)، هرچه n بزرگتر باشد، سیستم زمان بیشتری برای نظم و آرامش دارد و اتلاف انرژی کمتر می‌شود. نوسانات حرارتی مساحت را تقریبا به صفر می‌رسانند.

اولین و مهمترین نتیجه‌ای که از این پژوهش گرفتیم؛ این است که مساحت حلقه پسماندA و میدان وادارندگی H_c خیلی شدید به پارامترn در هر پله وابسته هستند[۷]. مساحت حلقه نشان دهنده مقدار انرژی‌ای است که طی یک چرخه کامل تغییر مغناطش تلف می‌شود؛ این اتلاف انرژی دراصل ناشی از تاخیر فاز سیستم نسبت به میدان خارجی است. داده‌های ما به وضوح نشان می‌دهند که وقتی n را زیاد میکنیم، سیستم وقت کافی پیدا می‌کند تا در هر پله، به تعادل ترمودینامیکی برسد، نتیجه این سازگاری بهتر بین پیکربندی اسپین‌ها و میدان این است که تاخیر فاز کمتر می‌شود و درنتیجه A و H_cبرخلاف یک افت نمایی ساده، از یک قانون مقیاس‌بندی توانی به فرم $A \propto n^{-۰/۲۴}$ و $H_c \propto n^{-۰/۲۵}$ (با $R^۲ > ۰/۹۹$) پیروی کرده و کاهش می‌یابند. برعکس، وقتی n کوچک است(یعنی فرکانس بالا است)، سیستم عملا در یک حالت غیرتعادلی گیر می‌کند و دیگر نمی‌تواند خودش را با تغییرات سریع میدان همگام کند[۸].



شکل۳ : کاهش یکنواخت میدان وادارنده H_cبا افزایش n و دماT در واحدهای بدون بعد. هرچه n و T بیشتر باشند، سیستم راحت‌تر بر سدهای برهمکنش تبادلی غلبه کرده و مغناطش معکوس می‌شود.

همین موضوع موجب می‌شود حلقه‌های پسماند خیلی پهن شوند. علاوه بر تاثیر نرخ تغییرات میدان، ما به‌طور سیستماتیک اثر دما را هم برروی رفتار پسماند مغناطیسی بررسی کردیم؛ در دماهای پایین، مثلا $T = ۱/۸$ که خیلی از دمای بحرانی $T_C = ۲/۲۶۹$ فاصله دارد، انرژی تبادلی بین همسایه‌ها کاملا بر نوسانات گرمایی چیره می‌شود. با نزدیک شدن به دمای بحرانی(یعنی به سمت فاز پارامغناطیس)، نوسانات حرارتی بیشتر می‌شود و نظم بلندبرد اسپینی را می‌شکند. این قضیه برگشت مغناطش را راحت‌تر می‌کند، همانطور که در شکل های ۲ و ۳ *نشان داده شده است، در دماهای بالاتر مثلا* $T = ۲/۶$ دیگر همبستگی اسپینی خیلی ضعیف شده و مساحت حلقه پسماند به مقادیر خیلی ناچیز (نزدیک صفر) می‌رسد. این یعنی سیستم کم‌کم از حالت فرومغناطیس خارج شده و وارد فاز پارامغناطیس می‌شود. برای اطمینان از عدم وابستگی نتایج به اثر اندازه محدود، شبکه‌های $L = ۶۰$ و $L = ۱۲۰$مقایسه شدند[۱۱]. تطابق عالی داده‌ها نشان می‌دهد طول همبستگی از ابعاد شبکه کوچکتر بوده و نتایج به خوبی رفتار حد ترمودینامیکی را توضیف می‌کنند[۹ و ۱۰]. با این وجود، از آنجا که تایید قطعی نقطه بحرانی گذار فاز دینامیکی تنها با مساحت حلقه کافی نیست، برای پژوهش‌های آینده، پیشنهاد می‌کنیم محاسبه دقیق پارامتر نظم دینامیکی (Q)، حساسیت (χ_Q)و انباشتگر بایندر(U_L)جهت اثبات قطعی این گذار را بررسی کنیم.



شکل۴ : انطباق داده‌ها برای $L = ۶۰$و $L = ۱۲۰$در $T = ۱/۸$ (بی‌بعد) تایید می‌کند L از مرزها کوچکتر است.

مرجع‌ها

[۱] B. K. Chakrabarti and M. Acharyya, ***Rev. Mod. Phys. 71, 847 (1999).***
[۲] *L. Onsager, "Crystal Statistics: A Two-Dimensional Model with an Order–Disorder Transition,"* ***Physical Review, 1944.***
[۳] T. Tomé and M. J. de Oliveira, ***Phys. Rev. A 41, 4251 (1990).***
[۴] *R. J. Glauber*, J. Math. ***Phys. 4, 294(1963)***
[۵] Metropolis et al., J. Chem. ***Phys. 21, 1087 (1953).***
[۶] M. Acharyya, ***Phys. Rev. E69, 027105(2004)***
[۷] M. Rao, D. Dhar, and R. Pandit, ***Phys. Rev. B 43, 3373 (1990).***
[۸] P. A. Rikvold et al., ***Phys. Rev. E 49, 5080 (1994).***
[۹] S. W. Sides, P. A. Rikvold, and M. A. Novotny, ***Phys. Rev. E 57, 6512 (1998).***
[۱۰] E. Vatansever and N. G. Fytas, ***Phys. Rev. E 104, 064104 (2021).***
[۱۱] Yüce, Yüksel & Vatansever, ***Physica A 604, 127897 (2022).***

انرژی آزاد غیرتعادلی یک شبکه آیزینگ با سرکوب سیناپسی کوتاه‌مدت

عابدینی، امیرعلی؛ نوشاد، هوشیار*

دانشکده فیزیک و مهندسی انرژی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی‌تکنیک تهران)، خیابان حافظ، تهران، ایران

چکیده

سرکوب سیناپسی کوتاه‌مدت، یک فیدبک کند دینامیکی را معرفی می‌کند که می‌تواند فعالیت عصبی پایا را ناپایدار سازد. ما یک شبکه آیزینگ جنبشی با سرکوب را در قالب یک مسئله مکانیک آماری غیرتعادلی فرمول‌بندی می‌کنیم. با بهره‌گیری از جدایی مقیاس‌های زمانی میان دینامیک سریع نورونی و ترمیم کند سیناپسی، یک تابعی انرژی آزاد مؤثر $\mathcal{F}(m)$ استخراج می‌کنیم که مغناطش ماکروسکوپی را توصیف می‌کند. چشم‌انداز $\mathcal{F}(m)$ یک گذار فاز بازگشتی را نشان می‌دهد که با افزایش زمان بازیابی سیناپسی، سیستم از یک فاز فرومغناطیس ($|m| \approx 1$) به یک فاز پارامغناطیس ($m \approx 0$) عبور می‌کند. شبیه‌سازی‌های مونت‌کارلوی کامل شبکه تصادفی، پیش‌بینی‌های میدان میانگین را تأیید می‌کنند. نتایج ما چارچوبی ترمودینامیکی برای گذارهای ناشی از ناکارآمدی موقت سیناپسی فراهم می‌آورد.

واژه های کلیدی: مکانیک آماری غیرتعادلی، سرکوب سیناپسی، انرژی آزاد مؤثر، شبیه‌سازی‌های مونت‌کارلو، مدل آیزینگ جنبشی

Nonequilibrium free energy of an Ising network with short-term synaptic depression

Abedini, Amirali; Noshad, Houshyar*

Department of Physics and Energy Engineering, Amirkabir University of Technology (Tehran Polytechnic), Hafez Avenue, Tehran, Iran

Abstract

Short-term synaptic depression, a ubiquitous form of activity-dependent plasticity, introduces a slow dynamical feedback that can destabilize persistent neural activity. We cast a kinetic Ising network with depression as a nonequilibrium statistical mechanics problem. Exploiting the separation of timescales between fast neuronal dynamics and slow synaptic recovery, we derive an effective free energy functional $\mathcal{F}(m)$ that governs the macroscopic magnetization. The landscape of $\mathcal{F}(m)$ reveals a re-entrant phase transition: as the synaptic recovery time increases, the system crosses from a ferromagnetic phase ($|m| \approx 1$) to a paramagnetic phase ($m \approx 0$). Full Monte Carlo simulations of the stochastic network confirm the mean-field predictions. Our results provide a thermodynamic framework for synaptic fatigue-driven cortical state transitions.

***Keywords**: Nonequilibrium Statistical Mechanics, Synaptic Depression, Effective Free Energy, Monte Carlo Simulations, Kinetic Ising Model*

PACS No. *5, 64, 89*

مقدمه

شبکه‌های عصبی در مغز گذارهای خودبه‌خودی میان حالت‌های فعال (بالا) و حالت‌های آرام (پایین) نشان می‌دهند. یک فرمول‌بندی بیوفیزیکی که این گذارها را شکل می‌دهد، سرکوب سیناپسی کوتاه‌مدت (STD) است،[۱] به این معنی که هر اسپایک پیش‌سیناپسی به‌طور گذرا مخزن وزیکول‌های آزادشدنی را تخلیه می‌کند و کارایی سیناپسی را کاهش می‌دهد تا آنکه فرایندهای بازیابی آن را بازگردانند. اثر متقابل فعالیت سریع عصبی و دینامیک کند سیناپسی یک مسئله کلاسیک غیرتعادلی را تشکیل می‌دهد. پژوهش‌های انجام شده تا کنون با به‌کارگیری معادلات آهنگ میدان میانگین و فرمول‌بندی‌های فوکر – پلانک به تحلیل STD

پرداخته‌اند و پدیده‌هایی همچون هم‌گام‌سازی بازگشتی و ناپایداری‌های نوسانی را پیش‌بینی کرده‌اند.[۲] با این وجود یک توصیف ترمودینامیکی به صورتی که بتواند با انرژی آزاد به طوری که کمینه‌های آن متناظر با فاز ماکروسکوپی باشد تا کنون ارائه نشده است. چنین توصیفی می‌تواند نشانه‌های افت‌وخیز در نزدیکی گذارها را پیش‌بینی کند.

اکنون یک شبکه آیزینگ جنبشی از نورون‌های دوتایی با دینامیک گلابر که در آن جفت‌شدگی‌های سیناپسی بر اثر شلیک پیش‌سیناپسی تضعیف می‌شوند را مدل‌سازی می‌کنیم. این مدل را با در نظر گرفتن متغیرهای سرکوب سیناپسی به‌عنوان میدان‌هایی با تحول کند که پیرو همبستگی‌های آنی اسپینی هستند، توسعه می‌دهیم. در پایان یک انرژی آزاد مؤثر $\mathcal{F}(m)$ برای مغناطش به‌دست می‌آوریم و نمودار فاز حاصل را محاسبه و پیش‌بینی‌های آن را با شبیه‌سازی‌های مونت‌کارلو مقایسه می‌کنیم.

شبکه آیزینگ جنبشی با سرکوب سیناپسی

N اسپین دوتایی $s_i = \pm 1$ در نظر می‌گیریم که در آن $+1$ یک نورون فعال و -1 یک نورون آرام را نشان می‌دهد. هر نورون ورودی را دقیقاً از c همسایه پیش‌سیناپسی که به‌طور تصادفی انتخاب شده‌اند دریافت می‌کند. وزن سیناپسی از نورون j به نورون i برابر است با:

$$J_{ij}(t) = J_0 x_{ij}(t) \qquad (۱)$$

به طوری که $J_0 > 0$ و $x_{ij} \in [0,1]$ متغیر سرکوب است. با در نظر گرفتن یک دینامیک سریع، اسپین‌ها به طور ناهمگام بر اساس نرخ گذار گلابر به روز می‌شود.[۳] با در نظر گرفتن $\partial(i)$ به عنوان مجموعه نورون‌های پیش‌سیناپسی، β به عنوان سطح نویز معکوس و θ به عنوان یک رانش خارجی یکنواخت داریم:

$$w(s_i \to -s_i) = \frac{1}{2}\left[1 - s_i \tanh(\beta h_i(t))\right] \qquad (۲)$$

$$h_i(t) = \sum_{j\in\partial(i)} J_0 x_{ij}(t) s_j(t) + \theta \qquad (۳)$$

اگر دینامیک کند باشد، هنگامی که نورون j حالت خود را تغییر می‌دهد، هر سیناپس خروجی دچار سرکوب می‌شود. این سرکوب را به صورت حاصل ضرب یک ضریب در وضعیت اولیه در نظر می‌گیریم.

$$x_{ij} \to \gamma x_{ij}, \quad 0 < \gamma < 1 \qquad (۴)$$

بین تغییر حالت‌ها، سیناپس‌ها به‌طور نمایی با ثابت زمانی τ_{recovery} ترمیم می‌شوند:

$$\frac{dx_{ij}}{dt} = \frac{1 - x_{ij}}{\tau_{\text{recovery}}} \qquad (۵)$$

کسر تخلیه وزیکول‌ها برای توصیف غیرفعال شدن سیناپس‌ها را $\alpha = 1 - \gamma$ تعریف می‌کنیم. همچنین برای فرض جدایی کامل مقیاس‌های زمانی، $\tau_{\text{recovery}} \gg 1$ (بر حسب یکاهای جاروب مونت‌کارلو) در نظر می‌گیریم. این در حالی است که برای متغیرهای سرکوب ثابت، اسپین‌ها به یک حالت شبه‌تعادلی واداشته می‌شوند.

تابع پارش شرطی

برای $\{x_{ij}\}$ های ثابت، جفت‌شدگی‌ها متقارن هستند و دینامیک گلابر شرط توازن را برآورده می‌کند. بنابراین توزیع مانای اسپین‌ها، توزیع بولتزمن خواهد بود:

$$P(s \mid x) = \frac{1}{Z(x)} e^{-\beta H(s,x)} \qquad (۶)$$

و برای هامیلتونی و تابع پارش خواهیم داشت:

$$H(s,x) = -\sum_{i<j} J_0 x_{ij} s_i s_j - \theta \sum_i s_i \qquad (۷)$$

$$Z(x) = \sum_s \exp\left[\beta \sum_{i<j} J_0 x_{ij} s_i s_j + \beta \sum_i s_i\right] \qquad (۸)$$

تقریب میدان میانگین

متغیرهای سرکوب شده $\{x_{ij}\}$ و اتصال‌پذیری را با یک منبع میانگین همگن x جایگزین می‌کنیم که یک جفت‌شدگی مؤثر همه‌به‌همه $J_{\text{eff}} = J_0 cx$ به‌دست می‌دهد. بنابراین مغناطش در معادله خودسازگاری کوری – وایس صدق می‌کند:[۴]

$$m = \frac{1}{N}\sum_i s_i \Rightarrow m = \tanh\left[\beta(J_0 cxm + \theta)\right] \qquad (۹)$$

انرژی آزاد به ازای هر اسپین با توجه به x برابر است با:

$$f(x) = -\frac{1}{\beta N}\ln Z(x) = \frac{\beta J_0 c}{2} x m^2 - \frac{1}{\beta}\ln\left[2\cosh\left(\beta(J_0 csm + \theta)\right)\right] \qquad (۱۰)$$

حذف بی‌درروی متغیر سرکوب

در حالت مانا، منبع میانگین x با توازن میان تخلیه و بازیابی تعیین می‌شود. آهنگ شلیک میانگین (آهنگ تغییر حالت) یک نورون عبارت است از:

$$r=\frac{1}{2}\left[1-m\tanh(\beta(J_{.}cxm+\theta))\right] \qquad (11)$$

آن‌گاه معادله آهنگی برای x برابر خواهد شد با:

$$x=\frac{1}{1+\alpha\tau_{\text{recovery}}r(m,x)} \qquad (12)$$

معادلات (۹) و (۱۲) یک دستگاه بسته را تشکیل می‌دهند. به ازای هر مغناطش m، معادله (۱۲) را حل می‌کنیم تا مقدار بی‌درروی منبع $x(m)$ به‌دست آید. جای‌گذاری $x(m)$ در معادله (۱۰) پتانسیل ترمودینامیکی مؤثر را نتیجه می‌دهد:

$$\mathcal{F}(m)=N\left[\frac{\beta J_{.}c}{2}x(m)m^{2}-\frac{1}{\beta}\ln\left(2\cosh\left[\beta(J_{.}cx(m)m+\theta\right]\right)\right] \qquad (13)$$

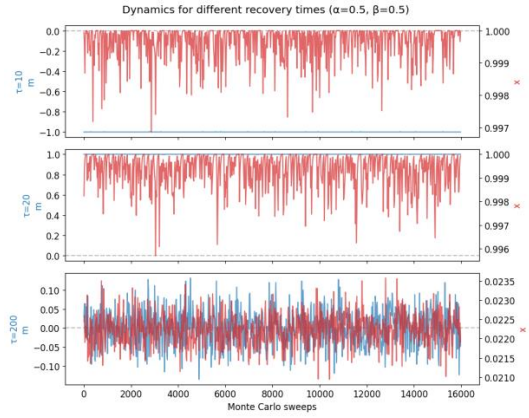
کمینه‌های $\mathcal{F}(m)$ متناظر با فازهای مشاهده‌شده ماکروسکوپی هستند. شکل این چشم‌انداز به پارامترهای بیوفیزیکی α (قدرت تخلیه) و τ_{recovery} (زمان ترمیم) بستگی دارد.

ساختار فاز

اکنون چشم‌انداز انرژی آزاد $\mathcal{F}(m)$ را در حالت متقارن $\theta=0$ تحلیل می‌کنیم. برای سرکوب ضعیف، یعنی شرایطی که حاصل‌ضرب $\alpha\tau_{\text{recovery}}$ کوچک باشد، متغیر نزدیک به ۱ می‌ماند، $x(m)\approx1$. در این صورت جفت‌شدگی مؤثر $\beta J_{.}c$ از مقدار بحرانی لازم برای منظم شدن خودبه‌خودی فراتر می‌رود و $\mathcal{F}(m)$ دو کمینه متقارن در $m=\pm m_{.}$ نشان می‌دهد که فاز فرومغناطیس را تعریف می‌کنند. نقطه ثابت پارامغناطیس در $m=0$ یک بیشینه موضعی است. با افزایش $\alpha\tau_{\text{recovery}}$، تخلیه در حالت فعال قابل‌ملاحظه می‌شود. با افزایش بیشتر قدرت سرکوب، جفت‌شدگی مؤثر به زیر آستانه منظم‌شدن می‌رود و کمینه‌های فرومغناطیس به‌کلی ناپدید می‌شوند و انرژی آزاد تنها یک کمینه در $m=0$ حفظ می‌کند که متناظر با فاز پارامغناطیس است. سناریوی کلی یک گذار نظم – بی‌نظمی بازگشتی ناشی از تخلیه است. مرزهای فاز را می‌توان به‌طور تحلیلی با یافتن نقاطی که در آن‌ها کمینه‌های $\mathcal{F}(m)$ به هم می‌پیوندند یا ناپدید می‌شوند تعیین کرد.

شبیه‌سازی مونت‌کارلو

مدل کامل تصادفی را با $N=500$ نورون، درجه میانگین $c=10$، $J_{.}=1$، $\beta=0/5$، $\alpha=0/5$ و سه زمان بازیابی τ_{recovery} برابر ۱۰ (بازیابی سریع)، ۲۰ (ناحیه هم‌زیستی) و ۲۰۰ (بازیابی کند) شبیه‌سازی می‌کنیم. هر شبیه‌سازی برای 2×10^{4} جاروب پس از کنار گذاشتن ۲۰٪ گذرا اجرا می‌شود.[۵]

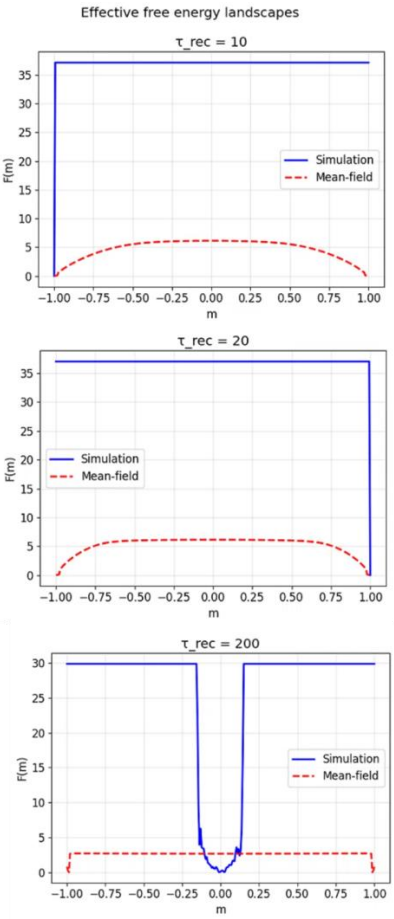


شکل ۱: سری زمانی مغناطش $m(t)$ و منبع میانگین $x(t)$ برای سه مقدار τ_{recovery}. مقادیر ۱۰ و ۲۰ برای τ_{recovery} منبع سیناپسی عملاً در $x=1$ اشباع می‌ماند (مقادیر میانگین $\langle x\rangle$ برابر ۰/۹۹۹۶ و ۰/۹۹۹۳ است)؛ نوسان‌ها در مقیاس 10^{-3} هستند و از بزرگ‌نمایی محور عمودی ناشی می‌شوند.

برای زمان‌های بازیابی سریع $\tau_{\text{recovery}}=10,20$، مغناطش نزدیک به $m=\pm1$ می‌ماند و اساساً واریانس صفر نشان می‌دهد، در حالی که منبع سیناپسی میانگین نزدیک به یک باقی می‌ماند، به طوری که برای $\tau_{\text{recovery}}=10$ میانگین $\langle x\rangle=0/9996$ و برای $\tau_{\text{recovery}}=20$ میانگین $\langle x\rangle=0/9993$ دارد.

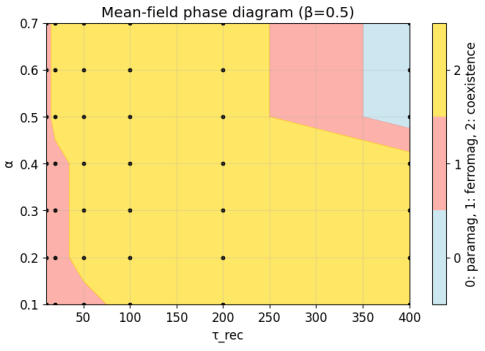
به طور کاملا متضاد برای حالت بازیابی کند $\tau_{\text{recovery}}=200$، مغناطش حول صفر با انحراف معیاری کوچک اما متناهی نوسان می‌کند و منبع میانگین تا تقریباً $x\approx0/02$ کم می‌شود که نشان‌دهنده تخلیه تقریباً کامل سیناپسی است.

شکل ۲ چگالی احتمال متناظر این نتایج را تأیید می‌کنند. برای $\tau_{\text{recovery}}=10,20$، اکسترمم‌ها در $m=\pm1$ نشان داده می‌شود که با کمینه‌های متقارن $\mathcal{F}(m)$ هم‌مکان هستند. برای $\tau_{\text{recovery}}=200$، تنها یک اکسترمم مرکزی منفرد در $m=0$ مشاهده می‌شود.



شکل ۲: چگالی احتمال مغناطش (آبی) همراه با انرژی آزاد میدان میانگین $\mathcal{F}(m)$ (خط‌چین قرمز) برای همان سه مقدار τ_{recovery}

شبیه‌سازی‌ها پیش‌بینی‌های نظری را به‌طور کمی تأیید می‌کنند که محتمل‌ترین مقادیر مغناطش با کمینه‌های تابعی انرژی آزاد استخراج‌شده در سراسر نمودار فاز منطبق هستند.



شکل ۳: نمودار فاز در صفحه $(\alpha, \tau_{\text{recovery}})$ که از تحلیل نقطه ثابت میدان میانگین محاسبه شده است. نواحی رنگی محدوده فرومغناطیس، پارامغناطیس و هم‌زیستی را نشان می‌دهد.

نتیجه‌گیری

نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که انتقال میان افت‌وخیزهای سریع عصبی و سرکوب کند سیناپسی را می‌توان با یک انرژی آزاد تعادلی مؤثر توصیف کرد. این انرژی آزاد مفروض نیست، بلکه از تابع پارش دستگاه اسپینی با حذف بی‌دررووی میدان‌های کند منبع استخراج شده است. به‌لحاظ فیزیکی، فاز فرومغناطیس متناظر با حالت‌های «بالا» پایدار است، در حالی که فاز پارامغناطیس نمایانگر فروپاشی به حالت «پایین» هنگام تخلیه سیناپس‌هاست. ناحیه هم‌زیستی دوپایداری را نشان می‌دهد که شبکه بسته به تاریخچه خود می‌تواند هر یک از دو حالت را حفظ کند.

مورد دیگر این است که یک فاز نوسانی واقعی مشاهده نشد؛ این موضوع علی‌رغم فیدبک منفی ذاتی سرکوب، با تحلیل پایداری مدل‌سازی سازگار است. نقطه ثابت پارامغناطیس در سراسر گستره پارامترهای بررسی‌شده با ویژه مقادیر حقیقی منفی پایدار می‌ماند. البته ممکن است نوسان‌ها با افزودن عناصر دیگری همچون فیدبک مهاری یا مقیاس‌های زمانی چندگانه سرکوب پدیدار شوند.

این روش چندین مسیر برای بررسی تجربی و آزمایشگاهی را ایجاد می‌کند. نخست، فرمول‌بندی انرژی آزاد امکان محاسبه روابط افت‌وخیز پاسخ و نماهای بحرانی در نزدیکی گذار را فراهم می‌کند که می‌تواند با ثبت‌های چندالکترودی اندازه‌گیری شود. دوم، این فرمول‌بندی به‌طور طبیعی به شبکه‌هایی با زیرجمعیت‌های تحریکی و مهاری یا به مدل‌هایی با تعدیل آستروسیتی تعمیم می‌یابد؛ در چنین وضعیت‌هایی میدان کند دینامیک پیچیده‌تری دارد.

مرجع‌ها

[1] Tsodyks, M., & Markram, H. (1997). The neural code between neocortical pyramidal neurons depends on neurotransmitter release probability. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **94**(2), 719-723.
[2] Mongillo, G., Barak, O., & Tsodyks, M. (2008). Synaptic theory of working memory. *Science*, **319**(5869), 1543-1546.
[3] Glauber, R. J. (1963). Time-dependent statistics of the Ising model. *Journal of Mathematical Physics*, **4**(2), 294-307.
[4] Kac, M., & Ward, J. C. (1952). A combinatorial solution of the two-dimensional Ising model. Physical Review, 88(6), 1332.
[5] Bressloff, P. C. (2014). *Stochastic Processes in Cell Biology*. Springer. Chapter 11: Stochastic Neural Networks and Monte Carlo Methods.

تفکیک مدل‌های سالیتون هایمبورگ – جکسون و پتانسیل عمل هاجکین – هاکسلی با استفاده از میکروسکوپی فاز کمّی (QPM)

عابدینی، امیرعلی؛ نوشاد، هوشیار*

دانشکده فیزیک و مهندسی انرژی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی‌تکنیک تهران)، خیابان حافظ، تهران، ایران

چکیده

دو مدل فیزیکی متفاوت پالس عصبی را توصیف می‌کنند؛ مدل مدار الکتریکی هاجکین – هاکسلی (HH) و مدل سالیتون مکانیکی هایمبورگ – جکسون (HJ). در حالی که هر دو ثبت‌های ولتاژ استانداردی دارند، اما اثرات مکانیکی و نوری متضادی را پیش‌بینی می‌کنند. در این‌جا جابجایی فاز نوری را استخراج می‌کنیم که هر مدل در یک آزمایش میکروسکوپی فاز کمّی تولید خواهد کرد. با شروع از پروفایل چگالی سالیتون HJ، از پایستگی جرم و رابطه لورنتس – لورنز برای به‌دست آوردن تغییرات ضخامت غشاء و ضریب شکست استفاده می‌کنیم. سیگنال QPM حاصل یک پالس sech^2 متقارن با دامنه اوج ۰/۰۴ mrad است. برای مدل HH، اثر نوری غالب اثر کِر است که یک شکل موج نامتقارن با یک دُم بلند و دامنه اوج ۶۳ mrad تولید می‌کند. دو معیار سنجش عدم تقارن به صورت نسبت مساحت پس و پیش از قله و چولگی زمانی معرفی شدند.. این اثرات متمایز با فناوری QPM قابل اندازه‌گیری هستند و امکان تفکیک مدل‌های انتشار عصبی فراهم می‌کنند.

واژه های کلیدی: سالیتون هایمبورگ – جکسون، مدل هاجکین – هاکسلی، جابه‌جایی فاز نوری، میکروسکوپی فاز کمّی (QPM)، اثر کِر

Discrimination of Heimburg–Jackson soliton and Hodgkin–Huxley action potential models using Quantitative Phase Microscopy (QPM)

Abedini, Amirali; Noshad, Houshyar*

Department of Physics and Energy Engineering, Amirkabir University of Technology (Tehran Polytechnic), Hafez Avenue, Tehran, Iran

Abstract

Two different physical models describe the nerve pulse: the Hodgkin–Huxley (HH) electrical circuit model and the Heimburg–Jackson (HJ) mechanical soliton model. While both yield standard voltage recordings, they predict contrasting mechanical and optical signatures. Here we derive the optical phase shift that each model would produce in a quantitative phase microscopy experiment. Starting from the HJ soliton density profile, we use mass conservation and the Lorentz–Lorenz relation to obtain the membrane thickness and refractive index changes. The resulting QPM signal is a symmetric sech^2 *pulse with a peak amplitude of* $0.04\,\mathrm{mrad}$*. For the HH model, the dominant optical effect is the Kerr effect, which produces an asymmetric waveform with a long tail and a peak amplitude of* $63\,\mathrm{mrad}$*. Two asymmetry metrics are introduced: the area and the temporal skewness. These distinct signatures are measurable with current QPM technology, providing a test for discriminating between models.*

***Keywords**: Heimburg–Jackson Soliton, Hodgkin–Huxley Model, Optical Phase Shift, QPM, Kerr effect*

PACS No. *5, 42, 87, 89*

مقدمه

ماهیت پالس عصبی همچنان پرسشی بنیادین در مرز میان فیزیک و زیست‌شناسی است؛ مدل کلاسیک هاجکین – هاکسلی (HH) پتانسیل عمل را به‌عنوان پدیده‌ای کاملاً الکتریکی توصیف می‌کند که توسط کانال‌های یونی ولتاژ ایجاد می‌شوند.[۱] از طرفی مدل سالیتونی هایمبورگ–جکسون (HJ) پیشنهاد می‌کند که پالس

عمدتاً یک موج چگالی مکانیکی در غشای لیپیدی است که با یک سیگنال الکتریکی ثانویه همراه می‌شود.[۲] اگرچه هر دو مدل می‌توانند ثبت‌های الکتریکی را توضیح دهند، اما هر کدام دارای اثرات مکانیکی و نوری به‌شدت متفاوتی هستند. اکنون می‌خواهیم جابه‌جایی فاز نوری را استخراج می‌کنیم که هر مدل در یک آزمایش میکروسکوپی فاز کمّی (QPM) تولید خواهد کرد.[۳] در ادامه نشان می‌دهیم که سالیتون HJ یک شکل موج متقارن sech^2 به‌دست می‌دهد، در حالی که پتانسیل عمل HH سیگنالی به‌شدت نامتقارن متناسب با تابع ولتاژ تولید می‌کند. این تفاوت یک پیش‌بینی آزمون‌پذیر فراهم می‌کند.

سالیتون هایمبورگ – جکسون (HJ)

سالیتون یک موج رونده از چگالی جرم سطحی $\rho_A(x,t)$ است در طول غشای آکسون حرکت می‌کند و پروفایل فضایی-زمانی آن به شکل یک تابع هذلولوی مربعی (sech^2) است:

$$\rho_A(x,t) = \rho_A^{\cdot} + \Delta\rho_A^{\max}\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{x-vt}{\Delta}\right) \qquad (۱)$$

که در آن $\rho_A^{\cdot}$ چگالی در حال سکون، v سرعت، و Δ پهنای سالیتون است. پایستگی جرم، تغییر ضخامت غشا را به‌دست می‌دهد:

$$\Delta d(x,t) = -d_{\cdot}\,\frac{\Delta\rho_A(x,t)}{\rho_A^{\cdot}} \qquad (۲)$$

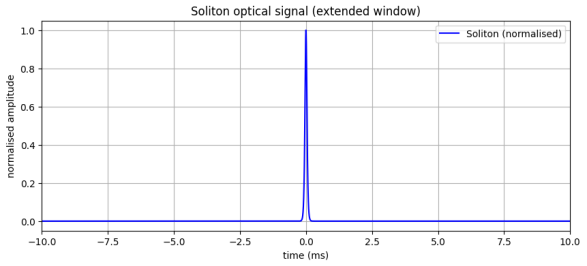
با به‌کارگیری شکل خطی‌شده قانون لورنتس - لورنز که ارتباط بین ضریب شکست و چگالی جرم سطحی را برقرار می‌کند، و با بسط تا مرتبه اول در اطراف مقادیر حالت سکون، تغییر ضریب شکست غشا به صورت تابعی خطی از تغییر چگالی جرم سطحی محاسبه می‌شود: [۴]

$$\Delta n(x,t) = \frac{(n_{\cdot}^2-1)(n_{\cdot}^2+2)}{6n_{\cdot}\rho_A^{\cdot}}\,\Delta\rho_A(x,t) \qquad (۳)$$

در ادامه، برای یک پروب در QPM، جابه‌جایی فاز به‌صورت زیر درمی‌آید:

$$\Delta\phi_{\mathrm{sol}}(t) = -\frac{4\pi d_{\cdot}}{\lambda}\,\frac{n_i-n_o}{\rho_A^{\cdot}}\,\Delta\rho_A^{\max}\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{vt}{\Delta}\right) \qquad (۴)$$

که در آن n_i و n_o ضرایب شکست آکسوپلاسم و محیط، و λ طول موج لیزر است.



شکل ۱: جابه‌جایی فاز بهنجارشده $\Delta\phi_{\mathrm{sol}}(t)$ به‌صورت تابعی از زمان. شکل موج یک پالس sech^2 خالص است که نسبت به قله خود متقارن خواهد بود. پنجره زمانی تا ± 20 ms گسترش یافته و سیگنال پیش از لبه‌های پنجره به صفر واپاشی می‌کند.

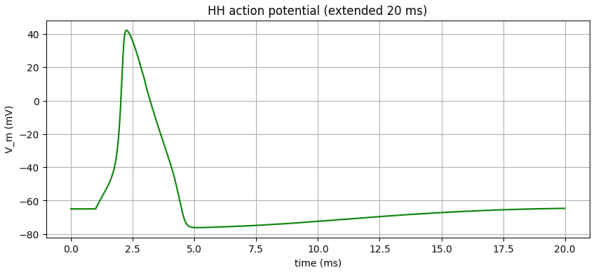
پتانسیل عمل هاجکین – هاکسلی (HH)

ما یک پتانسیل عمل هاجکین–هاکسلی را با پارامترهای $C_m = 1\ \mu\mathrm{F/cm^2}$، $g_{\mathrm{Na}} = 120\ \mathrm{mS/cm^2}$، $g_{\mathrm{K}} = 36\ \mathrm{mS/cm^2}$، $E_{\mathrm{Na}} = 50\ \mathrm{mV}$، $E_{\mathrm{K}} = -77\ \mathrm{mV}$ و $E_{\mathrm{L}} = -54.4\ \mathrm{mV}$ با یک پالس جریان کوتاه $30\ \mu\mathrm{F/cm^2}$ با ۲ ms شبیه‌سازی کردیم. ولتاژ حاصل $V_{\mathrm{m}}(t)$ است. اثر اپتیکی این پالس، به صورت اثر کِر خواهد بود:[۵,۶]

$$\Delta n_{\mathrm{Kerr}} = \frac{1}{2}KE^2, \quad E = \frac{V_{\mathrm{m}}}{d_{\cdot}} \qquad (۵)$$

به طوری که برای دولایه‌های لیپیدی $K \approx 2\times10^{-14}\ \mathrm{m^2/V^2}$ است. جابه‌جایی فاز برابر است با:

$$\Delta\phi_{\mathrm{HH}}(t) = \frac{2\pi K}{\lambda d_{\cdot}}\left(V_{\mathrm{m}}^2(t) - V_{\mathrm{rest}}^2\right) \qquad (۶)$$



شکل ۲: ولتاژ غشا $V_{\mathrm{m}}(t)$ شبیه‌سازی‌شده با استفاده از مدل استاندارد HH با یک پالس جریان کوتاه. اسپایک به اوج $+42\ \mathrm{mV}$ می‌رسد و به‌آرامی بازقطبی می‌شود و شکل نامتقارن دارای یک دُم بلند خواهد بود.

معیارهای عدم تقارن

برای مقایسه شکل‌ها مستقل از دامنه، هر سیگنال را نسبت به بیشینه‌اش بهنجار می‌کنیم و آن‌ها را در $t=0$ هم‌تراز می‌کنیم. همچنین دو معیار سنجش به عناوین نسبت مساحت و چولگی زمانی تعریف می‌کنیم. به ترتیب داریم:

$$R=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}S(t)dt}{\int_{-\infty}^{\cdot}S(t)dt} \qquad (۷)$$

$$\gamma=\frac{\int(t-\mu)^{۳}\,p(t)dt}{\sigma^{۳}},\quad p(t)=S(t)\Big/\int S(t)dt \qquad (۸)$$

یک سیگنال متقارن $R=1$ و $\gamma=0$ را می‌دهد. سیگنال‌های نامتقارن (واپاشی کُند) $R>1$ و $\gamma>0$ را نتیجه می‌دهند.

پارامترهای عددی

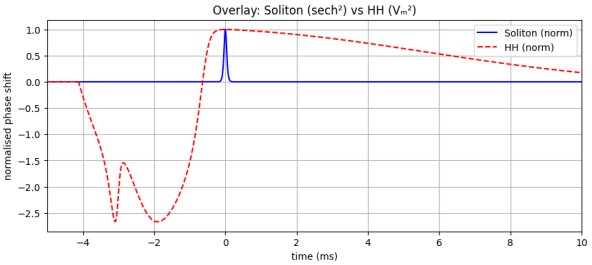
با استفاده از $d_{\cdot}=5\,\text{nm}$، $\rho_{\text{A}}^{\cdot}=4\times10^{-3}\,\text{kg/m}^{۳}$، $\Delta\rho_{\text{A}}^{\max}/\rho_{\text{A}}^{\cdot}=0/2$، $v=200\,\text{m/s}$، $\Delta=1\,\text{cm}$، $\lambda=633\,\text{nm}$، $n_i=1/35$ و $n_o=1/33$ برای مدل سالیتونی به‌دست می‌آوریم:

$$\Delta\phi_{\max}^{\text{sol}}=0/40\ \text{mrad} \qquad (۹)$$

همچنین برای مدل هاجکین ‒ هاکسلی داریم:

$$\Delta\phi_{\max}^{\text{HH}}=62/8\ \text{mrad} \qquad (۱۰)$$

که جابجایی فاز مدل هاجکین ‒ هاکسلی حدود ۱۶۰ برابر بزرگ‌تر است. شکل موج‌ها در شکل ۳ (بهنجارشده) نشان داده شده‌اند.

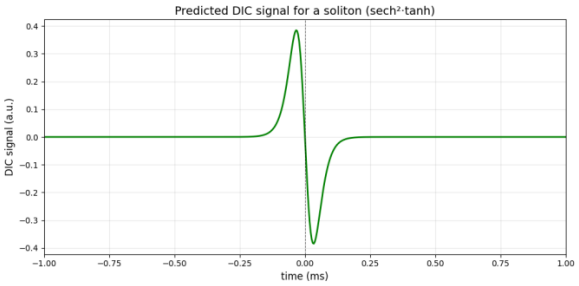


شکل ۳: سیگنال سالیتون (خط توپر آبی) باریک و کاملاً متقارن است. سیگنال HH (خط‌چین قرمز) به‌شدت نامتقارن است و دارای یک خیز سریع تا قله و به دنبال آن یک واپاشی بسیار کند است. خط نقطه‌چین عمودی قله‌های هم‌ترازشده در $t=0$ را نشان می‌دهد. این تفاوت آشکار در تقارن، یک آزمون تجربی روشن برای تفکیک دو مدل فراهم می‌کند.

سیگنال تداخل تفاضلی (DIC)

در میکروسکوپی DIC، سیگنال متناسب با مشتق مکانی فاز است. به این ترتیب برای سالیتون داریم:

$$S_{\text{DIC}}(t)\propto\frac{\partial}{\partial x}\Delta\phi_{\text{sol}}\Big|_{x=0} \propto-\text{sech}^{۲}\left(\frac{vt}{\Delta}\right)\tanh\left(\frac{vt}{\Delta}\right) \qquad (۱۱)$$



شکل ۴: سیگنال DIC پیش‌بینی‌شده برای یک سالیتون (برحسب یکاهای دلخواه)

تحلیل عدم قطعیت

برای ارزیابی اثرات اپتیکی سالیتون در برابر نویز تجربی، نویز سفید گاوسی با انحراف معیار ۰/۱ mrad و یک کف نویز فاز نوعی برای میکروسکوپی فاز کمّی را به شکل موج جابجایی فاز سالیتون محاسبه‌شده افزودیم. هزار حالت نویز مستقل تولید و برای هر حالت چولگی زمانی و نسبت مساحت (مساحت پس از قله تقسیم بر مساحت پیش از قله) بازمحاسبه شد. نتایج به‌صورت میانگین انحراف معیار روی ۱۰۰۰ نمونه خلاصه می‌شوند.

چولگی سالیتون $-0/0001\pm0/0038$ به‌دست آمد. این مقدار به‌لحاظ آماری از صفر تمیزناپذیر است و تأیید می‌کند که حتی در حضور نویز فاز واقع‌گرایانه، شکل موج به‌طور میانگین کاملاً متقارن باقی می‌ماند. انحراف معیار بسیار کوچک (۰/۰۰۳۸) نشان می‌دهد که چولگی بسیار پایدار است و چند میانگین‌گیری می‌توان به‌طور مطمئنی نتیجه گرفت که سیگنال متقارن است. از طرفی،

نسبت مساحت میانگین ۱/۰۲۳۰ با انحراف معیار ۰/۵۰۲۵ بدست آمد. میانگین بسیار نزدیک به واحد (مقدار ایده‌آل برای یک پالس متقارن) است. پراکندگی نسبتاً زیاد از آنجا ناشی می‌شود که نویز افزوده در دُم‌های شکل موج sech^2 با دامنه سیگنال قابل‌مقایسه است. در آزمایش عملی، می‌توان روی داده‌های متعدد (معمولاً ۱۰۰ تا ۱۰۰۰) میانگین گرفت تا نسبت سیگنال به نویز بهبود یابد. میانگین‌گیری نویز مؤثر با فاکتور $1/\sqrt{N}$ کاهش می‌یابد؛ برای $N=100$ محاسبه، انحراف معیار نسبت مساحت تا ۰/۰۵ ≈ کاهش خواهد یافت. چنین عدم قطعیت کوچکی امکان تفکیک از سیگنال HH را فراهم می‌کند.

نتیجه گیری

استخراج‌های تحلیلی ما نشان می‌دهند که سالیتون HJ و پتانسیل عمل HH جابجایی‌های فاز نوری به‌لحاظ کیفی متفاوتی تولید می‌کنند. مدل سالیتونی یک جابجایی متقارن در برابر مدل هاجکین – هاکسلی که کاملا نامتقارن است. این تفاوت از آنجا ناشی می‌شود که پاسخ نوری سالیتون مستقیماً به پالس چگالی متقارن (sech^2) گره خورده است، در حالی که پاسخ HH از V_m^2 پیروی می‌کند و فاز بازقطبی‌شدن یک پتانسیل عمل بسیار کُندتر از دپلاریزاسیون است.

یک پرسش موجه آن است که آیا مدل HH نیز ممکن است از طریق الکترواستریکشن یک سهم مکانیکی تولید کند؟ برآورد کمّی ما نشان می‌دهد که این اثر حداقل دو مرتبه بزرگی کوچک‌تر از پاسخ غالب کِر است و به‌طور اساسی، هیچ عدم تقارن اضافی به شکل موج وارد نمی‌کند. علاوه بر این، ما تقریب خطی‌شده لورنتس – لورنز را در برابر رابطه دقیق کلازیوس – موسوتی بررسی کرده‌ایم. ناهمخوانی برای بیشینه تغییر چگالی در نظر گرفته‌شده کمتر از ۵٪ است، که تحلیل ما را تأیید می‌کند.

از دیدگاه تجربی، یک اندازه‌گیری میکروسکوپی فاز کمّی (QPM) روی یک آکسون ایزوله، برای نمونه، آکسون بزرگ Loligo pealeii یا یک نورون کشت‌شده، با یک چیدمان استاندارد تداخل‌سنجی مبتنی بر لیزر کاملاً امکان‌پذیر است. آزمایش می‌تواند با تحریک الکتریکی خارج‌سلولی یا داخل‌سلولی برای راه‌اندازی پتانسیل عمل هم‌زمان شود و اثر تغییرات فاز می‌تواند روی تکرارهای متعدد میانگین‌گیری شود تا نسبت سیگنال به نویز بهبود یابد.

مرجع‌ها

[1] Hodgkin, A. L., & Huxley, A. F. (1952). A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve. *The Journal of Physiology*, **117**(4), 500-544.
[2] Heimburg, T., & Jackson, A. D. (2005). On soliton propagation in biomembranes and nerves. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **102**(28), 9790-9795.
[3] Popescu, G. (2011). *Quantitative Phase Imaging of Cells and Tissues*. McGraw-Hill. Chapter 7: Principles of Full-Field QPI.
[4] Lorentz, H. A. (1880). Über die Beziehung zwischen der Fortpflanzungsgeschwindigkeit des Lichtes und der Körperdichte. *Annalen der Physik*, **245**(4), 641-665.
[5] Weinreb, A. (1979). Kerr effect in lipid bilayers. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Biomembranes*, **558**(3), 289-297.
[6] O'Konski, C. T. (1981). Theory of the Kerr Constant. In: Krause, S. (eds) *Molecular Electro-Optics*. NATO Advanced Study Institutes Series, vol 64. Springer, Boston, MA.

اعتبار بسط مرتبه چهارم در مدل سازی ترانسمون و تأثیر آن بر ناهماهنگی و همدوسی کوانتومی

زمانی، نازنین ؛ راست خدیو، محمّد امین

مرکز آموزش عالی استهبان-دانشگاه شیراز، استهبان، ایران

چکیده

در این مقاله، میزان اعتبار تقریب درجه چهارم در مدل‌سازی کیوبیت ترانسمون بررسی می‌شود. ابتدا برای استخراج طیف انرژی، هامیلتونیِ مدل کامل کسینوسی ترانسمون در پایه تعداد زوج‌های کوپر (پایهٔ بار) به‌صورت عددی قطری‌سازی می‌شود. سپس، نحوه‌ی تغییرات فرکانس گذار بین دو تراز پایین انرژی (فرکانس‌های اصلی کیوبیت)، میزان ناهماهنگی و خطای نسبی این تقریب به ازای بازهٔ وسیعی از نسبت انرژی جوزفسون به انرژی خازنی محاسبه می‌شود. مشاهدات ما نشان می‌دهد که تقریب درجه چهارم در نسبت‌های بزرگ انرژی برای پیش‌بینی ساختار طیفی ترانسمون عملکرد بهتری دارد و در این رژیم، فرکانس‌های گذار و ناهماهنگی را با دقت مطلوبی توصیف می‌کند. همچنین، با افزایش این نسبت، افت حساسیت سیستم به نویز بار مشاهده می‌شود که بهبود همدوسی کیوبیت را در پی دارد. در نهایت نشان داده می‌شود که مدل مبتنی بر تقریب درجه چهارم، مشروط بر قرارگیری سیستم در رژیم ترانسمون، می‌تواند جایگزینی مناسبی برای حل عددیِ هامیلتون این دسته از مدارهای کوانتومی به شمار آید.

واژه های کلیدی: *ترانسمون، تقریب درجه چهارم، ناهماهنگی کوانتومی، همدوسی،*

Validity of the Quartic Expansion in Transmon Modeling and Its Impact on Anharmonicity and Quantum Coherence

Zamani, Nazanin ; Rastkhadiv, Mohammad Amin

Estahban Higher Education Center-Shiraz University, Estahban, Iran

Abstract

In this paper, we investigate the validity of the quartic approximation in modeling a transmon qubit. First, to obtain the energy spectrum, the full cosine Hamiltonian of the transmon model is numerically diagonalized in the Cooper-pair number basis (charge basis). Then, the dependence of the transition frequency between the two lowest energy levels (the qubit frequencies), the anharmonicity, and the relative error of this approximation are calculated over a wide range of the ratio between the Josephson energy and the charging energy. Our results show that the quartic approximation performs better in predicting the spectral structure of the transmon in the large-energy-ratio regime, where it accurately describes both the transition frequencies and the anharmonicity. Furthermore, as this ratio increases, a reduction in the system's sensitivity to charge noise is observed, leading to improved qubit coherence. Finally, it is demonstrated that the quartic approximation model, provided that the system operates in the transmon regime, can serve as a suitable alternative to the numerical solution of the full Hamiltonian for the analysis and design of this class of quantum circuits.

***Keywords**: Transmon, Quartic approximation, Anharmonicity, Quantum Coherence*

مقدمه

کیوبیت، کوچک‌ترین واحد پردازش اطلاعات در رایانه‌های کوانتومی است. بر خلاف بیت کلاسیکی، می‌تواند در برهم‌نهی دو حالت منطقی قرار گیرد. در میان روش‌های مختلف ساخت کیوبیت، کیوبیت‌های ابررسانا جایگاه مهمی دارند؛ زیرا کنترل و اندازه‌گیری آن‌ها نسبتاً راحت است. یکی از کیوبیت‌های معروف، کیوبیت ترانسمون است، که به منظور کاهش حساسیت به نویز بار طراحی شده است[1].

سیستم مورد بررسی ما ترانسمونی متشکل از یک پیوند جوزفسون با انرژی E_J (انرژی جفت‌شدگی مرتبط با تونل‌زنی بدون اتلاف جفت‌های کوپر از میان سد پیوند است) و یک خازن بزرگ موازی با انرژی شارژ E_C است. افزودن این خازن، حساسیت سطوح انرژی نسبت به نوسانات بار الکتریکی محیط را به شدت کاهش داده و

کیوبیت را در برابر نویز بار محافظت می‌کند. در این مقاله منظور از واژه‌ی نسبت، $\frac{E_J}{E_C}$ است. هنگامی که این نسبت در ناحیه‌ی $\frac{E_J}{E_C} \gg 1$ قرار بگیرد، وابستگی انرژی ترازها به بار زمینه به‌شدت کاهش می‌یابد. در نتیجه اثر نویز بار بر سامانه تضعیف می‌شود. این ویژگی، ترانسمون را به گزینه‌ای مناسب برای دستیابی به زمان‌های همدوسی طولانی‌تر تبدیل می‌کند[2]. توصیف دقیق این سامانه از طریق همیلتونی رابطهٔ (۱) که شامل جملهٔ کسینوسی است انجام می‌شود امّا حل مستقیم آن به‌صورت تحلیلی به‌آسانی ممکن نیست. دلیل این امر آن است که برای به‌دست آوردن طیف انرژی، باید هامیلتونی در فضایی با تعداد زیادی از حالت‌های پایه‌ی بار بررسی و به‌صورت عددی قطری‌سازی شود [1]. این روش، با وجود دقت بالا، برای انجام تحلیل‌های سریع و طراحی اولیه‌ی کیوبیت کارآمد نیست. از این رو، استفاده از روش‌های تقریبی اهمیت پیدا می‌کند. چنانچه جملهٔ کسینوسی را تا جمله‌ی درجه چهار بسط دهیم، امکان استخراج روابط تحلیلی برای انرژی ترازها، فرکانس گذار(f_{ij}) و ناهماهنگی (α) با تقریب مطلوبی حاصل می‌شود امّا این تقریب محدودیت هایی دارد. افزایش نسبت $\frac{E_J}{E_C}$ اگرچه حساسیت سامانه به نویز بار را کاهش می‌دهد، اما هم‌زمان موجب کاهش ناهماهنگی نیز می‌شود[3]. کاهش ناهماهنگی به این معناست که فاصله‌ی انرژی میان ترازهای متوالی به یکدیگر نزدیک‌تر می‌شود و سامانه به‌تدریج رفتاری نزدیک‌تر به یک نوسانگر هماهنگ پیدا می‌کند. در چنین شرایطی، احتمال نشت جمعیت به ترازهای ناخواسته در حین اعمال گیت‌های مایکروویو افزایش می‌یابد[4]. بنابراین، این پرسش مطرح می‌شود که تقریب درجه‌ی چهارم در چه بازه‌ای از نسبت، همچنان می‌تواند توصیفی قابل اعتماد از سامانه ارائه دهد.

در این مقاله، برای پاسخ به این پرسش، همیلتونی کامل کسینوسی ترانسمون در پایه‌ی بار به‌صورت عددی قطری‌سازی می‌شود تا طیف انرژی دقیق سامانه به‌دست بیاید. سپس نتایج حاصل با پیش‌بینی‌های مدل مبتنی بر تقریب درجه‌ی چهارم مقایسه می‌شوند. همچنین دقت این تقریب در محاسبه‌ی فرکانس گذار پایه، ناهماهنگی و نیز تغییرات خطای آن‌ها با افزایش نسبت بررسی می‌شوند. نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که تا چه حد می‌توان در طراحی و تحلیل کیوبیت ترانسمون به روابط تحلیلی این تقریب تکیه کرد و از چه ناحیه‌ای به بعد استفاده از محاسبات دقیق عددی ضرورت می‌یابد.

مبانی نظری

همیلتونی ترانسمون بر حسب عملگر تعداد زوج های کوپر $(\hat{n})$ و عملگر فاز $(\hat{\varphi})$ به صورت

$$H = 4E_C(\hat{n} - n_g)^2 - E_J cos(\hat{\varphi}). \quad (۱)$$

نوشته می‌شود که در آن n_g بار افست است [1]. رابطه‌ی جابه‌جایی این دو عملگر به‌صورت $[\hat{\varphi}.\hat{n}] = i$ می‌باشد.

برای عملکرد بهتر ترانسمون لازم است نسبت $\frac{E_J}{E_C}$ در بازه‌ی مقادیر بزرگ در نظر گرفته شود. در این شرایط، حساسیت تراز های انرژی نسبت به بار پس‌زمینه‌ی n_g به طور چشمگیری کاهش می‌یابد. به همین دلیل می‌توان با تقریب خوبی $n_g = 0$ فرض کرد. برای حل عددی، همیلتونی در پایهٔ بار به یک فضای محدود برش داده می‌شود و سپس ماتریس متناظر به‌صورت عددی قطری‌سازی می‌شود. از آنجا که مقادیر عدد کوانتومیِ بار گسسته هستند، کسینوس در پایه بار نقش مشابه عملگر انتقال را ایفا می‌کند [5]، که به‌صورت

$$cos(\hat{\varphi}) = \frac{1}{2}\sum_n |n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|. \quad (۲)$$

نوشته می‌شود. $|n\rangle$ نشان‌دهندهٔ حالتِ بار متناظر با n زوج کوپر است. با جایگذاری رابطه‌ی (۲) در هامیلتونی، درایه‌های ماتریس آن در پایه‌ی بار به صورت

$$H_{n.n'} = 4E_C(n - n_g)^2\delta_{n.n'} - \frac{E_J}{2}(\delta_{n.n'+1} + \delta_{n.n'-1}) \quad (۳)$$

به‌دست می‌آیند. در این رابطه، $\delta_{n.n'}$ دلتای کرونکر است. در محاسبات عددی این قسمت، از آنجا که فضای هیلبرت سامانه نامتناهی است لذا برای قطری‌سازی عددی باید آن را تا بازه‌ی محدودی از مقادیر n بُرش دهیم. از سوی دیگر، هنگامی که $E_J \gg E_C$ باشد، الکترون به‌شدّت در ته چاه پتانسیل مقیّد می‌شود و نوسانات فاز بسیار کوچک می‌شوند. این ویژگی اجازه می‌دهد که پتانسیل کسینوسی پیوند جوزفسون را حول نقطه‌ی $\hat{\varphi} = 0$ بسط دهیم،

$$-E_J\cos(\hat{\varphi}) \approx -E_J + \frac{E_J}{2}\hat{\varphi}^2 - \frac{E_J}{24}\hat{\varphi}^4 . \quad (٤)$$

اگر فقط تا جمله‌ی $\hat{\varphi}^2$ در نظر گرفته شود، سیستم به یک نوسانگر هارمونیک ساده با فرکانس پلاسما $w_p = \sqrt{8E_J E_C}$ تقلیل می‌یابد. فرکانس پلاسما همان فرکانس تقریب هارمونیک جفت‌های کوپر

است. ناهمانگی از جملهٔ غیرخطی $\hat{\varphi}^4$ به‌عنوان تصحیح اختلالی نسبت به نوسانگر هارمونیک ناشی می‌شود.

با استفاده از نظریه ی اختلال مستقل از زمان، رابطه‌ی انرژی برای تراز mام در تقریب مرتبه چهارم به صورت

$$E_m \approx -E_J + w_p\left(m+\frac{1}{2}\right) - \frac{E_C}{12}(6m^2+6m+3). \quad (۵)$$

به‌دست می‌آید. در این رابطه m اندیس تراز انرژی نوسانگر است. در کاربردهای پردازش اطلاعات کوانتومی، دو تراز پایین انرژی *(m=0,1)* به‌عنوان فضای محاسباتی در نظر گرفته می‌شود. فرکانس‌های گذار بین تراز های i و j از رابطه‌ی

$$f_{ij} = \frac{E_j - E_i}{h}. \quad (۶)$$

محا سبه می شوند، که در آن h ثابت پلانک ا ست. برای جدا سازی ترازهای محاسباتی از ترازهای بالاتر و کنترل نشست جمعیت در هنگام اعمال پالس های مایکروویو، پارامتری به نام ناهماهنگی تعریف می شود که به صورت $\alpha = f_{12} - f_{01}$ ا ست. با جایگذاری انرژی‌های حاصل از تقریب مرتبه‌ی چهارم در رابطه‌ی ناهماهنگی، به تقریب تحلیلیِ شناخته شده‌ی $\alpha \approx -E_C$ د ست می‌یابیم. برای ساده سازی $h = 1$ در نظر گرفته می شود. همچنین تمامی مقادیر فرکانس و انرژی بر حسب گیگاهرتز گزارش می‌شوند.

روش

در کار پی شرو، شبیه سازی عددی محا سبات تقریب مرتبه چهارم کیوبیت‌های ترانسمون، در محیط پایتون انجام شده‌است. روند کار به این صورت ا ست که ابتدا مسئله با قطری سازی ماتریس در پایه بار حل می‌شود و سپس نتایج با روابط تحلیلی حاصل ازتقریب مرتبه چهارم مقایسه می‌گردند.

برای به‌دست آوردن ویژه مقادیر، همیلتونی در پایهٔ بار نمایش داده می‌شود و سپس ماتریس حاصل به‌صورت عددی قطری‌سازی می‌گردد. جمله‌ی اول همیلتونی علاوه بر قطری بودن، بیانگر انرژی خازنی نیز است. امّا حضور عملگر $\cos(\hat{\varphi})$ موجب جفت شدگی بین ترازها می‌شود. با در نظر گرفتن این نکته، درایه‌های ماتریس هامیلتونی در پایه‌ی $|n\rangle$ به فرم $\langle n \mid H \mid n\rangle = 4E_C n^2$ و $\langle n \mid H \mid n \mp 1\rangle = -\frac{E_J}{2}$ به‌دست می‌آیند.

از آنجا که پایهٔ بار شامل بی‌نهایت حالت است، ماتریس هامیلتونی در این پایه بُعد نامتناهی خواهد داشت. بنابراین برای انجام محاسبات عددی، فضای هیلبرت را به یک زیرفضای متناهی $n \in [-n_{cut}\,.\,n_{cut}]$ محدود می‌کنیم. با انتخاب $n_{cut} = 80$ به یک ماتریس هرمیتی با ابعاد 161×161 می‌رسیم. این فضای برش خورده به اندازه‌ای بزرگ انتخاب شده است که انرژی ترازهای پایینِ مورد نیاز در کیوبیت همگرا شده و اثر خطای ناشی از برش فضا ناچیز باشد. پس از به‌دست آوردن ترازهای انرژی، فرکانس های‌گذار (رابطه (٦)) و ناهماهنگی محاسبه می‌شوند.

برای مطالعهٔ تابع موج در کیوبیت، بهتر است ویژه‌بردارهای همیلتونی در نمایش فاز نوشته شوند لذا ویژه‌بردارهای همیلتونی در پایه‌ی بار را با یک تبدیل فوریه‌ی گسسته به تابع $\psi_m(\varphi)$ روی بازه‌ی $[-\pi\,.+\pi]$ تبدیل می‌کنیم

$$\psi_m(\varphi) = \sum_{n=-n_{cut}}^{n_{cut}} \frac{1}{\sqrt{N}} c_n^m e^{in\varphi}\,. \quad (۷)$$

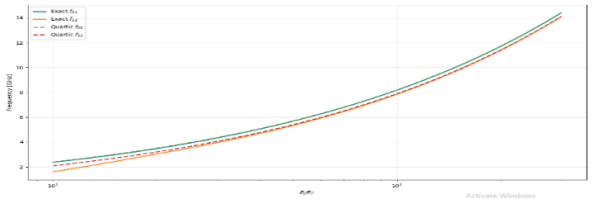
در این رابطه، c_n ویژه بردار در پایه‌ی بار و N تعداد حالت‌های در نظر گرفته شده در پایهٔ بار است و ضریب $\frac{1}{\sqrt{N}}$ نرمال‌سازی تبدیل فوریهٔ گسسته را تضمین می‌کند. برای بررسی تقریب مرتبه چهارم، مقدار E_C ثابت و برابر $0.3\ GHz$ در نظر گرفته می‌شود. همچنین نسبت $\frac{E_J}{E_C}$ در بازه‌ی $[10\,,\,300]$ تغییر داده می‌شود تا رفتار سامانه بر حسب این نسبت به‌دست آید. در هر یک از این نقاط، مقادیر حاصل از حل عددی دقیق هامیلتونی با نتایج به‌دست‌آمده از رابطهٔ تحلیلی مرتبهٔ چهارم برای ترازهای انرژی E_m مقایسه می‌شوند. سپس درصد خطای نسبی مطابق رابطهٔ

$$Error = \left|\frac{f_{exa} - f_{app}}{f_{exa}}\right| \times 100. \quad (۸)$$

به‌دست می‌آید که به این ترتیب می‌توان دقّت تقریب مرتبهٔ چهارم در بازه‌های مختلف نسبت $\frac{E_J}{E_C}$ را ارزیابی کرد. در این رابطه، f_{exa} فرکانس به‌دست‌آمده از حل عددی همیلتونی با جملهٔ کسینوسی و f_{app} فرکانس حاصل از تقریب مرتبه‌ی چهارم است. در اینجا منظور از حل دقیق، حل همیلتونی با در نظر گرفتن جملهٔ کسینوسی است درحالی که مسلماً در محاسبهٔ جمله کسینوسی نیز تقریب به‌کار می‌رود.

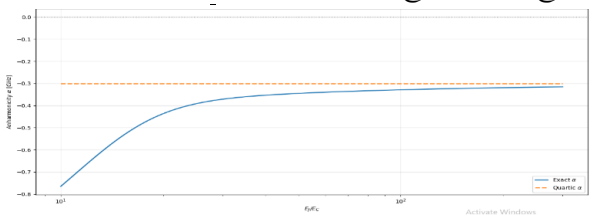
نتایج

مقایسهٔ میان حل دقیق ماتریسی و مدل تقریبی مرتبه چهارم، دیدگاه روشنی از کارآمدی این تقریب در بازه‌های مختلف انرژی ارائه می‌دهد.



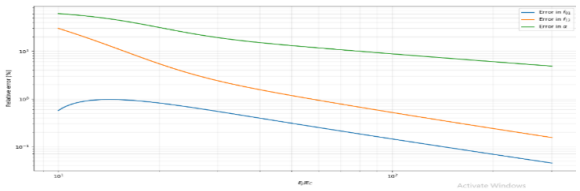
شکل۱ : مقایسه فرکانس‌های گذار در حل دقیق کسینوسی و تقریب مرتبهٔ چهارم برحسب نسبت انرژی‌ها

در شکل۱ خطوط ممتد آبی و نارنجی فرکانس‌های دقیق و خط‌چین سبز و قرمز مقادیر تقریبی هستند. با افزایش نسبت، نتایج تقریبی به نتایج دقیق همگرا می‌شوند.



شکل۲ : رفتار ناهماهنگی سیستم در مدل دقیق و تقریبی بر حسب نسبت انرژی‌ها

در شکل۲ خط‌چین نارنجی مقدار پیش‌بینی‌شده با تقریب درجه چهارم و خط آبی حل دقیق است. براساس تقریب مرتبه چهارم، ناهماهنگی تقریباً ثابت و برابر با $\alpha \approx -0.3\ GHz$ به‌دست می‌آید و عملاً به نسبت $\frac{E_J}{E_C}$ وابسته نیست. با این حال، حل دقیق ماتریسی نشان می‌دهد در نسبت‌های کوچک‌تر برای نمونه در $\frac{E_J}{E_C} = 10$ خطای این تقریب به‌طور قابل ملاحظه‌ای زیاد است امّا در نسبت‌های بزرگ، این خطا کاهش می‌یابد و به صفر میل می‌کند. کاهش خطا در مقادیر بزرگ نسبت $\frac{E_J}{E_C}$، به متمرکز شدن تابع موج پیرامون کمینه‌ی پتانسیل $\varphi \approx 0$ مربوط است که در این حالت، نوسانات فاز کاهش می‌یابد.



شکل۳ : درصد خطای نسبی تقریب مرتبه چهارم برای پارامترهای مختلف بر حسب نسبت انرژی‌ها

در شکل۳ خطوط سبز، نارنجی و آبی به ترتیب خطای ناهماهنگی، f_{12} و f_{01} را نشان می‌دهند. به‌جز یک برآمدگی کوچک در خطای f_{01}، روند کلی خطاها با افزایش نسبت $\frac{E_J}{E_C}$، کاهشی است. در تحلیل خطای نسبی، برای فرکانس گذار پایه رفتاری غیر یکنواخت مشاهده می‌شود. برخلاف خطای ناهماهنگی و فرکانس f_{12} ، خطای نسبی f_{01} در ابتدا روندی صعودی دارد, سپس روند کاهشی پیدا می‌کند. این بیشینه به حساسیت بالای تقریب درجه چهارم در ناحیه‌ی گذار از رژیم جفت کوپر به ترنسمون مربوط می‌شود.

نتیجه‌گیری

نتایج ما نشان می‌دهند که اتکا بر تقریب $\alpha \approx -E_C$ برای همه‌ی بازه‌های $\frac{E_J}{E_C}$ قابل اطمینان نیست. به‌طوری که در محدوده‌ی نزدیک به $\frac{E_J}{E_C} \sim 10$، استفاده از تقریب مرتبه چهارم خطای بزرگی دارد و در نسبت‌های بزرگ($\frac{E_J}{E_C} \approx 300$) به مقدار قابل قبولی کاهش می‌یابد. علاوه براین، وجود یک بیشینه در خطای فرکانس گذار پایه پیش از ورود به روند کاهشی، اهمیت استفاده از حل عددی دقیق یا لحاظ کردن مراتب بالاتر بسط پتانسیل، به ویژه در نواحی ابتدایی و میانی را نشان می‌دهد.

مرجع‌ها

[1] J. Koch et al.; “Charge-insensitive qubit design derived from the Cooper pair box”; *Phys. Rev. A* **76**, No. 4 (2007)1-16.
[2] S. M. Girvin; “*Superconducting qubits and circuits: Artificial atoms coupled to microwave photons*”; Oxford Univ. Press. (2014).
[3] P. Krantz et al.; “A quantum engineer’s guide to superconducting qubits”; *Appl. Phys. Rev*. **6**, No. 2 (2019) 695-706.
[4] A. Blais et al.; “Circuit quantum electrodynamics”; *Rev. Mod. Phys*. **93**, No. 2 (2021) 59-68.
[5] M. H. Devoret and R. J. Schoelkopf; “Superconducting Circuits for Quantum Information: An Outlook”; *Science* **339**, No. 6124 (2013) 1169-1174.

بررسی تحلیلی رسانش الکترونی یک زنجیره اتمی متصل شده به دو هادی از دو جایگاه اختیاری

اکبری چالشتری، تقی؛ مردانی، محمد؛ ربانی، حسن و خلف علی علی، خلدون

گروه فیزیک دانشگاه شهرکرد، بلوار رهبر، شهرکرد

چکیده

در این مقاله با بهره‌گیری از رویکرد تنگابست و با استفاده از روش تابع گرین به محاسبه تحلیلی ضریب عبور الکترون بین دو اتم دلخواه در یک زنجیره اتمی پرداخته و آن را به صورت تابعی از کمیت‌های تنگابست و انرژی الکترون به دست آورده‌ایم. ارائه الگوریتم تحلیلی، سرعت بیشتر در محاسبات عددی را حتی برای سامانه‌های بلند و طولانی میسر می‌کند.

واژه های کلیدی: *ضریب عبور الکترونی، روش تابع گرین، روش تحلیلی، رهیافت تنگابست*

Analytical study of the electronic conductance of an atomic chain connected to two leads via two arbitrary sites

Akbari Chaleshtori, Taghi; Mardaani, Mohammad, Rabani, Hassan and Khaldoon Khalaf Ali Ali
Department of Physics, University of Shahrekord, Rahbar Blv, Shahrekord,

Abstract

In this paper, we calculate analytically the electron transmission coefficient between two arbitrary atoms in an atomic chain within the tight-binding approach and by using the Green's function method. It is obtained as a function of the tight-binding quantities and the electron energy. The analytic algorithm provides the thigh speed of numerical calculation even for long systems.
***Keywords**: Green's function, transmission coefficient, tight binding, analytical formula.*

PACS No.

مقدمه

با گسترش کاربردهای مواد نانو ساختار و تأثیر واضح و انکار ناپذیر این مواد در عرصه‌های مختلف زندگی، اهمیت مطالعه و ساخت این مواد بر کسی پوشیده نیست. به دلیل اندازه کم در این سامانه‌ها، اندازه‌گیری برخی از کمیت‌ها و ویژگی‌های فیزیکی نیاز به ابزاری با دقت بالا دارند، از این‌رو پیشرفت‌های زیادی در زمینه ساخت ابزار آزمایشگاهی برای مطالعه این مواد حاصل شده است. همچنین روش‌های نوین نظری جهت مطالعه و ساخت این مواد توسط دانشمندان ابداع می‌شوند [۱و۲]. رسانش الکترون در نانوساختارها موضوع مهمی است که همواره در فیزیک ماده چگال مورد توجه بوده است [۶-۳]. فن تابع گرین، ماتریس انتقال و روش بولتزمن از جمله ابزار محاسباتی برای اندازه‌گیری ضریب عبور الکترون از یک سامانه هستند، که به محاسبه رسانش الکترونی سامانه منجر می‌شود [۷]. در این مقاله روش تحلیلی جدیدی برای محاسبه ضریب عبور الکترونی بین دو اتم دلخواه در یک زنجیره اتمی یک بعدی با کمک وارون‌کردن ماتریس سه قطری هامیلتونی که در تقریب تنگابست ظاهر می‌شود، ارائه کرده‌ایم. در این راستا، ضریب عبور الکترون را به صورت تحلیلی به عنوان تابعی از کمیت‌های تنگابست و انرژی الکترون به دست می‌آوریم. نتایج نشان می‌دهد که روش تابع گرین در محاسبه ضریب عبور الکترون سامانه‌های نانومقیاس با دو روش عددی و تحلیلی به طور کامل با یکدیگر و سایر روش‌ها سازگار است. در فرآیند حل این مسئله یک بعدی در تقریب نزدیکترین همسایه، با یک ماتریس سه قطری مواجه می‌شویم که باید وارون شود. برای

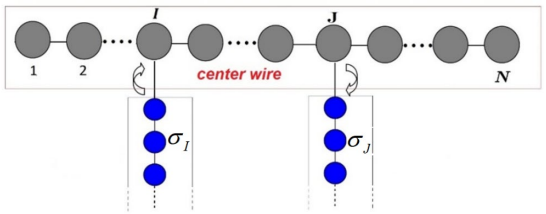
این منظور در بخش بعد چارچوب نظری برای محاسبه‌ی ضریب عبور الکترونی از یک نانو ساختار به روش تحلیلی ارائه‌ی می‌شود.

فرمولبندی

ضریب عبور و چگالی حالت‌های سامانه با استفاده از عناصر ماتریس تابع گرین محاسبه می‌شوند و هدف اصلی این بخش محاسبه این عناصر است. به کمک تقریب تنگابست در تقریب نزدیک‌ترین همسایه و با صرف‌نظر از اثر همسایه‌های دورتر، برای وارون تابع گرین زنجیره‌ی اتمی ساده یک ماتریس سه قطری به دست می‌آید. مطابق شکل ۱، یک زنجیره اتمی دارای N اتم یکسان با انرژی جایگاهی ε_0 و انرژی پرش بین جایگاهی β_W را در نظر می‌گیریم. هدف ما محاسبه ضریب عبور الکترونی بین اتم‌های I ام و J ام به روش تحلیلی است. ابتدا تابع گرین سامانه به صورت زیر معرفی می‌شود [۱]

$$G_W^{-1} = (\varepsilon - \beta_W \sigma_I(\varepsilon)\delta_I - \beta_W \sigma_J(\varepsilon)\delta_J) I_N - H_W , \qquad (۱)$$

که در آن $\sigma_{I(J)}$ خود انرژی هادی متصل به اتم $I(J)$ ام، ε انرژی الکترون ورودی و H_W هامیلتونی زنجیره‌ی اتمی است. در اینجا I_N ماتریس یکه از مرتبه N و $\delta_{I(J)}$ تابع کرونکری است که فقط در عنصر قطری $I(J)$ام مقدار یک دارد.



شکل۱ : هادی‌ها به دو اتم اختیاری واقع در جایگاه‌های I ام و J ام یک زنجیره‌ی اتمی متناهی متصل شده‌اند و رسانش بین این دو اتم اختیاری صورت می‌پذیرد.

با در نظر گرفتن اثر نزدیک‌ترین همسایه‌ها در تقریب تنگابست، H_W چنین نوشته می‌شود [۸]

$$H_W = \varepsilon_0 \sum_{n=1}^{N} |n\rangle\langle n| + \beta_W \sum_{n=1}^{N-1} (|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|), \qquad (۲)$$

که در آن N تعداد اتم‌ها در زنجیره است. همچنین خودانرژی هادی $I(J)$ ام، از رابطه زیر قابل محاسبه است [۹]

$$\sigma_{I(J)}(\varepsilon) = \frac{\beta_{WI(J)}^2}{\beta_W \beta_{I(J)}} \exp(-i\,\theta_{I(J)}(\varepsilon)), \qquad (۳)$$

که در آن $\beta_{I(J)}$ انرژی پرش بین اتم‌های هادی متصل به جایگاه $I(J)$ ام و $\beta_{WI(J)}$ انرژی پرش بین اتم $I(J)$ ام و هادی متناظر آن است. کمیت $\theta_{I(J)}$ نیز با عبارت زیر به‌دست می‌آید

$$\theta_{I(J)}(\varepsilon) = \cos^{-1}\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_{I(J)}}{2\beta_{I(J)}}\right). \qquad (۴)$$

برای محاسبه ضریب عبور بین اتم‌های I و J به روش تحلیلی به عناصر ماتریس تابع گرین سامانه نیاز داریم و ضریب عبور از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۷و۱۰]

$$T_{IJ}(\varepsilon) = 4\,\mathrm{Im}\sigma_I\,\mathrm{Im}\sigma_J\,|G_{IJ}(\varepsilon)|^2 , \qquad (۵)$$

که در آن $G_{IJ}(\varepsilon)$ عنصر سطر I ام و ستون J ام ماتریس تابع گرین سامانه است که مقدار آن را می‌توان از رابطه زیر به‌دست آورد

$$G_{IJ} = \frac{1}{\tilde{D}_{N,I,J}}, \qquad (۶)$$

که در آن $\tilde{D}_{N,I,J}$ توسط چند جمله‌ای زیر برحسب خودانرژی‌ها مشخص می‌شود:

$$\tilde{D}_{N,I,J} = D_{J-I-2} - (\sigma_I + \frac{D_{I-2}}{D_{I-1}} + \sigma_J + \frac{D_{n_1-J-1}}{D_{n_1-J}})\, D_{n_2-1} + (\sigma_I + \frac{D_{I-2}}{D_{I-1}})\,(\sigma_J + \frac{D_{n_1-J-1}}{D_{n_1-J}})\, D_{n_2-2}, \qquad (۷)$$

که در آن n_1 و n_2 به ترتیب $n_1 = N$ ، $n_2 = J - I + 1$ هستند و همچنین

$$D_n = \frac{\lambda^{n+1} - \lambda^{-n-1}}{\lambda - \lambda^{-1}}, \qquad (۸)$$

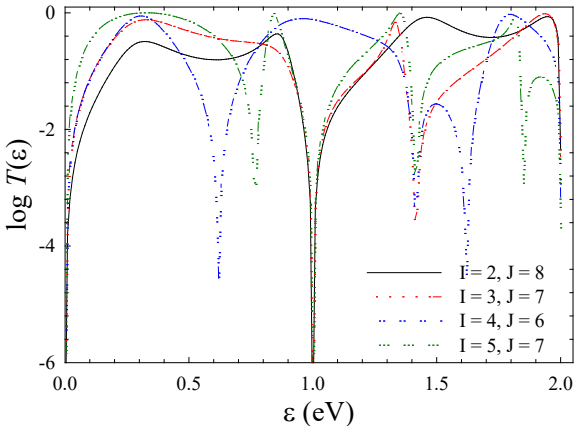
با

$$\lambda = \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{2\beta_W} + \sqrt{(\frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{2\beta_W})^2 - 1},$$

بحث

در این بخش، به عنوان مثال یک زنجیره یک بعدی شامل $N = 10$ اتم یکسان را در نظر می‌گیریم. ضریب عبور الکترون بین اتم‌های دلخواه I ام و J ام را با فرمول‌های بخش قبلی برای ٤ پیکربندی متفاوت به صورت تحلیلی محاسبه کرده و پاسخ‌ها را با روش مستقیم و غیر تحلیلی مقایسه می‌کنیم. برای این منظور ضریب

عبور الکترون بین اتم‌های اول و هشتم، سوم و هفتم، چهارم و



شکل۲ : هادی‌ها به دو اتم اختیاری واقع در جای‌گاه‌های I ام و J ام متصل شده‌اند و رسانش بین این دو اتم اختیاری صورت می‌پذیرد.

ششم، پنجم و هفتم را به صورت تابعی از انرژی الکترون عبوری محاسبه می‌کنیم؛ انتخاب این جایگاه‌های اتصال اختیاری است. برای ساده‌سازی، انرژی‌های جایگاهی و انرژی پرش را به صورت $\beta_{I(J)} = \beta_W = 1\text{eV}$, و $\varepsilon_{I(J)} = \varepsilon_W = \varepsilon_0 = 0$ و برای انرژی پرش اتصال را $\beta_{WI(J)} = 0.8\text{eV}$، در نظر می‌گیریم. ما نتایج عددی مربوط به فرمول‌بندی تحلیلی حاضر و روش مستقیم (وارون کردن مستقیم ماتریس گرین وارون) را با یکدیگر مقایسه کردیم و ملاحظه کردیم که کاملاً بر یکدیگر منطبق هستند. با این حال به عنوان مثال در شکل ۲ لگاریتم ضریب عبور الکترونی را به صورت تابعی از انرژی برای موقعیت‌های ذکر شده ترسیم کرده‌ایم. توجه داشته باشیم که به دلیل تقارن منحنی‌ها نسبت به انرژی صفر، آن را در بازه‌ی انرژی صفر تا 2eV آورده‌ایم. بدیهی است که مسیر گذر الکترون بین اتم‌ها علاوه بر اینکه متأثر از شرایط مرزی است، متأثر از تداخل تابع موجش از مسیر شاخه‌ها و مسیر بین دو هادی نیز هست. بنابر این شاهد آثار تداخلی (دره‌ها) در نمودارها به خصوص در پیکربندی‌هایی که شاخه‌ها بزرگترند هستیم.

نتیجه‌گیری

در این مقاله یک فرمولبندی تحلیلی برای محاسبه‌ی ضریب عبور الکترونی از یک زنجیره‌ی اتمی ساده که هادی‌ها از دو جایگاه اختیاری در آن متصل شده‌اند، ارائه دادیم. این فرمول‌بندی به دلیل ماهیت تحلیلی قابلیت محاسبه سریع ضریب عبور الکترونی سامانه‌های بسیار طولانی را دارد. به عنوان مثال، رسانش یک سامانه‌ی ده اتمی را نیز بررسی کردیم و متوجه شدیم که هر چه هادی‌ها به همدیگر نزدیکتر شوند، آثار تداخلی ناشی از دو مسیر بین هادی‌ها و مسیر گذرنده از شاخه‌ها، در دره‌های طیف رسانش بیشتر است.

مرجع‌ها

[1] Akbari Chaleshtori T, Rabani H and Mardaani M, Iranian Journal of Physics Research, 23 (2023) 349.
[2]W.Martienssen andH. Warlimont, Mesoscopic and Nanostructured Materials, (Springer Handbook of Condensed Matter and Materials Data, 2005).
[3]D.H. Santamore and M.C. Cross,Phys.Rev.Lett., 87 (2001) 115502.
[4] A. Balandin,J. Nanosci. Nanotech.,5 (2005)1015.
[5] J. Wang and J.S. Wang,J. Appl. Phys.,111 (2012) 044304.
[6] Grosso G. and Parravicini G.P., Solid State Physic, (Elsevier, 2000).
[7] Datta S, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems", Cambridge. University Press, Cambridge (1997).
[8] Mardaani M. and Rabani H., Phys. Status Solidi (b), 251 (2014) 1001.
[9] Mardaani M, Rabani H and Keshavarz M, 2012 Physica E 44 1342–5
[10] Mardaani M, Esfarjani K, Physica E 25 (2004) 119–130.

محاسبه اطلاعات فیشر کوانتومی برای مدل *t-U-V*

امینی، محمد ؛ صاحب‌سرا، پیمان

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

در این پژوهش، اطلاعات فیشر کوانتومی که نقشی کلیدی در حسگری کوانتومی و تشخیص درهم‌تنیدگی چندبخشی ایفا می‌کند، برای مدل t-U-V در فضای تکانه محاسبه شده است. این مدل شامل انرژی جنبشی، برهم‌کنش همسایه اول U و برهم‌کنش همسایه دوم V است. با استفاده از روش دو نسخه‌ای کردن سامانه و تعریف عملگری وابسته به تکانه، نشان داده می‌شود که اطلاعات فیشر کوانتومی به طور مستقیم از تابع طیفی تک‌الکترونی قابل محاسبه است. نتایج عددی نشان می‌دهد که با تغییر پارامترهای U و V، بیشینه اطلاعات فیشر کوانتومی در تکانه‌های مشخصی ظاهر می‌شود که به ساختار همبستگی‌های سامانه وابسته هستند. این وابستگی بیانگر آن است که اطلاعات فیشر کوانتومی می‌تواند ابزار مناسبی برای شناسایی تکانه‌های متناظر با بیشترین حساسیت کوانتومی و بررسی کاربردهای مرتبط با مترولوژی کوانتومی باشد.

واژه های کلیدی: *اطلاعات فیشر کوانتومی، مدل t-U-V، تابع طیفی تک‌الکترونی، حسگر کوانتومی، درهمتنیدگی چند بخشی*

Calculation Of Quantum Fisher Information For The *t-U-V* Model

Amini, Mohammad; Sahebsara, Peyman

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

In this research, the quantum Fisher information (QFI), which plays a key role in quantum sensing and multipartite entanglement detection, is calculated for the t-U-V model in momentum space. This model includes kinetic energy, nearest-neighbor interaction U, and next-nearest-neighbor interaction V. Using the system-doubling approach and a momentum-dependent operator, it is shown that the quantum Fisher information can be computed directly from the single-particle spectral function. Numerical results indicate that as the interaction parameters U and V vary, the maximum value of the quantum Fisher information appears at specific momenta, which are determined by the correlation structure of the system. This dependence suggests that the quantum Fisher information can serve as a useful tool for identifying momenta associated with enhanced quantum sensitivity and for exploring potential applications in quantum metrology.

***Keywords**: Quantum Fisher Information (QFI), t-U-V Model, Single-Particle Spectral Function, Quantum Sensing, Multipartite Entanglement*

PACS No. *3, 6*

مقدمه

اطلاعات فیشر کوانتومی (QFI) یک حالت$|\psi\rangle$ نسبت به یک مشاهده‌پذیر $\hat{O}$، که با $F_Q(|\psi\rangle, O)$ نشان داده می‌شود، یک مفهوم بنیادی در مترولوژی کوانتومی است. این کمیت کرانی بر دقت اندازه‌گیری کوانتومی یک فاز θ از یک عملگر یکانی $(U = e^{i\theta\hat{O}})$ به دست می‌دهد، که در آن $\hat{O}$ به‌عنوان یک مشاهده‌پذیر هرمیتی معرفی

می‌شود؛ این کران به‌عنوان کران کوانتومی کرامر- رائو شناخته می‌شود:

$$(\Delta\theta)^2 \geq \frac{1}{m F_Q(\rho,\hat{O})} \qquad (۱)$$

که در آن m تعداد اندازه‌گیری‌های مستقل برای تخمین θ است. برای برخی حالت‌های غیرکلاسیک کوانتومی با L کیوبیت، اطلاعات فیشر کوانتومی می‌تواند به حد هایزنبرگ برسد، یعنی($F_Q \sim L^2$)، در حالی که برای L کیوبیت مستقل، تقریباً برابر با اندازه‌ی سامانه ($F_Q \sim L$)، به صورت خطی مقیاس می‌شود، که حد استاندارد کوانتومی نام دارد. این تفاوت در مقیاس‌گذاری، اطلاعات فیشر را به معیاری قدرتمند برای تشخیص همبستگی‌های کوانتومی تبدیل می‌کند [۱و۲].

همچنین اطلاعات فیشر یک معیاری کمی برای درهم تنیدگی بس‌ذره‌ای است که ظرایف درهم‌تنیدگی نهفته در همبستگی‌های کوانتومی بس‌ذره‌ای ذاتی در پذیرفتاری دینامیکی را آشکار می‌سازد که می‌توان با روابط مشخصی آن را تعیین کرد [۳].

در واقع اطلاعات فیشر کوانتومی در ابتدا، برای کمی‌سازی بیشترین دقتی معرفی شد که با آن می‌توان یک پارامتر را با استفاده از یک حالت کوانتومی ρ برآورد کرد. در سال‌های اخیر، اطلاعات فیشر کوانتومی توجه زیادی را به خود جلب کرده است، زیرا کران پایین دقیقی برای درهم تنیدگی چندبخشی واقعی فراهم می‌کند [۴].

روابط مربوط به اطلاعات فیشر

برای یک حالت با عملگر چگالی مخلوط $\rho = \sum_\lambda P_\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda|$ اطلاعات فیشر کوانتومی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$F_Q(\rho,\hat{O}) = 2\sum_{\lambda\lambda'} \frac{(p_\lambda - p_{\lambda'})^2}{p_\lambda + p_{\lambda'}} |\langle\lambda|\hat{O}|\lambda'\rangle|^2. \qquad (۲)$$

برای یک حالت خالص $|\psi\rangle$، رابطه اطلاعات فیشر به واریانس ساده زیر تبدیل می‌شود [۴]:

$$F_Q(\rho,\hat{O}) = 4\langle\psi|\hat{O^2}|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle^2 \equiv 4\Delta^2 O. \qquad (۳)$$

می‌توان اطلاعات فیشر را به طور دقیق به یک تابع پاسخ کوبو مرتبط کرد، برای حالتی در تعادل گرمایی در دمای T، داریم:

$$F_Q(T) = \frac{4}{\pi}\int_0^\infty d\omega \tanh\left(\frac{\omega}{2T}\right)\chi''(\omega,T) \qquad (۴)$$

که در آن $\chi''(\omega,T) = \mathrm{Im}(\chi(\omega,T))$ بخش موهومی پذیرفتاری دینامیکی در حالت ρ نسبت به $\hat{O}$ است. همان حالت گرمایی و مولدی که اطلاعات فیشر برای آن محاسبه می‌شود.

برای اثبات درستی رابطه (۴) تنها فرض حداقلی تعادل گرمایی است. با قرار دادن $\hbar = k_B = 1$ پذیرفتاری دینامیکی به صورت

$$\chi(\omega,T) = i\int_0^\infty dt\, e^{-i\omega t}\,\mathrm{tr}\left(\rho[\hat{O}(t),\hat{O}]\right) \qquad (۵)$$

تعریف می‌شود، که در آن $\hat{O}(t) = e^{iHt}\hat{O}e^{-iHt}$ است. مناسب است در نمایش لِهمن محاسبات را ادامه دهیم. در این نمایش داریم:

$$\chi''(\omega) = \sum_{\lambda\lambda'} \frac{(p_\lambda - p_{\lambda'})}{p_\lambda + p_{\lambda'}} |\langle\lambda|\hat{O}|\lambda'\rangle|^2 \pi\,\delta(\omega + E_{\lambda'} - E_\lambda) \qquad (۶)$$

و همچنین برحسب تابع طیفی به شکل زیر است:

$$\chi''(k,\omega,T) = \frac{2e^{\beta\omega}}{n_B(\omega)}\sum_q \int d\omega'\, n_F(\omega')\, n_F(-\omega - \omega')\, A_q(\omega')\, A_{q+k}(\omega+\omega') \qquad (۷)$$

در رابطه (۷)، q بردار موج داخلی است که روی حالت‌های تکانه جمع زده می‌شود، k بردار موج خارجی و ω فرکانس اختلال خارجی هستند که پاسخ دینامیکی سامانه نسبت به آن‌ها توصیف می‌شود.

برای یک حالت گرمایی داریم:

$$2\int_0^\infty \mathrm{d}\omega \tanh\left(\frac{\omega}{2T}\right)\delta(\omega + E_{\lambda'} - E_\lambda) = \tanh\left(\frac{E_\lambda - E_{\lambda'}}{2T}\right) = \frac{p_\lambda - p_{\lambda'}}{p_\lambda + p_{\lambda'}} \qquad (۸)$$

با جایگذاری رابطه (۶) در رابطه (۴) و استفاده از رابطه (۸)، رابطه (۴) به فرم استاندارد اطلاعات فیشر کوانتومی در رابطه (۲) تبدیل می‌شود؛ بنابراین درستی رابطه (۴) تأیید می‌شود [۴ و۵]. در نهایت می‌توان اطلاعات فیشر را بر حسب تابع طیفی نوشت.

عملگرهایی که بین دو نسخه پرش می‌کنند می‌توانند گزینه‌های مناسبی برای پیدا کردن اطلاعات فیشر باشند. این عملگرها شامل دوتایی‌های فرمیونی بوده و بنابراین بوزونی‌اند. به طور خاص، برای یک سامانه‌ی N جایگاهی الکترون‌های بدون اسپین، عملگر مورد نظر به صورت زیر بیان می‌شود [۵]:

$$\hat{O}(a) = \sum_{j=1}^{N} a_j c_{jA}^\dagger c_{jB} + \mathrm{H.c.} \qquad (۹)$$

که در آن $c_{j\mu}^{(\dagger)}$ عملگر نابودی (آفرینش) در جایگاه j ام برای نسخه‌ی $\mu \in \{A,B\}$ است. با فرض کردن پرش موضعی بین نسخه‌های A و

B، با شدت پرش $a_j(k) = e^{ikj}$ در جایگاه j یک ساختار مدوله‌شده با عدد موج k ایجاد می‌کند. این ساختار قطری تضمین می‌کند که اطلاعات فیشر کوانتومی خاصیت جمع‌پذیری را حفظ کند [۵].

با کمک آن عملگر تعریف شده در رابطه (۹)، اطلاعات فیشر کوانتومی برای یک حالت خالص $|\psi\rangle$ با تعداد الکترون معین برابر با N_e به صورت زیر است:

$$F_Q\big(O(k)\big) = 8N_e - 8\sum_{i,j=1}^{N} cos\left(k(i-j)\right)|C_{ij}|^2 \qquad (۱۰)$$

که در آن $C_{ij} \equiv \langle\psi|c_i^\dagger c_j|\psi\rangle$ ماتریس همبستگی تک‌ذره‌ای است. در دمای صفر، رابطه (۴) به رابطه (۱۰) کاهش می‌یابد. این اطلاعات فیشر جمع‌پذیر است زیرا $O(k)$ شامل پرش بین همان جایگاه‌های i در نسخه‌های A و B می‌شود [۵]. این نتیجه بسیار ارزشمند است زیرا ارتباط مستقیمی بین اطلاعات فیشر کوانتومی و کمیت‌های قابل اندازه‌گیری تجربی مانند تابع طیفی تک‌ذره‌ای ایجاد می‌کند.

هامیلتونی سامانه

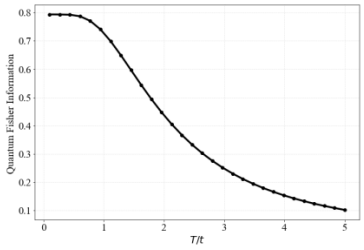
برای سامانه فرمیونی بدون اسپین یک بعدی که برهمکنش بین همسایه‌های اول و دوم از اهمیت بالایی برخوردار باشد از هامیلتونی مدل t-U-V استفاده می‌کنیم:

$$H = t\sum_i\left(c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i\right) + U\sum_i n_i n_{i+1} + V\sum_i n_i n_{i+2} \qquad (۱۱)$$

در این هامیلتونی t بیانگر دامنه پرش بین همسایه‌های اول است که عملگرهای c_i و $c_i^\dagger$ به ترتیب عملگرهای فنا و خلق فرمیونی در جایگاه i هستند، که اصل پادجابه‌جایی $\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}$ را برآورده می‌سازند و U برهمکنش کولنی بین نزدیکترین همسایه‌های اول که $n_i = c_i^\dagger c_i$ عملگر تعداد ذره در جایگاه i و V برهمکنش کولنی بین نزدیکترین همسایه‌های بعدی می‌باشد.

در این مدل ساده با تغییر U می‌توان حساسیت به برهمکنش نزدیک‌ترین همسایه را بررسی کرد و همچنین با تغییر V می‌توان اثر برهمکنش دوربرد را دید. رقابت بین U و V ناحیه‌هایی با بیشینه اطلاعات فیشر کوانتومی ایجاد می‌کند.

نتایج

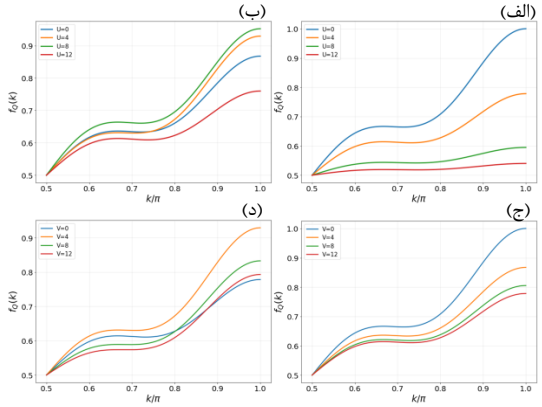


شکل ۱: تغییرات اطلاعات فیشر کوانتومی بر حسب دما ($k_B = 1$).

با استفاده از روابط ارائه‌شده در بخش نظری و برای مدل معرفی‌شده در رابطه (۱۱)، اطلاعات فیشر کوانتومی محاسبه شد. در تمامی محاسبات، قدرت پرش الکترون به عنوان واحد انرژی انتخاب شده و ($t = 1$) در نظر گرفته شده است. محاسبات عددی با استفاده از روش قطری‌سازی دقیق برای یک زنجیره یک‌بعدی از فرمیون‌های بدون اسپین با طول $L = 6$ انجام گرفت و سامانه نیز در حالت نیمه‌پر در نظر گرفته شد.

شکل ۱ وابستگی اطلاعات فیشر کوانتومی به دما را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که با افزایش دما، مقدار QFI کاهش می‌یابد. این رفتار ناشی از برانگیختگی‌های گرمایی و کاهش سهم همبستگی‌های کوانتومی در حالت گرمایی سامانه است. از آنجا که اطلاعات فیشر از تابع پاسخ دینامیکی سامانه به دست می‌آید، افزایش دما موجب کاهش سهم برانگیختگی‌های کم‌انرژی و در نتیجه کاهش مقدار اطلاعات فیشر می‌شود. در دماهای پایین، حالت پایه سهم غالب را در خواص سامانه دارد و بیشترین مقدار اطلاعات فیشر مشاهده می‌شود. از آنجا که بیشترین مقدار اطلاعات فیشر در حد دمای صفر حاصل می‌شود و رابطه (۴) نیز در این حد به رابطه (۱۰) کاهش می‌یابد، تمامی محاسبات ارائه‌شده در ادامه مقاله در دمای صفر انجام شده‌اند.

در شکل ۲، اطلاعات فیشر کوانتومی بهنجارشده نسبت به طول سامانه $\left(f_Q = \frac{F_Q}{4L}\right)$ بر حسب عدد موج k رسم شده است. نمودارهای ۲(الف) و ۲(ب) به ترتیب برای مقادیر ثابت $V = 0$ و $V = 4$ و مقادیر مختلف برهم‌کنش نزدیک‌ترین همسایه ارائه شده‌اند. مشاهده می‌شود که تغییر U موجب جابه‌جایی و تفکیک منحنی‌های اطلاعات فیشر می‌شود. در شکل ۲(الف)، بیشترین مقدار QFI در نزدیکی $k = \pi$ برای $U = 4$ مشاهده می‌شود، در حالی که با افزایش برهم‌کنش همسایه دوم به $V = 4$، بیشینه QFI به $U = 8$ منتقل می‌شود.



شکل۲: نمودار اطلاعات فیشر کوانتومی برحسب تکانه. در نمودارهای بالا برهمکنش کولنی V ثابت است و به ازای برهمکنش کولنی U متفاوت رسم شـــده‌اســـت (الف) $V=0$، و (ب) $V=4$ می‌باشـــد. نمودارهای پایین برهمکنش کولنی U ثابت است. (ج)) U =0 و (د) $U=4$ می‌باشد.

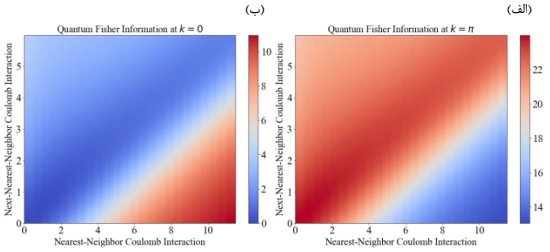
نمودارهای ۲(ج) و ۲(د) نیز به ترتیب برای مقادیر ثابت$U=0$ و $U=4$ و مقادیر مختلف V رسم شده‌اند که در آن‌ها نیز تغییر V باعث جابه‌جایی منظم منحنی‌ها می‌شود.

وابستگی QFI به بردار موج k از رابطه (۱۰) قابل درک است؛ زیرا همبستگی‌های تک‌ذره‌ای $|C_{ij}|^2$ با ضریب $\cos[k(i-j)]$ وزن‌دهی می‌شوند. در نتیجه با تغییر k، سهم همبستگی‌های فضایی مختلف تغییر کرده و اثر برهم‌کنش‌های U و V بر مقدار اطلاعات فیشر در بردارهای موج مختلف به‌صورت متفاوت ظاهر می‌شود.

به منظور بررسی اثر همزمان برهم‌کنش‌های U و V ، نقشه‌های حرارتی شکل ۳ رسم شده‌اند. در حالت$k=\pi$، بیشترین مقدار QFI در ناحیه برهم‌کنش‌های ضعیف مشاهده می‌شود، در حالی که برای $k=0$، بیشینه QFI در ناحیه U بزرگ و V کوچک قرار دارد. این تفاوت بیانگر حساسیت اطلاعات فیشر به ساختار همبستگی‌های ایجادشده توسط رقابت میان دو برهم‌کنش U و V است.

نتیجه گیری

در این پژوهش، برای سامانه فرمیونی که برهم‌کنش نزدیک‌ترین همسایه اول و دوم در آن اهمیت دارد، از هامیلتونی مدل t-U-V استفاده شد. نتایج این پژوهش نشان داد که اطلاعات فیشر نسبت به تغییر دما، بردار موج و برهم‌کنش‌های نزدیک‌ترین و دومین همسایه



شکل۳: نمودار اطلاعات فیشر کوانتومی برحسب تغییرات برهمکنش کولنی نزدیکترین همسایه و همسایه بعدی. (الف) برای زمانی که $k=\pi$ است و (ب) زمانی است که $k=0$ می‌باشد.

حساس است و می‌تواند تغییرات ساختار همبستگی‌های کوانتومی سامانه را در فضای تکانه آشکار سازد. همچنین مشخص شد که رقابت میان برهم‌کنش‌های U و V نقش مهمی در تعیین مقدار و توزیع اطلاعات فیشر در فضای تکانه ایفا می‌کند و موجب جابه‌جایی نواحی با بیشینه اطلاعات فیشر می‌شود. همچنین، بررسی وابستگی اطلاعات فیشر به بردار موج نشان داد که انتخاب تکانه مناسب می‌تواند اطلاعات متفاوتی از ساختار همبستگی‌های سامانه در اختیار قرار دهد. این نتایج بیانگر آن است که اطلاعات فیشر کوانتومی ابزاری مناسب برای بررسی اثر برهم‌کنش‌ها و مطالعه رفتار سامانه‌های فرمیونی برهم‌کنشی در فضای تکانه است.

چارچوب ارائه‌شده در این پژوهش می‌تواند مبنایی برای مطالعه سامانه‌های فرمیونی با اندازه‌های بزرگ‌تر و مدل‌های برهم‌کنشی پیچیده‌تر باشد. در این راستا، استفاده از روش‌های عددی مناسب برای سامانه‌های بزرگ، مانند روش گروه بازبهنجارش ماتریس چگالی(DMRG) و بررسی رفتار اطلاعات فیشر در حد ترمودینامیکی می‌تواند مسیر مناسبی برای توسعه این پژوهش در آینده فراهم سازد.

مرجع‌ها

[1] A. Sahoo, U. Mishra, and D. Rakshit, "Localization-driven quantum sensing," *Physical Review A*, vol. **109**, no. 3, p. L030601, 2024.
[2] U. Mishra and A. Bayat, "Integrable quantum many-body sensors for AC field sensing," *Scientific Reports*, vol. **12**, no. 1, p. 14760, 2022.
[3] J. Abouie and D. Vashaee, "Entanglement in quantum dots: Insights from dynamic susceptibility and quantum Fisher information," *Advanced Quantum Technologies*, vol. **7**, no. 9, p. 2400117, 2024.
[4] P. Hauke, M. Heyl, L. Tagliacozzo, and P. Zoller, "Measuring multipartite entanglement via dynamic susceptibilities," *Nature Physics*, vol. **12**, no. 8, p. 778, 2016.
[5] R. K. Malla, A. Weichselbaum, T.-C. Wei, and R. M. Konik, "Detecting multipartite entanglement patterns using single-particle Green's functions," *Physical Review Letters*, vol. **133**, no. 26, p. 260202, 2024.

ترازهای انرژی نقطه کوانتومی استوانه‌ای در حضور پتانسیل دنگ–فن–اکارت ، میدان‌های مغناطیسی سمتی و شار آهارونوف–بوهم

صادقی ، ابراهیم ؛ گنجی‌پور، سید حسین

گروه فیزیک دانشگاه یاسوج

چکیده

در این پژوهش، نقطه کوانتومی دو بعدی استوانه‌ای تحت تاثیر پتانسیل تحدیدی دنگ–فن–اکارت بررسی شده و انرژی ترازهای مختلف و تابع موج در حضور میدان‌های مغناطیسی سمتی و شار آهارونوف–بوهم محاسبه گردیده‌اند. نتایج بیانگر حذف تبهگنی ترازها در اثر اعمال میدان‌های خارجی می‌باشد. انرژی ذرات با افزایش شدت میدان مغناطیسی، عمق پتانسیل تحدیدی و شار افزایش می‌یابد.

واژه های کلیدی: ***میدان مغناطیسی سمتی، شار آهارونوف- بوهم ، پتانسیل تحدیدی دنگ- فن- اکارت***

Energy levels of cylindrical quantum dot in the presence of Deng-Fan-Eckart potential, azimuthal magnetic fields and Aharonov-Bohm flux

Sadeghi, Ebrahim; Ganjipour, S. Hossein

Department of Physics, Yasouj University

Abstract

In this research, a two-dimensional cylindrical quantum dot with Deng-Fan-Eckart confinement potential is considered and energy levels and wave function in the presence of azimuthal magnetic field and field of Aharonov-Bohm flux are calculated. The results show the degeneracy is removed under external fields. The energy of particles with magnetic field, potential depth and AB flux increases.
Keywords: Azimuthal magnetic field, Aharonov-Bohm flux, Deng-Fan-Eckart confinement potential

PACS No. 73

مقدمه

ظهور لیزر و توسعه اپتیک غیرخطی، افق‌های جدیدی را در فناوری‌های فوتونیک و پردازش اطلاعات کوانتومی گشوده است[۲و۱]. در این میان، پدیده‌های غیر خطی به عنوان یکی از نکات کلیدی، نقشی حیاتی در مدولاسیون نور، سوئیچینگ تمام–اپتیکال و مخابرات نوری ایفا می‌کند. ساختارهای نیمه‌رسانای با ابعاد پایین، به ویژه نقاط کوانتومی، به دلیل چگالی حالت‌های گسسته و ضرایب نوری غیرخطی بزرگ، کاندیدهای ایده‌آلی برای تقویت این اثرات هستند.

در سال‌های گذشته پژوهش‌های متعددی به بررسی اثر پارامترهای ساختاری و عوامل خارجی بر پاسخ‌های اپتیکی غیرخطی نانوساختارهای نیم‌رسانا اختصاص یافته است[۳و۱]. مطالعات مختلف نشان داده‌اند که اندازه نقطه کوانتومی، شکل و نوع پتانسیل محبوس‌کننده، و عوامل خارجی می‌توانند موجب تغییر چشمگیر در طیف انرژی و ضرایب اپتیکی غیرخطی شوند. اثر میدان‌های خارجی بر پاسخ‌های غیرخطی در برخی سامانه‌های کم‌بعد مورد بررسی قرار گرفته است. برای نمونه، تأثیر میدان مغناطیسی بر هارمونیک نسل دوم در نقاط کوانتومی نامتقارن مطالعه شده و نتایج حاصل نشان داده است که میدان مغناطیسی

قادر است شدت و موقعیت قله‌های تشدیدی را به طور مؤثری کنترل کند. افزون بر این، اثر فشار، دما و برهم‌کنش الکترون–حفره بر تولید هماهنگ سوم در نقاط کوانتومی GaAs مورد بررسی قرار گرفته و نقش مهم این عوامل در تغییر پاسخ اپتیکی غیرخطی گزارش شده است. همچنین خواص هارمونیک دوم و سوم در نقاط، دیسک‌ها و حلقه‌های کوانتومی با پتانسیل‌های محبوس‌کننده مختلف مطالعه شده و امکان مهندسی پاسخ غیرخطی از طریق تغییر پارامترهای ساختاری و پتانسیل‌های مؤثر به اثبات رسیده است.

در میان مدل‌های مختلف پتانسیل محبوس‌کننده، پتانسیل Deng–Fan–Eckart به دلیل انعطاف‌پذیری بالا در توصیف برهم‌کنش‌های مؤثر و توانایی آن در بازتولید طیف‌های انرژی سامانه‌های کوانتومی، توجه پژوهشگران را به خود جلب کرده است[٦-٤]. اخیراً Li و Duan با استفاده از این پتانسیل، خواص هماهنگ سوم را در نقاط کوانتومی کروی GaAs مورد مطالعه قرار دادند. آنان با حل معادله شرودینگر از طریق روش فاکتورگیری و به‌کارگیری ماتریس چگالی، ترازهای انرژی، توابع موج، عناصر ماتریسی گذار و ضریب تولید هماهنگ سوم را محاسبه کردند. نتایج این پژوهش نشان داد که شعاع نقطه کوانتومی، پارامترهای پتانسیل Deng–Fan–Eckart ، فشار هیدرواستاتیکی، دما و غلظت آلومینیوم تأثیر قابل توجهی بر شدت و مکان قله‌های هماهنگ سوم دارند. همچنین انتقال‌های قرمز و آبی متعددی در پاسخ اپتیکی سامانه از طریق تنظیم این پارامترها مشاهده شد[٧].

میدان مغناطیسی یکی از مهم‌ترین ابزارهای کنترل خواص کوانتومی در نانوساختارهای نیم‌رسانا محسوب می‌شود و می‌تواند از طریق تغییر ساختار ترازهای انرژی، اصلاح توابع موج، تغییر میزان موضعی‌شدن حامل‌ها و تأثیر بر احتمالات گذارهای نوری، پاسخ‌های اپتیکی خطی و غیرخطی را به طور قابل توجهی دگرگون سازد. از سوی دیگر، برخلاف بسیاری از پارامترهای ساختاری که در مرحله ساخت تعیین می‌شوند، میدان مغناطیسی یک عامل کنترل خارجی و برگشت‌پذیر است که امکان تنظیم خواص سامانه را بدون تغییر ساختار فیزیکی آن فراهم می‌آورد.

بررسی پژوهش‌های انجام شده نشان می‌دهد که اگرچه اثر میدان مغناطیسی بر برخی فرآیندهای اپتیکی غیرخطی و نیز بر انواع مختلفی از نقاط کوانتومی مورد مطالعه قرار گرفته است، اما تاکنون اثر میدان مغناطیسی سمتی بر تابع موج و ترازهای انرژی در نقاط کوانتومی استوانه‌ای GaAs تحت پتانسیل Deng–Fan–Eckart بررسی نشده است.

بر این اساس، هدف پژوهش حاضر توسعه مدل ارائه‌شده توسط Li و Duan از طریق وارد کردن میدان مغناطیسی خارجی با تقارن سمتی و بررسی تأثیر آن بر ساختار نواری نقاط کوانتومی استوانه‌ای تحت پتانسیل Deng–Fan–Eckart است[٦]. در این مطالعه، نتایج حاصل در حضور میدان مغناطیسی با نتایج برای حالت بدون میدان مقایسه خواهد شد تا نقش این عامل خارجی در کنترل و بهینه‌سازی پاسخ سامانه به طور دقیق مشخص گردد.

تئوری

معادله شرودینگر برای یک ذره تحت تاثیر میدان مغناطیسی در مختصات استوانه‌ای بصورت زیر می‌باشد

$$\frac{1}{2m^*}\left(i\hbar\vec{\nabla}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\psi+V\psi=E_{nm}\psi \qquad (1)$$

درعبارت فوق $\vec{A}=\vec{A}_1+\vec{A}_2$ بیانگر پتانسیل برداری ناشی از میدان مغناطیسی سمتی و شار آهارونوف– بوهم بوده که در شرایط $\nabla\times\vec{A}_1=\vec{B}$ و $\nabla\times\vec{A}_2=0$ صدق می‌کنند[٧].

$$\vec{A}_1=\frac{Be^{-\alpha r}}{(1-e^{-\alpha r})}\hat{\varphi} \quad , \quad \vec{A}_2=\frac{\Phi_{AB}}{2\pi r}\hat{\varphi} \qquad (2)$$

با در نظر گرفتن تابع موج بصورت

$$\psi(r,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi r}}e^{im\varphi}R_{nm}(r) \qquad (٣)$$

و جایگزاری آن در معادله (١)، به معادله شعاعی زیر خواهیم رسید

$$\frac{d^2R_{nm}(r)}{dr^2}+\frac{2m^*}{\hbar^2}[E_{nm}-V_{eff}]R_{nm}(r)=0 \qquad (٤)$$

در عبارت فوق پتانسیل مؤثر بصورت زیر تعریف می‌شود

$$V_{eff}=V(r)+\frac{\hbar^2}{2m^*r^2}\left(m^2-\frac{1}{4}\right)+\frac{e^2A^2}{2m^*c^2}+\frac{\hbar eAm}{m^*cr} \qquad (٥)$$

در معادله (۵)، V(r) پتانسیل تحدیدی دنک–فن–اکارت بوده و بصورت زیر بیان می‌گردد[۷]:

$$V(r) = V_0\left(1 - \frac{be^{-ar}}{1-e^{-ar}}\right) - \frac{V_1 e^{-ar}}{1-e^{-ar}} + \frac{V_2 e^{-ar}}{(1-e^{-ar})^2} \quad (٦)$$

در عبارت فوق V_0 ، V1 و V2 به ترتیب عمق پتانسیل و شدت‌های پتانسیل هستند .با فرض $s = e^{-ar}$ و استفاده از تقریب آلدریچ– گرین برای جمله مرکزگرا و جایگذاری اندازه پتانسیل برداری A در معادله شعاعی، به معادله زیر خواهیم رسید:

$$\frac{d^2R}{ds^2} + \frac{1}{s}\frac{dR}{ds} + \frac{1}{s^2(1-s)^2}[D_1 s^2 + D_2 s + D_3]R = 0 \quad (٧)$$

در عبارت فوق

$$D_1 = -\varepsilon_{nm}^2 - \eta_1 - \eta_2 - \beta_1 + \beta_0 d_0 - \beta_2 - \chi^2 d_0 - 2m\chi d_0 + d_0/4$$
$$D_2 = 2\varepsilon_{nm}^2 + \eta_2 + \beta_1 - \beta_2 - 2\beta_0 d_0 + \beta_0 + 2\chi^2 d_0 - \chi^2$$
$$-\beta_4 - 2m\chi + 4m\chi d_0 - \frac{d_0}{2} + 1/4$$
$$D_3 = -\varepsilon_{nm}^2 + \beta_0 d_0 - \chi^2 d_0 - 2m\chi d_0 + d_0/4 \quad (8)$$

در روابط فوق پارامترها بصورت زیر تعریف می‌شوند[٦]:

$$\varepsilon_{nm}^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2\alpha^2}(V_0 - E_{nm}),$$
$$\eta_1 = \frac{2m^* b^2 V_0}{\hbar^2\alpha^2}$$
$$\eta_2 = \frac{2\eta_1}{h}$$
$$\beta_0 = -m^2$$
$$\beta_{1,2} = \frac{2m^* V_{1,2}}{\hbar^2\alpha^2}$$
$$\beta_2 = \frac{m^{*2}\omega_c^2}{\hbar^2\alpha^2} \quad (9)$$

با حل معادله (۷) و با توجه به شرایط مرزی، تابع موج بر حسب توابع فوق هندسی بدست می‌آیند

$$R(r) = s^\lambda (1-s)^\omega F(a1, a2, a3, s) \quad (10)$$

در تابع موج فوق λ و ω برحسب روابط (۹) بیان می شوند.

برای اینکه توابع فوق هندسی محدود شوند بایستی

$$a_1 = -n \quad , \; n = 0,1,2,3,\ldots \quad (11)$$

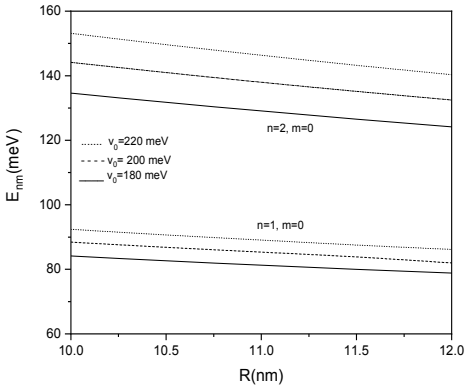
با استفاده از شرط فوق، انرژی ترازهای مختلف بدست می‌آیند.

نتایج

در این بخش محاسبات برای یک نقطه کوانتومی استوانه‌ای GaAs انجام شده و نتایج بر حسب مقادیر زیر ارائه می‌گردند.

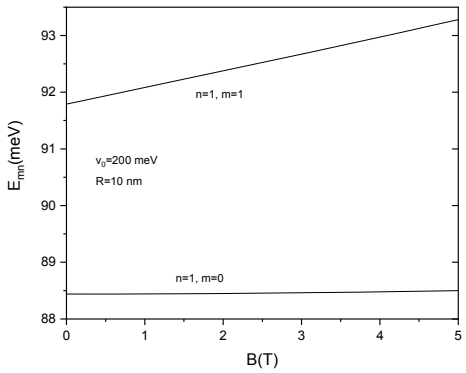
$m^* = 0.067\, m_0$ ، V0=V1=V2=200 meV,

در شکل ۱، تغییرات انرژی ترازهای مختلف بر حسب شعاع و به ازای عمق پتانسیل‌های متفاوت آورده شده است. همچنانکه از این شکل دیده می‌شود با کاهش شعاع قرص ، انرژی ترازها افزایش می‌یابد که می‌توان آن را ناشی از افزایش محدودیت کوانتومی دانست. از طرف دیگر با افزایش V0 و به ازای یک شعاع معین نیز انرژی ترازها افزایش می‌یابد. این رفتار می‌تواند ناشی از تجمع بیشتر تابع موج در داخل نقطه کوانتومی بدلیل افزایش سد پتانسیل باشد.

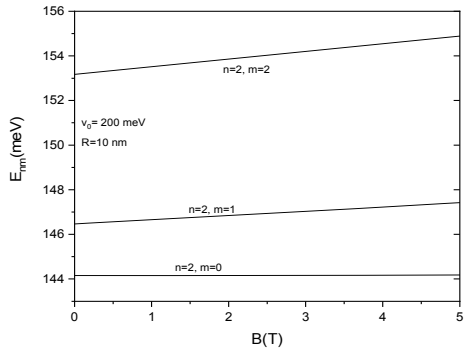


شکل۱: تغییرات انرژی ترازهای مختلف بر حسب شعاع قرص کوانتومی به‌ازای عمق پتانسیل‌های مختلف

در شکل‌های ۲ و ۳، انرژی ترازهای مختلف بر حسب میدان مغناطیسی و به‌ازای mهای مختلف ترسیم گردیده‌اند. همچنان که از این شکل‌ها دیده می‌شوند با افزایش شدت میدان مغناطیسی علاوه بر اینکه انرژی افزایش می‌یابد، شیب نمودارها نیز با افزایش m، افزایش می‌یابد. این رفتار ناشی از شکل خاص میدان مغناطیسی (سمتی) اعمالی، معادله (۲) می‌باشد.

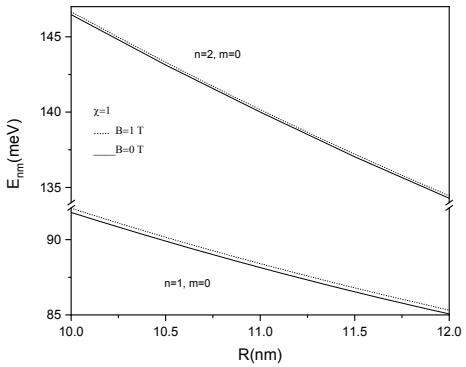


شکل۲: انرژی الکترون در قرص کوانتومی برحسب میدان مغناطیسی



شکل۳: انرژی ترازهای مختلف الکترون بر حسب میدان مغناطیسی در قرص کوانتومی

در شکل٤، تغییرات انرژی الکترون در ترازهای مختلف بر حسب شعاع قرص و در حضور میدان مغناطیسی سمتی و میدان ناشی از شار آهارانوف–بوهم ترسیم گردیده است. با توجه به نمودارهای فوق و مقایسه آن‌ها با شکل ۱، مشاهده می‌گردد که اعمال میدان و شار نیز سبب افزایش انرژی ذرات می‌گردد.



شکل٤: انرژی ترازهای مختلف بر حسب شعاع در حضور میدان مغناطیسی و شار آهارانوف–بوهم

نتیجه گیری

با اعمال میدان مغناطیسی سمتی و میدان ناشی از شار آهارونوف–بوهم بر یک قرص کوانتومی و در حضور پتانسیل تحدیدی دنگ–فن–اکارت تابع موج و انرژی ترازها بصورت تحلیلی محاسبه گردیده است. نتایج بیانگر افزایش انرژی ذرات با افزایش پارامترهای خارجی می‌باشد.

مرجع‌ها

[1] Sukanya. Nasa, S.P. Purohit *:"Linear and third order nonlinear optical properties of GaAs quantum dot in terahertz region"*. Physica E 118 (2020).

[2] H. Dakhlaoui, I. Altuntas, M.E. Mora-Ramos, F. Ungan*:" Numerical simulation of linear and nonlinear optical properties in hetero structure based on triple Gaussian quantum wells: effects of applied external fields and structural parameters"*, Eur. Phys. J. Plus 136 (8) (2021) 894.

[3] J.C. Martínez-Orozco, M.E. Mora-Ramos, C.A. Duque:" *Nonlinear optical rectification and second and third harmonic generation in GaAs δ-FET systems under hydrostatic pressure"* J. Lumin. 132 (2) (2012) 449–456.

[4] C.A. Duque, M.E. Mora-Ramos, J.D.*:"Correa Donor-impurity-related second and third harmonic generation and optical absorption in GaAs-(Ga, Al)As 3D coupled quantum dot-rings under applied electric field*" Superlattices Microstruct. 87 (2015) 25–31.

[5] G. Rezaei, B. Vaseghi, R. Khordad, H. Azadi *:"Kenary, Optical rectification coefficient of a two-dimensional quantum pseudodot system*", Physica E 43 (2011) 1853–1856.

[6] Xuechao Li, Yiming Duan: *"Third-harmonic generation in spherical quantum dots under Deng–Fan–Eckart potential: Effects of hydrostatic pressure, temperature and Al-concentration*"School of Mechanics and Optoelectronics Physics, Anhui University of Science and Technology, Huainan 232001, China

[7] Ikot, A. N., Edet, C. O., Amadi, P. O., Okorie, U. S., Rampho, G. J., & Abdullah, H. Y. (2020*):" Thermodynamic properties of Aharanov–Bohm (AB) and magnetic fields with screened Kratzer potential*". The European Physical Journal D, 74(7), 1-13, https://doi.org/10.1140/epjd/e2020-10084-9

بررسی اثر پهنا بر خواص فیزیکی نانوریبونهای مولیبدن دی سولفاید به روش شبیه سازی

علی حسین محمد ظاهری

دانشکده علوم، گروه فیزیکه دانشگاه پیام نوره تهران ه ایران

چکیده

نانوریبون‌های مولیبدن دی‌سولفاید (MoS_2) به دلیل خواص الکترونی، نوری و مکانیکی منحصربه‌فرد، از جمله مواد دوبعدی مورد توجه در فناوری نانو به شمار می‌روند. در این پژوهش، اثر پهنا بر خواص فیزیکی نانوریبون‌های MoS_2 با استفاده از روش‌های شبیه‌سازی مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور، نانوریبون‌هایی با پهناهای مختلف مدل‌سازی شده و تغییرات ساختار الکترونی، گاف انرژی و پایداری آن‌ها تحلیل گردید. نتایج نشان داد که با افزایش پهنا، خواص الکترونی نانوریبون‌ها دستخوش تغییر شده و مقدار گاف انرژی کاهش می‌یابد که ناشی از اثرات محدودیت کوانتومی است. همچنین پایداری ساختاری نانوریبون‌ها با تغییر پهنا تغییر کرده و رفتار وابسته به اندازه در آن‌ها مشاهده می‌شود. یافته‌های این تحقیق می‌تواند در طراحی و بهینه‌سازی ادوات نانوالکترونیکی و اپتوالکترونیکی مبتنی بر نانوریبون‌های MoS_2 کاربرد داشته باشد.

واژه های کلیدی: *مولیبدن دی‌سولفاید (MoS_2) ، نانوریبون، خواص الکترونی، اثر محدودیت کوانتومی، گاف نواری، شبیه‌سازی محاسباتی*

Effect of Ribbon Width on the Physical Properties of Molybdenum Disulfide (MoS_2) Nanoribbons: A Simulation Study

Ali Hossein Mohammad Zaherirzi

Department of Physics, Faculty of Science, Payame Noor University, Tehran, Iran.

Abstract

Molybdenum disulfide (MoS_2) nanoribbons, owing to their distinctive electronic, optical, and mechanical properties, are among the two-dimensional materials that have attracted significant attention in nanotechnology. In this study, the effect of width on the physical properties of MoS_2 nanoribbons has been investigated using simulation methods. To this end, nanoribbons with varying widths were modeled, and the resulting changes in their electronic structure, energy gap, and stability were analyzed. The results demonstrate that as the width increases, the electronic properties of the nanoribbons undergo substantial modifications, with the energy gap decreasing—a phenomenon attributed to quantum confinement effects. Furthermore, the structural stability of the nanoribbons varies with changes in width, revealing a clear size-dependent behavior. The findings of this research hold potential for the design and optimization of nanoelectronic and optoelectronic devices based on MoS_2 nanoribbons.

***Keywords**: Molybdenum disulfide nanoribbon, electronic properties, quantum confinement effect, band gap, computational simulation"*

PACS No: 70-72.

مقدمه

در دهه‌های اخیر، مواد دوبعدی به دلیل خواص الکترونیکی، نوری و مکانیکی منحصربه‌فرد خود توجه گسترده‌ای را در حوزه نانوفناوری و الکترونیک نسل آینده به خود جلب کرده‌اند. پس از موفقیت گرافن، خانواده دی‌کالکوژنیدهای فلزات واسطه (TMDs)به عنوان جایگزین‌های امیدوارکننده‌ای برای کاربردهای الکترونیکی و اپتوالکترونیکی معرفی شدند [۲-۱]. در میان این

مواد، مولیبدن دی‌سولفاید (MoS_2) به دلیل داشتن گاف انرژی ذاتی، پایداری شیمیایی مناسب و امکان ساخت ساختارهای کم‌بعدی، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است [۳–٤]. نانوریبون‌های MoS_2که از محدودسازی جانبی صفحات دوبعدی این ماده حاصل می‌شوند، ساختارهای شبه‌یک‌بعدی هستند که خواص آن‌ها به شدت تحت تأثیر اثرات محصورشدگی کوانتومی و حالت‌های لبه‌ای قرار می‌گیرد [٥–٦]. برخلاف لایه‌های دوبعدیMoS_2 ، نانوریبون‌ها می‌توانند رفتارهای الکترونیکی و مغناطیسی متنوعی از جمله نیمه‌رسانایی، فلزی بودن، نیمه‌فلزی و حتی فرومغناطیس را از خود نشان دهند [۷–۸]. یکی از مهم‌ترین پارامترهای هندسی مؤثر بر خواص نانوریبون‌هایMoS_2 ، پهنای نانوریبون است. کاهش پهنا موجب افزایش اثرات محصورشدگی کوانتومی شده و ساختار نواری ماده را به طور قابل توجهی تغییر می‌دهد [۹]. مطالعات نشان داده‌اند که با تغییر پهنا، مقدار گاف انرژی، چگالی حالات الکترونی، رسانندگی کوانتومی و ویژگی‌های انتقال بار دچار تغییرات چشمگیری می‌شوند [۱۰–۱۲]. خواص نوری نانوریبون‌های MoS_2 نیز وابستگی قابل توجهی به پهنا دارند. کوچک شدن ابعاد عرضی می‌تواند موجب تغییر در جذب نوری، انرژی اکسیتون‌ها و ناهمسانگردی نوری شود که این ویژگی‌ها برای کاربرد در آشکارسازهای نوری، دیودهای نشر نور و سلول‌های خورشیدی اهمیت فراوانی دارند [۱۳]. همچنین گزارش شده است که نانوریبون‌های بسیار باریک MoS_2 رفتار نوری ناهمسانگرد قوی از خود نشان می‌دهند که در لایه‌های دوبعدی معمولی مشاهده نمی‌شود [۱٤]. از دیدگاه مکانیکی نیز تغییر پهنا می‌تواند بر پایداری ساختاری، مدهای ارتعاشی و خواص الاستیکی نانوریبون‌ها اثرگذار باشد. بنابراین بررسی سیستماتیک تأثیر پهنا بر خواص فیزیکی نانوریبون‌های مولیبدن دی‌سولفاید، علاوه بر افزایش درک بنیادی از رفتار مواد کم‌بعدی، می‌تواند راهگشای طراحی و بهینه‌سازی ادوات نانوالکترونیکی، اسپینترونیکی و اپتوالکترونیکی مبتنی بر این ماده باشد.

بر این اساس، هدف از این پژوهش بررسی اثر پهنا بر خواص فیزیکی نانوریبون‌های مولیبدن دی‌سولفاید و تحلیل تغییرات ساختار الکترونیکی این نانوساختارها در ابعاد مختلف است.

روش محاسبات

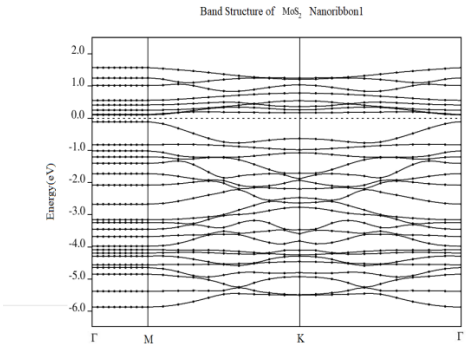
در این پژوهش، اثر پهنا بر خواص فیزیکی نانوریبون‌های مولیبدن دی‌سولفاید (MoS_2) با استفاده از محاسبات مبتنی بر نظریه تابعی چگالی (DFT) مورد بررسی قرار گرفت. تمامی شبیه‌سازی‌ها با بهره‌گیری از بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو انجام شدند. این یک بسته نرم‌افزاری منبع‌باز و رایگان است که برای شبیه‌سازی‌های مکانیک کوانتومی مواد، بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT) توسعه یافته است و برای محاسبات ساختار الکترونی، خواص نوری، مکانیکی و ترمودینامیکی مواد، به‌ویژه در مقیاس نانو، ارائه می‌دهد. برای توصیف برهم‌کنش الکترون–یون از شبه‌پتانسیل‌های نوع PAWو برای تقریب تبادلی–همبستگی از تابعی GGA در قالب PBEاستفاده شد. معیار همگرایی انرژی کل برابر با 10^{-6} رید برگ و معیار نیروها کمتر از 10^{-3} رید برگ بر بوهر در نظر گرفته شد. برای جلوگیری از برهم‌کنش بین تصاویر تناوبی، یک لایه خلأ به ضخامت ۱۵ آنگستروم در راستاهای غیرتناوبی اعمال گردید. نمونه‌برداری از ناحیه بریلوئن با استفاده از شبکه نقاط k از نوع Monkhorst–Packو متناسب با ابعاد نانوریبون انجام شد. پس از دستیابی به ساختارهای بهینه، انرژی کل، ساختار نواری و چگالی حالات الکترونی محاسبه شدند. همچنین تأثیر تغییر پهنا بر گاف نواری، توزیع حالات الکترونی مورد تحلیل قرار گرفت. در نهایت، نتایج به‌دست‌آمده برای نانوریبون‌های با پهناهای مختلف با یکدیگر مقایسه و روند تغییر خواص فیزیکی آن‌ها بررسی شد.

نتایج و بحث

در ابتدا نانو ریبون با عرض **۵/۵۲** آنگستروم مورد مطالعه قرار داده شد. پس از انجام همگرایی امرژی قطع و نیز نقاط پر تقارن فایل ورودی خود سازگار جهت مطالعه ساختار الکترونی این نانو ریبون اجرا شد که نتیجه در نمودار ۱ آمده است.

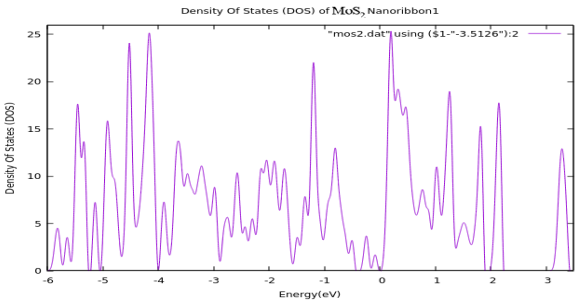
این نمودار ساختار نواری (۱) نانوریبون مولیبدن دی‌سولفاید را در مسیر تقارن بالای Γ–M–K–Γ نشان می‌دهد. این مسیر به این دلیل انتخاب شده است که این مسیر پوشش کامل رفتار الکترونیکی جهت‌های اصلی تقارن شبکه شش وجهی را پوشش می‌دهد. بسیاری از ویژگی‌های کلیدی MoS_2 (مانند گاف انرژی

مستقیم/غیرمستقیم، پراکندگی نوارها و حالت‌های لبه) در این نقاط و مسیرها ظاهر می‌شوند.



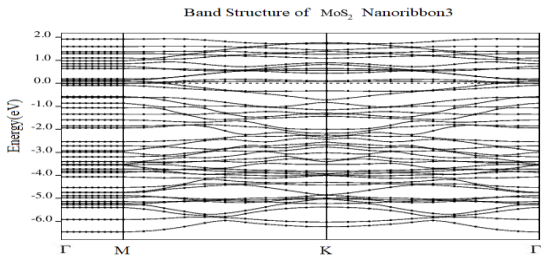
نمودار ۱ : ساختار نواری نانو ریبون مولیبدن دی سولفاید با عرض۵/۵۲ آنگستروم

مشاهده می‌شود که هیچ نواری از تراز فرمی عبور نمی‌کند، بنابراین این نانوریبون رفتار **نیمه‌رسانا** از خود نشان می‌دهد. کمینه نوار رسانش در نزدیکی ۰ eV و بیشینه نوار ظرفیت در اندکی پایین‌تر از آن قرار گرفته‌اند که بیانگر وجود یک گاف نواری کمتر از ۰/۵ الکترون‌ولت و شکاف باند غیر مستقیم است. تقارن مناسب نوارها در نقاط مختلف ناحیه بریلوئن حاکی از پایداری الکترونی ساختار می‌باشد. به این معنی که نوارهای انرژی در نقاط مختلف مسیر بریلوئن به صورت منظم و مطابق با تقارن مورد انتظار ظاهر شده‌اند. این موضوع نشان‌دهنده **پایداری الکترونیکی** ساختار نانوریبون است. جهت بررسی دقیق تر این ساختار چگالی حالتهای این نانو ریبون مورد مطالعه قرار گرفت که تیجه در نمودار ۲ آمده است. در واقع این نمودار میزان دسترسی به حالت‌های الکترونی را در بازه‌های مختلف انرژی نشان می‌دهد.



نمودار ۲ : چگالی حالات بر حسب انرژی نانو ریبون با عرض ۵/۵۲ آنگستروم

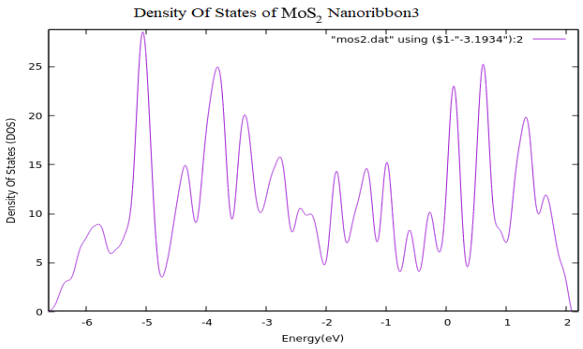
در این نمودار محور افقی بیانگر انرژی و محور عمودی نشان‌دهنده چگالی حالات الکترونی است. قله‌های تیز در DOS به تجمع زیاد حالت‌های الکترونی در برخی انرژی‌ها اشاره دارند که به ساختار نواری ماده مرتبط هستند. در مرحله بعد نانو ریبون با عرض ۳/۶ آنگستروم مورد مطالعه قرار گرفت که نمودار ساختار نواری آن به شکل زیر حاصل



شد

نمودار ۳: ساختار نواری نانو ریبون با عرض ۳/۶ آنگستروم

جهت بررسی دقیق تر این ساختار چگالی حالتهای این نانو ریبون نیز مورد مطالعه قرار گرفت که تیجه در نمودار ٤ آمده است.



نمودار ٤ : چگالی حالات بر حسب انرژی نانو ریبون با عرض ۳.٦ آنگستروم

همانطور که در نمود ار هویدا است مقدار قابل توجهی از چگالی حالات در نزدیکی تراز فرمی به معنای حضور الکترون‌های آزاد است که منجر به خواص رسانایی قوی می‌شود.

نتیجه گیری

به منظور بررسی تأثیر عرض نانوریبون بر خواص الکترونیکی MoS_2، ساختار نواری دو نانوریبون با عرض‌های تقریبی ۵/۵۲و ۳/٦ آنگستروم در مسیر متقارن Γ–M–K–Γ مورد مطالعه قرار

گرفت. نتایج نشان می‌دهد که کاهش عرض نانوریبون تأثیر قابل توجهی بر آرایش نوارهای انرژی و شکاف نواری دارد.

در نانوریبون با عرض ۵/۵۲ آنگستروم، تعداد زیرنوارهای الکترونی بیشتر بوده و تراکم حالت‌های انرژی در نواحی مختلف ساختار نواری بالاتر است. این موضوع به حضور تعداد بیشتری از اتم‌ها و برهم‌کنش‌های الکترونی در مقطع نانوریبون نسبت داده می‌شود. همچنین نوارهای انرژی در نزدیکی تراز فرمی به یکدیگر نزدیک‌تر هستند که بیانگر امکان انتقال بار و هدایت الکترونی بیشتر در این ساختار است. با کاهش عرض نانوریبون به ۳/۶ آنگستروم، فاصله بین زیرنوارهای انرژی افزایش یافته و نوارها ماهیت گسسته‌تری پیدا می‌کنند. این رفتار ناشی از تقویت اثر حبس کوانتومی است که در ساختارهای کم‌بعد با ابعاد کوچک‌تر نمود بیشتری دارد. در این حالت، تراکم حالت‌ها در نزدیکی تراز فرمی کاهش یافته و شکاف انرژی نسبت به نانوریبون پهن‌تر افزایش می‌یابد. علاوه بر این، میزان پراکندگی نوارها در نمونه با عرض ۵/۵۲ آنگستروم بیشتر از نمونه ۳/۶ آنگستروم است که می‌تواند نشان‌دهنده تحرک بالاتر حامل‌های بار و در نتیجه هدایت الکتریکی بهتر باشد. در مقابل، نانوریبون باریک‌تر به دلیل افزایش موضعی‌شدن حالت‌های الکترونی و بزرگ‌تر شدن شکاف نواری، رفتار نیمه‌رسانایی قوی‌تری از خود نشان می‌دهد. در مجموع، نتایج نشان می‌دهد که کاهش عرض نانوریبون MoS_2 از ۵/۵۲ به ۳/۶ آنگستروم موجب تقویت اثرات حبس کوانتومی، افزایش شکاف نواری، کاهش تراکم حالت‌های الکترونی در نزدیکی تراز فرمی و کاهش قابلیت هدایت الکتریکی می‌شود. بنابراین، کنترل عرض نانوریبون می‌تواند به عنوان یک روش مؤثر برای تنظیم خواص الکترونیکی و طراحی ادوات نانوالکترونیکی مبتنی بر MoS_2 مورد استفاده قرار گیرد.

همچنین با مقایسه چگالی حالات این دو نانو ریبون می توان گفت که نانوریبون پهن‌تر پیک‌های نسبتاً منظم‌تر و کم‌نوسان‌تری را به‌ویژه در ناحیه انرژی منفی (valence band) نمایش می‌دهد. در مقابل، نانوریبون باریک‌تر نوسانات شدیدتر، پیک‌های تیزتر و حالات گسسته‌تری را نشان می‌دهد که ناشی از اثر کوانتومی در ابعاد کوچک‌تر است.

در واقع می توان گفت کاهش عرض نانوریبون MoS_2 از۵/۵۲ به ۳/۶ آنگستروم باعث افزایش وابستگی شدید خواص الکترونیکی به اندازه شده و ساختار الکترونیکی را از حالت دوبعدی به سمت ویژگی‌های یک‌بعدی سوق می‌دهد. این تغییرات، امکان تنظیم دقیق خواص الکترونیکی را فراهم کرده و کاربردهای بالقوه این نانوساختارها را در نانوالکترونیک، ترانزیستورهای مولکولی و دستگاه‌های اپتوالکترونیک تقویت می‌کند. **نتایج حاصل از این پژوهش کاملاً همخوان با مطالعات پیشین DFT بر روی نانوریبون‌های MoS_2 ا ست [۶و۱۲].**

مراجع

[۱] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov and A. K. Geim; "Two-dimensional Atomic Crystals"; Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS), ۱۰۲(۳۰), ۱۰۴۵۱–۱۰۴۵۳ (۲۰۰۵).
[۲] Q. H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J. N. Coleman and M. S. Strano; "Electronics and Optoelectronics of Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenides"; Nature Nanotechnology, ۷(۱۱), ۶۹۹–۷۱۲ (۲۰۱۲).
[۳] K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan and T. F. Heinz; "Atomically Thin MoS_2: A New Direct-Gap Semiconductor"; Physical Review Letters, ۱۰۵(۱۳), ۱۳۶۸۰۵ (۲۰۱۰).
[۴] H. Wang, H. Yuan, S. S. Hong, Y. Li and Y. Cui; "Synthesis, Properties, and Optoelectronic Applications of Two-Dimensional MoS_2 and MoS_2-Based Heterostructures"; Chemical Society Reviews, ۴۷(۱۶), ۶۱۰۱–۶۱۲۷ (۲۰۱۸).
[۵] Y. Li, Z. Zhou, S. Zhang and Z. Chen; "MoS_2 Nanoribbons: High Stability and Unusual Electronic and Magnetic Properties"; Journal of the American Chemical Society, ۱۳۰(۴۹), ۱۶۷۳۹–۱۶۷۴۴ (۲۰۰۸).
[۶] H. Pan and Y. W. Zhang; "Edge-Dependent Structural, Electronic and Magnetic Properties of MoS_2 Nanoribbons"; Journal of Materials Chemistry, ۲۲(۱۵), ۷۲۸۰–۷۲۹۰ (۲۰۱۲).
[۷] A. R. Botello-Méndez, F. López-Urías, M. Terrones and H. Terrones; "Metallic and Ferromagnetic Edges in Molybdenum Disulfide Nanoribbons"; Nanotechnology, ۲۰(۳۲), ۳۲۵۷۰۳ (۲۰۰۹).
[۸] C. Ataca, H. Şahin and S. Ciraci; "Mechanical and Electronic Properties of MoS_2 Nanoribbons and Their Defects"; Journal of Physical Chemistry C, ۱۱۵(۱۰), ۳۹۳۴–۳۹۴۱ (۲۰۱۱).
[۹] Nature Index; "Electronic and Magnetic Properties of Transition Metal Dichalcogenide Nanoribbons". (۲۰۲۵).
[۱۰] F. Tabatabaei, et al.; "Quantum Conductance of MoS_2 Armchair Nanoribbons". (۲۰۱۷).
[۱۱] E. Ridolfi, D. Le, T. S. Rahman and E. R. Mucciolo; "Electronic Transport in Disordered MoS_2 Nanoribbons"; Physical Review B, ۹۵(۳), ۰۳۵۴۳۰ (۲۰۱۷).
[۱۲] H. Pan and Y. W. Zhang; "Edge Engineering in MoS_2 Nanoribbons"; Journal of Materials Chemistry, ۲۲(۱۵), ۷۲۸۰–۷۲۹۰ (۲۰۱۲).
[۱۳] M. Ye, D. Winskog, R. Zhang, A. Ericsson, M. T. Trinh and J. Zhu; "Recent Advancement on the Optical Properties of Two-Dimensional Molybdenum Disulfide Thin Films"; Photonics, ۲(۱), ۲۸۸–۳۰۷ (۲۰۱۵).
[۱۴] J. B. Wu, H. Li, H. M. Yin, X. Zhang, J. C. Tan, X. F. Liu, P. H. Tan and W. Ji; "Monolayer Molybdenum Disulfide Nanoribbons with High Optical Anisotropy". (۲۰۱۵).

بررسی ویژگی‌های نوری ترکیب $C_4H_3FN_2O_2$:رهیافت DFT

آزادپرور، ملیحه[1,*]

[1] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولایت، ایرانشهر، سیستان و بلوچستان
(M.azadparvar@velayat.ac.ir)

چکیده

در این پژوهش، پاسخ اپتیکی خطی نیمه‌رسانای آلی $C_4H_3FN_2O_2$ مبتنی بر نظریه تابعی چگالی در چارچوب تقریب گرادیان تعمیم‌یافته با تابعی PBE-GGA انجام گرفت و خواص الکترونی و نوری ماده از طریق چگالی حالت‌ها و تابع دی‌الکتریک وابسته به فرکانس تحلیل شد. نتایج نشان می‌دهد که ترکیب مورد مطالعه می‌تواند گزینه‌ای مناسب برای کاربرد در سامانه‌های زیست‌فیزیکی، حسگرهای نوری و ادوات مبتنی بر پاسخ اپتیکی خطی باشد.

واژه های کلیدی: *$C_4H_3FN_2O_2$ ، نیمه رساتای آلی، ضریب جذب ، ضریب شکست، تابع دی الکتریک*

Investigation of the Optical properties of $C_4H_3FN_2O_2$ Compound: A DFT Approach

Azadparvar, Maliheh[1,*]

[1] *Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Velayat University, Iranshahr, Sistan-Baluchestan*
(M.azadparvar@velayat.ac.ir)

Abstract

In this study, the linear optical response of the organic semiconductor $C_4H_3FN_2O_2$ was investigated based on density functional theory (DFT) within the framework of the generalized gradient approximation using the PBE-GGA functional. The electronic and optical properties of the material were analyzed through the density of states and the frequency-dependent dielectric function. The results suggest that the investigated compound could be a suitable candidate for applications in biophysical systems, optical sensors, and devices based on linear optical response.

***Keywords**: $C_4H_3FN_2O_2$, organic semiconductor, absorption coefficient, refractive index, dielectric function.*

PACS No. 78

مقدمه

ترکیبات آلی دارویی به دلیل ساختار مولکولی ویژه، حضور گروه‌های عاملی فعال و رفتار الکترونی قابل‌توجه، جایگاه مهمی در پژوهش‌های میان‌رشته‌ای فیزیک، شیمی، داروسازی و علوم زیستی دارند. در میان این ترکیبات، فلوئوروراسیل یا $C_4H_3FN_2O_2$ ، یکی از داروهای شناخته‌شده و پرکاربرد ضدسرطان است که سال‌ها در درمان انواع مختلف سرطان، از جمله سرطان‌های روده بزرگ، پستان، معده، پانکراس، مری و دهانه رحم مورد استفاده قرار گرفته است [۱–٤]. این ترکیب، مشتق فلوئوردار اوراسیل بوده و از نظر ساختاری شباهت زیادی به بازهای پیریمیدینی موجود در DNA و RNA دارد؛ از این رو می‌تواند در مسیرهای زیستی مرتبط با متابولیسم نوکلئوزیدها و همانندسازی DNA اختلال ایجاد کند [۲–٤]. اهمیت بالینی این ترکیب ، حضور آن در فهرست داروهای ضروری سازمان جهانی بهداشت و کاربرد گسترده آن در شیمی‌درمانی، سبب شده است که بررسی ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و فیزیکوشیمیایی آن همچنان مورد توجه پژوهشگران باشد [۳,٤].

پژوهش‌های مبتنی بر DFT نشان داده‌اند که بررسی کمیت‌هایی مانند انرژی اوربیتال‌های مرزی، گاف انرژی HOMO–LUMO، چگالی حالات، انتقال بار، انرژی جذب و تابع دی‌الکتریک می‌تواند اطلاعات ارزشمندی درباره پایداری شیمیایی، واکنش‌پذیری، حساسیت الکترونی و قابلیت‌های کاربردی مولکول‌های دارویی فراهم سازد [۱–۳]. در مطالعات پیشین، برهم‌کنش این ترکیب با نانولوله‌های کربنی و بورنیتریدی [۱]، نانوحفره‌های بورنیتریدی [۲]، نقاط کوانتومی گرافنی و نانوکلاسترهای اکسیدی عامل‌دار [۳] بررسی شده و نشان داده شده است که محیط نانوساختاری می‌تواند اثر قابل‌توجهی بر ویژگی‌های الکترونی و دارورسانی این مولکول داشته باشد.

بخش عمده‌ای از مطالعات انجام‌شده برجنبه‌های دارویی، این ترکیب متمرکز بوده است [۱–٤]. بررسی مستقل خواص الکتریکی و نوری این ترکیب نیز می‌تواند اطلاعات بنیادی مهمی درباره رفتار فیزیکی آن ارائه دهد. هدف از پژوهش حاضر، بررسی محاسباتی خواص الکتریکی و نوری ترکیب دارویی $C_4H_3FN_2O_2$ با استفاده از روش‌های مبتنی بر DFT است. نتایج این پژوهش می‌تواند به درک بهتر ویژگی‌های بنیادی FU-۵ کمک کرده و زمینه‌ای برای استفاده از آن در مطالعات پیشرفته‌تر مرتبط با سامانه‌های دارورسانی، حسگرهای زیستی، مواد آلی نیمه‌رسانا و کاربردهای اپتوالکترونیکی فراهم سازد.

جزئیات محاسباتی

مطالعه خواص الکترونی و اپتیکی به کمک محاسبات اصول اولیه با استفاده از روش موج تخت خطی شده تقویت شده با پتانسیل کامل (FP-LAPW) با کد Wien2k [۵] صورت گرفته است. محاسبات با تقریب گرادیان تعمیم‌یافته پردو–بورک–ارنزرهوف (PBE-GGA) برای تخمین پتانسیل‌های تبادلی–همبستگی انجام شده است [٦]. مقدار Kmax × RMT برابر با ۳ در نظر گرفته شده است، که در آن RMT کوچک‌ترین شعاع مافین–تین و Kmax اندازه بیشینه بردار شبکه معکوس است. در فرآیند میدان خودسازگار (SCF)، نقاط k به ترتیب ۱۰۰، ٤۰۰ و ۱۰۰۰ برای محاسبه ساختار نواری، چگالی حالت‌ها و خواص اپتوالکترونیکی انتخاب شده‌اند. انرژی قطع برای جداسازی حالت‌های هسته و ظرفیت ٦- Ry انتخاب شده است و انرژی در حلقه‌های SCF در ۰/۰۰۰۱ Ry همگرا می‌شود.

خواص اپتیکی یا پاسخ کریستال مواد به نور به صورت با محاسبه تابع دی الکتریک در ۳ جهت بلوری مشخص محاسبه می‌شود [۷]:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = Re\,\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) + i\,Im\,\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) \qquad (1)$$

در این رابطه قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مشاهده می شوند. قسمت حقیقی با رابطه کرامرز- کرونیک و قسمت موهومی از قسمت حقیقی به صورت زیر قابل محاسبه است:

$$Re\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} d\omega' \frac{\omega' Im\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2}, \qquad (2)$$

$$Im\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{\hbar^2 e^2}{\pi m^2 \omega^2} \sum_{c,v} \int dk \langle c_k | P_\alpha | v_k \rangle \langle v_k | P_\beta | c_k \rangle \delta(\epsilon_c^k - \epsilon_v^k - \omega). \qquad (3)$$

سایر کمیت های اپتیکی از جمله تابع بازتاب نور ، کمیت های n و k تابع شکست نور و خاموشی نور و تابع جذب وابسته قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک هستند و به کمک آنها تعیین می گردند..

بحث و نتایج

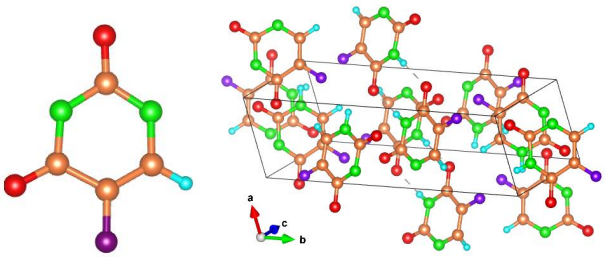
در ابتدا، ساختار مولکولی و بلوری ترکیب $C_4H_3FN_2O_2$ در شکل ۱ نمایش داده‌می‌شود. این ترکیب دارای ساختار بلوری مونوکلینیک با گروه فضایی P21/c است. بهینه‌سازی حجم ساختار بلوری از طریق کمینه‌سازی انرژی کل سلول واحد و برازش داده‌ها با معادله حالت Birch–Murnaghan انجام شد. پارامترهای شبکه به‌دست‌آمده شامل (a = 5.0433Å)

(,β= 108.88°) ، (c =6.6049 Å) ، (b = 14.9350 Å)

α=γ=90° می‌باشند و انرژی حالت پایه در حجم بهینه محاسبه گردید. این چارچوب محاسباتی امکان بررسی دقیق خواص الکترونیکی و اپتیکی $C_4H_3FN_2O$ را فراهم می‌کند.

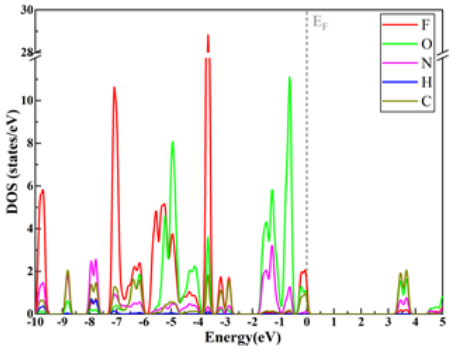
برای درک بهتر خواص الکترونیکی و نوری ترکیب، نمودارهای چگالی حالات الکترونی (DOS) مورد بررسی قرار گرفتند (شکل ۲). چگالی حالات ابزاری کلیدی برای تحلیل توزیع حالات الکترونی در نواحی ظرفیت و رسانش بوده و ماهیت پیوندهای شیمیایی و نوع رفتار الکترونی ماده را مشخص می‌کند. محاسبات

DOS کل و جزئی با استفاده از ساختار بهینه‌شده و در چارچوب تقریب PBE-GGA در بازه انرژی۱۰- تا ۵ eV انجام شد، به‌طوری‌که سطح فرمی در انرژی صفر قرار داده شد.



شکل ۱: طرحی از مولکول و ساختار سلول واحد ترکیب

نتایج DOS نشان می‌دهد که نوار ظرفیت در بازه انرژی ۱۰- تا ۰ eV عمدتاً از مشارکت حالات p اتم‌های فلوئور، اکسیژن و نیتروژن تشکیل شده است، در ناحیه نوار رسانش نیز، سهم غالب مربوط به حالات p اتم‌های کربن، اکسیژن و نیتروژن بوده که نقش اصلی را در انتقال بار ایفا می‌کنند. حالات s هیدروژن، نیتروژن و اکسیژن به همراه حالات s کربن سهم کمی در نزدیکی سطح فرمی دارند. منحنی چگالی حالت کلی شکاف انرژی حدود ۳.۲eV را نشان می دهد. این مقدار حاکی از ماهیت نیم رسانای با گاف نواری بزرگ ترکیب است که در توافق خوبی با مقادیر گزارش



شکل۲: نمودار چگالی حالت های کلی مربوط به هر اتم ترکیب

شده قبلی [۱,۸] است.

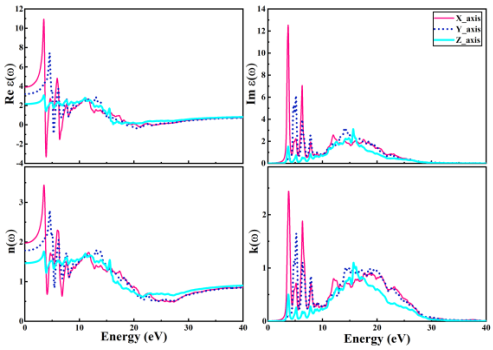
جدول ۱: مقایسه گاف ترکیب در این مطالعه با سایر گزارش ها

Method	Eg(eV)
This paper	**3.2**
DFT- B3LYP/6-31G*	^**3.67**
DFT- PBE-D3	'**5.41**

در بازه انرژی زیر سطح فرمی از ۰ تا۰.۵-الکترون ولت اتم فلوئور و سپس کربن و اکسیژن و با سهم کمتری نیتروژن حضور دارد. در بازه انرژی ۰.۵- تا ۲eV-این اتم های اکسیژن و نیتروژن هستند که سهم قابل توجهی دارند. در بالای سطح فرمی سهم مشارکت قابل توجه اتم های کربن ؛ اکسیژن سپس نیتروژن و در نهایت مقدار کمی فلوئور نشان داده می شود. به‌طور کلی، نمودارهای DOS حاکی از وجود پیوندهای کووالانسی قوی از نوع N–C و O–C و کووالانسی – قطبی از نوع F-Cدر ساختارماده هستند که ناشی از اشتراک الکترون بین اتم‌های با الکترونگاتیویته مختلف است. این ویژگی‌ها بیانگر پایداری الکترونی مناسب و ماهیت نیمه‌رسانایی $C_4H_3FN_2O_2$ بوده و آن را به گزینه‌ای قابل‌توجه برای کاربردهای اپتوالکترونیکی و زیست‌فیزیکی تبدیل می‌کند.

بررسی خواص اپتیکی ترکیب $C_4H_3FN_2O_2$ از آن جهت اهمیت دارد که این ویژگی‌ها می‌توانند اطلاعات ارزشمندی درباره جذب و پراکندگی نور، ساختار مولکولی، پایداری نوری و برهم‌کنش ترکیبات زیست‌فعال با محیط‌های زیستی فراهم کنند.

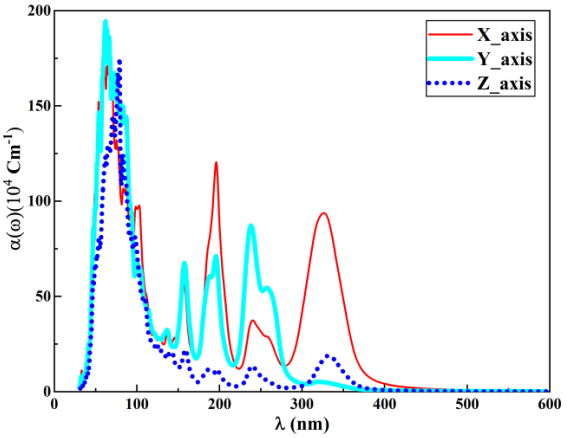
بررسی بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک در سه راستای بلوری نشان می‌دهد که مقدار ثابت دی‌الکتریک در راستای x حدود ٤، در راستای y حدود ۳ و در راستای z حدود ۲ است. بنابراین بیشترین قطبش الکتریکی در راستای x رخ می‌دهد که نشان‌دهنده وابستگی پاسخ الکترونی به جهت بلوری و وجود ناهمسانگردی ساختاری در ماده است. ناهمسانگردی اپتیکی مشاهده‌شده از تقارن پایین ساختار بلوری و توزیع غیریکنواخت پیوندها (تعداد اتم‌ها) در



شکل ۳: طیف تابع دی الکتریک بخش حقیقی، بخش موهومی، نمودار ضریب

راستاهای مختلف بلوری نشأت می‌گیرد. تفاوت در طول و زاویه پیوندها، میزان هم‌پوشانی اوربیتالی و پیوستگی شبکه در امتداد محورهای مختلف، سبب تغییر در قطبش‌پذیری الکترونی و در

نتیجه تفاوت در مؤلفه‌های تانسور دی‌الکتریک می‌شود؛ به‌طوری‌که در راستای X با پیوندهای بیشتر، کوتاه‌تر و هم‌پوشانی اوربیتالی قوی‌تر، پاسخ اپتیکی شدیدتری مشاهده می‌شود، در حالی که در جهت Z با برهم‌کنش‌های کمتر و فاصله‌های بین‌اتمی بزرگ‌تر، این پاسخ کاهش می‌یابد. بنابراین، رفتار ناهمسانگرد اپتیکی بازتاب مستقیم آرایش اتمی غیرهم‌ارز و جهت‌داری پیوندها در شبکه بلوری است. بیشینه مقدار بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک نیز در راستای x و در بازه انرژی ۳ تا ۵ الکترون‌ولت مشاهده می‌شود و مقدار آن حدود ۱۱ است. همچنین در بازه ٤ تا ۸ الکترون‌ولت، بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک منفی می‌شود که می‌تواند بیانگر رفتار فلزی‌مانند و بازتاب شدید موج الکترومغناطیسی در این محدوده انرژی باشد. بخش موهومی تابع دی‌الکتریک که بیانگر جذب نوری و اتلاف انرژی الکترون‌هاست، نشان می‌دهد که نخستین گذارهای اپتیکی مهم در محدوده ۳ تا ۸ الکترون‌ولت رخ می‌دهند؛ ناحیه‌ای که عمدتاً مربوط به طیف فرابنفش است. بر این اساس، گاف اپتیکی ترکیب حدود ۳.۵ الکترون‌ولت برآورد می‌شود و نشان می‌دهد آغاز جذب نوری در انرژی‌های نسبتاً بالا اتفاق می‌افتد. پیک‌های بخش موهومی تابع دی‌الکتریک در انرژی‌های eV۳.۵ و ۵ eV عمدتاً از گذارهای الکترونی بین اوربیتال‌های اتم‌های نوار ظرفیت (F, O, C, N) به حالت‌های نوار رسانش (C, O, F) نشأت می‌گیرند، در حالی که پیک‌های زیر ۱۰ eV بیشتر مربوط به گذار از حالت‌های F و O در نوار ظرفیت به نوار رسانش هستند. ضریب شکست نیز در راستای x حدود ۲، در راستای y حدود ۸/۱ و در راستای z حدود ٤/۱ گزارش شده است؛ بنابراین بیشترین پراکندگی نور در راستای x رخ می‌دهد. ضریب خاموشی نیز با بخش موهومی تابع دی‌الکتریک هم‌خوانی دارد و قله‌های آن در نواحی گذارهای الکترونی شدید ظاهر می‌شوند. ضریب جذب نوری نیز رفتار ناهمسانگرد ماده را تأیید می‌کند. در ناحیه فوق‌فرابنفش، بیشینه جذب در راستای Y رخ می‌دهد. در بازه طول موج ۲۰۰ تا ۳۰۰ نانومتر، جذب قابل‌توجهی در راستاهای X و Y مشاهده می‌شود که به گذارهای بین‌نواری مرتبط با اوربیتال‌های p اتم‌های اکسیژن، نیتروژن، فلوئور و کربن نسبت داده می‌شود. بیشترین جذب فرابنفش در راستای X مشاهده شده، در حالی که جذب در ناحیه مرئی تقریباً به صفر می‌رسد. در مجموع، ترکیب $C_4H_3FN_2O_2$ ماده‌ای با پاسخ اپتیکی ناهمسانگرد، جذب برجسته در ناحیه فرابنفش و وابستگی شدید خواص نوری به جهت بلوری است. بیشترین مقدار ضریب جذب در ناحیه فرابنفش در راستای X مشاهده می‌شود که نشان‌دهنده ناهمسانگردی اپتیکی این ترکیب است. جذب در ناحیه مرئی به صفر می رسد. رفتار ناهمسانگرد نمودار ضریب جذب در سه راستای بلوری نشان دهنده پاسخ ناهمسانگرد ماده به نور است و با نتایج ضریب شکست و ضریب خاموشی سازگار بوده و بیانگر وابستگی پاسخ نوری به جهت انتشار نور است.



شکل ٤: نمودار ضریب جذب در سه راستای مختلف بلوری

نتیجه گیری

مطالعه محاسباتی انجام‌شده نشان می‌دهد که $C_4H_3FN_2O_2$ یک ترکیب آلی نیمه رساتا با گاف نواری بزرگ و پایداری ساختاری مناسب است. $C_4H_3FN_2O_2$ نیمه‌رسانای آلی جذب نسبتا قوی در ناحیه فرابنفش است. نتایج محاسباتی نشان می‌دهد که این ترکیب دارای رفتار اپتیکی ناهمسانگرد است؛ یعنی پاسخ نوری و الکترونی آن به جهت اعمال میدان الکتریکی یا انتشار نور وابسته است. که می‌تواند برای کاربردهای اپتوالکترونیکی و زیست‌فیزیکی مورد توجه قرار گیرد.

سپاسگزاری

از همکاری آقای حسین اصغر رهنمای علی آباد صمیمانه تشکر می‌کنیم. اینکار با پشتیبانی دانشگاه حکیم سبزواری انجام شد.

مرجع‌ها

[۱] Faramarzi, Rahim, Mojtaba Falahati, and Mahmoud Mirzaei. "Interactions of fluorouracil by CNT and BNNT: DFT analyses." Advanced Journal of Science and Engineering 1.2 (2020): 62-66.
[۲] Javan, Masoud Bezi, et al. "A DFT study on the interaction between 5-fluorouracil and B 12 N 12 nanocluster." RSC advances 6.106 (2016): 104513-104521.
[۳] Ogunwale, Goodness J., et al. "Interaction of 5-fluorouracil on the surfaces of pristine and functionalized Ca12O12 nanocages: an intuition from DFT." ACS omega 8.15 (2023): 13551-13568.
[۴] Akay, Sema, et al. "Solubility and dissolution thermodynamics of 5-fluorouracil in (ethanol+ water) mixtures." Journal of Molecular Liquids 333 (2021): 116038.
[۵] Blaha P, Schwarz K, Madsen GK, Kvasnicka D, Luitz J. wien2k. An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties. 2001; 60 (1).
[۶] Perdew, J.P., Burke, K., Ernzerhof, M.: Generalized gradient approximation made simple. Phys. Rev. Lett. 77(18), 3865 (1996).
[۷] Ambrosch-Draxl C, Sofo JO. Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented planewave method. Computer physics communications. 2006 Jul 1;175(1):1-4.
[۸] Si, Nguyen Thanh, et. al. Binding mechanism and SERS spectra of 5-fluorouracil on gold clusters. *Frontiers in Chemistry* 10 (2022): 1050423.

ویژگی‌های اپتیکی پروسکایت‌های $Cs_2XInBr_6(X=Cu\ or\ Ag)$ در دو تقریب ذره مستقل و فاز تصادفی

مختاری، علی؛ نگهداری، فاطمه

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد

چکیده

ساختار نواری و ویژگی‌های اپتیکی پروسکایت‌های دوگانه $Cs_2XInBr_6(X=Cu\ or\ Ag)$ در رهیافت نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفته است. برای تحلیل بهتر داده‌های اپتیکی، در ابتدا ساختار نواری شبیه‌سازی شده است. ضرایب جذب و بازتاب اپتیکی و رفتار تابع اتلاف بر حسب انرژی موج الکترومغناطیس فرودی با استفاده از دو تقریب ذره مستقل (IPA) و فاز تصادفی (RPA) مورد مقایسه و تحلیل قرار گرفته‌اند. هر دو ترکیب با هر دو تقریب ذره مستقل و فاز تصادفی، در ناحیه انرژی‌های کم در نزدیکی طیف فروسرخ دارای مقادیر اتلاف ناچیز و کمترین ضریب جذب هستند. وجود بیشینه‌های طیف جذبی در محدوده فروسرخ، مرئی و ماوراء بنفش در هر دو ترکیب، نشان از قابلیت کاربرد این ترکیب‌ها در سلول‌های خورشیدی دارد. مقادیر قابل توجه برای پارامترهای جذب و اتلاف در انرژیهای بالا، قابلیت کاربرد این مواد در آشکارسازها را نشان می‌دهد. در کل ترکیب حاوی مس برای ساخت سلول خورشیدی از دیگری مناسب‌تر است.

واژه های کلیدی: *نظریه تابعی چگالی، سلول‌های خورشیدی، ویژگی‌های اپتیکی، ضریب جذب.*

Optical properties of the $Cs_2XInBr_6(X=Cu\ or\ Ag)$ perovskites using both independent particle and random phase approximations

Mokhtari, Ali; Negahdari, Fatemeh
Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Shahrekord University, Shahrekord

Abstract

The band structure and optical properties of the $Cs_2XInBr_6(X=Cu\ or\ Ag)$ perovskites have been investigated in density functional theory approach. For a better analysis of the optical data, the band structure has been simulated first. The optical absorption and reflection coefficients and the behavior of the loss function in terms of the incident electromagnetic wave energy have been compared and analyzed using both independent particle and random phase approximations (IPA, RPA). Both compounds, with both independent particle and random phase approximations, have negligible loss values and the lowest absorption coefficient in the low energy region near the infrared spectrum. The presence of absorption spectral maxima in the infrared, visible and ultraviolet ranges in both compounds indicates the applicability of these compounds in solar cells. Significant values for the absorption and loss parameters at high energies indicate the applicability of these materials in detectors. In general, the copper-based compound is more suitable for making solar cells than the other.

Keywords: Density Functional Theory, Solar Cells, Optical Properties, Absorption Coefficient.
PACS No:70

مقدمه

استفاده از انرژی‌های پاک و تجدیدپذیر یکی از استراتژی‌های توسعه پایدار برای حل بحران انرژی برای جامعه بشری است. بنابراین، انرژی خورشیدی کارآمدترین و عملی‌ترین گزینه‌ای است که قادر به مقابله با نیازهای جهانی انرژی و چالش‌های تغییرات اقلیمی است. تولید انرژی از نور خورشید تا حد زیادی به کارایی سلول‌های خورشیدی (SC) بستگی دارد [۱]. ساخت سلول‌های خورشیدی مبتنی بر ترکیبات پروسکایت به دلیل افزایش بازدهی توان تبدیل از ۳/۸ به ۲۵/۸ درصد در طی دهه گذشته [۲]، تنوع

ترکیبات، هزینه تولید پایین و کاربردهای متعدد در صنعت، امیدوارکننده‌ترین فناوری‌های نوظهور هستند.

پروسکایت‌های آلی (یا معدنی) مبتنی بر سرب مانند CH3NH3PbI3 (RbPbBr3-xIx) به دلیل شکاف باند مناسب، ضریب جذب بالا، جرم مؤثر کم حامل‌های بار و خواص فتوولتائیک منحصر به فرد، در رقابت با سایر مواد پیشرو بوده‌اند [۲-۱]. با وجود استفاده زیاد از چنین ترکیباتی تا دهه گذشته، سمیت سرب و ناپایداری ترکیبات مرتبط در محیط زیست، محققان را به فکر جایگزینی عنصر سرب در ترکیبات پروسکایت آلی/معدنی انداخته است. در این راستا، پروسکایت‌های دوگانه هالیدی با استوکیومتری عمومی $A_2BB'X_6$ برای حل این مشکل پیشنهاد شده است.

در کار حاضر یک مطالعه مقایسه‌ای روی ترکیب‌های پروسکایت دوگانه هالیدی $Cs_2XInBr_6(X=Cu\ or\ Ag)$ انجام داده‌ایم (از اینجا به بعد بطور مختصر CCIB و CAIB). رفتار ساختارهای نواری، ضریب جذب و بازتاب نوری و طیف اتلاف انرژی با دو رهیافت ذره مستقل (IPA) و فاز تصادفی(RPA) [۴-۳] توسط بسته محاسباتی ابینیت [۵] در رهیافت نظریه تابعی چگالی [۶] محاسبه و تجزیه و تحلیل شده‌اند. نتایج محاسبات کوانتومی حاضر می‌تواند در طراحی و ساخت دستگاه‌های نوری مانند آشکارسازهای فرابنفش و مادون قرمز و سلولهای خورشیدی مورد استفاده قرار گیرد.

روش‌های محاسباتی

سهم انرژی تبادلی-همبستگی با تقریب شیب تعمیم یافته محاسبه شده است و بخش پتانسیل ناشی از یون‌ها با روش شبه‌پتانسیل بار-پایسته در شبیه‌سازی‌ها بکار گرفته شده است. با استفاده از پارامترهای بهینه در این قسمت، ویژگی‌های اپتیکی دو ترکیب در گروه فضایی Fm-3m در تقریب ذره مستقل و فاز تصادفی بدست آمده است. دقت هم‌گرایی انرژی کل 10^{-8} الکترون ولت و حداکثر نیروی وارد بر اتم‌ها در حالت پارامترهای بهینه ساختاری، 10^{-6} الکترون ولت بر آنگستروم برآورد شده است. پارامتر قطع انرژی جنبشی برای تعیین تعداد جملات بسط تابع موج برای هر دو ساختار ۹۵۰ الکترون ولت و تعداد نقاط **k** در منطقه اول بریلوئن برای اطمینان از هم‌گرایی نیروهای باقی مانده بر روی اتم‌ها، بصورت ٤×٤×٤ همگرا شده است. ویژه مقادیر تک ذره با حل خودسازگار معادلات کوهن_شم [٦] در رهیافت فاز تصادفی محاسبه می‌شود. در رهیافت ذره مستقل برای کاهش حجم محاسبات، فقط ویژه توابع تک‌ذره در حوالی سطح فرمی در نظر گرفته می‌شود. بنابراین نتایج روش RPA نسبت به IPA دقت بالاتری دارد.

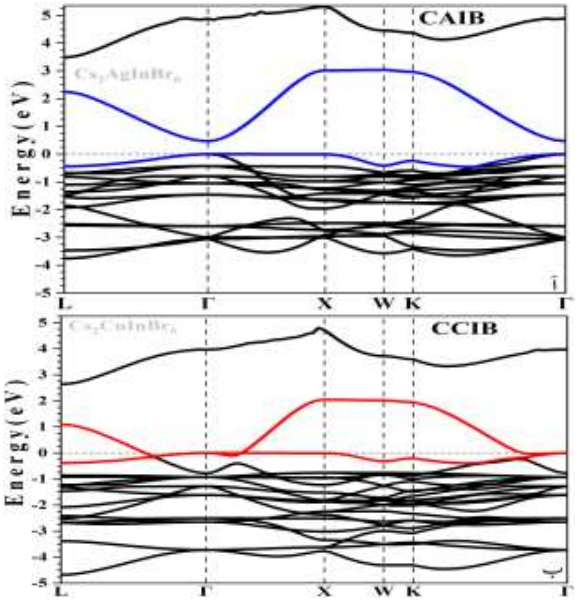
نتایج و بحث

مقدار پارامترهای شبکه، مدول حجمی و گاف انرژی برای ترکیب CCIB (CAIB) به ترتیب ۱۰/۹٤ (۱۱/۲۱) انگستروم، ۱۳ (۱۲/۱) گیگا پاسکال و ۰/۰۸ (۰/٤۷) الکترون‌ولت برآورد شده است. پارامتر شبکه در مقایسه با کارهای دیگران، [۷]۱۰/۹۱ ([۷]۱۱/۲ و [۸]۱۱/۰) انگستروم، اختلافی کمتر از یک درصد دارد. برای گاف انرژی نیز به ترتیب اعداد [۷]۰/۵ ([۷]۰/٦ و [۹]۲/۱) الکترون‌ولت، گزارش شده است. ساختار نواری یک ترکیب حالت جامد اطلاعات خوبی مربوط به گذار، انرژی گاف و جرم موثر الکترون و حفره ارائه می‌دهد. بنابراین برای بررسی خواص اپتیکی مواد در ابتدا نیاز است خواص الکترونی را بررسی نماییم. ساختار نوار انرژی (شکل۱) گاف نواری مستقیم را در نقطه Γ برای هر دو ترکیب نشان می‌دهد. اثر اسپین_مدار سبب کاهش بسیار جزئی در مقدار گاف می‌شود و قابل صرف‌نظر کردن است.

داده‌های تجربی (۲/۱ الکترون‌ولت برای CAIB) نشان می‌دهد که گاف انرژی کم‌تر از مقدار واقعی تخمین زده می‌شود که هم می‌تواند ناشی از تابعی تبادلی_همبستگی باشد و هم می‌تواند به‌علت وجود گذار اپتیکی ممنوع (شرط گذار اپتیکی ($\Delta l=\pm 1$) در این ساختارها باشد.

در شکلهای ۲ تا ٤، رفتار ضرایب جذب و بازتاب و طیف اتلاف آورده شده است که در ادامه تحلیل جامع اپتیکی را روی آن‌ها ارائه می‌کنیم. ابتدا برای ترکیب CAIB، در محدوده نور مرئی (۳/۲- ۱/۷ الکترون ولت) بیش‌ترین جذب در انرژی ۲/۸۸ الکترون ولت، طول موجی تقریبا برابر ٤۳۰ نانومتر در محدوده رنگ آبی است. قله دیگر در این محدوده انرژی برابر ۲/۱۳ الکترون ولت، طول

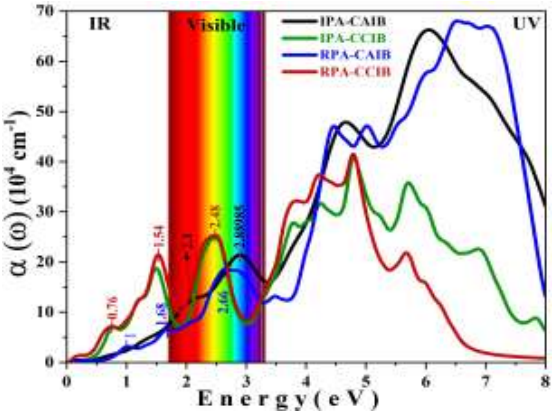
موج تقریبا برابر با ۵۸۲ نـانومتر در محـدوده رنـگ نـارنجی و زرد است.



شکل ۱: ساختار نوار انرژی ترکیبات آ)CAIB و ب)CCIB.

در محدوده فرابنفش ضریب جذب افزایش پیدا کـرده اسـت و دو قله در انرژی‌های ٤/٦٤ و ٦/٠٣ الکترون ولـت اسـت. بایـد توجـه داشت که نورخورشید که به زمین می‌رسـد شـامل ٤٧٪ فروسـرخ، ٤٦٪ نور مرئی و ۷٪ فرابنفش است؛ اما بازهم با توجـه بـه جـذب بالای این ترکیب در محـدوده نـور فـرابنفش می‌تـوان گفـت ایـن ترکیب برای کاربرد در آشکارسـازها یـا سـایر کاربردهـایی کـه در محدوده فرابنفش است، مفید می‌باشد.

ضریب بازتاب مشخص کننده شدت موج بازتابیده شده نسـبت بـه موج فرودی می‌باشد. بنابراین ضریب انعکاس یا بازتاب وابسته بـه انرژی فوتون فرودی است. کمینه‌های نمودار ضریب بازتاب بیانگر بیش‌ترین مقدار جـذب اسـت و بـرعکس بیشـینه‌های آن نشـانگر کم‌ترین جذب اسـت. آسـتانه ضـریب بازتـاب در هـر دو تقریـب حدود ۱۰٪ است. هم‌چنین ضریب بازتاب در ناحیـه مرئـی حـدود ۱۰ تا ۱۵ درصـد می‌باشـد. بیش‌تـرین ضـریب بازتـاب را تقریـب RPA در انرژی ۷/۵۸ الکتـرون ولـت حـدود ۵۷٪ از خـود نشـان می‌دهد. با توجه بـه نمـودار ضـریب بازتـاب، بطـور کلـی بزرگـی بازتاب در انرژی‌های مختلف بسیار کوچک است و فقط در ناحیـه بیش از ۷ الکترون ولت در هر دو تقریب به بیش از ۲۰ ٪ افـزایش می‌یابد. با توجه به اینکه در ناحیه مرئـی و فـرابنفش ایـن ترکیـب ضریب جذب نسبتا بالا (بیش از ۲۰ درصد) و ضریب بازتاب کمی از خود نشان می‌دهد، می‌تواند گزینه مناسبی برای استفاده در ابـزار فوتوالکتریک و همچنین به عنوان جاذب سلول خورشیدی استفاده گردد.



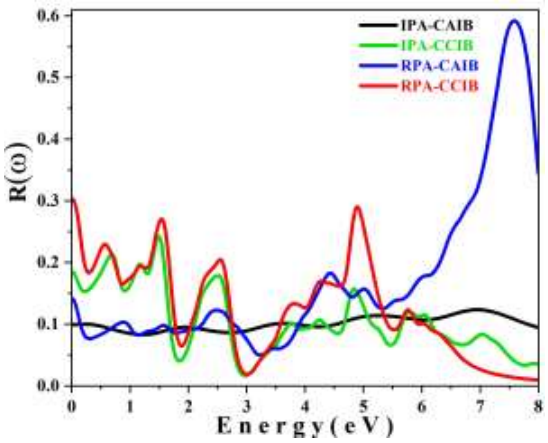
شکل ۲: ضریب جذب $\alpha(\omega)$ دو ترکیب مورد بررسی و تفکیک نتایج به سه بخش مادون قرمز(IR)، مرئی(Visible) و فرابنفش(UV).

بیشینه‌های ضریب بازتاب در ۲/۰۹، ۲/۸٤، ٤/٥٩ و ٥/٩٥ الکترون ولت هستند. برهم‌کنش‌های نوری غیرخطی مرتبه دوم فقط در بلورهایی که مرکز تقارن یا به‌عبارتی تقارن وارونی ندارند، اتفاق می‌افتد. ازآن‌جا که سامانه بلوری مکعبی و هم‌سانگرد $Fm\bar{3}m$ دارای تقارن وارونی است، لذا خواص غیرخطی مرتبه دوم ندارد.

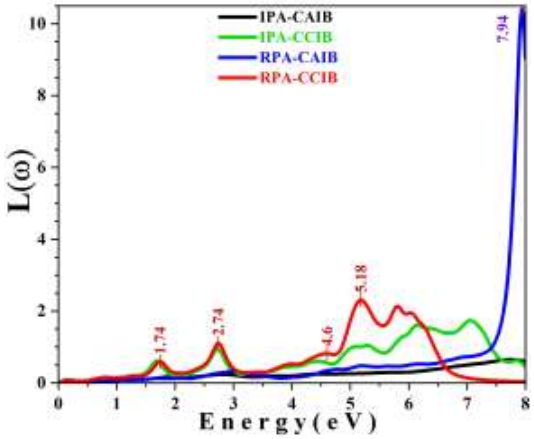
بیشینه‌های تابع اتلاف، به ترتیب در انرژی‌های ۲/۸۲، ٤/۳۹، ٥/٦۲ و ۷/۷۱ الکترون رخ داده است که تشدید پلاسمایی را در انرژی‌های کم نشان می‌دهند.

برای ترکیب *CCI B*: بیشترین جذب در انرژی ۲/٤۸ الکترون ولت، محدوده رنگ سبز با طول موج تقریبا ۵۰۰ نانومتر در ناحیه مرئی دارد. بیشینه‌های ضریب بازتاب، ۰/٦۸، ۱/۱۸، ۱/٥، ۲/٥۲، ۳/۷۸، ٤/۲٤، ٥/۸ و ۷/۰٤ الکترون ولت هستند. همچنین بیشینه‌های تابع

اتلاف، به ترتیب در انرژی‌های ۲/۱،۷۲/۶۸، ٤/٤٦، ٥/٣، ٦/١٤ و ٧/٠٦ الکترون ولت رخ داده‌است.



شکل ۳: رفتار ضریب بازتاب برحسب انرژی وردی



شکل ٤: رفتار تابع اتلاف $L(\omega)$ بر حسب انرژی موج فرودی (انرژی مربوط به بیشینه‌های اصلی مشخص شده است.)

برای اینکه یک جاذب نور خورشید حداقل هشتاد درصد انرژی تابشی را در عمق کمتر از یک میکرومتر جذب کند، ضریب جذب باید بیشتر از $۱\times۱۰^{٤}\ cm^{-۱}$ باشد، که برای ترکیبهای حاضر این شرط به خوبی برقرار است. بنابراین پارامتر مهمی که برای ساخت سلول‌های خورشیدی بسیارحائز اهمیت است، ضریب جذب است. ضمنا مقادیر کم پارامتر بازتاب و اتلاف برای هر دو ترکیب در نواحی مادون قرمز، مرئی و فرابنفش نشان دهنده کاربرد بالقوه این ترکیبها در دستگاههای اپتوالکترونیک است.

نتیجه گیری

قله‌های بدست آمده در طیف جذبی و مقادیر کم تابع اتلاف در ناحیه مادون قرمز و مرئی برای ترکیب CCIB و در ناحیه مرئی برای CAIB، نشانگر کاربرد این مواد در سلولهای خورشیدی است. مقدار قابل توجه کمیت جذب در انرژی‌های بالا نیز کاربرد این ساختارها در آشکارسازها را نشان می‌دهد. مقدار متوسط ضریب بازتاب در محدوده مادون قرمز، مرئی و فرابنفش برای هر دو ترکیب حدود ۱۵ درصد است، که اهمیت این ترکیبها در ساخت سلولهای خورشدی را نشان می‌دهد.

مرجع‌ها

[۱] A. Soni, K. C. Bhamu, J. Sahariya; “Investigating effect of strain on electronic and optical properties of lead free double perovskite $Cs_2AgInCl_6$ solar cell compound: a first principle calculation” J Alloys Compd **817** (2020) 152758.
[۲] L. Zhang, H. Li, K. Zhang, W. Li, C. Zuo, G. O. Odunmbaku, J. Chen, C. Chen, L. Zhang, R. Li, Y. Gao; “ Major strategies for improving the performance of perovskite solar cells”. iEnergy **2** (2023) 172-199.
[۳] M Fox, “*Optical properties of solids*”,Oxf. Univ. Press (2010).
[۴] C Ambrosch-Draxl and J O Sofo, *Computer physics Communications* **175** (2006) 1-14.
[۵] X Gonze, et al., *Comp. Mater. Sci.* **25** (2002) 478-492.
[۶] W Kohn and L J Sham, *Phy. Rev.* **140** (1965) A1133.
[۷] X G Zhao, et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **139** (2017) 6718-6725.
[۸] J Breternitz, et al., *J. Phys. Energy*, **1** (2019) 025003.
[۹] Y Liu, et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, **14** (2023) 3000-3006.

اثرات اکسیتونی در طیف جذب اشعه ایکس در نزدیکی ساختار لبه‌ی کالکوژنید تک‌لایه‌ی $BiGaSe_3$

حامد دریکوند؛ ریحان نجاتی‌پور*؛ مهرداد دادستانی

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم‌آباد، ایران

چکیده

در این پژوهش، ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و طیف جذب اشعه ایکس در نزدیکی ساختار لبه (XANES) کالکوژنید تک‌لایه $BiGaSe_3$ با استفاده از روش‌های مبتنی بر نظریه‌ی اختلال بس‌ذره‌ای (MBPT) مورد بررسی قرار گرفت. محاسبات در چارچوب روش موج تخت بهساخته خطی انجام شد، و ویژگی‌های برانگیختگی و طیف XANES به کمک هر دو تقریب تک‌ذره (IPA) و بس‌ذره (BSE) تعیین گردید. نتایج نشان داد که ساختار لایه‌ای $BiGaSe_3$ دارای گاف نواری غیرمستقیم است که مقدار آن با درنظر گرفتن برهمکنش اسپین–مدار از ۰/۶۸ eV به ۰/٦٤ eV کاهش می‌یابد. ارزیابی چگالی حالت‌های الکترونی نشان داد که نوارهای ظرفیت بیشتر از اوربیتال‌های p اتم Se و نوارهای رسانش از اوربیتال‌های p اتم Bi تشکیل شده‌اند. همچنین حضور اتم سنگین Bi موجب تقویت اثرات نسبیتی و شکافتگی حالت‌های p در نزدیکی تراز فرمی می‌شود. در مقایسه با تقریب IPA، حل دقیق BSE برای طیف‌های XANES لبه K اتم Se منجر به افزایش شدت بیشینه‌ها، تفکیک دقیق‌تر ساختار طیفی و جابجایی بیشینه‌ها به سمت انرژی کم‌تر می‌شود، که این امر ناشی از لحاظ کردن برهمکنش الکترون–حفره و تشکیل حالت‌های اکسیتونی مقید در ناحیه نزدیک لبه‌ی جذب می‌باشد.

واژه‌های کلیدی: *تک‌لایه‌ی $BiGaSe_3$، XANES، تابع دی‌الکتریک، معادله بت–سالپیتر (BSE)، اثرات اکسیتونی.*

Excitonic effects in the X-ray absorption near edge structure of $BiGaSe_3$ chalcogenide monolayer

Hamed Derikvand; Reihan Nejatipour*; Mehrdad Dadsetani

Department of Physics, Faculty of Sciences, Lorestan University, Khoramabad, Iran

Abstract

In this study, the structural, electronic, and X-ray absorption near edge structure (XANES) properties of the $BiGaSe_3$ chalcogenide monolayer were investigated using methods based on the many-body perturbation theory (MBPT). The calculations were performed within the framework of the linearized augmented plane wave method, and the excitonic properties and the XANES spectra were determined using both the independent-particle approximation (IPA) and Bethe-Salpeter equation (BSE) methods. The results showed that the $BiGaSe_3$ monolayer has an indirect band gap, which it is reduced from 0.68 eV to 0.64 eV by considering the spin-orbit coupling. The evaluation of the density of electronic states demonstrated that the valence bands are mainly composed of p orbitals of Se atoms and those of the conduction bands are consist of p orbitals of Bi atoms. Besides, the presence of the heavy Bi atom enhances relativistic effects and splitting of p states near the Fermi level. In comparison with the IPA, the accurate solving the BSE for the K-edge XANES spectra of the Se atom leads to the increase of peak intensities, more accurate resolution of the spectral structure, and a shift to the lower energies, which this is due to the consideration of electron-hole interaction and the formation of bound excitonic states in the region near the absorption edge.

***Keywords**: $BiGaSe_3$ monolayer, XANES, Dielectric function, Bethe-Salpeter equation (BSE), Excitonic effects.*

مقدمه

طیف‌سنجی جذب اشعه ایکس در نزدیکی ساختار لبه (XANES) یکی از ابزارهای قدرتمند برای بررسی ساختار الکترونی و برهمکنش‌های موضعی در مواد است. این روش به‌ویژه در مواد کم‌بعد، که در آن‌ها اثرات کوانتومی و برهمکنش‌های الکترون–حفره‌ای برجسته می‌شود، اهمیت ویژه‌ای دارد. از بررسی

جذب نور توسط الکترون‌های ترازهای مغزه‌ی اتم‌ها در بلور، می‌توان به اطلاعاتی شامل خواص ساختاری، نوع پیوندها، و نیز ویژگی‌های الکترونی شامل چگالی حالات الکترونی اشغال‌نشده دست یافت.

در سال‌های اخیر، کالکوژنیدهای دوبعدی به دلیل خواص نوری و الکترونی منحصربه‌فرد، توجه گسترده‌ای را در حوزه‌های اپتوالکترونیک و نانوفناوری به خود جلب کرده‌اند [۱]. در این میان، ترکیبات نوظهور مبتنی بر عناصر سنگین مانند بیسموت، به دلیل برهمکنش قوی اسپین–مدار و ساختار الکترونی مطلوب، بستری مناسب برای مشاهده پدیده‌های برانگیختگی پیچیده فراهم می‌کنند [۲]. ترکیب دوبعدی $BiGaSe_3$ به عنوان یک کالکوژنید تک‌لایه جدید، می‌تواند ویژگی‌های جالبی از جمله گاف انرژی کم، پاسخ نوری قوی و اثرات اکسیتونی (جفت‌شدگی الکترون–حفره) برجسته از خود نشان دهد که مطالعه آن را از دیدگاه نظری و کاربردی ضروری می‌سازد.

در محاسبه طیف XANES، درنظر گرفتن اثرات اکسیتونی نقش کلیدی در کاوش دقیق ویژگی‌های طیفی دارد. روش‌های مبتنی بر نظریه‌ی تابعی چگالی در تقریب‌های ذره‌مستقل (IPA) قادر به توصیف کامل برهمکنش‌های الکترون–حفره نیستند. در مقابل، حل معادله بت–سالپیتر (BSE) به عنوان یک چارچوب بس‌ذره‌ای، امکان لحاظ کردن این برهمکنش‌ها و در نتیجه بررسی دقیق‌تر طیف‌های جذب را فراهم می‌کند [۳].

در این پژوهش، ابتدا ویژگی‌های ساختاری و الکترونی کالکوژنید تک‌لایه $BiGaSe_3$ مشخصه‌یابی می‌شود و سپس طیف XANES آن مورد بررسی قرار می‌گیرد. محاسبات در دو سطح تقریب، شامل IPA و حل کامل معادله BSE انجام می‌شود و نتایج با یکدیگر مقایسه می‌شوند. هدف اصلی، بررسی نقش اثرات اکسیتونی در شکل‌گیری ساختار طیفی و ارائه درکی دقیق‌تر از خواص الکترونی این ماده‌ی نوظهور است.

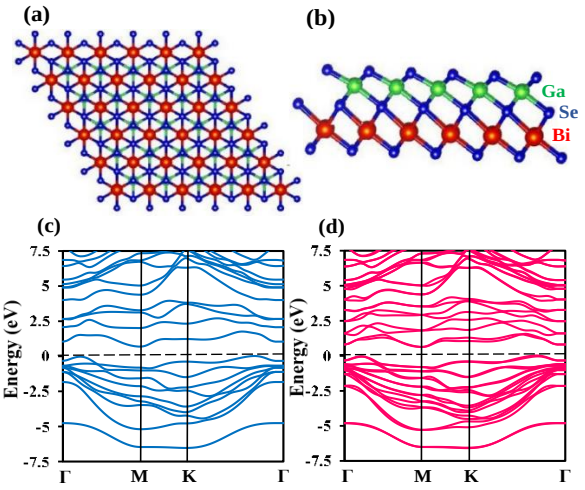
روش محاسبات

در این مطالعه، خواص حالت پایه شامل ویژگی‌های ساختاری، ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و حل معادلات کان–شم به کمک روش موج تخت بهساخته خطی (LAPW) با پتانسیل کامل محاسبه گردید [٤]. در ارزیابی ویژگی‌های برانگیختگی و حل BSE برای حصول طیف XANES، از بسته‌ی تمام‌الکترونی *exciting* بهره بردیم [۵]. انرژی تبادلی–همبستگی از تقریب شیب تعمیم یافته با تابعی پردو و همکاران (GGA-PBEsoL) محاسبه شد [٦]. ابعاد فضای وارون برابر با ۱×۲۰×۲۰ و ۱×۱۲×۱۲ به ترتیب برای حالات پایه و برانگیخته منجر به همگرایی نتایج شد. همچنین به منظور اطمینان از جلوگیری از برهمکنش بین لایه‌ها، یک ناحیه ۲۰ آنگستورمی خلأ بین آن‌ها تنظیم شد.

نتایج و بحث

ویژگی‌های ساختاری و الکترونی

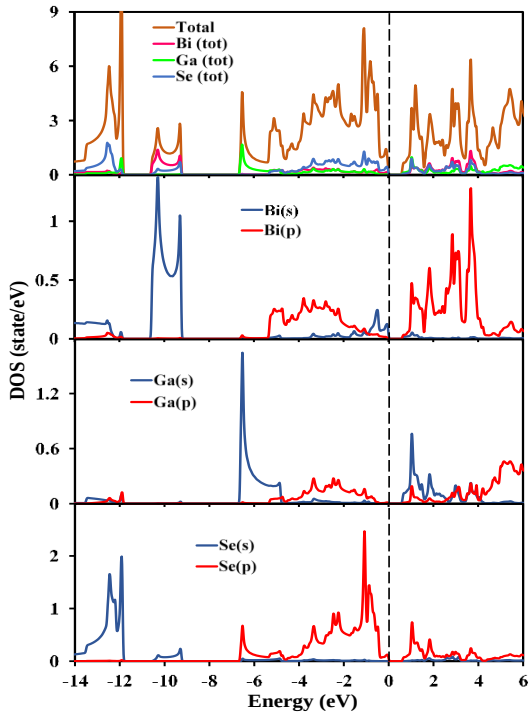
همانطور که در شکل ۱–a مشاهده می‌شود، کالکوژنید تک‌لایه $BiGaSe_3$ دارای ساختار بلوری شش‌گوشی با گروه فضایی P3m1 (۱۵٦) است. پارامتر شبکه درون صفحه‌ای بدست آمده برابر با ۳/۸۸۷۵ آنگستروم می‌باشد.



شکل ۱. ساختار بلوری تک‌لایه‌ی $BiGaSe_3$ از نمای (a) بالا و (b) کنار؛ ساختار نواری $BiGaSe_3$ بدون (c) و با (d) در نظر گرفتن برهمکنش اسپین–مدار.

بررسی نمای جانبی این ساختار لایه‌ای نشان می‌دهد که از پنج زیرلایه اتمی با توالی Se-Bi-Se-Ga-Se در راستای محور *c*

بلوری تشکیل شده است (شکل ۱–b). قرارگیری اتم‌های Ga و Bi بین لایه‌های اتمی Se بیانگر وجود پیوندهای کووالانسی قوی درون لایه‌ای است که پایداری ساختار را تضمین می‌کند. همچنین وجود اتم سنگین Bi در ساختار، می‌تواند نقش مهمی در تقویت اثرات نسبیتی مانند برهمکنش اسپین–مدار (SOC) و درنتیجه اصلاح ساختار نواری ایفا کند. در همین راستا محاسبات خواص الکترونی با و بدون در نظر گرفتن اثر SOC انجام شد. نتایج نشان می‌دهد که تک‌لایه $BiGaSe_3$ دارای گاف نواری غیر مستقیم است که مقدار آن بدون و با لحاظ اثر SOC به ترتیب برابر با ۰/۶۸ eV و ۰/۶٤ eV می‌باشد (شکل ۱–c، و d). بیشینه‌ی نوار ظرفیت در موقعیتی بین نقاط K و Γ، و کمینه‌ی نوار رسانش در M قرار دارد. شایان ذکر است که محاسبات پیشین از این ترکیبات بر پایه تقریب HSE06، گاف نواری غیرمستقیم در محدوده ۱/٦–۱ eV گزارش کرده‌اند [۷–۸]. چگالی حالت‌های کلی و جزئی نشان می‌دهد که نوارهای ظرفیت زیر تراز فرمی (تا ٦ eV–) عمدتاً از اوربیتال‌های p اتم Se تشکیل شده‌اند، در حالی که اوربیتال‌های s و p اتم Bi و p اتم Ga سهم کمتری دارند (شکل ۲). نوارهای انرژی در بازه ۱۰ eV– تا ۱٤ eV– شامل اوربیتال‌های s اتم Se و Bi می‌باشد. نوارهای رسانش غالباً ماهیت اوربیتالی p دارند و سهم اصلی آن‌ها مربوط به اتم Bi است. حضور پررنگ اوربیتال‌های p اتم Bi در نزدیکی لبه‌ی رسانش بیانگر نقش کلیدی این عنصر در تعیین خواص الکترونی سیستم می‌باشد. قابل ذکر است که حالت s عنصر Ga نیز نقش کمتری دارد. با توجه به جرم اتمی بالای بیسموت (۲۰۸/۹۸ u)، برهمکنش اسپین–مدار باعث شکافتگی حالت‌های p در نوار رسانش شده و درنتیجه منجر به اصلاح تبهگنی انرژی نوارهای بالای تراز فرمی می‌شود، همانطور که در مقایسه بین ساختار نواری بدون و با درنظر گرفتن اثر SOC مشهود است (شکل ۱–c و d). بنابراین برخی از این ترازها به سمت انرژی‌های پایین‌تر جابجا می‌شوند و این منجر به کاهش گاف نواری الکترونی می‌گردد. در مقابل، ترکیبی از اوربیتال‌های p عناصر Se و تا حدی Ga سهم بسیار کمتری در نزدیکی تراز فرمی دارند و عمدتاً در انرژی‌های بالاتر (بیشتر از ٤ eV) ظاهر می‌شوند، بنابراین نقش آن‌ها در تعیین گاف نواری ناچیز است.

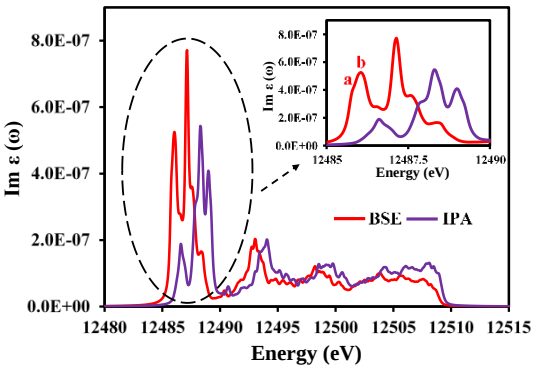


شکل ۲. چگالی حالت‌های الکترونی کلی و جزئی برای تک‌لایه‌ی $BiGaSe_3$.

طیف XANES

شکل ۳ طیف‌های XANES محاسبه شده برای لبه‌ی K (اوربیتال 1s) اتم Se از تک‌لایه $BiGaSe_3$ در دو تقریب IPA و BSE را نشان می‌دهد. تفاوت‌های مهمی را در ناحیه‌ی نزدیک لبه جذب (به ویژه در تصویر بزرگ‌نمایی شده درون شکل ۳) می‌توان مشاهده کرد. در ناحیه‌ی نزدیک لبه، طیف جذب حاصل از تقریب BSE دارای شدت بیشتر و ساختار طیفی تفکیک‌شده‌تری است، در حالی که در تقریب IPA، طیف بصورت پهن‌تر و با تفکیک کمتر ظاهر شده است. این تفاوت آشکار ناشی از لحاظ کردن برهمکنش الکترون–حفره در چارچوب BSE است. درواقع در لبه‌ی K، گذار اصلی از حالت هسته‌ای 1s اتم Se به نوارهای رسانش با حالت p صورت می‌گیرد. در تقریب IPA این حالت‌ها بدون لحاظ اثرات اکسیتونی اعمال می‌شود، درنتیجه گذارهای مجاز بصورت گسترده‌تر و با همپوشانی ظاهر می‌شوند و طیف دارای بیشینه‌های پهن‌تر و شدت طیفی کمتر است. در مقابل در تقریب BSE، جفت‌شدگی الکترون–حفره و تشکیل حالت‌های اکسیتونی مقید منجر به شکافتگی گذارهای الکترونی، افزایش

تعداد بیشینه‌های مجزا و تقویت شدت آن‌ها در ناحیه‌ی نزدیک لبه شده است.



شکل ۳. طیف‌های XANES لبه K اتم Se بدست آمده از نمونه تک‌لایه‌ی $BiGaSe_3$ در دو تقریب IPA و BSE.

علاوه بر این، مقایسه موقعیت بیشینه‌ها نشان می‌دهد که طیف ناشی از BSE نسبت به IPA دچار یک جابجایی واضح به سمت انرژی‌های کم‌تر شده است. این رفتار می‌تواند ناشی از انرژی بستگی اکسیتون‌ها باشد که انرژی گذارهای الکترونی را کاهش می‌دهد. در همین راستا، بررسی دقیق طیف XANES حاصل از حل معادله BSE حاکی از آن است که در ناحیه نزدیک لبه، پیش از اولین ساختار طیفی در تقریب IPA، دو ویژگی اکسیتونی مجزا ظاهر می‌شوند. نخستین ویژگی به صورت یک شانه (به نام a در تصویر بزرگ‌نمایی شده درون شکل ۳) در انرژی پایین‌تر مشاهده می‌شود که بیانگر تشکیل اولین حالت اکسیتونی مقید در سیستم است. اختلاف انرژی این حالت با آستانه جذب در تقریب IPA، انرژی بستگی اکسیتونی معادل ۴۰۷ meV دارد، که بیانگر برهمکنش قوی الکترون–حفره در ساختار ماده می‌باشد. این مقدار همخوانی قابل قبولی با نتایج گزارش شده از سایر کالکوژنیدهای لایه‌ای دارد [۹–۱۰]. علاوه بر این، اختلاف انرژی اولین بیشینه‌ی اکسیتونی b نیز نسبت به اولین ساختار طیفی IPA برابر ۱۲۹ meV محاسبه شد. در کل، جفت‌شدگی الکترون–حفره منجر به تشکیل ترازهای اکسیتونی در ناحیه‌ی گاف الکترونی (نزدیک به لبه‌ی نوار رسانش) شده است که باعث پایین آمدن انرژی لازم برای برانگیختگی ناشی از تابش پرتو ایکس در تک‌لایه‌ی $BiGaSe_3$ می‌شود.

نتیجه‌گیری

نتایج نشان داد که ترکیب تک‌لایه‌ی $BiGaSe_3$ دارای ساختار شش‌گوشی با گاف نواری غیرمستقیم است. درنظر گرفتن برهمکنش اسپین–مدار موجب کاهش گاف نواری و شکستن تبهگنی انرژی نوارهای نزدیک تراز فرمی شد که این رفتار عمدتاً به حضور اوربیتال‌های p اتم سنگین Bi مربوط می‌شود. بررسی طیف‌های XANES لبه K اتم Se در دو تقریب تک‌ذره‌ای و بس‌ذره‌ای آشکار کرد که اعمال اثرات اکسیتونی منجر به افزایش شدت، تفکیک بالاتر و در عین حال جابجایی بیشینه‌های طیفی به سمت انرژی‌های پایین‌تر می‌شود. در مجموع این مطالعه نقش مهم برهمکنش الکترون–حفره در تعیین پاسخ طیفی ماده را برجسته می‌کند.

مرجع‌ها

[1] R. Nejatipour, M. Dadsetani, Core level spectroscopy of Janus zirconium and hafnium dichalcogenide monolayers at the sulfur K and $L_{2,3}$ edges, including the excitonic effects. *Radiation Physics and Chemistry*. **229** (2025) 112478.

[2] Ben Abdallah, H., Ouerghui, W. Spin–orbit coupling effect on electronic, linear and nonlinear optical properties of Bi_2S_3 and the ternary bismuth sulfide $Bi_2S_{2.75}Se_{0.25}$: Ab-initio calculations. *Optical and Quantum Electronics*. **54** (2022) 1-18.

[3] G. Onida, et al. Electronic excitations: density-functional versus many-body Green's-function approaches. *Reviews of Modern Physics*. **74** (2002) 601.

[4] D.J. Singh, L. Nordstrom, Planewaves, *Pseudopotentials, and the LAPW method*. Springer Science & Business Media, 2nd edition, (2006) 134.

[5] A. Gulans, et al. Exciting: a full-potential all-electron package implementing density-functional theory and manybody perturbation theory. *Journal of Physics: Condensed Matter*. **26** (2014) 363202.

[6] J. P. Perdew, et al. Generalized Gradient Approximation Made Simple. Physical Review Letters. **78** (1997) 1396.

[7] L. Zhan, et al. 2D $XBiSe_3$ (X= As, Sb) monolayers with high anisotropic mobility and enhanced optical absorption in visible light region. *Applied Surface Science*, 530, (2020) 147137.

[8] L. Zhan, et al. 2D $XBiSe_3$ (X= Ga, In, Tl) monolayers with high carrier mobility and enhanced visible-light absorption. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 264, (2022) 120309.

[9] A. Ramasubramaniam. Large excitonic effects in monolayers of molybdenum and tungsten dichalcogenides. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 86(11), (2012) 115409.

[10] L. Zhan, et al. Structure-performance driven discovery of efficient Bi_2S_3 monolayer photocatalysts for solar water splitting. *Fuel*, 406, (2026) 137095.

تشدیدهای شبکه‌ای سطحی پلاسمونی با پهنای بسیار باریک در آرایه‌ی دایمرهای نانونیمکره‌ی طلا

آذریان، عباس[۱]؛ نادمی، مریم[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم ، قم

چکیده

تشدیدهای شبکه‌ای سطحی پلاسمونی که توسط آرایه‌ای از نانوذرات فلزی پشتیبانی می‌شوند، ویژگی‌های قابل‌توجهی نظیر پهنای طیفی بسیار باریک و میدان‌های نزدیک به‌شدت تقویت‌شده دارند و از این‌رو برای کاربردهای متنوعی جذاب هستند. در این پژوهش تشدیدهای شبکه‌ای سطحی با کیفیت بالا را گزارش می‌کنیم که توسط آرایه‌ای دوبعدی ازدایمرهای نانونیمکره‌ای طلا در محیط دی الکتریک متقارن پشتیبانی می‌شوند. این تشدیدها که تحت تابش نرمال برانگیخته می‌شوند، در حالتی‌که فاصله‌ی شکاف بین دو دایمر ۵ نانومتر باشد می‌توانند پهنای طیف بسیار باریکی در حدود ۱/۴ نانومتر در طول‌موج ۹۰۲/۹ نانومتر، داشته باشند. این مقدار با عامل کیفیتی بالا برابر با ۶۴۵ همراه است. بیشینه‌ی افزایش میدان الکتریکی آرایه می‌تواند به ۱۹۶ برابر برسد که حدود ۸ برابر بزرگتر از دایمر منفرد است.

واژه های کلیدی: *پلاسمونیک، آرایه‌ی نانوذرات فلزی، تشدیدهای شبکه‌ای سطحی پلاسمونی، ضریب کیفیت .*

Plasmonic Surface Lattice Resonances with Ultra-Narrow Linewidths in Arrays of Gold Nanohemisphere Dimers

Azariyan, Abbas[1]; Nademy, Maryam[1]

[1] *Department of Physics, University of Qom, Qom*

Abstract

Plasmonic surface lattice resonances supported by metal nanoparticle arrays have a range of appealing characteristics such as extremely narrow linewidths and greatly enhanced near fields. In this work, we report high-quality SLRs supported by two-dimensional arrays of gold nanodimer hemispheres embedded in a symmetric dielectric environment. These SLRs, excited under normal incidence, exhibit ultra narrow resonance linewidth of 1.4 nm at a wavelength 902.9 nm when the gap distance between the two nanoparticles in each dimer is 5 nm .This corresponds to an high quality factor of 645. the maximum electric-field enhancement in the array can reach a factor of 196, which is approximately eight times greater than the enhancement achieved in a single dimmer.

Keywords*: Plasmonics, Metallic nanoparticle arrays, Surface Plasmon Lattice Resonances, Quality factor*

مقدمه

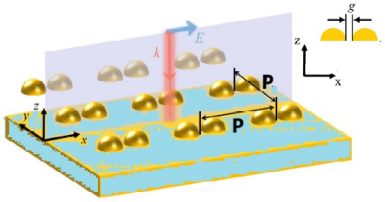
برهم‌کنش میان تشدیدهای پلاسمون سطحی موضعی[۱] مربوط به نانوذرات و نور پراکنده‌شده توسط نظم‌های پراش آرایه تشدیدهای شبکه‌ای سطحی[۲] را ایجاد می‌کنند، که مد پلاسمون شبکه‌ای نیز نامیده می‌شوند. مد پلاسمون شبکه‌ای دارای مزایای چشمگیری از جمله تقویت شدید میدان در حجم‌های بزرگ با طول‌عمرهای طولانی، پهنای طیفی باریک، قابلیت تنظیم‌پذیری طول‌موج در گستره‌ی وسیع هستند؛ که این ویژگی‌ها آن‌ها را برای کاربردهای متنوعی مناسب ساخته است. برای بسیاری از این کاربردها، ضریب کیفیت مد پلاسمون شبکه‌ای که به نسبت انرژی ذخیره‌شده به انرژی تلف‌شده در یک نوسانگر مربوط است و می‌توان آن را به‌صورت نسبت طول‌موج تشدید λ_{res} به پهنای طیفی $\Delta\lambda$ یعنی $Q=\frac{\lambda_{res}}{\Delta\lambda}$ تعریف کرد، نقش حیاتی در عملکرد ایفا می‌کند[۱]. در گزارش‌های تجربی اولیه [۲,۳]، ضریب کیفیت این مدها کمتر از ۱۰۰ گزارش شد. اگرچه این مقدار ده برابر بیشتر از مقادیر مربوط به مد پلاسمون موضعی رایج نانوذرات منفرد طلا است، تلاش‌های

چشمگیری برای بهبود بیشتر ضریب کیفیت تشدیدهای شبکه‌ای سطحی پلاسمونی صورت گرفته و راهکارهای مختلفی در طول زمان بررسی شده‌اند [۱].

در آزمایشگاه، فراهم کردن شرایط تابش نرمال ساده‌تر است، از طرفی پن و همکاران [۴] نشان دادند ذرات سلولی با قابلیت تقویت میدان قوی باعث دستیابی به میدان الکتریکی قوی در مد پلاسمون شبکه‌ای متناظر می‌شود و در برخی موارد ضریب کیفیت بالاتر را تولید می‌کند. بنابراین دایمرهای نانوذرات گزینه‌ی مناسبی به عنوان سلول واحد آرایه با قابلیت تقویت میدان هستند زیرا با ایجاد نقاط داغ در شکاف بین ذرات، تقویت میدان بیشتری نسبت به نانوذرات منفرد ایجاد می‌کنند. انتخاب محیط متقارن برای برانگیختن مدهای پلاسمون شبکه‌ای در تابش نرمال ضروری است. وجود یک زیرلایه می‌تواند پراش‌ها را سرکوب کند[۱,۲]. بدین ترتیب در این پژوهش شرایط دستیابی به ضریب کیفیت بالا را با تابش نرمال به آرایه‌ی دوبعدی مربعی با سلول واحدی شامل دایمر نانونیمکره‌ها در محیط دی‌الکتریک متقارن بررسی می‌کنیم. نشان خواهیم داد که تشدیدهای شبکه‌ای پلاسمونی این نانودایمرها می‌توانند پهنای طیفی بسیار باریکی در حدود ۱/۴نانومتر در طول‌موج ۹۰۲/۹ نانومتر داشته باشند. این مقدار متناظر با عامل کیفیت بسیار بالای ۶۴۵ است. قابلیت تنظیم طول‌موج تشدید و ضریب کیفیت از طریق کنترل فاصله‌ی شکاف بین دایمرنانونیم‌کره‌ها، مورد بررسی قرار خواهند گرفت. همچنین طیف‌های عبور، ویژگی‌های میدان‌نزدیک و توزیع بار الکتریکی نیز مورد مطالعه قرار خواهند گرفت.

شبیه سازی

شکل ۱ آرایه‌ای دوبعدی از دایمرهای نانونیم‌کره‌های طلایی با اندازه‌ی شکاف g و دوره‌ی شبکه‌ای P را در راستای محورهای x و y نشان می‌دهد. این ساختار که در محیط دی‌الکتریک متقارن با ضریب شکست ۱/۵ جای‌گذاری شده، توسط موج تختی عمود بر صفحه‌ی آرایه و قطبش TM در صفحه‌ی x-z تابیده می‌شود. در این مقاله، شبیه‌سازی‌های الکترومغناطیسی بر اساس روش اختلاف‌محدود در حوزه زمان انجام شده‌اند. خواص نوری طلا از داده‌های گزارش‌شده توسط جانسون و کریستی [۵] به دست آمده است.



شکل ۱ : طرح‌واره‌ی آرایه‌ی دایمر نانونیمکره‌ها با دوره تناوبp

مبانی نظری و نتایج

وقتی نانوذرات فلزی به‌صورت آرایه‌ای مرتب شوند و تحت تابش نور قرار بگیرند، جفت شدن حالت‌های پلاسمون موضعی ذرات و مرتبه‌های پراش درون صفحه‌ای که به ناهنجاری‌های ریلی شناخته می‌شوند، منجر به تشکیل دو مد پلاریتون می‌شود. پلاریتون انرژی پایین‌تر، اندکی از طول موج ناهنجاری قرمزتر می‌شود. بنابراین عمدتاً دارای ماهیت فوتونی با پهنای طیفی باریک است و افت طیفی تیز و شبیه به خطوط فانو در طیف عبور خواهد داشت که معمولاً به عنوان تشدید شبکه‌ای سطحی شناخته می‌شود. مد پلاریتون با انرژی بالاتر عمدتاً دارای ماهیت پلاسمونی موضعی است و تشخیص آن از خواص نانوذرات منفرد دشوار است. بنابراین همچنان به شناسایی این مد به عنوان مد پلاسمون موضعی آرایه ادامه خواهیم داد. در بسیاری از موارد، ناهنجاری ریلی خود را در طیف عبور آرایه به صورت یک پیک ناگهانی درست در سمت آبی افت تیز تشدید شبکه ای سطحی نشان می‌دهد[۶].

طول موج ناهنجاری ریلی در مرتبه‌ی پراش i , j در تابش عمود برای یک آرایه‌ی مستطیلی از رابطه‌ی زیر بدست می‌آید[۷]:

$$\lambda_{i,j}^{RA} = \frac{n}{\sqrt{\frac{i^2}{p_x^2} + \frac{j^2}{p_y^2}}} \qquad (۱)$$

n ضریب شکست محیط، p_x, p_y دوره تناوب در جهت x , y است که به دلیل مربعی بودن آرایه‌ی مورد بررسی ما، هر دو را برابر p فرض می‌کنیم.

به منظور بررسی تأثیر اندازه‌ی شکاف بین دو دایمر بر مد پلاسمون شبکه‌ای، طول موج مد پلاسمون موضعی دایمرها برای اندازه‌ی شکاف‌های متفاوت از طریق تنظیم شعاع نانوذرات طوری طراحی شده‌اند که یکسان باشند. طول موج تشدید مد پلاسمون موضعی تمام ذرات سلولی روی $\lambda_{LSPR}=770nm$ تحریک و تنظیم شده‌اند. در جدول۱ شعاع نیمکره‌های ذرات سلولی به ازای پنج فاصله‌ی شکاف مشخص که این طول موج را دارند، آمده است و در شکل۲ طیف پراکندگی آن‌ها رسم شده است. برای اندازه‌ی شکاف بیشتر دایمرها، نیمکره‌هایی با شعاع بزرگتر لازم هست تا طول موج تشدید پلاسمون ذرات سلولی روی ۷۷۰ نانومتر تنظیم شود. با توجه به شکل ۲ با افزایش شعاع نیمکره‌ها، ارتفاع و پهنای طیفی سطح مقطع پراکندگی ذرات سلولی افزایش می‌یابد. جفت‌شدگی قوی میدان دور بین نانوذرات و دستیابی به ضرایب کیفیت بالا در شرایطی رخ می‌دهد که λ_{RA} در ناحیه‌ی قرمزتر از λ_{LSPR} نانوذرات سلولی باشد [۶]. با توجه به این مطلب دوره تناوب تمام نانوآرایه‌های شبیه‌سازی شده در این پژوهش را روی $p=600nm$ تنظیم کردیم که با استفاده از رابطه‌ی (۱)، $\lambda_{1,0}^{RA}=900nm$ بدست می‌آید.

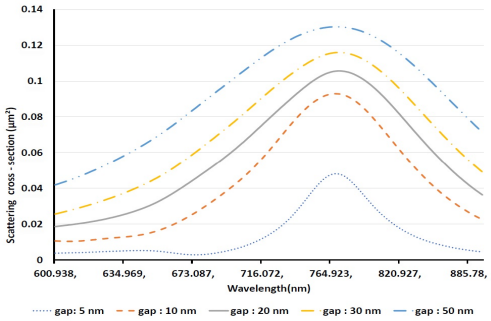
در شکل ۳ مد پلاریتون LSPR با انرژی بالاتر و مد پلاریتون SLR باریک با انرژی پایین‌تر و دو طول موج مربوط به ناهنجاری ریلی مشخص است. شکل ۳ نشان می‌دهد با کاهش اندازه‌ی شکاف بین دایمرها ضریب کیفیت مدهای پلاسمون شبکه‌ای افزایش می‌یابد. در اندازه‌ی شکاف ۵ نانومتر، بالاترین ضریب کیفیت عدد ۶۴۵ بدست می‌آید که جزء ضرایب کیفیت بالاست.

جدول۱ : شعاع نیمکره‌ها به ازای پنج فاصله‌ی شکاف مشخص دایمرها

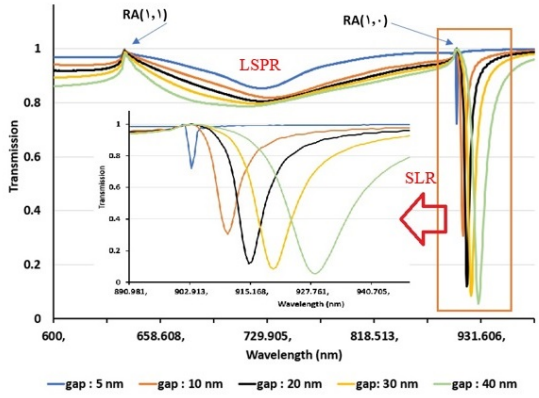
اندازه شکاف (نانومتر)	۵	۱۰	۲۰	۳۰	۴۰
شعاع نیمکره‌ها (نانومتر)	۳۴	۴۵٫۶	۵۱٫۳	۵۵٫۷	۶۱٫۸

جدول۲ : مشخصات مد پلاسمون شبکه‌ای

اندازه شکاف دایمر (نانومتر)	۵	۱۰	۲۰	۳۰	۴۰
طول موج تشدید (نانومتر)	۹۰۲٫۹	۹۱۰٫۲	۹۱۴٫۵	۹۱۹٫۶	۹۲۷٫۸
پهنای طیف عبور (نانومتر)	۱٫۴	۵٫۵	۶٫۲	۹٫۶	۱۵٫۵
ضریب کیفیت	۶۴۵	۱۶۵٫۵	۱۴۷٫۵	۹۵٫۸	۵۹٫۸

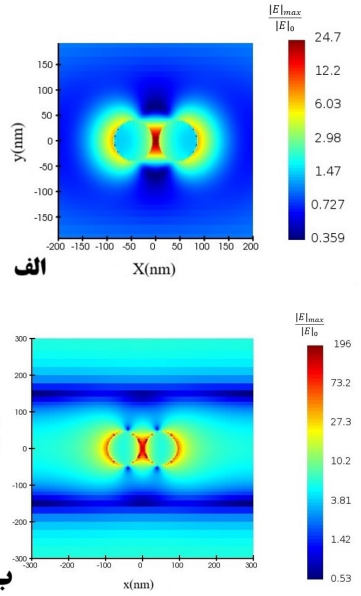


شکل۲ : طیف پراکندگی دایمرنانونیمکره‌ها به ازای پنج فاصله‌ی شکاف

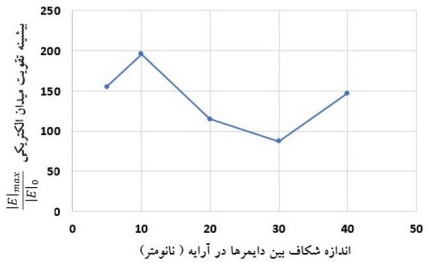


شکل۳ : طیف عبورآرایه‌ی دایمرنانونیمکره‌ها به ازای پنج فاصله‌ی شکاف

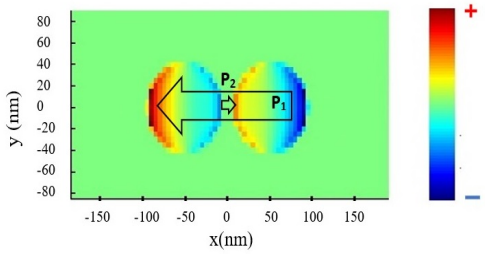
در شکل ۴ الف مربوط به دایمر منفرد، افزایش میدان الکتریکی عمدتاً در مجاورت نیمکره‌ها متمرکز می‌شود و بیشینه‌ی آن در شکاف دایمر است. شکل ۴ ب مربوط به آرایه، برانگیختیگی همزمان نانوذرات فلزی و همچنین شکل گیری یک موج ایستاده‌ی مماسی (بی‌نظمی ریلی) را نشان می‌دهد. نکته‌ی قابل توجه این است که در شکل ۴ ب علاوه بر ناحیه‌ی شکاف بین دایمرها در خارج شکاف هم افزایش میدان الکتریکی بصورت بیشینه است و محدوده‌ی بیشتری نسبت به دایمر منفرد شامل افزایش میدان بیشینه می‌شود. علاوه بر آن بیشینه‌ی افزایش میدان الکتریکی در آرایه می تواند به ۱۹۶ برابر برسد که حدود ۸ برابر بزرگتر از دایمر منفرد است. شکل ۶ نشان می‌دهد بیشترین افزایش میدان مربوط به آرایه با شکاف دایمری ۱۰ نانومتری است در حالیکه بیشترین ضریب کیفیت مربوط به این فاصله نیست.



شکل ۵ : توزیع میدان الکتریکی نزدیک با فاصله‌ی شکاف ۱۰ نانومتر الف- دایمر نانونیمکره منفرد ب- آرایه‌ی دایمر نانونیمکره‌ای



شکل ۶ : بیشینه‌ی تقویت میدان الکتریکی آرایه بر حسب اندازه‌ی شکاف دایمرها



شکل ۷ : توزیع بار الکتریکی روی دایمر آرایه در طول موج مد پلاسمون شبکه‌ای برای اندازه‌ی شکاف ۱۰ نانومتر

همانطورکه در شکل ۷ دیده میشود الگوری توزیع بار الکتریکی روی دایمر آرایه به صورت ۲ دوقطبی است که در مجموع تشکیل یک چهارقطبی را میدهد، لذا میتوان مد پلاسمون شبکه‌ای را ناشی از برهم کنش یک چهار قطبی در نظرگرفت.

نتیجه گیری

تشدیدهای شبکه‌ای سطحی بسیار باریک را در آرایه‌ای دوبعدی از دایمر نانونیمکره‌های طلا که در محیط دی‌الکتریک متقارن تعبیه شده‌اند، تحت تابش نرمال تحریک کردیم. طول موج مد پلاسمون موضعی تمام ذرات سلولی روی ۷۷۰ نانومتر و دوره تناوب همه نانوآرایه‌ها روی ۶۰۰ نانومتر تنظیم شدند. با این شرایط توانستیم طول موج تشدید و ضریب کیفیت مد پلاسمون شبکه‌ای را با تغییر اندازه‌ی شکاف دایمرها تنظیم کنیم. با کاهش اندازه‌ی شکاف دایمرها ضریب کیفیت مد پلاسمون شبکه‌ای افزایش می‌یابد، که بیشترین آن مربوط به آرایه‌ای با اندازه‌ی شکاف ۵ نانومتری دایمرهاست که به مقدار ۶۴۵ می‌رسد. در حالیکه بیشینه‌ی تقویت میدان مربوط به آرایه‌ای با اندازه‌ی شکاف ۱۰ نانومتری دایمرهاست که به حدود ۱۹۶ برابر می‌رسد.

مرجع‌ها

[۱] V. G. Kravets, A. V. Kabashin, W. L. Barnes and A. N. Grigorenko ; “Plasmonic surface lattice resonances: a review of properties and applications”; *Chemical reviews* **118**, No. 12 (2018) 5912-5951.
[۲] B. Auguié and W. L. Barnes; “Collective resonances in gold nanoparticle arrays”; *Physical review letters* **101**, No. 14 (2008)143902.
[۳] Y. Chu, E. Schonbrun, T. Yang, K.B. Crozier; “Experimental observation of narrow surface plasmon resonances in gold nanoparticle arrays ”; *Applied Physics Letters* **93**, No.18 (2008).
[۴] H. Pan, J. Xue, Z. Pan, C. Ou, H. Dong, Z. Meng, J. Zhou; “Morphology engineering for high-Q plasmonic surface lattice resonances with large field enhancement”; *Photonics*, No. 5 (2023) 570.
[۵] P.B. Johnson, R.W. Christy; “Optical constants of the noble metals”; *Physical review B* **6**, No. 12 (1972) 4370.
[۶] D. Dey, G.C. Schatz; “Plasmonic surface lattice resonances in nanoparticle arrays”; *MRS Bulletin* **49**, No. 5 (2024) 421-430.
[۷] J. Liu, Z. Meng, J. Zhou; “High Electric Field Enhancement Induced by Modal Coupling for a Plasmonic Dimer Array on a Metallic Film.”; *Photonics*, No. 2 (2024) 183.

[۱] Localized Surface Plasmon Resonance (LSPR)
[۲] Surface Lattice Resonance (SLR)

بررسی متغیرهای هندسی مؤثر بر حسگری پلاسمونیک آرایه نانوذرات پوسته–هسته مبتنی بر آلیاژ گالیم

قدیری، منصوره؛ باقری، مسیح ؛ صاحب‌سرا، پیمان*

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

در این پژوهش، عملکرد حسگری آرایه‌ای از نانوذرات هسته–پوسته مبتنی بر آلیاژ گالیم–نقره با پوسته نقره به‌صورت عددی مورد بررسی قرار گرفت. شبیه‌سازی‌ها با استفاده از روش اجزای محدود در نرم‌افزار COMSOL Multiphysics انجام شد. خواص اپتیکی هسته آلیاژی با بهره‌گیری از مدل Bruggeman و ترکیب ۹۶٫۴ درصد گالیم و ۳٫۶ درصد نقره، تعیین گردید. اثر شعاع نانوذره، ضخامت پوسته و فاصله بین نانوذرات بر پاسخ اپتیکی و عملکرد حسگری ساختار بررسی شد. نتایج نشان داد که پارامترهای هندسی نقش مهمی در تنظیم پاسخ پلاسمونیکی و بهبود عملکرد حسگر دارند. بیشینه حساسیت و شاخص شایستگی به‌ترتیب برابر با ۱۰۰ nm/RIU و ۳٫۲۳ به دست آمد که بیانگر عملکرد مناسب ساختار پیشنهادی برای کاربردهای حسگری پلاسمونیکی است .

واژه های کلیدی: *حسگر پلاسمونیک، شبیه سازی عددی، آلیاژ فلزات مایع*

Study of the Effects of Geometrical Parameters on the Plasmonic Sensing Performance of Gallium-Alloy-Based Core–Shell Nanoparticle Arrays

Ghadiri, Mansoureh; Bagheri, Masih; Sahebsara, Peyman*

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

In this study, the sensing performance of an array of gallium–silver alloy-based core–shell nanoparticles with a silver shell was numerically investigated. The simulations were carried out using the finite element method (FEM) in COMSOL Multiphysics. The optical properties of the alloy core were determined using the Bruggeman effective medium model with a composition of 96.4% gallium and 3.6% silver. The effects of nanoparticle radius, shell thickness, and interparticle spacing on the optical response and sensing performance of the structure. The results demonstrated that geometrical parameters play a significant role in tuning the plasmonic response and enhancing the sensor performance. The maximum sensitivity and figure of merit were found to be 100 nm/RIU and 3.23, respectively, indicating the promising potential of the proposed structure for plasmonic sensing applications.

***Keywords**: Plasmonic sensor, numerical simulation, liquid metal alloy.*

PACS No. 80,81

مقدمه

با پیشرفت فناوری نانو، پلاسمونیک به عنوان یکی از شاخه‌های مهم فوتونیک توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده است [۱]. تشدید پلاسمون سطحی موضعی[1] در نانوذرات به دلیل توانایی آن‌ها در تقویت میدان الکتریکی، کاربردهای متنوعی در حوزه‌هایی نظیر تصویربرداری زیستی، فوتوکاتالیز و به‌ویژه حسگری اپتیکی یافته است [۲]. حساسیت بالا، پاسخ سریع و قابلیت کوچک‌سازی از جمله مهم‌ترین مزایای این حسگرها محسوب می‌شوند [۳]. اگرچه نانوذرات فلزی منفرد قابلیت ایجاد تشدید پلاسمون سطحی موضعی را دارند، آرایش آن‌ها به صورت ساختارهای تناوبی و آرایه‌ای می‌تواند منجر به برهم‌کنش‌های الکترومغناطیسی قوی‌تر شود [٤]. از سوی دیگر، نانوذرات هسته–پوسته به دلیل برخورداری از درجات آزادی بیشتر در طراحی، به

[1] Localized surface-plasmon resonance

عنوان بستری مناسب برای تنظیم دقیق پاسخ اپتیکی شناخته می‌شوند [۵].

در سال‌های اخیر، فلزات مایع و آلیاژهای مبتنی بر آن‌ها به عنوان نسل جدیدی از مواد پلاسمونیکی مورد توجه قرار گرفته‌اند [۷]. در میان این مواد، گالیم به دلیل ویژگی‌هایی نظیر نقطه ذوب پایین، پایداری شیمیایی مناسب و خواص اپتیکی مطلوب جایگاه ویژه‌ای یافته است [۷]. همچنین، امکان آلیاژسازی گالیم با سایر فلزات، رویکردی مؤثر برای تنظیم پاسخ پلاسمونیکی و دستیابی به ویژگی‌های نوری مطلوب‌تر فراهم می‌آورد. با وجود مطالعات گسترده بر روی نانوذرات متداول مبتنی بر طلا و نقره، بررسی ساختارهای پلاسمونیکی مبتنی بر آلیاژهای گالیم همچنان محدود است و بسیاری از جنبه‌های مرتبط با رفتار اپتیکی و قابلیت حسگری این مواد نیازمند مطالعه بیشتر هستند.

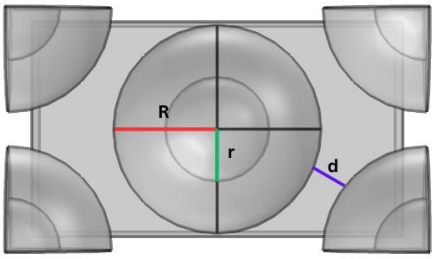
در این پژوهش، خواص اپتیکی و عملکرد حسگری یک آرایه تناوبی از نانوذرات هسته–پوسته مبتنی بر آلیاژ گالیم–نقره با استفاده از شبیه‌سازی عددی مورد بررسی قرار گرفته است. بدین منظور، هسته نانوذرات از آلیاژ Ga–Ag و پوسته آن‌ها از نقره خالص در نظر گرفته شده و پاسخ نوری ساختار در بازه نور مرئی با بهره‌گیری از روش المان محدود تحلیل شده است. تأثیر پارامترهای هندسی شامل شعاع هسته، ضخامت پوسته و فاصله بین نانوذرات بر طیف‌های جذب، عبور و بازتاب بررسی شده است. شاخص‌های عملکرد حسگری نیز مورد ارزیابی قرار گرفته است. نتایج این مطالعه می‌تواند در درک بهتر رفتار پلاسمونیکی آرایه‌های مبتنی بر آلیاژهای گالیم و طراحی حسگرهای اپتیکی با قابلیت تنظیم‌پذیری بالا و عملکرد بهبود یافته مؤثر باشد.

روش محاسباتی

در این پژوهش، تحلیل‌های عددی با استفاده از نرم‌افزار کامسول[۲] انجام شده است. این نرم‌افزار بر پایه روش اجزای محدود عمل کرده و امکان مدل‌سازی دقیق برهم‌کنش نور و ماده را در ساختارهای نانومقیاس فراهم می‌سازد. به دلیل توانایی بالای کامسول در حل معادلات ماکسول در هندسه‌های پیچیده، از آن برای بررسی پاسخ اپتیکی آرایه‌های نانوذرات هسته–پوسته استفاده شده است. برای تحلیل پاسخ الکترومغناطیسی، از ماژول Electromagnetic Waves, Frequency Domain استفاده شده است. این مدل بر پایه حل معادلات ماکسول در حوزه بسامد استوار است:

$$\nabla \times \mu_r^{-1}(\nabla \times \mathbf{E}) - k_0^2\left(\varepsilon_r - \frac{i\sigma}{\omega\varepsilon_0}\right)\mathbf{E} = 0$$

که در آن $\mathbf{E}$ میدان الکتریکی، μ_r تراوایی نسبی، ε_r گذردهی نسبی و k_0 عدد موج در خلأ است. این معادله امکان تحلیل دقیق توزیع میدان الکتریکی و برهم‌کنش نور با ساختارهای پلاسمونیکی را در حوزه بسامد فراهم می‌کند.



شکل ۱. شمای شبیه‌سازی نانوذرات که R شعاع، r شعاع هسته و d فاصله سطح به سطح نانوذرات است.

مدل مورد استفاده شامل سلول واحدی مکعبی است که در آن آرایه‌ای از نانوذرات هسته–پوسته قرار داده شده است. هر نانوذره دارای هسته‌ای از آلیاژ گالیم–نقره و پوسته‌ای از نقره خالص است. علاوه بر نانوذرات قرارگرفته در گوشه‌های سلول واحد، یک نانوذره در مرکز مکعب نیز در نظر گرفته شده است تا اثرات جفت‌شدگی بین ذرات قوی تر شود. برای اعمال شرایط تناوبی از شرط مرزی فلوکه استفاده شده و به منظور جلوگیری از بازتاب‌های ناخواسته از لایه جذب‌کننده کامل[3] بهره گرفته شده است [۸].

پارامترهای هندسی شامل شعاع نانوذره R، شعاع هسته r، ضخامت پوسته (t=R-r) و فاصله بین نانوذرات d در بازه‌های مشخص تغییر داده شده‌اند تا اثر آن‌ها بر پاسخ اپتیکی ساختار بررسی شود (شکل ۱). برای تعیین خواص اپتیکی آلیاژ گالیم–نقره،

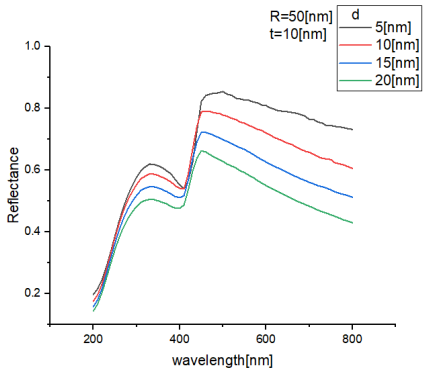
[2] COMSOL Multiphysics

[3] Perfectly matched layers

از مدل مؤثر برگمن استفاده شده است. در این مدل، گذردهی مؤثر آلیاژ از رابطه زیر به دست می‌آید [۹] :

$$f\frac{\varepsilon_{Ga}-\varepsilon_{eff}}{\varepsilon_{Ga}+2\varepsilon_{eff}}+(1-f)\frac{\varepsilon_{Ag}-\varepsilon_{eff}}{\varepsilon_{Ag}+2\varepsilon_{eff}}=0$$

که در آن f کسر حجمی گالیم، ε_{Ga} و ε_{Ag} گذردهی‌های دی‌الکتریک اجزای تشکیل‌دهنده و ε_{eff} گذردهی مؤثر آلیاژ است.



شکل۲. منحنی بازتاب به طول موج در فاصله سطح به سطح متفاوت.
(شعاع برابر با ۵۰ نانومتر و ضخامت پوسته برابر با ۱۰ نانومتر)

به منظور ارزیابی عملکرد حسگری، حساسیت حسگر S به صورت میزان جابه‌جایی طول موج تشدیدی به ازای واحد تغییر در ضریب شکست محیط تعریف می‌شود و از رابطه زیر محاسبه می‌گردد:

$$S=\frac{\Delta\lambda_{\mathrm{res}}}{\Delta n}$$

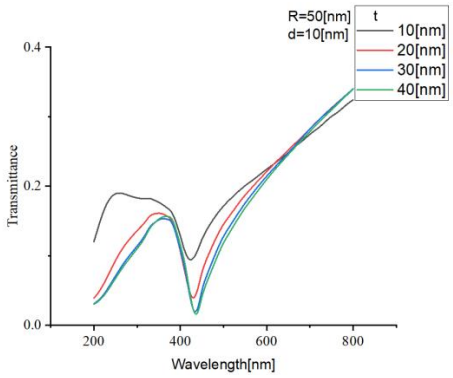
که در آن $\Delta\lambda_{\mathrm{res}}$ تغییر طول موج تشدیدی و Δn تغییر ضریب شکست محیط اطراف است. علاوه بر حساسیت، از شاخص شایستگی نیز برای ارزیابی جامع‌تر عملکرد حسگر استفاده شد که مطابق رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$\mathrm{FOM}=\frac{S}{\mathrm{FWHM}}$$

که در آن FWHM پهنای قله تشدید در نصف بیشینه شدت است.

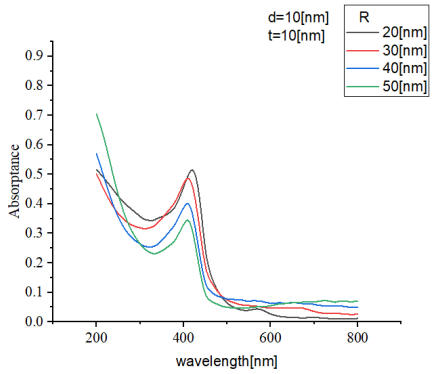
نتایج

ترکیب هسته آلیاژی مورد استفاده در این پژوهش بر اساس گزارش‌های تجربی پیشین انتخاب شده است. مطابق مطالعات انجام‌شده، آلیاژ گالیم–نقره با ترکیب ۹۶٫۴ درصد گالیم و ۳٫۶ درصد نقره از قابلیت ساخت و پایداری برخوردار بوده و به عنوان یکی از ترکیبات نوظهور مبتنی بر فلزات مایع معرفی شده است [۱۰].



شکل۳. منحنی عبور به طول موج در ضخامت پوسته متفاوت.
(شعاع برابر با ۵۰ نانومتر و فاصله سطحی برابر با ۱۰ نانومتر)

در شکل ۲، با افزایش فاصله سطح به سطح از ۵ به ۲۰ نانومتر، کاهش یکنواختی در شدت بازتاب در کل محدوده طیفی مشاهده می‌شود که نشان‌دهنده تضعیف برهم‌کنش‌های الکترومغناطیسی نزدیک‌میدان بین نانوذرات است. در فاصله ۵ نانومتر، بیشترین مقدار بازتاب در ناحیه مرئی و فروسرخ نزدیک ثبت شده است، در حالی که افزایش فاصله موجب افت تدریجی دامنه قله‌های بازتاب می‌شود. این رفتار ناشی از کاهش جفت‌شدگی پلاسمونی بین ذرات مجاور است. از سوی دیگر، بررسی دقیق موقعیت ویژگی‌های طیفی نشان می‌دهد که با کاهش فاصله بین نانوکره‌ها، کمینه طیفی به سمت طول موج‌های بزرگ‌تر جابه‌جا می‌شوند؛ پدیده‌ای که به‌عنوان انتقال به سرخ شناخته می‌شود. نمودار شکل ۳ نشان می‌دهد که ضخامت پوسته عامل کنترل‌کننده مکان و شدت مدهای پلاسمونی است [۱۱]. با افزایش ضخامت پوسته از ۱۰ به ۴۰ نانومتر، حداقل عبور در ناحیه حدود ۴۲۰–۴۴۰ نانومتر به‌طور

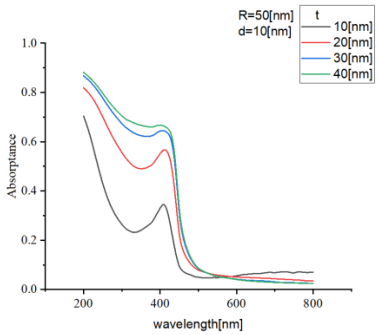


شکل٤. منحنی جذب به طول موج در شعاع متفاوت.
(فاصله سطحی برابر با ۱۰ نانومتر و ضخامت پوسته برابر با ۱۰ نانومتر)

محسوسی به سمت طول موج‌های بلندتر منتقل می‌شود و همزمان عمق این کمینه افزایش می‌یابد؛ به‌طوری‌که مقدار عبور در ضخامت‌های ۳۰ و ٤٠ نانومتر به کمترین مقدار خود می‌رسد. نکته قابل توجه دیگر، نمونه با ضخامت ۱۰ نانومتر دارای عبور بیشتر در محدوده ۲۵۰–۳۵۰ نانومتر است، در حالی که ضخیم‌تر شدن پوسته باعث کاهش عبور در این ناحیه می‌شود.

شکل ۳، تغییر شعاع هسته و تأثیر مستقیم آن بر موقعیت، شدت و پهنای تشدید جذب را نشان می‌دهد [۱۱]. با افزایش شعاع هسته از ۲۰ به ۵۰ نانومتر، قله اصلی شدت جذب کاهش می‌یابد. نکته مهم ، تغییرFWHM قله جذب است. بر اساس تجزیه و تحلیل داده‌ها، نمونه با شعاع ۳۰ نانومتر دارای باریک‌ترین قله جذب است؛ می‌توان نتیجه گرفت که این شعاع، مناسب‌ترین تعادل بین میرایی تشعشعی و میرایی اهمی را ایجاد کرده است.

با ثابت بودن شعاع هسته و فاصله بین ذرات شکل ۵ افزایش ضخامت پوسته از ۱۰ به ٤٠ نانومتر را نشان می‌دهد. مهم‌ترین ویژگی نمودار، تضعیف تدریجی و در نهایت محو شدن قله جذب ثانویه در حوالی ٤٠٠–٤٣٠ نانومتر است. این رفتار نشان می‌دهد که منشأ این تشدید هسته آلیاژی است، زیرا با ضخیم‌تر شدن پوسته نقره، سهم پاسخ اپتیکی پوسته بر پاسخ هسته غالب شده و ویژگی طیفی منتسب به هسته به‌تدریج پوشانده می‌شود.



شکل۵. منحنی جذب به طول موج در ضخامت پوسته متفاوت.
(شعاع برابر با ۵۰ نانومتر و فاصله سطحی برابر با ۱۰ نانومتر)

برای ارزیابی عملکرد ساختار با شعاع ۳۰ نانومتر و ضخامت پوسته ۱۵ نانومتر و فاصله ۱۰ نانومتر، با افزایش ضریب شکست محیط از ۱ به ۱٫۵ ، طول موج تشدید از ٤١٠ به ٤٦٠ نانومتر انتقال یافت که بیانگر انتقال به سرخ به میزان ۵۰ نانومتر است. از این رو، حساسیت ساختار برابر با nm/RIU ۱۰۰ به دست آمد. با در نظر گرفتن پهنای نیمه بیشینه تشدید ۳۱ نانومتر، مقدار ضریب شایستگی حسگر برابر با ۳٫۲۳ محاسبه شد. این مقدار نشان می‌دهد که ساختار مورد مطالعه علاوه بر حساسیت مناسب، از قابلیت تفکیک مطلوبی در کاربردهای حسگری برخوردار است [۱۲].

نتیجه‌گیری

نتایج این پژوهش نشان داد که آرایه نانوذرات هسته–پوسته مبتنی بر آلیاژ گالیم–نقره با پوسته نقره، از قابلیت مناسبی برای کاربردهای حسگری پلاسمونیکی برخوردار است. بررسی اثر پارامترهای هندسی نشان داد که با انتخاب ساختار بهینه، می‌توان به جابه‌جایی قابل‌توجه طول موج تشدید در پاسخ به تغییرات ضریب شکست محیط دست یافت. ساختار بهینه معرفی‌شده حساسیت و مقدار شایستگی قابل قبولی ارائه داد که بیانگر دقت و کارایی مناسب آن در آشکارسازی است.

مرجع‌ها

[1] T. W. Odom and G. C. Schatz; "Introduction to Plasmonics"; Chemical Reviews 111, No. 6 (2011) 3667–3668.
[2] B. P. Nanda, P. Rani, P. Paul, Aman, S. S. Ganti and R. Bhatia; "Recent Trends and Impact of Localized Surface Plasmon Resonance (LSPR) and Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) in Modern Analysis"; Journal of Pharmaceutical Analysis 14, No. 11 (2024) 100959.
[3] E. Koushki, A. A. Mowlavi and S. T. Hoseini; "Application of Localized Surface Plasmon Resonance of Conjugated Gold Nanoparticles in Spectral Diagnosis of SARS-CoV-2: A Numerical Study"; Plasmonics 18, No. 5 (2023) 1847–1855.
[4] S. Farooq, R. H. Dahar, M. W. Yasin, M. Hu, D. Rativa, D. Kong and R. E. De Araujo; "Optimizing Plasmonic Nanostructures Array for High-Performance Sensing Applications"; Results in Physics 76 (2025) 108386.
[5] H.-J. Wang, J.-S. Lin, H. Zhang, Y.-J. Zhang and J.-F. Li; "Plasmonic Core–Shell Materials: Synthesis, Spectroscopic Characterization, and Photocatalytic Applications"; Accounts of Materials Research 3, No. 2 (2022) 187–198.
[6] J. Wang, S. Liu, Z. V. Vardeny and A. Nahata; "Liquid Metal-Based Plasmonics"; Optics Express 20, No. 3 (2012) 2346–2353.
[7] X. Gao, X. Fan and J. Zhang; "Tunable Plasmonic Gallium Nano Liquid Metal from Facile and Controllable Synthesis"; Materials Horizons 8, No. 12 (2021) 3315–3323.
[8] D. D. Novaes and P. C. C. R. Pereira; "On the Periodic and Antiperiodic Aspects of the Floquet Normal Form"; Bulletin des Sciences Mathématiques 190 (2024) 103378.
[9] M. Khardani, M. Bouaïcha and B. Bessaïs; "Bruggeman Effective Medium Approach for Modelling Optical Properties of Porous Silicon: Comparison with Experiment"; Physica Status Solidi C 4, No. 6 (2007) 1986–1990.
[10] T. Daeneke, K. Khoshmanesh, N. Mahmood, I. A. De Castro, D. Esrafilzadeh, S. J. Barrow, M. D. Dickey and K. Kalantar-zadeh; "Liquid Metals: Fundamentals and Applications in Chemistry"; Chemical Society Reviews 47, No. 11 (2018) 4073–4111.
[11] J.-B. Hu, Y.-L. Chen, J. Li, Y.-W. Ma and C.-C. Shu; "Geometrical Parameter Effect on Plasmonic Scattering of Bimetallic Three-Layered Nanoshells"; Nanomaterials 12, No. 21 (2022) 3816.
[12] L. Cheng, S. Gong and P. Tuersun; "Analysis and Optimization of Rotationally Symmetric Au-Ag Alloy Nanoparticles for Refractive Index Sensing Properties Using T-Matrix Method"; Nanomaterials 15, No. 13 (2025) 1052.

بررسی ترابرد کوانتومی در نانونوار نیترید بور درحضور تهی‌جا

رحمانی ایوریق، نسیم؛ ستاری، فرهاد

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل

چکیده

در این مقاله، ترابرد کوانتومی نانونوار آرمچیر نیترید بور در دو حالت خالص و دارای تهی‌جای با استفاده از مدل تنگ‌بست و فرمالیسم تابع گرین غیرتعادلی بررسی شده است. با حذف یک اتم نیتروژن از ناحیه پراکندگی، چگالی موضعی حالات روی اتم بور مجاور محاسبه شد. انتقال مرجع انرژی به میانگین انرژی‌های جایگاهی بور و نیتروژن موجب مرکزدهی طیف‌ها حول انرژی صفر شد. نتایج نشان می‌دهد نانونوار خالص دارای گاف ترابردی حدود ٤/٦ الکترون ولت است. همچنین کاهش جزئی جریان در بایاس‌های بالا نشان می‌دهد که تهی جایگاه عمدتاً بر ساختار الکترونی موضعی اثر می‌گذارد، بدون آنکه ماهیت نانونوارآرمچیر نیترید بور را به‌طور اساسی تغییر دهد.

واژه های کلیدی: *نانونوار آرمچیر نیترید بور، تهی جا، تنگ‌بست، تابع گرین غیرتعادلی، چگالی موضعی حالات.*

Investigation of quantum transport in boron nitride nanoribbons in the presence of a vacancy

Rahmani-Ivriq, Nasim; Sattari, Farhad

Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Mohaghegh Ardabili, P.O. Box 179, Ardabil, Iran

Abstract

In this paper, quantum transport in pristine and defective armchair boron nitride nanoribbons is investigated using the tight-binding model and the nonequilibrium Green's function formalism. By removing a nitrogen atom from the scattering region, the local density of states is calculated on the adjacent boron atom. Shifting the energy reference to the average on-site energies of boron and nitrogen centers the spectra around zero energy. The pristine nanoribbon shows a transport gap of about 4.6 eV. The slight reduction of current at high bias indicates that the vacancy mainly affects the local electronic structure without fundamentally altering the behaviour of the nanoribbon.

***Keywords**: armchair boron nitride nanoribbon, vacancy, tight-binding, nonequilibrium Green's function, local density of states.*

PACS No. 72, 81

مقدمه

پس از سنتز گرافین، تک‌لایه نیترید بور نیز با برخورداری از ویژگی‌های حرارتی و مکانیکی ممتاز، با موفقیت سنتز شد [۱]. ساختار هگزاگونال نیترید بور، به دلیل گاف نواری بزرگ، پایداری شیمیایی بالا و خواص دی‌الکتریک مناسب، به‌عنوان ماده‌ای مهم در نانوالکترونیک شناخته می‌شود [۲]. همچنین، تفاوت خواص اپتیکی نانونوارهای آرمچیر و زیگزاگ نیترید بور، شاخصی کلیدی برای شناسایی تجربی این ماده به‌شمار می‌رود [۳]. در مقیاس نانونوار، خواص الکترونی این ساختار به هندسه لبه، عرض نوار و نقص‌های اتمی وابسته است. مطالعات پیشین نشان داده‌اند که نانونوارهای آرمچیر نیترید بور معمولاً دارای گاف انرژی قابل‌توجهی هستند و ساختار الکترونی آن‌ها به نوع لبه و اندازه سامانه وابسته است. مدل تنگ‌بست نشان می‌دهد که بار توزیع‌شده

در لبه‌ها، عامل نوسان گاف نواری در نانونوارهای نیترید بور است [٤]. از سوی دیگر، نقص‌های نقطه‌ای مانند تهی‌جاها می‌توانند با ایجاد حالت‌های موضعی و مراکز پراکندگی، بر خواص طیفی و ترابردی اثرگذار باشند. از این‌رو، در این مقاله، خواص الکترونی و ترابردی نانونوار آرمچیر نیترید بور در دو حالت خالص و دارای تهی‌جا در مکان نیتروژن، با استفاده از فرمالیسم تنگ‌بست و تابع گرین غیرتعادلی، بررسی می‌شود.

روشهای محاسباتی

سامانه مورد مطالعه شامل یک نانونوار آرمچیر نیترید بور است که به دو الکترود نیمه‌بی‌نهایت چپ و راست متصل شده است. ناحیه مرکزی در دو حالت بررسی می‌شود: ساختار خالص، ساختار دارای نقص که در آن یک اتم نیتروژن از قسمت مرکزی در ناحیه پراکندگی حذف شده است.

در ساختار دارای نقص، چگالی موضعی حالات روی اتم بور واقع در نزدیک‌ترین مکان به تهی جا محاسبه می‌شود. انتخاب این سایت بر اساس مختصات هندسی واقعی ساختار انجام شده است تا تفسیر چگالی حالات جایگزیده به همسایه فیزیکی نقص مربوط باشد.

هامیلتونی سامانه در تقریب تنگ‌بست نزدیک‌ترین همسایه به صورت زیر نوشته می‌شود [٥]:

$$H = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij}(c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i) \qquad (١)$$

که در آن ε_i انرژی جایگاه اتم i می باشد t_{ij} پارامتر پرش بین همسایه‌های نزدیک است. برای توصیف ماهیت نانونوار نیترید بور، انرژی جایگاه اتم‌های بور و نیتروژن متفاوت در نظر گرفته می‌شود. به‌منظور قرار دادن مرجع انرژی در مرکز گاف انرژی، از مقادیر $\varepsilon_B = +2.285\ eV$ و $\varepsilon_N = -2.285\ eV$ استفاده کردیم و مقدار پارامتر پرش $t_{ij} = -1.95\ eV$ در نظر گرفته ایم [٣]. برای محاسبه ترابرد از فرمالیسم تابع گرین غیرتعادلی استفاده می‌شود، تابع گرین تاخیری ناحیه مرکزی با در نظر گرفتن خودانرژی الکترودهای چپ و راست محاسبه می‌شود. سپس رسانش الکترونی سامانه با استفاده از فرمول لاندائر محاسبه می‌شود [٦]:

$$G = \frac{2e^2}{h} T(E) \qquad (٢)$$

که در آن $T(E) = Tr(\Gamma_L G_S^a \Gamma_R G_S^r)$ ضریب رسانش می‌باشد G_S^r و G_S^a توابع گرین تاخیری و پیشرفته کانال مرکزی می‌باشند. توابع اتصال الکترودها برای الکترود چپ (راست) با رابطه زیر داده می‌شوند:

$$\Gamma_{L(R)}(E) = i\left(\Sigma_{L(R)}(E) - \Sigma_{L(R)}(E)^\dagger\right) \qquad (٣)$$

چگالی حالت‌های جایگزیده در مکان i را می توان به صورت زیر بیان کرد:

$$LDOS(i,E) = -\frac{1}{\pi} Im\left(G_S(i,i)\right) \qquad (٤)$$

عنصر ماتریس تابع گرین در مکان i توسط $G_S(i,i)$ تعریف می شود. علاوه بر این، چگالی حالات را می توان به صورت زیر نوشت:

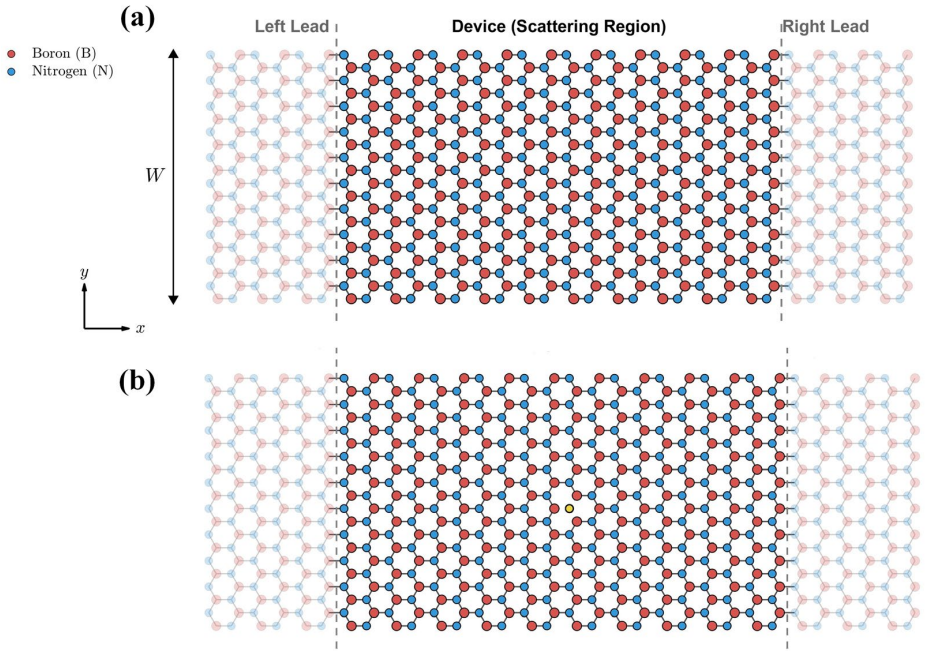
$$DOS(E) = -\frac{1}{\pi} Im\left(Tr(G_S)\right) \qquad (٥)$$

و در نهایت جریان عبوری تحت بایاس با استفاده از فرمول لاندائر محاسبه می‌شود.

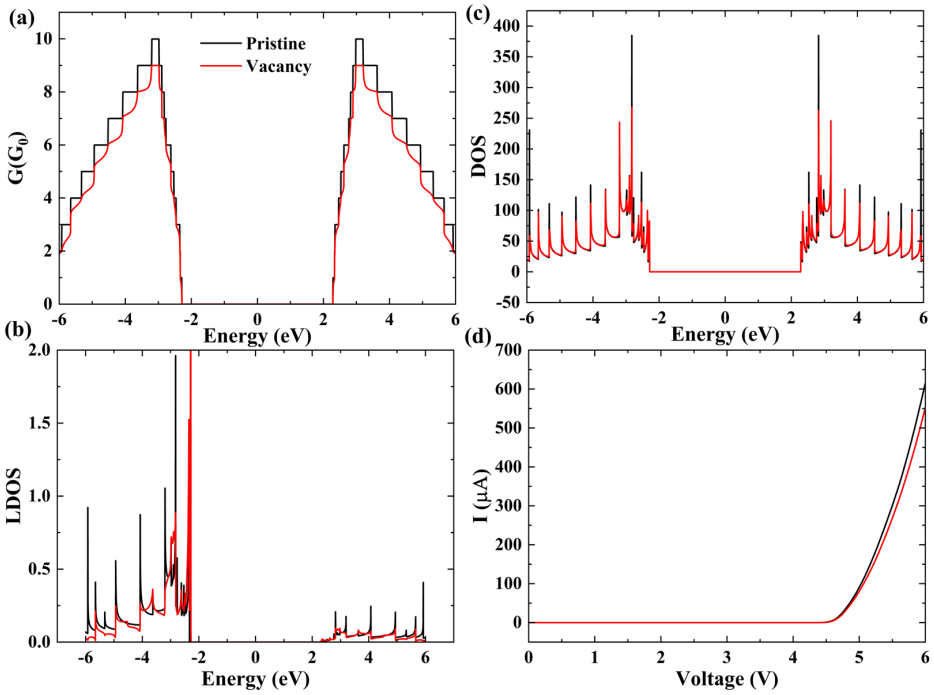
$$I(V) = 2e/h \int T(E,V)[f_L(E) - f_R(E)]\, dE \qquad (٦)$$

نتایج وبحث

شکل (١) هندسه نانونوار آرمچیر نیترید بور را در دو حالت خالص و در حضور تهی جا در جایگاه اتم نیتروژن نشان می‌دهد. در ساختار معیوب، اتم نیتروژن از ناحیه مرکزی حذف شده و چگالی حالات جایگزیده روی اتم بور مجاور آن محاسبه شده است. این انتخاب به‌صورت هندسی انجام شده و بنابراین پیک مشاهده‌شده به اثر موضعی تهی جا بستگی دارد.



شکل۱ : هندسه نانونوار آرمچیر نیترید بور. ساختار به سه ناحیه الکترود چپ، ناحیه مرکزی یا ناحیه پراکندگی، و الکترود راست تقسیم شده است. اتم‌های بور و نیتروژن به‌ترتیب با رنگ‌های قرمز و آبی نمایش داده شده‌اند. (a) بیانگر ساختار خالص و (b) ساختار دارای تهی جا (اتم زرد رنگ) در ناحیه مرکزی می‌باشد. پارامتر W نشان‌دهنده پهنای نانونوار است.



شکل۲ : مقایسه نتایج ترابرد برای نانونوارآرمچیر نیترید بور خالص و دارای تهی جا (a) ضریب عبور، (b) چگالی حالت‌های جایگزیده، (c) چگالی حالت‌ها و (d) مشخصه جریان– ولتاژ. خطوط سیاه و قرمز به‌ترتیب مربوط به ساختار خالص و معیوب هستند.

نتایج در شکل (۲) نشان می‌دهند که نانونوار آرمچیر نیترید بور در حالت خالص دارای یک گاف ترابردی پهن در حدود ٤/٦ الکترون ولت پیرامون صفر انرژی است که منشأ آن به اختلاف ذاتی انرژی‌های جایگاه اتم‌های بور و نیتروژن بازمی‌گردد. با ایجاد تهی جا در جایگاه نیتروژن، اگرچه گاف کلی ساختار تقریباً حفظ می‌شود، مقدار عبور و جریان در نواحی رسانش اندکی کاهش می‌یابد که این امر بیانگر نقش نقص به‌عنوان یک مرکز پراکندگی موضعی است. همچنین، مقایسه چگالی حالتها در دو حالت خالص و معیوب نشان می‌دهد که ساختار کلی طیف الکترونی دستخوش تغییر اساسی نمی‌شود و تنها شدت برخی قله‌ها تغییر می‌کند. در مقابل، بارزترین اثر نقص در چگالی حالتهای جایگزیده اتم بور مجاور تهی جا ظاهر می‌شود، جایی که یک پیک تیز نزدیک لبه باند ظرفیت شکل می‌گیرد. این پیک به یک حالت موضعی ناشی از شکست تقارن موضعی پیوندها نسبت داده می‌شود. بنابراین، تهی جای نیتروژن عمدتاً خواص موضعی و دامنه ترابرد را تحت تأثیر قرار می‌دهد، بی‌آنکه ماهیت نیمه‌رسانای با گاف پهن سامانه را از بین ببرد.

نتیجه گیری

در این پژوهش، خواص الکترونی و ترابردی نانونوار آرمچیر نیترید بور با روش ترکیبی از تنگ بست و تابع گرین غیرتعادلی بررسی شد. نتایج نشان داد تهی جا در مکان اتم نیتروژن بدون تغییر محسوس گاف(٤/٦ الکترون ولت)، حالت موضعی قوی در همسایه بور ایجاد کرده و جریان را در بایاس‌های بالا اندکی کاهش می‌دهد.

مرجع‌ها

[۱] M. Yagmurcukardes, F. M. Peeters, R. T. Senger, and H. Sahin; “Nanoribbons: From fundamentals to state-of-the-art applications”; Applied Physics Reviews **3**, No. 4 (2016).
[۲] Y. Lin and JW. Connell; “Advances in 2D boron nitride nanostructures: nanosheets, nanoribbons, nanomeshes, and hybrids with graphene”; Nanoscale **4**, No. 22 (2012): 6908-6939.
[۳] S. Wang, Q. Chen, and J. Wang; “Optical properties of boron nitride nanoribbons: Excitonic effects”; *Applied Physics Letters* **99**, No. 6 (2011).
[۴] K. Zhao, M. Zhao, Z. Wang, Y. Fan; “Tight-binding model for the electronic structures of SiC and BN nanoribbons”; *Physics E* **43**, No. 1 (2010) 440–445.
[۵] N. Rahmani-Ivriq, A. A. Kordbacheh, and M. K. Kheirabadi; “Quantum conductance of defected phosphorene and germanene nanoribbons”; *Journal of Nanoparticle Research* **21**, No. 11(2019) 225.
[۶] S. Datta; “*Electronic Transport in Mesoscopic Systems*”; Cambridge University Press, Cambridge (1995).

بررسی تأثیر طول شاخه‌ها بر خواص پلاسمونیک نانوذرات ستاره‌ای شکل طلا با استفاده از روش FDTD

آذریان ، عباس[۱]؛ هاشمی، ریحانه سادات[۱]

[۱] *دانشکده فیزیک دانشگاه قم، بلوار الغدیر، قم*

چکیده

نانوذرات ستاره‌ای شکل طلا به‌دلیل شکل هندسی خاص و ویژگی‌های نوری قابل تنظیم، یکی از مهم‌ترین نانوساختارهای پلاسمونیکی به‌شمار می‌روند. در این پژوهش، اثر تغییر طول شاخه‌ها بر پاسخ نوری این ساختارها با استفاده از روش تفاضل محدود در حوزهٔ زمان (FDTD) مورد بررسی قرار گرفت. نتایج تحقیق نشان داد که افزایش شعاع خارجی نانوذرهٔ ستاره‌ای طلا، موجب جابه‌جایی قرمز قلهٔ تشدید پلاسمونی و افزایش ضریب تقویت میدان الکتریکی تا عدد ۱۵۳ می‌شود. تقویت شدید میدان الکتریکی در نوک شاخه‌ها، نانوذرات ستاره‌ای شکل طلا را به گزینه‌ای مناسب برای کاربردهای نوری و حسگری تبدیل کرده است.

واژه های کلیدی: *نانوذرات ستاره‌ای، سطح مقطع جذب، شبیه سازی FDTD، تشدید پلاسمون سطحی موضعی*

Effect of Tip Length on the Plasmonic Properties of Star-Shaped Gold Nanoparticles

Azarian, Abbas [۱]; Hashemi, Reihane sadat[۱]

[۱] *Department of Physics, University of Qom, Qom, Iran*

Abstract

Star_shaped gold nanoparticles are considered one of the important plasmonic nanostructures. In this study, the effect of changing the tip length on the optical response of these structures was investigated using the finite_difference time_domain (FDTD) method. The results of this study showed that increasing the outer radius of star_shaped gold nanoparticle leads to a red shift of the surface plasmon resonance peak and increases the electric field enhancement factor up to 153. This strong enhancement of the electric field at the tips makes star_shaped gold nanoparticles promising condidates for optical and sensors applications.

***Keywords**: Gold Nanostars, Absorption Cross-Section, FDTD simulation, Localized Surface Plasmon Resonance (LSPR)*

PACS No.

مقدمه

در سال‌های اخیر، پلاسمونیک به یکی از مهم‌ترین شاخه‌های نانوفوتونیک تبدیل شده است. این حوزه به مطالعهٔ چگونگی تعامل نور با نانوذرات فلزی می‌پردازد که هستهٔ اصلی آن را پدیدهٔ تشدید پلاسمون سطحی موضعی تشکیل می‌دهد. در این پدیده الکترون‌های آزاد در نانوذرات فلزی هنگام برخورد نور فرودی، شروع به نوسان جمعی می‌کنند که این نوسان هماهنگ منجر به جذب و پراکندگی شدید نور در طول‌موج‌های مشخصی می‌شود [۱].

در میان فلزات نجیب، طلا به‌علت زیست‌سازگاری مناسب، پایداری شیمیایی بالا و پاسخ پلاسمونیک قوی در ناحیهٔ مرئی و فروسرخ نزدیک، جایگاه ویژه‌ای در پژوهش‌های پلاسمونیک دارد [۲]. به علاوه در دهه‌های اخیر، توجه پژوهشگران به نانوذرات غیرکروی مانند نانومیله‌ها، نانودیسک‌ها و نانوستاره‌ها جلب شده است [۳]. دراین‌میان، نانوستاره‌های طلا جایگاه ویژه‌ای به‌عنوان یکی از کارآمدترین ساختارهای پلاسمونیک دارند. وجود شاخه‌های متعدد با نوک‌های تیز در نانوستاره‌ها سبب تمرکز شدید بارهای الکتریکی در نواحی نوک‌ها شده و نقاط داغ با شدت میدان بسیار بالا را ایجاد می‌کنند [٤].

ویژگی‌های پلاسمونیک نانوستاره‌های طلا به عوامل مختلفی بستگی دارند که از جملهٔ این عوامل می‌توان به تعداد و طول شاخه‌ها، ضخامت، شعاع نوک‌ها، اندازهٔ هستهٔ مرکزی و هم‌چنین ضریب دی‌الکتریک محیط اطراف اشاره کرد [٥]. طول شاخه‌ها در نانوستاره‌های طلا نقشی مانند آنتن در سامانه‌های آنتنی ماکروسکوپی بازی می‌کند. زمانی‌که طول شاخه‌ها افزایش می‌یابد، باعث افزایش طول مؤثر مسیر نوسان الکترون‌ها شده و بنابراین، قلهٔ تشدید پلاسمون سطحی جابه‌جایی قرمز پیدا می‌کنند [٦]. این ویژگی در کاربردهای زیست‌پزشکی اهمیت دارد، چون امکان تنظیم تشدید پلاسمون سطحی در ناحیهٔ مادون قرمز نزدیک را، که بیشترین عمق نفوذ در بافت‌های زیستی دارا می‌باشد، فراهم می‌کند[۷]. بنابراین، تنظیم طول شاخه‌ها روشی مناسب برای طراحی نانوستاره‌های طلا با ویژگی‌های نوری هدفمند است.

در این پژوهش، اثر طول شاخه‌ها بر پاسخ پلاسمونیک نانوستارهٔ پنج‌پر طلا با استفاده از روش FDTD بررسی شده است تا نقش این پارامتر در بهینه‌سازی ساختار برای کاربردهای نانوفوتونیکی و زیست‌پزشکی مشخص شود.

مبانی نظری و شبیه‌سازی عددی

برای مدل‌سازی خواص نوری فلز طلا، از تابع دی‌الکتریک وابسته به فرکانس استفاده می‌شود. مدل درود، یکی از مدل‌های متداول برای توصیف رفتار الکترون‌های آزاد در فلزات نجیب است[۱]:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \qquad (۱)$$

در این رابطه، $\varepsilon(\omega)$ تابع دی‌الکتریک وابسته به فرکانس، ε_∞ گذردهی در فرکانس‌های بالا، γ ضریب میرایی الکترون‌ها و ω_p فرکانس پلاسما است. سطح مقطع جذب کمیتی برای ارزیابی میزان انرژی جذب‌شده توسط نانوذره است[۸]:

$$\sigma_{abs} = \frac{P_{abs}}{I_0} \qquad (۲)$$

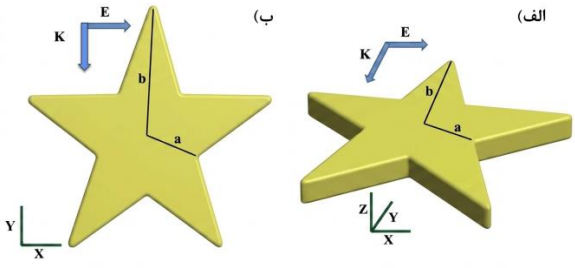
که در آن σ_{abs} سطح مقطع جذب، P_{abs} توان جذب‌شده توسط نانوذره و I_0 شدت موج فرودی است. این کمیت نشان می‌دهد که ساختار نوری تا چه اندازه توانایی جذب انرژی تابشی را دارد.

برای توصیف برهم‌کنش نور با نانوذرات فلزی از معادلات ماکسول استفاده می‌شود. در روش تفاضل محدود در حوزهٔ زمان (FDTD) که اولین بار در سال ۱۹٦٦ توسط یی معرفی شد، این معادلات به‌صورت گسسته در شبکهٔ فضا–زمان حل شده و از این طریق توزیع میدان‌های الکترومغناطیسی در اطراف ساختار محاسبه می‌شود[۹]. در این پژوهش از روش FDTD برای محاسبهٔ سطح مقطع جذب نانوستاره استفاده شده است. شبیه‌سازی‌ها برای تابش موج تخت در بازهٔ طیفی ۲۰۰ تا ۲۰۰۰ نانومتر صورت گرفته است. نانوستاره در محیط هوا در نظر گرفته شده است. برای مقادیر تابع دی‌الکتریک طلا از داده‌های جانسون و کریستی استفاده شده است [۱۰]. به منظور دستیابی به دقت محاسباتی بالا، به‌ویژه در لبه‌های

تیز نانوستاره، ابعاد شبکه‌بندی در ناحیهٔ نوک شاخه‌های نانوستاره برابر با ۰.۵ نانومتر در نظر گرفته شد.

نتایج

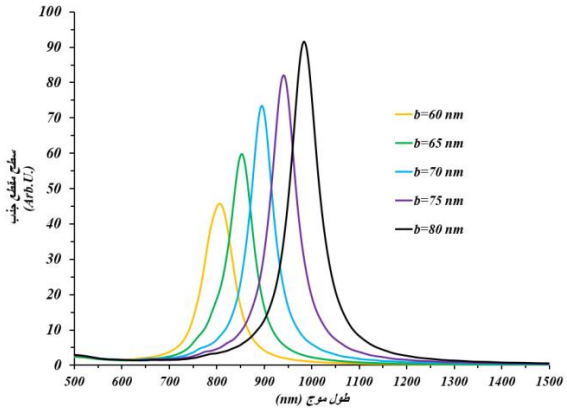
در شکل ۱، یک نانوستارهٔ پنج شاخهٔ طلا با ابعاد شعاع داخلی a و شعاع خارجی b مشاهده می‌شود. قطبش میدان الکتریکی در جهت محور X قرار گرفته است.



شکل ۱: طرح‌وارهٔ نانوستارهٔ طلا از دو جهت الف) سه بعدی (مایل) و ب) بالا، بردار K نشان‌دهنده جهت تابش و بردار E بیانگر جهت قطبش (میدان الکتریکی) نور فرودی است.

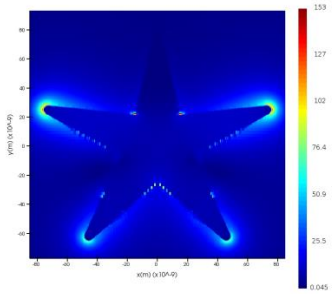
شبیه‌سازی‌ها برای نانوستاره با شعاع داخلی ۲۵ نانومتر و ضخامت ۱۰ نانومتر انجام شده است. شعاع نوک شاخه‌ها ۳ نانومتر در نظر گرفته شده است. در این پژوهش برای بررسی تاثیر طول شاخه از تغییرات کمیت شعاع خارجی استفاده شده و سایر پارامترها ثابت در نظر گرفته شده است. طیف سطح مقطع جذب برحسب طول موج برای مقادیر مختلف شعاع خارجی در شکل ۲ نشان داده شده است. باتوجه به شکل ۲ با افزایش شعاع خارجی از ٦٠ تا ٨٠ نانومتر، موقعیت قله‌ها به‌طور یکنواخت به سمت طول موج‌های بلندتر جابه‌جا می‌شوند. به‌طور مشخص طول موج تشدید از ٨٠٧ نانومتر به ٩٨٤ نانومتر افزایش می‌یابد. این رفتار نشان‌دهندهٔ یک انتقال قرمز شدید در پاسخ طیفی ساختار است.

علاوه‌براین با افزایش شعاع خارجی، شدت جذب هم به‌طور قابل توجهی افزایش می‌یابد. بیشترین مقدار سطح مقطع جذب از حدود ٤٥ برای شعاع خارجی ٦٠ نانومتر به حدود ٩١ برای شعاع خارجی ٨٠ نانومتر می‌رسد که تقریبا دوبرابر شدن شدت جذب را نشان می‌دهد.

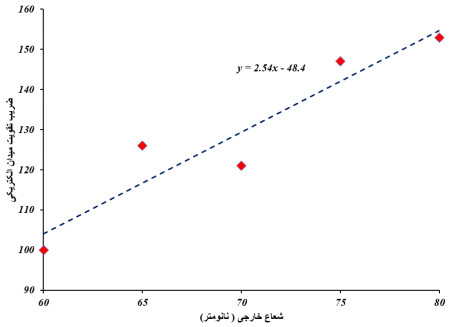


شکل ۲ : مقایسهٔ طیف جذب نانوستارهٔ طلا با شعاع های مختلف

شکل ۳، الگوی توزیع میدان الکتریکی نانوذرهٔ ستاره‌ای شکل برای قلهٔ تشدید پلاسمونی را با شعاع خارجی ۸۰ نانومتر نشان می‌دهد. نواحی با شدت بالا به علت افزایش شدید میدان الکتریکی در نوک شاخه‌ها و در راستای قطبش میدان الکتریکی نور تابشی ایجاد شده‌اند. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که ضریب تقویت میدان در این ساختار در بازهٔ ۱۰۰ تا ۱۵۳ متغیر است. این مقدار در توافق بسیار خوبی با نتایج مطالعات مشابه بر روی نانوستاره‌های طلا قرار دارد؛ برای نمونه، آذریان و زمانی نجف‌آبادی [۱۱] مقدار تقویت میدان را برای نانوستاره‌ای با هندسهٔ مشابه، حدود ۱۱٤ برابر گزارش کرده‌اند.



شکل ۳. توزیع میدان الکتریکی اطراف نانوستاره برای شعاع خارجی ۸۰ نانومتر، با بیشترین مقدار ضریب تقویت میدان الکتریکی محلی ۱۵۳



شکل ٤. نمودار ضریب تقویت میدان الکتریکی بر حسب شعاع‌های خارجی مختلف نانوذرهٔ ستاره‌ای طلا

در شکل ٤، تغییرات بیشینهٔ ضریب تقویت میدان الکتریکی برای شعاع‌های خارجی مختلف نانوذرات ستاره‌ای نشان داده شده است. همان‌طور که می‌بینیم با افزایش شعاع خارجی، ضریب تقویت میدان الکتریکی افزایش قابل توجهی یافته است.

اگرچه در این پژوهش بر روی ساختار پنج‌پر با ضخامت مشخص تمرکز شده است، بررسی‌های تکمیلی نشان می‌دهد که پارامترهای هندسی مانند تعداد شاخه‌ها و ضخامت نانوستاره نیز نقش مهمی در تنظیم طول‌موج تشدید پلاسمونی دارند[۱۲] ؛ به‌طوری‌که افزایش تعداد شاخه‌ها، موجب جابه‌جایی قرمز تشدید می‌شود [۱۳]. هم‌چنین، همان‌طور که درپژوهش پیشین ما گزارش شده است، کاهش ضخامت نانوستاره باعث افزایش شدت قله‌های پلاسمونی و جابه‌جایی قرمز طول‌موج‌های تشدید می‌شود [۱٤].

نتیجه گیری

در این پژوهش،پاسخ پلاسمونیک نانوذرات ستاره‌ای شکل طلابا استفاده از روش شبیه‌سازی تفاضل محدود در حوزهٔ زمان مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان داد که طول شاخه‌های نانوستاره‌ها نقش مهمی در تعیین محل تشدید پلاسمون سطحی و شدت تقویت میدان الکتریکی محلی دارد. با افزایش شعاع خارجی نانوستاره، قلهٔ تشدید به سمت طول‌موج‌های بلندتر جابه‌جا شده و میدان الکتریکی در نواحی نوک شاخه‌ها به‌طور محسوسی تقویت می‌شود. این ویژگی، ساختار نانوستاره را کاندید مناسبی برای کاربردهایی مانند حسگرهای پلاسمونیک و طیف‌سنجی رامان تقویت‌شدهٔ سطحی می‌کند. نتایج این مطالعه می‌تواند در طراحی و بهینه‌سازی ساختارهای پلاسمونیکی در مطالعات آینده مفید باشد.

مرجع‌ها

[۱] S. A. Maier, *"Plasmonics: Fundamentals and Applications,"* Springer, New York (۲۰۰۷).
[۲] Huang and M. A. El-Sayed, *"Gold Nanoparticles: Optical Properties and Implementations in Biomedicine,"* Journal of Advanced Research ۱۸, ۱–۱۵ (۲۰۱۹).
[۳] C. Novo, A. M. Funston, and P. Mulvaney, *"Direct Observation of Chemical Reactions on Single Gold Nanocrystals Using Plasmon Spectroscopy,"* Nature Nanotechnology ۱۳, ٦٥٨–٦٦٣ (۲۰۱۸).
[٤] A. Tukova *et al.*, *"Plasmonic Nanostars: Unique Properties That Distinguish Them from Spherical Nanoparticles from a Biosensing Perspective,"* Advanced Optical Materials ۱۲, ۱–۱٤ (۲۰۲٤).
[٥] S. Lal, S. Link, and N. J. Halas, *"Nano-Optics from Sensing to Waveguiding,"* Nature Photonics ۱, ٦٤۱–٦٤٨ (۲۰۰۷).
[٦] S. Chen *et al.*, *"Tunable Nonlinear Absorption of Gold Nanostars and Application as a Saturable Absorber,"* Optics & Laser Technology ۱٦٨, ۱۰۹۸۷۳ (۲۰۲٤).
[۷] S. M. Mousavi *et al.*, *"Gold Nanostars: Diagnosis, Bioimaging and Biomedical Applications,"* Drug Metabolism Reviews ٥۲, ۱–۱٦ (۲۰۲۰).
[۸] C. F. Bohren and D. R. Huffman, *"Absorption and Scattering of Light by Small Particles,"* ۱st ed., Wiley (۱۹۹۸).
[۹] A. Taflove and S. C. Hagness, *"Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method,"* ۲nd ed., Artech House, Boston (۲۰۰۰).
[۱۰] P. B. Johnson and R. W. Christy, *"Optical Constants of the Noble Metals,"* Physical Review B ٦, ٤۳۷۰–٤۳۷۹ (۱۹۷۲).
[۱۱] آذریان، عباس و زمانی نجف آبادی، شقایق؛ « *تأثیر پارامترهای هندسی بر خواص ترموپلاسمونیک نانوذرات ستاره‌ای شکل طلا جهت استفاده در درمان نورگرمایی* »؛ مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، ۲٤(۲)، (۱٤۰۳).
[۱۲] R. A. Harder, L. A. Wijenayaka, H. T. Phan, and A. J. Haes; "*Tuning gold nanostar morphology for the SERS detection of uranyl*"; Journal of Raman Spectroscopy, Vol. ٥۲, No. ۲, pp. ٤۹۷–٥۰٥. (۲۰۲۱).
[۱۳] T. Chung and S.-H. Lee; *"Quantitative Study of Plasmonic Gold Nanostar Geometry Toward Optimal SERS Detection"*; Plasmonics, Vol. ۱۷, No. ٥, pp. ۲۱۱۳–۲۱۲۱. (۲۰۲۲) .
[۱٤] آذریان، عباس و هاشمی، ریحانه سادات؛ « *تأثیر ضخامت بر سطح مقطع خاموشی نانوذرات ستاره‌ای شکل طلا – نقره* »؛ مقاله‌نامه سی‌ویکمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران، ص. ٤٤٨ (۱٤۰٤) .

شبیه‌سازی و طراحی حسگر پلاسمونیک حساس مبتنی بر شفافیت القایی پلاسمونیکی در ساختار فلز-فسفر سیاه-گرافن

مرادی، مهرداد؛ سعادت جو، زهرا
پژوهشکده علوم و فناوری نانو دانشگاه کاشان، کاشان

چکیده

در این مقاله، یک حسگر پلاسمونیک پیشرفته با پیکربندی کرچمن شامل چهار لایه طلا، فسفرسیاه، گرافن و محیط حسگر طراحی و شبیه‌سازی شده است. در این ساختار، پدیده شفافیت القایی پلاسمونیکی (PIT) با کیفیت بالایی تحقق یافته است. شبیه‌سازی‌های عددی با روش ماتریس انتقال انجام شده است. نتایج نشان می‌دهد که در ضخامت بهینه لایه طلا (۴۲ nm)، یک دره تشدید تیز در طول‌موج ۸/۲ μm ایجاد می‌شود. با تغییر ضریب شکست محیط حسگر در بازه ۱/۳۳ تا ۱/۴۰، دره تشدید به طور خطی به سمت طول‌موج‌های بلندتر جابه‌جا می‌شود. حساسیت‌طیفی (۴/۵ μm/RIU) و ضریب‌حساسیت (FOM) معادل ۳۱/۴ μm^{-1} محاسبه شده است. ساختار پیشنهادی قابلیت کاربرد در تشخیص سلول‌های سرطانی و سنجش زیستی را دارا می‌باشد.

واژه های کلیدی: *حسگر پلاسمونیک، شفافیت القایی پلاسمونیکی، روش ماتریس انتقال، فسفرسیاه*

Simulation and design of a sensitive plasmonic sensor based on plasmonic induced transparency in a metal-black phosphorus-graphene structure

Moradi, Mehrdad; Saadat Joo, Zahra
Institute of Nanoscience and Nanotechnology, University of Kashan, Kashan

Abstract

In this paper, an advanced plasmonic sensor with a Kretschmann configuration consisting of four layers of gold, black phosphorus, graphene, and a sensing medium is designed and simulated. In this structure, the phenomenon of plasmonic induced transparency (PIT) with high quality is realized. Numerical simulations have been performed using the transfer matrix method. The results show that at the optimal thickness of the gold layer (42 nm), a sharp resonance valley with a 180° phase jump is created at a wavelength of about 8 μm. By changing the refractive index of the sensor medium in the range of 1.33 to 1.40, the resonance valley shifts linearly towards longer wavelengths. The spectral sensitivity is calculated to be 4.5 (μm/RIU) and the factor of mass (FOM) is calculated to be 31.4 μm^{-1}. The proposed structure has the potential to be used in cancer cell detection and biosensing.

***Keywords**: Plasmonic sensor, plasmonic induced transparency, transfer matrix method, black phosphorus*
PACS No. 68

مقدمه

حسگرهای مبتنی بر تشدید پلاسمون‌سطحی (SPR) به دلیل حساسیت بالا به تغییرات ضریب‌شکست سطحی و پاسخ‌دهی لحظه‌ای، به ابزاری کلیدی در زیست‌فناوری و تشخیص‌های پزشکی تبدیل شده‌اند. پدیده تشدید پلاسمون سطحی زمانی رخ می‌دهد که بردارموج‌نور فرودی با بردارموج پلاسمون سطحی در سطح مشترک یک فلز و دی‌الکتریک مطابقت پیدا کند [۱]. این پدیده قادر است انرژی موج الکترومغناطیسی را در ابعاد نانومتری متمرکز کند که برای کاربردهایی مانند جاذب‌های نوری، مدولاتورها و حسگرها بسیار ارزشمند است.

حسگرهای SPR سنتی مبتنی بر فیلم‌های فلزی ضخیم، به دلیل پهنای باند تشدید زیاد، از ضریب‌حساسیت پایینی برخوردار هستند. برای غلبه بر این محدودیت، پدیده شفافیت القایی پلاسمونیکی (PIT) پیشنهاد شده است. این پدیده معادل پلاسمونیکی پدیده شفافیت القایی الکترومغناطیسی (EIT) در سیستم‌های اتمی می‌باشد و با ایجاد یک پنجره شفافیت باریک

درون نوار جذب پهن، ضریب‌جساسیت را به میزان قابل توجهی افزایش می‌دهد [۲].

در سال‌های اخیر، مواد دوبعدی مانند گرافن و فسفرسیاه به دلیل خواص اپتیکی و الکترونی منحصربه‌فرد، توجه بسیاری را به خود جلب کرده‌اند [۳،۲]. گرافن دارای رسانندگی نوری قابل تنظیم با ولتاژ گیت و تحرک پذیری بالای حامل‌ها می‌باشد. فسفرسیاه نیز به عنوان یک نیمه‌هادی دوبعدی با گاف انرژی مستقیم، خواص ناهمسانگرد جالبی از خود نشان می‌دهد و پلاسمون‌های با کیفیت بالایی را در ناحیه مادون قرمز میانی پشتیبانی می‌کند [۳]. ترکیب این دو ماده می‌تواند منجر به ایجاد پدیده PIT با کارایی بالا شود.

در این مقاله، یک حسگر پلاسمونیک بر پایه لایه‌های یکپارچه طلا با ضخامت ۴۲ نانومتر، فسفرسیاه با ضخامت ۵ نانومتر و گرافن با ضخامت ۰/۳۴ نانومتر در پیکربندی کرچمن طراحی و شبیه‌سازی شده است [۴]. نتایج نشان می‌دهد که حسگر پیشنهادی دارای حساسیت طیفی(μm/RIU) ۴/۵ و ضریب حساسیت μm^{-1} ۳۱/۴ می‌باشد.

شبیه‌سازی و تعریف لایه‌ها

پیکربندی هندسی حسگر پیشنهادی در شکل ۱ نشان داده شده است. ساختار از بالا به پایین شامل لایه‌های زیر می‌باشد [۲]:

۱. لایه طلا (Au): این لایه با ضخامت بهینه ۴۲ نانومتر به عنوان لایه فلزی اصلی عمل می‌کند و مدهای پلاسمونی روشن را تحریک می‌نماید. لایه طلا به دلیل بازتابندگی بالا، نقش مهمی در ایجاد تشدید پلاسمونی در ساختار ایفا می‌کند.

۲. لایه فسفرسیاه (BP): این لایه با ضخامت ۵ نانومتر به عنوان لایه تولیدکننده مدهای تاریک عمل کرده و پهنای باند تشدید را کاهش می‌دهد. فسفرسیاه یک ماده نیمه‌هادی دوبعدی با گاف انرژی مستقیم است که خواص ناهمسانگرد جالبی از خود نشان می‌دهد.

۳. لایه گرافن: این لایه به صورت تک‌لایه با ضخامت فیزیکی ۰/۳۴ نانومتر قرار گرفته است. گرافن به دلیل وابستگی شدید رسانایی نوری به محیط اطراف، حساسیت نهایی حسگر را تضمین می‌کند. گرافن دارای رسانندگی نوری قابل تنظیم با ولتاژ گیت و تحرک پذیری بالای حامل‌ها می‌باشد [۳،۱].

۴. محیط حسگر: این لایه محل عبور نمونه زیستی بوده و ضریب شکست آن در بازه ۱/۳۳ تا ۱/۴۰ تغییر می‌کند. این بازه منطبق با ضریب‌شکست‌محیط‌های زیستی نظیر آب، خون و بافت‌های سرطانی است که کاربردپذیری حسگر را در تشخیص‌های پزشکی نشان می‌دهد [۴،۳].



شکل ۱. شماتیک هندسی حسگر پلاسمونیک پیشنهادی در پیکربندی کرچمن شامل چهار لایه طلا، فسفرسیاه، گرافن و محیط حسگر

شبیه‌سازی‌های عددی با استفاده از روش ماتریس انتقال انجام شده است. در این روش، ماتریس مشخصه هر لایه به صورت زیر تعریف می‌شود [۲،۴]:

$$M_k = \begin{pmatrix} \cos(\beta_k d_k) & (\frac{i\sin(\beta_k d_k)}{q_k} \\ iq_k \sin(\beta_k d_k) & \cos(\beta_K d_k) \end{pmatrix} \quad (۱)$$

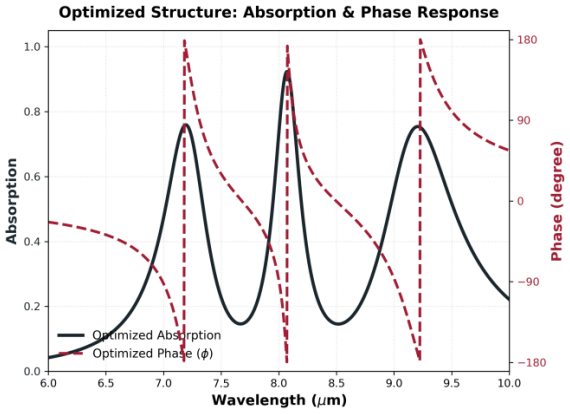
که در آن d_k ضخامت فیزیکی لایهk، β_k ضخامت‌فاز لایه و q_k پارامتری وابسته به زاویه تابش و ضریب شکست لایه می‌باشد. ضریب بازتاب کل ساختار از ماتریس کل به دست آمده و جذب از رابطه بقای انرژی $A = 1 - |r|^2$ محاسبه شده است.

پارامترهای فیزیکی و هندسی بهینه ساختار در جدول ۱ خلاصه شده است.

عنوان	نماد هندسی	مقدار
طلا	t_{Au}	42 nm
ضخامت فسفرسیاه	t_{BP}	5 nm
ضخامت گرافن	t_{gr}	0.34 nm
تراز فرمی‌گرافن	E_F	0.8 eV
دوره تناوب	p	250 nm

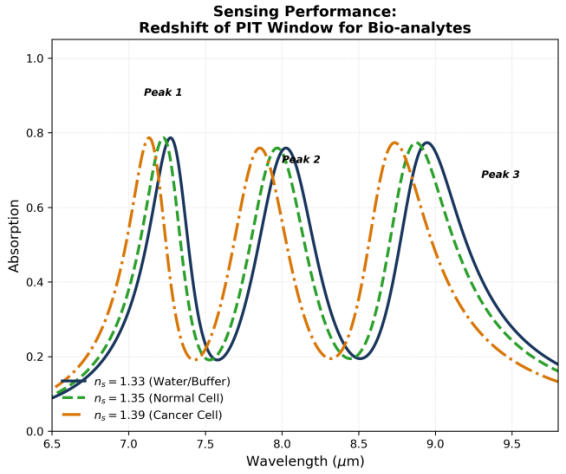
نتایج و بحث

با اعمال پارامترهای بهینه جدول ۱، رفتار جذب و فاز سیستم در ضریب شکست مرجع ۱/۳۳ (آب) شبیه‌سازی شد. نتایج در شکل ۲ نشان داده شده است. در ضخامت بهینه ۴۲ نانومتری لایه طلا، شرایط جفت‌شدگی بحرانی برقرار شده و جذب اپتیکی در دو قله جانبی به حداکثر مقدار خود (نزدیک به ۱۰۰ درصد) می‌رسد. در ناحیه میانی طیف، تداخل ویرانگر بین مد روشن تحریک‌شده در لایه طلا و مدهای تاریک ایجادشده در لایه‌های فسفرسیاه و گرافن، منجر به کاهش شدید جذب و تشکیل یک دره تشدید باریک در طول‌موج حدود ۸/۲ µm می‌گردد. جهش فازی ۱۸۰ درجه در طول‌موج‌های ۷ و ۹ میکرومتر رخ می‌دهد.

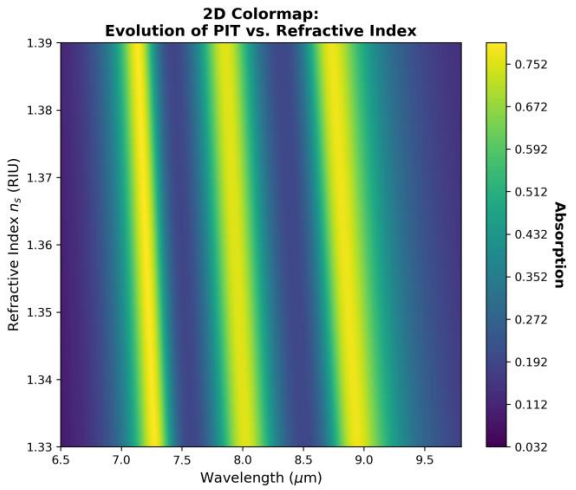


شکل ۲. طیف جذب اپتیکی (منحنی آبی) و پاسخ فاز (منحنی قرمز) حسگر پیشنهادی بر حسب طول‌موج در ضریب شکست مرجع ۱/۳۳ (آب خالص). یک دره تشدید باریک در طول‌موج حدود ۸/۲ µm مشاهده می‌شود.

به منظور تحلیل فیزیک حاکم بر پدیده شفافیت القایی پلاسمونیکی، توزیع میدان الکتریکی در سه طول‌موج مشخص شامل دو قله جذب و یک دره تشدید مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاصل در شکل ۳ نشان داده شده است. در طول‌موج قله جذب اول (۷/۵ µm)، میدان الکتریکی به شدت در لایه طلا متمرکز می‌باشد که حاکی از تحریک مد پلاسمونی روشن در این لایه است. در طول‌موج دره تشدید (۸ µm) PIT، میدان الکتریکی به صورت متوازن بین لایه طلا و لایه‌های دوبعدی (فسفرسیاه و گرافن) توزیع شده است و یک الگوی تداخلی پیچیده مشاهده می‌شود. این توزیع متوازن انرژی، بیانگر وقوع تداخل ویرانگر بین مد روشن و مدهای تاریک بوده که مستقیماً به ایجاد پنجره شفافیت PIT منجر می‌شود. در طول‌موج قله جذب دوم (۹/۵ µm)، میدان الکتریکی عمدتاً در لایه فسفرسیاه متمرکز شده که نشان‌دهنده نقش غالب این لایه در تشدید دوم می‌باشد.



شکل ۳. توزیع میدان الکتریکی در ساختار پیشنهادی در سه طول‌موج مختلف: (راست) طول‌موج ۷/۵ µm که میدان در لایه طلا متمرکز شده است، (وسط) طول‌موج حدود ۸ µm که میدان به طور متوازن بین لایه طلا و لایه‌های دوبعدی توزیع شده است، (چپ) طول‌موج ۹/۵ µm که میدان عمدتاً در لایه فسفرسیاه متمرکز شده است.



شکل ۴. جابه‌جایی طیف جذب حسگر برای سه محیط بیولوژیکی شامل آب خالص (۱/۳۳)، سلول نرمال (۱/۳۵) و سلول سرطانی (۱/۳۹) همراه با نقشه رنگی دوبعدی جذب بر حسب طول‌موج و ضریب شکست محیط.

به منظور ارزیابی عملکرد حسگر در کاربردهای بالینی، پاسخ طیفی ساختار برای سه محیط بیولوژیکی استاندارد شامل آب خالص (n_s = ۱/۳۳)، سلول نرمال (n_s =۱/۳۵) و سلول سرطانی (n_s = ۱/۳۹) مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاصل در شکل ۴ نمایش داده شده است. با افزایش ضریب‌شکست محیط آنالیت، پنجره شفافیت PIT و دره مرکزی تشدید به سمت طول‌موج‌های بلندتر جابه‌جا می‌شوند. با تغییر ضریب-شکست از مقدار ۱/۳۳ به ۱/۳۹، دره تشدید حدود ۹۰ تا ۱۱۰ نانومتر جابه‌جایی دارد. تصویر کانتور دوبعدی جذب بر حسب طول‌موج و ضریب‌شکست‌محیط، به وضوح نشان‌دهنده جابه‌جایی یکنواخت و خطی قله‌ها و دره‌های تشدید می‌باشد.

طول‌موج دره مرکزی تشدید برای مقادیر مختلف ضریب‌شکست محیط استخراج گردیده است. رابطه بین طول‌موج دره تشدید و ضریب-شکست محیط از رفتار خطی پیروی می‌کند. حساسیت طیفی حسگر از شیب منحنی کالیبراسیون خطی محاسبه می‌شود. بر اساس رابطه $S = \frac{\Delta\lambda}{\Delta n_s}$، مقدار حساسیت‌طیفی برابر با (μm/RIU) ۴/۵ به دست آمده است. ضریب‌حساسیت حسگر نیز از نسبت حساسیت‌طیفی به پهنای باند در نیمه ماکزیمم دره تشدید $FOM = \frac{s}{FWHM}$ محاسبه می‌گردد. مقدار این پارامتر برای ساختار پیشنهادی برابر با μm^{-1} ۳۱/۴ محاسبه شده است. محدوده ضریب‌شکست ۱/۳۳ تا ۱/۳۹ با ضریب-شکست محیط‌های زیستی متداول از جمله آب، خون و بافت‌های سرطانی تطابق دارد که کاربردپذیری حسگر طراحی‌شده در تشخیص‌های پزشکی را تأیید می‌کند.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، یک حسگر پلاسمونیک مبتنی بر لایه‌های یکپارچه طلا، فسفرسیاه و گرافن در پیکربندی کرچمن طراحی و شبیه‌سازی شده است. بر اساس نتایج به دست آمده، ضخامت بهینه لایه طلا برابر با ۴۲ نانومتر تعیین گردید که در این ضخامت، شرایط جفت‌شدگی بحرانی برقرار می‌شود. طیف جذب ساختار پیشنهادی نشان می‌دهد که یک دره تشدید باریک در طول‌موج حدود ۸/۲ میکرومتر ایجاد شده است. جهش فازی ۱۸۰ درجه در طول‌موج‌های ۷ و ۹ میکرومتر رخ می‌دهد. ارزیابی عملکرد حسگر در محیط‌های بیولوژیکی مختلف نشان داد که این ساختار قابلیت تشخیص تغییرات ضریب‌شکست در بازه ۱/۳۳ تا ۱/۳۹ را دارا می‌باشد. این بازه با ضریب‌شکست محیط‌هایی مانند آب، خون و بافت‌های سرطانی مطابقت دارد. مقادیر حساسیت‌طیفی و ضریب‌حساسیت حسگر به ترتیب برابر با (μm/RIU) ۴/۵ و μm^{-1} ۳۱/۴ محاسبه گردید که بیانگر عملکرد مطلوب ساختار پیشنهادی می‌باشد. با توجه به نتایج حاصل، حسگر طراحی‌شده می‌تواند به عنوان گزینه‌ای مناسب در کاربردهای تشخیص سلول‌های سرطانی، سنجش گلوکز و سایر آنالیت‌های بیولوژیکی مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع‌ها

[1] C. Liu, H. Li, H. Xu, M. Zhao, C. Xiong, M. Li, B. Ruan, B. Zhang, K. Wu, "Plasmonic biosensor based on excellently absorbable adjustable plasmon-induced transparency in black phosphorus and graphene metamaterials," New Journal of Physics, (2020) 073049.

[2] B. Mulyanti, C. Wulandari, N. R. Mohamad, E. Rifaldi, L. Hasanah, P. S. Menon, "Bimetallic Ag/Au thin films in Kretschmann-based surface plasmon resonance sensor for glucose detection," (2020) 485-492.

[3] A. Kumar, A. K. Yadav, A. S. Kushwaha, S. K. Srivastava, "A comparative study among WS2, MoS2 and graphene-based surface plasmon resonance (SPR) sensor," (2020) 100012.

[4] M. Goli, S. Mahmoudi, M. Moradi, "Bio-Sensor Based on Surface Plasmon Polariton: Study, Comparison and Optimization," (2018), 5(3), 209-213.

بررسی تأثیر جانشینی هالوژن بر گاف نواری پروسکایت‌های $MAPbX_3$ (X = I، Br، Cl) با رویکرد بازتحلیل داده‌های تجربی و محاسباتی DFT

مشحون، سارا[۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

چکیده

در این پژوهش، تأثیر جانشینی هالوژن (ید، برم، کلر) بر گاف نواری پروسکایت‌های آلی-معدنی $MAPbX_3$ به صورت سیستماتیک بررسی شده است. با بازتحلیل داده‌های تجربی منتشر شده و نتایج محاسباتی تئوری تابعی چگالی(DFT) ، یک رابطه خطی بین ثابت شبکه و گاف نواری مشاهده شد. نتایج نشان می‌دهد که با کاهش شعاع یونی هالوژن از I به Cl ، ثابت شبکه از ۶/۲۹ به ۵/۶۸ آنگستروم کاهش و گاف نواری از ۱/۵۵ به ۲/۹۱ الکترون‌ولت افزایش می‌یابد. یک ضریب همبستگی ۰/۹۹ بین این دو پارامتر وجود دارد. این یافته می‌تواند برای مهندسی گاف نواری در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی مورد استفاده قرار گیرد.

واژه های کلیدی: *پروسکایت هالید سرب، جانشینی هالوژن، گاف نواری، نظریه تابعی چگالی، سلول خورشیدی.*

Investigation of Halide Substitution Effect on the Band Gap of $MAPbX_3$ (X = I, Br, Cl) Perovskites via Re-analysis of Experimental and Computational Data

Mashhoun, Sara[1*]

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

Abstract

In this study, the effect of halide substitution (iodine, bromine, chlorine) on the band gap of organic-inorganic $MAPbX_3$ perovskites has been systematically investigated. By re-analyzing published experimental data and density functional theory (DFT) computational results, a linear relationship between the lattice constant and the band gap was observed. The results show that as the ionic radius of the halide decreases from I to Cl, the lattice constant decreases from 6.29 to 5.68 Å, while the band gap increases from 1.55 to 2.91 eV. A correlation coefficient of 0.99 exists between these two parameters. This finding can be used for band gap engineering in perovskite solar cells.

***Keywords**: Lead halide perovskite, Halide substitution, Band gap, Density functional theory (DFT), Solar cell*

PACS No. 70

۱- مقدمه

پروسکایت‌های هالید سرب با فرمول عمومی ABX_3 از مهم‌ترین خانواده‌های نیمه‌رساناهای بلوری در فیزیک ماده چگال هستند که ویژگی‌های الکترونی آن‌ها به شدت به ساختار بلوری وابسته است [۱]. ساختار پروسکایت ایده‌آل (گروه فضایی $Pm\bar{3}m$) از شبکه‌ای سه‌بعدی از هشت‌وجهی‌های PbX_6 تشکیل شده که کاتیون A در حفره‌های میان آن‌ها قرار می‌گیرد [۲]. تغییر اندازه یا الکترونگاتیویته یون هالوژن، طول پیوند Pb–X و زاویه‌های شبکه را تغییر داده و در نهایت منجر به تغییر در ساختار نوار انرژی می‌شود [۲ و ۳].

در ترکیبات متیل آمونیوم سرب هالید ($MAPbX_3$)، تغییر هالوژن X به‌طور سیستماتیک بر رفتار ساختاری و الکترونی اثر می‌گذارد. در دمای اتاق، $MAPbI_3$ در فاز تتراگونال (گروه فضایی I4/mcm) پایدار است، در حالی که $MAPbBr_3$ و $MAPbCl_3$ ساختار مکعبی (گروه فضایی $Pm\bar{3}m$) دارند [۴-۶]. این تفاوت فازی، حساسیت بالای این مواد به پارامترهای شبکه‌ای و یونی را نشان می‌دهد. $MAPbI_3$ با گاف نواری مستقیم حدود eV

۱/۵۵ یکی از نمونه‌های شاخص این خانواده است [۳]. ساختار نواری این مواد عمدتاً از برهمکنش اوربیتال‌های Pb-6p و X-np تشکیل شده و به شدت به تغییرات ساختاری وابسته است [۷]؛ به‌طوری‌که جانشینی ید با برم و کلر موجب کاهش ثابت شبکه و افزایش گاف نواری می‌شود [٤].

مطالعات تجربی و نظری نشان داده‌اند که جانشینی هالوژن ابزاری مؤثر برای مهندسی گاف نواری در این خانواده از مواد است [۸]. محاسبات مبتنی بر نظریه تابعی چگالی[1] (DFT) نیز نشان می‌دهند که نتایج به انتخاب تابعی و اثر جفت‌شدگی اسپین-مدار[2] (SOC) وابسته هستند [۷، ۹]. این مواد به دلیل قابلیت تنظیم گاف نواری، در ادوات اپتوالکترونیکی و سلول‌های خورشیدی کاربرد گسترده‌ای یافته‌اند [۱۰، ۱۱] و به‌ویژه برای ساخت سلول‌های خورشیدی چندپشته (تندم[3]) و آشکارسازهای نوری فرابنفش-مرئی مناسب هستند [٤، ۱۲]. گزارش‌های اخیر نشان می‌دهد که بازدهی سلول‌های پروسکایتی با سرعت بالایی در حال افزایش است [۱۳].

در سال‌های اخیر، مطالعات تجربی و محاسباتی متعددی در زمینه وابستگی ساختار الکترونی این مواد به ترکیب شیمیایی و پارامترهای شبکه‌ای گزارش شده است [۱۸-۱۴]. در این مطالعات نشان داده شده است که تغییر ترکیب هالوژنی و در نتیجه تغییر در ثابت شبکه، می‌تواند به‌طور مستقیم بر برهمکنش‌های اوربیتال‌های Pb–X و در نهایت بر ساختار نوار انرژی اثرگذار باشد [۱٤، ۱۵]. همچنین رویکردهای مبتنی بر یادگیری ماشین و محاسبات داده‌محور نیز برای درک و پیش‌بینی رفتار الکترونی این خانواده از مواد مورد استفاده قرار گرفته‌اند [۱۶]. مطالعات تجربی روی ترکیبات $MAPbX_3$ (X = I, Br, Cl) نشان داده‌اند که تغییر هالوژن موجب تغییرات همزمان در ساختار بلوری و خواص اپتیکی می‌شود [۱۵، ۱۸]. به‌طور مشخص، کاهش ثابت شبکه در اثر جایگزینی ید با برم و کلر با افزایش گاف نواری همراه است که این روند در اندازه‌گیری‌های طیف‌سنجی نوری نیز مشاهده شده است [۱٤، ۱۸]. با وجود پژوهش‌های گسترده، یک رابطه کمّی و یکپارچه میان ثابت شبکه و گاف نواری در کل خانواده $MAPbX_3$ هنوز به‌صورت جامع ارائه نشده است. هدف این پژوهش، استخراج چنین رابطه‌ای برای اولین بار بر اساس بازتحلیل داده‌های تجربی و محاسباتی موجود است.

۲- روش تحقیق

این پژوهش مبتنی بر تحلیل داده‌های تجربی و نتایج محاسباتی گزارش‌شده در منابع معتبر است. داده‌های مربوط به ثابت شبکه و گاف نواری برای ترکیبات $MAPbI_3$، $MAPbBr_3$ و $MAPbCl_3$ از مطالعات تجربی و نظری منتخب استخراج شده‌اند [۱، ۲].

همچنین نتایج محاسبات DFT در دو سطح تقریب[4] PBE (GGA) و PBE+SOC از مطالعات پیشین گردآوری شده‌اند [۷-۵].

برای اطمینان از مقایسه‌پذیری داده‌ها، تنها نتایج مربوط به فاز شبه‌مکعبی در دمای اتاق (۳۰۰-۲۹۸ K) انتخاب شدند. داده‌ها پس از یکسان‌سازی واحدها، بررسی سازگاری ساختاری و حذف داده‌های ناسازگار در یک مجموعه داده مشترک قرار گرفتند.

تحلیل آماری شامل رگرسیون خطی برای بررسی رابطه میان ثابت شبکه و گاف نواری انجام شد. ضریب تعیین R^2 به‌عنوان معیار شدت همبستگی استفاده شد. کلیه پردازش‌ها و نمودارها با نرم‌افزار Microsoft Excel انجام شده است. این نوع تحلیل در مطالعات داده‌محور مواد نیمه‌رسانا به‌طور گسترده مورد استفاده قرار گرفته است [۱۹].

۳- نتایج و بحث

۳-۱- تغییرات ساختاری

با تغییر هالوژن از ید به کلر در ترکیبات $MAPbX_3$، کاهش شعاع یونی هالوژن ($I^- \approx 220$ pm، $Br^- \approx 196$ pm، $Cl^- \approx 181$ pm) منجر به انقباض شبکه بلوری می‌شوداین انقباض مستقیما در کاهش ثابت شبکه از ٦/۲۹ Å در $MAPbI_3$ به ۵/٦۸ Å در $MAPbCl_3$ قابل مشاهده است. جدول ۱ پارامترهای شبکه و گاف نواری برای سه ترکیب $MAPbX_3$ را نشان می‌دهد.

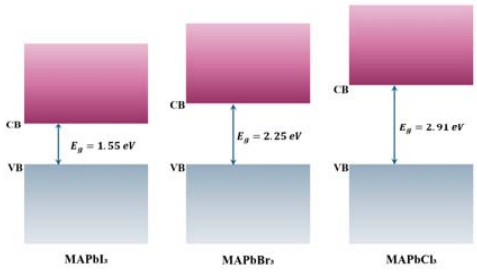
جدول۱ : پارامترهای شبکه و گاف نواری برای سه ساختار پروسکایت هالید سرب [۱، ۲، ۵]

ترکیب	ثابت شبکه تجربی(Å)	گاف نواری تجربی(eV)	گاف نواری PBE (eV)	گاف نواری PBE+SOC (eV)
$MAPbI_3$	۶/۲۹	۱/۵۵	۱/۶۳	۱/۰۵
$MAPbBr_3$	۵/۹۳	۲/۲۵	۲/۳۰	۱/۷۰
$MAPbCl_3$	۵/۶۸	۲/۹۱	۳/۰۲	۲/۴۰

۳-۲- تغییرات گاف نواری

نتایج نشان می‌دهد که با تغییر هالوژن از ید به کلر در ساختار $MAPbX_3$، گاف نواری به‌صورت یکنواخت افزایش می‌یابد. طبق داده‌های تجربی جدول ۱ این تغییر از ۱/۵۵ eV در $MAPbI_3$ به ۲/۹۱ eV در $MAPbCl_3$ مشاهده می‌شود و روند آن در شکل ۱ نشان داده شده است.

این رفتار را می‌توان به تغییرات همزمان در ساختار الکترونیکی و هندسه بلوری نسبت داد که مستقیماً از کاهش شعاع یونی هالوژن و انقباض شبکه ناشی می‌شود.



شکل ۱ مقایسه شماتیک گاف نواری در سه ترکیب $MAPbX_3$ (X = I، Br، Cl)

از دیدگاه ساختار نواری، دو مکانیسم اصلی در این روند نقش دارند:

۱. تغییر در هم‌پوشانی اوربیتال‌ها

با کاهش شعاع هالوژن از ید به برم و کلر، طول پیوند Pb–X کاهش یافته و در نتیجه شدت هم‌پوشانی بین اوربیتال‌های Pb-6p و X-np تغییر می‌کند. این تغییر منجر به افزایش جدایی بین نوار ظرفیت و نوار رسانش و در نتیجه افزایش گاف نواری می‌شود.

۲. تغییر در موقعیت نوار ظرفیت

افزایش الکترونگاتیویته هالوژن‌ها از ید به برم و کلر (به ترتیب ۲٫۶۶، ۲٫۹۶ و ۳٫۱۶) باعث کاهش انرژی اوربیتال‌های p هالوژن و در نتیجه پایین‌تر رفتن بیشینه نوار ظرفیت نسبت به سطح انرژی مرجع می‌شود. در نتیجه، حتی در صورت تغییر محدود در نوار رسانش، فاصله بین بیشینه نوار ظرفیت و کمینه نوار رسانش افزایش یافته و گاف نواری بزرگ‌تر می‌شود.

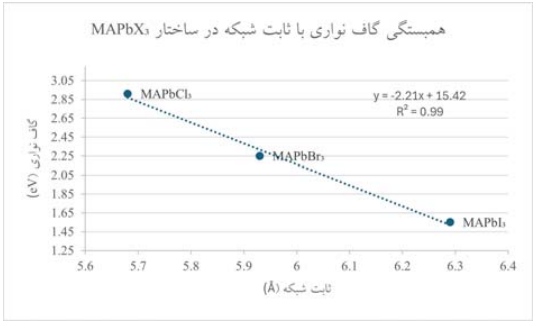
ترکیب این دو اثر – کاهش هم‌پوشانی اوربیتالی و جابجایی انرژی نوار ظرفیت – منجر به افزایش سیستماتیک گاف نواری در کل خانواده $MAPbX_3$ می‌شود که با روند تجربی مشاهده‌شده کاملاً سازگار است.

۳-۳- همبستگی کمّی

بین ثابت شبکه و گاف نواری(شکل ۲) رابطه خطی معکوس مشاهده می‌شود:

$$E_g(eV) = -2.21 \times a(\text{Å}) + 15.42 \qquad (۱)$$

که در آن a ثابت شبکه است. مقدار $R^2 \approx$ ۰/۹۹ نشان‌دهنده همبستگی بسیار قوی است. با استفاده از قانون وگارد، ثابت شبکه‌ی آلیاژهای $MAPb(I_{1-x}Br_x)_3$ از میانگین وزنی ثابت‌های شبکه $MAPbI_3$ و $MAPbBr_3$ به دست می‌آید. سپس با جایگذاری در رابطه‌ی (۱)، گاف نواری آلیاژ قابل پیش‌بینی خواهد بود. به عنوان مثال، برای x=۰/۵، ثابت شبکه ۶٫۱۱ Å و گاف نواری ۱/۹۱ الکترون‌ولت برآورد می‌شود.



شکل۲ : همبستگی گاف نواری با ثابت شبکه در ساختار $MAPbX_3$

۴-۳- مقایسه با نتایج DFT

نتایج محاسبات با تابعی PBE (بدون در نظر گرفتن SOC) گاف نواری را کمی بیشتر از مقدار واقعی نشان می‌دهد (خطای حدود ۰/۱ الکترون‌ولت). اگر SOC را به محاسبات اضافه کنیم (PBE+SOC) گاف به شدت کاهش پیدا می‌کند و از مقدار تجربی کمتر می‌شود (خطای حدود ۰/۵ الکترون‌ولت). چنین رفتاری ناشی از اثرات نسبیتی در اتم Pb است که باعث شکافتگی نوار رسانش می‌شود. این یافته با مرجع [۸] همخوانی دارد و نشان می‌دهد برای پروسکایت‌های سرب‌دار، لحاظ کردن SOC ضروری است. با این حال، ترکیب SOC با یک تابعی هیبرید مانند HSE06 [۵] می‌تواند دقت را افزایش دهد [۶-۵، ۲۱-۲۰].

۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، تأثیر جانشینی هالوژن بر گاف نواری در پروسکایت‌های $MAPbX_3$ به‌صورت کمّی بررسی شد. نوآوری اصلی این کار، استخراج یک رابطه خطی ساده و یکپارچه میان ثابت شبکه و گاف نواری برای کل خانواده $MAPbX_3$ است که تاکنون به‌صورت جامع ارائه نشده بود. نتایج نشان داد:

- با تغییر هالوژن از I به Br و Cl ، گاف نواری به‌طور سیستماتیک از ۱/۵۵ eV به ۲/۹۱ eV افزایش می‌یابد.

- کاهش شعاع یونی هالوژن منجر به انقباض شبکه و ایجاد یک همبستگی خطی قوی($R^2 \approx$ ۰/۹۹) بین ثابت شبکه و گاف نواری می‌شود که امکان پیش‌بینی گاف نواری را بر اساس پارامتر شبکه فراهم می‌کند.
- محاسبات مبتنی بر DFT نشان می‌دهد که تقریب PBE بدون در نظر گرفتنSOC ، گاف نواری را حدود ٪٤ بیش‌برآورد می‌کند، در حالی که لحاظ کردن SOC منجر به کم‌برآوردی حدود ٪۲۰ می‌شود.

این نتایج نشان می‌دهد که خواص الکترونیکی این خانواده به‌شدت به ساختار بلوری وابسته است و پارامتر شبکه می‌تواند به‌عنوان یک شاخص مؤثر برای پیش‌بینی و مهندسی گاف نواری به کار رود. این همبستگی می‌تواند در طراحی مواد پروسکایتی با گاف نواری هدفمند برای کاربردهای اپتوالکترونیکی و فوتوولتائیک مورد استفاده قرار گیرد.

بررسی اثر جانشینی هم‌زمان در هر دو جایگاه A و X و همچنین استفاده از تابعی‌های دقیق‌تر مانند HSE06 می‌تواند دقت پیش‌بینی گاف نواری را در این خانواده بهبود دهد.

منابع

[1] T. Baikie *et al.*, "Synthesis and crystal chemistry of the hybrid perovskite $(CH_3NH_3)PbI_3$ for solid-state sensitised solar cell applications", *Journal of Materials Chemistry A*, **1**(18), 5628-5641 (2013).
[2] C. C. Stoumpos *et al.*, "Semiconducting tin and lead iodide perovskites with organic cations: Phase transitions, high mobilities, and near-infrared photoluminescent properties", *Inorganic Chemistry*, **52**(15), 9019-9038 (2013).
[3] A. Kojima *et al.*, "Organometal halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells", *Journal of the American Chemical Society*, **131**(17), 6050-6051 (2009).
[4] J. H. Noh *et al.*, "Chemical management for colorful, efficient, and stable inorganic–organic hybrid nanostructured solar cells", *Nano Letters*, **13**(4), 1764-1769 (2013).
[5] P. Umari *et al.*, "Relativistic GW calculations on $CH_3NH_3PbI_3$ and $CH_3NH_3SnI_3$ perovskites for solar cell applications", *Scientific Reports*, **4**, 4467 (2014).
[6] J. Even *et al.*, "Importance of spin–orbit coupling in hybrid organic/inorganic perovskites for photovoltaic applications", *The Journal of Physical Chemistry C*, **117**(22), 11517-11525 (2013).
[7] G. Giorgi *et al.*, "Small photocarrier effective masses featuring ambipolar transport in methylammonium lead iodide perovskite: A density functional study", *The Journal of Physical Chemistry C*, **117**(46), 24285-24291 (2013).
[8] U. Shahzadi *et al.*, "Band Gap Alteration of Halide Mixing in Hybrid Perovskites: A First-Principles Study with Statistical Analysis", *The Journal of Physical Chemistry A*, **128**(6), 1173-1180 (2024).
[9] F. P. Sabino *et al.*, "Spin-orbit coupling effects on the electronic structure of halide perovskites", *Physical Review B*, **109**(12), 125201 (2024).
[10] Y. Shi *et al.*, "Tandem perovskite/silicon solar cells: challenges and opportunities", *ACS Energy Letters*, **9**(3), 850-865 (2024).
[11] H. Tao and Y. Chen, "Perovskite solar cells: towards commercialization", *Nanotechnology Reviews*, **12**(1), 20230512 (2023).
[12] L. Martínez-Goyeneche *et al.*, "Narrowband Monolithic Perovskite-Perovskite Tandem Photodetectors", *Advanced Optical Materials*, **10**, 2201047 (2022).
[13] National Renewable Energy Laboratory (NREL), "Best Research-Cell Efficiency Chart", U.S. Department of Energy, https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html (2025).
[14] S. Ullah *et al.*, "An intrinsic electrical conductivity study of perovskite powders $MAPbX_3$ (X = I, Br, Cl) to investigate its effect on their photovoltaic performance", *Physical Chemistry Chemical Physics*, **26**, 6736-6751 (2024).
[15] S. Dutt *et al.*, "Halide tuning in derivative organic–inorganic perovskites $MAPb(Br_{1-x}Cl_x)_3$: exploring structural, optical and vibrational characteristics", *Journal of Materials Science*, **59**, 15449-15468 (2024).
[16] S. Wang *et al.*, "Data-driven optimization and machine learning analysis of compatible molecules for halide perovskite materials", *npj Computational Materials*, **10**, 114 (2024).
[17] S. Zhang *et al.*, "Can thick metal-halide perovskite single crystals have narrower optical bandgaps with near-infrared absorption?", *Physical Chemistry Chemical Physics*, **26**, 9137-9148 (2024).
[18] S. Mehra *et al.*, "Experimental and Theoretical Investigations of $MAPbX_3$-Based Perovskites (X= Cl, Br, I) for Photovoltaic Applications", *ChemistryOpen*, **13**, e202300055 (2024).
[19] J. Nelson *et al.*, "Machine learning for materials scientists: An introduction and overview", *Nature Reviews Materials*, **4**, 124-130 (2019).
[20] F. Brivio *et al.*, "Structural and electronic properties of hybrid perovskites for high-efficiency thin-film photovoltaics", *APL Materials*, **1**, 042111 (2013).
[21] J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, "Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential", *The Journal of Chemical Physics*, **118**(18), 8207-8215 (2003).

[۱] Density Functional Theory
[۲] Spin-Orbit Coupling
[۳] Tandem solar cells
[٤] Perdew-Burke-Ernzerhof (Generalized Gradient Approximation)
[٥] Heyd-Scuseria-Ernzerhof 2006

شبیه‌سازی الگوی پراش بلور گارنت آلومینیوم ایتریوم با نقایص بلوری

کاظمی، زاهده؛ رضوانی جلال، مسعود؛ سوری، داریوش

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

در این مقاله، الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) بلور گارنت آلومینیوم ایتریوم (YAG) در حالت‌های مختلف شامل بلور کپه‌ای، بلور دارای نقص شبکه، شبیه‌سازی شده است. با توجه به هزینه‌بر و زمان‌بر بودن آزمایش‌های تجربی به‌ویژه در مقیاس نانو، استفاده از شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای بر اساس مدل‌های فیزیکی مناسب، روشی کارآمد برای پیش‌بینی رفتار ساختاری مواد محسوب می‌شود. در این کار، با دانستن تعداد اتم‌ها و موقعیت آن‌ها در یاخته‌ی واحد، شدت پراش بر حسب زاویه‌ی پراکندگی با استفاده از روابط تحلیلی و محاسبات عددی تعیین شده است. همچنین تأثیر حذف یک اتم در الگوی پراش بررسی شده است.

واژه های کلیدی: *الگوی پراش XRD گارنت آلومینیوم ایتریوم ، شبیه‌سازی ، ساختار بلوری، نانوذرات، نقص.*

Simulation of the Diffraction Pattern of Yttrium Aluminum Garnet crystal with crystal defects

Kazemi, Zahedeh; Rezvani Jalal, Masoud; Souri, Dariush

Department of Physics, Faculty of Science, Malayer University, Malayer

Abstract

In this study, the X-ray diffraction (XRD) pattern of yttrium aluminum garnet (YAG) crystal has been simulated in various conditions including bulk crystal, crystal with lattice defects. Given the high cost and time-consuming nature of experimental investigations, especially at the nanoscale, computer simulations based on proper physical models provide an efficient approach for predicting the structural behavior of materials. In this work, by knowing the number of atoms and their positions within the unit cell, the diffraction intensity as a function of scattering angle has been determined using analytical relations and numerical computations. Furthermore, the effects of removing one atom on the diffraction pattern have been investigated.

***Keywords**: XRD diffraction pattern, yttrium aluminum garnet, Simulation, Crystal structure, nanoparticles, defect.*

مقدمه

پراش پرتو ایکس ابزار توصیفی بسیار مفیدی برای مطالعه غیرمخرب ساختار بلوری، ترکیب شیمیایی و خواص فیزیکی مواد بلوری است. از روش‌های متنوع مرتبط به آن می‌توان اندازه‌گیری خواص ساختاری فازهای بلوری مانند کُرنش، چگالی نابجایی، اندازه دانه، ترکیب فازی و نقص ساختاری را نام برد [۱]. هنگامی که اندازه بلورک از ابعاد کُپه‌ای به ابعاد نانو کاهش می‌یابد قله‌های *XRD* پهن می‌شوند. روش‌های مختلفی برای تحلیل الگوی *XRD* ارائه شده است. یکی از این روش‌ها برای این کار، استفاده از محاسبات عددی و شبیه‌سازی است. با انجام شبیه‌سازی *XRD* با

تکیه بر مدل‌های صحیح فیزیکی می‌توان اطلاعات ارزشمندی از ساختار نانوذرات به دست آورد.

سنتز نانوذرات و بررسی تجربی آنها معمولاً ساده نیست و به همین دلیل استفاده از شبیه‌سازی‌های کامپیوتری برای پیش‌بینی رفتار آنها در شرایط مختلف می‌تواند نقش حیاتی ایفا کند. سرامیک‌های شفاف پلی‌کریستالی *YAG* آلایش‌یافته با یون‌های خاکی کمیاب طی دو دهه‌ی گذشته و از زمان نخستین نمایش آن‌ها به عنوان ماده لیزری در سال ۱۹۹۵، به‌طور گسترده مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. سرامیک‌های شفاف *YAG* به دلیل ویژگی‌های مطلوب‌شان نسبت به بلورهای تکی، از جمله حداکثر غلظت آلایش بیشتر، آزادی طراحی عملکردی بیشتر، ساخت آسان‌تر، هزینه کمتر و مهم‌تر از همه، خواص نوری و حرارتی برتر، به‌عنوان محیط‌های بهره برای لیزرهای حالت جامد با توان بالا و راندمان بالا پتانسیل قابل‌توجهی در نظر گرفته شده‌اند. مطالعات پیشین نشان داده‌اند که سرامیک‌های *YAG* آلایش‌یافته با خاک‌های کمیاب را می‌توان با خواص نوری و عملکرد لیزری معادل یا فراتر از بلورهای تکی همان ماده ساخت[۲]. در سال‌های اخیر، سرامیک‌های پلی‌کریستالی بسیار شفاف *($Y_3Al_5O_{12}$ (YAG)* آلایش‌یافته با عناصر خاکی کمیاب به‌ویژه *(Nd:YAG)* با بهبود فناوری‌های ساخت و سیستم تحریک دیود لیزری مناسب، به یک محیط لیزری مهم تبدیل شده‌اند. بلور تکی *YAG* به ویژه هنگامی که با Nd^{3+} آلایش شود، پتانسیل خود را به عنوان یک ماده لیزری اثبات کرده است. با این حال، به دلیل دشواری ساخت مواد بلوری تکی با اندازه بزرگ با استفاده از روش‌های معمول رشد بلور، فناوری سرامیک مورد توجه قرار گرفته است که با استفاده از آن می‌توان *YAG* همگن با اندازه بزرگ را با هزینه نسبتاً کمتری ساخت. ثابت شده است که مواد سرامیکی *YAG* عملکرد لیزری عالی مشابه بلورهای تکی *YAG* از خود نشان می‌دهند. در میان مواد *YAG* آلایش‌یافته با خاک‌های کمیاب، بلورهای تکی و سرامیک‌های *(Er:YAG)* با محتوای بالای اربیوم محیط‌های لیزری مهمی برای دستیابی به نشر لیزر در طول‌موج ۳ میکرومتر هستند که به طور گسترده توسط جامعه پزشکی استفاده می‌شود. مطالعات طیفی بالاتبدیلی نیز توسط گروه‌های دیگر بر روی سرامیک‌های *Er:YAG* و *Er,Yb:YAG* گزارش شده است[۳].

فرمول‌بندی الگوی پراش *XRD*

پراش پرتو ایکس از بلورها بر اساس قانون براگ انجام می‌شود:

$$n\lambda = 2dSin(\theta) \quad (۱)$$

که در آن n یک عدد صحیح، λ طول موج پرتو ایکس، d فاصله صفحات بلوری و θ نیز زاویه پراش می‌باشد. برای ساده سازی فرمول، بلور را به صورت کامل در نظر می‌گیریم آنگاه فرمول پراش ساده‌تر می‌شود. بردار انتشار پرتو x فرودی $\vec{k}$، بردار انتشار پرتوی پراکنده شده $\overrightarrow{k'}$ و بردار شبکه وارون نیز $\vec{G}$ باشد آنگاه به فرمول زیر می‌رسیم:

$$\vec{k} - \overrightarrow{k'} = \vec{G} \quad (۲)$$

به عبارت دیگر، با داشتن بردارهای شبکه وارون و معلوم بودن جهت پرتو ایکس فرودی می‌توان تمام $\overrightarrow{k'}$ هایی که شرط فوق را برآورده می‌کنند پیدا کرد. جهت این $\overrightarrow{k'}$ ها در واقع همان موقعیت فضایی قله‌های پراشی را نشان خواهد داد.

حال اگر بلوری که مورد مطالعه قرار دارد دارای نقایص و ناخالصی‌های بلوری باشد، آنگاه فرمول (۲) کار آمد نخواهد بود. در ابعاد نانومتری که شامل فقط چند ده الی چند صد یاخته بسیط شبکه است اعتبار رابطه (۲) باز هم کمتر می‌شود و دیگر خبری از قله‌های تیز و باریک پراشی نخواهد بود حتی ممکن است که ارتفاع قله‌های پراشی نیز تغییر کند. به دلیل اینکه فرمول‌بندی صریح و یکتایی وجود ندارد باید به روش‌های محاسباتی روی آورد. اگر برای مثال N اتم در هر یاخته بسیط وجود داشته باشد و مکان هر اتم نیز با $\overrightarrow{r_n}$ مشخص شود آنگاه دامنه تداخلی پرتوی ایکس فرودی به این اتم‌ها (با بردار انتشار $\vec{k}$) و پرتوهای پراکنده شده از آنها (با بردار انتشار $\overrightarrow{k'}$) به صورت زیر خواهد بود:

$$E = \sum_{n=1}^{N} e^{i(\vec{k}-\overrightarrow{k'}).\overrightarrow{r_n}} \quad (۳)$$

که اگر چندین یاخته وجود داشته باشد آنگاه با جمع همه آنها به راحتی می‌توان شدت پراش بر حسب زاویه پراکندگی و قله‌های پراشی را پیدا کرد. و اگر از رابطه‌ی (۳) میانگین گیری کنیم به رابطه‌ی (٤) می‌رسیم که باعث سهولت در کار می‌شود. با استفاده از رابطه زیر به راحتی می‌توان الگوی XRD هر ذره‌ای را با داشتن اطلاعات مربوط به تعداد اتم‌های موجود در آن و مکان آنها با دقت کامل محاسبه و شبیه‌سازی کرد. این رابطه می‌تواند بسیار کاربردی باشد، به خصوص در نانوبلورک‌ها و نقاط کوانتومی که تعداد اتم‌های تشکیل دهنده آنها خیلی زیاد نیست.

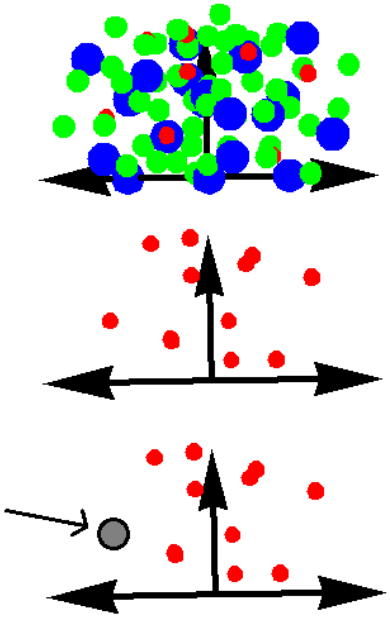
$$I(2\theta) = [1 + \mathrm{Cos}(2\theta)^2] \sum_{m,n} \frac{\mathrm{Sin}(2kr_{mn}\,\mathrm{Sin}(\theta))}{2kr_{mn}\,\mathrm{Sin}(\theta)} \quad (٤)$$

که در آن $\vec{r}_{mn} = \vec{r}_m - \vec{r}_n$ است و $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ است و ۲θ نیز زاویه‌ی بین راستای فرود و راستای پراش می‌باشد[٤].

شبیه‌سازی *XRD*

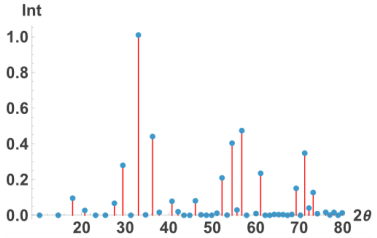
بلور *YAG* دارای ساختار مکعبی مرکز وجهی با ثابت شبکه $a=12.004$ Å است [٥]. و دارای ١٦٠ (٨٠) اتم در سلول مکعبی (اولیه) است. یون‌های Y مکان‌های ٢٤(c) را اشغال می‌کنند و هر یک با هشت اتم اکسیژن هماهنگی دوازده‌وجهی دارند. اتم‌های O مکان‌های ٩٦(h) را اشغال می‌کنند. دو مکان متفاوت برای Al وجود دارد:یکی در مکان ١٦(a) با تقارن نقطه‌ای هشت‌وجهی (C_{3i}) ودیگری در مکان‌های ٢٤(d) با تقارن نقطه‌ای چهاروجهی (S_4) را اشغال می‌کنند. ساختار گارنت را می‌توان به صورت هشت‌وجهی‌ها، چهاروجهی‌ها و دوازده‌وجهی‌های به هم پیوسته با اتم‌های O مشترک در گوشه‌ها در نظر گرفت[٦]. برای انجام شبیه‌سازی از پرتو ایکس با طول موج λ=1.54178 Å (خط K_α مس) استفاده شد. مختصات اتم‌های Y، O و Al از مرجع [٧] استخراج و در کد وارد شد ؛ الگوی *XRD* در حالت کپه‌ای از یک سلول واحد (با ٨٠ اتم) و در حالت نانوبلور، ابر سلولی با ابعاد ١ نانومتر در حالتهای تهی‌جایی و نقص بلوری در یک برنامه‌ی کامپیوتری در محیط متمتیکا (WOLFRAM 14.3) انجام شد.

در این شبیه‌سازی اتم حذف شده یک اتم از ١٢ اتم ایتریوم است و در نهایت از همه ١٢ حالت ممکن، میانگین گیری شد. در شکل ١-بالا سلول واحد شبکه این بلور *YAG* ترسیم شده است. شکل ١-وسطی فقط جایگاه اتم‌های ایتریوم در بلور *YAG* نمایش داده شده است و در شکل ١-پایین یک تهی جایی در عنصر ایتریوم ایجاد شده است.



شکل ١: (بالا) سلول واحد شبکه برای بلور *YAG* با ساختار *BCC*. (وسط) جایگاه اتمهای ایتریوم در بلور *YAG* (پایین) ایجاد تهی جایی یک عنصر ایتریوم.

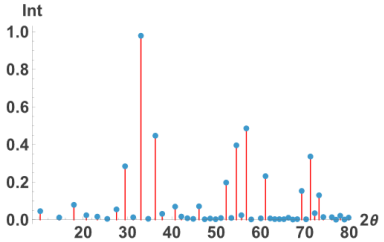
شبیه‌سازی الگوی *XRD* این بلور برای حالت کُپه‌ای توسط برنامه کامپیوتری مذکور نیز در شکل ٢ دیده می‌شود.



شکل ٢: الگوی *XRD* شبیه‌سازی شده برای بلور کپه‌ای *YAG*

بلور *YAG*به گروه فضایی $Ia\bar{3}d$ *(230)* متعلق است. الگوی شبیه‌سازی شده به خوبی با الگوی استاندارد بلور *YAG* به شماره

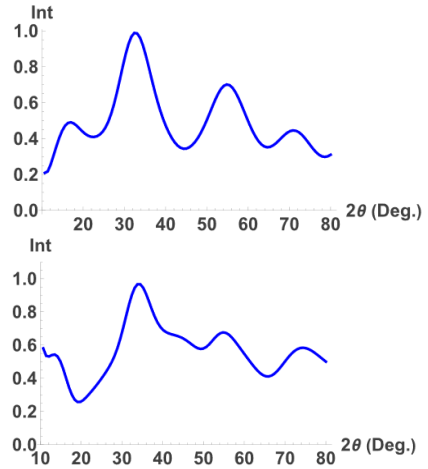
کارت *JCPDS: 33-0040* همخوانی دارد. [٦]. و در شکل ۳ نیز شبیه‌سازی الگوی *XRD* این بلور برای حالت کُپه‌ای برای حالت تهی جایی اتم ایتریوم ترسیم شده است.



شکل ۳: الگوی *XRD* شبیه‌سازی شده برای بلور کپه‌ای *YAG* برای حالت تهی جایی یک اتم ایتریوم

همچنین برای حالت تهی‌جا تغییرات شدت نسبی در زاویه حدود ۱۰/۳ درجه با حالت بدون نقص مقایسه شده و افزایش شدت از ۰ به حدود ۰/۰٤٦ واحد نسبی ایجاد شده است.

اگر ابعاد بلور در ناحیه نانومتر باشد این الگو تغییراتی خواهد داشت. در شکل ٤ الگوی *XRD* مربوط به بلور *YAG* با ابعاد ۱ نانومتری و نیز برای حالت تهی جایی یک اتم ایتریوم آورده شده است که توسط برنامه کامپیوتری مذکور انجام شده است.



شکل ٤: (بالا) الگوی XRD شبیه‌سازی شده نانوبلور YAG با اندازه ۱ نانومتر (پایین) الگوی XRD شبیه‌سازی شده نانوبلور YAG با اندازه ۱ نانومتر برای حالت تهی جایی اتم ایتریوم

نتیجه‌گیری

در این مقاله، به شبیه‌سازی الگوی *XRD* بلور *YAG* در حالتی که شامل تهی جاهای مربوط به یون ایتریوم یا ناخالصی‌هایی که در موقعیت ایتریوم ها است پرداخته شد. مشاهده گردید که تعدادی از قله‌های پراشی که از بابت تئوری وجود دارند ولی تقارن‌ها با عث صفر شدن آن‌ها می‌شود ایجاد ناخالصی‌ها و تهی‌جاها منجربه ایجاد شدت در آن نواحی خواهیم شد مخصوصا" در زوایای نزدیک به ۱۰ درجه یک قله‌ی پراشی هم در حالت تهی جایی و هم در حالت ناخالصی نسبت به وضعیت بدون نقص ایجاد شد. همچنین در زمینه‌ی شبیه‌سازی نانو تفاوت‌هایی دیده می‌شود در مقالات آتی لحاظ کردن موقعیت دقیق پراش‌های یونهای *Er* ، *Yb* و *Nd* و تأثیر دقیق آن‌ها بر روی قله‌ها گزارش خواهد شد.

سپاسگزاری

از دانشگاه ملایر به خاطر حمایت از مقاله قدردانی می‌شود.

مرجع‌ها

[۱] Saeed Ebrahimi, Dariush Souri, Alireza Khezripour, “**Strain-size features of bare ZnSe:Cu and ZnSe:Cu@ZnS core/shell quantum dots from extensive X-ray diffraction analysis, and their photoluminescence properties**”, Journal of Luminescence 244 (2022) 118757.

[۲]Xingtao Chen , et all, **Fabrication and spectroscopic properties of Yb/Er:YAG and Yb, Er:YAG transparent ceramics by co-precipitation synthesis route**, Journal of Luminescence
Volume 188, August 2017, Pages 533-540

[۳] M. Pokhrel, G. A. Kumar, P. Samuel, K. I. Ueda, T. Yanagitani**, Infrared and upconversion spectroscopic studies of high Er3+content transparent YAG ceramic,** Optical Materials Express 1272November (2011), Vol. 1, No. 7.

[۴] A. E. Ross, D. G. Mc Culloch and D. R. McKenziea, **Extending the Debye scattering equation for diffraction from a cylindrically averaged group of atoms: detecting molecular orientation at an interface**, Acta Cryst. A 76, 468–473, 2020.

[۵] Ke Liua,B, XIAOLIN Zhoua, Jing Changa, JUAN Chenga, Bing Dong. **Electronic structure and optical propertiesof yttrium aluminum garnet (Y3Al5O12) under high pressure,** Optoelectronics And Advanced Materials Rapid Communications Vol. 8, No. 3-4, (2014), P. 264 – 269.

[۶] D. Michalik, M.Sopicka-Lizer, J. Plewa, T. Pawlik, **Application Of Mechanochemical Processing To Synthesis Of Yag:Ce Garnet Powder,** Archives Of Metallurgy And Materials Volume 56 (2011).

[۷] https://legacy.materialsproject.org/materials/mp-3050/#

بررسی رفتار جذب H_2S و CO بر سطح آلیاژ Pt-Ru(001) با استفاده از محاسبات DFT: بینش‌هایی برای کاربردهای حسگری گاز

مینا یعقوبی نوتاش[۱]

[۱] آزمایشگاه شبیه‌سازی مولکولی، دانشکده فیزیک دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز

چکیده

در این پژوهش، جذب دو گاز سمی H_2S و CO بر سطح آلیاژ Pt-Ru(001) با استفاده از محاسبات DFT بررسی شده است. پس از تعیین پایدارترین پیکربندی‌های جذب، کمیت‌هایی مانند انرژی جذب، انتقال بار و چگالی حالت‌های تصویر شده (PDOS) محاسبه و تحلیل گردیدند. نتایج نشان می‌دهد که انرژی جذب CO در پایدارترین حالت ((C-u(Ru)) برابر ۲.۴۴- الکترون‌ولت و برای H_2S در پایدارترین حالت ((S-d(Pt)) برابر ۱.۱۲- الکترون‌ولت است که حاکی از جذب قوی‌تر CO می‌باشد. همچنین جذب مولکول CO وابستگی شدیدتری به جهت‌گیری مولکول دارد. آنالیز بار نیز نشان می‌دهد که انتقال بار بین مولکول و سطح برای هر دو مولکول رخ می‌دهد که عاملی مهم در عملکرد حسگری است.

واژه های کلیدی: *آلیاژ Pt-Ru، انرژی جذب، چگالی حالتهای تصویر شده (PDOS)، آنالیز بار Bader*

Investigation of H_2S and CO Adsorption Behavior on Pt-Ru(001) Alloy Surface Using DFT Calculations: Insights for Gas Sensing Applications

Yaghoobi Notash, Mina[1]

[1] *Molecular Simulation Laboratory (MSL), Department of Physics, Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz*

Abstract

In this study, the adsorption of two toxic gases, H_2S and CO, on the surface of Pt-Ru(001) alloy has been investigated using DFT calculations. After determining the most stable adsorption configurations, key quantities such as adsorption energy, charge transfer (Bader analysis), and projected density of states (PDOS) were calculated and analyzed. The results show that the adsorption energy of CO in its most stable configuration (C-u(Ru)) is -2.44 eV, while that of H_2S in its most stable configuration (S-d(Pt)) is -1.12 eV, indicating stronger adsorption of CO. Furthermore, the adsorption of CO exhibits a stronger dependence on molecular orientation. Bader charge analysis also reveals that charge transfer occurs between the molecule and the surface, which is an important factor in sensing performance

***Keywords**: Pt-Ru alloy, Adsorption energy, Projected Density of States (PDOS), Bader charge analysis*

PACS No. 89

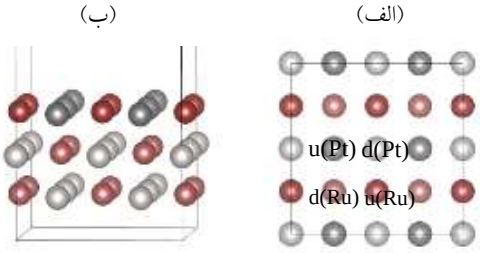
مقدمه

فعالیت‌های صنعتی منجر به انتشار گازهای سمی می‌شوند که خطری جدی برای محیط زیست و سلامت تمام موجودات زنده به شمار می‌روند. در این میان، گاز سولفید هیدروژن (H_2S) که عمدتاً حاصل استخراج نفت و گاز طبیعی و نیز تجزیه مواد آلی است، از خطرناک‌ترین نمونه‌ها محسوب می‌شود. مواجهه با این گاز بسته به غلظت آن، عوارضی از تحریک خفیف چشم تا از دست دادن هوشیاری و حتی مرگ را به دنبال دارد [۱]. از سوی دیگر، گاز مونوکسید کربن (CO) نیز با مکانیسمی متفاوت – یعنی اتصال به هموگلوبین خون و مختل کردن انتقال اکسیژن در بدن – تهدیدی جدی برای سلامت انسان محسوب می‌شود. بنابراین، توسعه موادی که توانایی تشخیص همزمان این دو گاز سمی را داشته باشند، از

اهمیت بالایی برخوردار است. در حال حاضر، روش‌های رایج تشخیص گاز H_2S عمدتاً شامل حسگرهای نوری، حسگرهای نیمه‌هادی مبتنی بر اکسیدهای فلزی و حسگرهای الکتروشیمیایی می‌شود[۲, ۳]. با این وجود، هزینه ساخت بالا، گزینش‌پذیری ضعیف و عملکرد در دمای بالا از جمله چالش‌های اصلی این حسگرهاست که محققان را به دنبال راهکارهایی برای بهبود عملکرد آنها سوق داده است. فلزات نجیب به دلیل خواص کاتالیستی استثنایی و توانایی آنها در تسهیل واکنش‌های سطحی در دماهای پایین، گزینه‌های بسیار مناسبی برای کاربردهای حسگری به شمار می‌روند. پلاتین (Pt) در قالب ترکیب‌ها و آلیاژهای گوناگون به طور گسترده مورد توجه قرار گرفته است. همچنین، روتنیوم (Ru) به عنوان یکی دیگر از فلزات ارزشمند، به دلیل ویژگی‌های کاتالیستی مکمل، مقاومت نسبتاً خوب در برابر مسمومیت با گوگرد و هزینه کمتر در مقایسه با پلاتین، توجه ویژه‌ای را در تحقیقات اخیر به خود جلب کرده است. در این پژوهش، با استفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT) ، برهمکنش دو گاز سمی H_2S و CO با سطح (۰۰۱) آلیاژ دو فلزی Pt-Ru بررسی شده است. برای این منظور، کمیت‌های کلیدی مانند انرژی جذب، میزان انتقال بار پس از فرآیند جذب و چگالی حالت‌های الکترونی (PDOS) محاسبه و تحلیل شده‌اند. هدف اصلی این مطالعه، بررسی خواص جذبی و گزینش‌پذیری سطح آلیاژی نسبت به این دو گاز است.

روش انجام محاسبات

در این پژوهش، تمام محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT) و با استفاده از بسته نرم‌افزاری VASP انجام شده است[٤]. برای توصیف برهمکنش بین یون‌ها و الکترون‌های ظرفیت از روش امواج تخت افزوده شده (PAW) استفاده گردید و شرط همگرایی برای نیروهای وارد بر اتم‌ها ۰.۰۱ الکترون‌ولت بر آنگستروم و برای انرژی 10^{-6} الکترون‌ولت انتخاب شد. برای توصیف برهمکنش‌های تبادلی–همبستگی از تابعی PBE در چارچوب تقریب گرادیان تعمیم‌یافته (GGA) استفاده گردید و اثرات نیروهای واندروالس با استفاده از روش اصلاحی DFT-D2 در نظر گرفته شد[٥, ٦]. نمونه‌برداری از ناحیه بریلوئن به روش منخورشت–پک انجام گرفت؛ بدین ترتیب که برای ساختار سه‌بعدی (سلول واحد) از شبکه k-points با ابعاد ۱۱×۱۱×۱۱ و برای ابرسلول دوبعدی ۲×۲ از شبکه ۱×۵×۵ استفاده شد. برای ساخت آلیاژ دوتایی Pt-Ru، ابتدا ساختار بلوری پلاتین خالص بر اساس داده‌های کریستالوگرافی ایجاد گردید[۷]. در مرحله بعد، اتم‌های پلاتین با اتم‌های روتنیوم به صورت یک در میان جایگزین شدند تا ترکیب آلیاژی حاصل شود. پس از بهینه‌سازی پارامترهای سلول و موقعیت اتم‌ها، صفحه (۰۰۱) برای یک سوپرسلول ۲×۲ از سلول واحد بهینه شده برش خورد. این سوپرسلول شامل سه‌لایه از اتم‌های Pt و Ru می‌باشد و به عنوان سطح جاذب برای مطالعات جذب CO و H_2S در نظر گرفته شدند. به منظور حذف اثرات مرزی ناخواسته در راستای عمود بر سطح، یک لایه خلأ به ضخامت بیش از ۱۵ آنگستروم بالای سطح در نظر گرفته شد و سپس ساختار دوبعدی حاصل مجدداً بهینه‌سازی هندسی شد. سوپرسلول نهایی با ابعاد (۷.۶۰ ×۷.۶۱) آنگستروم، دربرگیرنده ۱۲ اتم پلاتین و ۱۲ اتم روتنیوم می‌باشد. نمای جانبی، نمای بالا و همچنین سوپرسلول ساختار مورد مطالعه در شکل ۱ نشان داده شده است.



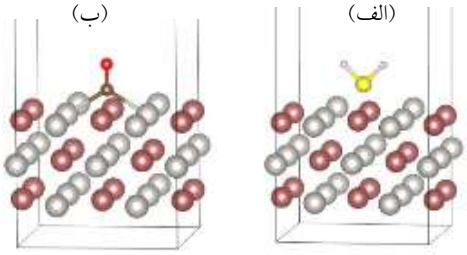
شکل ۱: (الف) دید از زاویه بالا به همراه جایگاههای جذب و (ب) دید از زاویه جانبی سوپر سلول Pt-Ru(001). اتمهای لایه بالا با رنگ تیره‌تر مشخص شده‌اند.

بررسی و تحلیل نتایج

برای یافتن پایدارترین پیکربندی جذب، همه مکان‌های جذب احتمالی روی سطح Pt-Ru(001) همراه با دو جهت‌گیری متفاوت برای هر یک از مولکول‌های H_2S و CO مورد بررسی قرار گرفتند. همان‌گونه که در شکل ۱ نشان داده شده است، بر اساس هندسه سطح، چهار مکان جذب اصلی تعریف گردید: موقعیت بالای اتم Pt در لایه اول ((u(Pt))، بالای اتم Ru در لایه اول((u(Ru))، بالای

اتم Pt در لایه دوم ((d(Pt)) و بالای اتم Ru در لایه دوم((d(Ru)) . برای مولکول H_2S دو جهت‌گیری (نزدیک‌شدن از سمت اتم S و نزدیک‌شدن از سمت اتم‌های H) در هر چهار موقعیت جذب در نظر گرفته شد. این روند برای مولکول CO نیز تکرار گردید، با این تفاوت که دو جهت‌گیری نزدیک‌شدن از طرف اتم C و اتم O مدنظر قرار گرفت. بر این اساس نامگذاری پیکربندیها به صورت X-Y انجام شد که در آن X نام اتمی هست که نزدیک سطح قرار گرفته و Y موقعیت جذب می باشد.

بهینه‌سازی هندسی برای همه پیکربندی‌ها بدون اعمال هرگونه محدودیتی انجام شد تا پایدارترین حالت‌های نهایی حاصل گردند. ساختارهای بهینه‌شده مربوط به پیکربندی‌های S-d(Pt) و C-d(Pt) در شکل ۲ نمایش داده شده است.



شکل۲: تصویر بهینه سازی شده پس از جذب (الف) مولکول H_2S در پیکر بندی S-d(Pt) و (ب) مولکول CO در پیکربندی C-d(Pt).

برای مطالعه کمی برهمکنش بین مولکول‌های گاز و سطح آلیاژ، انرژی جذب (E_{ads}) به عنوان معیار پایداری ترمودینامیکی محاسبه شد. این کمیت مطابق رابطه (۱) تعیین می‌گردد:

$$E_{ads} = E_{(Pt-Ru)+M} - (E_{(Pt-Ru)} + E_M) \qquad (۱)$$

که در آن $E_{(Pt-Ru)+M}$ انرژی کل سطح آلیاژ Pt-Ru(001) + مولکول پس از جذب، $E_{(Pt-Ru)}$ انرژی سطح آلیاژ و E_M انرژی مولکول گاز در حالت آزاد است. هر چه E_{ads} منفی‌تر باشد، جذب قوی‌تر و پایدارتر خواهد بود. تمامی مقادیر محاسبه شده در جدول ۱ ارائه شده است. برای مولکول H_2S ، نتایج نشان می‌دهد هر دو جهت‌گیری منجر به انرژی جذب قابل‌توجهی می‌شوند که حاکی از برهمکنش شیمیایی قوی با سطح است. بیشترین پایداری مربوط به پیکربندی‌های S-d(Pt) و S-u(Ru) با انرژی جذب به ترتیب ۱.۱۲- و ۰.۹۶- الکترون‌ولت می‌باشد. نکته قابل توجه اینکه در پیکربندی S-d(Pt) ، اتم گوگرد با دو اتم Pt و دو اتم Ru برهمکنش دارد، در حالی که در S-u(Ru) تنها با یک اتم Ru در تماس است و این می‌تواند توجیه‌کننده پایداری بالاتر S-d(Pt) است. در مورد مولکول CO، هنگامی که CO از سمت اتم کربن به سطح نزدیک می‌شود، انرژی جذب در تمام جایگاه‌ها مقادیر بسیار بزرگی (بین ۲.۰۵- تا ۲.۴۴- الکترون‌ولت) دارد که نشان‌دهنده تشکیل پیوند شیمیایی قوی با سطح (به ویژه با اتم‌های Ru) است. در مقابل، برای جهت‌گیری از سمت اکسیژن، انرژی جذب بسیار کوچک بوده و برهمکنش از نوع فیزیکی (واندروالسی) است و پیوند شیمیایی قابل‌توجهی شکل نمی‌گیرد. این رفتار نشان می‌دهد که جهت‌گیری مولکول عاملی تعیین‌کننده در جذب CO روی این آلیاژ است. برای درک دقیق‌تر ماهیت برهمکنش بین مولکول‌های گاز و سطح آلیاژی، دو تحلیل مکمل شامل آنالیز انتقال بار به روش Bader و محاسبات چگالی حالت‌های تصویر شده (PDOS) انجام گردید. نتایج حاصل از آنالیز بار نشان می‌دهد که جهت‌گیری مولکول H_2S تأثیر مستقیمی بر جهت انتقال بار دارد. هنگامی که مولکول از سمت اتم‌های هیدروژن به سطح نزدیک می‌شود، بار از سطح به مولکول منتقل می‌گردد؛ بنابراین در این حالت سطح نقش الکترون دهنده را ایفا می‌کند. همچنین، در پیکربندی S-d(Pt)، باز هم مقدار ناچیزی بار از سطح به مولکول منتقل می‌شود، اما در سایر پیکربندی‌های با جهت‌گیری S، بار از مولکول به سطح منتقل

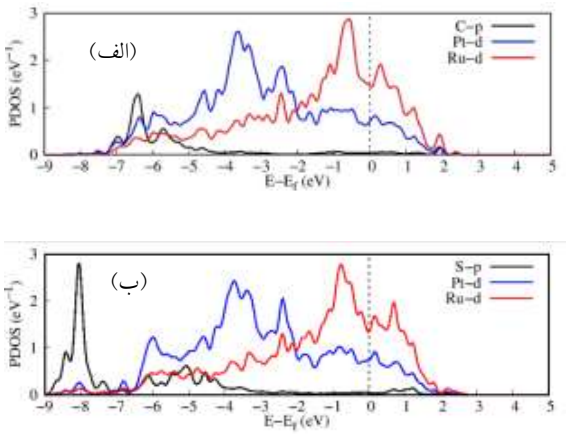
جدول ۱: انرژی جذب محاسبه شده (E_{ads}) و بار انتقال یافته از مولکول به سطح (Q).

پیکربندی‌ها	E_{ads}(eV)	Q(|e|)
S-u(Pt)/S-u(Ru)	-۰.۷۰ /-۰.۹۶	+۰.۱۳۲ /+۰.۰۳۹
S-d(Pt)/S-d(Ru)	-۱.۱۲ /-۰.۷۹	-۰.۰۱۱ /+۰.۰۵۵
H-u(Pt)/H-u(Ru)	-۰.۵۲ /-۰.۷٤	-۰.۰۱۳ /-۰.۰۲٦
H-d(Pt)/H-d(Ru)	-۰.۷۳ /-۰.٦٤	-۰.۰۱۹ /-۰.۰۱۱
C-u(Pt)/C-u(Ru)	-۲.۰۹ /-۲.٤٤	-۰.۱۱۵ /-۰.۱۱۸
C-d(Pt)/C-d(Ru)	-۲.۱۳ /-۲.۰۵	-۰.٤۲۰ /-۰.۳۹٦
O-u(Pt)/O-u(Ru)	-۰.۲۰ /-۰.۳۱	-۰.۰۱۵ /-۰.۰٦۳
O-d(Pt)/O-d(Ru)	-۰.۲۱ /-۰.۲۳	-۰.۰۲۵ /-۰.۰۲۳

شده و سطح به عنوان الکترون گیرنده عمل می‌کند. بیشترین مقدار انتقال بار در میان تمام پیکربندی‌های H_2S مربوط به حالت S-u(Pt) با مقدار تقریبی ۰.۱۳۲ الکترون است.

در مورد مولکول CO، رفتار متفاوت است: در تمامی پیکربندی‌ها، سطح به عنوان الکترون دهنده عمل می‌کند. با این وجود، میزان بار منتقل شده در حالت‌هایی که مولکول از سمت اتم کربن نزدیک می‌شود، به طور قابل‌توجهی بیشتر از حالت‌هایی است که از سمت اتم اکسیژن نزدیک می‌شود. مقادیر دقیق انتقال بار برای همه پیکربندی‌ها در جدول ۱ گردآوری شده است.

بررسی نتایج نشان می‌دهد که میزان انتقال بار به تنهایی نمی‌تواند توجیه‌کننده مقادیر انرژی جذب باشد؛ زیرا در برخی پیکربندی‌ها که انرژی جذب قابل‌توجهی مشاهده می‌شود، میزان انتقال بار نسبتاً ناچیز است. بنابراین، عوامل دیگری نظیر هیبریداسیون اوربیتالی نیز در تعیین پایداری سامانه نقش اساسی دارند. به منظور بررسی عمیق‌تر ماهیت برهمکنش‌های الکترونی و نقش اوربیتال‌های مختلف در تشکیل پیوند، PDOS برای اتمهای درگیر در فرآیند جذب محاسبه گردید. نتایج بدست آمده برای دو پیکر بندی S-d(Pt) و C-d(Pt) در شکل (۳) ارائه شده است. همان‌طور که در شکل (۳–الف) مشاهده می‌شود، اوربیتال‌های P اتم گوگرد همپوشانی قابل‌توجهی با اوربیتال‌های d اتم‌های پلاتین و روتنیوم



شکل ۳: چگالی حالتهای تصویر شده (PDOS) بر روی اوربیتالهای P و d اتم‌های درگیر در جذب برای پیکربندی‌های (الف) S-d(pt) و (ب) S-u(Pt). سطح فرمی با خط‌چین مشخص شده‌است.

در محدوده انرژی ۷ -تا ۳– الکترون‌ولت و حوالی ۸– الکترون ولت دارند. این همپوشانی قوی نشان‌دهنده تشکیل پیوند بین گوگرد و سطح است. در شکل (۳–ب)، اوربیتال‌های p اتم کربن همپوشانی قوی در دو ناحیه زیر تراز فرمی (٤– تا ۷– الکترون ولت) و بالای تراز فرمی (حوال۲+ الکترون ولت) دارند. این همپوشانی در بالای تراز فرمی نشان دهنده پیوند برگشتی از فلز به اوربیتال π^* خالی CO است که پایداری بالاتر CO را توجیه می‌کند.

نتیجه گیری

محاسبات DFT انجام شده در این پژوهش نشان داد که آلیاژ دوتایی Pt-Ru(001) می‌تواند به عنوان ماده‌ای امیدوارکننده برای حسگری گازهای سمی H_2S و CO مورد توجه قرار گیرد. جذب قوی مولکول CO در مقایسه با H_2S بیانگر گزینش‌پذیری بیشتر این آلیاژ نسبت به CO است. همچنین، وابستگی شدید جذب CO به جهت‌گیری مولکول و نقش پیوند برگشتی در پایداری آن، از جنبه‌های مهمی است که در طراحی حسگرهای عملی باید مد نظر قرار گیرد.

مرجع‌ها

[۱] T.W. Lambert, V.M. Goodwin, D. Stefani, L. Strosher, "Hydrogen sulfide (H2S) and sour gas effects on the eye. A historical perspective", *Science of The Total Environment*, **367** (2006) 1-22.

[۲] H. Zong, X. Li, Y. Zhang, F. Wang, X. Yu, G. Duan, Y. Luo, "Pt/Ti3C2 electrode material used for H2S sensor with low detection limit and high stability", *Chinese Chemical Letters*, **36** (2025) 110195.

[۳] J. Shin, J.Y. Hwang, C. Kim, J. Park, J.W. Roh, S.-W. Choi, C. Jin, M.S. Choi, "H2S gas sensing enhancement of Au-decorated SnO2 nanospheres synthesized using hydrothermal and microwave methods", *Sensors and Actuators Reports*, **8** (2024) 100246.

[٤] G. Kresse, J. Furthmüller, "Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set" ,*Physical Review B*, **54** (1996) 11169-11186.

[٥] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, "Generalized Gradient Approximation Made Simple", *Physical Review Letters*, **77** (1996) 3865-3868.

[٦] S. Grimme, "Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction", *Journal of Computational Chemistry*, **27** (2006) 1787-1799.

[۷] W.P. Davey, "Precision Measurements of the Lattice Constants of Twelve Common Metals", *Physical Review*, **25** (1925) 753-761.

مطالعه مقایسه‌ای رفتار جذب گازهای سمی H_2S و CO بر روی سطح Pt(001) با استفاده از محاسبات DFT

مینا یعقوبی نوتاش[۱]

[۱] آزمایشگاه شبیه‌سازی مولکولی، دانشکده فیزیک دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز

چکیده

در این مطالعه، برهمکنش مولکول‌های H_2S و CO با سطح Pt(001) با استفاده از محاسبات DFT بررسی شده است. کمیت‌های مهمی شامل انرژی جذب، فاصله جذب، انتقال بار و تغییرات چگالی بار محاسبه گردید. نتایج بدست آمده نشان می‌دهند که هر دو مولکول تمایل قابل توجهی برای جذب روی سطح Pt(001) نشان می‌دهند. با این وجود فرآیند جذب CO وابستگی شدیدی به جهت‌گیری فضایی مولکول نشان می‌دهد. همچنین آنالیز بار Bader نشان می‌دهد در جذب H_2S سطح الکترون‌گیرنده و در جذب CO سطح الکترون‌دهنده است. این نتایج بیانگر پتانسیل بالای Pt(001) در حسگری گازهای سمی است.

واژه های کلیدی: *محاسبات DFT، انرژی جذب، تغییرات چگالی بار، سطح Pt(001)*

Comparative Study of H_2S and CO Toxic Gas Adsorption Behavior on the Pt(001) Surface Using DFT Calculations

Yaghoobi Notash, Mina[1]

[1] *Molecular Simulation Laboratory (MSL), Department of Physics, Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz*

Abstract

The present study explores the interaction of H_2S and CO molecules with the Pt(001) surface within the framework of DFT calculations. Important parameters such as adsorption energy, equilibrium adsorption distance, charge transfer, and charge density differences have been calculated. The results demonstrate that both molecules possess a considerable affinity for adsorption onto the Pt(001) surface. Nevertheless, the CO adsorption process exhibits a strong dependency on the molecular orientation. Additionally, Bader charge analysis indicates that during H_2S adsorption, the surface serves as an electron acceptor, whereas in CO adsorption, the surface acts as an electron donor. These results highlight the promising potential of Pt(001) for toxic gas sensing applications

***Keywords**: DFT calculations, adsorption energy, charge density difference, Pt(001) surface*

PACS No. 89

مقدمه

تشخیص دقیق و سریع گازهای سمی مانند سولفید هیدروژن (H_2S) و مونوکسید کربن (CO) به دلیل تهدیدات جدی آن‌ها برای سلامت انسان و محیط زیست، به یکی از نیازهای اساسی در حوزه ایمنی صنعتی و پزشکی تبدیل شده است. گاز H_2S که عمدتاً در صنایع نفت و گاز و تصفیه فاضلاب منتشر می‌شود، موجب مسمومیت حاد و آسیب به سیستم عصبی می‌گردد. از سوی دیگر، گاز CO با ایجاد اختلال در فرآیند انتقال اکسیژن در خون منجر به خفگی می‌شود. تاکنون مطالعات نظری و تجربی گسترده‌ای به بررسی جذب و برهمکنش این آلاینده‌ها با مواد مختلف پرداخته‌اند. در این میان، اکسیدهای فلزی نظیر SnO_2، TiO_2 و ZnO به دلیل حساسیت بالا و هزینه ساخت نسبتاً پایین، توجه ویژه‌ای را به خود

جلب کرده‌اند [۱–۳]. با این وجود، حسگرهای گازی مرسوم هر یک با چالش‌هایی نظیر دماهای کاری بالا و گزینش پذیری پایین مواجه هستند. بنابراین، توسعه مواد حسگر جدید با عملکرد برتر، یک نیاز ضروری و تحقیقاتی است. علاوه بر اکسیدهای فلزی، فلزات نجیب به ویژه پلاتین (Pt) به دلیل خواص کاتالیستی استثنایی و توانایی در تسهیل واکنش‌های سطحی، توجه گسترده‌ای را در طراحی حسگرهای گازی به خود جلب کرده‌اند [٤]. با این حال، درک بنیادی از مکانیسم جذب گازها روی سطوح مختلف پلاتین در مقیاس اتمی، یک پیش‌نیاز اساسی برای بهینه‌سازی عملکرد حسگرها است. نظریه تابعی چگالی (DFT) به عنوان یک ابزار قدرتمند محاسباتی، امکان بررسی برهمکنش‌های گاز–سطح، محاسبه انرژی جذب، انتقال بار الکتریکی و تغییرات ساختار الکترونی را با دقت بالا فراهم می‌کند. تاکنون مطالعات متعددی به بررسی جذب CO بر روی سطوح مختلف پلاتین، به ویژه Pt(111)، پرداخته‌اند[٥, ٦]. همچنین پژوهش‌هایی در زمینه جذب H_2S روی Pt(111) گزارش شده است[٧]. با این حال، **تاکنون هیچ مطالعه سیستماتیک و مقایسه‌ای** به بررسی همزمان جذب هر دو گاز H_2S و CO بر روی سطح Pt(001) نپرداخته است و این موضوع همچنان به عنوان یک **شکاف تحقیقاتی** باقی مانده است.

در این تحقیق، برهمکنش مولکول‌های H_2S و CO با سطح Pt(001) و با بهره‌گیری ازروش DFT مورد بررسی قرار گرفته‌است. به این منظور، کمیت‌های اساسی شامل انرژی جذب، فاصله جذب، انتقال بار و تغییر چگالی بار (CDD) محاسبه و تحلیل شده‌اند.

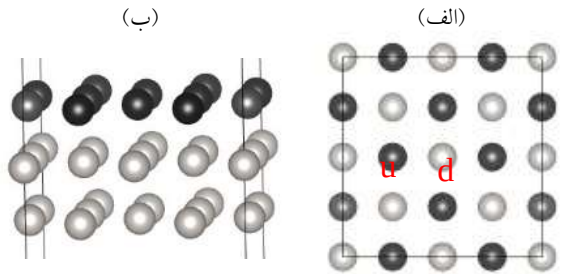
روش انجام محاسبات

برای انجام محاسبات در این پژوهش، از روش DFT و کد VASP استفاده گردید[٨]. بهینه‌سازی ساختارها تا رسیدن به نیروهای کمتر از ۰.۰۱ الکترون‌ولت بر آنگستروم و تغییرات انرژی کمتر از 10^{-6} الکترون‌ولت ادامه یافت. برهم‌کنش‌های تبادلی–همبستگی با تابعی PBE در تقریب GGA مدل‌سازی شدند و اثرات واندروالس با روش اصلاحی DFT-D2 لحاظ گردیدند [٩, ١٠]. نمونه‌برداری از ناحیه بریلوئن با روش منخورشت–پک و با شبکه k-point های ۱۱× ۱۱× ۱۱(برای سلول واحد سه بعدی)، ۱×۵×۵ (برای سوپرسل ۲×۲ دوبعدی) انجام شد.

ساختار کریستالی پلاتین بر اساس داده‌های کریستالوگرافی مدل‌سازی گردید[١١]. پس از بهینه‌سازی پارامترهای شبکه و موقعیت اتم‌ها در سلول واحد، صفحه (۰۰۱) با استفاده از یک سوپرسل ۲×۲ برش داده شد. این ساختار که شامل سه لایه اتمی از پلاتین است، به عنوان بستر جاذب در نظر گرفته شد به منظور جلوگیری از برهمکنش‌های غیرواقعی بین لایه سطحی و تصاویر تناوبی آن در جهت عمود بر سطح (محورz)، یک ناحیه خلأ به ضخامت بیش از ۱۵ آنگستروم در بالای سطح در نظر گرفته شد. سپس یک مرحله بهینه‌سازی هندسی دیگر بر روی این ساختار دوبعدی حاصل انجام گرفت. در نهایت، سوپرسل نهایی دارای ابعاد ۷.٦٤ × ۷.٦٤ آنگستروم بوده و شامل ٢٤ اتم پلاتین می‌باشد.

بررسی و تحلیل نتایج

به منظور مطالعه مکانیسم جذب و برهمکنش مولکول‌های H_2S و CO با سطح Pt(001) و همچنین بررسی گزینش‌پذیری ساختار، دو جایگاه جذب متمایز روی سطح پلاتین در نظر گرفته شد. این دو جایگاه عبارتند از: جایگاه بالای یک اتم پلاتین در لایه بالایی سطح (که با نماد u مشخص شده‌است) و جایگاه بالای یک اتم پلاتین در لایه دوم (که با نماد d مشخص گردیده است). موقعیت این دو جایگاه در شکل ۱ به ترتیب با علامت‌های u و d نمایش داده شده است. برای هر یک از این دو جایگاه، اثر جهت‌گیری فضایی مولکول‌ها با تعریف دو آرایش متفاوت مورد بررسی قرار

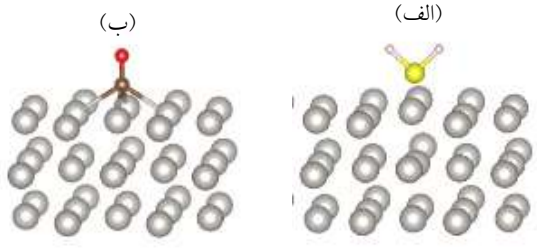


شکل ۱: (الف) دید از زاویه بالا به همراه جایگاههای جذب و (ب) دید از زاویه جانبی سوپر سلول Pt(001). اتمهای لایه بالا با رنگ تیره مشخص شده‌اند.

گرفت. بدین ترتیب برای گاز H_2S چهار پیکربندی کلی تعریف شد. S-d نزدیک شدن از سمت اتم گوگرد به جایگاه d، H-d نزدیک شدن از سمت اتم‌های هیدروژن به جایگاه d، S-u، نزدیک شدن از سمت اتم گوگرد به جایگاه u و H-u، نزدیک شدن از سمت اتم‌های هیدروژن به جایگاه u. همچنین برای گاز CO نیز به طور مشابه چهار پیکربندی تعریف گردید: C-d، O-d، C-u و O-d که به ترتیب نشان‌دهنده نزدیک شدن از سمت اتم کربن یا اکسیژن به جایگاه‌های d و u می‌باشند. در تمامی پیکربندی‌های فوق، فاصله اولیه مولکول گاز از سطح به طور میانگین ۲.۵ آنگستروم در نظر گرفته شد و سپس فرآیند بهینه‌سازی هندسی تا رسیدن به معیارهای همگرایی مورد نظر ادامه یافت. ساختارهای نهایی بهینه‌شده برای پیکربندیهای S-d و C-d در شکل ۲ ارائه شده است. فاصله جذب که به عنوان کوتاه‌ترین فاصله بین اتم‌های گاز و اتم‌های سطح پس از بهینه‌سازی هندسی تعریف می‌شود، در جدول ۱ گزارش شده است. بر اساس نتایج بدست آمده کوتاه ترین فاصله جذب مربوط C-d می باشد که نشان دهنده برهمکنش قوی بین مولکول و سطح مورد مطالعه می‌باشد. برای مطالعه کمی برهمکنش بین مولکول‌های گاز و سطح Pt(001)، **انرژی جذب** (E_{ads}) انرژی جذب به عنوان معیار پایداری ترمودینامیکی، مطابق رابطه (۱) محاسبه شد:

$$E_{ads} = E_{Pt+M} - (E_{Pt} + E_M) \qquad (۱)$$

که در آن E_{Pt+M} نشان‌دهنده انرژی کل سامانه پس از جذب، E_{Pt} انرژی سطح خالص و E_M انرژی مولکول گاز در حالت آزاد است. یک مقدار منفی بزرگتر برای E_{ads} بیانگر جذب قوی‌تر و پایدارتر می‌باشد. کلیه مقادیر محاسبه‌شده در جدول ۱ ارائه شده‌است. بر اساس نتایج به‌دست‌آمده برای مولکول H_2S ، انرژی جذب در هر



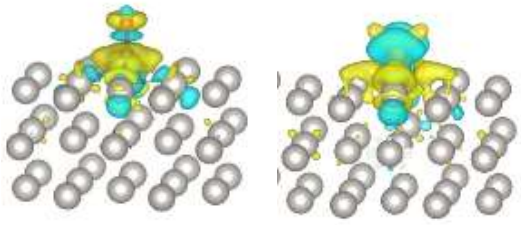
شکل۲: تصویر بهینه سازی شده پس از جذب (الف) مولکول H_2S در پیکر بندی S-d و (ب) مولکول CO در پیکر بندی C-d.

جدول ۱: فاصله جذب(d)، انرژی جذب (E_{ads}) و بار انتقال یافته از مولکول به سطح (Q).

پیکربندی	d(Å)	E_{ads}(eV)	Q(|e|)
S-u	۲.۲۶	-۰.۹۳	۰.۱۲۶
S-d	۱.۳۱	-۱.۱۱	۰.۲۱۱
H-u	۲.۱۲	-۰.۸۳	۰.۰۳٤
H-d	۲.۱۳	-۰.۸۲	۰.۰۳٤
C-u	۱.۸۳	-۲.٤٦	۰.۰۲۸
C-d	۱.۲۲	-۲.۱۱	-۰.۲٤۸
O-u	۲.۸۵	-۰.۲۸	-۰.۰۱۳
O-d	۳.۱۱	-۰.۳۱	-۰.۰۱۹

دو حالت نزدیک شدن از سمت اتم‌های هیدروژن (پیکربندی‌های H-d و H-u) و از سمت اتم گوگرد (پیکربندی‌های S-d و S-u) مقادیر قابل توجهی دارد که نشان‌دهنده برهمکنش شیمیایی قوی با سطح Pt(001) است. با این حال، بیشترین مقدار انرژی جذب مربوط به پیکربندی S-d (حدود ۱.۲- الکترون‌ولت) می‌باشد که بیانگر پایدارترین حالت جذب برای H_2S است. در مورد مولکول CO، مقدار انرژی جذب به جهت‌گیری مولکول بستگی شدید دارد؛ به طوری که وقتی مولکول از سمت اتم کربن به سطح نزدیک می‌شود (پیکربندی‌های C-d و C-u)، انرژی جذب در هر دو جایگاه d و u مقدار قابل توجهی داشته (حدود ۲.۱- الکترون‌ولت) که نشان‌دهنده تشکیل پیوند شیمیایی قوی بین کربن و سطح پلاتین است. در مقابل، برای پیکربندی‌هایی که مولکول CO از سمت اتم اکسیژن به سطح نزدیک می‌شود (O-d و O-u)، انرژی جذب محاسبه‌شده مقدار نسبتاً کمی دارد (حدود ۰.۳- الکترون‌ولت). این مقدار کوچک نشان می‌دهد که در این حالت، برهمکنش از نوع فیزیکی (جذب واندروالسی) بوده و پیوند شیمیایی قابل‌توجهی شکل نمی‌گیرد. بر اساس مدل Blyholder، جذب قوی CO از سمت کربن ناشی از اهدای σ (از اوربیتال 5σ) و پیوند بازگشتی (از اوربیتال‌های d به π^*) می‌باشد که هر دو بر روی اتم کربن متمرکز هستند[۱۲]. در پیکربندی‌های O-d و O-u، به دلیل عدم تقارن مناسب، این برهمکنش‌ها رخ نداده و جذب از نوع فیزیکی (واندروالسی) با انرژی پایین است.

(الف) (ب)



شـــکل ۳: توزیع فضـــایی تغییرات چگالی بار (CDD) برای پیکر بندی (الف) S-d برای مولکول H2S و (ب) C-d برای مولکول (CO)

به منظور درک بهتر ماهیت برهمکنش بین مولکول‌های گاز و سطح Pt(001) و همچنین بررسی نقش انتقال بار الکتریکی در مکانیسم حسگری، تغییرات چگالی بار (CDD) و محاسبات آنالیز بار Bader انجام گردید[۱۳]. شکل ۳، توزیع فضایی تغییرات چگالی بار را برای پیکربندی‌های C-d برای CO و S-d برای H_2S، پس از بهینه‌سازی هندسی نشان می‌دهد. در این شکل، نواحی زرد رنگ معرف تجمع بار الکترونی و نواحی آبی رنگ معرف کاهش چگالی بار هستند. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در پیکربندی C-d، چگالی بار بر روی اتم کربن مولکول CO افزایش یافته است. علاوه بر این، وجود ناحیه‌ای کوچک از تجمع بار در فضای بینابینی مولکول و سطح، مؤید برقراری یک برهمکنش شیمیایی قوی است. در حالی که در فرآیند جذب H_2S ، تجمع بار عمدتاً بر روی اتم‌های پلاتین سطح مشاهده می‌گردد.

نتایج حاصل از آنالیز بار Bader نشان می‌دهد که جهت و میزان انتقال بار به شدت به نوع گاز جذب‌شونده وابسته است. در فرآیند جذب H_2S، بار (الکترون) همواره از مولکول گاز به سطح Pt(001) منتقل می‌شود و سطح نقش الکترون گیرنده دارد. در این میان، پیکربندی S-d بیشترین مقدار انتقال بار را به خود اختصاص می‌دهد. در این حالت، سطح پلاتین نقش الکترون‌گیرنده دارد و این جریان بار می‌تواند به عنوان یک سیگنال الکتریکی قابل اندازه‌گیری در یک حسگر گازی عمل کند. در مقابل، برای مولکول CO ، جهت انتقال بار معکوس است و بار از سطح به مولکول منتقل می‌شود (به استثنای پیکربندی C-u). بیشترین مقدار این انتقال بار مربوط به پیکربندی C-d است. به طور کلی، تغییرات قابل توجه در توزیع چگالی بار و نیز انتقال بار الکتریکی بین مولکول‌های گاز و سطح Pt(001) در طول فرآیند جذب، نشان‌دهنده پتانسیل بالای سطح پلاتین برای کاربرد در ادوات حسگری گازهای سمی مانند H_2S و CO می‌باشد.

نتیجه گیری:

نتایج نشان می‌دهند که سطح Pt(001) حساسیت بالایی نسبت به هر دو گاز H_2S و CO دارد، اما گزینش‌پذیری بالایی بین آن‌ها از خود نشان نمی‌دهد. با این حال، تفاوت در وابستگی به جهت‌گیری مولکولی (به ویژه برای CO) و همچنین میزان انتقال بار محاسبه‌شده، می‌تواند مبنایی برای طراحی حسگرهای انتخابی از طریق کنترل دما یا اصلاح سطح باشد.

مرجع‌ها

[۱] J. Shin, J.Y. Hwang, C. Kim, J. Park, J.W. Roh, S.-W. Choi, C. Jin, M.S. Choi, *"H2S gas sensing enhancement of Au-decorated SnO2 nanospheres synthesized using hydrothermal and microwave methods"*, Sensors and Actuators Reports, **8** (2024) 100246.
[۲] W.-F .Huang, H.-T. Chen, M.C. Lin, *"Density Functional Theory Study of the Adsorption and Reaction of H2S on TiO2 Rutile (110) and Anatase (101) Surfaces"*, The Journal of Physical Chemistry C, **113** (2009) 20411-20420.
[۳] Y. Liu, J. Cao, X. Wei, *"Mechanism of enhanced CO adsorption on ZnO by transition metal (Sc, Ti, V, Cr, Mn) doping"*, Computational Materials Science, 268 (2026) 114662.
[۴] D.C. Ford, Y. Xu, M. Mavrikakis, Atomic and molecular adsorption on Pt(111), Surface Science, 587 (2005) 159-174.
[۵] G.T.K.K .Gunasooriya, M. Saeys, *"CO Adsorption on Pt(111): From Isolated Molecules to Ordered High-Coverage Structures"*, ACS Catalysis, **8** (2018) 10225-10233.
[۶] L. K. G, I. Kundappaden, R. Chatanathodi, *"A DFT study of CO adsorption on pt (111) using van der Waals functionals"*, Surface Science, **681** (2019) 143-148.
[۷] D.R. Alfonso, "*First-principles studies of H2S adsorption and dissociation on metal surfaces, Surface Science"*, **602** (2008) 2758-2768.
[۸]G. Kresse, J. Furthmüller, *"Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set"*, Physical Review B, **54** (1996) 11169-11186.
[۹] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *"Generalized Gradient Approximation Made Simple, Physical Review Letters"*, **77** (1996) 3865-3868.
[۱۰] S. Grimme, Semiempirical *"GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction"*, Journal of Computational Chemistry, **27** (2006) 1787-1799.
[۱۱] W.P. Davey, "*Precision Measurements of the Lattice Constants of Twelve Common Metals"*, Physical Review, **25** (1925) 753-761.
[۱۲] G. Blyholder, *"Molecular Orbital View of Chemisorbed Carbon Monoxide"*, The Journal of Physical Chemistry, **68** (1964) 2772-2777.
[۱۳] W. Tang, E. Sanville, G. Henkelman, *"A grid-based Bader analysis algorithm without lattice bias"*, Journal of Physics: Condensed Matter, **21** (2009) 084204.

نانوپوسته‌های مگنتوپلاسمونیک مبتنی بر هسته آهن یا اکسید آهن با پوسته‌های طلا برای درمان هدفمند سرطان

نعمتی ، روح اله ؛ فرخ نژاد، محسن* ؛ حسینی فرزاد، محمود

دانشکده علوم، بخش فیزیک، دانشگاه شیراز

چکیده

مگنتوپلاسمونیک‌تراپی روشی نوین برای درمان هدفمند سرطان است که ترکیبی از فوتوترمال‌تراپی و هایپرترمی مغناطیسی را به‌کار می‌گیرد. در این روش، نانوذرات با هسته آهن یا اکسید آهن و پوسته طلا تحت میدان مغناطیسی متناوب و تابش لیزر مادون‌قرمز گرما تولید می‌کنند. در این پژوهش، خواص نوری این نانوذرات با نظریه مای و مدل محیط مؤثر بررسی و توزیع دما در تومور پوستی با استفاده از معادلات زیست‌گرما محاسبه شده است. نتایج نشان می‌دهد بازده جذب و خاموشی به شعاع هسته و ضخامت پوسته وابسته بوده و امکان تنظیم دقیق پیک پلاسمون در پنجره‌های زیستی وجود دارد. این نانوذرات با بازده درمانی بالا و پایداری حرارتی مناسب، گزینه‌ای امیدبخش برای درمان هدفمند سرطان هستند.

واژه های کلیدی: پلاسمونیک، نانوذرات مغناطیسی، نانوپوسته طلا، فوتوترمال تراپی و هایپرترمی مغناطیسی، معادلات انتقال زیست گرما

Magneto plasmonic nanoshells with Iron/Iran oxide cores and gold shells for targeted cancer therapy

Nemati, Rouhollah; Farokhnezhad, Mohsen*; Hosseini Farzad, Mahmood

Department of Physics, College of Sciences, Shiraz University, Shiraz 71454, Iran

Abstract

Magneto-plasmonic therapy is a novel approach for targeted cancer treatment that combines photothermal therapy and magnetic hyperthermia. In this method, magneto-plasmonic nanoparticles (NPs) composed of iron or iron oxide cores coated with a gold shell generate heat when simultaneously exposed to an alternating magnetic field and near-infrared laser irradiation. In this study, the optical properties of these NPs are first investigated using Mie theory and the effective medium model. Then, the temperature distribution produced by the generated thermal energy in a skin tumor and the surrounding tissue is calculated using bioheat equations. The results show that the absorption and extinction efficiencies strongly depend on geometric parameters such as the core radius and shell thickness, allowing the localized surface plasmon resonance peak to be tuned within biological windows. These NPs, due to their high therapeutic efficiency and suitable thermal stability, are promising candidates for targeted cancer therapy.

***Keywords**: Gold nanoparticles, Magnetic nanoparticles, Gold nanoshells, Photothermal and optical properties, Biological windows, Bioheat transfer equations, Hyperthermia*

مقدمه

مگنتو پلاسمونیک تراپی به عنوان یکی از روش‌های نوین و موثر در درمان سرطان شناخته می‌شود. در این روش، از نانوذرات با هسته مغناطیسی و پوسته طلا استفاده می‌شود که امکان بهره‌گیری همزمان از دو روش فوتوترمال‌تراپی و هایپرترمی مغناطیسی وجود دارد. در روش هایپرترمی مغناطیسی، پس از نفوذ نانوذرات به داخل تومور، میدان مغناطیسی متناوب در یک فرکانس و شدت مناسب اعمال می‌شود. انتخاب فرکانس و شدت میدان مغناطیسی باید به گونه‌ای انجام شود که علاوه بر ایجاد اثر درمانی مؤثر، آسیبی به

بافت‌های سالم وارد نشود. در این روش، دو قطبی‌های مغناطیسی موجود در هسته‌های آهن یا اکسید آهن تمایل دارند جهت خود را با میدان مغناطیسی متناوب اعمال شده همسو کنند، انرژی مصرف شده در فرآیند هم راستاسازی و همچنین بازگشت گشتاورهای مغناطیسی به حالت تعادل به صورت گرما آزاد می‌شود [۱]. تولید گرما در این فرآیند از دو سازوکار اصلی، یعنی واهلش نیل و براونی پیروی می‌کند. واهلش نیل به گرمایی اشاره دارد که اثر اتلاف انرژی ناشی از چرخش گشتاورهای مغناطیسی منفرد در داخل ذرات مغناطیسی ایجاد می‌شود [۱]. در مقابل، واهلش براونی به گرمای تولیدشده بر اثر چرخش فیزیکی نانوذرات در محیط سیال اطلاق می‌شود؛ به‌طوری‌که کل ذره برای همسو شدن گشتاور مغناطیسی خود با میدان مغناطیسی خارجی می‌چرخد [۱]. در این سامانه، نانوذرات به‌طور هم‌زمان در معرض تابش لیزر نیز قرار می‌گیرند. برانگیختگی پدیده تشدید پلاسمون سطحی موضعی در پوسته طلا باعث جذب مؤثر نور و تبدیل انرژی نوری به گرما می‌شود و در نتیجه دمای موضعی در بافت تومور افزایش می‌یابد. هنگامی که دمای تومور به حدود ۴۲ درجه سانتی‌گراد برسد، سلول‌های سرطانی به دلیل حساسیت بیشتر نسبت به گرما تخریب می‌شوند. یکی از مزیت‌های مهم روش مگنتوپلاسمونیک‌تراپی نسبت به فوتوترمال‌تراپی متداول آن است که بخشی از گرمای موردنیاز از طریق هایپرترمی مغناطیسی تأمین می‌شود. در نتیجه می‌توان شدت تابش لیزر را کاهش داد و بدین ترتیب احتمال بروز عوارض جانبی را کم کرد، در حالی که کارایی درمان همچنان حفظ می‌شود.

مدل و تئوری

با استفاده از روش محیط مؤثر می‌توانیم تابع دی الکتریک مؤثر یک نانوساختار چندلایه را محاسبه نماییم. در اینجا یک مغزه مغناطیسی کروی به شعاع r_c به همراه یک پوسته طلا به ضخامت t_{Au} در نظر بگیرید. در اینجا، $i = 1,2$ و شعاع‌های r_i از مرکز پوسته‌های کروی می‌باشند. همچنین، تابع دی الکتریک مغزی ε_c، تابع دی الکتریک پوسته طلا ε_{Au} و تابع دی الکتریک محیط ε_m بگیرید. با شروع کردن از مرکز نانوپوسته، می توان مغزه مغناطیسی و پوسته طلا را یک کره همگن به شعاع r_2 درنظر گرفت. ناحیه مغزی با ε_c کسر حجمی $f_c = (r_c/r_1)^3$ از ناحیه میزبان با ε_{Au} را اشغال می‌کند. با کمک معادله ماکسول-گارنت، تابع دی الکتریک مؤثر ε_{eff} بین مغزی مغناطیسی و اولین پوسته طلا به صورت زیر بدست می‌آید [۲]:

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{Au}\frac{\varepsilon_c(1+2f)+\varepsilon_{Au}(2-2f)}{\varepsilon_c(2+f)+\varepsilon_{Au}(1-f)} \quad (۱)$$

ما الان یک کره همگن با شعاع r_2 و با تابع دی الکتریک مؤثر ε_{eff} داریم. اگر ضریب تراوایی مغناطیسی مغزی مغناطیسی μ_c و برای پوسته μ_{Au} باشد، ضریب تراوایی مؤثر به کمک مدل محیط مؤثر به صورت زیر بدست می آید:

$$\mu_{eff} = \mu_{Au}\frac{\mu_c(\omega)(1+2f)+\mu_{Au}(2-2f)}{\mu_c(\omega)(2+f)+\mu_{Au}(1-f)} \quad (۲)$$

در اینجا $\mu_{Au} = 1$ و ضریب تراوایی مغزی مغناطیسی $\mu_c(\omega)$ به صورت زیر محاسبه می‌شود [۳]:

$$\mu_c(\omega) = \mu_1 + i\mu_2 \quad (۳)$$

به ترتیب بخش حقیقی و موهومی تراوایی به صورت زیر بدست می آید [۳]:

$$\mu_1 = \frac{\chi_0\omega\tau[1-(\omega\tau/2)^2]}{[1+(\omega\tau/2)^2]^2} \quad (۴)$$

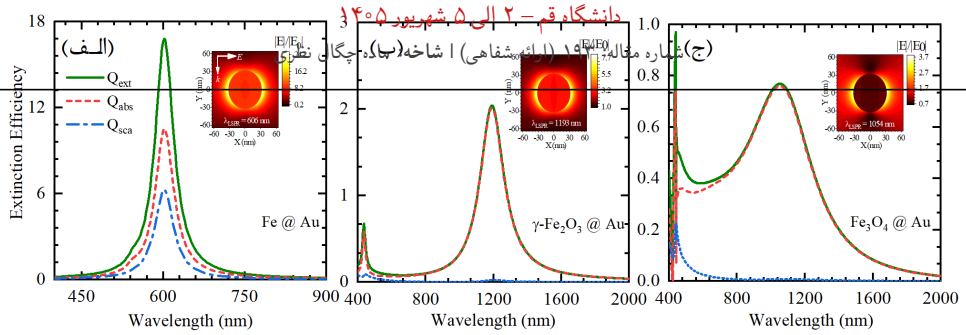
$$\mu_2 = \frac{\chi_0\omega\tau}{[1+(\omega\tau/2)^2]^2} \quad (۵)$$

در اینجا فرکانس زاویه‌ای میدان مغناطیسی خارجی $\omega = 450\ kHz$ می باشد، پذیرفتاری مغناطیسی χ_0 و زمان واهلش τ برای هسته‌های مغناطیسی مختلف در جدول زیر آمده است.

جدول۱ : مقادیر مورد نیاز برای هسته‌های مغناطیسی مختلف [۳]

ماده	χ_0	τ
Fe	۳/۳	۱/۶×۱۰$^{-۱۱}$
Fe_2O_3	۰/۶	۷/۱×۱۰$^{-۱۱}$
Fe_3O_4	۰/۸۳	۵/۳×۱۰$^{-۱۱}$

در نهایت بازده جذب، پراکندگی و خاموشی از نظریه مای بدست می آید [۴]. معادله زیست گرما برای لایه‌های مختلف بافت پوست به صورت زیر است [۵]:



شکل ۱: بازده جذب، پراکندگی و خاموشی برای نانوپوسته‌های طلا با مغزی الف) آهن، ب) مگمیت و ج) مگنتایت با شعاع ۳۰nm و پوسته طلا با ضخامت ۲nm. همچنین، توزیع میدان الکتریکی نسبت به میدان الکتریکی فرودی در طول موج تشدید پلاسمون سطحی در صفحه xy در داخل این شکل رسم شده است.

$$\rho c\frac{\partial T}{\partial t} = -\nabla.q(r,z,t) + Q_{perf} + Q_{met} + Q_{laser}(r,z) + Q_M \quad (۶)$$

$$\nabla.q(r,z,t) = -k\nabla T(r,z,T) \quad (۷)$$

که در آنجا ρ چگالی بافت، c ظرفیت گرمایی ویژه بافت، k رسانش گرمایی بافت، T دمای بافت، Q_{met} آهنگ سوخت ساز بافت، Q_{perf} آهنگ گردش خون در بافت که به صورت زیر بیان می شود:

$$Q_{perf} = \rho_b C_b \omega_b (T_b - T) \quad (۸)$$

در اینجا ρ_b و C_b چگالی و ظرفیت گرمایی خون و ω_b آهنگ گردش خون است. توان گرمایی حاصل از بخش مغناطیسی نانوذره در حضور میدان مغناطیسی متناوب است، که به صورت زیر بدست می آید [۵]:

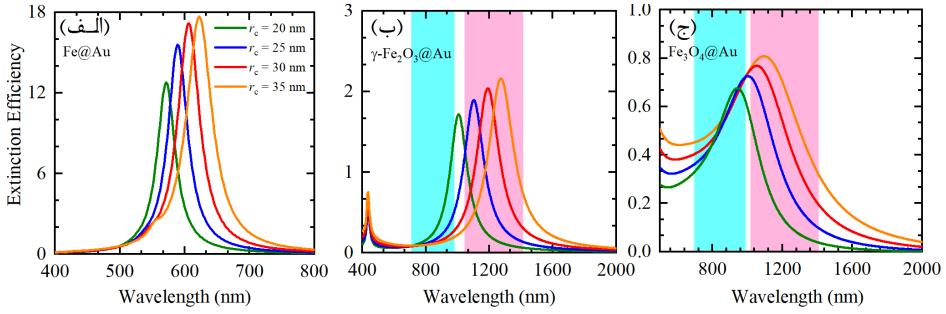
$$Q_M = \pi\mu_0\chi_0 H_0^2 f \frac{2\pi f\tau}{1+(2\pi f\tau)^2} \quad (۹)$$

ترم توان گرمایی تولید شده توسط لیزر به کمک قانون لامبرت به صورت زیر بیان می شود:

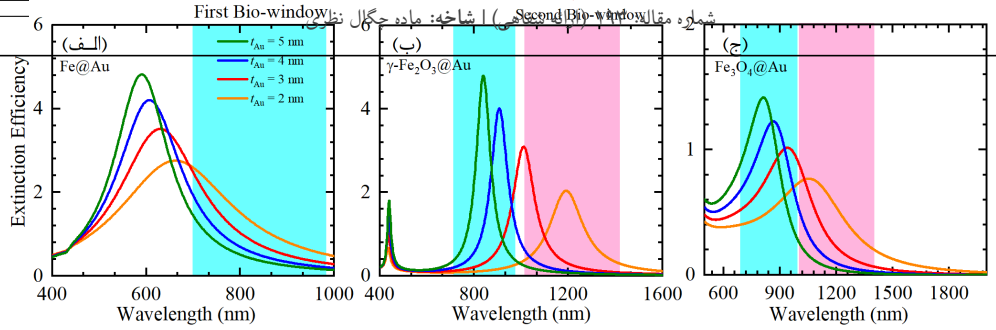
$$Q_{laser} = \alpha I_0 exp\left(\frac{-(x^2+y^2)}{2R^2(0)\exp(\beta z)}\right)\exp(-(\alpha+\beta)z) \quad (۱۰)$$

نتایج و بحث:

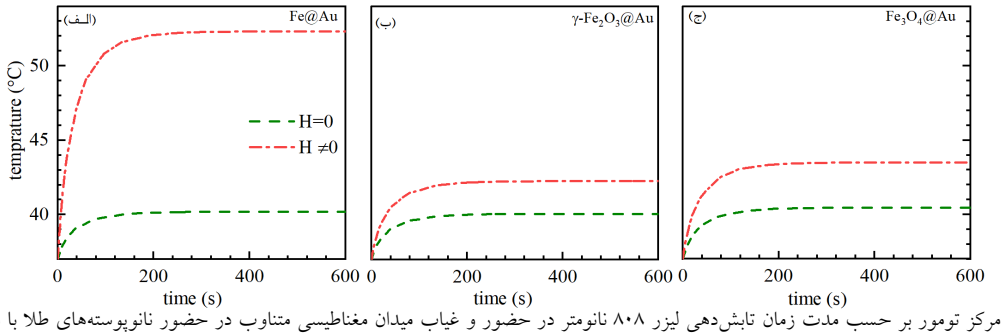
همانطور که در این شکل ۱ مشاهده می‌شود، پیک تشدید پلاسمون سطحی برای نانوپوسته‌های طلا با مغزی آهن، مگمیت و مگنتایت به ترتیب ۶۰۶nm، ۱۱۹۳nm و ۱۰۵۴ nm می باشد. اگرچه شدت پیک پلاسمون سطحی در نانوپوسته‌های طلا با مغزی آهن قویتر است، اما در پنجره های بیولوژیکی (۱۰۰۰–۱۴۰۰ nm) قرار نمی گیرد، از سوی دیگر میزان بازده پراکندگی ۶۰ درصد بازده جذب است. با این وجود، پیک های تشدید پلاسمون سطحی برای نانوپوسته‌های طلا با مغزی مگمیت و مگنتایت در داخل پنجره‌های بیولوژیکی قرار می‌گیرند و بازده پراکندگی آنها به طور تقریبی صفر است. استفاده از نانوذرات با پیک پلاسمون سطحی در داخل پنجره‌های بیولوژیکی، علاوه بر افزایش بازده فوتوترمال تراپی و جذب نور، عوارض جانبی را بطور قابل ملاحظه‌ای کاهش می دهد و امکان استفاده از لیزرهایی با شدت و توان کمتر را فراهم می‌سازد. چگالی توان گرمایی و توزیع دمایی در ساختارهای پلاسمونیک از اتلاف انرژی پلاسمونی نشأت می‌گیرد که آن بطور مستقیم به افزایش شدت میدان الکتریکی $|E|^2/|E_0|^2$ وابسته است. با مطالعه این کمیت قادر خواهیم بود تولید گرما در نانوذره در مکانهای فضایی خاص را کنترل کنیم و این برای کاربردهای فوتوترمال تراپی و داورسانی حائز اهمیت است.



شکل ۲: بازده خاموشی نانوپوسته‌های طلا با مغزه الف) آهن، ب) مگمیت و ج) مگنتایت برای ضخامت ثابت پوسته طلا ۲ nm و شعاع های مختلف مغزه. ناحیه ها با رنگ های فیروزه‌ای و صورتی به ترتیب محدوده طیفی پنجره‌های بیولوژیکی اول (۹۸۰– ۱۰۰۰) نانومتر و دوم (۱۰۰۰–۱۴۰۰) نانومتر را نشان می دهند.



شکل ۳: بازده خاموشی نانوپوسته‌های طلا با مغزه الف) آهن، ب) مگمیت و ج) مگنتایت برای شعاع ثابت مغزه ۳۰ nm و ضخامت‌های مختلف پوسته طلا.



شکل ۴: دمای مرکز تومور بر حسب مدت زمان تابش‌دهی لیزر ۸۰۸ نانومتر در حضور و غیاب میدان مغناطیسی متناوب در حضور نانوپوسته‌های طلا با مغزه الف) آهن، ب) مگمیت و ج)مگنتایت با شعاع مغزه ۳۰ nm و ضخامت پوسته طلا ۲ nm

برای این منظور، ما توزیع میدان الکتریکی را اطراف هر کدام از نانوذرات در طول موج تشدید پلاسمونی را در شکل ۱ محاسبه کردیم. همانطور که انتظار داشتیم میزان افزایش میدان الکتریکی نسبت به میدان الکتریکی فرودی برای نانوپوسته‌های طلا با مغزی آهن، مگمیت و مگنتایت به ترتیب ۲۴، ۷/۷ و ۳/۷ برابر می باشد. شکل‌های ۲ و ۳ نشان می‌دهند که با افزایش شعاع مغزه از ۲۰ تا ۲۵ نانومتر، پیک پلاسمون سطحی دچار جابه‌جایی قرمز شده و شدت آن افزایش می‌یابد، در حالی‌که افزایش ضخامت پوسته طلا از ۲ تا ۵ نانومتر موجب جابه‌جایی آبی پیک همراه با افزایش شدت آن می‌شود. همچنین، در نانوپوسته‌های با هسته مگمیت و مگنتایت، با تنظیم شعاع مغزه و ضخامت پوسته می‌توان موقعیت پیک پلاسمون را در پنجره‌های زیستی اول و دوم قرار داد، اما برای هسته آهن این پیک همچنان خارج از پنجره‌های زیستی باقی می‌ماند.

با حل معادلات زیست گرما، دمای مرکز یک تومور پوستی در حضور یک لیزر ۸۰۸ nm با شدت ۰/۳ W/cm^2 بر حسب مدت زمان تابش‌دهی لیزر در شکل ۴ رسم شده است. بطور همزمان، یک میدان مغناطیسی متناوب با شدت $H = ۴/۵\times۱۰^{۴}\ \frac{A}{m}$ و فرکانس ۱۰۴ Hz به تومور پوستی اعمال می‌شود. نانوذرات با غلظت $۱۰^{۱۰}\ ml^{-1}$ ۹× بطور یکنواخت در بافت تومور توزیع شده‌اند. مشخصات فیزیکی تومور و محیط اطراف آن در مرجع [۵] آورده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود دمای مرکز تومور در غیاب میدان مغناطیسی ۴۰ درجه سانتی‌گراد است که در حضور میدان مغناطیسی برای هسته‌های مختلف آهن، مگمیت و مگنتایت به ترتیب به ۵۳، ۴۲ و ۴۳ درجه سانتی‌گراد می رسد.

نتیجه گیری

خواص نوری و حرارتی نانوپوسته‌های مگنتوپلاسمونیک به شعاع هسته و ضخامت پوسته طلا وابسته است و از این طریق می‌توان پیک پلاسمونی را در پنجره‌های زیستی تنظیم کرد. حضور میدان مغناطیسی متناوب موجب افزایش دما و کاهش مدت درمان شده و در نتیجه کارایی مگنتوپلاسمونیک‌تراپی را بهبود می‌بخشد.

مرجع‌ها

[1] Suriyanto, E. Y. K. Ng, and S. D. Kumar. "Physical mechanism and modeling of heat generation and transfer in magnetic fluid hyperthermia through Néelian and Brownian relaxation: a review." *Biomedical engineering online* 16, no. 1 (2017): 36.
[2] Diaz-HR, Rafael, Raul Esquivel-Sirvent, and Cecilia Noguez. "Plasmonic response of nested nanoparticles with arbitrary geometry." *The Journal of Physical Chemistry C* 120, no. 4 (2016): 2349-2354.
[3] Herrera, Luis J. Mendoza, et al. "Sizing and Eddy currents in magnetic core nanoparticles: an optical extinction approach." *Physical Chemistry Chemical Physics* 19.4 (2017): 3076-3083.
[4] Tzarouchis, Dimitrios, and Ari Sihvola. "Light scattering by a dielectric sphere: perspectives on the Mie resonances." *Applied Sciences* 8.2 (2018): 184.
[5] Paul, Abhijit, and Anup Paul. "Thermomechanical analysis of a triple layered skin structure in presence of nanoparticle embedding multi-level blood vessels." *International Journal of Heat and Mass Transfer* 148 (2020): 119076.

محاسبه رسانش گرمایی دی‌اکسید توریوم با حل معادله ترابرد فونون بولتزمن مبتنی بر تابعی تبادلی–همبستگی بهینه

پیامی شبستر، محمود ؛ شیخی، سمیرا

گروه فیزیک نظری و محاسباتی، پژوهشکده فیزیک و شتابگرها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، سازمان انرژی اتمی ایران، تهران

چکیده

در این پژوهش، رسانش گرمایی شبکه‌ای دی‌اکسید توریوم (ThO_2) با استفاده از محاسبات اصول اولیه و بر پایه یک تابعی تبادلی–همبستگی مناسب مورد بررسی قرار گرفته است. ابتدا خواص ارتعاشی و طیف فونونی این ماده محاسبه شد و پایداری دینامیکی ساختار بلوری آن مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاصل از طیف فونونی وجود ویژگی‌هایی نظیر گاف فونونی و شکافتگی طولی–عرضی مدهای اپتیکی در نقطه Γ را نشان می‌دهد که بیانگر ماهیت یونی پیوندها در این ترکیب است. سپس رسانش گرمایی شبکه‌ای با حل معادله ترابرد فونون بولتزمن در بازه دمایی ۳۰۰ تا ۱۰۰۰ کلوین محاسبه شد. نتایج نشان می‌دهند که رسانش گرمایی محاسبه‌شده با افزایش دما کاهش یافته و رفتار آن با داده‌های تجربی و نتایج نظری گزارش‌شده در منابع پیشین تطابق خوبی دارد. این توافق نشان می‌دهد که چارچوب محاسباتی به‌کاررفته می‌تواند به‌عنوان رویکردی قابل اعتماد برای مطالعه و پیش‌بینی خواص گرمایی مواد پیشرفته مورد استفاده قرار گیرد

واژه های کلیدی: *دی اکسید توریوم، رسانش گرمایی شبکه ای، معادله ترابرد فونون بولتزمن، نظریه تابعی چگالی، نظریه اختلال تابعی چگالی.*

Calculation of the Thermal Conductivity of Thorium Dioxide via Solution of the Phonon Boltzmann Transport Equation Based on an Optimized Exchange–Correlation Functional

Payami Shabestar, Mahmoud; Sheykhi, Samira

Theoretical and Computational Physics Group, Physics & Accelerators Research School, Nuclear Science & Technology Research Institute, Atomic Energy Organization of Iran, Tehran

Abstract

In this work, the lattice thermal conductivity of thorium dioxide (ThO_2) is investigated using first-principles calculations based on an optimized exchange–correlation functional. The vibrational properties and phonon spectrum of the material are first analyzed to examine the dynamical stability of its crystal structure. The calculated phonon dispersion reveals characteristic features such as a phonon band gap and the longitudinal–transverse optical (LO–TO) splitting at the Γ point, indicating the ionic nature of the bonding in this compound. The lattice thermal conductivity is then obtained by solving the phonon Boltzmann transport equation over the temperature range of 300–1000 K. The results show that the thermal conductivity decreases with increasing temperature and exhibits good agreement with available experimental data and previous theoretical studies. This agreement demonstrates that the employed computational framework provides a reliable approach for studying and predicting the thermal transport properties of advanced materials.

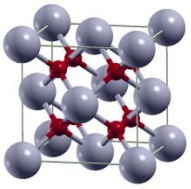
***Keywords**: thorium dioxide, lattice thermal conductivity, phonon Boltzmann transport equation, density functional theory, density-functional perturbation theory.*

PACS No. : 71; 73; 75

مقدمه

دی‌اکسید توریوم (ThO_2) یکی از مواد مهم در حوزه سوخت‌های هسته‌ای پیشرفته به شمار می‌رود. این ترکیب به دلیل نقطه ذوب بسیار بالا، پایداری شیمیایی قابل توجه و مقاومت مناسب در برابر تابش، به‌عنوان گزینه‌ای امیدبخش برای نسل جدید سوخت‌های هسته‌ای مورد توجه قرار گرفته است. در سال‌های اخیر و با افزایش نیاز به سامانه‌های هسته‌ای ایمن‌تر و کارآمدتر، سوخت‌های

مبتنی بر ThO_2 به‌عنوان جایگزینی بالقوه برای سوخت‌های متداول بر پایه دی‌اکسید اورانیوم مطرح شده‌اند. ساختار بلوری این ترکیب از نوع فلوریتی [۱] با تقارن مکعبی بوده که در آن اتم‌های توریوم در جایگاههای شبکه مکعبی وجوه‌مرکزدار [۲] قرار گرفته و اتم‌های اکسیژن جایگاه‌های تتراهدرال را اشغال می‌کنند (شکل ۱).



شکل۱ : بلور دی اکسید توریوم که توسط گروه فضایی مکعبی $Fm\bar{3}m$ با شماره ۲۲۵ مشخص می شود. گوی های بزرگ نقره ای و کوچک قرمز به ترتیب برای اتمهای توریوم و اکسیژن استفاده شده اند.

یکی از عوامل تعیین‌کننده در ایمنی و کارایی سوخت‌های هسته‌ای، توانایی ماده در انتقال و دفع گرما است. در این میان، رسانش گرمایی شبکه‌ای نقش اصلی را در انتقال حرارت در چنین موادی ایفا می‌کند. از این رو، شناخت دقیق مکانیسم‌های انتقال گرما در ThO_2 برای ارزیابی عملکرد حرارتی آن در شرایط کاری اهمیت زیادی دارد. با این حال، پیش‌بینی دقیق رسانش گرمایی شبکه‌ای به دلیل وابستگی آن به فرآیندهای پیچیده پراکندگی فونونی همواره چالش‌برانگیز بوده است. در سال‌های اخیر، نظریه تابعی چگالی (DFT) به‌عنوان یکی از ابزارهای قدرتمند برای مطالعه خواص الکترونی و ارتعاشی مواد به‌طور گسترده مورد استفاده قرار گرفته است. با وجود این، دقت نتایج به‌دست‌آمده به‌طور قابل توجهی به انتخاب تابعی تبادلی–همبستگی وابسته است. در بسیاری از موارد، تابعی‌های متداول قادر نیستند به‌طور هم‌زمان ساختار بلوری و ویژگی‌های ارتعاشی ThO_2 را با دقت کافی بازتولید کنند. از این رو، انتخاب یا بهینه‌سازی مناسب تابعی تبادلی –همبستگی برای دستیابی به توصیفی دقیق از ساختار شبکه و پراکندگی فونونی اهمیت ویژه‌ای دارد. در مطالعات تجربی متعددی که به بررسی خواص گرمایی دی‌اکسید توریوم پرداخته‌اند، اندازه‌گیری‌های مختلف نشان داده‌اند که رسانش گرمایی این ماده با افزایش دما کاهش می‌یابد و رفتار آن در دماهای بالا عمدتاً توسط پراکندگی فونونی کنترل می‌شود. در کنار این مطالعات تجربی، پژوهش‌های نظری نیز با استفاده از روش‌های مبتنی بر نظریه تابعی چگالی و مدل‌های ترابرد فونونی برای پیش‌بینی رسانش گرمایی ThO_2 انجام شده‌اند. با وجود این، در میان نتایج گزارش‌شده در منابع مختلف اختلاف‌هایی مشاهده می‌شود که بخش قابل توجهی از آن می‌تواند به تفاوت در انتخاب تابعی تبادلی –همبستگی، نحوه در نظر گرفتن برهم‌کنش‌های ناهارمونیک [۳] و روش حل معادله ترابرد فونون بولتزمن نسبت داده شود.

در این پژوهش، با استفاده از شبه پتانسیل بهینه تولید شده در کارهای قبل، که مبتنی بر یک غربالگری نظام‌مند بر روی ترکیب‌های مختلف تابعی تبادلی –همبستگی انجام شده [۱]، خواص ارتعاشی و طیف فونونی ماده محاسبه شده و رسانش گرمایی شبکه‌ای با حل معادله ترابرد فونون بولتزمن به‌دست آمد. هدف اصلی این مطالعه ارائه رویکردی قابل اعتماد برای پیش‌بینی خواص انتقال حرارت در مواد هسته‌ای پیشرفته و دستیابی به نتایجی با تطابق مناسب با داده‌های تجربی است.

روش انجام محاسبات

برای برهمکنش الکترون–یون، از شبه پتانسیلهای PAW [۴] بهینه [۱] استفاده شده که از غربالگری ترکیبات مختلف اجزای تشکیل دهنده تابعی تبادلی–همبستگی در رابطه زیر به دست آمده است:

$$E_{xc}[n(\vec{r}),\nabla n(\vec{r})] \equiv E_x + E_c + \Delta E_x + \Delta E_c. \qquad (1)$$

در ترکیب بهینه، از دترمینان اسلیتر (با ضریب $\alpha = 2/3$) برای E_x ، مدل گونارسون–لوندکوویست [۲] برای E_c ، تصحیح گرادیانی پردو–ونگ ۹۱ [۳] برای ΔE_x ، و تصحیح گرادیانی

[۱] Fluorite

[۲] FCC

[۳] Anharmonic

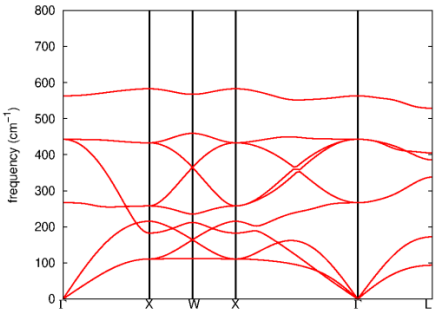
[۴] Projector Augmented Wave

PBEsol [۴] برای ΔE_c استفاده نموده ایم. این انتخاب با بررسی تعداد ۲۸۰۰ ترکیبات مختلف ممکنه از یک مجموعه محدود برای چهار جمله فوق و تولید شبه پتانسیل مربوطه و استفاده از آن برای انجام محاسبه خودسازگار الکترونی صورت گرفته است. آن ترکیبی را بعنوان مناسب (بهینه) در نظر گرفته ایم که بهینه سازی هندسه بلور نزدیکترین مقدار برای ثابت شبکه تجربی را، که برابر ۵/۵۹۲ آنگستروم می باشد، باز تولید نماید [۱].
برای حل معادلات کوهن–شم توسط کد محاسباتی QE [۵]، انرژیهای قطع ۹۰ و ۷۲۰ ریدبرگ را به ترتیب برای بسط توابع موج و چگالی الکترونی در نظر گرفته ایم. انتگرالگیریها در فضای معکوس با مش ۱۰×۱۰×۱۰ انجام شده اند و ساختارهای هندسی با دقت فشار و نیروی به ترتیب ۰/۵ کیلوبار و ۰/۰۰۱ میلی ریدبرگ بر واحد اتمی بهینه شده اند.

ویژگی‌های ارتعاشی و ثابت‌های نیروی مرتبه دوم با استفاده از نظریه اختلالی تابعی چگالی (DFPT) استخراج گردید. جهت لحاظ کردن برهم‌کنش‌های سه‌فونونی، ثابت‌های نیروی مرتبه سوم با روش ابرسلول ۴×۴×۴ (شامل ۱۹۲ اتم) محاسبه شدند. در نهایت، رسانش گرمایی شبکه‌ای κ_L در بازه ۳۰۰ تا ۱۰۰۰ کلوین با حل تکراری معادله ترابرد فونون بولتزمن (BTE) در کد ShengBTE [۴] و با استفاده از شبکه q برابر ۲۰×۲۰×۲۰ محاسبه شد. این رویکرد تکراری با در نظر گرفتن فرآیندهای نرمال و واگرد (Umklapp)، توصیف دقیق‌تری از جفت‌شدگی بین‌مدی نسبت به تقریب زمان واهلش (RTA) ارائه می‌دهد.

نتایج و بحث

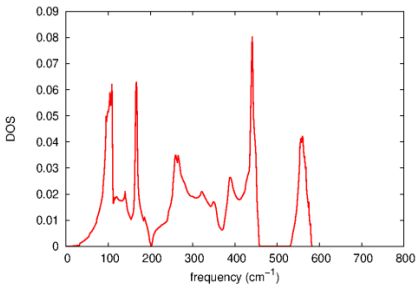
پس از بهینه‌سازی کامل ساختار بلوری دی‌اکسید توریوم در چارچوب محاسبات اصول اولیه، پارامتر شبکه به‌دست‌آمده تطابق بسیار خوبی با مقدار تجربی گزارش‌شده در مرجع [۵] نشان داد که بیانگر عملکرد مناسب تابعی تبادلی –همبستگی انتخاب‌شده در توصیف ساختار این ماده است. برای بررسی پایداری دینامیکی ساختار، طیف پاشندگی فونونی در امتداد مسیرهای تقارن بالای ناحیه بریلوئن $\Gamma \rightarrow X \rightarrow W \rightarrow X \rightarrow \Gamma \rightarrow L$ محاسبه شد که نتیجه آن در شکل ۲ نشان داده شده است.



شکل۲ : طیف پاشندگی فونونی بلور دی اکسید توریوم در امتداد مسیرهای تقارن بالای ناحیه بریلوئن.

همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود، در هیچ‌یک از نقاط ناحیه بریلوئن فرکانس موهومی مشاهده نمی‌شود که این امر نشان‌دهنده پایداری دینامیکی کامل فاز فلوریتی دی‌اکسید توریوم است. با توجه به وجود سه اتم در سلول واحد اولیه ساختار فلوریتی، طیف ارتعاشی شامل ۹ شاخه فونونی است که از سه مد آکوستیک و شش مد اپتیکی تشکیل می‌شود. نتایج به‌دست‌آمده از محاسبات کاملاً با این انتظار نظری سازگار هستند. در ناحیه نزدیک به نقطه Γ، شاخه‌های آکوستیک رفتار تقریباً خطی از خود نشان می‌دهند که بیانگر سرعت گروهی غیرصفر این مدها و نقش اساسی آن‌ها در انتقال گرمای شبکه‌ای است. در مقابل، شاخه‌های اپتیکی در بازه فرکانسی بالاتر متمرکز شده‌اند و توزیع فرکانسی آن‌ها تحت تأثیر اختلاف جرم قابل توجه میان اتم‌های توریوم و اکسیژن قرار دارد. همچنین در نقطه Γ جداشدگی مشخصی میان مدهای طولی و عرضی اپتیکی مشاهده می‌شود. این جداشدگی LO–TO ناشی از برهم‌کنش‌های بلندبرد کولنی در بلورهای یونی و وجود بارهای مؤثر بورن غیرصفر است و بیانگر ماهیت یونی پیوند Th–O در این ترکیب می‌باشد.

برای تحلیل دقیق‌تر ویژگی‌های ارتعاشی، چگالی حالت‌های فونونی (PDOS) نیز محاسبه شد که در شکل ۳ نمایش داده شده است.



شکل۳ : چگالی حالتهای فونونی بلور دی اکسید توریوم. گاف انرژی فونونی در بازه فرکانسی تقریباً بین ۴۵۸ تا ۵۱۸ برسانتی‌متر قرار دارد.

همان‌گونه که در این شکل مشاهده می‌شود، طیف ارتعاشی در بازه فرکانسی تقریباً ۴۵۸ تا ۵۱۸ برسانتی‌متر فاقد حالت‌های ارتعاشی است که نشان‌دهنده وجود یک گاف فونونی در ساختار ارتعاشی دی‌اکسید توریوم می‌باشد. وجود چنین گافی می‌تواند بر فرآیندهای پراکندگی سه‌فونونی تأثیرگذار باشد، زیرا برخی کانال‌های برهم‌کنش میان مدهای آکوستیک و اپتیکی را محدود می‌کند. این ویژگی معمولاً در موادی مشاهده می‌شود که بین اتم‌های تشکیل‌دهنده آن‌ها اختلاف جرم قابل توجهی وجود دارد.

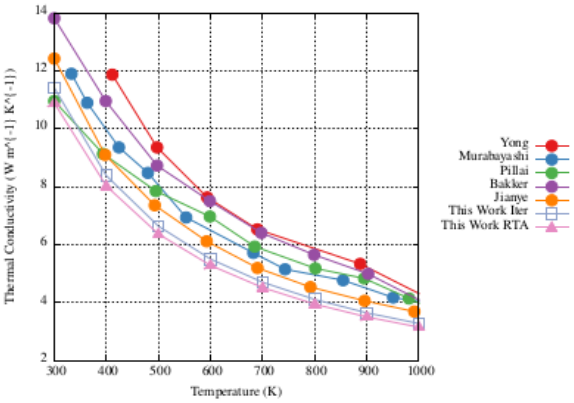
رسانش گرمایی شبکه‌ای دی‌اکسید توریوم در بازه دمایی ۳۰۰ تا ۱۰۰۰ کلوین با حل تکراری معادله ترابرد فونون بولتزمن محاسبه شد. نتایج حاصل در شکل ۴ به همراه داده‌های تجربی و نتایج نظری گزارش‌شده در منابع پیشین مقایسه شده‌اند. در این شکل، نتایج Yong و Jianye مربوط به محاسبات نظری [۶،۷] و نتایج Murabayashi، Pillai و Bakker مربوط به اندازه‌گیری‌های تجربی [۸–۱۰] هستند. همان‌طور که مشاهده می‌شود، رسانش گرمایی با افزایش دما به‌طور یکنواخت کاهش می‌یابد. در دماهای بالا وابستگی دمایی رسانش گرمایی تقریباً از رابطه

$$\kappa \propto 1/T \qquad (2)$$

پیروی می‌کند که نشان‌دهنده غالب بودن فرآیندهای واگرد در محدود کردن انتقال گرما است. با افزایش دما، جمعیت فونونی افزایش یافته و احتمال پراکندگی‌های سه‌فونونی بیشتر می‌شود؛ در نتیجه طول آزاد میانگین فونون‌ها کاهش یافته و رسانش گرمایی افت می‌کند. لازم به ذکر است که در این مطالعه معادله ترابرد فونون بولتزمن به‌صورت تکراری حل شده است. این روش با در نظر گرفتن جفت‌شدگی کامل میان مدهای مختلف فونونی، توصیف دقیق‌تری نسبت به تقریب زمان واهلش ارائه می‌دهد و بنابراین نتایج به‌دست‌آمده از نظر فیزیکی قابل اعتمادتر هستند. بررسی هم‌زمان طیف فونونی و نتایج رسانش گرمایی نشان می‌دهد که مدهای آکوستیک به دلیل سرعت گروهی بالاتر سهم غالبی در انتقال گرما دارند، در حالی که وجود گاف فونونی و اختلاف جرم قابل توجه میان اتم‌های Th و O بر الگوی پراکندگی سه‌فونونی اثرگذار است. در مجموع، ساختار ارتعاشی دی‌اکسید توریوم با ماهیت یونی قوی و وجود گاف فونونی، چارچوب فیزیکی منسجمی برای تبیین رفتار رسانش گرمایی این ماده در گستره وسیعی از دما فراهم می‌کند.

نتیجه گیری

در این پژوهش، رسانش گرمایی شبکه‌ای دی‌اکسید توریوم با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن و حل تکراری معادله ترابرد فونون بولتزمن مورد بررسی قرار گرفت. با به‌کارگیری یک تابعی تبادلی–همبستگی بهینه، ثابت شبکه ۵.۵۹۲ آنگستروم به‌دست آمد که تطابق فوق‌العاده‌ای با مقادیر تجربی دارد. نتایج ما ضمن تأیید پایداری دینامیکی ساختار فلوریتی، وجود یک گاف فونونی واقعی در بازه ۴۵۸ تا ۵۱۸ بر سانتیمتر و جداشدگی قابل‌توجه LO-TO در نقطه Γ را آشکار ساخت. محاسبات مربوط به فرآیندهای پراکندگی سه‌فونونی در یک ابرسلول ۴×۴×۴ (شامل ۱۹۲ اتم) نشان داد که حل تکراری معادله BTE، با در نظر گرفتن اثرات جفت‌شدگی مدها، توصیف دقیق‌تری از ترابرد گرما نسبت به تقریب RTA ارائه می‌دهد. رسانش گرمایی پیش‌بینی‌شده از وابستگی مشخصه $1/T$ پیروی کرده و همخوانی بالایی با داده‌های تجربی و نظری پیشین دارد. این تحقیق بر کارآمدی استفاده از تابعی‌های بهینه‌شده در پیش‌بینی خواص گرمایی اکسیدهای اکتینیدی تأکید کرده و داده‌های حیاتی برای کاربردهای سوخت هسته‌ای فراهم می‌کند.



شکل۴ : رسانش گرمایی شبکه‌ای محاسبه‌شده‌برای ThO2 به صورت تابعی از دما. نتایج حاصل از حل تکراری معادله ترابرد بولتزمن و تقریب زمان واهلش با داده‌های تجربی و نظری حاصل از پژوهش‌های دیگران مقایسه شده‌اند. Yong و Jianye مربوط به نتایج نظری [۶و۷] و Murabayashi، Pillai، و Bakker [۸–۱۰] مربوط به نتایج تجربی هستند.

مرجع‌ها

[۱] پیامی شبستر، محمود و شیخی، سمیرا ؛ «تابعی تبادلی–همبستگی مناسب برای محاسبات DFT ساختار بلوری و ثابتهای کشسان بلور ThO_2» مقاله نامه هفتمین کنفرانس فیزیک محاسباتی ایران، دانشگاه شهید بهشتی، ۱۳ بهمن ۱۴۹۴؛ صفحه ۲۸ تا ۳۱

[۲] P. Giannozzi, et. al.,; “Quantum ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials”; *J. Phys: Condens Matter* **21** , 395502 (2009).

[۳] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev*. **136**, B864 (1964); W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev*. **140**, A1133 (1965).

[۴] W. Li, J. Carrete, N.A. Katcho, N. Mingo, Comput. Phys. Commun. 185, 1747 (2014).

[۵] S. Wolf, The Chemistry of the Actinide and Transactinide Elements 3273–3338 (Springer, 2006).

[۶] Y. Lu, et al, *J. Phys. Condens. Matter* **24** , 225801 (2012)

[۷] J. Liu, et al, *J. Nucl. Mater*. **511**, 11 (2018).

[۸] M. Murabayashi, *J. Nucl. Sci. Technol*. **7** , 559 (1970).

[۹] C. Pillai, P. Raj, *J. Nucl. Mater*. **277** (2000) 116.

[۱۰] K. Bakker, et al, *J. Nucl. Mater*. **250** , 1 (1997).

بررسی فراسطح گرافنی با استفاده از یادگیری ماشین- مدل جنگل تصادفی

جودی ، رامین[۱] ؛ نصیری ، مجتبی[۱] ؛ مددی ، ابراهیم[۲]

[۱] دانشکده علوم، گروه فیزیک، دانشگاه زنجان، زنجان

[۲] دانشکده علوم مهندسی و مهندسی فیزیک، مرکز آموزش عالی فنی و مهندسی بوئین زهرا، بوئین زهرا

چکیده

در این پژوهش روش یادگیری ماشین برای مطالعه جذب موج الکترومغناطیسی توسط فراسطح مبتنی بر گرافن مورد استفاده قرار می‌گیرد. ابتدا روش المان محدود برای مطالعه‌ی یک سلول از این فراسطح که دارای هندسه متقارن با چهار شکاف یا گشودگی زاویه‌ای است در بازه‌ی فرکانسی تراهرتز به کار گرفته می‌شود. به علت وجود پارامترهای متعدد در این سامانه بررسی کامل جذب به ازای همه مقادیر پارامترها بسیار پرهزینه و زمان بر است. به این دلیل این سامانه با استفاده از مدل جنگل تصادفی که روشی متداول در یادگیری ماشین است بررسی می‌شود.

واژه های کلیدی: *فراسطح، گرافن، جاذب کامل، تراهرتز،یادگیری ماشین،جنگل تصادفی.*

Machine Learning-Based Analysis of a Graphene Metasurface Using the Random Forest Algorithm

Judi, Ramin[۱]; Nasiri, Mojtaba[۱] ;Madadi, Ebrahim[۲]

[۱] *Department of Physics, University of Zanjan, Zanjan,*

[۲] *Department of Engineering Sciences and Engineering Physics, Buin Zahra Technical and Engineering Higher Education Center, Buin Zahra*

Abstract

In this study, a machine learning approach is employed to investigate the absorption of electromagnetic waves by a graphene-based metasurface. First, the finite element method is used to analyze a unit cell of the metasurface with a symmetric geometry consisting of four angular gaps in the terahertz frequency range. Due to the large number of parameters involved in this system, a comprehensive investigation of the absorption behavior for all possible parameter values is computationally expensive and time-consuming. Therefore, the system is further studied using the Random Forest model, a widely used machine learning technique. The proposed approach enables efficient prediction and analysis of the absorption characteristics of the graphene metasurface while significantly reducing the computational cost.

***Keywords**: Metasurface; Graphene; Perfect Absorber; Terahertz; Machine Learning; Random Forest*

PACS No.۷۸

مقدمه

فراموا د ساختارهای مصنوعی هستند که از آرایه‌هایی دوبعدی و سه بعدی تشکیل شده اند که عناصر آنها از ابعاد زیرطول‌موج تشکیل شده‌اند. ساختارهای دو بعدی را فراسطح یا متاسرفیس می نامند. این ساختارها امکان کنترل دقیق و دستکاری ویژگی‌های موج الکترومغناطیسی شامل دامنه، فاز، قطبش و جهت انتشار را فراهم

می‌کنند. برخلاف فراماده سه بعدی، فراسطوح ضخامت بسیار کمی دارند و می توانند امکان پاسخ‌های نامتعارف مانند شکست منفی، جذب کامل و کنترل فاز پیوسته را فراهم آورند [۱،۲]. بخاطر این ویژگی‌ها جالب، فراسطوح در کاربردهایی نظیر لنزهای تخت، جاذب‌های کامل، فیلترهای فرکانسی، حسگرها و سامانه‌های مخابراتی پیشرفته حائز اهمیت فراوانی هستند، به‌ویژه این مواد در ناحیه تراهرتز که شکاف فناوری میان امواج مایکروویو و فروسرخ است به کار برده می‌شوند.

در سال‌های اخیر، از مواد دوبعدی مانند گرافن در طراحی فراسطوح استفاده فراوانی می شود که منجر به تحول زیادی در این حوزه شده است. گرافن، یک لایه‌ی تک اتمی از اتم‌های کربن است که بر روی شبکه لانه‌زنبوری قرار گرفته‌اند. این مواد دارای رسانندگی بالا و تحرک الکترونی زیادی هستند و از طریق تغییر انرژی فرمی، قابلیت تنظیم‌پذیری الکتریکی در آن امکانپذیر است، بنابراین این مواد گزینه‌ای بسیار مناسب برای ساخت فراسطوح فعال و قابل تنظیم محسوب می‌شوند [۳]. امکان کنترل دینامیکی پاسخ الکترومغناطیسی آن از طریق اعمال ولتاژ بایاس یا تزریق ناخالصی یکی از مهم‌ترین مزایای گرافن در ناحیه تراهرتز است که منجر به تغییر سطح فرمی می‌شود و سبب تنظیم‌پذیری فرکانس تشدید و میزان جذب می‌گردد [۴]. این ویژگی باعث شده است که فراسطوح مبتنی بر گرافن در طراحی جاذب‌های پهن‌باند، مدولاتورها، حسگرهای زیستی و ادوات فوتونیکی فعال کاربرد گسترده‌ای پیدا کنند [۵].

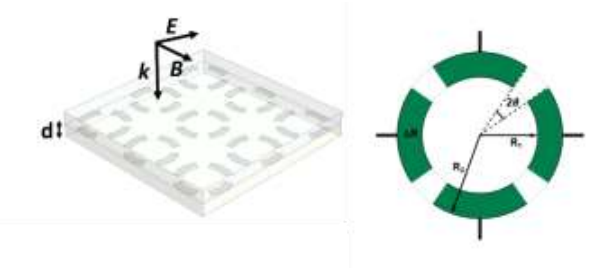
با وجود این مزایا، طراحی بهینه فراسطوح گرافنی همچنان یک چالش پیچیده به شمار می‌رود. پاسخ این ساختارها به میدان الکترومغناطیسی به‌شدت به پارامترهای هندسی (مانند ابعاد المان‌ها و شکاف‌ها)، خواص ماده (انرژی فرمی، نرخ پراکندگی) و شرایط تحریک وابسته است .روش‌های رایج طراحی فراسطوح گرافنی، بر پایه شبیه‌سازی‌های عددی تمام‌موج و جستجو در میان پارامترهای مختلف استوار است که با محاسبات عددی پیچیده انجام می‌شوند. این محاسبات با افزایش تعداد پارامترها از نظر زمانی بسیار پرهزینه هستند. علاوه بر این، بررسی کامل فضای پارامتری برای دستیابی به عملکرد بهینه نیازمند اجرای تعداد زیادی شبیه‌سازی است.

در این راستا، روش‌های یادگیری ماشین به‌عنوان ابزاری کارآمد برای مدل‌سازی و پیش‌بینی رفتار فراسطوح مورد توجه قرار گرفته‌اند [۶،۷]. این روش‌ها با یادگیری رابطه میان پارامترهای طراحی و پاسخ به میدان‌های الکترومغناطیسی، امکان پیش‌بینی سریع عملکرد ساختار را بدون نیاز به اجرای شبیه‌سازی‌های مکرر فراهم می‌کنند. در میان الگوریتم‌های مختلف، روش جنگل تصادفی علاوه بر سادگی به دلیل توانایی بالا در مدل‌سازی روابط پیچیده، پایداری در برابر نویز و بیش‌برازش، و عملکرد مناسب در مجموعه‌داده‌های محدود، گزینه‌ای قابل اعتماد برای تحلیل فراسطوح گرافنی به شمار می‌رود.

در پژوهش حاضر، طیف جذب یک فراسطح مبتنی بر گرافن در ناحیه تراهرتز مورد بررسی قرار گرفته است. داده‌های مورد نیاز از طریق شبیه‌سازی عددی از نرم افزار کامسول استخراج شده و سپس با استفاده از الگوریتم جنگل تصادفی، مدلی برای پیش‌بینی ضریب جذب برحسب پارامترهای هندسی و فیزیکی ساختار توسعه داده شده است. این رویکرد امکان تحلیل سریع فضای پارامتری و شناسایی نواحی با جذب بالا را فراهم می‌کند و می‌تواند مسیر طراحی و بهینه‌سازی فراسطوح قابل تنظیم را به‌طور چشمگیری تسریع نماید.

مدل اولیه شبیه سازی

در این پژوهش، یک فراسطح مبتنی بر گرافن مورد بررسی قرار گرفته است. ساختار پیشنهادی به‌صورت یک آرایه دوره‌ای از واحدهای تکرارشونده طراحی شده است[۸]. در شبیه‌سازی‌های عددی، به دلیل تقارن و تناوب ساختار، تنها یک سلول واحد از این فراسطح مورد تحلیل قرار می‌گیرد. همان‌طور که در شکل (۱) نشان داده شده است، سلول واحد شامل یک حلقه گرافنی است که دارای چهار شکاف متقارن می‌باشد. وجود این شکاف‌ها نقش مهمی در ایجاد تشدیدهای پلاسمونی و در نتیجه افزایش جذب امواج الکترومغناطیسی در ناحیه تراهرتز ایفا می‌کند.



شکل۱ : شماتیک فراسطح مورد مطالعه به صورت نمای سه بعدی و نمای بالایی

در این ساختار، حلقه گرافنی بر روی یک زیرلایه دی‌الکتریک قرار گرفته است. ضخامت زیرلایه در شکل (۱) برابر است با $d = ۱۷.۶\ \mu m$. علاوه بر این، جهت و اندازه شکاف‌های ایجاد شده در حلقه با استفاده از زاویه‌های متقارن تعریف می‌شوند. این زاویه ها در شکل (۱) نمایش داده شده است. تغییر گشودگی شکاف‌ها می‌تواند بر جفت‌شدگی میدان الکترومغناطیسی با مدهای پلاسمونی ساختار اثر گذاشته و در نتیجه رفتار جذب ساختار را تحت تأثیر قرار دهد.

یکی دیگر از پارامترهای هندسی مهم در این ساختار، ضخامت حلقه گرافنی است که با پارامتر ΔR نمایش داده می‌شود. این پارامتر در واقع اختلاف بین شعاع داخلی و خارجی حلقه را مشخص کرده و تعیین‌کننده‌ی پهنای حلقه می‌باشد. تغییر مقدار ΔR موجب تغییر در شرایط تشدید و در نتیجه تغییر در طیف جذب فراسطح خواهد شد. همان طور که اشاره کردیم تحلیل رفتار الکترومغناطیسی ساختارو شبیه‌سازی‌های عددی با استفاده از روش المان محدود انجام شده است. در این روش، شرایط مرزی تناوبی در راستاهای صفحه‌ای اعمال شده تا رفتار یک آرایه بی‌نهایت از سلول‌های واحد، مدل‌سازی شود. همچنین یک موج تخت در راستای عمود بر سطح فراسطح به ساختار تابانده شده و پاسخ جذب ساختار در بازه فرکانسی ناحیه تراهرتز محاسبه شده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی های مختلف به تعداد ۱۸۰ نمونه به‌عنوان داده‌های آموزشی برای مدل یادگیری ماشین مورد استفاده قرار گرفته‌اند.

نتیجه‌گیری

پس از استخراج داده‌های مورد نیاز از شبیه‌سازی‌های عددی، از روش یادگیری ماشین برای مدل‌سازی رابطه میان پارامترهای ساختار و پاسخ جذب استفاده شده است. در این پژوهش، الگوریتم جنگل تصادفی برای پیش‌بینی ضریب جذب بر حسب پارامترهایی نظیر انرژی فرمی گرافن ($E_f = ۰.۸\ eV$)، زاویه شکاف‌ها (θ)، ضخامت حلقه (ΔR) و فرکانس موج فرودی (f) در ناحیه ۰٫۱ تا ۵ تراهرتز به کار گرفته شد. این الگوریتم با استفاده از ۸۰ درصد داده‌های حاصل از شبیه‌سازی آموزش داده شد تا بتواند جذب سامانه را در فضای پارامتری مورد نظر ($\Delta R, \theta$) پیش‌بینی کند.

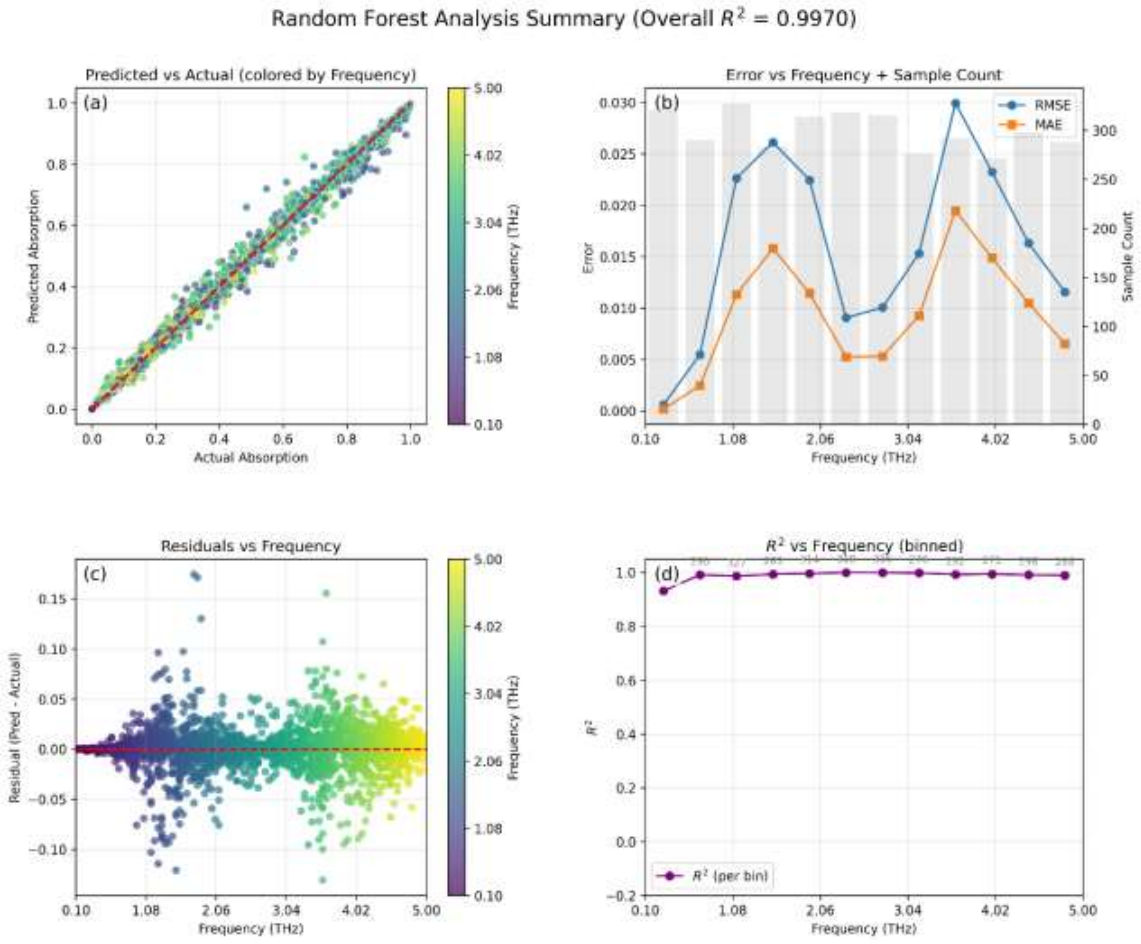
برای ارزیابی عملکرد مدل، مقادیر پیش‌بینی‌شده توسط الگوریتم با مقادیر واقعی حاصل از شبیه‌سازی مقایسه شدند.

همان‌طور که در شکل (a-۲) مشاهده می‌شود، همبستگی بسیار خوبی میان مقادیر پیش‌بینی‌شده و داده‌های واقعی وجود دارد و نقاط به‌خوبی در امتداد خط ایده‌آل قرار گرفته‌اند. این نتیجه نشان می‌دهد که مدل یادگیری ماشین توانسته است رابطه غیرخطی میان پارامترهای ساختار و پاسخ جذب را با دقت بالایی یاد بگیرد. شکل (b-۲)خطا برحسب فرکانس :این نمودار تغییرات خطاهای RMSEو MAE را در بازه‌های مختلف فرکانسی نمایش می‌دهد. مقادیر پایین خطا در تمامی بازه‌ها (کمتر از ۰٫۰۳) نشان‌دهنده پایداری مدل در فرکانس‌های مختلف است؛ همچنین ستون‌های خاکستری‌رنگ، توزیع یکنواخت داده‌های آموزشی (Sample Count)را در کل فضای فرکانسی تایید می‌کنند.

در شکل (c-۲) اختلاف بین مقدار پیش‌بینی‌شده و واقعی (Residuals) ترسیم شده است. توزیع متقارن داده‌ها حول خط صفر (خط‌چین قرمز) نشان‌دهنده عدم وجود خطای سیستماتیک در مدل (Bias) و مناسب بودن الگوریتم انتخاب‌شده برای این مسأله است. شکل (d-۲) نمودار دقت مدل را به‌صورت مجزا در هر بازه فرکانسی نشان می‌دهد. مقادیر $R^۲$که همگی در نزدیکی ۱ قرار دارند، ثابت می‌کنند که مدل فارغ از فرکانس کاری، عملکردی قابل اعتماد برای پیش‌بینی پاسخ جذبی فراسطح دارد.

در ادامه، برای بررسی دقیق‌تر رفتار ساختار در فضای پارامتری، از مدل آموزش‌دیده برای تولید نقشه‌های پارامتری جذب استفاده شد. شکل (۳) فضای پارامتری ضریب جذب را بر حسب پارامترهای هندسی شامل ضخامت حلقه ΔR و زاویه شکاف‌ها θ در چند فرکانس مختلف در ناحیه تراهرتز نشان می‌دهد. در این نمودارها، شدت رنگ بیانگر مقدار جذب ساختار است و نواحی با رنگ روشن‌تر نشان‌دهنده جذب بالاتر می‌باشند. همچنین در این شکل، نواحی با جذب بالا به صورت هاشور خورده مشخص شده‌اند که نشان‌دهنده محدوده‌هایی از پارامترهای هندسی هستند که عملکرد بهینه‌تری برای ساختار فراهم می‌کنند. در این ناحیه ها جذب فراسطح بالای ۹۵٪ است.

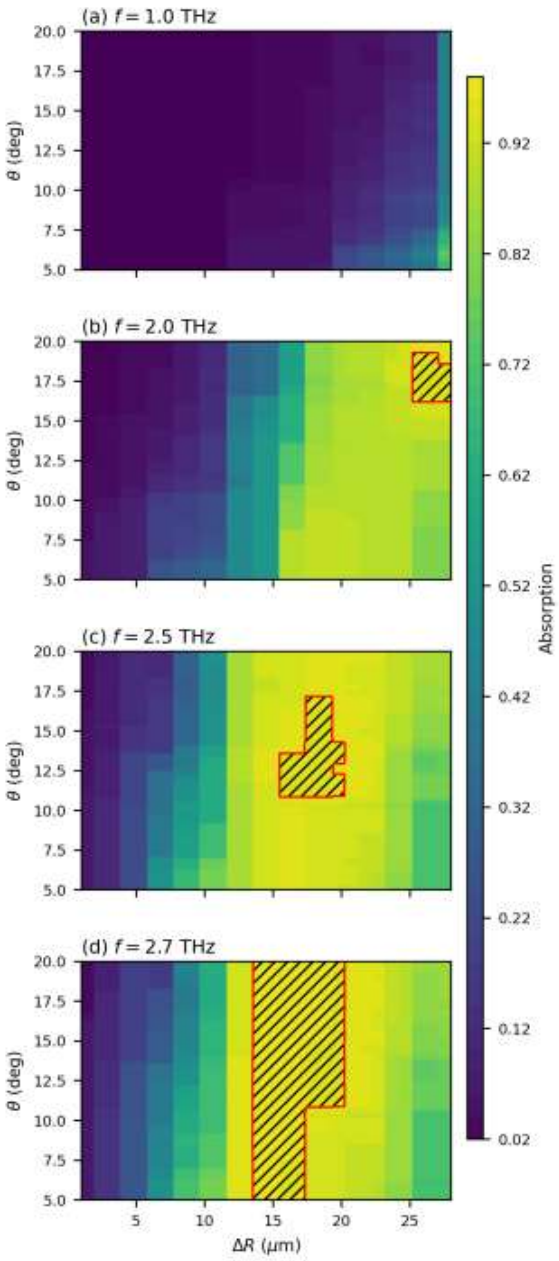
نتایج حاصل از این نقشه‌های پارامتری نشان می‌دهد که پاسخ جذب فراسطح به‌طور قابل توجهی به پارامترهای هندسی ساختار وابسته است. با تغییر ضخامت حلقه و زاویه شکاف‌ها، شرایط تشدید پلاسمونی در ساختار تغییر کرده و در نتیجه مقدار جذب در



شکل۲ : جزئیات آموزش جنگل تصادفی

فرکانس‌های مختلف دستخوش تغییر می‌شود. استفاده از مدل یادگیری ماشین این امکان را فراهم می‌کند که این فضای پارامتری به‌صورت سریع و پیوسته بررسی شده و نواحی مناسب برای دستیابی به جذب بالا شناسایی شوند. در مجموع، نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که ترکیب شبیه‌سازی‌های عددی با روش‌های یادگیری ماشین می‌تواند رویکردی کارآمد برای تحلیل و طراحی فراسطح‌های

گرافنی در ناحیه تراهرتز باشد. این روش نه تنها دقت قابل قبولی در پیش‌بینی پاسخ ساختار ارائه می‌دهد، بلکه زمان مورد نیاز برای بررسی فضای پارامتری و بهینه‌سازی طراحی را نیز به‌طور قابل توجهی کاهش می‌دهد.



شکل۳ : شکل فضای پارامتری مربوط به زاویه شکاف‌ها و ضخامت حلقه‌ی گرافنی برای چند فرکانس مشخص می‌کند. نواحی هاشور خورده جذب بالای ۹۵ درصد را نشان می دهد

مرجع‌ها

[۱] N. Yu and F. Capasso; "Flat Optics with Designer Metasurfaces"; *Nature Materials* **۱۳** (۲۰۱۴) ۱۳۹–۱۵۰.

[۲] S. Jahani and Z. Jacob; "All-Dielectric Metamaterials"; *Nature Nanotechnology* **۱۱** (۲۰۱۶) ۲۳–۳۶.

[۳] A. K. Geim and K. S. Novoselov; "The Rise of Graphene"; *Nature Materials* **۶** (۲۰۰۷) ۱۸۳–۱۹۱.

[۴] F. H. L. Koppens et al.; "Graphene Plasmonics: A Platform for Strong Light–Matter Interactions"; *Nano Letters* **۱۱** (۲۰۱۱) ۳۳۷۰–۳۳۷۷.

[۵] Q. Bao and K. P. Loh; "Graphene Photonics, Plasmonics, and Broadband Optoelectronic Devices"; *ACS Nano* **۶** (۲۰۱۲) ۳۶۷۷–۳۶۹۴.

[۶] W. Ma et al.; "Deep Learning for the Design of Photonic Structures"; *Nature Photonics* **۱۵** (۲۰۲۱) ۷۷–۹۰.

[۷] J. Peurifoy et al.; "Nanophotonic Particle Simulation and Inverse Design Using Neural Networks"; *Science Advances* **۴** (۲۰۱۸) eaar۴۲۰۶.

[۸] رامین جودی، مجتبی نصیری و ابراهیم مددی؛ «جاذب کامل پهن باند قابل تنظیم مبتنی بر گرافن»؛ *مجله پژوهش فیزیک ایران*، **۲۵**، شماره ۴، زمستان ۱۴۰۴، صفحه ۴۶۶ تا ۴۶۹.

بررسی تاثیر ٤ درصد ناخالصی فلز واسط (آهن، منگنز) بر خواص الکترونیکی و اپتیکی نانونوار لبه دسته صندلی نیترید آلومینیوم

بدیعیان باغ سیاهی، فاطمه [۱]؛ بیرانوند، مهرزاد [۲]

[۱] دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه کوثر بجنورد، بجنورد

[۲] آموزش و پرورش استان قم، ناحیه ۲

چکیده

در این پژوهش تاثیر جایگذاری ٤ درصد ناخالصی فلز واسط (آهن، منگنز) بر خواص الکترونیکی و اپتیکی نانونوار دسته صندلی نیترید آلومینیوم با استفاده از نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. نتایج نشان می دهند که افزودن فلز واسط منجر به شکافتگی نوارهای تبهگن در ساختار نواری نانو نوار می شود. علاوه بر این، تقارن موجود در کانالهای اسپین بالا و پایین به هم می خورد و گاف نواری اسپین بالا و پایین تغییر می کند. در خصوص خواص اپتیکی، نتایج نشان می دهند که افزودن ناخالصی فلز واسط منجر به گذارهای اپتیکی جدید در ناحیه نور مرئی و در نتیجه تغییر رفتار پاشندگی نانو نوار از حالت بهنجار به حالت نابهنجار می شود.

واژه های کلیدی: *نانونوار- نیترید آلومینیوم- خواص اپتیکی- پاشندگی نابهنجار-گذار اپتیکی*

Study of the effect of 4% TM (Mn, Fe) impurity on the electronic and optical properties of AlN armchair nanoribbon

Badieian Baghsiyahi, Fatemeh[1] ; Beiranvand, Mehrzad[2]

[1] *Faculty of Natural Science and Engineering, Kosar University of Bojnord, Bojnord, Iran*

[2] *Education and Training Department of Qom Province, Zone 2*

Abstract

In this study, the effect of substituting 4% transition metals (TM) impurities (Fe,Mn) on the electronic and optical properties of AlN armchair nanoribbons was investigated using the ab initio method. The results indicate that the addition of TM leads to the splitting of degenerate bands in the nanoribbon's band structure. Furthermore, the existing symmetry in the spin-up and spin-down channels is broken, and the energy of gaps become different. Regarding optical properties, the results show that the addition of TM impurities leads to new optical transitions in the visible light region, consequently changing the dispersion behavior of the nanoribbon from normal to anomalous.

key words: AlN nanoribbon-optical properties-anomalous dispersion-optical transition

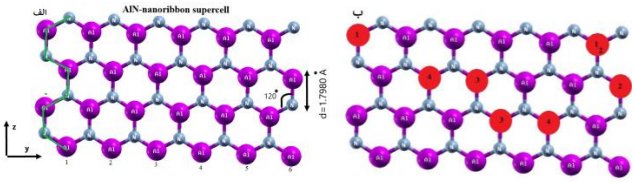
PACS No. 81,73

مقدمه

ترکیبات نیمه هادی نیترید آلومینیوم از دیرباز به دلیل شکاف نواری بزرگشان در دیودهای ساطع نور آبی- فرابنفش، لیزرها و الکترونیک با دمای بالا مورد توجه قرار گرفته اند. پس از کشف گرافن، نانوساختارهای دو بعدی مبتنی بر نیترید آلومینیوم مانند لایه‌های نازک، نانوصفحات و نانوروبان‌ها به‌عنوان مواد گرافن‌مانند همچنان به‌عنوان نامزدهای مناسب برای نیم‌رساناهای مغناطیسی رقیق و اسپین‌ترونیک‌ها به دلیل پایداری ساختاری، حرارتی و شیمیایی در نظر گرفته می‌شوند. اتم های فلزات واسطه (TM) مغناطیسی مانند مس، کروم، نیکل و منگنز برای ساختن نیم‌رساناهای مغناطیسی رقیق نیترید آلومینیوم مورد استفاده قرار گرفتند مطالعه نانو ساختارهای نیترید آلومینیوم نیز توسط گروه های مختلف مورد توجه قرار گرفته است [۵-۱]. با وجود مطالعه نظری ساختار و پایداری نانو ساختارهای نیترید آلومینیوم، سنتز نیترید آلومینیوم دو بعدی در کارهای تجربی اخیر، مطالعه بر روی این ترکیب همچنان جزو موضوعات به روز است. در این مقاله سعی کرده ایم در ادامه پژوهش های قبلی بر روی نانوصفحات نیترید آلومینیوم، به بررسی تاثیر آلایش ٤ درصد عناصر فلز واسط آهن و منگنز بر خواص الکترونیکی و اپتیکی نانونوار لبه دسته صندلی بپردازیم [٦و٧].

روش محاسباتی

در این مقاله از روش محاسبات ابتدا به ساکن نظریه تابعی چگالی در غالب بسته نرم افزاری سی استا (SIESTA) استفاده شده است. مجموعه پایه DZP در تقریب شبه پتانسیل شیب تعمیم یافته (GGA) و آزمون همگرایی انرژی کل با استفاده از انرژی قطع ۶۰۰ریدبرگ در نظر گرفته شده است و محاسبات تا رسیدن نیروی بین اتمها به 0.04 eV/Å و اختلاف انرژی به 10^{-5} eV ادامه یافته است. مش بندی فضای وارون بر اساس روش مونخارست–پک با مقادیر 1×4×5 انجام شده است. در شکل ۱ ابرشبکه درنظر گرفته شده برای ساخت نانونوار و جایگاههای در نظر گرفته شده برای افزودن ناخالصی نشان داده شده است. در این ابرشبکه، ۲۴ اتم آلومینیوم و ۲۴ اتم نیتروژن حضور دارند. ابرشبکه با لبه دسته صندلی، در صفحه yz با گسترش در راستای z است. پهنای نانونوار همچنان که مشاهده می شود به اندازه ۶ زنجیره دسته صندلی است. طول پیوندها d=1.7980Å و زوایای داخلی 120° هستند.



شکل ۱ : الف) ابرشبکه نیترید آلومینیوم ب) جایگاه افزودن اتمهای ناخالصی فلز واسط

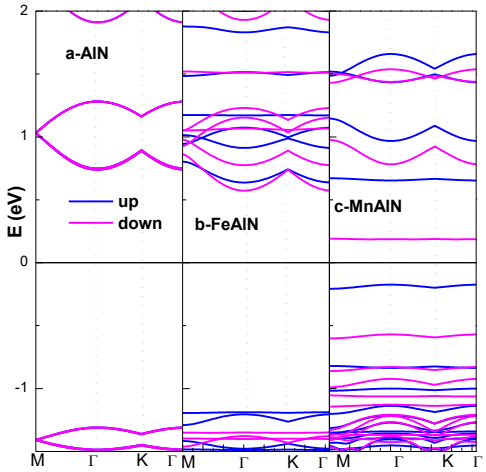
بررسی آلایش نانونوار با عناصر فلز واسط (آهن و منگنز)–خواص الکتریکی

برای بررسی جاینشانی عنصر فلز واسط در نانونوار، همانطور که در شکل ۱ مشاهده می شود چهار حالت متفاوت (جایگاه ۱ تا ۴) برای جاینشانی دو اتم ناخالصی فلز واسط به جای دو اتم آلومینیوم در نظر گرفته شده است، به این ترتیب حدود ۴٪ ناخالصی (۲اتم از ۴۸ اتم ترکیب اولیه) در ترکیب وارد می کنیم. علاوه بر این برای بررسی نظم مغناطیسی نمونه ها، پایداری نمونه ها در دو وضعیت فرومغناطیسی و آنتی فرو مغناطیس بررسی شده است. در نهایت با بررسی انرژی کل ۸ وضعیت هر کدام از نمونه ها (لبه دور–لبه نزدیک–وسط دور–وسط نزدیک– در وضعیت

جدول ۱: انرژی کل نانونوار نیترید آلومینیوم آلایش یافته در وضعیتهای مختلف (الکترون ولت)

	Fe		Mn	
	FM	AFM	FM	AFM
لبه دور	−۸۸۱۷/۷۶۸۱۳۰	−۸۸۱۷/۷۶۸۱۳۶	−۸۵۱۱/۸۰۳۷۶۴	−۸۵۱۱/۸۰۳۷۹۵
لبه نزدیک	−۸۸۱۷/۵۰۶۶۰۹	−۸۸۱۷/۷۲۹۸۷۱	−	−۸۵۱۱/۴۰۰۵۳۲
وسط دور	−۸۸۱۶/۴۹۳۶۷۱	−۸۸۱۶/۴۹۴۰۶۳	−۸۵۰۹/۴۷۶۵۸۴	−۸۵۰۹/۴۷۵۴۵۷
وسط نزدیک	−۸۸۱۶/۲۱۰۷۳۲	−۸۸۱۶/۵۴۰۰۳۶	−۸۵۰۹/۵۹۷۸۴۰	−۸۵۰۹/۱۳۸۱۲۱

فرو مغناطیس و آنتی فرومغناطیس) پایدارترین حالت هر کدام برای بررسی خواص الکترونی و اپتیکی انتخاب شدند. همانطور که جدول ۱ نشان می دهد نمونه آهن در وضعیت لبه دور آنتی فرومغناطیس و نمونه منگنز نیز در همین وضعیت پایین ترین انرژی کل و در نتیجه بیشترین پایداری را دارند (البته تفاوت انرژی بین وضعیتهای مختلف ناچیز است و نتیجه گیری دقیق در خصوص تعیین ساختار پایدار با این داده ها عملا غیر ممکن است، با این وجود با توجه به حجم زیاد داده ها، تنها خواص الکتریکی و اپتیکی نمونه های با کمترین انرژی کل بررسی و گزارش شده اند). شکل ۲ ساختار نواری نانو نوار خالص و آلایش یافته با آهن و منگنز را نشان می دهد. عدم تقارن موجود در ساختار نواری حالتهای اسپین بالا و پایین در نانو نوارهای آلایش شده نشان می دهد که حضور اتمهای ناخالصی منجر به مغناطیسی شدن نانونوار نیترید آلومینیوم شده است. در ادامه برای بررسی دقیق تر تاثیر اتمهای ناخالصی، چگالی حالتهای جزیی نمونه ها نیز محاسبه و در

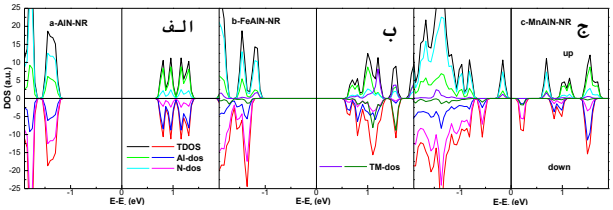


شکل۲ : ساختار نواری و چگالی حالتهای نانونوار نیترید آلومینیوم خالص و آلایش یافته در وضعیت لبه دور آنتی فرومغناطیس.

شکل ۳ نمایش داده شده اند. شکل ۳–الف نشان می دهد که در نانو نوار نیترید آلومینیوم خالص، هم در اسپین بالا و هم در اسپین پایین، سهم غالب در چگالی حالتهای بالای تراز فرمی متعلق به آلومینیوم است در حالی که چگالی حالتهای پایین تراز فرمی، عمدتا ناشی از نیتروژن هستند. در مورد آلایش با آهن همانطور که در شکل ۳–ب حالتهای اسپین پایین مشاهده می شود؛ در اثر حضور اتمهای آهن، تبهگنی اولین نوارهای بالای تراز فرمی (محدوده ۱ الکترون ولت) کاملا از بین می رود؛ علاوه بر این ترازهای ناخالصی جدیدی در محدوده ۱.۵ تا ۲ الکترون ولت ایجاد می شود. در خصوص حالتهای اسپین بالا این تغییرات کمی متفاوت هستند. در مورد حالتهای اسپین بالا و پایین زیر تراز فرمی هم پدیده غالب شکافتگی تبهگنی نوارها است. در مورد ناخالصی منگنز وضعیت پیچیده تر است. همانطور که شکل ۳–ج نشان می دهد در این حالت علاوه بر شکافتگی تبهگنیها، جابجایی شدید نوارها و کوچک شدن گاف انرژی را نیز داریم. نکته جالب توجه در مورد آلایش با منگنز، پیدایش دو پیک در حالت اسپین بالا ناشی از هیبریداسیون نیتروژن با آلومینیوم و منگنز بلافاصله قبل و بعد از تراز فرمی است که منجر به کاهش چشمگیر اندازه گاف انرژی شده است. مقدار گاف انرژی نمونه ها در جدول ۲ گزارش شده است.

خواص اپتیکی

برای بررسی خواص اپتیکی از روش تئوری تابعی چگالی وابسته به زمان (TD-DFT) بر مبنای تئوری اغتشاش مرتبه اول استفاده می شود. محاسبات برای نوری با قطبش خطی در راستای z که عمود بر نانو نوار می تابد، انجام شده است. در ابتدا قسمت موهومی تابع دی الکتریک محاسبه می شود، سپس به کمک تبدیلات کرامرز–کرونیگ و روابط زیر، سایرپارامترهای



شکل ۳: چگالی حالتهای جزیی نانو نوار نیترید آلومینیوم الف)خالص و آلایش یافته با ب) آهن ج)منگنز در وضعیت لبه دور آنتی فرومغناطیس.

اپتیکی به دست می آیند [٤و ٥]:

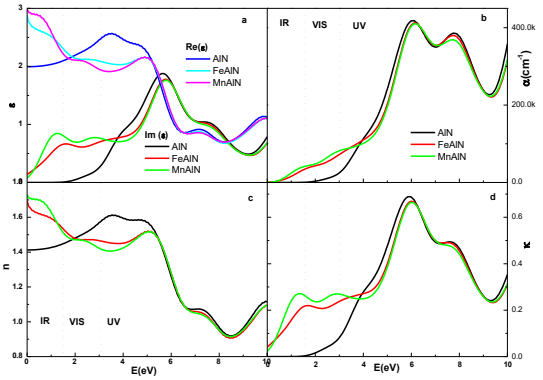
$$\varepsilon = \varepsilon_{Re} + i\,\varepsilon_{Im} \quad (۱)$$

$$\hat{n} = n + i\,\kappa \quad (۲)$$

در روابط بالا ε تابع دی الکتریک مختلط است و ε_{Re} و ε_{Im}معرف قسمت حقیقی و موهومی آن هستند. $\hat{n}$ ضریب شکست مختلط است که n ضریب شکست حقیقی ماده و κ قسمت موهومی ضریب شکست یا همان ضریب خاموشی است. ضریب جذب با رابطه (۳) به قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مربوط می شود.

$$I(\omega) = \sqrt{2}\,\frac{\omega}{c}\left[(\varepsilon_{Re}(\omega)^2 + \varepsilon_{Im}(\omega)^2)^{1/2} - \varepsilon_{Re}(\omega)\right]^{1/2} \quad (۳)$$

شکل ٤ بخش موهومی و حقیقی تابع دی الکتریک، بخش حقیقی و موهومی تابع ضریب شکست (ضریب شکست حقیقی و ضریب خاموشی) و در نهایت ضریب جذب این سه نانو نوار را نشان می دهد. همانطور که مشاهده می شود افزودن اتمهای ناخالصی، رفتار نانونوار به ویژه در محدوده مادون قرمز و مرئی را به شدت تحت تاثیر قرار می دهد. در نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک (شکل ٤–الف) شاهد ایجاد دو قله جدید در لبه بالا و پایین ناحیه نور مرئی، در اثر آلایش با منگنز و آهن هستیم. علاوه بر این افزودن ناخالصی منجر به جابجایی به سمت آبی قله های ناحیه فرابنفش می شود. همچنین مقدار تابع دی الکتریک استاتیک (شکل –الف٤) با افزودن اتمهای ناخالصی از ۲ به حدود ۳ تغییر کرده است. نمودار جذب (شکل ٤–ب) نیز نشان می دهد که در مکان همان دو قله ایجاد شده در نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک شاهد دو قله جذب هستیم. با توجه به اینکه قله‌های بخش موهومی تابع دی‌الکتریک انتقال اپتیکی از حالت‌های اشغال‌شده به حالت‌های خالی نواری مشخص می کنند، ایجاد این قله های جدید در اثر آلایش نیز به خاطر ایجاد نوارهای ناخالصی در ساختار نواری و در نتیجه گذارهای اپتیکی جدید است که در نمودار جذب و ضریب خاموشی به وضوح دیده می شوند (شکل ٤–ب و د). نکته دیگری که از نمودار جذب و ضریب خاموشی می توان نتیجه گرفت این است که نانو نوار نیترید آلومینیوم در محدوده مرئی برای نور عبوری عمودی شفاف است



شکل ٤: الف) بخش حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک ب) ضریب شکست ج)ضریب خاموشی د) ضریب جذب نانونوار نیترید آلومینیوم خالص و آلایش یافته در وضعیت لبه دور آنتی فرومغناطیس.

اما افزودن ناخالصیهای فلز واسط نانو نوار را در برابر عبور نور از حالت شفافیت خارج می کنند. همانطور که می دانیم در مواد اپتیکی مرسوم، ضریب شکست نور با افزایش فرکانس و انرژی فوتون افزایش می یابد که به عنوان پاشندگی بهنجار یا عادی شناخته می شود و در محدوده های جذب اپتیکی، شاهد عکس این رفتار هستیم؛ یعنی با افزایش فرکانس، ضریب شکست کاهش می یابد که به عنوان پاشندگی نابهنجار معروف است. در این ترکیبات نیز، افزودن ناخالصی فلزات واسط به نانو نوار، منجر به تغییر رفتار نانونوار خالص از حالت پاشندگی بهنجار به پاشندگی نابهنجار شده است. لذا می توان انتظار داشت این نمونه ها کاندیداهایی برای استفاده در حوزه انتقال اطلاعات توسط فیبر نوری، محاسبات اپتیکی، حسگرهای نوری با دقت بالا و ... باشند.

نتایج به دست آمده (جدول ۲)، همخوانی خوبی با نتایج تئوری و تجربی پیشین دارند [۸–۱۰]. به عنوان نمونه رفتار بخش حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک ، ضریب خاموشی و ضریب شکست در انرژی صفرمحاسبه شده برای نانو صفحه نیترید آلومینیوم در کار والدبگی(۲۰۱۳) با بسته محاسباتی Wien2k همخوانی خوبی دارند. باکالوا (۲۰۰٦) و گاسنو (۲۰۲۱) مقدار ضریب شکست فیلم نیترید آلومینیوم را برای انرژیهای بالا حدود ۲ گزارش کرده اند که با توجه به اینکه ما نانو نوار نیترید آلومینیوم را بررسی کرده ایم همخوانی نسبتا مناسب است.

نتیجه گیری

در این پژوهش تاثیر جایگذاری ٤ درصد ناخالصی فلز واسط

جدول ۲: انرژی گاف (eV)، تابت دی الکتریک استاتیک، مکان قله های جذبی در نمودار ضریب خاموشی و ضریب شکست نور زرد

نمونه	انرژی گاف (eV)		ثابت دی الکتریک استاتیک	مکان قله های جذب (eV)	ضریب شکست نور زرد
	اسپین پایین	اسپین بالا			
AlN	۲.۰٤۷۹	۲.۰٤۷۹	۱.۹۹	٤و۵.۹	۱.٤۹
FeAlN	۰.۵۹۳٦	۱.۸۲٦۵	۲.۸۵	۵.۹و ٦.۱	۱.٤۷
MnAlN	۰.۷۵٦٦	۰.۸۲٦۱	۲.۹۸	٦و۲.۸و۱.۳	۱.٤۷

(آهن، منگنز) بر خواص الکترونیکی و اپتیکی نانونوار دسته صندلی نیترید آلومینیوم به روش ابتدا به ساکن بررسی شده است. نتایج نشان می دهند که افزودن فلز واسط منجر به شکافتگی نوارهای تبهگن در ساختار نواری نانو نوار می شود. علاوه بر این تقارن موجود در کانالهای اسپین بالا و پایین به هم می خورد و گاف نواری اسپین بالا و پایین متفاوت می شود. در خصوص خواص اپتیکی، نتایج نشان می دهند که افزودن ناخالصی فلز واسط منجر به گذارهای اپتیکی جدید در ناحیه نور مرئی و در نتیجه تغییر رفتار پاشندگی نانو نوار از حالت بهنجار به حالت نابهنجار می شود.

مرجع‌ها

[۱] I. R. Yogi, N. K. Jaiswal; “First-Principle Study of Cl Functionalized Zigzag AlN Nanoribbons”; Integrated Ferroelectrics **205** (2020) 114-121.
[۲] M. Chegeni, R. Beiranvand, Sh. Valedbagi; “Generating Tunable Magnetism in AlN Nanoribbons Using Anion/Cation Vacancies: a First-Principle Prediction”; Braz. J. Phys. **47**(2) (2017) 137-144.
[۳] Chang-wen Zhang; “First-principles study on electronic structures and magnetic properties of AlN nanosheets and nanoribbons”; J. Apl. Phys. **111** (2012) 043702.
[٤] J. Zhang, Y. Zhang, J. M. Zhang, K. W. Xu; “The effect of the dangling Computational and Theoretical Chemistry **967** (2011) 113-119.
[۵] Timur Malin, Vladimir Mansurov, Yury Galitsyn, Konstantin Zhuravlev, Phys. Status Solidi C **12** (2015) 443–446.
[۶] M. Beyranvand, T. Movlarooy, F. Badieian Baghsiyahi; “ Magnetic phase stability of transition metals doped (4,4) AlN nanosheet”; J. Mag. Mag. Mat. **497** (2020) 166028.
[۷] M. Beyranvand, T. Movlarooy, F. Badieian Baghsiyahi; “ Ab initio study of electronic and magnetic properties of zigzag and armchair AlN nanosheets”; Phys. E **150** (2023) 115670.
[۸] Sh. Vadedbagi, A. Fathalian, S. MohammadElahi; “Electronic and optical properties of AlN nanosheet: An ab initio study”; Optics Communications **309** (2013) 123-157.
[۹] S. Bakalova, A. Szekeres, S. Grigorescu, E. **Axente**, G. Socol, I. N. Mihailesco; “Optical properties of aluminium nitride films obtaind by pulsed laser deposition: an ellipsometric study”; Appl. Phys. A, 85 (2006) 99-102.
[۱۰] A. Gasonoo, H. S. Ahn, S. Lim, J. H. Lee, Y. Choi; “Color glass by layered nitride films for building integrated photovoltaic (BIPV) system”; Crystals, **11** (2021) 281.

اثر آلایش نانو نوار هیدروژنه آلومینیوم نیترید با ناخالصی فلز واسط (آهن، منگنز) بر خواص الکترونیکی و اپتیکی به روش نظریه تابعی چگالی

فاطمه بدیعیان باغ سیاهی

دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه کوثر بجنورد، بجنورد

چکیده

در این پژوهش نانو نوار آلومینیوم نیترید با پهنای ٦ زنجیره آلومینیوم-نیترید، در حضور یک اتم ناخالصی فلز واسط (آهن، منگنز) مورد بررسی قرار گرفته است. سپس لبه های نانو نوار توسط هیدروژن اشباع شده است. مشاهده می شود که در اثر اشباع لبه های نانونوار با هیدروژن، گاف نواری افزایش می یابد و حالتهای لبه در ساختار نواری از بین می رود. با افزودن ناخالصیهای آهن و منگنز مشاهده می شود که گاف کاهش می یابد و حالتهای جدیدی در گاف نواری ایجاد می شود که باعث گذارهای اپتیکی جدیدی می شوند که در نمودار جذب اپتیکی نشان داده شده است.

واژه های کلیدی: *روش تابعی چگالی، نانو نوار، آلومینیوم نیترید، هیدروژن، حالتهای لبه، نمودار جذب*

Effect of doping hydrogenated aluminum nitride nanoribbons with Fe and Mn on electronic and optical properties: DFT calculation

Badieian Baghsiyahi, Fatemeh

Faculty of Engineering, Kosar University of Bojnord, Bojnord, Iran

Abstract

In this study, AlN nanoribbons with a width of 6 Al-N chains were investigated in the presence of an TM impurity atom (Fe,Mn). Then the edges of the nanoribbon are saturated with hydrogen. It is observed that due to it, the band gap increases and the edge states in the band structure disappear. By adding TM impurities, it is observed that the band gap decreases and new states are created in the band gap, which cause new optical transitions, which are shown in the optical absorption diagram.

***Keywords**: DFT, nanoribbon, AlN, edge state, absorption coefficient*

PACS No. *81,73*

مقدمه

پس از کشف گرافن، تحقیقات گسترده‌ای بر روی مواد یک بعدی و دو بعدی برای کاربرد در اسپینترونیک انجام شده است. ترکیبات نیمه‌هادی آلومینیوم نیترید از دیرباز به دلیل شکاف نواری بزرگشان در دیودهای ساطع نور آبی/فرابنفش، لیزرها و الکترونیک با دمای بالا مورد توجه قرار گرفته اند. پس از کشف گرافن، نانوساختارهای دو بعدی مبتنی بر آلومینیوم نیترید مانند لایه‌های نازک، نانوصفحات و نانونوارها به‌عنوان مواد گرافن‌مانند همچنان به‌عنوان نامزدهای مناسب برای نیم‌رساناهای مغناطیسی رقیق و اسپین‌ترونیک‌ها به دلیل پایداری ساختاری، حرارتی و شیمیایی در نظر گرفته می‌شوند. علاوه براین، آلومینیوم نیترید ماده‌ای با سمیت کم است که از لحاظ زیست محیطی نیز آن را مورد توجه قرار می‌دهد. مطالعه نانو ساختارهای آلومینیوم نیترید نیز توسط گروه‌های مختلف مورد توجه قرار گرفته است [٤-١]. با توجه به سنتز آلومینیوم نیترید دو بعدی در کارهای تجربی اخیر در کنار مطالعه نظری ساختار و پایداری نانو ساختارهای آلومینیوم نیترید، ، مطالعه بر روی این ترکیب همچنان جزو موضوعات به روز است [٥].

دراین مقاله سعی کرده‌ایم در ادامه پژوهش‌های قبلی بر روی نانوصفحات آلومینیوم نیترید، به بررسی تاثیر جاینشانی ۲ درصد عنصر فلز واسط (آهن، منگنز) در دو جایگاه متفاوت همراه با اشباع لبه های نانونوار با هیدروژن بپردازیم [٧-٦].

روش محاسباتی

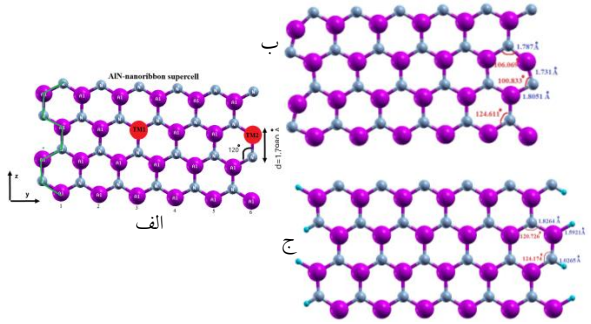
بهینه سازی نانو نوارها و محاسبات خواص الکترونی در چارچوب نظریه تابعی چگالی با استفاده از روش ترکیب خطی اربیتالهای اتمی برای حل تابع موج کوهن-شم در بسته نرم افزاری سیستا انجام شده است. برای محاسبه برهم کنش بین هسته و الکترونهای مغزی با الکترون های ظرفیت از تقریب

شبه پتانسیل ترولیر–مارتین، برهم کنش تبادلی بین الکترونهای ظرفیت به کمک شیب تعمیم یافته پردو–برک ارزنهوف (GGA-PBA) و آرایش الکترونهای ظرفیت با استفاده از پایه اربیتال های اتمی تابع قطبیده دوگانه زتا (DZP) در نظر گرفته شده است. آزمون همگرایی انرژی کل با استفاده از انرژی قطع ۶۰۰ریدبرگ انجام شده است و محاسبات تا رسیدن به ۰.۰۱ eV/Å ادامه یافته است. مش بندی فضای وارون به روش مونخارست–پک با مقادیر ۱×٤ ×٤ انجام شده است. در شکل ۱–الف ابر شبکه درنظر گرفته شده برای ساخت نانونوار قبل و بعد از بهینه شدن ساختار نشان داده شده است. دراین ابر شبکه ۲٤ اتم آلومینیوم و ۲٤ اتم نیتروژن حضور دارند. ابر شبکه با لبه دسته صندلی، در صفحه yz با گسترش در راستای z در نظر گرفته شده است. پهنای نانونوار همچنان که مشاهده می‌شود به اندازه ٦ زنجیره دسته صندلی آلومینیوم –نیتروژن است. طول پیوندها ۱/۷۹۸۰ Å و زوایای داخلی ۱۲۰° هستند. جهت بهبود خواص الکترونیکی و اپتیکی نانونوار، اثر جاینشانی اتمهای ناخالصی فلز واسط آهن و منگنز به جای آلومینیوم، در دو جایگاه یکی در وسط نانو نوار و دیگری در لبه نانونوار (شکل ۱–الف) بررسی شده است. علاوه براین تاثیر اشباع لبه های نانو نوار با هیدروژن نیز مورد بررسی قرار گرفته است.

نتایج

اثر هیدروژن بر نانو نوار آلومینیوم نیترید خالص

همانطور که در شکل ۱–ب مشاهده می‌شود بعد از بهینه شدن ساختار، در حالی که نانونوار همچنان مسطح است ولی طول پیوندها و زوایای حلقه‌های شش گوشی واقع در لبه‌های نانونوار تغییر کرده است که روی شکل مشخص شده است [٤]. جهت کاهش تغییر شکل نانو نوار در لبه ها، اتم هیدروژن در محل پیوندهای شکسته شده قرار داده شد. بعد از بهینه کردن ساختاراشباع شده با هیدروژن، همانطور که در شکل ۱–ج مشاهده می شود اعوجاج در لبه های نانو نوار بسیار کاهش می یابد. چگالی حالتهای نانو نوار اشباع شده با هیدروژن و بدون هیدروژن در شکل ۲–الف و ب نمایش داده شده است.

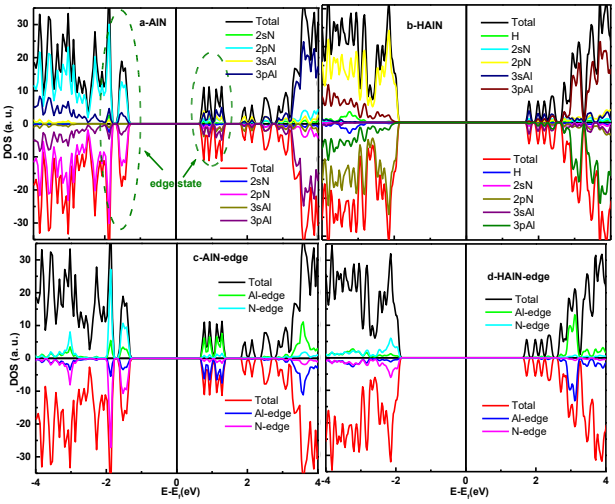


شکل ۱: الف) ابر سلول انتخابی نانو نوار آلومینیوم نیترید و جایگاههای افزودن ناخالصی ب) ابر سلول آلومینیوم نیترید بهینه شده ج) ابر سلول آلومینیوم نیترید اشباع شده با هیدروژن بهینه شده

همانطور که در شکل ۲–ج مشخص شده است، قله های موجود در بازه۲– تا ۲ الکترون ولت در نانو نوار خالص بدون هیدروژن (شکل ۲–الف) متعلق به اتمهای واقع در لبه نانو نوار هستند که بعد از اشباع پیوندهای شکسته شده این اتمها با هیدروژن، شاهد حذف این قله ها در شکل ۲–ب هستیم که منجربه افزایش اندازه گاف می شود (جدول ۱). نکته قابل توجه دیگر تقارن چگالی حالتهای اسپینی بالا و پایین برای هر دو نمونه است که نشان از عدم مغناطیسی بودن نانونوار خالص و اشباع شده دارد.

تاثیر آلایش نانو نوار با فلزات واسط

شکل ۳ و ٤ تاثیر جاینشانی یک اتم آلومینیوم با آهن و منگنز را در دو موقعیت لبه نانو نوار و وسط نانو نوار در حضور و عدم حضور اتمهای هیدروژن نشان می دهند. در این چهار نمونه هم



شکل۲: چگالی حالتهای نانو نوارآلومینیوم نیترید (مقادیر مثبت برای اسپین بالا و مقادیر منفی برای اسپین پایین) الف)بدون اشباع ب) اشباع شده با هیدروژن، سهم چگالی حالتهای اتمهای آلومینیوم و نیتروژن واقع در لبه نانو نوار در چگالی حالتهای نانونوار ج) بدون اشباع د) اشباع شده.

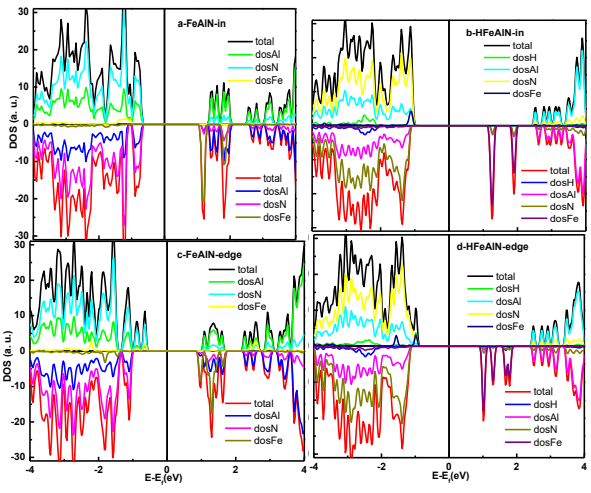
مشابه شکل ۲، اشباع لبه ها با هیدروژن منجر به حذف حالتهای مربوط به اتمهای لبه و افزایش گاف می شود.

همانطور که چگالی حالتهای جزیی در شکل ۳ و ٤ نشان می دهد جاینشانی اتم ناخالصی فلز واسط به جای آلومینیوم باعث کاهش گاف در اسپین پایین برای نمونه آهن و کاهش گاف در اسپین بالا برای نمونه منگنز می شود (جدول ۱).عدم تقارن ایجاد شده در چگالی حالتهای اسپسن بالا و پایین نشان می دهد که نانونوار، مغناطیسی شده است. در این وضعیت نیز همانطور که در شکل ۳ و ٤ مشاهده می شود اشباع لبه های نانو نوار با هیدروژن منجر به حذف حالتهای مربوط به اتمهای آلومینیوم و نیتروژن واقع در لبه نانو نوار شده است. علی رغم این، حالتهای جدیدی که در اثر آلایش با اتم فلز واسط ایجاد شده اند باعث تغییر گاف نواری شده اند.

جهت بررسی پایداری ساختار اشباع شده، انرژی تشکیل نمونه ها نیز طبق رابطه ۱ محاسبه شده اند که نتایج حاصل در جدول ۱ نشان داده شده اند.

$$E_{formation} = (E_{tot} - \sum_i n_i \mu_i)/N \quad (۱)$$

در این رابطه E_{tot} انرژی کل نانو نوار اشباع شده است، n و μ معرف تعداد و انرژی شیمیایی هر یک از عناصر تشکیل دهنده نمونه و N تعداد کل اتمهای موجود در نمونه است. منفی بودن انرژی تشکیل نمونه ها، نشان دهنده پایداری بیشتر نمونه های



شکل۳: چگالی حالتهای نانو نوارآلومینیوم نیترید آلایش یافته (مقادیر مثبت برای اسپین بالا و مقادیر منفی برای اسپین پایین) الف) با آهن در وسط بدون اشباع ب) آهن در وسط و اشباع شده با هیدروژن ج) آهن در لبه بدون اشباع د) آهن در لبه و اشباع شده با هیدروژن.

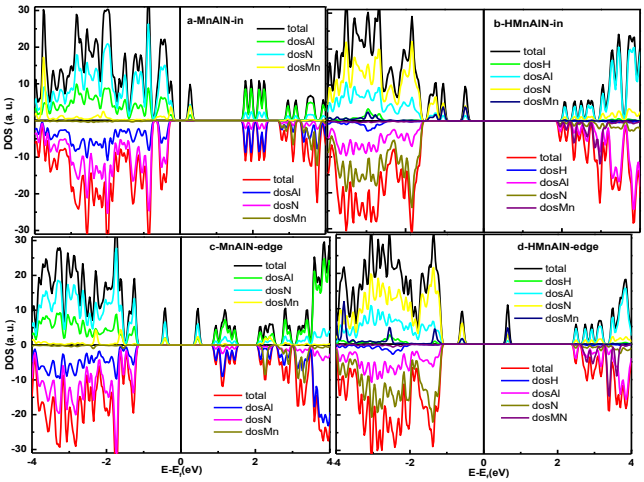
جدول۱: انرژی گاف و انرژی تشکیل نانو نوارها

نمونه	انرژی گاف (eV)				انرژی تشکیل(eV) نانونوار هیدروژنه
	خالص		هیدروژنه		
	اسپین بالا	اسپین پایین	اسپین بالا	اسپین پایین	
AlN	۲/۱۲۲۳	۲/۱۲۲۳	۳/٦۳٥	۳/٦۳٥	-٥/۲٦۰۳
AlN+Fe(in)	۲/۱٤۱	۱/۸۸٦	۳/٥٥	۲/۳٦٤	-٥/۲٤٤۲
AlN+Fe(out)	۱/۷۱۲	۲/۰۲٤	۳/٤۱۲	۲/۱۹۱	-٥/۲٤۳٥
AlN+Mn(in)	۰/٤۹۳	۲/۱۱٥	۰/٥۲۱	۳/٥٥٦	-٥/۱۹۳۲
AlN+Mn(out)	۰/۸٤۹	۲/۱٤۱	۱/۱۸۹۱	۳/٦۳٥	-٥/۲۰۰٥

اشباع شده با هیدروژن نسبت به نمونه های بدون هیدروژن است. با توجه به اینکه نانو نوارهای آلایش یافته با منگنز برای حالت اسپین بالا، کاهش مشهودی در اندازه گاف نشان می دهند در ادامه خواص اپتیکی این دو نمونه در مقایسه با نانو نوار خالص بررسی می گردد.

خواص اپتیکی

برای بررسی خواص اپتیکی از روش تئوری تابعی چگالی وابسته به زمان (TD-DFT) بر مبنای تئوری اغتشاش مرتبه اول استفاده می شود. محاسبات برای نوری با قطبش خطی در راستای z که عمود بر نانو نوار می تابد، انجام شده است. در ابتدا قسمت موهومی تابع دی الکتریک محاسبه می شود، سپس به کمک تبدیلات کرامرز-کرونیگ و روابط ۲و۳، سایرپارامترهای اپتیکی به دست می آیند [٤و ٥]:



شکل٤ چگالی حالتهای نانو نوارآلومینیوم نیترید آلایش یافته (مقادیر مثبت برای اسپین بالا و مقادیر منفی برای اسپین پایین) الف) با منگنز در وسط بدون اشباع ب) منگنز در وسط و اشباع شده با هیدروژن ج) منگنز در لبه بدون اشباع د) منگنز در لبه و اشباع شده با هیدروژن.

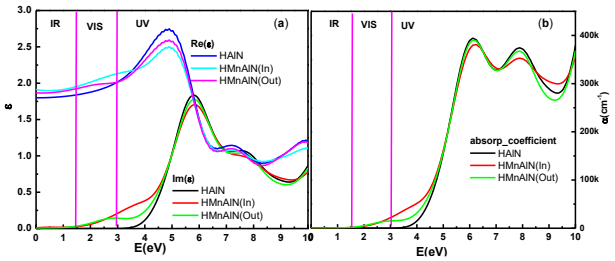
$$\varepsilon = \varepsilon_{Re} + i\,\varepsilon_{Im} \qquad (۲)$$

در رابطه بالا ε تابع دی الکتریک مختلط است و ε_{Re} و ε_{Im} معرف قسمت حقیقی و موهومی آن هستند. ضریب جذب با رابطه (۳) به قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مربوط می شود [۸].

$$I(\omega) = \sqrt{2}\,\frac{\omega}{c}\left[(\varepsilon_{Re}(\omega)^2 + \varepsilon_{Im}(\omega)^2)^{1/2} - \varepsilon_{Re}(\omega)\right]^{1/2} \qquad (۳)$$

شکل۵–الف بخش موهومی و حقیقی تابع دی الکتریک و شکل ۵–ب ضریب جذب نانو نوار خالص و آلایش یافته با منگنز اشباع شده را نشان می دهد. همانطور که مشاهده می شود افزودن منگنز، رفتار نانونوار به ویژه در محدوده مریی را به شدت تحت تاثیر قرار می دهد. در نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک (شکل ۵–الف) شاهد ایجاد یک قله جدید در لبه بالایی ناحیه نور مریی، در اثر آلایش با منگنز هستیم که برای ناخالصی منگنز در لبه نانو نوار این قله در محدوده ۲/۵۹eV واقع شده است و برای نمونه حاوی منگنز در وسط نانونوار در ۳/۵۳ eV یک پیک پهن را شاهدیم. علاوه بر این، افزودن ناخالصی منجر به جابجایی به سمت آبی قله های ناحیه فرابنفش می شود. همچنین مقدار تابع دی الکتریک استاتیک (شکل ۵–الف) با افزودن اتمهای ناخالصی، حدود ۰/۲ افزایش می یابد. نمودار جذب (شکل ۵–ب) با نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک کاملا همخوانی دارد و مکان قله های حذب با قله های موجود در بخش موهومی تابع دی الکتریک یکسان است. با توجه به اینکه قله‌های بخش موهومی تابع دی‌الکتریک انتقال اپتیکی از حالت‌های اشغال‌شده نوار ظرفیت به حالت‌های خالی نوار رسانش را مشخص می کنند، ایجاد این قله های جدید در اثر آلایش به خاطر ایجاد نوارهای ناخالصی در ساختار نواری و در نتیجه گذارهای اپتیکی جدید است که در نمودار جذب به وضوح دیده می شوند. نکته دیگری که از نمودار جذب می توان نتیجه گرفت این است که نانو نوار آلومینیوم نیترید در محدوده مریی برای نور عبوری عمودی شفاف است اما افزودن ناخالصیهای فلز واسط، نانو نوار را از حالت شفافیت خارج می کنند. نتایج به دست آمده همخوانی خوبی با نتایج تئوری و تجربی پیشین دارند [۹–۱۱].

به عنوان نمونه رفتار بخش حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک ، ضریب خاموشی و ضریب شکست در انرژی صفرمحاسبه



شکل۵:الف)قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک ب)ضریب جذب نانونوارها.

شده برای نانو صفحه آلومینیوم نیترید در کار والدبگی(۲۰۱۳) با بسته محاسباتی Wien2k همخوانی خوبی دارند. باکالوا (۲۰۰۶) و گاسنو (۲۰۲۱) مقدار ضریب شکست فیلم آلومینیوم نیترید را برای انرژیهای بالا حدود ۲ گزارش کرده اند که با توجه به اینکه ما نانو نوار آلومینیوم نیترید را بررسی کرده ایم همخوانی نسبتا مناسب است.

نتیجه گیری

در این پژوهش تاثیر جایگذاری یک اتم فلز واسط (آهن، منگنز) به جای آلومینیوم بر خواص الکترونیکی و اپتیکی نانونوار دسته صندلی آلومینیوم نیترید اشباع شده با هیدروژن به روش ابتدا به ساکن بررسی شده است. نتایج نشان می دهند که افزودن فلز واسط منجر به شکافتگی نوارهای تبهگن در ساختار نواری نانو نوار می شود. علاوه بر این تقارن موجود در کانالهای اسپین بالا و پایین به هم می خورد و گاف نواری اسپین بالا و پایین متفاوت می شود. در خصوص خواص اپتیکی، نتایج نشان می دهند که افزودن ناخالصی فلز واسط منجر به گذارهای اپتیکی جدید در ناحیه نور مریی می شود.

مرجع‌ها

[۱] R. Yogi, N. K. Jaiswal "First-Principal Study of Cl Functionalized Zigzag AlN Nanoribbons"; Integrated Ferroelectrics **205** (2020) 114-121.
[۲] M. Chegeni, R. Beiranvand, Sh. Valedbagi "Generating Tunable Magnetism in AlN Nanoribbons Using Anion/Cation Vacancies: a First-Principle Prediction" Braz. J. Phys. (2017) DOI 10.1007/s13538-016-0480-x
[۳] Chang-wen Zhang "First-principles study on electronic structures and magnetic properties of AlN nanosheets and nanoribbons" J. Apll. Phys. **111** (2012) 043702.
[۴] J. Zhang, Y. Zhang, J. M. Zhang, K. W. Xu "The effect of the dangling bond on the electronic and magnetic properties of AlN nanoribbon" Computational and Theoretical Chemistry **967** (2011) 113-119.
[۵] Timur Malin, Vladimir Mansurov, Yury Galitsyn, Konstantin Zhuravlev, Phys. Status Solidi C 12 (2015) 443–446.
[۶] M. Beyranvand, T. Movlarooy, F. Badieian Baghsiyahi "Magnetic phase stability of transition metals doped (4,4) AlN nanosheet" J. Mag. Mag. Mat. 497 (2020) 166028.
[۷] M. Beyranvand, T. Movlarooy, F. Badieian Baghsiyahi "Ab ignition study of electronic and magnetic properties of zigzag and armchair AlN nanosheets" Phys. E 150 (2023) 115670.
[۸] https://en.wikipedia.org/wiki/Refractive_index#cite_note-DresselhausMITCourse
[۹] Sh. Vadedbagi, A. Fathalian, S. MohammadElahi, "Electronic and optical properties of AlN nanosheet:An ab initio study", Optics Communications 309 (2013) 123-157.
[۱۰] S. Bakalova, A. Szekeres, S. Grigorescu, E. Axente, G. Socol, I. N. Mihailesco, "Optical properties of aluminium nitride films obtaind by pulsed laser deposition: an ellipsometric study", Appl. Phys. A, 85 (2006) 99-102.
[۱۱] A. Gasonoo, H. S. Ahn, S. Lim, J. H. Lee, Y. Choi, "Color glass by layered nitride films for building integrated photovoltaic (BIPV) system", Crystals, 11 (2021) 281.

مطالعه ابتدا به ساکن ویژگی‌های اپتیکی پروسکایت‌های دوگانه آلی–معدنی دارای تهی‌جای منظم: $(K \text{ or } NH_4)_2TiCl_6$

مختاری، علی

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد

چکیده

ویژگی‌های اپتیکی پروسکایت‌های دوگانه آلی–معدنی دارای تهی‌جای منظم X_2TiCl_6 $(X= K \text{ or } NH_4)$ را با استفاده از رهیافت ابتدا به ساکن شبیه‌سازی کرده‌ایم. این ترکیب‌ها به دلیل پایداری بالا و پتانسیل آنها برای انرژی تجدیدپذیر، محبوبیت زیادی پیدا کرده‌اند. تحقیقات ما روی پروسکایت‌های K_2TiCl_6 و $(NH_4)_2TiCl_6$ به ترتیب شکاف‌های نواری مستقیم حدود ۲/۲۱ و ۲/۱۱ الکترون‌ولت را نشان می‌دهد. پایداری بالا، شکاف نواری مناسب و جذب نور عالی از ویژگی‌های این مواد است که انتظار می‌رود برای استفاده در سلول‌های خورشیدی ایده‌آل باشند. ترکیب‌های مورد بررسی در محدوده نو مرئی دارای ضرایب جذب بالایی در حدود $10^5 cm^{-1}$ هستند. مطالعه ما می‌تواند راه را برای شناسایی مواد جاذب نور پایدار، سازگار با محیط زیست و با راندمان بالا برای استفاده در دستگاه‌های اپتوالکترونیکی و فتوولتائیک هموار کند.

واژه های کلیدی: *پروسکایت‌های دوگانه دارای تهی‌جای منظم، ویژگی‌های اپتیکی، دستگاه‌های فتوولتائیک.*

First-principles study on the optical properties of organic-inorganic vacancy ordered double perovskites: $(K \text{ or } NH_4)_2TiCl_6$

Mokhtari, Ali
Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Shahrekord University, Shahrekord

Abstract

We have simulated the optical properties of organic-inorganic vacancy-ordered halide double perovskites X_2TiCl_6 $(X= K \text{ or } NH_4)$ using ab-initio approach. These compounds are becoming popular due to their exceptional stability and potential for renewable energy. Our research on the K_2TiCl_6 and $(NH_4)_2TiCl_6$ perovskites show direct band gaps of about 2.21 and 2.11 eV, respectively. High stability, appropriate band gap, and excellent light absorption are the characteristics of these materials, which are expected to be ideal for use in solar cells. The investigated compounds have high absorption coefficients of about 10^5 cm^{-1} in the visible light region. Our study could pave the way for identifying stable, eco-friendly, and high-efficiency light absorber materials for use in optoelectronic and photovoltaic devices.

***Keywords**: Vacancy-ordered double perovskites, optical properties, and Photovoltaic devices.*
PACS No:70

مقدمه

در چند دهه اخیر، افزایش تقاضای انرژی و کمبود منابع در سطح جهان، محققان را بر آن داشته است تا منابع جدید انرژی را برای رفع چالش‌های انرژی کشف کنند. انرژی خورشیدی به دلیل وجود ترکیب‌های با کارایی بالا که در دستگاه‌های فتوولتائیک استفاده می‌شوند، در صدر قرار دارد. انرژی خورشیدی نوعی انرژی سبز است و به طور گسترده در طول سال در دسترس است. بنابراین، انرژی خورشیدی جایگزین طولانی مدت، پاک و ارزان نسبت به برق تولید شده از نفت است [۱].

پروسکایت‌ها به دلیل جذب نوری و بازده بالا، تراکم کم حامل‌ها، تحرک‌پذیری و طول عمر بالای حامل‌های بار، طول نسبتاً زیاد انتشار الکترون–حفره، جرم مؤثر کم حامل‌ها و به ویژه گاف‌های نواری مستقیم و قابل تنظیم آن‌ها، به لحاظ کاربرد در ادوات

الکترونیکی مورد توجه ویژه قرار گرفته‌اند. به‌عنوان مثال قابلیت تنظیم گاف می‌تواند برای سلول‌های خورشیدی پروسکایتی چند منظوره یا سلول‌های خورشیدی ترکیبی تک اتصالی باعث بازدهی بالاتر ضریب تبدیل انرژی شود.

ترکیب K_2TiCl_6 حداکثر جذب نور در ناحیه فرابنفش تا مرئی طیف خورشید را دارد. ماهیت غیرسمی، پایداری ساختاری و ترمودینامیکی بالا، تقاضای آن را برای سلول‌های خورشیدی و سایر کاربردهای اپتوالکترونیکی افزایش می‌دهد [۲]. پروسکایت‌های بدون سرب هالیدی بر مشکلات موجود در پروسکایت‌های حاوی سرب، که یک عنصر سمی است غلبه می‌کنند. پروسکایت‌های هالیدی آلی–معدنی نیز با قابلیت هزینه کم تولید و بازده تبدیل بالا برای کاربردهای فتوولتائیک توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند. در کار حاضر به مطالعه ویژگی‌های فیزیکی دسته‌ای از ترکیبات آلی–معدنی پروسکایتی دوگانه دارای تهی جای منظم برپایه‌ی تیتانیوم (X_2TiCl_6 (X= K^+ or NH_4^+) (بطور مختصر KTC و NHTC) پرداخته‌ایم. با محاسبات ابتدا به ساکن و بر پایه نظریه تابعی چگالی، ابتدا بهینه‌سازی پارامترها ساختاری را انجام داده‌ایم و سپس ویژه‌گی‌های اپتیکی را مورد بررسی و تجزیه تحلیل قرار دادیم.

روش‌های محاسباتی

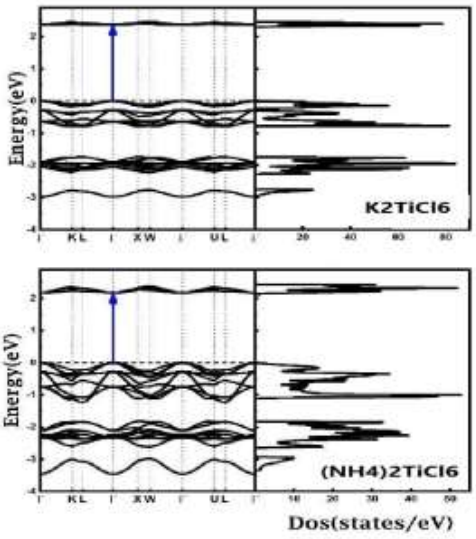
محاسبات بر مبنای اصول اولیه در رهیافت نظریه تابعی چگالی توسط بسته محاسباتی کوانتوم–اسپرسو (QE) انجام شده است [۳]. از شبه‌پتانسیل‌های فوق هموار [٤] و تقریب شیب تعمیم یافته [٥] برای محاسبه سهم برهمکنش‌های الکترون–یون و تبادلی–همبستگی استفاده شده است. طرح مونخورست و پک [٦] برای مش‌بندی اولین ناحیه بریلوین برای مجموعه معینی از نقاط **k** به صورت ٤×٤×٤ بهینه شده است. همچنین آستانه همگرایی انرژی با دقتی برابر با 10^{-8} eV تخمین زده شده است و انرژی قطع بسط تابع موج و چگالی الکترونی برحسب امواج تخت برای تمام ساختارها به ترتیب تا ٥٠ و ٢٥٠ ریدبرگ بهینه شده‌اند. مکان اتم‌ها با انجام فرآیند واهلش تا رسیدن به دقت 10^{-5} بهینه‌سازی شده است. ویژگی‌های حالت برانگیخته با استفاده از نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان (روش توربو–لنکزوس که به عنوان یک پودمان در بسته QE طراحی شده است) محاسبه شده است. برای به دست آوردن یک طیف همگرا، تعداد تکرارها در چرخه بازگشتی لنکزوس را بهینه کردیم و ضرایب لنکزوس با روش برون‌یابی ثابت تا تعداد ١٠٠٠٠ برون یابی شده است. با استفاده از پارامترهای بهینه در این قسمت، ویژگی‌های ساختاری و اپتیکی دو ترکیب شبیه‌سازی شده است.

نتایج و بحث

در ابتدا ویژگی‌های ساختاری *پروسکایت‌های دوگانه آلی–معدنی KTC و NHTC* که معمولاً در فاز مکعبی (Fm3m) متبلور می‌شوند، را بررسی کردیم. ساختار هندسی آنها شامل هشت‌وجهی‌های $TiCl_6$ با کاتیون‌های *K* یا NH_4 است که فضاهای بین آنها را اشغال می‌کنند. اتم‌های Ti توسط شش یون هالید احاطه شده‌اند. برای اطمینان از پایداری ساختاری پروسکایت‌های مورد بررسی، انرژی همدوسی، ضریب تحمل گلدشمیت (τ_F) و ضریب هشت‌وجهی (μ) را برای هر دو پروسکایت محاسبه کردیم. ضریب تحمل مستقیماً به نسبت شعاع کاتیون جایگاه *K* هالید و یون Ti بستگی دارد. برای پروسکایت‌های هالیدی، ضریب تحمل باید بین ٠/٨٥ تا ١/١١ باشد و ضریب هشت‌وجهی معمولاً بین ٠/٤١٤ تا ٠/٥٩٢ است. با این حال، به صورت تجربی نشان داده شده است که یک پروسکایت هالیدی با ضریب هشت‌وجهی کمتر از ٠/٤١٤ را می‌توان سنتز کرد [٧]. مقدارهای انرژی همدوسی (٣/٢١- و ٣/٤٢- الکترون ولت بر اتم)، ضریب تحمل گلدشمیت (١/٠٨ و ١/٠٣) و ضریب هشت‌وجهی(٠/٣١ ٠/٣٣) را به ترتیب برای *KTC* و *NHTC* بدست آورده‌ایم.

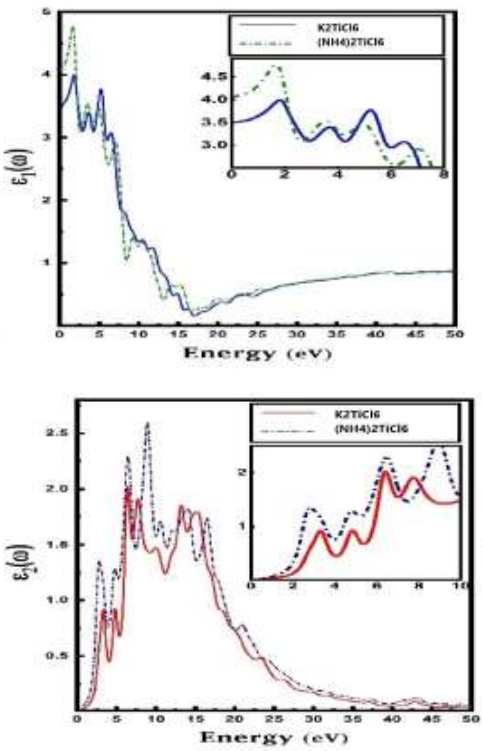
ساختارهای نواری ترکیب‌ها، اطلاعات مهمی را ارائه می‌دهند که برای درک و پیش‌بینی عملکرد آنها در کاربردهای مختلف، به ویژه برای سلول‌های خورشیدی، ضروری است. طبق مطالعه ما، هر دو ترکیب در نقطه Γ یک گاف نواری مستقیم از خود نشان می‌دهند (شکل ١). پهنای مجموعه نوارهای ظرفیت در نزدیکی سطح فرمی (که روی صفر تنظیم شده) برای ترکیب *NHTC* نسبت به *KTC* بیشتر است، که نشان از همپوشانی بیشتر اربیتالهای ظرفیت در این

ناحیه دارد و با مقادیر انرژی همدوسی نیز تطابق دارد.



شکل ۱: ساختار نواری محاسبه‌شده در امتداد جهت‌های با تقارن بالا در منطقه اول بریلوئن و چگالی حالت‌های کل (بالای نوار ظرفیت روی صفر تنظیم شده است).

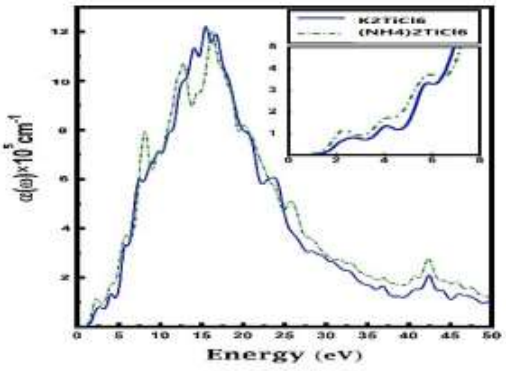
بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک (شکل ۲)، با استفاده از پارامترهای بهینه‌شده‌ی Itermax0=۲۰۰۰ و q=۰/۰۰۳ محاسبه شده‌اند. (اولین کمیت، تعداد چرخه‌های روش لنگسوس را تعیین می‌کند و در حین محاسبات آنقدر این کمیت را افزایش می‌دهیم تا طیف تابع دی‌الکتریک همگرا شود. همچنین به دلیل آنکه به محاسبات در تقریب حد طول موج بلند نیازمندیم، ما باید حداقل ممکن را برای $|q|$ انتخاب کنیم. بنابراین آنقدر این کمیت را کاهش می‌دهیم تا همگرایی حاصل شود.) بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک که رفتار قطبش نور را توصیف می‌کند، با بخش موهومی که ویژگی‌های جذب بلورها را تعیین می‌کند، طبق روابط اپتیکی همبستگی مناسبی دارند. طبق مدل پن [۸] ثابت دی‌الکتریک استاتیک ($\varepsilon_1(0)$) به تغییر گاف انرژی وابسته است ($\varepsilon_1(0)\approx 1+(\hbar\omega_p/E_{gap})^2$). در این رابطه ω_p و $\hbar$ به ترتیب بسامد رزونانس پلاسما و ثابت پلانک کاهش یافته است. ثابت دی‌الکتریک استاتیک بالا برای جذب مؤثر نور بسیار مهم است و نشان‌دهنده قابلیت‌های بهتر پذیرش الکترون است. در مقدار بیشینه بخش حقیقی که بسامد رزونانس کاملاً عمود بر میدان الکتریکی است، نور فرودی قطبیده می‌شود و مقدار آن با تغییر کاتیون از K به $NH4$ افزایش می‌یابد. پس از بیشینه‌های رزونانسی، $\varepsilon_1(\omega)$ روند کاهشی دارد اما مقدار آن برای هر دو ترکیب مثبت باقی می‌ماند که نشان دهنده رفتار نیمه‌رسانای مواد است. رفتار مجانبی این پارامتر در انرژی‌های بالا به یک عدد ثابت نزدیک می‌شود که در تطابق با مدل کلاسیک درود است. بدیهی است که پارامتر $\varepsilon_2(\omega)$برای هر دو ترکیب چندین بیشینه در محدوده۱۰-۰ الکترون‌ولت نشان می‌دهد و به دنبال آن یک روند نزولی دارد. علاوه بر این بیشینه‌های اصلی تقریباً در ٤/٥٢، ٧/٢٣، و ١٠/١ الکترون‌ولت هستند و این نشان می‌دهد که ترکیب‌های مورد بررسی ظرفیت جذب بالایی در محدوده طیف مرئی و فرابنفش دارند. مقادیر آستانه برای این تابع و طیف ضریب جذب (شکل ۳) به عنوان لبه جذب پایه شناخته می‌شوند و تحریک لبه جذب منجر به گذارهای بین نواری می‌شود.



شکل ۲: رفتار سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک بر حسب انرژی فرودی

اندازه‌گیری جذب فوتون‌های فرودی بر روی سطح یک جامد به

پیش‌بینی پتانسیل آن برای کاربردهای اپتوالکترونیکی کمک می‌کند. رفتار پارامترهای جذب نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی برای هر دو ترکیب در شکل ۳ رسم شده است و لبه‌های جذب آنها به ترتیب برای *KTC* و *NHTC* در ۲/٦ و ۲/٤ الکترون‌ولت قرار دارند. این مقادیر به طور معقولی با شکاف‌های نواری مربوطه همسو هستند و کمی بزرگتر از قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک هستند. در محدوده انرژی۱۷-۰ الکترون‌ولت ، چندین بیشینه جذب مشاهده می‌شود و روند صعودی را نشان می‌دهند. این رفتار را می‌توان به گذارهای الکترونیکی بین حالت‌ها نسبت داد و چنین افزایش سریعی در ضریب جذب، مشخصه ای است که معمولاً در نیمه‌هادی‌ها یافت می‌شود.



شکل ۳: رفتار ضریب جذب نسبت به انرژی فرودی

شدت جذب در محدوده مرئی تقریباً از مرتبه ۱۰۵ است که با مقادیر بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک مطابقت دارد. این نشان می‌دهد که مواد مورد مطالعه به ویژه برای سلول‌های خورشیدی و دستگاه‌های اپتوالکترونیکی قابل توجه هستند. به طور کلی، ترکیبهای مورد مطالعه ما در ناحیه فرابنفش ضریب جذب بالایی دارند که آنها را به عنوان لایه‌های جاذب برای کاربردهای صنعتی در این ناحیه مناسب می‌کند. بالاتر از این مقادیر، ضرایب جذب کاهش می‌یابند و پس از کمی نوسان به مقدار مجانبی خود می‌رسند. برای اینکه یک جاذب نور خورشید، حداقل هشتاد درصد انرژی تابشی را در عمق کمتر از یک میکرومتر جذب کند، ضریب جذب ماده باید بیشتر از $۱\times۱۰^{٤}\ cm^{-۱}$ باشد، که برای ترکیبهای حاضر این شرط به خوبی برقرار است. ضمنا مقادیر مناسب پارامتر جذب برای ترکیبها در ناحیه مادون قرمز، مرئی و فرابنفش نشان دهنده کاربرد بالقوه این ترکیبها در دستگاههای اپتوالکترونیک است.

نتیجه‌گیری

ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و نوری پروسکایت‌های دوگانه آلی-معدنی دارای تهی‌جای منظم X_2TiCl_6 (X= K or NH_4) توسط رهیافت شبه‌پتانسیل در چارچوب نظریه تابعی چگالی بررسی و تجزیه و تحلیل شده است. پایداری فاز مکعبی این ترکیب‌ها با محاسبه انرژی همدوسی و قرار گرفتن ضریب تحمل در محدوده مشخص شده (۰/۸۵-۱/۱۱) تضمین می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که همه ترکیب‌ها دارای ویژگی‌های الکترونی و نوری بهینه‌ای هستند که می‌توانند به عنوان مواد جاذب نور مرئی برای کاربردهای فتوولتائیک مورد استفاده قرار گیرند. شدت جذب برای هر دو ترکیب در محدوده مرئی تقریباً از مرتبه ۱۰۵ است. نتایج کار ما انگیزه‌ای برای تحقیقات بیشتر برای شناسایی مواد جاذب نور پایدار، سازگار با محیط زیست و با راندمان بالا به عنوان جایگزینی برای ترکیب‌های مبتنی بر سرب در دستگاه‌های فتوولتائیک، به ویژه سلول‌های خورشیدی یا سایر دستگاه‌های اپتوالکترونیکی ایجاد می‌کند.

مرجع‌ها

[۱] A. E. Maughan, et. al.; "Defect tolerance to intolerance in the vacancy-ordered doubleperovskite semiconductors Cs2SnI6 and Cs2TeI6", J. Am. Chem. Soc. **138** (2016) 8453–8464.
[۲] T. Ghrib, et. al.; "A new lead free double perovskites $K_2Ti(Cl/Br)_6$; a promising materials foroptoelectronic and transport properties; probed by DFT", Mater. Chem. and Phys. **264** (2021) 124435.
[۳] P. Giannozzi, et al., J. Chem. Phys. **152** (2020) 154105.
[۴] B. Walker, and R. Gebauer, J. Chem. Phys. **127** (2007) 164106.
[۵] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 3865-3868.
[۶] H. J. Monkhorst, and J. D. Pack, Phys. Rev. B **13** (1976) 5188.
[۷] C. Li et. all. ; "Formability of ABX_3 (X = F, Cl, Br, I) halide perovskites', Acta Crys. Sect. B: Struct. Sci. **64** (2008) 702-707.
[۸] D. R. Penn, "Wave-number-Dependent dielectric function of semiconductors." Phys. Rev.**128** (1962) 2093.

شبیه‌سازی سلول‌های خورشیدی پروسکایتی آلی–غیرآلی آلاییده

باقری، مسیح؛ روحانی اصفهانی، حورا سادات؛ صاحب‌سرا، پیمان*

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

در این پژوهش، شبیه‌سازی عددی سلول خورشیدی پروسکایتی تلفیقی آلی–غیرآلی آلایش یافته مبتنی بر لایه جاذب $FASn_xPb_{1-x}I_3$ با استفاده از نرم‌افزار کامسول انجام شد. هدف اصلی مطالعه، بررسی تأثیر آلایش قلع و ضخامت لایه‌های مختلف سلول بر عملکرد آن و دستیابی به بیشترین بازده تبدیل توان بود. در شرایط بهینه، بازده تبدیل توان به مقدار ۲۲٫۴٪ و ضریب پرشدگی به ۸۲٪ رسید که درغلظت آلایش قلع نزدیک به ۰٫۶۳ حاصل شد. یافته‌های این پژوهش نشان می‌دهد که بهینه‌سازی همزمان متغیرهای ساختاری و ترکیبی می‌تواند به‌طور مؤثری عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایتی مبتنی بر قلع–سرب را بهبود بخشد و بدین ترتیب راهکاری مناسب برای طراحی و بهینه‌سازی این دسته از سلول‌های خورشیدی ارائه دهد.

واژه های کلیدی: *سلول خورشیدی پروسکایتی، آلایش، شبیه‌سازی عددی، بازده تبدیل توان.*

Simulation of organic-inorganic doped perovskite solar cells

Bagheri, Masih; Rouhani Isfahani, Houra Sadat; Sahebsara, Peyman*

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

In this study, a numerical simulation of an organic–inorganic hybrid doped perovskite solar cell based on absorber layer $FASn_xPb_{1-x}I_3$ was performed using COMSOL Multiphysics. The main objective was to achieve the maximum power conversion efficiency by investigating the effect of Sn doping and the thickness of layers. Under optimized conditions, a power conversion efficiency of 22.4 % and a fill factor of 82% were obtained at a Sn doping concentration close to 0.63 The results indicate that simultaneous optimization of structural and compositional parameters, which can significantly enhance the performance of Sn–Pb-based perovskite solar cells, providing an effective strategy for the design and optimization of this class of photovoltaic devices.

***Keywords**: perovskite solar cell, doping, numerical simulation, power conversion efficiency.*

PACS No. 78, 89

مقدمه

با افزایش تقاضای جهانی برای انرژی و نگرانی‌های فزاینده درباره تغییرات اقلیمی، توسعه فناوری‌های انرژی تجدیدپذیر به یکی از اولویت‌های اصلی پژوهشگران تبدیل شده است [۱]. در این میان، سلول‌های خورشیدی به عنوان یک فناوری امیدبخش در تبدیل مستقیم انرژی خورشیدی به الکتریسیته، توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده‌اند [۲]. پروسکایت‌ها دسته‌ای از مواد بلوری با فرمول ABX_3 هستند که در آن A و B کاتیون و X نشان‌دهنده یک آنیون است. پروسکایت‌های تلفیقی آلی–غیرآلی به عنوان مواد مستعد برای سلول‌های خورشیدی فتوولتائیک مطرح شده‌اند، که پیشرفت سریعی در بازده تبدیل توان [1] داشته‌اند [۳]. پروسکایت فرمامیدینیوم سرب یدید $FAPbI_3$ به دلیل شکاف نوار مناسب، تحرک بالای حامل‌ها و ضریب جذب نوری زیاد، از مواد پرکاربرد در سلول‌های خورشیدی به شمار می‌رود [٤]. با این حال، سمی بودن سرب یکی

[1] Power Conversion Efficiency

از مهم‌ترین چالش‌های تجاری‌سازی این فناوری است. از این رو، جایگزینی سرب با عناصر کم‌خطرتر به موضوعی مهم در پژوهش‌های اخیر تبدیل شده است. در این میان، قلع به دلیل شباهت آرایش الکترونی ظرفیتی با سرب، گزینه‌ای مناسب محسوب می‌شود. با وجود این، پروسکایت‌های کاملاً مبتنی بر قلع به دلیل اکسید شدن Sn^{2+} به Sn^{4+} و افزایش بازترکیب حامل‌ها، از پایداری و عملکرد مطلوبی برخوردار نیستند [۵ و ۶]. بنابراین آلایش $FAPbI_3$ و $FASnI_3$ می‌تواند راهکاری مؤثر برای بهره‌گیری همزمان از مزایای هر دو ماده باشد؛ بر همین اساس، در این پژوهش عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی با ساختار $CuSCN/\ FASn_xPb_{1-x}I_3/TiO_2$ به کمک شبیه‌سازی عددی در نرم‌افزار COMSOL مورد بررسی قرار گرفت. در این سلول، لایه پروسکایتی $FASn_xPb_{1-x}I_3$ به عنوان لایه جاذب، TiO_2 به عنوان لایه انتقال‌دهنده الکترون[1] و CuSCN به عنوان لایه انتقال‌دهنده حفره[2] در نظر گرفته شده و اثر میزان آلایش قلع بر خواص الکترونیکی لایه جاذب و پارامترهای عملکردی سلول مطالعه و بر اساس بازده تبدیل توان بهینه‌سازی شد.

روش محاسباتی

شبیه‌سازی‌های عددی این پژوهش با استفاده از روش المان محدود در نرم‌افزار کامسول و از طریق بخش نیم‌رسانا انجام شده است. این بخش امکان بررسی همزمان فرآیندهای الکترونی و نوری در ساختارهای نیم‌رسانا، از جمله سلول‌های خورشیدی، را فراهم می‌کند که بر پایه حل معادلات بنیادی نیم‌رساناها شامل معادلات رانش–پخش برای توصیف انتقال حامل‌های بار و معادله پواسون برای تعیین توزیع پتانسیل الکتریکی در حالت پایدار است [۷]:

$$\nabla\cdot(-\epsilon_0\epsilon_r\nabla V)=q(p-n+N_d^+-N_a^-)\,. \qquad (۱)$$

که در آن n و p به ترتیب چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها، ϵ_0 ثابت گذردهی خلأ، ϵ_r گذردهی نسبی ماده، V پتانسیل الکترواستاتیک، q ثابت بار، N_d^+ و N_a^- به ترتیب چگالی دهنده‌ها و پذیرنده‌ها یونیده است. معادله چگالی جریان الکترون به شکل زیر نوشته می‌شود[۷]:

$$\overrightarrow{J_n}=qn\left(\mu_n\nabla E_c+\frac{q}{n}D_n\nabla_n-D_n\nabla\ln(N_c)+D_{n-th}\nabla\ln(T)\right)\,, \qquad (۲)$$

که در آن μ_n تحرک‌پذیری الکترون، E_c انرژی لبه نوار هدایت، D_n ضریب نفوذ الکترون، N_c چگالی حالت‌های مؤثر نوار هدایت، D_{n-th} ضریب نفوذ گرمایی و T دمای سامانه می‌باشد. این رابطه همچنین با چگالی جریان حفره‌ها نیز مشابهت دارد.

بازترکیب شاکلی–رید–هال[3] به عنوان سازوکار اصلی بازترکیب، در نواحی حجمی، در نظر گرفته شده است [۸]:

$$R_n=\frac{np-n_i^2}{\tau_p(n+n_i)+\tau_n(p+p_i)}=R_p\,, \qquad (۳)$$

در معادله آهنگ بازترکیب برای الکترون و حفره‌ها، n_i/p_i چگالی ذاتی مؤثر و τ عمر حامل‌های اقلیت می‌باشند. در کنار بررسی خواص الکترونی، به منظور محاسبه آهنگ تولید زوج الکترون–حفره (G_{ph}) تحت تابش نور، مدل‌سازی دقیق پاسخ نوری مواد ضروری است که با استفاده از معادله زیر انجام می‌شود [۷]:

$$G_{ph}(z)=\frac{4\pi}{hc}\int_{100[\mathrm{nm}]}^{2000[\mathrm{nm}]}k(\lambda)F(\lambda)\exp\left(\frac{4\pi k(\lambda)}{\lambda}\mathrm{z}\right)d\lambda\,, \qquad (٤)$$

با ثابت پلانک h و سرعت نور c، این نرخ تولید بر حسب z ارتفاع سلول خورشیدی تابعی از شدت تابش نور $F(\lambda)$ و ضریب جذب نوری $k(\lambda)$ ماده بر حسب طول موج خواهد بود. از طیف تابش متعارف AM1.5g با شدت کل ۱۰۰۰ وات بر متر مربع به عنوان تابش خورشیدی استفاده شده است.

در ارزیابی عملکرد سلول‌های فتوولتائیک، دو متغیر کلیدی بازده تبدیل توان (η) که بیانگر نسبت توان خروجی الکتریکی به توان نور ورودی و ضریب پرشدگی (FF) که سنجه بازده انتقال بار است، به عنوان معیارهای اساسی مورد توجه قرار می‌گیرند. بازده تبدیل توان و ضریب پرشدگی از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۷]:

$$\eta=\frac{V_{oc}\times I_{sc}}{P_{in}}\times\%100\,, \qquad (۵)$$

$$FF=\frac{V_{mp}\times I_{mp}}{V_{oc}\times I_{sc}}\times\%100\,, \qquad (٦)$$

[1] Electron Transport Layer (ETL)
[2] Hole Transport Layer (HTL)
[3] Shockley-Read-Hall Recombination

که V_{oc} ولتاژ مدار باز و I_{sc} چگالی جریان اتصال کوتاه و V_{mp} و I_{mp} به ترتیب ولتاژ و جریان در نقطه حداکثر توان هستند. برای مدل سازی لایه جاذب آلاییده شده $FASn_xPb_{1-x}I_3$، خواص مواد $FAPbI_3$ و $FASnI_3$ براساس نسبت آلایش قلع (x) با استفاده از قوانین وابستگی ترکیب[1] محاسبه شد. برای متغیرهایی که تغییرات آن ها با آلاییده شدن مواد خطی فرض می‌شود، از رابطه درون یابی خطی استفاده گردید [۹]:

$$P_{\text{dop}}(x) = P_{Pb}(1-x) + xP_{Sn}\,, \qquad (۷)$$

که در آن P_{Pb} و P_{Sn} به ترتیب مقدار متغیر مورد نظر در $FAPbI_3$ و $FASnI_3$ بوده و P_{dop} مقدار متناظر آن در ماده آلاییده شده است. متغیرهای گذردهی نسبی، الکترون خواهی، تحرک‌پذیری الکترون و حفره، و همچنین طول عمر الکترون و حفره با استفاده از این رابطه محاسبه شدند. برای متغیر که تغییرات آن ها ماهیت نمایی دارد، از درون یابی لگاریتمی استفاده شد [۱۰]:

$$P_{\text{diop}}(x) = P_{\text{Pb}}^{(1-x)} \times P_{\text{Sn}}^{x}\,. \qquad (۸)$$

در این مطالعه برای محاسبه چگالی مؤثر حالات نوار هدایت (N_C) و نوار ظرفیت (N_V) از رابطه لگاریتمی استفاده گردید.از سوی دیگر، به دلیل وجود پدیده خمیدگی شکاف نواری[2] در مواد آلاییده شده شامل Pb و Sn گاف انرژی را نمی‌توان با یک رابطه خطی توصیف کرد. بنابراین، گاف انرژی از رابطه زیر محاسبه شد:

$$E_g(x) = (1-x)E_{g_{Pb}} + x\,E_{g_{Sn}} - bx(1-x)\,, \qquad (۹)$$

که در آن b متغیر خمیدگی است [۱۱]. بر اساس مقادیر گزارش‌شده در مطالعات پیشین، مقدار این متغیر برابر با ۰٫۶۱ ±۰٫۰۳ eV در نظر گرفته شد [۱۲]. مواد و ویژگی‌های مورد نیاز در این مطالعه در جدول۱ ارائه شده‌اند. به‌منظور تعیین درصد بهینه آلایش، از روش نلدر–مید[3] در بخش بهینه‌سازی استفاده شد. در این پژوهش، درصد آلایش و ضخامت لایه‌های سلول خورشیدی به‌عنوان متغیر در نظر گرفته شد و مقدار آن به گونه‌ای بهینه گردید که بازدهی سلول به بیشینه مقدار خود برسد.

جدول ۱. ویژگی‌های ترکیبات مورد استفاده

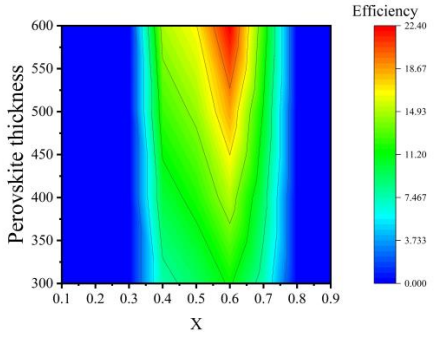
متغیر	CuSCN HTL [۱۵]	$FASnI_3$ [۱۴]	$FAPbI_3$ [۴]	TiO_2 ETL [۱۳]
ضریب گذردهی نسبی	۱۰	۸٫۲	۲۵	۳۱
گاف نوار (eV)	۳٫۴	۱٫۴۱	۱٫۵۳	۳
الکترون خواهی (eV)	۱٫۹	۴٫۷	۴٫۰	۴٫۱
چگالی حالات مؤثر الکترون($10^{18}cm^{-3}$)	۲٫۲	۱٫۰	۱۸	۱۰۰
چگالی حالات مؤثر حفره ($10^{18}cm^{-3}$)	۱٫۸	۱٫۰	۲٫۲	۱۰۰
تحرک‌پذیری الکترون ($cm^2/V{\cdot}s$)	۱۰۰	۲۲	۲۷	۰٫۰۱
تحرک‌پذیری حفره ($cm^2/V{\cdot}s$)	۲۵	۲۲	۲۷	۲
طول عمر الکترون (ns)	۱۰	۱۰۰	۵۰۰	۵
طول عمر حفره (ns)	۱۰	۱۰۰	۵۰۰	۵

نتیجه‌گیری

در این مطالعه، به‌منظور دستیابی به بیشترین بازده تبدیل توان در سلول خورشیدی پروسکایتی مبتنی بر $FASn_xPb_{1-x}I_3$، فرآیند بهینه‌سازی دو متغیر کلیدی شامل غلظت آلایش قلع x و ضخامت لایه‌های سلول انجام شد. بدین منظور، ابتدا سلول خورشیدی در نرم‌افزار COMSOL طراحی شد و سپس با استفاده از الگوریتم بهینه‌سازی ذکر شده، تأثیر تغییرات هم‌زمان این متغیرها بر عملکرد سلول مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج حاصل نشان داد که تنظیم مناسب درصد آلایش قلع در کنار انتخاب ضخامت بهینه برای لایه پروسکایت، نقش تعیین‌کننده‌ای در بهبود فرآیندهای جذب نوری، تولید و انتقال حامل‌ها داشته و در نهایت منجر به افزایش قابل توجه بازده تبدیل توان سلول خورشیدی می‌شود. این رویکرد امکان شناسایی شرایط بهینه طراحی و دستیابی به بیشترین مقدار بازدهی را فراهم ساخت.

[1] Composition dependence laws
[2] Bandgap Bowing
[3] Nelder–Mead method

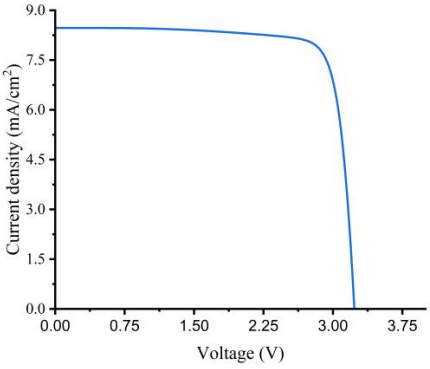
شکل ۱ تأثیر هم‌زمان ضخامت لایه پروسکایت و غلظت آلایش قلع در ساختار را بر بازده تبدیل توان سلول خورشیدی پروسکایتی نشان می‌دهد. همان‌گونه که دیده می‌شود، افزایش ضخامت لایه جاذب و تنظیم مناسب درصد آلایش قلع منجر به بهبود عملکرد سلول خورشیدی می‌شود. نتایج بهینه‌سازی نشان داد



شکل ۱. منحنی ترازنما ضخامت لایه پروسکایت و درصد آلایش قلع با رنگ‌نمای بازدهی.
(درصد صفر به معنای عدم امکان وجود ساختار است)

که بیشینه بازده تبدیل توان، برابر با حدود ۲۲٫٤٪، در غلظت آلایش تقریباً ۰٫٦۳ و ضخامت پروسکایت نزدیک به ٦۰۰ نانومتر حاصل می‌شود. همچنین ضخامت بهینه لایه‌های انتقال دهنده الکترون و حفره به ترتیب ۵۰ و ۱۵۰ نانومتر است.

شکل ۲ منحنی مشخصه جریان–ولتاژ سلول خورشیدی پروسکایتی بهینه‌شده مبتنی بر $FASn_xPb_{1-x}I_3$ را نشان می‌دهد. این منحنی پس از اعمال مقادیر بهینه ضخامت لایه‌ها و آلایش قلع به دست آمده است. از تحلیل منحنی، متغیرهای عملکردی سلول شامل



شکل ۲. منحنی جریان–ولتاژ.

جریان اتصال کوتاه، ولتاژ مدار باز، نقطه توان بیشینه و در نهایت ضریب پرشدگی استخراج شدند. نتایج نشان داد که مقدار ضریب پرشدگی سلول برابر با حدود ۸۲٪ است که بیانگر کیفیت مناسب استخراج حامل‌ها و کاهش نسبی تلفات مقاومتی و بازترکیب در ساختار طراحی‌شده می‌باشد. دستیابی به چنین مقدار ضریب پرشدگی در کنار بازده بالای سلول، نشان‌دهنده اثربخشی فرآیند بهینه‌سازی در بهبود عملکرد کلی این سلول خورشیدی پروسکایتی است، که عملکرد بهتری را در مقایسه با مطالعه مشابهی که با لایه‌های جاذب متفاوت، نمایش می‌دهد [۱٦].

مرجع‌ها

[1] C. DB and P. Sriramalakshmi; “Simulation of lead free heterojunction n-FASnI3/p-FrGeCl3 based Perovskite solar cell with ZnMgO as Electron transport layer and GO as Hole transport layer using SCAPS-1D”; Results in Engineering. 27 (2025) 106180.
[2] K. P. Mishra, B. K. Pandey and S. Pandey; “Unveiling the potential of FASnI3 solar cells through advanced charge transport materials: A SCAPS-1D perspective”; J. Alloys Compd. 1006 (2024) 176283.
[3] X. Fan; “Advanced progress in metal halide perovskite solar cells: A review”; Mater. Today Sustain. 24 (2023) 100603.
[4] M. Kareem, M. Abdullah, C. R. Vaghela, K. S. Kiran, K. Parasuraman and S. Kumar; “Improving the performance of FAPbI3 perovskite solar cells using a self-assembled monolayer”; RSC Adv. 6 (2016) 52287–52294.
[5] Y. El Arfaoui, M. Khenfouch and N. Habiballah; “Efficient all lead-free perovskite solar cell simulation of FASnI3/FAGeCl3 with 30% efficiency: SCAPS-1D investigation”; Results Opt. 13 (2023) 100554.
[6] D. Azhakanantham, M. Selvamani, T. Geun Kim, D. Contreras and A. Varman Kesavan; “Exploring novel HTL suitable for Eco-friendly and high performance FASnI3 photovoltaics”; Mater. Sci. Eng. B 284 (2022) 115909.
[7] S. M. Sze and K. K. Ng; “Physics of Semiconductor Devices”; 3rd edition, Wiley-Interscience. (2007).
[8] W. Shockley, J. T. Read Jr.; “Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons”; Phys. Rev. 87, No. 5 (1952) 835–842.
[9] A. R. Denton and N. W. Ashcroft; “Vegard’s law”; Phys. Rev. A 43, No. 6 (1991) 3161–3164.
[10] R. Simpkin; “Derivation of Lichtenecker’s Logarithmic Mixture Formula From Maxwell’s Equations”; IEEE Trans. Microw. Theory Tech. 58, No. 3 (2010) 545–550.
[11] E. S. Parrott, T. Green, R. L. Milot, M. B. Johnston, H. J. Snaith and L. M. Herz; “Interplay of Structural and Optoelectronic Properties in Formamidinium Mixed Tin–Lead Triiodide Perovskites”; Adv. Funct. Mater. 28, No. 33 (2018) 1802803.
[12] A. Rajagopal, R. J. Stoddard, H. W. Hillhouse and A. K. Y. Jen; “On understanding bandgap bowing and optoelectronic quality in Pb–Sn alloy hybrid perovskites”; J. Mater. Chem. A 7, No. 27 (2019) 16285–16293.
[13] R. T. Mouchou, T. C. Jen, O. T. Laseinde and K. O. Ukoba; “Numerical simulation and optimization of p-NiO/n-TiO2 solar cell system using SCAPS”; Mater. Today Proc. 38 (2021) 835–841.
[14] Y. El Arfaoui, M. Khenfouch and N. Habiballah; “Efficient all lead-free perovskite solar cell simulation of FASnI3/FAGeCl3 with 30% efficiency: SCAPS-1D investigation”; Results Opt. 13 (2023) 100554.
[15] A. Alipour and H. Alipour; “Device modeling of high performance and eco friendly FAMASnI3 based perovskite solar cell”; In Review (2024).
[16] Q. Yang, S. Yang, T. Xi, H. Li, J. Yi and J. Zhong; “Gradient doping simulation of perovskite solar cells with CH3NH3Sn1−xPbxI3 as the absorber layer”; Curr. Appl. Phys. 44 (2022) 55–62. doi:10.1016/j.cap.2022.08.012

بررسی هدایت گرمایی فونونی نانو نوارهای آرمچیری کاربید سیلیکون

دشتبانی‌زاده ، مریم[۱] ؛ فرقدان ، روح اله[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

[۲] گروه فیزیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

چکیده

امروزه، نانو نوارهای سیلیکون کربید به دلیل خواص نانو الکترونیکی و نوری و حرارتی که دارند، توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند. در این پژوهش، ویژگی‌های فونونی و رفتار انتقال حرارت در نانونوارهای سیلیکون کاربید و تغییر مکان تهی‌جای‌ها مورد بررسی قرار گرفته است. به‌منظور تحلیل خواص گرمایی، ساختار نواری فونون‌ها، ظرفیت گرمایی و رسانش فونونی محاسبه شدند. نتایج نشان‌داد که اثر تهی‌جای مدها رو کاهش می‌دهد و شکل نمودار پاشندگی فونونی را تغییر می‌دهد، این تغییرات به مکان تهی‌جای در مرکز و لبه نانونوار وابسته است که در نهایت سبب کاهش رسانش فونونی می‌شود.

واژه های کلیدی: *نانونوارهای آرمچیری سیلیکون کاربید؛ خواص فونونی؛ ساختار نواری فونون‌ها؛ ظرفیت گرمایی؛ رسانش فونونی.*

Investigation of Phonon Thermal Conductance in Armchair Silicon Carbide Nanoribbons

Dashtbanizade, Maryam [1]; Farghadan, Rouhollah [2]

[1] Department of Physics, University of Kashan, Kashan, 87317-53153, Iran
[2] Department of Physics, University of Kashan, Kashan, 87317-53153, Iran

Abstract

Silicon carbide nanoribbons have attracted considerable attention in recent years owing to their unique nanoelectronic, optical, and thermal properties. In this study, the phononic properties and thermal transport behavior of silicon carbide nanoribbons with vacancy defects at different positions were investigated. To evaluate the thermal characteristics, phonon band structures, heat capacity, and phonon thermal conductance were calculated. The results show that the presence of vacancy defects modifies the phonon dispersion spectra and reduces the contribution of phonon modes to thermal transport. These effects strongly depend on the position of the vacancy defect, whether located at the edge or in the center of the nanoribbon, ultimately leading to a decrease in phonon thermal conductance.

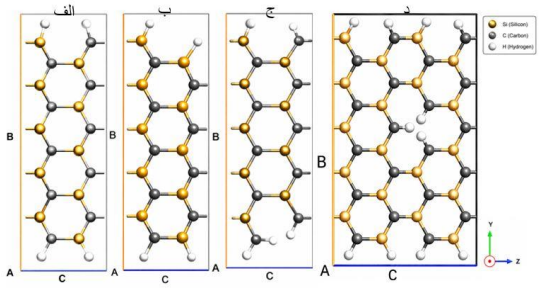
***Keywords**:Armchair Silicon Carbide Nanoribbons; Phonon Properties; Phonon Band Structure; Heat Capacity; Phonon Conductance.*

PACS No. 63, 65, 66

مقدمه

امروزه با کوچک‌تر شدن ابعاد ادوات الکترونیکی و افزایش چگالی توان، مدیریت حرارت به یکی از مسائل مهم در طراحی سامانه‌های نانومقیاس تبدیل شده است [۱]. در این مقیاس، انتقال گرما عمدتاً توسط فونون‌ها انجام می‌شود؛ از این‌رو، بررسی خواص فونونی و مکانیزم‌های پراکندگی فونون‌ها برای درک رفتار حرارتی نانوساختارها اهمیت ویژه‌ای دارد [۱, ۲]. نانونوارهای گرافنی به دلیل رسانندگی گرمایی بالا، به‌طور گسترده مورد مطالعه قرار گرفته‌اند و نتایج نشان داده شده است که رسانندگی حرارتی آن‌ها به عرض، طول و نوع لبه و وجود نواقص ساختاری وابسته است [۳–۶]. به ویژه، نقص‌های تهی‌جای با افزایش پراکندگی فونون‌ها موجب

کاهش رسانندگی گرمایی شده و امکان کنترل انتقال حرارت را فراهم می‌کنند[۷,٦,٤]. سیلیکون کاربید یکی از مواد دوبعدی مهم با پایداری حرارتی و استحکام مکانیکی بالا است که کاربردهای گسترده‌ای در ادوات نانومقیاس دارد[۲, ۱]. انتقال حرارت در نانونوارهای سیلیکون کاربید عمدتاً توسط فونون‌ها انجام می‌شود و به ساختار نواری فونونی، نوع لبه و ابعاد هندسی و نواقص ساختاری وابسته است [۷,۲]. افزایش عرض نانونوار با کاهش پراکندگی مرزی و افزایش تعداد مدهای انتقالی، رسانندگی گرمایی را افزایش می‌دهد [۲]. همچنین تفاوت لبه‌های آرمچیر و زیگزاگ از طریق تغییر چگالی حالات فونونی و مسیرهای پراکندگی، رفتار حرارتی متفاوتی ایجاد می‌کند [۲]. همچنین اختلاف جرم اتم‌های سیلیسیم و کربن موجب تغییر طیف فونونی و بر ویژگی‌های انتقال انرژی اثرگذار است[۲, ۸]. با وجود مطالعات انجام شده، اثر نواقص بر خواص فونونی نانونوارهای سیلیکون‌کاربید همچنان نیازمند بررسی‌های بیشتری است [۷, ۱].در این پژوهش، خواص فونونی نانونوارهای آرمچیری سیلیکون کاربید در حضور نواقص تهی‌جای مطالعه شده است. بدین منظور، ساختار نواری فونون‌ها، چگالی حالات فونونی، ظرفیت گرمایی و رسانش فونونی محاسبه و تحلیل شدند. نتایج حاصل می‌تواند به درک بهتر سازوکارهای انتقال انرژی و طراحی نانوساختار با عملکرد حرارتی بهینه کمک کند.



شکل۱: الف)ساختار نانو نوار سیلیکون کربید بدون نقص ب)ساختار نانو نوار سیلیکون کربید دارای نقص تهی‌جای در گوشه بالا سمت راست ساختار (حذف اتم کربن) ج) ساختار نانو نوار سیلیکون کربید دارای نقص تهی‌جای در گوشه پایین سمت راست ساختار(حذف اتم سیلیسیم) د) ساختار توسعه یافته نانو نوار سیلیکون کربید دارای نقص تهی‌جای در مرکز ساختار(حذف اتم سیلیسیم)

جزئیات محاسبات

ظرفیت گرمایی در حجم ثابت از طریق انتگرال‌گیری روی چگالی حالات فونونی و با استفاده از تابع توزیع محاسبه شد. در این روش ابتدا چگالی حالت ابتدا از محاسبات فونونی به‌دست آمد و سپس ظرفیت گرمایی با مشتق‌گیری از انرژی ارتعاشی شبکه نسبت به دما محاسبه شد.

ظرفیت گرمایی:

$$C_V = \frac{3NK_B \int_0^\infty \frac{u^2 e^u}{(e^u-1)^2} F(\omega)\, d\omega}{\int_0^\infty F(\omega)\, d\omega} \qquad (۱$$

که در آن $u = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$ است. توانستیم ظرفیت گرمایی فونونی بر پایه چگالی حالت فونونی بدست آوریم.

$F(\omega)$ همان DOS واقعی محاسبه شده از رابطه دینامیکی است. $\int_0^\infty F(\omega)d\omega = 3N$ همچنین برای حذف وابستگی به تعداد اتم ها، چگالی حالت فونونی را بر $3N$ نرمال کردیم و در نهایت به رابطه ای که برای ظرفیت گرمایی نوشتیم رسیدیم.

$$C_V = 3N \frac{\int_0^\infty \frac{u^2 e^u}{(e^u-1)^2} F(\omega)\, d\omega}{3N} = K_B \int_0^\infty \frac{u^2 e^u}{(e^u-1)^2} F(\omega)\, d\omega \qquad (۲$$

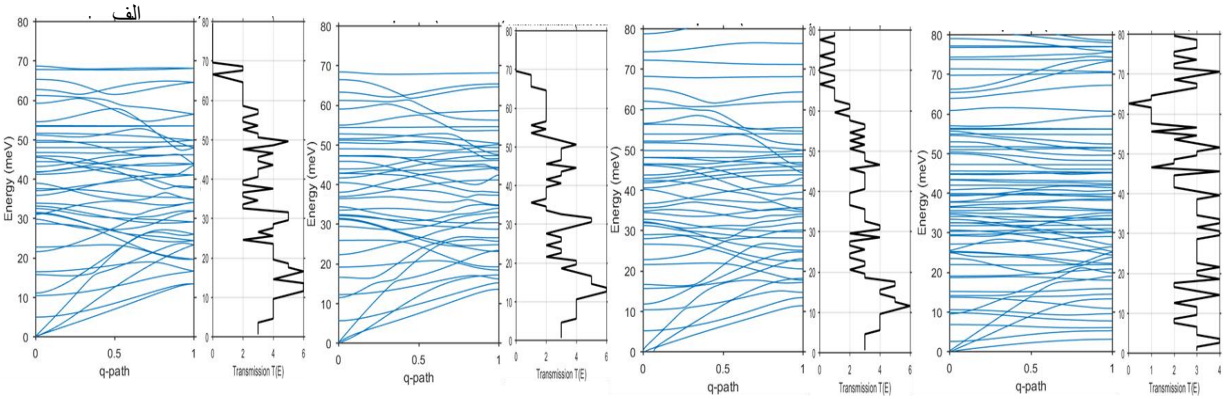
رسانش گرمایی[۸] فونونی:

$$k_{ph} = \frac{K_B}{2\pi} \int_0^\infty d\omega\, u^2\, T_{ph}(\omega) \frac{e^u}{(e^u-1)^2} \qquad (۳$$

در این پژوهش، خواص فونونی و رسانش گرمایی در چارچوب تقریب هارمونیک و بر پایه ثابت‌های نیروی مرتبه دوم محاسبه شدند. از آنجا که ثابت‌های نیروی مرتبه سوم و برهم‌کنش‌های غیر هارمونیک در محاسبات لحاظ نشدند، پراکندگی ذاتی فونون–فونون در نظر گرفته نشده است. بنابراین رسانش گرمایی فونونی گزارش‌شده بیانگر تقریب بالستیک است که با توجه به اندازه کوچک نانو نوار های مورد بررسی تقریب مناسبی به شمار می‌آید.ازاین‌رو، محاسبه مشتق مرتبه سوم و اثرات ناشی از آن‌ها در این مطالعه بررسی نشده است.

بحث و نتایج

در این پژوهش، طیف فونونی نانو نوارهای آرمچیری کاربید سیلیکون با استفاده از محاسبات اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی و نرم‌افزار *SIESTA* بررسی شد و برای برهم‌کنش تبادلی همبستگی از تقریب گرادیان تعمیم‌یافته *(GGA-PBE)* استفاده شد. همچنین توابع موج الکترونی با پایه *DZP* و شبه‌پتانسیل‌های *FHI* انجام گرفت. انرژی برش ۳۵۰ *Ry* و شبکه نقاط k برابر ۱×۱×۵۰ در راستای تناوبی در نظر گرفته شد. همچنین برای محاسبه ماتریس



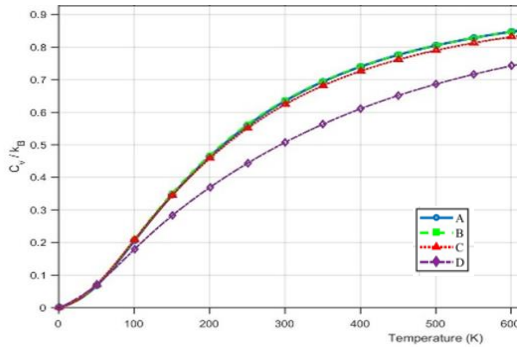
شکل۲: شکل الف) بند های فونونی و نوار های ترنزمیشن ساختار کامل. ب) بند های فونونی با ساختار تهی‌جای در بالای ساختار (حذف اتم کربن) ج)بند های فونی مربوط به ساختار دارای تهی‌جای در پایین ساختار(حذف اتم سیلیکون) د)بند های فونونی و ترنزمیشن ساختار دارای تهی‌جای (حذف اتم سیلیکون از وسط ساختار) معرفی شده

دینامیکی، ظرفیت گرمایی و رسانش فونونی از نرم‌افزار *MATLAB* استفاده شد. ساختار مورد مطالعه نانونوار آرمچیری سیلیکون کاربید با عرض $W=10$ است(شکل۱). برای حذف برهم‌کنش سلول‌های تکراری، در دو راستای غیرتناوبی (x,y) خلأ ۲۰Å اعمال شد. چهار ساختار شامل نانونوار بدون نقص، دو ساختار دارای تهی‌جای لبه‌ای (حذف اتم کربن و سیلیسیم) و یک ساختار دارای تهی‌جای مرکزی سیلیسیم بررسی شدند. تمامی ساختارها تا رسیدن نیروی باقی‌مانده کمتر از $۰.۰۱\ eV/\text{Å}$ بهینه‌سازی شدند. سپس نوارهای فونونی و چگالی حالت‌های فونونی آن‌ها محاسبه شد.

شکل۲، ساختار نواری و تابع انتقال فونونی نانونوارهای کاربید سیلیکون را نشان می‌دهد. حضور نقص‌های تهی‌جای موجب تغییر شاخه‌های فونونی و کاهش مدهای انتقالی می‌شود. همچنین ساختار (ج) نسبت به سایر ساختارها پایداری کمتری دارد.

در شکل۳، ظرفیت گرمایی فونونی نرمال‌شده نانونوارهای آرمچیری کاربید سیلیکون نشان داده شده است. ظرفیت گرمایی در همه ساختارها با افزایش دما افزایش یافته و در دماهای بالا به اشباع نزدیک می‌شود که ناشی از مشارکت بیشتر مدهای فونونی در ذخیره انرژی گرمایی است. در دماهای پایین، تنها مدهای آکوستیکی کم‌فرکانس برانگیخته می‌شوند؛ بنابراین اختلاف محسوسی میان ساختارهای بدون نقص و دارای نقص مشاهده نمی‌شود. با افزایش دما، به‌ویژه در حدود $۳۰۰K$ تفاوت میان ساختارها آشکارتر می‌شود.

ساختار بدون نقص و دو ساختار دارای نقص لبه‌ای رفتار مشابهی دارند، در حالی که ساختار دارای تهی‌جای مرکزی سیلیسیم ظرفیت

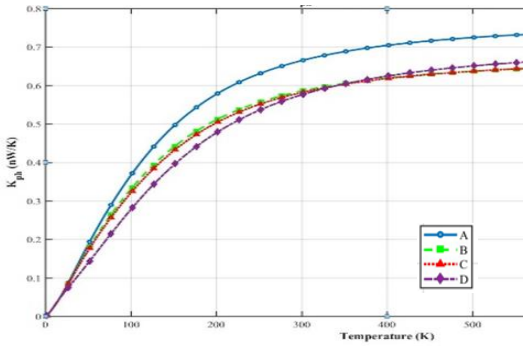


شکل۳: نمودار ظرفیت گرمایی بر حسب دما: رنگ آبی (A) مربوط به ساختار (الف) کامل و بدون تهی‌جای است. رنگ سبز (B) مربوط به ساختار (ب) دارای نقص در گوشه بالا سمت راست، رنگ قرمز (C) مربوط به ساختار (ج) دارای نقص در گوشه پایین سمت راست، رنگ بنفش (D) مربوط به ساختار (د) دارای نقص در مرکز ساختار است.

گرمایی کمتری نشان می‌دهد. این رفتار بیانگر تأثیر بیشتر نقص مرکزی بر طیف فونونی و مدهای ارتعاشی است. در دمای بالاتر از $۳۰۰K$ نرخ افزایش ظرفیت گرمایی کاهش یافته و منحنی‌ها به اشباع نزدیک می‌شوند. در مجموع، موقعیت نقص نسبت به نوع اتم حذف شده تأثیر بیشتری بر رفتار گرمایی نانونوارهای کاربید سیلیکون دارد.

در شکل٤، تغییرات رسانش گرمایی فونونی برای ساختارهای بدون نقص و دارای نقص نشان داده شده است. در تمامی ساختارها، رسانش فونونی با افزایش دما افزایش می‌یابد که ناشی از مشارکت

مدهای فونونی بیشتر در انتقال حرارت است. مقایسه نتایج نشان می‌دهد حضور تهی‌جای در تمامی ساختارهای دارای نقص رسانش فونونی را کاهش می‌دهد. بیشترین اختلاف بین ساختارهای بدون نقص و معیوب در بازه ۱۰۰ تا $۳۰۰K$ دیده می‌شود، در حالی که با افزایش دما مقادیر رسانش به یکدیگر نزدیک‌تر می‌شوند. همچنین هر سه ساختار معیوب رفتار حرارتی مشابهی دارند.



شکل٤: نمودار رسانش گرمایی فونونی بر حسب دما: رنگ آبی (A) مربوط به ساختار (الف) کامل و بدون تهی‌جای است. رنگ سبز (B) مربوط به ساختار (ب) دارای نقص در گوشه بالا سمت راست، رنگ قرمز (C) مربوط به ساختار (ج) دارای نقص در گوشه پایین سمت راست، رنگ بنفش (D) مربوط به ساختار (د) دارای نقص در مرکز ساختار است

نتایج به‌دست‌آمده با مطالعات پیشین مقایسه شد. Jiang و همکاران [۹] نشان دادند که نقص‌های تهی‌جای موجب کاهش رسانش گرمایی شده و شدت این کاهش به موقعیت نقص وابسته است. همچنین Savin و Kivshar [٤] کاهش انتقال حرارت را ناشی از ایجاد مدهای ارتعاشی موضعی و افزایش پراکندگی فونون‌ها دانستند. که نتایج با گزارش‌های پیشین همخوانی دارد؛ به‌طوری‌که رسانش فونونی ساختار بدون نقص در دمای ۳۰۰K حدود ۰.٦٨nW/K و برای ساختارهای دارای تهی‌جای به حدود ۰.۵۸تا۰.۵۹ nW/K کاهش می‌یابد. با وجود اینکه در بسیاری از مطالعات نقص مرکزی بیشترین کاهش رسانش را ایجاد می‌کند؛ اما در این پژوهش نقص مرکزی بیشترین تأثیر را بر ظرفیت گرمایی نشان داد، در حالی که در رسانش فونونی اختلاف آن با نقص‌های لبه‌ای اندک بود.

نتیجه گیری

در این پژوهش، خواص فونونی نانونوارهای آرمچیری کاربید سیلیکون بدون نقص و دارای نقص تهی‌جای با استفاده از محاسبه نظریه تابعی چگالی و ترابرد همدوس فونونی بررسی شد و ظرفیت گرمایی و رسانش فونونی محاسبه شدند. نتایج نشان داد که وجود نقص‌ها باعث کاهش رسانش فونونی نسبت به ساختار بدون نقص می‌شود. همچنین مشخص شد که موقعیت نقص بر شدت این کاهش اثر دارد،همچنین مشخص شد موقعیت نقص بر خواص گرمایی نانونوار مؤثر است؛ به‌طوری‌که نقص مرکزی بیشترین تأثیر را بر ظرفیت گرمایی نشان داد، در حالی که اختلاف آن با نقص‌های لبه‌ای در رسانش فونونی ناچیز بود. در مجموع، نقص‌های تهی‌جای نقش مهمی در تضعیف انتقال حرارت فونونی در این نانوساختارها دارند. نتایج این پژوهش درک عمیق‌تری از ویژگی‌های فونونی نانونوارهای کاربید سیلیکون ارائه داده و می‌تواند در طراحی مواد و ادوات نانومقیاس با عملکرد حرارتی بهینه مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع‌ها

[۱] A. J. Islam, M. S. Islam, N. Ferdous, J. Park, A. G. Bhuiyan and A. Hashimoto; “Anomalous temperature dependent thermal conductivity of two-dimensional silicon carbide”; Nanotechnology 30, No. 44 (2019) 445707.

[۲] M. S. Islam, A. S. M. Islam, O. Mahamud, A. Saha, N. Ferdous, J. Park and A. Hashimoto; “Molecular dynamics study of thermal transport in single-layer silicon carbide nanoribbons”; AIP Advances 10, No. 1 (2020).

[۳] Z. Q. Ye, B. Y. Cao, W. J. Yao, T. Feng and X. Ruan; “Spectral phonon thermal properties in graphene nanoribbons”; Carbon 93 (2015) 915-923.

[٤] A. V. Savin and Y. S. Kivshar; “Phononic Fano resonances in graphene nanoribbons with local defects”; Scientific Reports 7, No. 1 (2017) 4668.

[۵] M. Masoudi-Nia et al.; “Thermal transport in graphene nanoribbons: Effect of edge and defects”; Physica E 116 (2020) 113757.

[٦] M. Shirdel-Havar and R. Farghadan; “Large thermospin effects in carbon nanotubes with vacancy defects”; The Journal of Physical Chemistry C 123, No. 33 (2019) 20105-20115.

[۷] G. Khanlar, S. I. Vishkayi and H. R. Soleimani; “The spin-dependent properties of silicon carbide/graphene nanoribbons junctions with vacancy defects”; Scientific Reports 11, No. 1 (2021) 23879.

[۸] A. Togo and I. Tanaka; “First principles phonon calculations in materials science”; Scripta Materialia 108 (2015) 1–5.

[۹] J. W. Jiang, B. S. Wang and J. S. Wang; “First-principle study of the thermal conductance in graphene nanoribbon with vacancy and substitutional silicon defects”; Applied Physics Letters 98, No. 11 (2011).

بررسی ساختار مکانیکی مکسین کاربید تیتانیوم به روش ابتدا به ساکن

علی حسین محمد ظاهری

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

چکیده

به دلیل رشد فناوری نانو و تلاش محققان برای دستیابی به خواص جدید ترکیب های نانو و با توجه به خواص و کاربرد های مکسین ها در صنایع و رشد استفاده از آنها ما در این پژوهش برآن شدیم به بررسی ترکیبی از این خانواده (Ti_2C) بپردازیم. لذا در این پژوهش، خواص ساختاری و مکانیکی کاربید تیتانیوم (TiC) با استفاده از روش ابتدا به ساکن مبتنی بر نظریه تابعی چگالی (DFT) و نرم افزارکوانتوم اسپرسو مورد بررسی قرار گرفت. پس از بهینه‌سازی ساختار بلوری، پارامترهای شبکه پایداری مکانیکی ترکیب ارزیابی شد. نتایج نشان داد که TiC دارای استحکام و سختی بالا بوده و از پایداری مکانیکی مناسبی برخوردار است. یافته‌های این مطالعه می‌تواند در طراحی و توسعه مواد سرامیکی پیشرفته برای کاربردهای صنعتی و مهندسی مورد استفاده قرار گیرد.

واژه های کلیدی: *مکسین کاربید تیتانیوم، تئوری تابعی چگالی، خواص الکترونیکی، خواص مکانیکی ، چگالی حالات، ساختار نواری*

Ab Initio Investigation of the Mechanical Properties of Titanium Carbide Mxene Article

Ali Hossein Mohammad Zaheri

Department of Physics, Payame Noor University Tehran, Iran

Abstract

Due to the rapid advancement of nanotechnology and researchers' ongoing efforts to achieve novel properties in nanomaterials, along with the remarkable physicochemical properties and wide-ranging industrial applications of MAX phases and their increasing utilization, the present study aimed to investigate a member of this family, namely Ti_2C. Accordingly, the structural and mechanical properties of titanium carbide (TiC) were examined using first-principles calculations based on Density Functional Theory (DFT) implemented in the Quantum ESPRESSO software package. Following the optimization of the crystal structure, the lattice parameters and mechanical stability of the compound were evaluated. The results demonstrated that TiC exhibits high strength and hardness along with favorable mechanical stability. The findings of this study can be effectively utilized in the design and development of advanced ceramic materials for various industrial and engineering applications.

Keywords: *Ti_2C MXene, Density Functional Theory (DFT), Electronic Properties, Mechanical Properties, Electronic Band Structure, Density of States (DOS).*

PACS No.

مقدمه

یکی از بزرگترین جهش های علمی تاریخ بشریت را بدون شک می‌توان نانو فناوری دانست. به واسطه‌ی ظهور این علم، بشر توانست با دستکاری در مقیاس و ترکیبات ساختار های مختلف نتایج مطلوب و مورد دلخواه خود را از مواد مختلف بدست آورد. شاید نقطه‌ی آغاز این زمینه از علم را سخنرانی فاینمن دانست که با جمله به یاد ماندنی آن پایین فضاهای زیادی هست ذهن محققین و دانشمندان هم دوره خود رابه این چالش بزرگ علمی دعوت کرد و بعد از آن در اثر تلاش‌های آن‌ها و جذابیت موضوع پیشرفت شتابانی در این گرایش اتفاق افتاد. با کشف و معرفی گرافن به عنوان یک ساختار دو بعدی و با توجه به خواص و کاربردهای وسیعی که این ماده به عرصه ظهور گذاشت تلاش

دانشمندان برای معرفی ساختار های شبه دوبعدی آغاز شد و به دنبال آن اکثر پژوهشگران برآن شدند که مواد دو بعدی بیشتری را معرفی و خواص جدیدی را بدست آوردند از مهمترین یافته ها و نتایجی که این پژوهشگران به دست آورده‌اند ماده نانویی جدیدی به نام مکسین(«MXene») است. این ماده، ازحالت بالکی تحت ساختار و نامگذاری «MAX» ساخته شده و پسوند «ene» به دلیل تشابه به «Graphene» به انتهای آن اضافه شده است. مکسین ها برای اولین بار، طی همکاری‌های پژوهشی پروفسور «Barsoum» و همکارانش کشف و معرفی شد. تا کنون کاربردهای زیادی برای «MXene» معرفی شده است و از مهم‌ترینشان، می‌توان به کاربرد در ذخیره‌سازی انرژی، تداخل‌های الکترومغناطیسی «EMI»، تقویت کامپوزیت‌ها و همچنین آب-شیرین‌کن‌ها اشاره کرد. با بهره‌گیری از قابلیت انعطاف‌پذیری بالا و رسانش الکتریکی زیاد، این ماده در مقایسه با تمامی مواد ساخته شده با ضخامت یکسان، بالاترین عملکرد را در زمینه حفاظ‌های الکترومغناطیسی از خود به نمایش می گذارد. از طرفی خاصیت ضد باکتریایی «MXene » ها کشف شده است که حتی در این زمینه می‌تواند کاربرد بالاتری از اکسید گرافن نشان دهد. محققان دانشگاه درکسل، در مقاله شان در سال ۲۰۱۱ میلادی در مجله «Advanced Materials» به عنوان «نانوکریستال‌های دو بعدی سنتز شده توسط لایه‌لایه کردن Ti_3AlC_2» منتشر کردند و برای اولین بار، قابلیت تبدیل تیتانیوم آلومینیوم کاربید سه بعدی که نوعی «MAX» فاز رایج است، را به ساختاری دو بعدی با مزیت های بسیار متفاوت به جامعه علمی معرفی کردند. آنها با قرار دادن پودر تیتانیوم آلومینیوم کاربید (Ti_3AlC_2) در اسید هیدروفلوئوریک در دمای اتاق اقدام به حذف آلومینیوم ازآن ترکیب کردند. طی این روند شیمیایی، که به لایه‌لایه کردن «Exfoliation» معروف است، نانو صفحات «Ti_3C_2» بدست آمد. از آن تاریخ به بعد، یکی از خویشاوندان گرافن، «MXene» نام گرفت. کاربید تیتانیوم (TiC) یکی از مهم‌ترین سرامیک‌های دیرگداز فلزات واسطه است که به دلیل سختی بالا، نقطه ذوب زیاد، مقاومت سایشی مطلوب و پایداری شیمیایی مناسب، کاربرد گسترده‌ای در صنایع پیشرفته دارد [۱]. توسعه روش‌های محاسباتی مبتنی بر مکانیک کوانتومی، به‌ویژه نظریه تابعی چگالی(DFT) ، امکان مطالعه خواص ساختاری و مکانیکی مواد را در سطح اتمی فراهم کرده است [۳-۲]. روش‌های ابتدا به ساکن (Ab Initio) به دلیل عدم وابستگی به داده‌های تجربی، ابزاری کارآمد برای پیش‌بینی رفتار مواد و بررسی ویژگی‌های بنیادی آن‌ها محسوب می‌شوند [٤]. مطالعات انجام‌شده نشان داده‌اند که ساختار الکترونی TiC نقش مهمی در ایجاد استحکام و سختی بالای این ترکیب دارد [٥]. بررسی خواص مکانیکی این ماده از طریق محاسبه ثابت‌های الاستیک، مدول بالک، مدول برشی و مدول یانگ، اطلاعات ارزشمندی درباره پایداری مکانیکی و رفتار الاستیکی آن ارائه می‌دهد [٧-٦]. پژوهش‌های مبتنی بر اصول اولیه نشان داده‌اند که کاربید تیتانیوم در گستره وسیعی از شرایط فشاری، پایداری مکانیکی قابل توجهی از خود نشان می‌دهد [٨].همچنین، نتایج حاصل از محاسبات نظری با داده‌های تجربی همخوانی مناسبی داشته و اعتبار روش‌های محاسباتی را تأیید کرده‌اند [٩]. از این‌رو، بررسی ساختار مکانیکی کاربید تیتانیوم به روش ابتدا به ساکن می‌تواند در شناخت بهتر رفتار این ماده و طراحی مواد مهندسی با خواص مکانیکی بهینه نقش مؤثری ایفا کند [١٠].

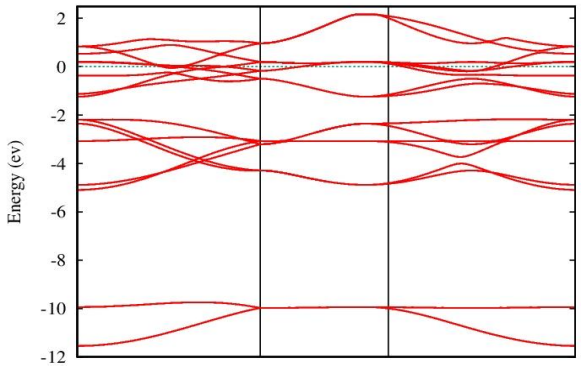
روش محاسبات

محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی و به روش شبیه سازی کوانتوم اسپرسو انجام شده است. کوانتوم اسپرسو مجموعه‌ای برای محاسبات ساختار الکترونیکی و مدل‌سازی مواد است که به صورت رایگان و به عنوان نرم‌افزار رایگان تحت مجوز عمومی گنو توزیع شده است. این بسته محاسباتی بر اساس تئوری تابعیت چگالی، و به صورت شبه پتانسیلی عمل می-کند [١١]. بر اساس این روش شبه پتانسیل جایگزین برهمکنش واقعی الکترون-یون می شود .شبه پتانسیل هسته اتم و همه الکترون ها را به جز بیرونی ترین لایه ظرفیتی توصیف می کند .میدان پتانسیل به سرعت در حال تغییر در نزدیکی هسته اتمی با یک تابع صاف تر جایگزین می شود که میدان پتانسیل دور از هسته را به خوبی شبیه سازی می کند .

با انجام این کار، به مبنای موج صفحه عددی کمتری برای بسط تابع موج نیاز دارد و این امر باعث افزایش سرعت محاسبات ما می شود. . در این بسته نرم افزاری، برهم‌کنش بین الکترون‌ها و یون‌ها با استفاده از شبه‌پتانسیل‌ها و روش امواج تخت مدل‌سازی می‌شود که دقت و کارایی مناسبی را برای مطالعه مواد بلوری فراهم می‌کند [۱۲]. برای توصیف برهم‌کنش الکترون–یون از شبه‌پتانسیل‌های نوع PAW و برای تقریب تبادلی–همبستگی از تابعی GGA در قالب PBE استفاده شد. این روش شبیه سازی قابلیت محاسبه خواص ساختاری، الکترونی، مکانیکی و دینامیکی مواد را دارا بوده و در تحقیقات علوم مواد و فیزیک حالت جامد به طور گسترده مورد استفاده قرار می‌گیرد[۱۳]. به دلیل دقت بالا و امکان بهینه‌سازی ساختارهای بلوری،کوانتوم اسپرسو ابزاری مناسب برای بررسی خواص مکانیکی کاربید تیتانیوم در سطح اتمی محسوب می‌شود

نتایج و بحث

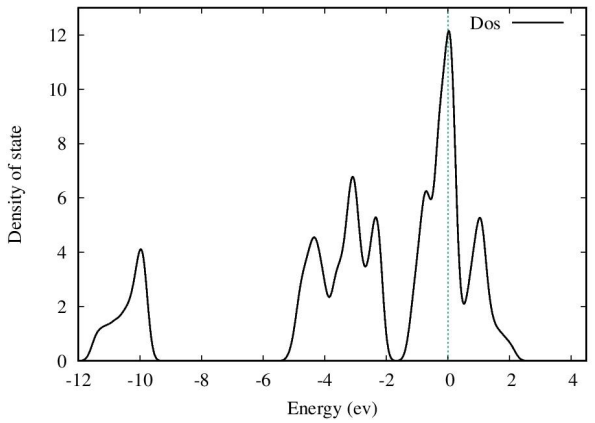
جهت انجام محاسبات، پس ازساخت ورودی های مناسب موقعیت های اتم های موجود در سلول پایه بهینه شد. در نتیجه این بهینه سازی پارامترهای شبکه a= ۳/۰۶۹ b= ۵/۳۱۶ و c=۱۳/۷۳۶ در واحد آنگستروم و کلیه زوایا نیز ۹۰ درجه به دست امدند. به منظور بررسی خاصیت الکترونیکی نمودار های ساختار نواری و چگالی حالات مورد بحث و محاسبه قرار گرفتند که نتایج به ترتیب در نمودارهای ۱ و ۲ نشان داده شده اند. این نمودار ها می‌توانند به ما نشان دهند که ترکیبی دارای خاصیت رسانندگی، نیمه رسانایی و یا نارسانایی می‌باشد این امر به اینگونه اثبات می‌شود که اگر در نمودار ساختار نواری اگر تراز ها سطح فرمی را قطع نکرده باشند یعنی در این ناحیه گاف داشته باشیم دیگر شاهد خاصیت رسانایی نیستیم و بسته به میزان گاف ماده می‌تواند در دسته نیم و یا نارسانا ها قرار گیرند اما در مورد ساختار مورد بررسی ما همانگونه که میبینیم این ترکیب دارای خاصیت رسانایی می‌باشد چراکه ترازهای انرژی سطح فرمی را قطع کرده و شرط رسانایی را ارضاء می‌کند و از طرفی دارای سرعت گروه زیادی در محدوده سطح فرمی نمی‌باشد چرا که شیب این تراز ها در این محدود زیاد نیست.



نمودار ۱: نمودار ساختار نواری

در واقع نمودار فوق ساختار نواری الکترونی ماده را نشان می‌دهد که در آن تغییرات انرژی الکترون‌ها بر حسب بردار موج در مسیرهای مختلف ناحیه بریلوئن نمایش داده شده است. مشاهده عبور برخی نوارها از سطح فرمی (خط‌چین فیروزه‌ای در انرژی صفر الکترون‌ولت) بیانگر رفتار رسانایی و وجود حالت‌های الکترونی در نزدیکی سطح فرمی است.

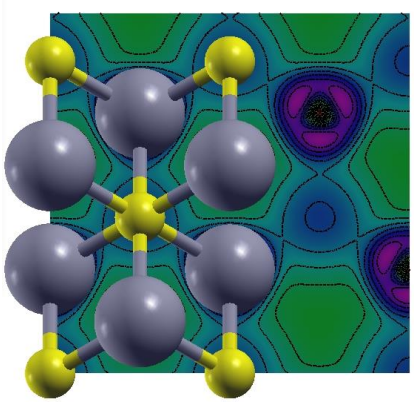
مرحله بعدی به بررسی چگالی حالات الکترونی پرداخته شده است که نتایج در نمودار ۲ آمده است.



نمودار ۲: چگالی حالات بر حسب انرژی

همانطور که در نمودار هویدا است وجود مقدار قابل توجه پیک در نزدیکی سطح فرمی (انرژی صفر الکترون‌ولت) بیانگر در دسترس بودن حالت‌های الکترونی در این ناحیه و تأییدکننده رفتار رسانایی

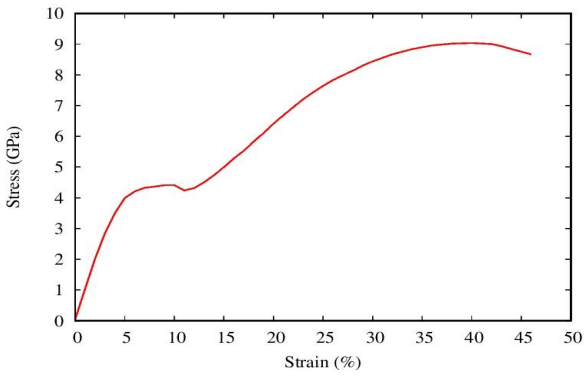
فلزی ماده است. همچنین، قله‌های متعدد مشاهده‌شده در نواحی مختلف انرژی نشان‌دهنده مشارکت اوربیتال‌های اتمی گوناگون در تشکیل نوارهای الکترونی و ساختار الکترونی ماده هستند. جهت بررسی دقیق تر و حصول اطمینان از نتایج توزیع چگالی بار الکترونی در ساختار بلوری نیز مورد بررسی قرار گرفت که نتایج در نمودار ۳ آمده است.



نمودار ۳: توزیع چگالی بار الکترونی در ساختار بلوری

این نمودار توزیع چگالی بار الکترونی در ساختار بلوری را نشان می‌دهد که در آن نواحی با رنگ‌های متراکم‌تر بیانگر تمرکز بیشتر الکترون‌ها هستند. تجمع چگالی بار در ناحیه بین اتم‌های مجاور نشان‌دهنده تشکیل پیوندهای شیمیایی قوی و برهم‌کنش الکترونی قابل توجه میان اتم‌ها در ساختار ماده است.

در مرحله پایانی این پژوهش به بررسی خاصیت مکانیکی این ماده پرداخته شده است. نتیجه بررسی در نمودار ٤ آمده است.



نمو.دار ٤: نمودار تنش–کرنش

نمودار تنش–کرنش ارائه‌شده با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کلاسیک به دست آمده است. در این روش، کرنش یک‌محوری به طور تدریجی به ورقه نانویی Ti_2C اعمال شده و تنش حاصل در هر گام کرنش ثبت و رسم گردیده است.این نمودار نشان می‌دهد که با افزایش کرنش، تنش ابتدا به‌سرعت تا حدود ٤.۳گیگاپاسکال در کرنش حدود ٪۵افزایش می‌یابد که بیانگر رفتار الاستیک و آغاز تسلیم ماده است. پس از یک ناحیه تقریباً ثابت و افت جزئی تنش در حدود ٪۱۲–۱۰ کرنش، تنش دوباره افزایش می‌یابد که نشان‌دهنده سخت‌شوندگی کرنشی و افزایش مقاومت ماده در اثر تغییر شکل پلاستیک است. تنش به بیشینه‌ای نزدیک ۹گیگاپاسکال در کرنش حدود ٪٤۰–۳۸ می‌رسد و سپس اندکی کاهش می‌یابد که می‌تواند نشانه شروع گردن‌شدگی یا کاهش ظرفیت تحمل بار پیش از شکست باشد. در واقع این نمودار نشان می‌دهد که ماده مورد بررسی با افزایش کرنش، پس از تسلیم اولیه دچار سخت‌شوندگی کرنشی شده و تا تنشی حدود ۹گیگاپاسکال مقاومت خود را افزایش می‌دهد، سپس در کرنش‌های بالا نشانه‌هایی از شروع ناپایداری و کاهش مقاومت مشاهده می‌شود.

مرجع‌ها

[۱] Toth, L. E. (۱۹۷۱). *Transition Metal Carbides and Nitrides*. Academic Press.
[۲] Hohenberg, P., & Kohn, W. (۱۹٦٤). Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*, ۱۳٦(۳B), B۸٦٤–B۸۷۱.
[۳] Kohn, W., & Sham, L. J. (۱۹٦٥). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, ۱٤۰(٤A), A۱۱۳۳–A۱۱۳۸.
[٤] Cohen, M. L. (۱۹۸٥). Calculation of bulk moduli of diamond and zinc-blende solids. *Physical Review B*, ۳۲(۱۲), ۷۹۸۸–۷۹۹۱.
[٥] Jhi, S. H., Ihm, J., Louie, S. G., & Cohen, M. L. (۱۹۹۹). Electronic mechanism of hardness enhancement in transition-metal carbonitrides. *Nature*, ۳۹۹, ۱۳۲–۱۳٤.
[٦] Born, M., & Huang, K. (۱۹٥٤). *Dynamical Theory of Crystal Lattices*. Oxford University Press.
[۷] Nye, J. F. (۱۹۸٥). *Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices*. Oxford University Press.
[۸] Zhao, E., Meng, J., Ma, Y., & Wu, Z. (۲۰۰۸). Structural, elastic and electronic properties of titanium carbide under pressure from first-principles calculations. *Computational Materials Science*, ٤٤(۲), ٥۳۱–٥۳٥.
[۹] Music, D., Schneider, J. M., Veprek, S., & Jansson, U. (۲۰۰٦). Ab initio study of elastic properties of TiC. *Surface and Coatings Technology*, ۲۰۰(۲۲–۲۳), ٦٤٤۰–٦٤٤٤.
[۱۰] Grimvall, G. (۱۹۹۹). *Thermophysical Properties of Materials*. Elsevier Science.
[۱۱] Giannozzi, P., et al. (۲۰۰۹). *QUANTUM ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials*. Journal of Physics: Condensed Matter, ۲۱(۳۹), ۳۹٥٥۰۲.
[۱۲] Martin, R. M. (۲۰۰٤). *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*. Cambridge University Press.
[۱۳] Giannozzi, P., et al. (۲۰۱۷). *Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO*. Journal of Physics: Condensed Matter, ۲۹(٤٦), ٤٦٥۹۰۱.

محاسبهٔ خواص ساختاری، مکانیکی، ارتعاشی و ترمودینامیکی سوخت راکتور گازی دما بالا با استفاده از روش ابتدا به ساکن

صحافی، محمد حسین؛ باهنر، مجید

مرکز محاسبات پیشرفتهٔ ایران، سازمان انرژی اتمی، تهران، ایران

چکیده

در این مقاله، خواص ساختاری، ترمودینامیکی و مکانیکی سوخت هسته ای پایه توریومی توسط بستهٔ نرم افزاری کوانتوم اسپرسو بر پایه نظریهٔ اختلالی تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته و روش امواج تخت همراه با شبه پتانسیل های فوق نرم انجام شده است. خواص ترمودینامیکی و مکانیکی به وسیلهٔ دینامیک شبکه در تقریب شبه هماهنگ، محاسبه شده اند. با رسم منحنی انرژی بر حسب حجم و برازش معادلهٔ مورناگون ، مقادیر پارامترهای تعادلی شبکه از جمله ثابت شبکه و مدول حجمی به دست آمدند. در نهایت خواص ساختاری، مکانیکی و ظرفیت گرمایی مولی با نتایج تجربی مقایسه شده که بیانگر دقت خوب و صحت محاسبات انجام شده می باشد.

واژه های کلیدی: *ساختار الکترونی ، ضرایب کشسانی ، راکتور گازی دما بالا ، پاشندگی فونونی*

Calculation of Structural, Mechanical, Vibrational and Thermodynamic Properties of High Temperature Gas Reactor Fuel Using Ab Initio Method

Sahafi, Mohammad Hossein; Bahonar, Majid

Iran Advanced Computing Center, AEOI, Tehran, Iran

Abstract

In this work, the structural, thermodynamic and mechanical properties of the Thorium-based nuclear fuel are studied using the quantum espresso software package based on density functional- perturbation theory. The calculations are carried out using generalized Gradient approximation and Plane wave methods with ultra-soft pseudopotentials. The thermodynamic and mechanical properties are obtained by the lattice dynamics in the quasi-harmonic approximation. By drawing the energy curve in terms of volume and the Murnaghan equation fitting, the values of equilibrium lattice parameters such as lattice constant and bulk modulus are obtained. Finally, the structural, mechanical properties and molar thermal capacity are compared with experimental results that are in good agreement with each other.

***Keywords**: Electronic Structure, Elastic Constants, High Temperature Gas Reactor, phonon Dispersion*

PACS No. 61 ,63 ,65 ,81

مقدمه

اخیراً ترکیبات توریومی به عنوان سوخت هسته ای در راکتورهای نسل چهارم در مقایسه با سوخت‌های قبلی (اورانیوم)، به دلیل دارا بودن مزایای فیزیکی بهتری از جمله؛ دمای ذوب بالا، مقاومت بالا در برابر خوردگی ، ضریب انبساط گرمایی پایین و رسانندگی گرمایی بالاتر مورد استفاده قرار گرفته اند. به منظور توسعه فن‌آوری‌های چرخهٔ هسته‌ای براساس سوخت‌های کاربیدی، نیتریدی و یا اکسیدی ، شناختن خصوصیات ترموفیزیکی و مکانیکی آن ها حائز اهمیت می‌باشد[۱]. در سال‌های اخیر مطالعات زیادی براساس اصول اولیه، روی ترکیبات توریومی صورت گرفته است . ریچارد و همکاران[۲]، شبه پتانسیلی را تولید کردند و با آن ساختار بلوری توریوم را مورد بررسی قرار دادند.لو

و همکاران [۳] ساختار الکترونی، خواص ترمودینامیکی و مکانیکی نیترید توریوم را با استفاده از اطلاعات دینامیک شبکه مورد مطالعه قرار دادند.آتا و همکاران [٤] خواص مغناطیسی، ساختاری و الکترونی نیترید توریوم را به دست آوردند.

روش و محاسبات

محاسبات فونونی و الکترونی

محاسبات فونونی و الکترونی در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی[۷-۵] با استفاده از بستهٔ نرم افزاری کوانتوم اسپرسو انجام شده است [۸]. نمونه برداری از منطقهٔ اول بریلوئن به صورت یک شبکه (۱۰×۱۰×۱۰) از نقاط شبکه وارون است که از مش‌بندی مونخورست پک استفاده شده است . انرژی جنبشی قطع توابع موج ۳۱۲۹ الکترون ولت می باشد. مقادیر پارامتر های مذکور این اطمینان را به ما می دهد که خطای حاصل در انرژی کل محاسبه شده کمتر از ۱/۳٦ meV/atom است . منحنی‌های پاشندگی فونونی در چارچوب نظریهٔ اختلالی تابعی چگالی نیمه سازگار به دست آمده اند[۹] . ماتریس‌های دینامیکی برای شبکه (۸×۸×۸) از نقاط شبکه وارون و با استفاده از مش بندی مونخورست پک به دست آمده است.

ثابت‌های کشسانی

ثابت‌های کشسانی اطلاعات مربوط به خواص پایداری و مکانیکی جامدات را به وسیلهٔ توصیف رفتار بلورها تحت تغییر تانسورهای کشسانی در اختیار قرار می‌دهد. در مواد با ساختار مکعبی، تنها سه ثابت کشسانی مستقل C_{44}, C_{12}, C_{11} وجود دارد. در این مقاله ثابت‌های کشسانی به وسیلهٔ اندازه گیری شیب شاخه‌های فونونی صوتی در امتداد محدودهٔ طول موج بلند به دست آمده‌اند. مدول حجمی B_0، مدول برشی G، مدول‌های یانگ E، نسبت پواسون v و پارامتر ناهمسانگرد A از طریق روابط زیر محاسبه می‌شوند[۱۰] :

$$B_0 = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (1)$$

$$G = \frac{1}{5}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \quad (2)$$

$$E = \frac{9B_0G}{3B_0 + G} \quad (3)$$

$$v = \frac{3B_0 - E}{6B_0} \quad (4)$$

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (5)$$

توابع ترمودینامیکی

در تقریب شبه هماهنگ، انرژی آزاد هلمهولتز به صورت زیر بیان می‌شود [۱۱]:

$$F(V,T) = E_e(V) + F_{ph}(V,T) \quad (6)$$

در اینجا E_e سهم الکترونی در دمای T= 0 K و F_{ph} سهم فونونی در انرژی آزاد هلمهولتز هستند.

$$F_{ph}(V,T) = k_B T \sum_{jq} \ln[2\sinh(x)] \quad (7)$$

که $x = (h\omega_j(q)/2k_BT)$ و $\omega_j(q)$ فرکانس مد فونونی j ام در نقطهٔ q در منطقهٔ اول بریلوئن می‌باشد. سهم ارتعاشی برای ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت (C_V) از طریق رابطه زیر به صورت مستقیم محاسبه می شود[۱۲] :

$$C_V(T) = k_B \sum_{jp} x^2 \frac{1}{\sinh^2(x)} \quad (8)$$

و معادلهٔ حالت بدین صورت به دست می‌آید :

$$P(V,T) = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T = -\frac{\partial E}{\partial V} - \sum_{jp} \frac{h}{2}\frac{\partial \omega_j(q)}{\partial V}\coth(x) \quad (9)$$

برای محاسبهٔ فشار از طریق معادلهٔ (۹) باید وابستگی حجمی $\omega_j(q)$ را به دست آوریم. بنابراین نمودارهای پاشندگی فونونی را برای حجم های مختلف در دمای T = ۰K محاسبه می‌شود. ضریب انبساط گرمایی حجمی از طریق رابطهٔ زیر تعریف می‌گردد:

$$\alpha_V = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_T \quad (10)$$

پارامتر گرونیسن جزئی، که در ارتباط با ناهماهنگی مربوط به فونون منفرد است، به صورت زیر تعریف می‌شود[۳] :

$$\gamma_j(q) = -\frac{V}{\omega_j(q)}\frac{\partial \omega_j(q)}{\partial V} \quad (11)$$

پارامتر گرونیسن کل، از میانگین وزنی $\gamma_j(q)$ با C_V به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\gamma = \frac{1}{C_V}\sum_{jp} \gamma_j(q)\, C_V(j,q) \quad (12)$$

دمای دبای $\Theta_D(T)$ از طریق ثابت‌های کشسانی با استفاده از سرعت متوسط صوت v_m در داخل شبکه بلوری توسط معادلهٔ زیر قابل محاسبه می باشد[۱۳]:

$$\Theta_D^{el} = \frac{h}{k_B}\left[\frac{3\pi}{4\pi V}\right]^{1/3} v_m \qquad (13)$$

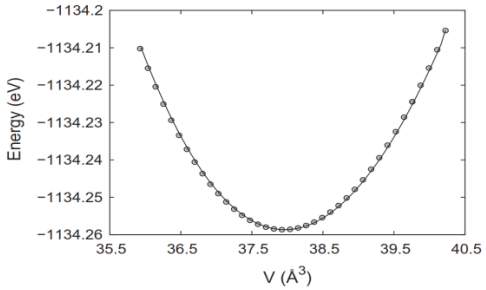
همچنین $\Theta_D(T)$ که نمودار C_V را با استفاده از تقریب دبای برای دماهای پایین برازش می شود، به صورت زیرمحاسبه می‌شود:

$$C_V = \frac{12\pi^4 n k_B}{3\Theta_D^3} T^3 \qquad (14)$$

در اینجا n بیاگرتعداد اتم‌های موجود در سلول واحد است.

بحث و نتایج

ساختارکاربید توریوم از نوع سدیم کلرید (B_1) است. این ساختار تنها دو اتم در یاختهٔ بسیط خود دارد. در شکل۱ پارامتر تعادلی شبکه a_0، مدول حجمی B_0 و مشتق مدول حجمی نسبت به فشار B_0' با استفاده از برازش انرژی کل توسط معادلهٔ حالت درجهٔ چهارم بریچ – مورناگان به دست آمده اند.



شکل ۱: تغییرات انرژی کل بر حسب حجم بلور به وسیلهٔ معادلهٔ حالت درجهٔ چهارم بریچ – مورناگان در دمای صفر کلوین برای کاربید توریوم.

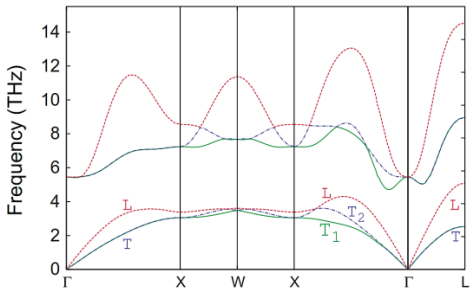
پارامتر تعادلی شبکه a_0 و B_0' محاسبه شده، در توافق خوبی با نتایج نظری و تجربی قبلی هستندکه اطلاعات آن ها در جدول ۱ آمده است [۱۴–۱۸]. جدول ۲ نیز ضرایب کشسانی را با داده های موجود مقایسه می کند. در شکل۲ نمودارهای پاشندگی فونونی در راستای مسیرهای تقارنی مختلف در شرایط دمای صفر کلوین محاسبه شده است. شش مد فونونی در روابط پاشندگی مشاهده می‌کنیم (سه شاخهٔ صوتی و سه شاخهٔ اپتیکی)، این حالت با یک سلول واحد اولیه که حاوی دو اتم است در تطابق می‌باشد. شاخه‌های طولی و عرضی نمودارهای پاشندگی فونونی در شکل ۲ مشاهده می شوند، تأکید می شود که همهٔ فرکانس‌ها مثبت هستند که نشان دهندهٔ پایداری ساختار بلوری می باشد.

جدول۱ : مقایسه میان پارامتر شبکهa_0 (Å) ، مدول حجمیB_0 (GPa) و مشتق آن B'_0 با نتایج تجربی و نظری[۱۵].

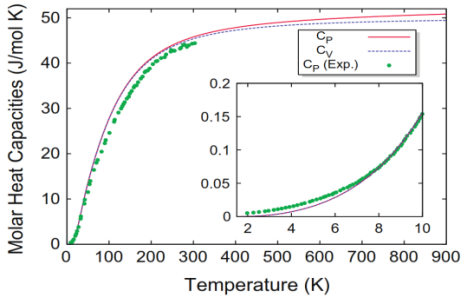
	a_0	B_0	B'_0
کارحاضر	۵/۳۳۵	۱۳۴/۷۸	۳/۰۰۱
کار تجربی	۵/۳۳۴	۱۰۹	۳/۱
کار نظری ۱	۵/۳۴۱	۱۳۴/۳۳	۳/۰۷۱
کار نظری۲	۵/۳۸۸	۱۳۱/۸۹	۲/۷۳

جدول ۲: مقایسه میان ضرایب کشسانی با داده های موجود [۱۵].

منبع	C_{11}	C_{12}	$C44$
کار حاضر	۲۲۵/۲	۸۷/٤٥	٦۷/۳۰
کار نظری ۱	۲۵۲/۲	۹٦/۳	٦۰/۲



شکل ۲: منحنی‌های پاشندگی فونونی برای کاربید توریوم در حجم تعادلی و دمای T= 0 K محاسبه شده است.



شکل ۳: ظرفیت های گرمایی مولی حاصل از فرکانس های فونونی بر حسب دما برای کاربید توریوم (خط چین آبی)، ظرفیت گرمایی در فشار ثابت (خط قرمز) ، ظرفیت گرمایی در فشار ثابت حاصل از داده های مرجع[۲۰].

در شکل ۳ ظرفیت گرمایی مولی به دست آمده از معادلهٔ (۸) ارائه

شده است و همچنین ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت رسم شده است، نتایج حاصل با داده‌های تجربی گزارش شده در مرجع [۱۷] مقایسه شده است. یک بزرگ‌نمایی از محدودهٔ دماهای پایین را در شکل کوچک نشان داده شده که در این محدوده نتایج حاصل با داده‌های تجربی در توافق خوبی هستند.

نتیجه‌گیری

به طور خلاصه، پارامترهای ساختاری، خواص ترمودینامیکی و مکانیکی کاربید توریوم را مورد بررسی قرار داده ایم که داده‌های اساسی برای شناختن هر ماده، بخصوص سوخت هسته‌ای می‌باشند. این خواص به وسیلهٔ دینامیک شبکه در تقریب شبه هماهنگ، به دست آمدند. خواص مکانیکی و ترمودینامیکی از روابط پاشندگی مربوطه به دست آمده است. منحنی‌های پاشندگی فونونی کاربید توریوم با استفاده از محاسبات اصول اولیه ارائه شده است. ثابت‌های کشسانی و ظرفیت‌های گرمایی مولی (C_p, C_v) حاصل روابط پاشندگی می‌باشند که با کارهای نظری و تجربی اخیر مورد مقایسه قرار گرفته که در توافق خوبی با آن ها هستند.

مرجع‌ها

[۱] T Abram, T., & Ion, S. (2008). Generation-IV nuclear power: A review of the state of the science. *Energy Policy*, *36*(12), 4323-4330.

[۲] Richard, N., Bernard, S., Jollet, F., & Torrent, M. (2002). Plane-wave pseudopotential study of the light actinides. *Physical Review B*, *66*(23), 235112.

[۳] Lu, Y., Li, D. F., Wang, B. T., Li, R. W., & Zhang, P. (2011). Electronic structures, mechanical and thermodynamic properties of ThN from first-principles calculations. *Journal of nuclear materials*, *408*(2), 136-141.

[۴] Raymond Atta-Fynn and Asok K %J Physical Review B Ray, *Density functional study of the actinide nitrides.* **76**(11): p. 115101.2007

[۵] Shein, I. R., Shein, K. I., & Ivanovskii, A. L. (2006). First-principle study of B1-like thorium carbide, nitride and oxide. *Journal of nuclear materials*, *353*(1-2), 19-26.

[۶] Bouchet, J., Jollet, F., & Zérah, G. (2006). High-pressure lattice dynamics and thermodynamic properties of Th: An ab initio study of phonon dispersion curves. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, *74*(13), 134304.

[۷] Modak, P., & Verma, A. K. (2011). First-principles investigation of electronic, vibrational, elastic, and structural properties of ThN and UN up to 100 GPa. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, *84*(2), 024108.

[۸] Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... & Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of physics: Condensed matter*, *21*(39), 395502.

[۹] Mahendra Aynyas, Jagdeesh Pataiya, BS Arya, A Singh and SP Sanyal. *Structural and mechanical properties of thorium carbide*. in *AIP Conference Proceedings*. 2015. AIP Publishing.

[۱۰] Moruzzi, V. L., Janak, J. F., & Schwarz, K. (1988). Calculated thermal properties of metals. *Physical Review B*, *37*(2), 790.

[۱۱] McConnell, J. D. C. (1995). MT Dove. Introduction to Lattice Dynamics Cambridge,(Cambridge University Press), 1993. xvii+ 258 pp., Price£ 35. ISBN 0 521 39293 4. *Mineralogical Magazine*, *59*(396), 581-582.

[۱۲] Daroca, D. P., Jaroszewicz, S., Llois, A. M., & Mosca, H. O. (2013). Phonon spectrum, mechanical and thermophysical properties of thorium carbide. *Journal of nuclear materials*, *437*(1-3), 135-138.

[۱۳] Wang, B. T., Zhang, P., Song, H., Shi, H., Li, D., & Li, W. D. (2010). Structural, mechanical, thermodynamic, and electronic properties of thorium hydrides from first-principles. *Journal of nuclear materials*, *401*(1-3), 124-129.

[۱۴] Leopold Gmelin, *Gmelin Handbook of inorganic and organometallic chemistry: Au--Gold*. Vol. 1. 1992: Springer-Verlag.

[۱۵] Gerward, L., Staun Olsen, J., Benedict, U., Itíe, J. P., & Spirlet, J. C. (1986). Structural stability and equation of state of thorium carbide for pressures up to 36 GPa. *Applied Crystallography*, *19*(5), 308-310.

[۱۶] Hubert Schmidbaur and Leopold Gmelin, *Gmelin handbook of inorganic chemistry*. 1987: Springer.

[۱۷] Aydin, S. E. Z. G. İ. N., Tatar, A. Y. N. U. R., & Ciftci, Y. O. (2012). A theoretical study for thorium monocarbide (ThC). *Journal of nuclear materials*, *429*(1-3), 55-69.

[۱۸] R Benz, A Naoumidis, D Brown and Leopold Gmelin, *Thorium: Compounds with nitrogen*. 1987: Springer-Verlag.

[۱۹] L Gerward, Olsen Staun, U Benedict and H Luo, *Compression of ThC to 50 GPa*. 1990, Copenhagen Univ.(Denmark). HC Oersted Inst.

[۲۰] Danan, J. (1975). Chaleur specifique de 2 a 300 K du monocarbure de thorium. *Journal of Nuclear Materials*, *57*(3), 280-282.

تحلیل گرمایی و بررسی کاربرد مدل JMA در شیشه‌های $xMoO_3$-(60-x)V_2O_5-40TeO_2

حسینی، سیده فاطمه؛ سوری، داریوش

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

در کار پژوهشی حاضر، ترکیبات توده‌ای آمورف $xMoO_3$-(60-x)V_2O_5-40TeO_2 با درصدهای مولی مختلف اکسید مولیبدن $(0 \le x \le 60$ mol%) با روش معمول سرمایش مذاب ساخته شده‌اند. نمودارهای گرماسنجی روبشی تفاضلی (DSC) برای این نمونه‌ها در بازه‌ی دمایی (۲۰- °C ۵۰۰) و در نرخ‌های گرمایش مختلف (φ) مورد استفاده قرار گرفت تا بینش دقیقتری در مورد ویژگی‌های کالریمتری آنها حاصل شود. دمای کازمن (T_k) برای شیشه‌های مورد مطالعه تعیین شد. مشخص شد که با افزایش محتوای MoO_3، این دما از ۱۸۶/۸۳ به ۲۷۰/۴۲ درجه سانتی‌گراد افزایش می‌یابد. علاوه بر این، کاربرد مدل جان-مهل-آورامی (JMA) در سینتیک بلورینگی نمونه‌های حاضر بررسی شد و نشان داد که JMA در شرایط غیر همدما معتبر نیست.

واژه های کلیدی: *روش سرمایش مذاب، گرماسنجی روبشی تفاضلی، دمای کازمن* (T_k).

Thermal analysis and investigation of the applicability of JMA model in $xMoO_3$-(60-x) V_2O_5-40TeO_2 glasses

Hosseini, Seyyedeh Fatemeh; Souri, Dariush

Department of Physics, Faculty of Science, Malayer University, Malayer

Abstract

In the present research work, $xMoO_3$-(60-x) V_2O_5-40TeO_2 amorphous bulk compositions with different molar content of MoO_3 ($0 \le x \le 60$ mol%) have been prepared by common melt-quenching method. Differential scanning calorimetry (DSC) of these ternary glasses have been investigated in the range of (20-500 °C) at different heating rates (φ). The Kauzmann temperature (T_k) was determined for the understudied glasses. It was found to increase from 186.83 to 270.42 °C with increasing MoO_3 content. In addition, the applicability of John-Mehl-Avrami (JMA) model to crystallization kinetics of present samples was investigated and showing that JMA was not valid in non-isothermal.

***Keywords**: melt-quenching method, Differential scanning calorimetry (DSC), Kauzmann temperature (T_k).*
PACS No. 65

مقدمه

کشف سیستم‌های جدید که می‌توانند به عنوان عوامل کاربردی در فناوری و زندگی انسان عمل کنند، نیازمند تلاش‌های نظری و تجربی فراوانی است. بر اساس پژوهش‌های انجام گرفته، شیشه‌های تلوریمی به دلیل دارا بودن دمای ذوب پایین، ویژگی غیر نمگیری، گذار فروسرخ خوب، ویژگی‌های الکتریکی و اپتیکی و ساختار مقاوم در برابر شوک‌های گرمایی دارای اهمیت خاصی در ترکیبات آمورف هستن[۱و۲]. گرماسنجی روبشی تفاضلی (DSC) روش مناسبی برای بررسی رفتار شیشه‌ها در نرخ‌های گرمایی متفاوت می‌باشد[۲]. همچنین، مدل جان-مهل-آورامی (JMA) بهترین توصیف را از سینتیک بلورینگی همدما ارائه داده است؛ همین نویسندگان [۳] گذار شیشه‌ای همدما و غیر همدما را در شیشه‌های سلنومولیبدات نقره آلاییده با یدید نقره و همچنین کاربرد مدل JMA گزارش کرده‌اند. نتایج آنها حاکی از وابستگی شدید گذار شیشه‌ای، انرژی فعال‌سازی بلورینگی و ابعاد رشد بلور به AgI این شیشه‌ها است.

تاکنون، مطالعاتی در مورد خواص حرارتی و نوری شیشه‌های $xMoO_3$-(60- x) V_2O_5-40TeO_2 در کارهای اخیر ما [۴و۵]

انجام شده است. بنابراین در کار حاضر، دمای کازمن T_k (یعنی دمای ایده‌آل گذار شیشه‌ای ترمودینامیکی) برای شیشه‌های اکسیدی مورد مطالعه تعیین شد. علاوه بر این، کاربرد مدل JMA در سینتیک بلورینگی مورد آزمایش قرار گرفت، تحلیلی که قبلاً برای شیشه‌های فوق الذکر گزارش نشده بود. این رویکرد می‌تواند بینشی در مورد تاریخچه گرمایی سیستم شیشه‌ای فعلی ارائه دهد و به درک بهتر این مواد برای توسعه عوامل عملکردی پایدار گرمایی کمک کند.

روش ساخت نمونه

در کار پژوهشی حاضر، جهت تهیه شیشه‌های اکسیدی $xMoO_3$-$(60-x)V_2O_5$-$40TeO_2$ (که x دارای مقادیر ۰ تا ۶۰ درصد مولی می‌باشد و شیشه‌های حاصل به اختصار TVMx نامیده می‌شوند)، از ذوب پودرهای اکسیدهای اولیه با درصد خلوص بالا با بهره گیری از روش سرمایش سریع مذاب استفاده شده است که جزئیات آماده‌سازی نمونه را می‌توان از مراجع [٤و٦] دریافت کرد. آزمایشات پراش پرتو x و اندازه‌گیری‌های گرمایی نمونه‌های مذکور، به ترتیب به وسیله پراش پرتو X توسط دستگاه (Diffractometer: SEIFERT3003, CuK_α)، دستگاه گرماسنجی روبشی تفاضلی (DSC. 822, Mettler Toledo, Switzer land) انجام شده‌است.

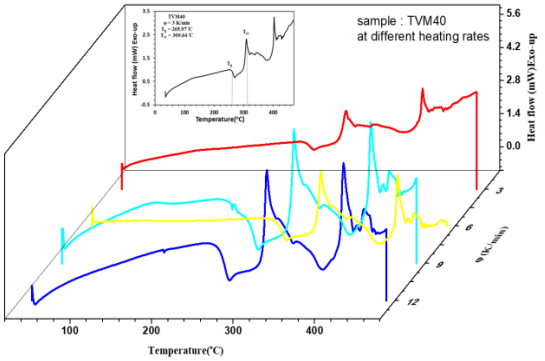
نتایج و بحث

الف: مشخصه‌یابی ساختاری توسط پراش پرتو X

مشخصه یابی پرتو ایکس روی نمونه‌های بالک TVMx به روش پودری انجام شده است که نتایج آن در مرجع شماره (٦) آمده است و عدم وجود قله‌های براگ در این الگوها طبیعت آمورف و غیر بلوری نمونه‌ها را تایید می‌کند[٤و٦].

ب: ملاحظات گرمایی

مناسب‌ترین راه برای تعیین ویژگی‌های گرمایی و دماهای مشخصه در شیشه‌ها، استفاده از آزمایش کالریمتری (گرماسنجی) است که تحت فشار ثابت گاز بی‌اثر انجام می‌شود. منحنی‌های DSC نمونه‌های TVMx در نرخ‌های مختلف گرمایی بررسی شده است. شکل(۱) نمودار (ترموگراف) DSC را برای نمونه‌ی نوعی TVM40 در نرخ‌های گرمایش متفاوت نشان می‌دهد. دماهای T_x و T_{cr} به ترتیب دمای شروع بلورینگی و بلورینگی هستند و به صورت نوعی در تصویر درونی شکل (۱) نشان داده شده‌اند. در این کار، شروع بلندترین قله گرمازا در منحنی‌های DSC دمای شروع بلورینگی(T_x) قلمداد می‌گردد. این منحنی ها با یک پیک گرمازای مربوط به دمای بلورینگی T_{cr} بعد از T_x دنبال می‌شوند. بر اساس این کار و گزارش گرمایی قبلی ما در مورد همین نمونه‌ها [٤]، برای MoO_3 در محدوده ۰ تا ۳۰ درصد مولی، نمودارهای DSC یک قله بلوری را نشان دادند و برای درصد مولی ٤۰ تا ۵۰ دو قله بلوری گرمازای اصلی مشاهده شد. دمای مربوط به قله دوم برای نمونه‌های مورد مطالعه در جدول ۱ گزارش شده است.



شکل ۱ : منحنی DSC نمونه‌ی TVM40 در نرخ‌های گرمایش متفاوت.

ج: دمای کازمن

دمای کازمن (T_k) به عنوان دمایی شناخته می‌شود که در آن آنتروپی مایع (مذاب) و بلور مربوطه برابر می‌شود؛ به عبارت دیگر، می‌توان آن را به عنوان پایین‌ترین حد نظری برای تبدیل شیشه تعبیر کرد و بنابراین، آنتروپی مایع فوق سرد و بلور مربوطه در T_k برابر می‌شود. در دماهای پایین‌تر از T_k، آنتروپی مایع فوق سرد کمتر از مقدار برابر بلوری آن خواهد بود. با این وجود، درک اینکه چگونه یک مایع غیر تناوبی می‌تواند آنتروپی کمتری نسبت به یک بلور منظم با چگالی یکسان داشته باشد، دشوار است. در نتیجه، T_k

مرز پایینی T_g است؛ بنابراین، مایع فوق سرد به دلیل همان آنتروپی بلور در T_k، به شیشه تبدیل می‌شود. با استفاده از پارامتر تردی m، دمای کازمن محاسبه می‌شود تا ارتباطی بین دمای گذار شیشه‌ای اندازه‌گیری شده و دمای گذار شیشه‌ای ایده‌آل ترمودینامیکی T_k کشف شود. از معادله ۱ می‌توان برای پیش‌بینی مقدار T_k استفاده کرد[۷]:

$$T_k = 1.12T_g - 23.17T_g/m + 20.69 \quad (۱)$$

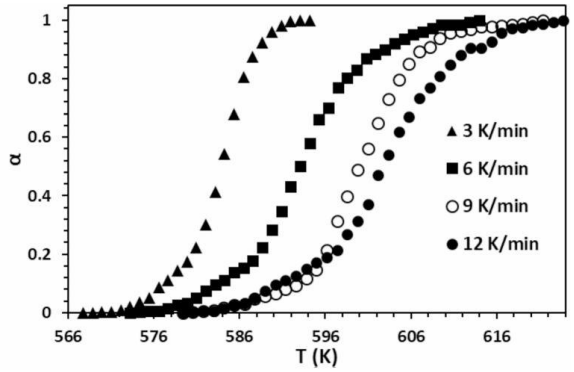
مقادیر دمای گذار شیشه‌ای اندازه‌گیری شده و دمای کازمن به‌دست‌آمده (با استفاده از معادله ۱) در جدول ۱ ارائه شده است. برای نمونه‌های حاضر، مقادیر تردی (m) از کار قبلی ما روی نمونه‌های مورد نظر [٤] محاسبه شده‌اند. مقادیر دمای گذار شیشه‌ای ایده‌آل به‌دست‌آمده (T_k) حدود ۳۰ تا ۵۰ درجه سانتیگراد کمتر از مقادیر T_g اندازه‌گیری شده توسط DSC است که منطقی است. همچنین، مقادیر بدست آمده روند افزایشی از۱۸٦/۸۳ به ۲۷۰/٤۲ درجه سانتیگراد با افزایش محتوای MoO_3 را نشان می‌دهد.

د: بررسی کاربرد مدل JMA برای سینتیک بلورینگی

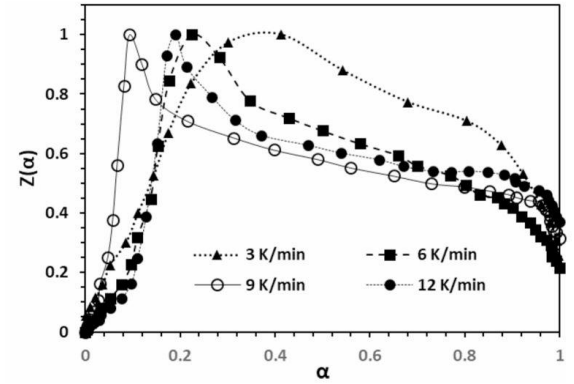
اگرچه مدل جان–مهل–آورامی(JMA) اغلب در حالت همدما استفاده می‌شود، اما می‌تواند در سینتیک بلورینگی غیر همدما نیز معتبر باشد [۸]. معیار سنجش α_m می‌تواند برای تعیین کاربرد JMA در شرایط غیر همدما استفاده شود. برای تعیین معیار α_m، باید منحنی $Z(\alpha)$-α را در هر نرخ گرمایش رسم کرد، که در آن تابع $Z(\alpha)$ توسط معادله (۲) به صورت زیر داده شده است [۱۰–۸]:

$$Z(\alpha) = \Theta(T)\, T^2 \quad (۲)$$

نمودار DSC غیر همدما $\Theta(T)$ (براساس داده‌های DSC جریان گرمای ویژه اندازه‌گیری شده Θ، نرمال شده در هر جرم نمونه بر حسب W/g) به نرخ گرمایش φ بستگی دارد. برای نمونه‌های حاضر، برای بررسی اعتبار مدل JMA، منحنی کسر حجمی فاز بلوری (α) در مقابل T به صورت نوعی در شکل (۲) برای نمونه TVM40 در نرخ‌های گرمایش مختلف در طول آزمایش کالریمتری غیرهمدما نشان داده شده است. با توجه به شکل، مرحله اولیه، آغاز هسته‌زایی است، افزایش میانی نشان دهنده افزایش نرخ هسته‌زایی و مرحله نهایی نشان دهنده اشباع هسته‌زایی و رشد بلور است. برای تأیید کاربرد مدل JMA، باید ماکزیمم $Z(\alpha)$-α مقابل α_m را بدست آورد که طبق گزارشات تایید شده مقدار α_m برای مدل JMA باید در محدوده ۰/٦۵–۰/٦۱ باشد[۸–۱۰]. شکل (۳) نمودار $Z(\alpha)$ نرمال شده (در محدوده ۰/۱) برحسب α برای نمونه TVM40 را نشان می‌دهد که با بهره گیری از داده‌های بدست آمده از نمودار شکل (۲) رسم شده است. همانطور مشاهده می‌کنید ماکزیمم مقدار α_m محدوده ۰/٤–۰/۱ را نشان می‌دهد. نمونه‌های دیگر نیز نتایج مشابهی را نشان دادند. بر اساس مقادیر به‌دست‌آمده از α_m، مدل JMA برای نمونه‌های حاضر در TA غیرهمدما قابل استفاده نیست (همانطور که برای سایر شیشه‌های مولیبدات در مقالات [۳و۱۱] گزارش شده است). بررسی اعتبار مدل JMA برای آزمایش کالریمتری همدما سیستم‌های شیشه‌ای موضوع کارهای آینده ما خواهد بود.



شکل ۲ : نمودارتغییرات α برحسب T، تحت فرآیند غیرهمدما در نرخ‌های گرمایش مختلف برای نمونه TVM40.



شکل ۳ : نمودار نرمال شده $Z(\alpha)$ برحسب α برای نرخ‌های گرمایش مختلف برای نمونه TVM40.

جدول ۱: مقادیر دمای گذار شیشه‌ای (T_g)، دمای بلورینگی (T_{cr}) برای اولین و دومین قله بلورینگی، دمای شروع تبلور (T_x) ، پارامتر تردی (m) و دمای کازمن (T_k) برای نمونه‌های TVMx در نرخ‌های گرمایش مختلف.

sample	φ (K/min)	T_g(°C) [4]	T_x(°C)[4]	T_{cr}(^{0}C) (firstpeak)[4]	T_{cr} (^{0}C) (second peak)	T_k(°C)	m[4]
TVM0	3	226.09	253	265.74	-	186.83	0.6029
	6	229.18	260.5	272.16	-		
	9	231.71	265.4	276.94	-		
	12	232.30	266.6	280.09	-		
TVM10	3	232.15	273.5	290.10	-	180.98	0.4753
	6	234.64	281.4	300.49	-		
	9	237.08	284.6	304.61	-		
	12	236.52	285.8	309.01	-		
TVM20	3	239.24	293.5	320.01	-	176.92	0.5145
	6	241.61	307.8	330.64	-		
	9	244.14	312.2	337.95	-		
	12	246.05	320.6	344.24	-		
TVM30	3	251.41	294.6	303.75	-	201.60	0.6430
	6	253.13	302.3	311.37	-		
	9	255.87	305	317.52	-		
	12	256.25	309.8	320.57	-		
TVM40	3	265.97	289.1	309.64	403.38	226.90	0.5077
	6	265.84	293.5	315.69	409.00		
	9	266.18	295.4	319.69	414.20		
	12	268.46	301.4	322.89	416.60		
TVM50	3	279.64	292.4	317.02	391.40	241.30	0.5183
	6	282.86	299	322.08	396.50		
	9	284.78	303.8	326.57	401.00		
	12	286.26	307.4	330.03	403.40		
TVM60	3	300.44	311.1	330.24	380.40	270.42	0.5607
	6	302.13	314.4	334.30	384.80		
	9	304.80	318.2	337.89	387.80		
	12	305.82	319.4	340.95	390.20		

نتیجه‌گیری

نمونه‌های $xMoO_3$-$(60-x)V_2O_5$-$40TeO_2$ تهیه شده به روش سرمایش سریع مذاب ماهیت آمورف داشتند. دماهای گذار شیشه‌ای و بلورینگی نمونه‌ها توسط آزمایشات گرماسنجی روبشی تفاضلی در نرخ‌های مختلف گرمایش بدست آمد؛ همچنین، دمای کازمن (T_k) (دمای گذار شیشه‌ای ایده‌آل) برای شیشه‌های اکسیدی مورد مطالعه تعیین شد که روند افزایشی از۱۸۶/۸۳ به ۲۷۰/۴۲ درجه سانتیگراد با افزایش محتوای MoO_3 را نشان می‌دهد. علاوه بر این، کاربرد مدل JMA در سینتیک بلورینگی نمونه‌های حاضر بررسی شد و نشان داد که JMA در تحلیل کالریمتری غیر همدما معتبر نیست.

مراجع

[1] D. Souri; "Effect of molybdenum tri-oxide molar ratio on the opti cal and some physical properties of tellurite–vanadate–molybdate glasses"; Measurement 44, (2011) 717–721.
[2] G. Turky, M. Dawy; "Spectral and electrical properties of ternary (TeO_2–V_2O_5–Sm_2O_3) glasses"; Mater. Chem. Phys. 77, (2002) 48–59.
[3] B. Deb and A. Ghosh; "Glass-crystal transition in silver-iodide–doped silver selenomolybdate glasses"; EPL. 104, (2013) 56003.
[4] S.F. Hosseini et al; "Functional thermal stable samples: non-isothermal calorimetric analysis of MoO_3–V_2O_5–TeO_2 oxide glasses"; J. Inorg. Organomet. Mater. Polym. 31, (2021) 2877-2890.
[5] S. F. Hosseini, D. Souri; "Optical properties of tellurovanadate–molybdate glasses"; Mater Electron. 33, (2022) 13506-13515.
[6] D. Souri, M. Elahi; "The dc electrical conductivity of semiconduct ing TeO_2–V_2O_5–MoO_3 bulk glasses"; Phys. Scr. 75(2), (2007) 219–226.
[7] Q. Gao and Z. Jian; "Predicting the Thermodynamic Ideal Glass Transition Temperature in Glass-Forming Liquids"; J Materials. 13, (2020) 2151-2159.
[8] Y Zhi-jie et al; "Applicability of Johnson-Mehl-Avrami model to crystallization kinetics of $Zr_{60}Al_{15}Ni_{25}$ bulk amorphous alloy"; Trans Nonferrous Met. Soc. China. 18, (2008) 138-144.
[9] J. Malek and T. Mitsuhashi; "Testing Method for the Johnson–Mehl–Avrami Equation in Kinetic Analysis of Crystallization Processes"; J. Am. Ceram. Soc. 83, (2000) 2103-2105.
[10] A. A. Joraid; "Limitation of the Johnson–Mehl–Avrami (JMA) formula for kinetic analysis of the crystallization of a chalcogenide glass"; Thermochim. Acta. 436, (2005) 78-82.
[11] B. Deb and A. Ghosh; "Crystallization kinetics in selenium molybdate molecular glasses"; EPL. 95, (2011) 26002.

بهبود سوئیچینگ فروالکتریکی $BiFeO_3$ از طریق آلایش همزمان Co و Eu

شهربانو رحیمی[۱]، سعید جلالی اسدآبادی[۱]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه اصفهان، میدان آزادی

چکیده

در این پژوهش، اثر هم‌آلایشی Co و Eu بر خواص فروالکتریکی $BiFeO_3$ با استفاده از محاسبات اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی بررسی شد. نتایج نشان داد که جانشینی همزمان Eu و Co ضمن حفظ ماهیت فروالکتریکی ماده، موجب کاهش قابل‌توجه ارتفاع سد انرژی چاه دوگانه و در نتیجه بهبود قابلیت سوئیچینگ فروالکتریکی می‌شود. همچنین قطبش خودبه‌خودی نسبت به نمونه خالص کاهش می‌یابد که این رفتار به کاهش فعالیت استریوشیمیایی جفت‌الکترون‌های ناپیوندی Bi و تغییر در اعوجاج‌های ساختاری ناشی از آلایش نسبت داده می‌شود. با وجود کاهش قطبش، افت چشمگیرتر ارتفاع سد انرژی نشان می‌دهد که هم‌آلایشی Co و Eu می‌تواند تعادل مناسبی میان پایداری فروالکتریکی و سهولت وارونگی قطبش ایجاد کند. این نتایج بیانگر آن است که هم‌آلایشی Co و Eu را به‌عنوان راهکاری مؤثر برای مهندسی و بهینه‌سازی عملکرد مواد چندفروئیکی مبتنی بر $BiFeO_3$ معرفی می‌کند.

Improving the Ferroelectric Switchability of $BiFeO_3$ through Co and Eu Co-Doping

Shahrbano Rahimi[1], Saeid Jalali Asad Abadi[1]

[1]Department of Physics, Faculaty of physics, University of Isfahan, Isfahan

Abstract

In this study, the effect of Co and Eu co-doping on the ferroelectric properties of $BiFeO_3$ is investigated using first-principles calculations based on density functional theory (DFT). The results indicate that simultaneous substitution of Eu and Co preserves the ferroelectric nature of the material while significantly reducing the double-well energy barrier, thereby enhancing ferroelectric switching capability. In addition, the spontaneous polarization decreases compared to the pristine sample, which is attributed to the reduced activity of Bi lone electron pairs and structural distortions induced by doping. Despite the reduction in polarization, the more pronounced decrease in the energy barrier suggests that Co and Eu co-doping can establish a favorable balance between ferroelectric stability and ease of polarization reversal. These findings identify Co–Eu co-doping as an effective strategy for engineering and optimizing the performance of $BiFeO_3$-based multiferroic materials.

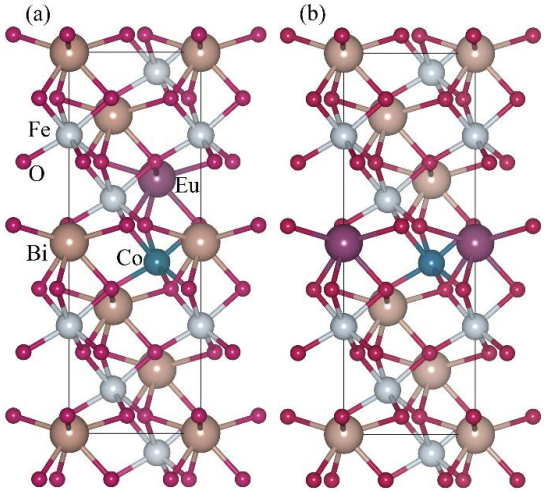
PACS No. (70)

مقدمه

مواد چندتابعی به دلیل برخورداری همزمان از چندین خاصیت فیزیکی و امکان ادغام عملکردهای مختلف در یک ماده، نقش مهمی در کوچک‌سازی و توسعه نسل جدید ادوات الکترونیکی ایفا می‌کنند[۱]. در میان این مواد، ترکیبات بس‌فروئیکی مبتنی بر بیسموت به دلیل سازگاری زیست‌محیطی، هزینه تولید پایین و کاربردهای گسترده در ذخیره‌سازی انرژی، تبدیل انرژی و حسگرها، توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند [۲]. در این میان، $BiFeO_3$ با ساختار لوزی‌رخ R3c یکی از شناخته‌شده‌ترین مواد بس‌فروئیک

است که به دلیل هم‌زیستی نظم فروالکتریک و پادفرومغناطیس در دمای اتاق، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است [۳].

اگرچه $BiFeO_3$ دارای قطبش خودبه‌خودی بزرگی است، اما این ماده با چالش‌هایی نیز روبه‌رو است. از یک سو، تولید نمونه‌های با استوکیومتری دقیق و تک‌فاز دشوار است و از سوی دیگر، فرآیند وارونگی قطبش و کنترل سوئیچینگ فروالکتریکی با پیچیدگی و دشواری همراه است [٤].



شکل۱: آرایش‌های مختلف جانشینی ناخالصی‌ها در ساختار $BiFeO_3$: (a) آرایش ۱ و (b) آرایش ۲. در هر دو آرایش، ااتم Co جایگزین اتم Fe و اتم Eu جایگزین اتم Bi شده‌است.

از این‌رو، مهندسی خواص فروالکتریکی و بهبود رفتار سوئیچینگ $BiFeO_3$ از طریق آلایش هدفمند و اصلاح ساختار الکترونی، به یکی از محورهای مهم پژوهش‌های اخیر تبدیل شده است. در این پژوهش، اثر آلایش همزمان Co و Eu بر خواص ساختاری، الکترونی و فروالکتریکی $BiFeO_3$ با استفاده از محاسبات اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. به‌منظور ارزیابی تأثیر نحوه توزیع ناخالصی‌ها، دو آرایش مختلف جانشینی برای اتم‌های Co و Eu در ساختار در نظر گرفته شد که در شکل ۱ نشان داده شده‌اند. در این مطالعه، پایداری ساختاری، تغییرات قطبش خودبه‌خودی، رفتار سوئیچینگ فروالکتریکی و ارتفاع سد انرژی پتانسیل چاه دوگانه در این دو آرایش آلایشی مورد بررسی قرار گرفت.

قطبش خودبه‌خودی نقش مهمی در بهبود عملکرد و کاربردهای این ساختارها ایفا می‌کند. بر اساس نظریه نوین قطبش، قطبش خودبه‌خودی از رابطه زیر به دست می‌آید [۵–۸]:

$$P_\alpha^{(\lambda)} = \frac{e}{\Omega}\sum_{s}^{atoms} Z_s^{ion} r_s + \left(\frac{ifq}{8\pi^3}\right)\sum_{n=1}^{M}\int_{BZ} dk_\alpha < u_{nk}^{(\lambda)} | \nabla_k | u_{nk}^{(\lambda)} > \quad (۱)$$

که در آن جمله اول سهم بار یونی است که در مکان‌های اتمی r_s قرار گرفته‌اند. f عدد اشغال نواری، M تعداد ترازهای اشغال‌شده و α نیز جهت قطبش را در مختصات دکارتی مشخص می‌کند. λ یک پارامتر بی‌دررو و بدون بعد است که مقدار آن به‌طور پیوسته از صفر تا یک تغییر می‌کند. $\lambda = 0$ حالت ابتدایی دستگاه و $\lambda = 1$ حالت نهایی دستگاه را نشان می‌دهند. عبارت داخل انتگرال معرف فاز بری است [۹].

جزئیات محاسبات

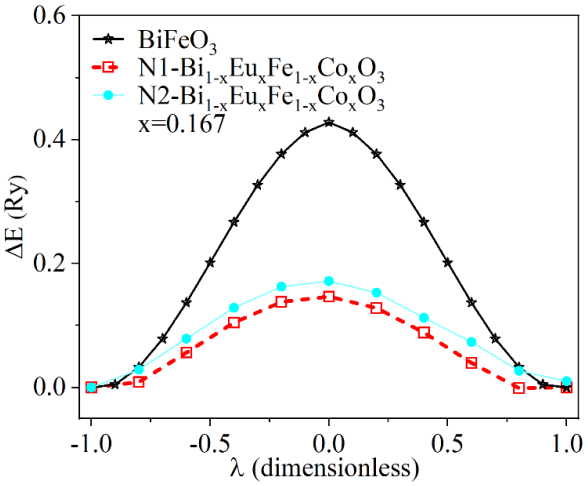
محاسبات اصول اولیه در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) با استفاده از بسته نرم‌افزاری WIEN2k انجام شد [۱۰]. برای توصیف برهم‌کنش تبادلی–همبستگی از تقریب گرادیان تعمیم‌یافته (GGA-PBE) و روش GGA+U استفاده شد [۱۱]. از آنجا که مقدار پارامتر هابارد به نوع سیستم و ترکیب مورد مطالعه وابسته است، مقدار بهینه آن به‌صورت جداگانه برای ساختارهای خالص و آلاییده تعیین شد. برای محاسبه قطبش خودبه‌خودی از کد BERRYPI استفاده شد [۹]. از فاز ساختاری R3m ($R\bar{3}m$) در پایه شش‌گوشه به عنوان ساختار $\lambda = 1$ $(\lambda = 0)$ استفاده کردیم. این دو فاز از نظرتقارن ساختاری به یکدیگر شبیه و دارای ۳۰ اتم در ساختار بلوری هستند.

بحث

انرژی تشکیل آرایش نوع ۱ و نوع ۲ (قسمت (a) و (b) شکل ۱)، به‌ترتیب برابر با ۵/٤۰– و ۵/٦۰–ریدبرگ محاسبه شد که منفی بودن

این مقادیر نشان‌دهنده پایداری ترمودینامیکی و امکان تشکیل ساختارهای آلاییده مورد مطالعه است. همچنین، پایین‌تر بودن انرژی آرایش نوع ۲ نشان می‌دهد که این پیکربندی از نظر انرژی کل پایدارتر است.

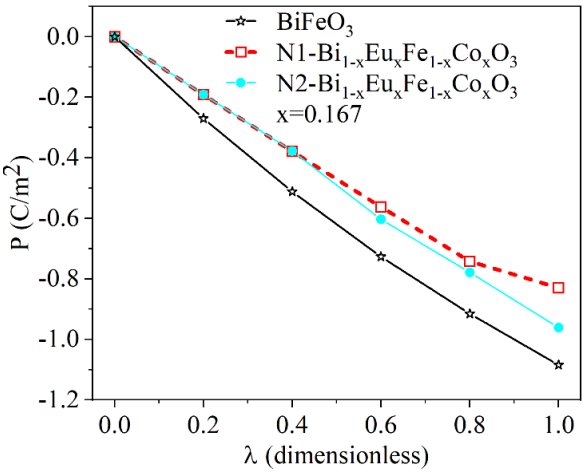
به‌منظور بررسی تأثیر آلایش همزمان Eu و Co بر خواص فروالکتریکی $BiFeO_3$، مسیر تغییر ساختار از فاز متقارن به فاز قطبی از طریق پارامتر بی‌دررووی λ مورد مطالعه قرار گرفت. شکل (۲) مربوط به اختلاف انرژی بین ساختارهای قطبی و متقارن را نشان می‌دهد. ساختار خالص $BiFeO_3$ دارای یک پتانسیل چاه دوگانه مشخص با سد انرژی نسبتاً بزرگ است. این رفتار بیانگر پایداری بالای حالت فروالکتریکی و وجود اعوجاج قطبی قوی در ساختار خالص است.



شکل ۲: اختلاف انرژی به صورت تابعی از اعوجاج ساختاری بین حالت‌های قطبی $\lambda = 1$ و متقارن $\lambda = 0$.

با اعمال آلایش همزمان Eu وCo، ارتفاع سد انرژی به‌طور محسوسی کاهش می‌یابد (شکل۲). مقدار بیشینه اختلاف انرژی از حدود ۰/۴۲ ریدبرگ در $BiFeO_3$ خالص به حدود ۰/۱۷–۰/۱۵ ریدبرگ در نمونه‌های آلاییده کاهش پیدا می‌کند. کاهش ارتفاع سد انرژی نشان می‌دهد که گذار بین دو حالت قطبی به انرژی کمتری نیاز دارد و در نتیجه فرآیند سوئیچینگ فروالکتریکی آسان‌تر خواهد شد. این موضوع از دیدگاه کاربردی اهمیت زیادی دارد، زیرا کاهش انرژی سوئیچینگ یکی از پارامترهای کلیدی در توسعه حافظه‌های فروالکتریکی و ادوات مبتنی بر قطبش الکتریکی است.

از سوی دیگر، نتایج محاسبات قطبش بر پایه نظریه نوین قطبش و روش فاز بری نشان می‌دهد که اگرچه آلایش Eu و Co موجب کاهش مقدار قطبش خودبه‌خودی می‌شود، اما ماهیت فروالکتریکی سیستم همچنان حفظ می‌گردد زیرا شکل چاه دو گانه حفظ شده‌است. مقدار قطبش خودبه‌خودی از حدود ۱/۰۸ C/m^2 برای $BiFeO_3$ خالص به حدود ۰/۸۶ و ۰/۹۸ C/m^2 برای ساختارهای آلاییده کاهش می‌یابد (شکل۳). با وجود این کاهش، مقادیر به‌دست‌آمده همچنان در محدوده فروالکتریک‌های قوی قرار دارند و نشان‌دهنده پایداری قابل توجه فاز قطبی هستند.



شکل ۳: قطبش الکتریکی به صورت تابعی از اعوجاج ساختاری بین حالت‌های قطبی $\lambda = 1$ و متقارن $\lambda = 0$.

منشأ این رفتار را می‌توان در تغییرات ساختار الکترونی و شیمی پیوندها جستجو کرد. در $BiFeO_3$ خالص، قطبش عمدتاً از فعالیت استریوشیمیایی جفت‌الکترون ناپیوندی $Bi\text{-}6s^2$ و همچنین جابه‌جایی یون‌های Fe نسبت به هشت‌وجهی‌های اکسیژن ناشی می‌شود. جایگزینی Eu به جای Bi موجب کاهش فعالیت استریوشیمیایی جفت‌الکترون تنها و در نتیجه کاهش اعوجاج قطبی می‌شود. علاوه بر این، جانشینی Co در جایگاه Fe باعث تغییر هیبریدشدگی

اوربیتال‌های فلز–اکسیژن و بازآرایی پیوندهای Bi–O شده و دامنه جابه‌جایی یون‌های مرکزی را کاهش می‌دهد. برآیند این دو اثر به صورت کاهش قطبش خودبه‌خودی و همزمان کاهش سد انرژی فروالکتریکی ظاهر می‌شود.

نکته قابل توجه آن است که کاهش سد انرژی به‌مراتب بیشتر از کاهش قطبش است. این نتیجه نشان می‌دهد که آلایش همزمان Eu و Co تعادل مناسبی میان پایداری فروالکتریکی و قابلیت سوئیچینگ برقرار می‌کند. به بیان دیگر، اگرچه مقدار قطبش خودبه‌خودی تا حدودی کاهش یافته است، ساختار همچنان قطبش قابل‌توجهی را حفظ می‌کند، در حالی که انرژی لازم برای وارونگی قطبش به‌طور چشمگیری کاهش می‌یابد. چنین رفتاری، این ترکیب را به گزینه‌ای مناسب برای کاربرد در حافظه‌های فروالکتریکی، حسگرها، عملگرها و سایر ادوات چندفروئیکی تبدیل می‌کند.

نتیجه

در مجموع، نتایج نشان می‌دهد که آلایش همزمان Eu و Co روشی مؤثر برای مهندسی سوییچینگ فروالکتریکی در $BiFeO_3$ است. این آلایش ضمن حفظ قطبش خودبه‌خودی قابل توجه، مانع انرژی سوئیچینگ را کاهش داده و شرایط مناسب‌تری برای عملکرد عملی ادوات فروالکتریکی و بس‌فروئیکی فراهم می‌سازد.

بنابراین، ترکیبات $Bi_{1-x}Eu_xFe_{1-x}Co_xO_3$ (x=0.167) را می‌توان به‌عنوان نامزدهای امیدوارکننده‌ای برای نسل جدید مواد چندتابعی با قابلیت کنترل همزمان خواص الکتریکی، مغناطیسی و اپتیکی معرفی کرد.

مرجع‌ها

[۱] M. Fiebig, T. Lottermoser, D. Meier, and M. J. N. R. M. Trassin, "The evolution of multiferroics," vol. 1, no. 8, pp. 1-14, 2016.
[۲] Y. Heo and M. J. A. M. Alexe, "Boosting piezoelectricity under illumination via the bulk photovoltaic effect and the Schottky barrier effect in BiFeO3," vol. 34, no. 5, p. 2105845, 2022.
[۳] S. Rahimi, R. Ebrahimi-Jaberi, F. Jalali-Asadabadi, L. Mollabashi, and S. J. P. R. B. Jalali-Asadabadi, "Influence of (Ba, F) multidoping on structural, magnetic, optical, and electrical properties as well as performance enhancement of multiferroic $BiFeO_3$," vol. 106, no. 11, p. 115205, 2022.
[۴] M. Iliev, M. Abrashev, D. Mazumdar, V. Shelke, A. J. P. R. B. C. M. Gupta, and M. Physics, "Polarized Raman spectroscopy of nearly tetragonal $BiFeO_3$ thin films," vol. 82, no. 1, p. 014107, 2010.
[۵] D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, "Berry phase effects on electronic properties," *Reviews of modern physics*, vol. 82, no. 3, p. 1959, 2010.
[۶] R. Resta, "D. Vanderbilt Theory of Polarization :A Modern Approach, K. Rabe, C. H. Ahn and J.-M. Triscone (Eds): Physics of Ferrelectrics," *Topics Appl. Physics*, vol. 105, p. 117, 2007.
[۷] Q. Niu, "Berry phase effects on electronic properties," in *APS March Meeting Abstracts*, 2007, p. U21. 001.
[۸] Shahrbano Rahimi, Saeid Jalali-Asadabadi, Peter Blaha, Farhad Jalali-Asadabadi, "Nonzero spontaneous electric polarization in metals: Novel predictive methods and applications", In press by Scientific Reports " 2023.
[۹] S. Ahmed, J. Kivinen, B. Zaporzan, L. Curiel, S. Pichardo, and O. Rubel, "BerryPI: A software for studying polarization of crystalline solids with WIEN2k density functional all-electron package," *Computer Physics Communications*, vol. 184, no. 3, pp. 647-651, 2013.
[۱۰] P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran, R. Laskowski, G. K. Madsen, and L. D. J. T. J. o. c. p. Marks, "WIEN2k: An APW+ lo program for calculating the properties of solids," vol. 152, no. 7, 2020.
[۱۱] V. I. Anisimov, I. Solovyev, M. Korotin, M. Czyżyk, and G. J. P. R. B. Sawatzky, "Density-functional theory and NiO photoemission spectra," vol. 48, no. 23, p. 16929, 1993.

بررسی ارتباط آستانه پرکولیشن و ضریب گیج در نانوکامپوزیت‌های پلیمری حاوی نانولوله‌های کربنی با رویکرد میدان میانگین

مظاهری، مجتبی[۱]؛ پاینده پیمان، جواد[۲]؛ احمدی، نیکو[۲]

[۱] گروه علوم پایه، دانشگاه صنعتی همدان، همدان

[۲] گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی همدان، همدان

چکیده

در این مقاله ابتدا با استفاده از روش میدان میانگین مقدار رسانایی کامپوزیت پلیمری/نانولوله کربنی در درصدهای مختلف حجمی محاسبه می شود. در ادامه با پیدا کردن نقطه پرکولیشن، تغییرات رسانایی کامپوزیت با تغییرات کرنش بدست می آید. در نهایت با استفاده از روابط موجود، ضریب گیج سنسور کامپوزیتی محاسبه می شود. نتایج نشان می دهد که می توان به نقطه پرکولیشن ۰.۴۵٪ حجمی رسید و در ادامه سنسورهایی با ضریب گیج حدود ۵۰ طراحی کرد که عملکرد بسیار خوبی می باشد.

واژه های کلیدی: *کامپوزیت پلیمری، نانولوله کربنی، پرکولیشن، سنسور، ضریب گیج*

Investigation of the Relationship Between Percolation Threshold and Gauge Factor in Carbon Nanotube-Reinforced Polymer Nanocomposites Using a Mean-Field Approach

Mazaheri, Mojtaba[۱]; Payandehpeyman, Javad[۲]; Nikoo, Ahmadi[۲]

[۱] *Department of Basic Science, Hamedan University of Technology, Hamedan*

[۲] *Department of Mechanical Engineering, Hamedan University of Technology, Hamedan*

Abstract

In this article, the electrical conductivity of a polymer/carbon nanotube composite is first calculated at different volume fractions using the mean-field method. Next, by determining the percolation threshold, the variation of the composite conductivity with strain is obtained. Finally, the gauge factor of the composite sensor is calculated using the existing relationships. The results show that a percolation threshold of 0.45 vol% can be achieved, and subsequently, sensors with a gauge factor of about 50 can be designed, which indicates very good performance.

***Keywords**: Polymer Composite, Carbon Nanotube, Percolation, Sensor, Gauge Factor*

PACS No. 62, 80, 81

مقدمه

با رشد تکنولوژی و گسترش سیستم های هوشمند، استفاده هر چه بیشتر از سنسورهای مختلف مکانیکی به منظور پایش وضعیت به یک ضرورت تبدیل شده است. استفاده از سنسورهای مقاومتی به دلیل حساسیت زیاد آنها، اطمینان بالا، دوام و عملکرد مناسب آنها بسیار رایج می باشد. سنسورهای مقاومتی فعلی که عموما فلزی می باشند، گران قیمت بوده و در برابر تغییر شکل های زیاد دچار شکست و خرابی می شوند [۱]. با تولید کامپوزیت های پلیمری رسانا در سال های اخیر تحول بسیار زیادی در این شاخه از فناوری ایجاد شده است.

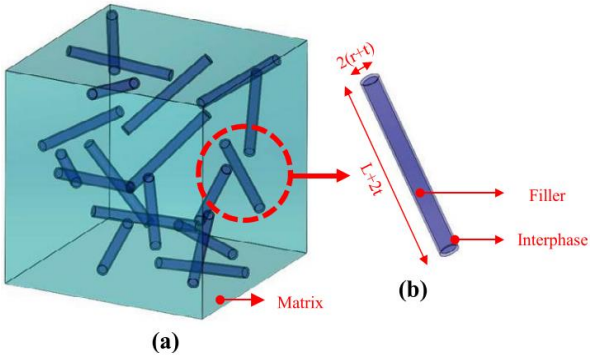
کامپوزیت های پلیمری با انواع نانو پرکننده های جدید مانند گرافن، نانولوله های کربنی و کربن بلک عملا به مقاومت های الکتریکی قابل کنترل تبدیل شده اند [۲]. نکته بسیار مهم در طراحی کامپوزیت های رسانای پلیمری، پیدا کردن نقطه پرکولیشن یا در واقعه مرز عایق–رسانا بودن این ماده می باشد. این نقطه وابستگی بسیار زیادی به پارامترهای مختلف کامپوزیت مانند هندسه پرکننده، مقدار حجمی

پرکننده، نوع ماتریس و مورفولوژی ساختار کامپوزیت دارد. محاسبه نقطه پرکولیشن به روش های عددی و تجربی معمولا بسیار زمانبر و پرهزینه می باشد. استفاده از روش های تحلیلی مانند میدان میانگین در سال های اخیر به این منظور بسیار گسترش پیدا کرده است [۳].

در این مقاله ابتدا در بخش مدل نظری با استفاده از روش میدان میانگین مقدار رسانایی کامپوزیت پلیمری/نانولوله کربنی به صورت تابعی از کسر حجمی پرکننده ها به دست می آید. در ادامه با استفاده از رسانایی موثر کامپوزیت، مقاومت و ضریب گیج کامپوزیت تعریف می شوند. در بخش نتیجه با پیدا کردن نقطه پرکولیشن، تغییرات مقاومت الکتریکی کامپوزیت با تغییرات کرنش بدست می آید. در نهایت با استفاده از روابط موجود، ضریب گیج سنسور کامپوزیتی محاسبه می شود. در بخش نتیجه گیری، جمع بندی مدل سازی و نتایج شبیه سازی ارایه شده است.

مدل نظری: روش میدان میانگین

شکل ۱ (a) عنصر حجم نماینده[۱] (RVE) یک کامپوزیت با پرکننده های نانولوله کربنی را نشان می دهد ناولوه های کربنی به صورت رندوم در داخل حجم توزیع شده اند و هر یک دارای جهت گیری کاتوره ای هستند. نانولوله های کربنی را به صورت استوانه هایی با ارتفاع L و شعاع r فرض می کنیم. ویژگی های فیزیکی و مکانیکی ماتریس پلیمر و پرکننده های نانولوله کربنی با یکدیگر فرق دارند.



شکل ۱ : (a) مدل سازی کامپوزیت پلیمری حاوی نانولوله کربنی (b) مدل سازی نانولوله کربنی یا در نظرگرفتن ناحیه بین فازی، نانولوله کربنی مجتمع [۴].

در هنگام ساخت کامپوزیت، وقتی پرکننده ها در داخل یک ماتریس توزیع می شوند یک لایه روی نانولوله های کربنی را پوشش می دهد که لایه بین فازی نامیده می شود. لایه های بین فازی تاثیر زیادی بر خواص فیزیکی و مکانیکی کامپوزیت دارند. در نظر گرفتن این ویژگی ها در مدل سازی می تواند به نتایج بهتری منجر گردد که با نتایج تجربی انطباق بیشتری دارند. ضخامت لایه بین فازی t است. شکل ۱ (b) یک نانولوله کربنی به شکل استوانه به همراه لایه بین فازی را نشان می دهد به آن نانولوله مجتمع می گوییم. نسبت اندازه، نسبت طول موثر به قطر موثر، پرکننده های مجتمع استوانه ای شکل به صورت $M = \frac{L+2t}{2r+2t}$ تعریف می شود. نانولوله موثر در دو راستای طولی محور استوانه و در راستای عرضی سطح مقطع دارای دو رسانایی مختلف دارد. رسانایی در راستای محور طولی (σ_{com}^{z}) و رسانایی در سطح مقطع (σ_{com}^{x}) را می توان با استفاده از روش میدان میانگین به دست آورد که به صورت زیر نوشته می شوند

$$\sigma_{com}^{z} = \frac{\sigma_{int}(L+2t)[\sigma_f d^2+\sigma_{int}[(d+2t)^2-d^2]]}{\sigma_{int}L(d+2t)^2+2t[\sigma_f d^2+\sigma_{int}[(d+2t)^2-d^2]]} \quad (۱)$$

$$\sigma_{com}^{x} = \frac{\sigma_{int}}{L+2t}\left[L\frac{2\sigma_f d^2+(\sigma_f+\sigma_{int})[(d+2t)^2-d^2]}{2\sigma_{int}d^2+(\sigma_f+\sigma_{int})[(d+2t)^2-d^2]}+2t\right] \quad (۲)$$

با توجه به اینکه نانولوله های کربنی مجتمع در مکان های کاتوره ای و با جهت گیری کاتوره ای در داخل ماتریس توزیع شده اند رسانایی موثر نانوکامپوزیت در جهت های x y و z با یکدیگر برابر هستند. بنابراین، با استفاده از نظریه قطبش میانگین، رسانایی الکتریکی موثر نانوکامپوزیت حاوی نانولوله های کربنی (σ_e) با میانگین گیری بر روی عنصر حجم نماینده به صورت زیر به دست می آید:

$$\langle \vec{J} \rangle = \sigma_e \langle \vec{E} \rangle. \quad (۳)$$

با وارد کردن بخش های مربوط به ماتریس پلیمر، پرکننده های نانولوله کربنی و لایه های بین فازی در معادله بالا و انجام عملیات ریاضی طولانی، می توانیم رابطه کلی زیر را برای رسانایی موثر نانوکامپوزیت به دست آوریم [۴و۵]:

[۱] Representative Volume Element

$$۳\left(۱-\frac{\phi_f}{\alpha}\right)\frac{\sigma_e-\sigma_m}{۲\sigma_e+\sigma_m}+۳\frac{\phi_f}{\alpha}\left[\frac{\sigma_e-\sigma_{com}^z}{\sigma_e+B_{com}^z(\sigma_{com}^z-\sigma_e)}+۴\frac{\sigma_e-\sigma_{com}^x}{\sigma_e+(۱-B_{com}^z)(\sigma_{com}^x-\sigma_e)}\right]=۰ \quad (۴)$$

با توجه به اینکه نسبت اندازه نانولوله های کربنی بسیار بزرگ است، $M \gg ۱$، ضریب واقطبش در راستای محور استوانه به صورت زیر نوشته می شود:

$$B_{com}^z = ۱-\frac{M}{(M^۲-۱)^{\frac{۳}{۲}}}\left[M(M^۲-۱)^{\frac{۱}{۲}}-ArcCoshM\right]. \quad (۵)$$

با استفاده از رابطه (۴۳) رسانایی نانوکامپوزیت را می توانیم محاسبه کنیم.

در داخل کامپوزیت، وقتی دو نانولوله کربنی در فاصله بحرانی تونل زنی (d_c) یا کمتر از یکدیگر قرار دارند الکترون ها می توانند بین نانولوله ها تونل زنی کنند. در واقع این تونل زنی در ناحیه لایه های بین فازی که پوشش نانولوله های کربنی هستند رخ می دهد. رسانایی ناحیه بین فازی (σ_{int}) که ناشی از تونل زنی الکترون ها را به صورت زیر به دست آوریم:

$$\sigma_{int}=\frac{e^۲(۲m\lambda)^{۱/۲}}{\hbar^۲}\exp(-\frac{۲\pi d_c}{\hbar}(۲m\lambda)^{۱/۲}) \quad (۶)$$

که $\hbar$ ثابت پلانک، m و e جرم و بار الکترون و λ ارتفاع سد تونل زنی است. در این مدل، حداکثر مقدار فاصله تونل زنی به صورت $d_c = ۲t$ فرض شده است.

حال مقاومت الکتریکی کامپوزیت به صورت زیر به دست می آید:

$$R=\frac{L_{com}}{\sigma_e S_{com}} \quad (۷)$$

که L_{com} و S_{com} به ترتیب طول و سطح مقطع کامپوزیت است. حال با اعمال فشار روی سطح کامپوزیت، طول کامپوزیت در راستای اعمال فشار کاهش می یابد و در نتیجه میزان درصد حجمی پرکننده ها تغییر می کند و در نتیجه مقاومت الکتریکی کامپوزیت تغییر می کند. بنابراین تغییرات نسبی مقاومت الکتریکی کامپوزیت بر حسب کرنش را می توان به دست آورد.

ضریب گیج معیاری برای ارزیابی عملکرد سنسورهای کرنش مبتنی بر مواد رسانا است و بیانگر میزان حساسیت سنسور نسبت به تغییرات مکانیکی است. ضریب گیج به صورت زیر می شود

$$G_f=\frac{\Delta R}{R\epsilon} \quad (۸)$$

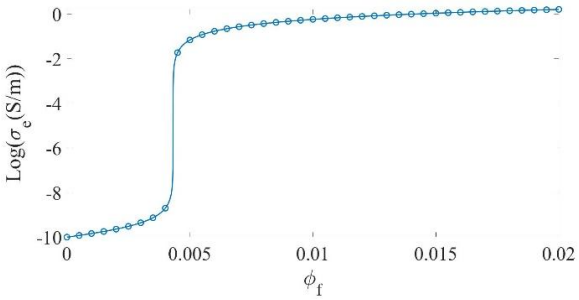
که در آن ΔR تغییرات مقاومت ناشی از اعمال کرنش و ε کرنش مکانیکی وارد شده به کامپوزیت است. مقدار بزرگ‌تر ضریب گیج نشان‌دهنده حساسیت بالاتر سنسور نسبت به تغییرات کرنش می‌باشد. در کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی، تغییرات مقاومت عمدتاً ناشی از تغییر در شبکه رسانای تشکیل‌شده توسط نانولوله‌ها است. اعمال کرنش موجب تغییر فاصله بین نانولوله‌ها، تغییر تعداد مسیرهای رسانا و همچنین تغییر احتمال تونل‌زنی الکترونی بین آن‌ها می‌شود که در نهایت به تغییر قابل توجه مقاومت الکتریکی ماده منجر می‌گردد.

اثر کرنش در مدل حاضر به‌صورت تغییر در ساختار شبکه رسانای CNT ها لحاظ می‌شود. با اعمال کرنش، فاصله بین نانولوله‌ها و نیز کسر حجمی مؤثر آن‌ها تغییر می‌کند و این امر باعث تغییر رسانایی مؤثر کامپوزیت می‌شود. همچنین، هنگامی که فاصله دو CNT از فاصله بحرانی تونل‌زنی کمتر باشد، انتقال بار از طریق تونل‌زنی الکترونی رخ می‌دهد و رسانایی تونلی به‌طور نمایی (غیر خطی) به فاصله بین‌ذره‌ای وابسته است. از این‌رو، کرنش با افزایش فاصله بین CNT ها، رسانایی تونلی را کاهش داده و مقاومت الکتریکی را افزایش می‌دهد؛ به همین دلیل، پاسخ پیزورزیستی و ضریب گیج در نزدیکی آستانه پرکولاسیون به‌طور چشمگیری تقویت می‌شوند. این رفتار غیرخطی به‌ویژه در نزدیکی آستانه پرکولاسیون بیشتر مشاهده می‌شود، زیرا در این ناحیه حتی تغییرات کوچک در فاصله بین نانولوله‌ها می‌تواند موجب تغییرات قابل توجهی در شبکه رسانایی و در نتیجه مقاومت الکتریکی کامپوزیت شود.

نتایج

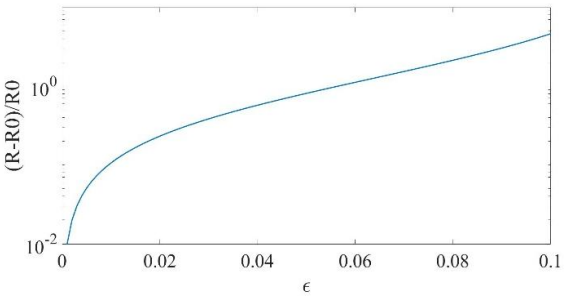
در شکل ۲، تغییرات رسانائی الکتریکی کامپوزیت نسبت به افزایش نانولوله کربنی در یک نمودار نیمه لگاریتمی نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود، کامپوزیت تا قبل از پرکولیشن (حدود ۰.۴۵ درصد حجمی پرکننده) عایق می باشد و با گذر از نقطه پرکولیشن، رسانائی کامپوزیت با یک جهش سریع به سرعت به ناحیه رسانایی نزدیک می شود. این مسئله به دلیل تونل زنی است که به دلیل افزایش پرکننده و نزدیک شدن آنها به یکدیگر اتفاق می افتد. حال با به دست آمدن مقدار پرکولیشن در این طراحی، که درصد حجمی بسیار کمی هم می باشد، به اعمال کرنش بر روی کامپوزیت می پردازیم. در واقع وقتی این کامپوزیت با این درصد بهینه به عنوان

سنسور استفاده شود، با اعمال نیرو دچار کرنش شده و به دلیل تغییرات حجمی پرکننده، رسانائی کامپوزیت تغییر می کند.



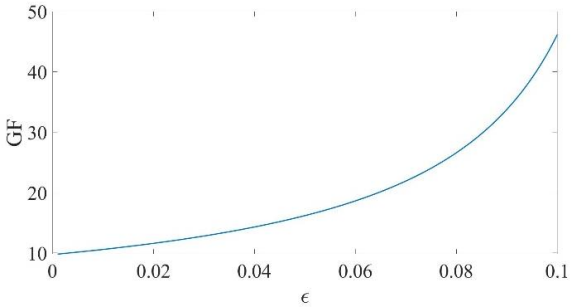
شکل۲ : تغییرات رسانائی الکتریکی کامپوزیت نسبت به افزایش پرکننده

از این مکانیزم تغییر رسانائی که به معنی تغییر مقاومت الکتریکی نیز می باشد، به عنوان سنسور برای تعیین میزان کرنش اعمالی می توان استفاده کرد. تغییرات نسبی مقاومت الکتریکی کامپوزیت در کرنش های مختلف در شکل ۳ به صورت نیمه لگاریتمی نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می شود، با افزایش کرنش یک افزایش سریع در مقاومت الکتریکی داشته و در ادامه تغییرات آن تقریبا خطی می شود.



شکل۳ : تغییرات نسبی مقاومت الکتریکی کامپوزیت نسبت به کرنش محوری در نقطه پرکولیشن

به منظور محاسبه ضریب گیج که مهمترین پارامتر طراحی سنسورهای کرنش می باشد، کافی است از رابطه (۸) استفاده کنیم. نتیجه این محاسبه در شکل ۴ نشان داده شده است که تغییرات ضریب گیج را بر حسب میزان کرنش محوری اعمال شده به آن نشان می دهد. مقدار ضریب گیج ابتدا کم بوده که با افزایش مقدار کرنش این مقدار افزایش ناگهانی دارد و به صورت غیر خطی رفتار می کند.



شکل۴ : تغییرات ضریب گیج کامپوزیت نسبت به کرنش محوری در نقطه پرکولیشن

نتیجه گیری

در مجموع نتایج شبیه‌سازی نشان داد که، رسانایی مؤثر نانوکامپوزیت با افزایش کسر حجمی نانولوله‌های کربنی افزایش یافته و در حدود ۰/۴۵٪ جهش ناگهانی در رسانایی مشاهده می‌شود که همان خود نشان‌دهنده رسیدن به آستانه پرکولاسیون و تشکیل شبکه رسانای پیوسته است. محاسبات در نزدیکی آستانه پرکولاسیون انجام شده است و تغییرات کوچک کرنش نیز موجب تغییرات محسوس در مقاومت الکتریکی و افزایش ضریب گیج می‌شود. بنابراین ناحیه پرکولاسیون نقش تعیین‌کننده‌ای در بهبود عملکرد حسگری داشته و انتخاب مناسب کسر حجمی نانولوله‌ها می‌تواند موجب افزایش قابل توجه حساسیت و کارایی حسگرهای مبتنی بر نانوکامپوزیت‌های CNT شود.

مرجع‌ها

[۱] D. Thuau, C. Ayela, P. Poulin and I. Dufour, "Highly piezoresistive hybrid MEMS sensors", *Sensors and Actuators A: Physical 209*, (۲۰۱٤) ۱٦۱-۱٦۸.
[۲] J. Payandehpeyman, M. Mazaheri, "Geometrical and Physical Effects of Nanofillers on Percolation and Electrical Conductivity of Polymer Carbon-Based Nanocomposites: A General Micro-Mechanical Model", *Soft Matter 19* (۲۰۲۳) ٥۳۰–٥۳۹.
[۳] Y. Wang, G.J. Weng, S.A. Meguid, A.M. Hamouda, "A Continuum Model with a Percolation Threshold and Tunneling-Assisted Interfacial Conductivity for Carbon Nanotube-Based Nanocomposites", *J. Appl. Phys. 115* (۲۰۱٤).
[٤] J. Payandehpeyman, M. Mazaheri, "Micromechanical Modeling of Electrical Conductivity and Percolation in CNT/Polymer Nanocomposites by Considering Morphology: Homogeneous, Agglomerated, and Segregated Structures", *Polym. Compos.* ۱–۲۰ (۲۰۲٥).
[٥] M Farhadpour, J Payandehpeyman, M Mazaheri, N Irandoust, ..., "Significance of transcrystalline layer formation on electrical conductivity of polyamide ٦-carbon nanotube nanocomposites: An experimental and theoretical study", *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* ۱۷۸, (۲۰۲٤) ۱۰۷۹۷۷.

بررسی ویژگیهای الکترونی و اپتیکی ساختار اسپینل $CuMn_2O_4$

یگانه، محبوبه ، [1] ؛ واحدی فخرآباد، داود [2]

[1] دانشگاه کوثر بجنورد، بجنورد، ایران

[2] گروه فیزیک ، دانشگاه نیشابور ،نیشابور، ایران

چکیده

در این مطالعه، خواص الکترونیکی و نوری ساختار اسپینل نرمال $CuMn_2O_4$ در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از تقریب گرادیان تعمیم‌یافته استاندارد (GGA) انجام شد. نتایج الکترونی نشان دهنده ویژگی فلزی این ساختار است که در آن رفتار فلزی و عدم وجود گاف نواری هم در کانال اسپین-بالا و هم در کانال اسپین-پایین مشاهده می‌شود. خواص نوری $CuMn_2O_4$ از طریق بررسی قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک نیز در این پژوهش مورد مطالعه قرار گرفت.

واژه های کلیدی: *اسپینل نرمال، $CuMn_2O_4$ ، نظریه تابعی چگالی، رفتار فلزی، خواص نوری*

Electronic and optical properties of spinel structure of $CuMn_2O_4$

Mahboubeh, Yeganeh[1]; Davoud, Vahedi Fakhrabad [2]

[1] *Kosar University of Bojnord, Bojnord, Iran*
[2] *Physics Department, University of Neyshabur, Neyshabur, Iran*

Abstract

In this study, the electronic and optical properties of the normal spinel structure $CuMn_2O_4$ were investigated within the framework of density functional theory using the standard generalized gradient approximation (GGA). The electronic results indicate the metallic nature of this structure, in which metallic behavior was observed in either the spin-up channel or the spin-down channel. The optical properties of $CuMn_2O_4$ were also studied in this study by examining the real and imaginary parts of the dielectric function.

***Keywords**: Normal spinel, $CuMn_2O_4$, density functional theory, metallic behavior, optical properties.*

PACS No. 70

مقدمه

ساختارهای اسپینل AB_2X_4 عمدتاً متعلق به گروه فضایی Fd3m و (O_h^7; No. 227) با شبکه‌های مکعبی با وجوه مرکزپر (fcc) هستند و برای کاربرد در زمینه‌های مختلف مانند مواد مغناطیسی، کاتالیزورها، سرامیک‌ها، ابرخازن‌ها و غیره جالب توجه هستند [1]. A و B کاتیون‌هایی هستند که می‌توانند در دو مکان مختلف چهاروجهی (T_d) و هشت‌وجهی (O_h) قرار گیرند X [2].می‌تواند دسته‌های مختلفی از مواد، از جمله اکسیدها، سولفیدها، سلنیدها و تلوریدها را پوشش دهد که موقعیت‌های 32e را در موقعیت‌های(u, u, u) وایکاف اشغال می‌کنند.

کاتیون‌ها در مکان‌های A با تقارنT_d ، موقعیت‌های وایکاف 8a (1/8, 1/8, 1/8) و کاتیون‌ها در مکان‌های B با تقارنO_h، موقعیت‌های وایکاف 16d و (1/2, 1/2, 1/2)را اختصاص می‌دهند اسپینل‌ها می‌توانند در انواع مختلفی تشکیل شوند: نرمال، معکوس و مخلوط از هر دو [3]. در اسپینل نرمال، کاتیون‌های دو ظرفیتی و سه ظرفیتی به ترتیب جایگاه‌های T_d و O_h را اشغال می‌کنند، در حالی که در اسپینل‌های معکوس، نیمی از جایگاه‌های O_h توسط کاتیون‌های دو ظرفیتی اشغال شده‌اند و کاتیون‌های سه ظرفیتی جایگاه‌های T_d و بقیه جایگاه‌های O_h را اشغال می‌کنند. در مورد اسپینل نوع مخلوط، کاتیون‌های دو ظرفیتی و سه ظرفیتی، با برآورده کردن نسبت 2:1 تعداد کاتیون‌های سه ظرفیتی به دو ظرفیتی، می‌توانند در جایگاه‌های T_d و O_h توزیع شوند. این ساختارها می‌توانند کاربردهای امیدوارکننده‌ای در کاتالیستها، واکنش‌های اکسیداسیون–احیا، پیل‌های سوختی و باتری‌های فلز–هوا داشته باشد، زیرا حضور همزمان دو فلز واسطه در این ترکیب، خواص بسیار خوبی دارد [4].

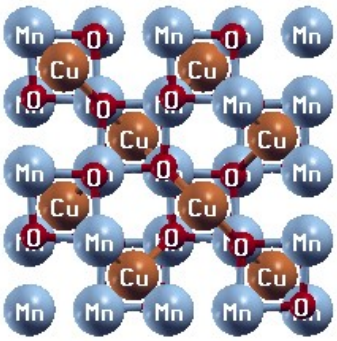
در این پژوهش ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی ساختار اسپینل نرمال $CuMn_2O_4$ با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفته شد.

روش محاسباتی

محاسبات اسپین–پلاریزه با اجرای کد کوانتوم اسپرسو بر اساس نظریه تابعی چگالی انجام شد [5]. از GGA برای توصیف تابعی تبادل–همبستگی و با در نظر گرفتن کتابخانه‌ی پایستگی هنجار (NC)استفاده شد .شبکه‌بندی‌های 10×10×10 K-point از طریق طرح Monkhorst-Pack ، ناحیه‌ی بریلوئن را نمونه‌برداری می‌کنند .انرژی جنبشی و چگالی بار به ترتیب 90 و 720 ریدبرگ در محاسبات مورد استفاده قرار گرفتند .خواص نوری $CuMn_2O_4$بر اساس تقریب RPA با بسته‌ی کوانتوم اسپرسو تخمین زده شد[5].

ویژگی‌های الکترونی $CuMn_2O_4$

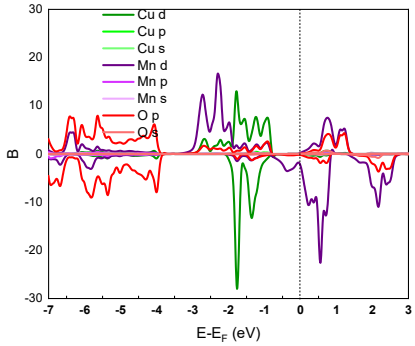
ساختار $CuMn_2O_4$ در شکل 1 نشان داده شده است. این ساختار دارای پارامتر شبکه a=8.29 Å است که با پارامترهای گزارش شده قبلی مطابقت خوبی دارد [6]. چگالی حالت‌های قطبیده اسپینی (DOS)و چگالی حالت‌های جزئی (PDOS) ساختار اسپینل توسط GGA در شکل 2 ارائه شده است.



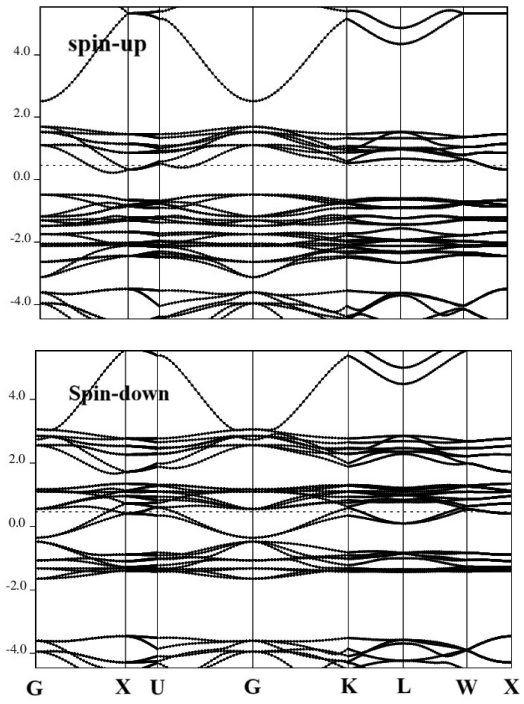
شکل 1: ساختار سلول $CuMn_2O_4$

همانطور که در شکل 2 مشاهده می‌گردد، $CuMn_2O_4$ رفتار فلزی دارد و در حالیکه چگالی حالتهای اسپین–بالا گاف نواری مشاهده نمی‌گردد، چگالی حالتهای اسپین–پایین نیز گاف نواری ندارد و این موضوع دلالت بر رفتار فلزی فلزی در این دو کانال اسپینی است. با بررسی چگالی حالتهای جزئی مشاهده می‌شود که اربیتالهای Mn 3*d* در نوار رسانش هم کانال اسپین–بالا و هم پایین غالب هستند. در حالیکه اربیتالهای Cu 3*d* در کانال اسپین–بالا و Mn 3*d* در کانال اسپین–پایین نوار ظرفیت نزدیک به تراز فرمی مشارکت بیشتری دارند. عدم وجود تقارن بین چگالی حالتهای اسپین–بالا و اسپین پایین اشاره به رفتار مغناطیسی این ساختار اسپینل دارد.

ساختار نواری $CuMn_2O_4$ در کانالهای اسپین– بالا و اسپین–پایین در شکل 3 نشان داده شده است که رفتار فلزی مشاهده شده در نمودار چگالی حالتها را تایید میکند.



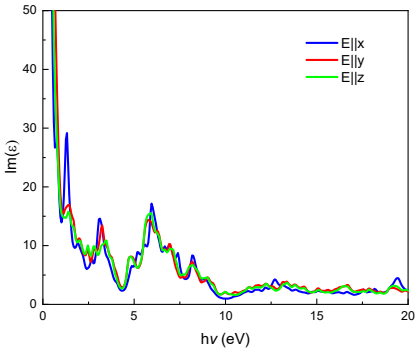
شکل 2: چگالی حالت‌های جزئی(PDOS)



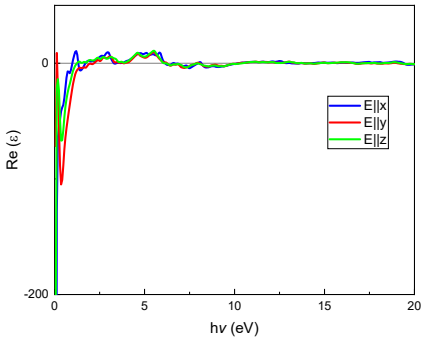
شکل 3: ساختار نواری کانال اسپین-بالا و اسپین-پایین $CuMn_2O_4$

ویژگی‌های نوری

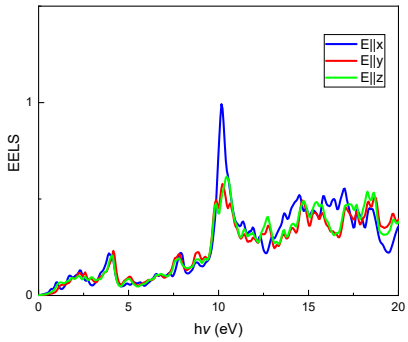
ویژگی‌های نوری این ساختار اسپینل با محاسبه وابستگی فرکانسی بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک $Im[\varepsilon(\omega)]$ برای E||x, E||y و E||z بررسی شد و نتایج در شکل 4 ارائه شد. پیک‌های (شکل 4) اطلاعات مربوط به گذار نوری از حالت‌های اشغال شده به حالت‌های خالی توسط گذارهای بین یا درون باندی را نشان می‌دهند. پیک‌های برجسته در 3.07,1.31 , 5.95 و 8.23 الکترون ولت در E||x مشاهده می‌شوند. در E||y و E||z پیک‌ها تقریباً در همان نقاط هستند. ضریب جذب که با بخش موهومی تابع دی‌الکتریک مشخص می‌شود نشان دهنده جذب بالاتر امواج الکترومغناطیس با انرژی‌های بیان شده در این ساختار اسپینل است. نمودار قسمت حقیقی تابع دی الکتریک $Re[\varepsilon(\omega)]$ در شکل 5 بیانگر رفتار کلی فلزی ساختار مورد نظر است. از این نمودار می‌توان پیک‌های پلاسمون را که برانگیختگی‌های جمعی الکترون ظرفیت هستند و زمانی شکل می‌گیرند که $[\varepsilon(\omega)]=0$ و در حالیکه این نمودار با شیب مثبت تغییر می‌کند و البته $Im[\varepsilon(\omega)]$ در این انرژی کوچک است، را یافت. نمودار نمودار قسمت حقیقی تابع دی الکتریک در انرژهای 1.31, 1.71, 3.48, 7.99 و 10.2 الکترون ولت صفر می‌شود که پس از بررسی شیب نمودار ومقایسه با قسمت موهومی تابع دی الکتریک، انرژی های 1.71, 7.99 و 10.2 به عنوان پیک‌های پلاسمون معرفی می‌گردد که با آنچه در در نمودار EELS محاسبه‌شده در شکل 6 همخوانی دارد.



شکل 4: قسمت موهومی تابع دی الکتریک $CuMn_2O_4$



شکل 5: قسمت حقیقی تابع دی الکتریک $CuMn_2O_4$



نتیجه گیری

در مطالعه خواص الکترونیکی و نوری ساختار اسپینل نرمال $CuMn_2O_4$ در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از تقریب گرادیان تعمیم‌یافته استاندارد (GGA) ویژگی فلزی این ساختار مشاهده شد. همچنین خواص نوری $CuMn_2O_4$ از طریق بررسی قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک نیز در این پژوهش مورد مطالعه قرار گرفت.

.

مرجع‌ها

[1] Sickafus, K.E., J.M. Wills, and N.W. Grimes, *Structure of Spinel*. J. Am. Ceram. Soc., 1999. **82**(12): p. 3279-3292.
[2] Hou, Y.H., et al., *Structural, electronic and magnetic properties of partially inverse spinel CoFe2O4: a first-principles study*. J. Phys. D: Appl. Phys., 2010. **43**: p. 445003.
[3] Mo, S.-D. and W.Y. Ching, *Electronic structure of normal, inverse, and partially inverse spinels in the MgAl2O4 system*. Phys. Rev. B 1996. **54**: p. 16555-16561.
[4] Li, Y., M.S. Wu, and C.Y. Ouyang, *The structural and electronic properties of spinel MnCo2O4 bulk and low-index surfaces: From first principles studies*. Appl. Surf. Sci., 2015. **349**: p. 510-515.
[5] Baroni, S., et al., Rev. Mod. Phys. Rev. , 2001. **73**: p. 515.
[6] Mungse, P., et al., *Copper-manganese mixed oxides: CO2-selectivity, stable and cyclic performance for chemical looping combustion of methane*. Physical Chemistry Chemical Physics, 2014. **16**: p. 19634-19642.

پروب کوانتومی برای زاویه جهت میدان مغناطیسی خارجی سینوسی

پورهاشمی خبیصی، ابوالفضل؛ حسینی*، سیدمحمد؛ نوروزی، میلاد؛ سیدیزدی، جمیله*

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی‌عصر (عج) رفسنجان، رفسنجان

چکیده

در این کار، به مسئله‌ی برآورد جهت زاویه‌ی میدان در یک سامانه‌ی دو کیوبیتی متاثر از یک میدان مغناطیسی خارجی سینوسی پرداخته می‌شود. معیار مورد استفاده برای تعیین حساسیت پارامتر، اطلاعات فیشر کوانتومی (QFI) می‌باشد. یافته‌های ما نشان می‌دهد، برای میدان‌های مغناطیسی ضعیف حساسیت سامانه افزایش می‌یابد. درحالیکه، برای میدان‌های مغناطیسی قوی حساسیت سامانه کوانتومی نسبت به پارامتر مورد نظر با افزایش دما، کاهش پیدا می‌کند. این نتایج می‌تواند در طراحی حسگرهای کوانتومی برای مغناطیس‌سنجی سودمند باشد.

واژه های کلیدی: *اطلاعات فیشر کوانتومی، برآورد کوانتومی، مترولوژی کوانتومی.*

Quantum probe for the direction angle of a sinusoidal external magnetic field

Pourhashemi-Khabisi, Abolfazl; Hosseiny, Seyed Mohammad*; Norouzi, Milad; Seyed-Yazdi, Jamileh*

Department of Physics, Vali-e-Asr University of Rafsanjan, Rafsanjan, Iran.

Abstract

In this work, we address the problem of estimating the field angle direction in a two-qubit system affected by an external sinusoidal magnetic field. The criterion used to determine the sensitivity of the parameter is the quantum Fisher information (QFI). Our findings show that for weak magnetic fields, the sensitivity of the system increases. While for strong magnetic fields, the sensitivity of the quantum system to the parameter of interest decreases with increasing temperature. These results can be useful in the design of quantum sensors for magnetometry.

***Keywords**: Quantum Fisher Information, Quantum Estimation, Quantum Metrology.*

PACS No. ۷٤

۱. مقدمه

مکانیک کوانتومی نه تنها به عنوان یک نظریه بنیادی و یک فناوری جدید در حال پیشرفت است بلکه هدفش توسعه فناوری‌های نوین یا بهبود فناوری‌های موجود فعلی با پیوند منابع کوانتومی و پدیده‌های کوانتومی است. برخی از جنبه‌های فناوری کوانتومی، مانند ارتباطات کوانتومی، محاسبات کوانتومی و مترولوژی[۱] کوانتومی، قدرت زیادی را در تئوری و آزمایشگاه برای رهبری انقلاب صنعتی بعدی نشان داده‌اند. مترولوژی کوانتومی بر اندازه‌گیری‌های دقیق پارامترهای داده شده با استفاده از سامانه‌های کوانتومی و منابع کوانتومی تمرکز دارد. برآورد پارامتر کوانتومی، نظریه‌ای برای مترولوژی کوانتومی است و کران کوانتومی کرامر–رائو، ابزار ریاضی مورد مطالعه برای برآورد پارامتر کوانتومی است [۱]. در کران کوانتومی کرامر–رائو، اطلاعات فیشر کوانتومی[۲]

[۱] Quantum metrology

[۲] Quantum Fisher information

کمیت‌های کلیدی هستند که نشان‌دهنده حد دقت برای برآوردهای تک پارامتری و چند پارامتری هستند. در سال‌های اخیر، چندین بررسی برجسته در مورد مترولوژی کوانتومی و برآورد پارامتر کوانتومی، از دیدگاه‌های مختلف ارائه شده است، از جمله توسط جیووانتی و همکارانش [۲]، مواردی که توسط پاریس و همکاران [۳] حسینی و همکاران [٤] و توث و همکاران [٥]، و توسط براون و همکارانش در مورد مترولوژی کوانتومی کوانتومی [٦] توسط پزه و همکاران [۷] و هوانگ و همکاران [۸] و دگن و همکاران در مورد حسگری کوانتومی [۹] ارائه شده است. هدف این مقاله این است سامانه دو کیوبیتی مبتنی بر مدل هایزنبرگ متأثر از دو اندرکنش مغناطیسی دزیالوشینسکی–موریا (DM) و کاپلان–شختمن–انتین–وهلمن–آهارونی ($KSEA$) تحت تأثیر یک میدان مغناطیسی خارجی سینوسی که زاویه (جهت) میدان مغناطیسی (θ)، با استفاده از نظریه برآورد پارامتر و از طریق اطلاعات فیشر کوانتومی برآورد شود.

۲. اطلاعات فیشر کوانتومی

اطلاعات فیشر کوانتومی (QFI) دقت نهایی برآورد یک پارامتر از یک حالت کوانتومی را کمّی می‌کند و می‌تواند به عنوان یک معیار قابلیت اطمینان از یک سامانه کوانتومی به عنوان یک حسگر کوانتومی در نظر گرفته شود [۱۰]. نابرابری کرامر–رائو[۳] در مترولوژی کوانتومی، حد دقت برآورد پارامتر را توصیف می‌کند. در یک سوی این نابرابری، دقت برآورد قرار دارد که بیانگر تفاوت بین مقدار واقعی و مقدار برآورد زده شده یک پارامتر است. در سوی دیگر نابرابری، کمیتی به نام اطلاعات فیشر کوانتومی ظاهر می‌شود که کران پایین دقت برآورد را بر حسب تعداد تکرارهای اندازه‌گیری تعیین می‌کند، بدین ترتیب، نابرابری کرامر–رائو به صورت زیر حاصل می‌شود [٤]:

$$\Delta\alpha \geq \frac{1}{\sqrt{F_Q(\alpha)}} \qquad (۱)$$

...که کوچکترین تغییر قابل تشخیص پارامتر ناشناخته α را در اختیار قرار می‌دهد. بر اساس نظریه برآورد کوانتومی، افزایش اطلاعات فیشر کوانتومی به معنای بهبود دقت برآورد پارامتر α است. اطلاعات فیشر کوانتومی $F_Q(\alpha)$ مربوط به پارامتر α، متناظر با تجزیه طیفی یک ماتریس چگالی، به صورت زیر تعریف می‌شود [٤]:

$$F_Q(\alpha)=\sum_i \frac{(\partial_\alpha \lambda_i)^2}{\lambda_i}+4\sum_{i\neq j}\frac{(\lambda_i+\lambda_j)^2}{\lambda_i+\lambda_j}|\langle\varphi_i|\partial_\alpha\varphi_j\rangle|^2 \qquad (۲)$$

که در این جا $\lambda_{i,j}$ و $|\varphi_{i,j}\rangle$ به ترتیب ویژه مقادیر و ویژه بردارهای ماتریس چگالی هستند.

۳. مدل

یک سامانه فیزیکی دوکیوبیتی تشکیل شده از زنجیرهٔ هایزنبرنگ XYZ تحت تأثیر یک میدان مغناطیسی خارجی ناهمگن سینوسی، متأثر از اندرکنش‌های DM و $KSEA$ را فرض کنید که این سامانه توسط هامیلتونی به صورت زیر است [۱۱]:

$$H_N = H_H + H_B + H_{DM} + H_{KSEA}, \qquad (۳)$$

H_H مربوط به اندرکنش‌های تبادل اسپین هایزنبرگ می‌باشد و H_B به عنوان هامیلتونی زیمن که نشان‌دهنده تأثیر میدان مغناطیسی خارجی ناهمگن بر روی سامانه است. هم چنین، H_{DM} و H_{KSEA} به ترتیب نشان‌دهنده اندرکنش‌های مغناطیسی DM و $KSEA$ می‌باشند. هامیلتونی رابطه (۱۳) را می‌توان به صورت زیر نوشت:

(٤)

$$H_N=\sum_{i=1}^{N-1}\{J_x\hat{\sigma}_i^x\otimes\hat{\sigma}_{i+1}^x+J_y\hat{\sigma}_i^y\otimes\hat{\sigma}_{i+1}^y+J_z\hat{\sigma}_i^z\otimes\hat{\sigma}_{i+1}^z$$
$$+B_i.(\sigma_i\otimes I_2)+B_{i+1}.(I_2\otimes\sigma_{i+1})+D.(\sigma_i\times\sigma_{i+1})+\sigma_i.\Gamma.\sigma_{i+1}\},$$

اندرکنش بین مکان‌های اسپین توسط ضرایب جفت اسپین–اسپین حقیقی در امتداد جهت‌های x,y,z تعیین می‌شوند، که توسط J_K برای $k=x,y,z$ نشان داده می‌شوند، جفت‌شدگی پادفرومغناطیس با مقادیر مثبت J_K است. هم چنین، $B_i=(B_x,B_y,B_z)$ چگالی شار مغناطیسی است که به شکاف زیمن در سایت اسپین i–ام کمک می‌کند. بردار اندرکنش D_m با $D=(D_x,D_y,D_z)$ نمایش داده می‌شود که مشخص کننده جفت‌شدگی تبادل پادمتقارن است که وظیفه جفت کردن مدار اسپین در موارد خاص می‌باشد. علاوه‌براین، اندرکنش $KSEA$ با Γ نمایش داده می‌شود که بیانگر اندرکنش متقارن ناهمسانگرد است، در این اندرکنش جهت‌گیری اسپین‌ها و

[۳] Cramér-Rao

تقارن‌های مکانی نقش ایفا می‌کند. Γ به صورت رابطه زیر مشخص می‌شود:

$$\Gamma=\begin{pmatrix}0 & \Gamma_z & \Gamma_y\\ \Gamma_z & 0 & \Gamma_x\\ \Gamma_y & \Gamma_x & 0\end{pmatrix}, \quad (۵)$$

با در نظر گرفتن هامیلتونی (۳) می‌توان به شکل اصلاح‌شده‌ای که برای هر جفت اسپین متوالی قابل اعمال است، به فرم ماتریسی زیر تعریف نمود:

(۶)

$$H=\begin{pmatrix}J_z+B(\cos\theta+\sin\theta) & 0 & 0 & -2i\Gamma_z+J_x-J_y\\ 0 & -J_z+B(\cos\theta-\sin\theta) & 2iD_z+J_x+J & 0\\ 0 & -2iD_z+J_x+J_y & -J_z-B(\cos\theta-\sin\theta) & 0\\ 2i\Gamma_z+J_x-J_y & 0 & 0 & J_z-B(\cos\theta+\sin\theta)\end{pmatrix},$$

در رابطه فوق، θ زاویه‌ای است که میدان مغناطیسی خارجی B با یک محور مرجع می‌سازد. این زاویه جهت میدان مغناطیسی را نسبت به محور مختصات مشخص می‌نماید. این زاویه در توصیف جهت و تأثیر میدان مغناطیسی بر سامانه فیزیکی مورد بحث نقش مهمی دارد. چهار ویژه مقدار برای هامیلتونی به صورت مشخص می‌شود:

$$\begin{aligned}E_{1,2}&=\pm K_1+J_z\\ E_{3,4}&=\pm K_1-J_z\end{aligned} \quad (۷)$$

به عبارتی برای مقدارهای K_1 و K_2 خواهیم داشت:

$$K_1=\sqrt{k_1^2+B^2(\cos\theta+\sin\theta)^2} \quad (۸)$$

$$K_2=\sqrt{k_2^2+B^2(\cos\theta-\sin\theta)^2}$$

و مقدارهای k_1 و k_2 هم مشخص است:

$$k_1=\sqrt{(J_x-J_y)^2+4\Gamma_z^2} \quad (۹)$$

$$k_2=\sqrt{(J_x+J_y)^2+4D_z^2} \quad (۱۰)$$

عملگر چگالی سامانه به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\rho_T=\frac{1}{Z}e^{\frac{-\hat{H}}{k_BT}} \quad (۱۱)$$

که در آن $Z=Tr[\exp(\frac{\hat{H}}{K_BT})]$ تابع پارش با ثابت بولتزمن k_B است (که برای ساده‌سازی $k_B=1$ در نظر گرفته شده است).

با استفاده از هامیلتونی (۳) و عملگر چگالی (۱۱)، ماتریس چگالی یا حالت سامانه زیر را در تعادل گرمایی بدست می‌آوریم:

$$\rho_T=\begin{pmatrix}a^- & 0 & 0 & c\\ 0 & b^- & d & 0\\ 0 & d^* & b^+ & 0\\ c^* & 0 & 0 & a^+\end{pmatrix}, \quad (۱۲)$$

که در آن عناصر غیر صفر به صورت زیر نوشته می‌شوند:

$$a^{\pm}=\frac{e^{\frac{-J_z}{T}}}{\eta}[[\cosh(\frac{K_1}{T})\pm B(\cos\theta+\sin\theta)/K_1]\vartheta_1] \quad (۱۳)$$

$$b^{\pm}=\frac{e^{\frac{J_z}{T}}}{\eta}[[\cosh(\frac{K_2}{T})\pm B(\cos\theta-\sin\theta)/K_2]\vartheta_2] \quad (۱۴)$$

$$c=-\frac{e^{\frac{-J_z}{T}}}{\eta}[[(-2i\Gamma_z+J_x-J_y)/K_1]\vartheta_1] \quad (۱۵)$$

$$d=-\frac{e^{\frac{-J_z}{T}}}{Z}[[(2iD_z+J_x+J_y)/K_2]\vartheta_2] \quad (۱۶)$$

مقدارهای $\vartheta_{1(2)}$ و Z به صورت زیر در نظر گرفته می‌شوند:

$$\vartheta_{1(2)}=\frac{\sinh(K_{1,(2)})}{T} \quad (۱۷)$$

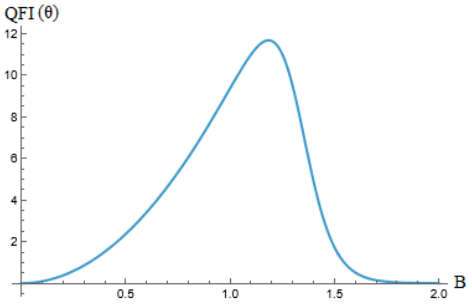
$$Z=2\{e^{\frac{-J_z}{T}}\cosh(\frac{K_1}{T})+e^{\frac{-J_z}{T}}\cosh(\frac{K_2}{T})\} \quad (۱۸)$$

۴. نتایج و بحث

با توجه به رابطه ماتریس چگالی (۱۲) و با استفاده از رابطه (۲)، اطلاعات فیشر کوانتومی را با توجه به جهت زاویه میدان مغناطیسی، برآورد می‌کنیم. در شکل (۱) نمودار برآورد جهت زاویه میدان مغناطیسی بر حسب میدان مغناطیسی مشاهده می‌شود. برای میدان‌های مغناطیسی ضعیف ($B<1.2$) جهت زاویه میدان مغناطیسی منجر به بهبود برآورد حساسیت سامانه می‌شود، ولی برای میدان‌های مغناطیسی قوی ($B>1.2$) حساسیت سامانه کوانتومی نسبت به پارامتر جهت زاویه میدان مغناطیسی کاهش پیدا می‌کند.

از رابطه (۱) مشخص می‌شود. هرچه $F_Q(\theta)$ بزرگتر باشد، حساسیت سامانه به تغییرات زاویه میدان مغناطیسی بیشتر و دقت برآورد بالاتر است. وابستگی $F_Q(\theta)$ به شدت میدان مغناطیسی بررسی شده است، داده‌ها نشان می‌دهند که با افزایش میدان مغناطیسی، مقدار $F_Q(\theta)$ به شدت کاهش می‌یابد، کاهش اطلاعات فیشر کوانتومی در میدان‌های قوی ناشی از غلبه جمله زیمن، افزایش شکاف انرژی، در نتیجه کاهش نرخ تغییر حالت نسبت به زاویه میدان مغناطیسی است، در نتیجه حساسیت سامانه (دقت برآورد) به

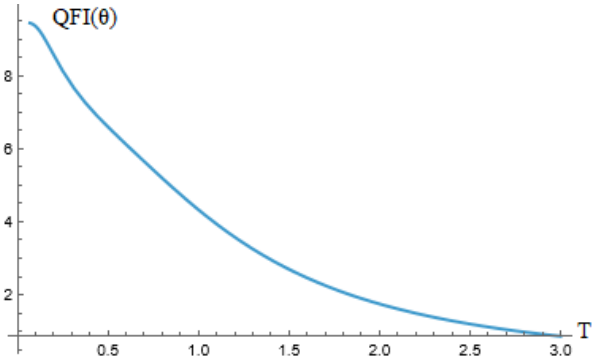
شدت افت می‌کند. هرچه میدان مغناطیسی قوی‌تر باشد، حساسیت سامانه به تغییرات زاویه میدان کمتر می‌گردد.



شکل (۱): نمودار برآورد اطلاعات فیشر کوانتومیِ زاویه میدان مغناطیسی برحسب میدان مغناطیسی، زمانی که مقادیر به صورت زیر مشخص می‌شوند:

$$Dz=0,\Gamma z=0,Jx=0.8,Jy=0.5,Jz=0.3,\theta=\pi/4,T=0.1$$

در شکل (۲) برآورد زاویه جهت میدان مغناطیسی بر حسب دما ترسیم شده است، حساسیت سامانه کوانتومی با توجه به جهت زاویه میدان مغناطیسی با افزایش دما کاهش پیدا می‌کند پس در نتیجه حساسیت سامانه (دقت برآورد) با افزایش دما کاهش پیدا می‌کند و به مانند میدان مغناطیسی افت می‌کند. بنابراین برای برآورد دقیق زاویه میدان بهترین روش پایین نگه داشتن دما تا حد ممکن است. افزایش دما مانند یک نوفه آماری عمل کرده و اطلاعات فیشر کوانتومی را از بین می‌برد.



شکل۲: نمودار تغییرات اطلاعات فیشر کوانتومی بر حسب دما، که مقادیر به صورت زیر مشخص می‌شوند:

$$B=1,Dz=0,\Gamma z=0,Jx=0.8,Jy=0.5,Jz=0.3,\theta=\pi/4,$$

۵. نتیجه‌گیری

در این مقاله، حساسیت حالت کوانتومی یک سامانه دو کیوبیتی مبتنی بر مدل هایزنبرگ متأثر از دو اندرکنش مغناطیسی دزیالوشینسکی–موریا (DM) و کاپلان–شختمن–انتین–وهلمن–آهارونی (KSEA) تحت تأثیر یک میدان مغناطیسی خارجی سینوسی نسبت به تغییرات جهت زاویه میدان مغناطیسی با استفاده از اطلاعات فیشر کوانتومی مورد بررسی قرار گرفت. هدف اصلی، تعیین میزان وابستگی حالت سامانه به پارامتر زاویه میدان مغناطیسی و یافتن شرایط بهینه برای برآورد دقیق این زاویه بود. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش شدت میدان مغناطیسی و همچنین با افزایش دما، مقدار اطلاعات فیشر کوانتومی به طور چشمگیری کاهش می‌یابد. بهترین شرایط برای برآورد دقیق زاویه میدان مغناطیسی، در محدوده میدان‌های ضعیف و قوی و دما مشخص شد، این قابلیت در حوزه‌های حسگری کوانتومی کاربرد دارد.

۶. مرجع‌ها

[۱] Liu, J., Yuan, H., Lu, X. M., & Wang, X. (۲۰۲۰). Quantum Fisher information matrix and multiparameter estimation. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, ۵۳(۲), ۰۲۳۰۰۱.

[۲] Giovannetti, V., Lloyd, S., & Maccone, L. (۲۰۰٤). Quantum-enhanced measurements: beating the standard quantum limit. Science, ۳۰٦(۵۷۰۰), ۱۳۳۰-۱۳۳٦.

[۳] Giovannetti, V., Lloyd, S., & Maccone, L. (۲۰۱۱). Advances in quantum metrology. *Nature Photonics*, *5*(٤), ۲۲۲-۲۲۹.

[٤] Paris, M. G. (۲۰۰۹). Quantum estimation for quantum technology. International Journal of Quantum Information, ۷(□□□□۰۱), ۱۲۵–۱۳۷.

[۵] Hosseiny, S. M., Seyed-Yazdi, J., Norouzi, M., & Livreri, P. (۲۰۲٤). Quantum teleportation in Heisenberg chain with magnetic-field gradient under intrinsic decoherence. Scientific Reports, ۱٤(۱), ۹٦۰۷.

[٦] Braun, D., Adesso, G., Benatti, F., Floreanini, R., Marzolino, U., Mitchell, M. W., & Pirandola, S. (۲۰۱۸). Quantum-enhanced measurements without entanglement. Reviews of Modern Physics, ۹۰(۳), ۰۳۵۰۰٦.

[۷] Pezze, L., Smerzi, A., Oberthaler, M. K., Schmied, R., & Treutlein, P. (۲۰۱۸). Quantum metrology with nonclassical states of atomic ensembles. Reviews of Modern Physics, ۹۰(۳), ۰۳۵۰۰۵.

[۸] Huang, J., Wu, S., Zhong, H., & Lee, C. (۲۰۱٤). Quantum metrology with cold atoms. sensors, ٤۱, ٤٤.

[۹] Degen, C. L., Reinhard, F., & Cappellaro, P. (۲۰۱۷). Quantum sensing. Reviews of modern physics, ۸۹(۳), ۰۳۵۰۰۲.

[۱۰] Beckey, J. L., Cerezo, M., Sone, A., & Coles, P. J. (۲۰۲۲). Variational quantum algorithm for estimating the quantum Fisher information. Physical Review Research, ٤(۱), ۰۱۳۰۸۳.

[۱۱] Ali, A., Al-Kuwari, S., Rahim, M. T., Ghominejad, M., Ali, H., & Haddadi, S. (۲۰۲٤). Nonclassical characteristics in spin-۱/۲ Heisenberg XYZ model with added DM and KSEA interactions under sinusoidal magnetic field: Hierarchy of quantum resources. *arXiv e-prints*, arXiv-۲٤۰۵.

توسعه مدل مبتنی بر یادگیری ماشین برای پیش‌بینی رسانایی یونی در الکترولیت‌های غیرآبی

علیزاده ، سارا[۱] ؛ گشمرد، حسن[۲] ؛ هاشمی فر، سید جواد[۲] ؛ رضایی رکن آبادی، محمود[۱]

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

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

رسانایی یونی الکترولیت‌ها عامل تعیین‌کننده در عملکرد الکتروشیمیایی باتری‌های لیتیوم-یون است. روش‌های سنتی آزمون و خطا و مدل‌سازی‌های مبتنی بر مکانیک کوانتومی مانند (DFT) به دلیل محدودیت‌های ذاتی و هزینه محاسباتی بالا، کارایی لازم را برای غلبه بر چالش‌های فعلی ندارند. در این پژوهش، با بهره‌گیری از پارادایم «علم مواد داده‌محور»، یک مدل پیش‌بینی مبتنی بر الگوریتم XGBoost توسعه یافت. مجموعه داده‌ای استاندارد و پاک‌سازی‌شده از مقالات تجربی معتبر گردآوری و پیش‌پردازشی شد. ارزیابی مدل بر روی داده‌های آزمون، ضریب R^2 برابر با ۰/۹۸۱٤ و ریشه میانگین مربعات خطا (RMSE) برابر با ۰/۵۲۲۰ را نشان داد که حاکی از دقت مناسب و عدم بیش‌برازش مدل است. تحلیل اهمیت ویژگی‌ها نشان داد که «نوع کاتیون فلزی» و «ساختار آنیون نمک» مهم‌ترین عوامل مؤثر بر رسانایی یونی هستند، در حالی که دما و نوع حلال نقش‌های تعدیل‌کننده دارند. مدل توسعه‌یافته در این پژوهش قادر است به عنوان ابزاری کارآمد برای طراحی سریع الکترولیت‌های بهینه بدون نیاز به آزمایش‌های پرهزینه عمل کند.

واژه های کلیدی: *باتری لیتیوم-یون، الکترولیت غیرآبی، یادگیری ماشین، XGBoost، رسانایی یونی، علم داده.*

Development of a machine learning-based model for predicting ionic conductivity in Non-Aqueous electrolytes

Alizadeh, Sara[1]; Gashmard, Hassan[2]; Hashemifar, S. Javad[2]; Rezaee Roknabadi, Mahmood[2]

[1] *Department of Physics, Sciences, Ferdowsi University of Mashhad*
[2] *Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan*

Abstract

Ionic conductivity of electrolytes is a decisive factor in the electrochemical performance of lithium-ion batteries. Traditional trial-and-error methods and quantum mechanics-based modeling techniques, such as Density Functional Theory (DFT), lack the necessary efficiency to address current challenges due to inherent limitations and high computational costs. In this study, leveraging the paradigm of "data-driven materials science," we developed a predictive model based on the XGBoost algorithm. A standardized dataset was compiled and preprocessed from reputable experimental studies. Evaluation of the model on the test dataset yielded a coefficient of determination (R^2) of 0.9814 and a Root Mean Square Error (RMSE) of 0.5220, indicating high accuracy and the absence of overfitting. Feature importance analysis revealed that "metal cation type" and "anion salt structure" are the most critical factors influencing ionic conductivity, whereas temperature and solvent type play moderating roles. The model developed in this research can serve as an efficient tool for the rapid design of optimized electrolytes, eliminating the need for costly experimental trials.

***Keywords**: Lithium-ion Battery, Non-aqueous Electrolyte, Machine Learning, XGBoost, Ionic Conductivity, Data Science*

PACS No. *84*

۱. مقدمه

باتری‌های لیتیوم-یون به دلیل چگالی انرژی بالا، طول عمر چرخه‌ای مناسب و وزن سبک، به عنوان ستون فقرات فناوری‌های ذخیره‌سازی انرژی مدرن شناخته می‌شوند و نقش حیاتی در توسعه الکترونیک قابل‌حمل، خودروهای الکتریکی و سامانه‌های ذخیره‌سازی ایستا ایفا می‌کنند [1]. عملکرد این باتری‌ها بر پایه انتقال یون‌های لیتیوم بین الکترودها در فرآیندهای شارژ و دشارژ استوار است؛ فرآیندی که در آن الکترولیت به عنوان محیط انتقال‌دهنده یون، نقشی بنیادین ایفا می‌کند [2]. رسانایی یونی الکترولیت مستقیماً بر مقاومت داخلی باتری، نرخ شارژ/دشارژ، توان خروجی و در نهایت راندمان کلی سیستم تأثیر می‌گذارد [2,3]. با این حال، دستیابی به الکترولیت‌هایی با رسانایی یونی بالا، پایداری الکتروشیمیایی گسترده و ایمنی بالا، همچنان یکی از چالش‌های اساسی در توسعه نسل بعدی باتری‌ها محسوب می‌شود [4].

به‌طور سنتی، کشف و بهینه‌سازی مواد الکترولیتی عمدتا بر روی روش‌های آزمون و خطای تجربی و یا مدل‌سازی‌های مبتنی بر مکانیک کوانتومی نظیر نظریه تابعی چگالی (DFT) استوار بوده است [5]. اگرچه DFT ابزاری قدرتمند برای درک رفتار اتمی است، اما با محدودیت‌های جدی از جمله هزینه محاسباتی بسیار بالا، محدودیت در مقیاس زمانی و مکانی و دشواری در شبیه‌سازی سیستم‌های پیچیده روبرو است [6]. این کاستی‌ها، سرعت اکتشاف مواد جدید را محدود کرده و منجر به ظهور الگوواره جدیدی در علم مواد تحت عنوان «علم مواد داده‌محور» شده است [7]. در این پارادایم جدید، استفاده از روش‌های یادگیری ماشین به عنوان جایگزینی کارآمد، امکان پردازش حجم عظیمی از داده‌ها و شناسایی الگوهای پنهان را فراهم می‌سازد [7].

با وجود پتانسیل بالای یادگیری ماشین، دقت مدل‌های پیش‌بینی‌کننده به شدت به کیفیت و استانداردسازی داده‌های ورودی وابسته است. پایگاه‌های داده عمومی موجود اغلب فاقد یکسان‌سازی دقیق پارامترهای ساختاری هستند که می‌تواند منجر به نویز زیاد و کاهش دقت مدل شود. در این پژوهش، با هدف غلبه بر این چالش‌ها، مجموعه‌ای از داده‌های استاندارد و پاک‌سازی‌شده از منابع معتبر علمی گردآوری شد. سپس با استفاده از الگوریتم قدرتمند XGBoost، مدلی برای پیش‌بینی رسانایی یونی الکترولیت‌های لیتیومی توسعه یافت. هدف اصلی این مطالعه، نه تنها دستیابی به دقت پیش‌بینی بالا از طریق معیارهای آماری نظیر R^2 و RMSE، بلکه تحلیل اهمیت ویژگی‌ها برای کشف عوامل کلیدی مؤثر بر رسانایی یونی است .

۲. مواد و روش‌ها

۲/۱ جمع‌آوری و آماده‌سازی مجموعه داده جدید

یک مجموعه داده جدید و کاملاً استاندارد از مقالات تجربی معتبر (Q1) گردآوری شد. معیارهای انتخاب مقالات تجربی شامل گزارش دقیق نوع نمک، رسانایی یونی ، اسامی حلال‌ها ، نسبت ترکیب (مولی یا وزنی) و دما بود. در این پژوهش از نسخه دستی نرم‌افزار Plot Digitizer (version 2.0) [8] برای استخراج داده از نمودارها و جداول استفاده شد تا دقت خوانش افزایش یابد. داده‌های جمع‌آوری شده (۱۶۸۹۷ رکورد) پس از یکسان‌سازی واحدها (تبدیل نسبت‌های حجمی به وزنی و اطمینان از استفاده از مولالیته) و نرمال‌سازی مقادیر، وارد فرآیند تحلیل شدند.

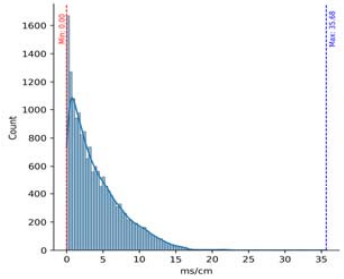
۲/۲ مصورسازی داده‌ها

پیش از مدل‌سازی، داده‌ها با استفاده از پایتون مصورسازی شدند. شکل ۱ نشان‌دهنده توزیع گسترده مقادیر رسانایی یونی در پایگاه داده جمع آوری شده است. شکل ۲ بیانگر گستردگی مقدار غلظت نمک و رسانایی یونی در پایگاه داده جدید است و شکل ۳ نشان دهنده محدوده دما (بر حسب سانتی گراد) به کار رفته برای هر نمک در این پایگاه داده است.

۲/۳ مدل‌سازی با XGBoost و معیارهای ارزیابی

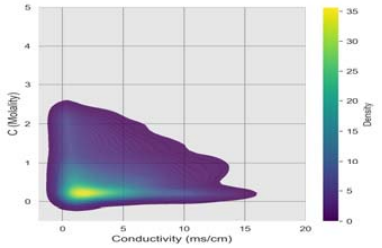
برای پیش‌بینی رسانایی یونی، از الگوریتم XGBoost استفاده شد. این الگوریتم به دلیل مقاومت بالا در برابر بیش‌برازش ، سرعت پردازش بالا و قابلیت تفسیرپذیری از طریق شاخص اهمیت ویژگی‌ها انتخاب گردید. ۸۰ درصد داده ها برای آموزش و ۲۰ درصد داده ها برای آزمون استفاده شده است. عملکرد مدل بر روی داده‌های آموزش و تست با چهار معیار اصلی R^2، R^2_{adj} MAE و RMSE ارزیابی شد که نتایج در جدول ۱ ذکر شده

است. همان‌طور که در جدول ۱ مشهود است، مدل توانسته است بیش از ۹۸٪ از تغییرات متغیر هدف (رسانایی یونی) را با دقت بالا پیش‌بینی کند. مقدار R^2 در داده‌های تست و مقدار R^2_{adj} نزدیک به آن نشان‌دهنده برازش مناسب مدل و عدم وجود ویژگی‌های زائد در فضای ورودی است. تفاوت کم بین نتایج بخش آموزش و آزمون حاکی از پایداری مدل و غلبه بر پدیده بیش‌برازش است. این موضوع تأیید می‌کند که الگوریتم با بهینه‌سازی پارامترها، الگوهای کلی سیستم الکتروشیمیایی را به‌درستی یاد گرفته است.همچنین، مقادیر پایین RMSE و MAE در بخش آزمون، دقت پیش‌بینی مدل را در مقیاس اصلی واحدها تأیید می‌کند. البته تفاوت این دو مقدار با یکدیگر احتمال مناسب عمل نکردن مدل در داده های پرت را مطرح میکند که برای بررسی بیشتر نمودار شکل ٤ رسم شد و همانطور که مشخص است مقدار داده های پرت در مقایسه با عموم داده ها بسیار کم و نادر است و از طرفی عموما صنعت با رسانایی یونی در محدوده های ms/cm ۱۲-۸ کار می‌کند [۹] که در این محدوده مدل به شایستگی عمل می‌کند.

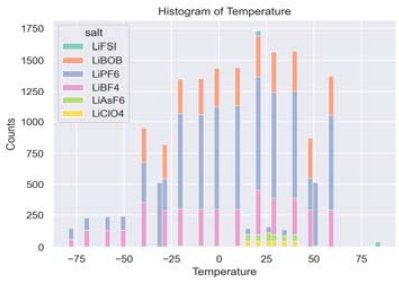


شکل 1 : محدوده رسانایی یونی استفاده شده در پایگاه داده بر حسب میلی زیمنس بر سانتیمتر

همچنین نمودار پراکندگی در شکل ۵، رابطه بین مقادیر واقعی رسانایی یونی و مقادیر پیش‌بینی‌شده توسط مدل را نمایش می‌دهد. این توزیع فشرده نقاط حول محور y=x نشان‌دهنده همبستگی قوی و خطی بین مقادیر واقعی و پیش‌بینی‌شده است. انحراف کم نقاط از این خط، گواهی بر دقت مناسب مدل است. برای شناسایی عوامل کلیدی مؤثر بر رسانایی یونی، شاخص اهمیت ویژگی‌ها از مدل XGBoost استخراج و در شکل ٦ نمایش داده شده است که در این شکل T_centigrade بیانگر دما، عناصر تشکیل دهنده نمک درون الکترولیت شامل Li ,O ,I ,B ,P ,As ,F ,S و در نهایت سایراسامی شامل نام‌های حلال های مختلف درون الکترولیت است.



شکل۲ : محدوده رسانایی یونی و غلظت نمک بر حسب مولالیته در پایگاه داده



شکل۳ : محدوده دما به کار رفته برای هر نمک در پایگاه داده

جدول۱ : معیارهای دقت مدل

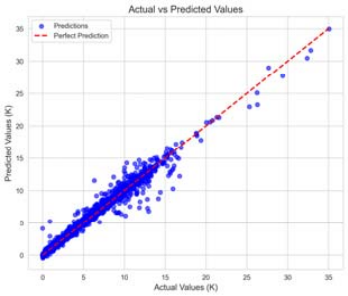
	معیار آموزش	معیار تست
R^2 Score	۰.۹۸۷۳	0.9814
R^2 Adjusted	0.9873	0.9813
MAE	0.2172	0.2658
MSE	0.1754	0.2725
RMSE	0.4189	0.5220

نتایج نشان می‌دهد که حضورسولفور در نمک در رتبه نخست اهمیت قرار دارد و در مرتبه بعدی حضور فلوئور در نمک حایز اهمیت است. نوع حلال (MA) نیز در رتبه سوم اهمیت قرار دارد.



شکل٤: نمودار باقیمانده برای بررسی نقاط پرت

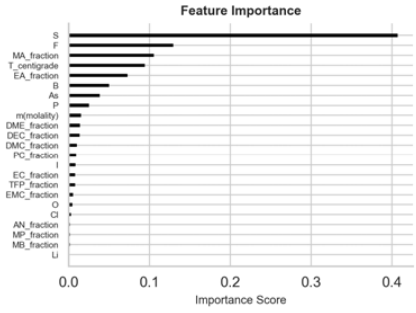
اگرچه حلال به عنوان محیط انتقال عمل می‌کند، اما این نتایج نشان می‌دهد که تغییرات در هویت شیمیایی نمک و کاتیون، تأثیر تعیین‌کننده‌تری نسبت به نوع حلال بر رسانایی نهایی سیستم دارند. در نهایت، دما در رتبه چهارم اهمیت قرار گرفته که بر انرژی جنبشی انتقال بار اثر می‌گذارد.



شکل۵: نمودار پراکندگی برای بیان دقت مدل

نتیجه گیری

در این پژوهش، پس از گردآوری یک پایگاه داده جامع، یک مدل یادگیری ماشین مبتنی بر XGBoost برای پیش‌بینی دقیق رسانایی یونی در الکترولیت‌های غیرآبی باتری‌های لیتیوم–یون توسعه یافت. با گردآوری و استانداردسازی داده‌های تجربی و رفع نواقص پایگاه‌های موجود، مدل نهایی با ضریب تعیین (R^2=۰/۹۸۱۴) و خطای متوسط جذر مربعات (RMSE=0.5220) عملکردی



شکل٦: نمودار اولولیت ویژگی ها در بهبود رسانایی یونی الکترولیت

بدون بیش‌برازش از خود نشان داد. تحلیل حساسیت ویژگی‌ها تأیید کرد که عوامل شیمیایی ذاتی، به‌ویژه نوع و ساختار کاتیون و آنیون، تعیین‌کننده‌های اصلی رسانایی یونی هستند، در حالی که دما و حلال نقش ثانویه اما مؤثری ایفا می‌کنند. در نهایت، این مدل به‌عنوان ابزاری کارآمد، سریع و کم‌هزینه برای غربالگری و طراحی بهینه الکترولیت‌های جدید معرفی شده که می‌تواند زمان و هزینه‌های تحقیقات آزمایشگاهی را به‌طور چشمگیر کاهش دهد.

مرجع‌ها

[1] A. Manthiram, "An Outlook on Lithium Ion Battery Technology", *ACS Central Science*, **3**, (2017), 1063–1069.
[2] D. Castelvecchi, "ELECTRIC CARS: THE BATTERY CHALLENGE", *Nature*, **596**, (2021), 336-339.
[3] A. Ahmadian, et al. "Flexible Paper-Based Li-ion Batteries: A Review.World", *Journal of Engineering and Technology*, **9**, (2021). 285-299.
[4] W. Lee, et al. "Advances in the Cathode Materials for Making a Breakthrough in the Li Rechargeable Batteries", *Angewandte Chemie*, **59(7),** (2020). 2578-2605.
[5] U. V. Alpen, et al. "Ionic conductivity of Li14Zn GeO44 (Lisicon)", *Electrochim. Acta*, **23**, (1978). 1395.
[6] Paolo de Blasio. et al. "CALiSol-23: Experimental electrolyte conductivity data for various Li-salts and solvent combinations", Scientific Data, 11, (2024). 750
[7] H. Gashmard. et al. "Predicting superconducting transition temperature through advanced machine learning and innovative feature engineering", *Scientific Reports*, **14**, (2024). 3965.
[8] https://plotdigitizer.com/
[9] K. Eunhwan et al. "Ionic Liquid Electrolytes for Electrochemical Energy Storage Devices", *Materials*, **14**(14), (2021). 4000.

ضریب خودپخشی آب در نانوکانال‌های ساخته شده از بلورهای دو بعدی

انوری‌فرد، عاطفه؛ ابراهیمی، فاطمه

دانشکده فیزیک، دانشگاه بیرجند، بیرجند

چکیده

ویژگی‌های سطحی دیواره‌ها، نقش تعیین کننده‌ای در ترابرد مایعات در نانومقیاس دارند. در این پژوهش، پدیده خودپخشی آب در سه نوع نانوکانال مختلف تخمین زده شده است: نانوکانال کاملاً هموار با دیواره‌های گرافینی، نانوکانال زبر و نانوکانال هیبریدی که یکی از دیواره‌های آن گرافینی و دیگری یک دیواره زبر است. ضریب خودپخشی آب از دو روش متفاوت محاسبه شده است. در روش اول پدیده خودپخشی ستونی از آب در ستون مجاور با برازش غلظت آن به جواب معادله پخش در این هندسه تخمین زده شده است. در حالی که در روش دوم خودپخشی از میانگین مربعی جابه‌جایی مولکول‌های آب در بازه‌های زمانی دلخواه محاسبه شده است. نتایج حاکی از آن است که مقادیر ضریب پخش حاصل از دو روش به کاررفته، به خصوص در زمان‌های بزرگتر تطابق بسیار خوبی با یکدیگر دارند.

واژه های کلیدی: *نانوکانال، گرافین، زبری، خودپخشی، شبیه سازی مولکولی.*

Water Self-Diffusion in Nanochannels Made from Two-Dimensional Crystals

Anvarifard, Atefeh; Ebrahimi, Fatemeh

Department of Physics, University of Birjand, Birjand

Abstract

Surface properties of channel walls play a decisive role in fluid transport at the nanoscale. In this study, the self-diffusion behavior of water is evaluated in three different types of nanochannels: a perfectly smooth nanochannel with graphene walls, a rough nanochannel, and a hybrid nanochannel consisting of one graphene wall and one rough wall. The self-diffusion coefficient of water is calculated using two different methods. In the first method, the self-diffusion process of a water column into an adjacent column is estimated by fitting the concentration profile to the solution of the diffusion equation for this geometry. In the second method, the self-diffusion coefficient is calculated from the mean square displacement of water molecules over selected time intervals. The results indicate that the diffusion coefficients obtained from the two methods are in very good agreement with each other, particularly at longer times.

***Keywords**: Nanochannel, Graphene, Roughness, Self-Diffusion, Molecular simulation.*

PACS No. 68, 89, 81

مقدمه

یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های ترابردی مایعات سرعت خودپخشی آن‌ها است که سایر فرآیندهای ترابردی از جمله انتقال گرما و گرانروی را نیز تحت تاثیر قرار می‌دهد. پخش آب در نانومقیاس به برهم‌کنش شاره–دیواره وابسته است که این خود علاوه بر ویژگی‌های شیمیایی دیواره متأثر از آرایش هندسی اتم‌های دیواره نیز می‌باشد [۱]. پیشرفت‌های اخیر در ساخت نانوکانال‌های محصور شده بین بلورهای دو بعدی، امکان کنترل

دقیق‌تر این برهم‌کنش‌ها را فراهم می‌سازد. گایم و همکاران با ساخت تجربی نانوکانال‌های مبتنی بر گرافین و نیتریدبورشش‌گوشی(hBN)، نشان دادند که تغییر ویژگی‌های دیواره می‌تواند تأثیر قابل توجهی بر ترابرد آب در نانوکانال‌ها داشته باشد [۲].

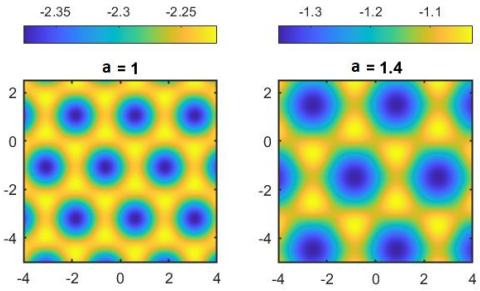
در این پژوهش پخش آب در سه حالت مختلف مطالعه شده است. (الف) یک نانوکانال با دیواره‌های گرافینی ساده (P) که کاملاً هموار است، (ب) یک نانوکانال با دیواره‌های شش گوشی زبر(A) و (پ) یک نانوکانال هیبریدی (H) که یکی از دیواره‌های آن گرافینی و دیگری دیواره زبر است. ضریب خودپخشی آب در یک بازه زمانی دلخواه از دو روش متفاوت محاسبه شده است: برازش پروفایل غلظت خودپخشی آب به جواب معادله پخش و محاسبه میانگین مربعی جابه‌جایی مولکول‌های آب در این بازه زمانی. نتایج بدست آمده برای سه نوع کانال مختلف با یکدیگر مقایسه شده و تحلیل مختصری از آن ارائه خواهد شد.

ایجاد زبری به‌صورت مصنوعی مدل‌سازی شده به این ترتیب که فاصله بین همسایگان اول کربنی افزایش یافته است. در این روش ساختار شش‌ضلعی حفظ می‌شود ولی به دلیل افزایش طول پیوند کربن–کربن زبری سطح افزایش می‌یابد.

روش شبیه سازی

شبیه‌سازی‌ها با استفاده از بسته شبیه‌سازی دینامیک مولکولی LAMMPS اجرا شده‌اند. مولکول‌های آب با مدل SPC/E شبیه‌سازی و با الگوریتم SHAKE به صورت صلب نگه داشته شده‌اند. دما از طریق ترموستات نوز–هوور در ۳۰۰ کلوین ثابت نگه داشته شد. برهم‌کنش بین مولکول‌های آب و اتم‌های کربن به صورت برهم‌کنش لنارد جونز بین مولکول‌های اکسیژن و دیواره کربنی با پارامترهای $\epsilon_{c\text{-}o}$= ۰,۱۴۹۲ $\frac{kcal}{mol}$ و $\sigma_{c\text{-}o}$= ۳,۱۹ Å شبیه‌سازی شده است. برهم‌کنش‌های بلند برد کولنی با استفاده از روش ذره–ذره–ذره–شبکه (PPPM) محاسبه شدند.

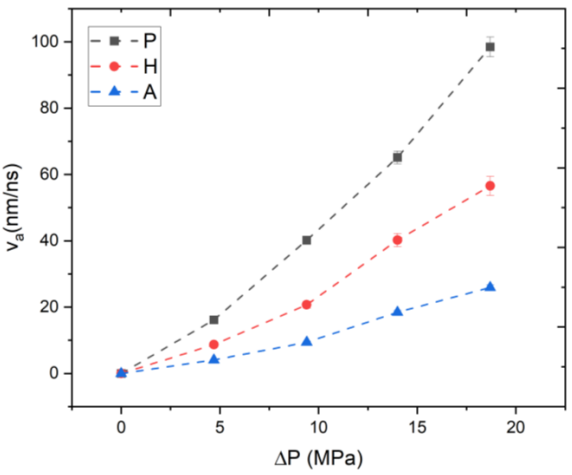
برای بررسی اثر زبری دیواره بر برهم‌کنش شاره–دیواره، سه نانوکانال با زبری متفاوت در نظر گرفته شد. در بلور دو بعدی گرافین طول پیوند کربن–کربن d_0=۰,۱۴۲nm است. در بلور شش‌گوشی زبر، این طول با اعمال ضریب زبری a=۱,۴ افزایش داده شده است. مطابق شکل ۱ افزایش زبری با تغییر فاصله بین اتم‌های کربن، توپولوژی چشم انداز انرژی سطح را تغییر داده و ناهمگنی‌های انرژی سطحی را در امتداد دیواره‌های نانوکانال ایجاد می‌کند [۳].



شکل۱: مقایسه چشم انداز انرژی سطوح گرافینی (a=۱) و زبر (a=۱,۴).

اثر زبری بر اصطکاک

قبل از هر چیز نشان می‌دهیم که ایجاد زبری بر اصطکاک شاره–دیواره تأثیر کاملاً ملموسی دارد. برای این کار در چارچوب دینامیک مولکولی غیرتعادلی و با اعمال یک نیروی دلخواه خارجی، وابستگی نرخ شارش آب به اختلاف فشار ایجاد شده در دو سر نانوکانال را در سه حالت مختلف بررسی کرده‌ایم.



شکل۲: نمودار سرعت متوسط بر حسب اختلاف فشار برای سه نانوکانال p (مربع‌های سیاه)، H (دایره‌های قرمز) و A (مثلث‌های آبی).

نتایج به دست آمده (شکل ۲) نشانگر آن است که همانگونه که انتظار داشتیم ایجاد زبری در دیواره نانوکانال منجر به کاهش سرعت شارش آب می‌شود.

محاسبه ضریب پخش

روش اول: در این روش، ابتدا محتوای کل کانال به دو بخش مساوی تقسیم شده و تغییرات چگالی هر کدام از دو بخش ایجاد شده با گذشت زمان بررسی می‌شود. در شکل ۳-الف برای وضوح بیشتر هر کدام از این ستون ها با رنگ جداگانه‌ای مشخص شده است. همانطور که در شکل ۳-ب مشاهده می‌شود پس از گذشت زمان (در این شکل ۰٫۲ نانوثانیه) دو ستون آب در هم پخش می‌شوند.

غلظت حل شونده C، از معادله پخش تبعیت می‌کند:

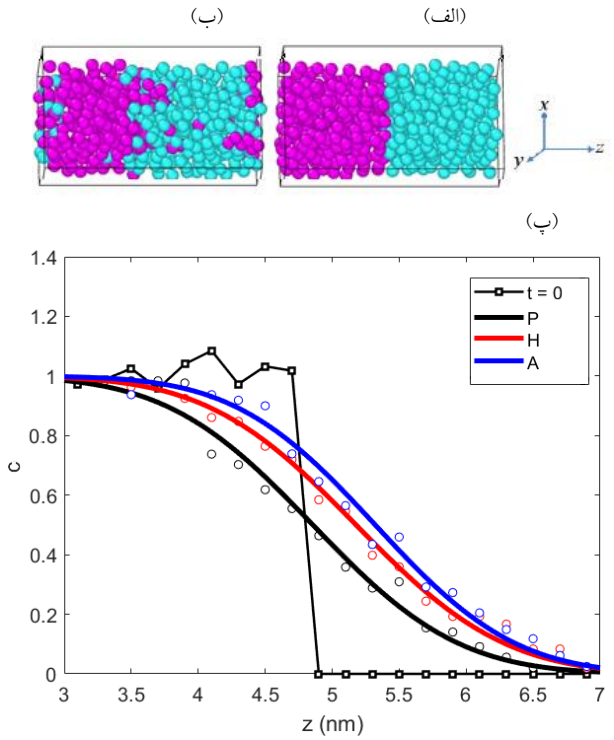
$$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \langle C \rangle}{\partial z^2} \qquad (۱)$$

با شرایط اولیه گفته شده توزیع غلظت هر ستون را می‌توان با حل تحلیلی معادله پخش و تابع خطای (erf) توصیف کرد. مثلاً برای ستون سمت چپ جواب معادله ۱ به صورت زیر است[٤]:

$$\langle C \rangle = \frac{1}{2}\left[1 + \mathrm{erf}\left(\frac{z - z_0}{\sqrt{4Dt}}\right)\right] \qquad (۲)$$

در معادله ۲، پارامتر z_0 موقعیت اولیه مکان محوری جدایی دو ستون است. با برازش چگالی غلظت آب با معادله ۲ در این ستون می‌توان ضریب پخش محوری را در هر زمان دلخواه بدست آورد. برای هر نمونه، در مجموع ۱۰ نمونه شبیه‌سازی مستقل انجام گرفت. شبیه‌سازی‌ها شامل ۰٫۲ نانوثانیه برای رسیدن سیستم به حالت پایا و ۱ نانوثانیه برای نمونه‌برداری از داده‌ها است. داده‌های شبیه‌سازی در راستای z به برش‌هایی با عرض ۱ نانومتر تقسیم شد و غلظت ستون آب در هر برش محاسبه گردید.

شکل ۳-پ نمودار غلظت ستون آب (نسبت به غلظت معمولی آب) را در زمان ۰٫۱ نانوثانیه، به همراه برازش حاصل از معادله ۲، برای هر سه نمونه مورد بررسی نشان می‌دهد. غلظت مولکول‌های آب با مقدار متناظر در ناحیه بالک نرمال‌سازی شده است؛ ازاین‌رو مقادیر غلظت در بازه ۰ تا ۱ قرار دارند.



شکل۳: (الف) تقسیم محتوای آب کانال به دو بخش، (ب) پخش دو ستون آب در زمان ۰٫۲ نانوثانیه، (پ) نمودار غلظت نسبی ستون آب در زمان ۰٫۱ نانوثانیه به همراه برازش معادله ۲ برای سه نانوکانال P (سیاه)، H (قرمز) و A (آبی).

بر اساس پارامترهای حاصل از این برازش، مقادیر ضریب پخش برای زمان‌های ۰٫۱ و ۰٫۲ نانوثانیه در جدول ۱ ارائه شده‌اند. این ضریب پخش را با D_C نشان می‌دهیم.

روش دوم: در این روش ضریب پخش از طریق تعقیب مکان محوری همه مولکول های آب در زمان (z(t)) از طریق رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$D_T = \frac{\langle (z(t) - z(0))^2 \rangle}{2t} \qquad (۳)$$

برای اطمینان از حصول حالت تعادل ترمودینامیکی موقعیت مولکول‌های آب، یک بازه ۰٫۲ نانوثانیه در هر شبیه‌سازی در نظر گرفته شده است. در اینجا نیز ضریب پخش از میانگین گیری روی یک مجموعه شامل ۱۵۰ نمونه مستقل تخمین زده شده است. نتایج حاصله برای زمان های ۰٫۱ و ۰٫۲ نانوثانیه در جدول ۱ آمده است. این ضریب پخش را با D_T نشان می‌دهیم.

جدول۱ : ضریب پخش آب به‌دست‌آمده از دو روش برازش پروفایل غلظت و میانگین مربعی جابه‌جایی محوری در زمان‌های ۰٫۱ و ۰٫۲ نانوثانیه (D بر حسب 10^{-9} m^2/s، مقدار خطا در تمام محاسبات کمتر از ٤ درصد است.)

نانوکانال	D_C (۰٫۱ns)	D_C (۰٫۲ns)	D_T (۰٫۱ns)	D_T (۰٫۲ns)
P	۵٫۳۰	۵٫۷۰	۵٫۶۰	۵٫۶۵
H	۵٫۱۰	۵٫۶۰	۵٫۷۰	۵٫۷۵
A	۵٫۰۰	۵٫۳۰	۵٫۲۰	۵٫۲۵

تحلیل نتایج

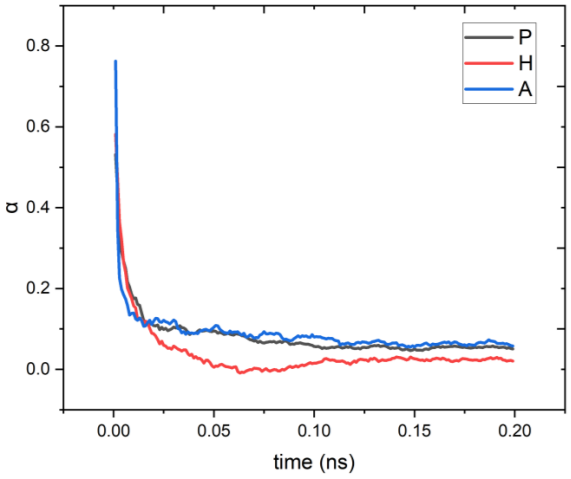
با بررسی نتایج بدست آمده در می‌یابیم که ضریب پخش در روش اول وابسته به زمان و در روش دوم تقریباً ثابت است به هر حال در زمان ۰٫۲ نانوثانیه و در محدوده خطا مقادیر بدست آمده برای ضریب پخش به مقدار یکسانی برای هر نمونه میل می کند و در عین حال تفاوت اندکی بین ضرایب پخش نمونه‌ها وجود دارد. این در حالی است که پیش‌تر نشان داده شد ضریب اصطکاک به شدت متأثر از زبری دیواره است.

شایان ذکر است که نتایج تحقیقات اخیر حاکی از غیر نرمال بودن (غیر گاوسی بودن) پدیده پخش در مجاورت سطوح جامد است [۵]. میزان انحراف حرکت مولکول‌های آب از رفتار گاوسی را می‌توان با محاسبه پارامتر α مطابق رابطه ٤ تخمین زد [۵]:

$$\alpha(t)=\frac{\langle z^4(t)\rangle-3\langle z^2(t)\rangle^2}{\langle z^2(t)\rangle^2} \qquad (٤)$$

برای یک فرآیند کاملاً گاوسی، مقدار پارامتر α برابر صفر خواهد بود.

نتایج محاسبات ما برای کمیت α در سه نمونه بحث شده در شکل ٤ به صورت تابعی از زمان آمده است همان‌طور که مشاهده می‌شود، مقدار α در زمان‌های کوتاه دارای مقادیر نسبتاً بزرگی است و با گذشت زمان کاهش می‌یابد. با این حال، مقدار آن در کل بازه زمانی شبیه‌سازی به صفر نمی‌رسد. این رفتار نشان می‌دهد که حرکت مولکول‌های آب در نانوکانال‌های مورد بررسی از رفتار گاوسی ایده‌آل انحراف دارد. وجود این انحراف را می‌توان به محدودشدگی هندسی کانال و برهم‌کنش‌های شاره–دیواره نسبت داد که موجب ایجاد ناهمگنی در دینامیک مولکولی آب می‌شوند.



شکل٤: نمودار تغییرات پارامتر α بر حسب زمان برای سه نانوکانال P (سیاه)، H (قرمز) و A (آبی).

نتیجه گیری

در این پژوهش، پخش آب در نانوکانال‌های گرافینی با زبری‌های مختلف به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. ضریب پخش آب با استفاده از دو رویکرد مستقل شامل برازش نمودار غلظت و میانگین مربعی جابه‌جایی محوری در چارچوب دینامیک مولکولی تعادلی محاسبه شد. مقادیر ضریب پخش به‌دست‌آمده از دو رویکرد اختلاف ناچیزی با یکدیگر داشتند.

مرجع‌ها

[۱] I. N. Tsimpanogiannis, O. A. Moultos, L. F. M. Franco, M. B. D. M. Spera, M. Erdős and I. G. Economou; "Self-diffusion coefficient of bulk and confined water: a critical review of classical molecular simulation studies"; *Molecular Simulation* **45**, No. 4–5 (2019) 425–453.

[۲] A. Keerthi, S. Goutham, Y. You, P. Iamprasertkun, R. A. W. Dryfe, A. K. Geim and B. Radha; "Water friction in nanofluidic channels made from two-dimensional crystals"; *Nature Communications* **12**, No. 1 (2021) 3092.

[۳] F. Ebrahimi, M. Neek-Amal and M. Sahimi; "Taylor–Aris dispersion in nanotubes: analytical solution, effects of slip and surface potential landscape, and measurement of the slip length"; *The Journal of Physical Chemistry B* **128**, No. 43 (2024) 10727–10734.

[٤] J. Gouyon, A. Boudier, F. Barakat, A. Pallotta and I. Clarot; "Taylor dispersion analysis of metallic-based nanoparticles—A short review"; *Electrophoresis* **43**, No. 23–24 (2022) 2377–2391.

[۵] A. Alexandre, M. Lavaud, N. Fares, E. Millan, Y. Louyer, T. Salez, Y. Amarouchene, T. Guérin and D. S. Dean; "Non-Gaussian diffusion near surfaces"; *Physical Review Letters* **130**, No. 7 (2023) 077101.

وابستگی نیروی کازیمیر در هر دو قطبش امواج الکترومغناطیسی نسبت به ویژگی‌های اپتیکی اجزای سیستم میکروالکترومکانیکی

جهانفر، زیبا[۱]؛ تاجیک، فاطمه[۲]

[۱] گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک دانشگاه الزهرا، تهران
[۲] گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک دانشگاه الزهرا، تهران

چکیده

در سیستم‌های میکروالکترومکانیکی (MEMS)، نیروی کازیمیر به ویژگی‌های اپتیکی مواد وابسته بوده و نقش مهمی در رفتار دینامیکی دستگاه دارد. در این پژوهش، با استفاده از نظریه لیفشیتز سهم قطبش‌های عرضی الکتریکی و عرضی مغناطیسی در نیروی کازیمیر بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که در فواصل کمتر از ۳۰ نانومتر، نیروی ناشی از قطبش عرضی مغناطیسی بر قطبش عرضی الکتریکی غالب است که این رفتار مستقل از ویژگی‌های اپتیکی و هندسی میکروسیستم می‌باشد. با افزایش فاصله، از سهم قطبش عرضی مغناطیسی کاسته می‌شود. این تغییرات در مواد با رسانایی بالاتر شدیدتر است به طوریکه نسبت نیروهای دو قطبش به سمت یک میل خواهد کرد. مطالعات نشان می‌دهد در مواد با رسانایی کم دامنه این تغییرات بسیار کمتر است و در تمام فواصل سهم نیروی تولید شده مرتبط با قطبش عرضی مغناطیسی نسبت به سهم نیروی ناشی از قطبش عرضی الکتریکی به طور چشم‌گیری قوی‌تر است.

واژه های کلیدی: *نیروی کازیمیر، ویژگی اپتیکی، قطبش عرضی الکتریکی و مغناطیسی موج الکترومغناطیس*

Dependence of the Casimir Force on the Optical Properties of Microelectromechanical System for Both Electromagnetic Polarizations

Jahanfar, Ziba[1]; Tajik, Fatemeh[2]

[1] *Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Physics Alzahra University, Tehran*
[2] *Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Physics Alzahra University, Tehran*

Abstract

In microelectromechanical systems (MEMS), the Casimir force is strongly dependent on the optical properties of constituent materials and plays a crucial role in the dynamic behavior of these devices. In the present study, the contributions of transverse electric (TE) and transverse magnetic (TM) polarizations to the Casimir force are investigated within the framework of Lifshitz theory. The results reveal that at separation distances below 30 nm, the contribution of the TM polarization exceeds that of the TE polarization. This behavior is found to be independent of the optical and geometrical characteristics of the microsystem. As the separation distance increases, the relative contribution of the TM polarization gradually decreases. These variations become more pronounced for materials with higher electrical conductivity, causing the ratio of the forces associated with the two polarizations to approach unity. In contrast, for low-conductivity materials, the magnitude of these variations is considerably smaller. Moreover, over the entire separation range, the force contribution arising from TM polarization remains significantly greater than that associated with TE polarization.

***Keywords**: Casimir force, Optical properties, Transverse Electric and Transverse Magnetic polarization*

PACS No. 42.50.Lc, 85.85.+j, 78.20.Ci.

مقدمه

در دهه‌های اخیر، پیشرفت‌های سریع در نانوفناوری منجر به کوچک‌سازی سیستم‌های میکروالکترومکانیکی به سمت نانوالکترومکانیکی (MEMS/NEMS) شده است که در آن‌ها نیروی کازیمیر ناشی از نوسانات کوانتومی خلاء، نقشی تعیین‌کننده درعملکردسامانه‌ها ایفا می‌کند[1]. از

ایـن‌رو، درک دقیـق وابسـتگی ایـن نیـرو بـه شـرایط محیطـی وهندسـه سـاخت ضـرورتی اساسـی بـرای کنتـرل رشـد آن وافزایش کارایی میکرو و نانوادوات محسوب می‌شود.

نیروی کازیمیر نخستین بار توسط هندریک کازیمیر درسال ۱۹۴۸ بر پایه نوسانات خلاء میان صفحات تخت، موازی و رسانای ایده آل پیش بینی شد. در دهه ۱۹۵۰، اوگنی لیفشیتز با استفاده از قضیه افت‌وخیز-اتلاف این پدیده را برای دی‌الکتریک‌های واقعی تعمیم داد. او نوسانات میدان را به جذب نوری دوقطبی های ماده پیوند زد تا برهمکنش را در تمام فواصل توصیف کند. این نظریه با لحاظ دما، رژیم های واندروالس و کازیمیر را به طور یکپارچه پوشش می دهد[2].

باتوجه به نقش اجتناب ناپذیر نیروی کازیمیر در دینامیک میکروسیستم‌ها و تأثیر مستقیم آن بر بازدهی آن‌ها، بررسی این نیرو و عوامل مؤثر بر آن ضروری است. مطالعات پیشین نشان داده‌اند که افزایش رسانندگی اجزای سازنده میکروسیستم منجر به رشد نیروی کازیمیر تولید شده در میکروسیستم می‌شود. همچنین، استفاده از برخی مواد مانند عایق‌های توپولوژیک می‌تواند جهت نیرو را از جاذبه به دافعه تغییر دهد[3]. از سوی دیگر، نتایج پژوهش‌ها نشان می‌دهد که پاسخ میکروسیستم به تغییرات دما به ویژگی‌های اپتیکی مواد وابسته است؛ به طوری که با کاهش رسانندگی مواد، حساسیت سیستم به تغییرات دما افزایش می‌یابد.

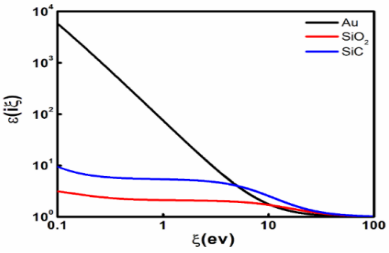
در این مطالعه، قصد داریم وابستگی نیروی کازیمیر حاصل ازهر دو مؤلفه‌ی قطبش الکتریکی و مغناطیسی موج الکترومغناطیسی را به ویژگی‌های اپتیکی مواد سازنده میکروسیستم بررسی کرده و چگونگی تأثیرپذیری این برهم‌کنش را توسط شرایط مرزی حاکم بر صفحات تحلیل نماییم همچنین، وابستگی بین نیروی تولیدی در هر قطبش و رسانندگی سیستم درفواصل مختلف جدایی میان اجزا مورد بررسی قرار می‌گیرد تا تأثیر هر قطبش در تولید نیرو در تمام فواصل آشکار شود. در این راستا، تمرکز ویژه‌ای بر تحلیل چگونگی کنترل‌پذیری شرایط مرزی میدان از طریق مهندسی رسانندگی مواد در فواصل مختلف معطوف شده است تا مشخص گردد که چگونه اثرات هندسی و جفت‌شدگی مدهای میدان در قطبش‌های مختلف، می‌توانند به یک پاسخ متوازن و پایدار در برابر تغییرات دما منجر شوند. در نهایت، نتایج این پژوهش می‌تواند در طراحی و بهینه سازی میکروادوات جهت دستیابی به پایداری و بازدهی بالاتر مورد استفاده قرارگیرد.

روش محاسبات

سامانه‌ی مورد بررسی دراین پژوهش مشتمل بر دو صفحه‌ی موازی، کاملاً صاف و بدون زبری است. به منظور پوشش طیف گسترده‌ای از ویژگی‌های اپتیکی و بررسی دقیق اثررسانندگی بر نیروی تولیدشده در میکروسیستم، صفحات ازسه ماده‌ی مختلف با پاسخ‌های الکتریکی متفاوت شامل Au، SiC و SiO_2 انتخاب شده است. Au به عنوان یک رسانای قوی با چگالی بالایی ازالکترون‌های آزاد،فلزی ایده‌آل در ساخت میکروسیستم‌ها به شمار می‌رود [4,5]، حضور این الکترون‌ها سبب افزایش قدرت جذب وتقویت بخش موهومی تابع دی‌الکتریک طلا در فرکانس‌های پایین می‌شود. در این مطالعه، SiC (رساناشده با تزریق نیتروژن) به دلیل پایداری بالا، کاربرد گسترده‌ای در ساخت ادوات میکرو درشرایط سخت و محیط‌های خشن دارد [6,7]. نسبت $\sigma = (\omega_p^2/\omega_\tau)/4\pi$ نشان دهنده‌ی رسانندگی ایستا ماده است که در ان ω_p و ω_τ به ترتیب فرکانس پلاسما و فرکانس واهلش می‌باشند. این نسبت برای SiC مقدار 0.4 ev و برای Au مقدار آن 1600 ev است[8]. این مقادیر تفاوت رسانندگی بین این دو ماده را نشان می دهند. ماده‌ی سوم، سیلیکا (SiO_2)، نیز به عنوان یک نمونه نارسانا در این مطالعه در نظر گرفته شده است.

دراین پژوهش، محاسبات مربوط به نیروی کازیمیر بر پایه‌ی نظریه‌ی لیفشیتز استوار است که در آن، تابع $\varepsilon(i\xi)$ یعنی بخش موهومی تابع دی الکتریک برحسب فرکانس موهومی (ξ) نقشی محوری ایفا می‌کند. تفاوت چشمگیر در رسانندگی مواد در این مطالعه، به تفاوتی آشکار در تابع $\varepsilon(i\xi)$ منجر می‌شود. جزئیات این پاسخ‌های اپتیکی و بخش موهومی توابع دی‌الکتریک مرتبط با آن‌ها در شکل ۱ به تصویر کشیده شده است. همین تمایز در ویژگی‌های نوری، عامل اصلی بروز تفاوت‌های شدید در بزرگی و رفتار نیروی کازیمیر حاصله خواهد بود. همان طور که در شکل ۱ مشاهده می شود، مقدار $\varepsilon(i\xi)$ که معرف بخش موهومی تابع دی الکتریک است، برای Au بسیار قوی است. این موضوع به دلیل رسانندگی زیاد این ماده

و قدرت بالای بخش موهومی تابع دی الکتریک ان است. به عبارت دیگر به دلیل حضور الکترون های آزاد در Au قدرت جذب در آن زیاد است و بنابراین افت و خیز ناشی از جذب در سیستم بالا می رود. این فاکتور برای SiC کم تر از طلاست و نشان دهنده چگالی الکترون آزاد کمتر نسبت به طلا است که منجر به جذب کم تری نسبت به طلا می‌شود. در مورد سیلیکا نیز مشاهده می شود که مقدار $\varepsilon(i\xi)$ از عدد یک، فاصله زیادی نمی‌گیرد، زیرا این ماده نارساناست و فاقد الکترون آزاد می‌باشد و الکترون های مقید آن بستگی بسیار بالایی به هسته دارند، بنابراین قدرت جذب ناچیزی دارد. منبع اصلی جذب و افت‌وخیز در این ماده تغییر پلاریزه‌ی ماده و تشکیل دو قطبی ها می‌باشد.



شکل۱: توابع دی اکتریک مواد بکاررفته برحسب بسامد موهومی در این پژوهش.

نیروی کازیمیر برواحد سطح بابهره گیری از نظریه لیفشیتز به صورت زیر محاسبه می شود:

$$F_{cas}(z) = -\frac{K_B T}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty\prime}\int_0^{\infty} K_\perp dK_\perp K_0(i\xi_n,K_\perp)\times \sum_{\alpha=s,p}\left[\frac{e^{2zK_0(i\xi_n,K_\perp)}}{r_\alpha^2(i\xi_n,K_\perp)}-1\right]^{-1} \quad (1)$$

در رابطه (۱)، $K_\perp$ بزرگی بردارموج درون صفحات است و ξ بیانگر بسامد موهومی است، s,p دو قطبش میدان الکترومغناطیسی، به ترتیب قطبش عرضی مغناطیسی(TM) و قطبش عرضی الکتریکی(TE) را نشان می دهد. رابطه زیر(2) بردار موج هرسه محیط را توصیف می کند.

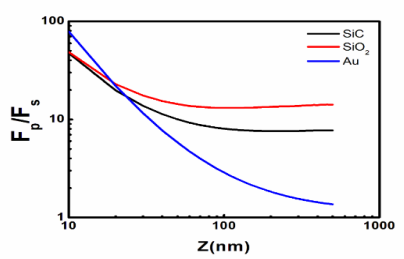
$$K_i(i\xi,K_\perp)=\sqrt{\varepsilon_i(\xi)\frac{\xi^2}{c^2}+K_\perp^2} \quad (2)$$

و ضرایب بازتاب فرنل به صورت زیر داده می شود:

$$r_s(i\xi,K_\perp)=\frac{K_0(i\xi,K_\perp)-K_i(i\xi,K_\perp)}{K_0(i\xi,K_\perp)+K_i(i\xi,K_\perp)} \quad (3)$$

$$r_p(i\xi,K_\perp)=\frac{\varepsilon_i(i\xi)K_0(i\xi,K_\perp)-K_i(i\xi,K_\perp)}{\varepsilon_i(i\xi)K_0(i\xi,K_\perp)+K_i(i\xi,K_\perp)} \quad (4)$$

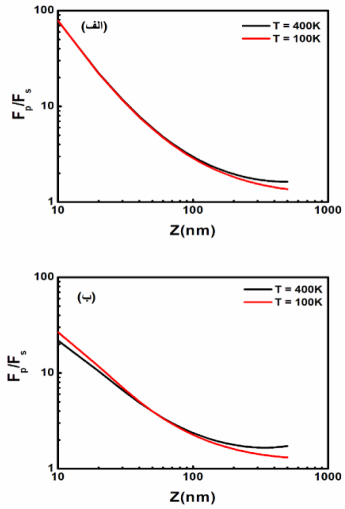
نتایج



شکل۲: نسبت F_p/F_s برحسب فاصله بین صفحات دردمای T=100K.

در شکل۲ نسبت F_p/F_s برای میکروسیستمهای متشکل از Au و SiO_2 و SiC که دارای تفاوت رسانندگی چشمگیر میباشند مشاهده می‌شود. در مقایسه بین دو سیستم متشکل از Au و SiO_2 میتوان گفت کاهش مقدار بیشینه و افزایش مقدار کمینه نسبت F_p/F_s در میکروسیستم شامل SiO_2، ناشی از پاسخ الکترومغناطیسی یکنواخت‌تر این ماده در مقایسه با فلزات است. در فلزاتی نظیر طلا، جفت‌شدگی قوی قطبش P با الکترون‌های آزاد و مدهای پلاسمونی سطحی در فواصل کوتاه موجب افزایش شدید این نسبت می‌شود، درحالی‌که درفواصل بزرگ کاهش بسیار شدید عمق نفوذ موج الکترومغناطیسی و رفتار آینه‌ای فلز سبب نزدیک شدن سهم دو قطبش و کاهش قابل توجه نسبت F_p/F_s می‌گردد. درمقابل، در دی‌الکتریک‌هایی مانند SiO_2 در فواصل نزدیک مدهای فونونی سطحی با قطبش P جفت شدگی دارند که شدت نیروی حاصل از ان در مقایسه با نیروی مرتبط با جفت شدگی پلاسمون‌های سطحی و میدان در فلزات بسیار ضعیف‌تر است. همچنین با توجه به قوی بودن عمق نفوذ موج الکترومغناطیسی در SiO_2 نسبت به فلزات باعث قوی ماندن تاثیر مدهای فونونی حجمی و برهمکنش انها با قطبش P در گستره وسیعی از فواصل می‌شود. از این رو دامنه تغییرات نسبت F_p/F_s محدودتر بوده، بیشینه آن کاهش یافته و کمینه آن افزایش می‌یابد. در ادامه به مقایسه نسبت مؤلفه‌های قطبشی نیروی کازیمیر برای دو میکروسیستم شامل SiC و SiO_2 پرداخته شده است. در فواصل کوتاه، هردو ماده رفتار مشابهی ازخود نشان می‌دهند که ناشی ازغلبه مدهای سطحی فونونی و برهمکنش انها با قطبش P است. باافزایش فاصله، تفاوت میان دوسیستم اشکار می‌شود؛ به گونه‌ای که نسبت نیروها در SiC افت شدیدتری راتجربه می‌کند. این رفتار ناشی از حضور حامل‌های بار آزاد و افزایش رسانندگی الکتریکی در SiC دوپ شده است که منجر به محدود

شدن نفوذ میدان‌های الکترومغناطیسی به درون این ماده و ضعیف شدن برهمکنش قطبش P و متعاقبا کاهش سهم نیروی ایجاد شده توسط این قطبش می‌شود. در مقابل، در SiO_2 به دلیل نبود حامل‌های آزاد و عمق نفوذ وسیع برای موج الکترومغناطیسی، برهم‌کنش مدهای فونونی در حجم با قطبش P همچنان غالب باقی می‌ماند. بنابراین، دوپینگ و رسانندگی ناشی ازآن نقش تعیین کننده‌ای در بازتوزیع سهم قطبش‌ها و تغییر رفتار نیروی کازیمیر ایفا می‌کند.



شکل۳: نسبت F_p/F_s برحسب فاصله بین صفحات در دو دمای مختلف و دومواده: الف) Au و ب) SiO_2

شکل ۳ وابستگی دمایی نسبت نیروی F_p/F_s نشات گرفته از پلاریزاسیون P به پلاریزاسیون S را بر حسب فاصله برای دو میکروسیستم مختلف، به ترتیب متشکل از صفحات Au و SiO_2 در دو دمای 100K و 400K نشان می‌دهد. برای هر دو ماده طلا و سیلیکا، منحنی‌های مربوط به این دو دما در کل بازه فواصل تقریباً به‌طور کامل بر یکدیگر منطبق هستند که نشان‌دهنده عدم حساسیت محسوس این نسبت به تغییرات دما است. دلیل فیزیکی این رفتار به تقارن انتقالی بالا و همگن بودن کامل فضا در این هندسه بازمی‌گردد. در نتیجه، با افزایش دما، اگرچه جمعیت فوتون‌های گرمایی تغییر می‌کند، اما این اثر به‌طور همزمان و متوازن بر هر دو پلاریزاسیون Pو S اعمال می‌شود. بنابراین، در سیستم صفحه–صفحه، مکانیزم هندسی خاصی برای تقویت یا تضعیف انتخابی یکی از پلاریزاسیون‌ها وجود ندارد و F_p/F_s مستقل از دما باقی می‌ماند.

نتیجه گیری

در این پژوهش، با در نظرگرفتن یک میکروسیستم متشکل از دو صفحه موازی و بدون زبری و در دمای 100K، سهم قطبش‌های عرضی الکتریکی (TE) و عرضی مغناطیسی (TM) برتولید نیروی کازیمیر بر پایه‌ی نظریه‌ی لیفشیتز مورد ارزیابی قرارگرفت. یافته‌ها نشان می‌دهند که در فواصل کوتاه (کمتر از30nm)، نیروی ناشی از قطبشTM به طور مطلق برقطبش TE غلبه دارد که این رفتار، مستقل ازویژگی‌های هندسی و اپتیکی میکروسیستم رخ می‌دهد. با افزایش فاصله جدایی صفحات، از سهم قطبش TM کاسته می‌شود که شدت این تغییرات به رسانندگی مواد سازنده بستگی دارد. به طور مشخص، در فواصل حدود 500nm ، نسبت نیروی حاصل از قطبشTM به قطبش TE برای ماده‌ی طلا به دلیل عمق نفوذ بسیار کم میدان و رفتار آن به عنوان یک فلز ایده‌آل و بازتاب‌کننده‌ی کامل، به مقدار یک میل می‌کند. این در حالی است که برای ماده‌ی نارسانا مانند SiO_2 در همین فاصله، به دلیل عمق نفوذ زیاد و نفوذ بسیار قوی میدان به درون ماده، نیروی ناشی ازقطبش TM تا 20 برابر قوی‌تر از قطبش TE باقی می‌ماند. نتایج این تحقیق نشان می‌دهد که دامنه این تغییرات در مواد با رسانایی کم بسیار محدودتر بوده و مهندسی رسانندگی و عمق نفوذ در مواد مختلف می‌تواند برای تنظیم دقیق پاسخ دینامیکی و بازدهی میکروادوات به کار گرفته شود.

مرجع‌ها

[1] A.W. Rodriguez, F. Capasso, and S. G. Johnson, Nature Photonics, 5 , 211 (2011).
[2] E. M. Lifshitz, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 29, 894 (1955) [Soviet Phys. JETP 2, 73(1956)].
[3] A. G. Grushin and A. Cortijo, *Physical Review Letters*, 106, 020403 (2011).
[4] R. S. Decca, D. Lo´pez, E. Fischbach, G. L. Klimchitskay, D. E. Krause, and V. M.Mostepanenko, Phys. Rev. D 75, 077101 (2007).
[5] R.S. Decca, D. Lo´pez , E. Fischbach, G.L. Klimchitskaya , D.E. Krause, V.M. Mostepanenko, Annals of Physics 318, 37 (2005).; R. S. Decca, D. Lopez, E. Fischbach, and D. E. Krause, Phys. Rev. Lett. 91, 050402 (2003).
[6] M. Sedighi, V. B. Svetovoy, W. H. Broer, and G. Palasantzas, Phys. Rev. B 89, 195440 (2014).
[7] M. Sedighi, V. B. Svetovoy, and G. Palasantzas, Phys. Rev. B 93, 085434 (2016).
[8] M. Sedighi, V. B. Svetovoy, W. H. Broer, and G. Palasantzas, “Casimir forces from conductive silicon carbide surfaces,” Phys Rev B Condens Matter Mater Phys, vol. 89, no. 19, May 2014, doi: 10.1103/PhysRevB.89.195440.

برگشت‌پذیری دریچه کانال یونی در عدد رینولدز پایین

عابدینی، امیرعلی؛ نوشاد، هوشیار*

دانشکده فیزیک و مهندسی انرژی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی‌تکنیک تهران)، خیابان حافظ، تهران، ایران

چکیده

کانال‌های یونی در دولایه لیپیدی بسیار گرانرو هستند، به طوری که عدد رینولدز ساختاری به‌شدت کوچک است. در این رژیم فوق‌میرا، حرکت برگشت‌پذیر تحت رانش کند امکان‌پذیر می‌شود. ما کانال را به‌صورت یک ذره براونی در یک چاه دوگانه مدل‌سازی می‌کنیم که توسط یک شیب نیروی متقارن رانده می‌شود؛ در این صورت قضیه افت‌وخیز Crooks را برای فرمول‌بندی اتلاف به‌کار می‌گیریم. با تغییر جرم مؤثر، عدد رینولدز را از حد فیزیولوژیک ($\mathrm{Re}\approx ۰/۰۱$) تا رژیم اینرسی ($\mathrm{Re}\approx ۱$) تنظیم می‌کنیم. در Re پایین، اتلاف به‌صورت $۱/\tau$ مقیاس‌بندی می‌شود و به برگشت‌پذیری نزدیک می‌شود. نتایج ما نشان می‌دهد که محیط با عدد رینولدز پایین غشا یک اصل برای پیام‌رسانی عصبی بهینه است.

واژه های کلیدی: کانال یونی، عدد رینولدز ساختاری، قضیه افت‌وخیز کروکس، دینامیک لنژون، ترمودینامیک تصادفی

Reversibility of Ion Channel Gating at Low Reynolds Number

Abedini, Amirali; Noshad, Houshyar*

Department of Physics and Energy Engineering, Amirkabir University of Technology (Tehran Polytechnic), Hafez Avenue, Tehran, Iran

Abstract

Ion channels gate in the highly viscous lipid bilayer, where the conformational Reynolds number is vanishingly small. In this overdamped regime, reversible motion becomes possible under slow driving. We model the gate as a Brownian particle in a double well, driven by a symmetric force ramp, and apply the Crooks fluctuation theorem to quantify dissipation. By varying the effective mass, we tune the Reynolds number from the physiological limit ($\mathrm{Re}\approx 0.01$) to the inertial regime ($\mathrm{Re}\approx 1$). At low Re the dissipation scales as $1/\tau$, tending toward reversibility; inertia introduces non-monotonic losses. Our results establish that the low-Reynolds-number environment of the membrane is a design principle for optimized neuronal signalling.

***Keywords**: Ion Channel, Conformational Reynolds Number, Crooks Fluctuation Theorem, Langevin Dynamics, Stochastic Thermodynamics*

PACS No. *5, 87, 98*

مقدمه

کانال‌های یونی ولتاژ، عناصر تحریک‌پذیر نورون‌ها هستند و باز و بسته شدن آن‌ها شامل تغییرات ساختاری دومین‌های پروتئینی درون دولایه لیپیدی است؛[۱] این محیطی با گرانروی مؤثر فوق‌العاده بالا است. عدد رینولدز متناظر برای یک کانال متحرک به‌شدت کوچک است ($\mathrm{Re}\ll ۱$)، که دینامیک را در رژیم فوق‌میرا قرار می‌دهد. در فیزیک کلاسیک اعداد رینولدز پایین، حرکت تحت برگشت‌پذیری زمانی نیروی محرک، برگشت‌پذیر است (قضیه Scallop پرسل). این موضوع پرسشی بنیادین مطرح می‌کند که آیا یک کانال یونی نورون تا چه حد می‌تواند نزدیک به برگشت‌پذیری ترمودینامیکی عمل کند، و نقش صریح عدد رینولدز چیست؟ در این‌جا با ساخت یک مدل تصادفی کمینه از یک کانال ولتاژ و با به‌کارگیری قضیه افت‌وخیز Crooks برای کمی‌سازی برگشت‌ناپذیری، به این پرسش می‌پردازیم. جرم مؤثر دریچه در هر مرحله تغییر داده می‌شود تا عدد رینولدز ساختاری را

از حد فوق‌میرای فیزیولوژیک ($\mathrm{Re}\sim ۰/۰۱$) تا رژیم اینرسی ($\mathrm{Re}\sim ۱$) بررسی کنیم. نتایج نشان می‌دهند که محیط با عدد رینولدز پایین برای کانال‌های یونی تقریباً برگشت‌پذیر ضروری است و اثرات اینرسی، کارایی انرژی فرایند را از بین می‌برند.

دینامیک لنژون کانال یونی

دریچه کانال به‌صورت یک درجه آزادی منفرد x مدل‌سازی می‌شود که نماینده جابه‌جایی یک دومین حسگر ولتاژ است و دینامیک آن توسط معادله لنژون میرا نشده داده می‌شود:[۲]

$$m\ddot{x}+\gamma\dot{x}=-\frac{dU(x)}{dx}+F_{\mathrm{ext}}(t)+\sqrt{۲\gamma k_{\mathrm{B}}T}\,\xi(t) \qquad (۱)$$

که در آن m جرم مؤثر دریچه، γ ضریب درگ گرانروی، $k_{\mathrm{B}}T$ انرژی گرمایی، و $\xi(t)$ نویز سفید گاوسی با میانگین صفر و خودهمبستگی $\langle\xi(t)\,|\,\xi(t')\rangle=\delta(t-t')$ است. پتانسیل $U(x)$ نیز یک چاه دوگانه متقارن است:

$$U(x)=U_{۰}\left(\left(\frac{x}{L}\right)^{۲}-۱\right)^{۲} \qquad (۲)$$

این پتانسیل دارای کمینه‌هایی در $x=\pm L$ متناظر با حالت‌های بسته و باز، که توسط یک سد به ارتفاع $U_{۰}$ از هم جدا شده‌اند. نیروی خارجی $F_{\mathrm{ext}}(t)$ اثر ولتاژ غشا را ایجاد می‌کند و پتانسیل را تغییر می‌دهد.

عدد رینولدز ساختاری

برای ذره‌ای که با سرعت مشخصه v_{char} حرکت می‌کند، نیروی اینرسی به‌صورت $mv_{\mathrm{char}}/\tau_{\mathrm{char}}$ و نیروی گرانروی به‌صورت γv_{char} مقیاس‌بندی می‌شود. با استفاده از برآورد همپارگی $v_{\mathrm{char}}=\sqrt{k_{\mathrm{B}}T/m}$ و مقیاس طول طبیعی L ، عدد رینولدز ساختاری را چنین تعریف می‌کنیم:[۳]

$$\mathrm{Re}_{\mathrm{conf}}=\frac{mv_{\mathrm{char}}}{\gamma L}=\frac{\sqrt{k_{\mathrm{B}}Tm}}{\gamma L} \qquad (۳)$$

این عدد با عدد رینولدز کلاسیک $\mathrm{Re}=va/\nu$ متفاوت است و اینرسی را در یک حرکت داخلی فوق‌میرا اندازه‌گیری می‌کند.

در یک کانال یونی واقعی، جرم مؤثر توسط ساختار پروتئین تعیین می‌شود و یک پارامتر آزاد به‌شمار نمی‌آید. در این‌جا ما به‌طور یک ابزار عددی m را تغییر می‌دهیم تا عدد رینولدز ساختاری را از حد فوق‌میرای فیزیولوژیکی ($\mathrm{Re}_{\mathrm{conf}}\approx ۰/۰۱$) به رژیم اینرسی ($\mathrm{Re}_{\mathrm{conf}}\approx ۱$) برسانیم.

برای یک پروتئین S4 از نوع helix در دولایه لیپیدی، $\gamma\sim ۱۰^{-۱۱}\,\mathrm{kg\cdot s^{-۱}}$، $L\sim ۰/۵\,\mathrm{nm}$ و $m\sim ۱۰^{-۲۳}\,\mathrm{kg}$ است که $\mathrm{Re}_{\mathrm{conf}}\sim ۰/۰۱$ را به‌دست می‌دهد. بنابراین کانال‌های یونی در رژیمی عمیقاً فوق‌میرا عمل می‌کنند که در آن جمله اینرسی $m\ddot{x}$ در مقایسه با $\gamma\dot{x}$ قابل‌چشم‌پوشی است.

اکنون ما یک پروتکل خطی متقارن زمانی اعمال می‌کنیم، به طوری که نیروی خارجی به‌طور خطی از $-F_{\max}$ تا $+F_{\max}$ در مدت زمان τ (رفت) و سپس از $+F_{\max}$ به $-F_{\max}$ در همان مدت (برگشت) تغییر می‌کند. دامنه کج‌شدگی به‌صورت $-F_{\max}=U_{۰}/L$ انتخاب می‌شود، به‌طوری‌که وقتی $F_{\mathrm{ext}}=-F_{\max}$، پتانسیل $V(x)=U(x)-F_{\mathrm{ext}}x$ یک چاه منفرد عمیق در $x\approx -L$ با سدی به ارتفاع $۲U_{۰}$ در سمت راست دارد. این مدل‌سازی تضمین می‌کند که ذره از چاه چپ شروع کند و برای رسیدن به حالت باز، عبور از سد ضروری باشد. پتانسیل کل وابسته به زمان $V(x,t)=U(x)-F_{\mathrm{ext}}(t)x$ است. کار انجام‌شده توسط نیروی خارجی در طول یک مسیر، طبق فرمول‌بندی Sekimoto، برابر است با:[۴]

$$W=\int_{۰}^{\tau}\frac{\partial V}{\partial t}dt=-\int_{۰}^{\tau}\dot{F}_{\mathrm{ext}}(t)x(t)dt \qquad (۴)$$

قضیه افت‌وخیز Crooks و برگشت‌پذیری

پروتکل رفت $\Lambda_F(t)$ را در نظر می‌گیریم که نیرو را از $-F_{\max}$ به $+F_{\max}$ در بازه $[۰,\tau]$ تغییر می‌دهد، و قرینه زمانی آن $\Lambda_R(t)=\Lambda_F(\tau-t)$است. قضیه افت‌وخیز Crooks چگالی‌های احتمال کار را در فرآیندهای رفت و برگشت به‌صورت زیر مرتبط می‌کند:[۵]

$$\frac{P_F(W)}{P_R(-W)}=\exp\left(\frac{W-\Delta F}{k_{\mathrm{B}}T}\right) \qquad (۵)$$

به طوری که $\Delta F=F(+F_{\max})-F(-F_{\max})$ اختلاف انرژی آزاد میان حالت‌های تعادلی در دو انتهای پروتکل است. برای چاه دوگانه متقارن و دامنه‌های برابر، $\Delta F=۰$ است. برای این که یک فرایند میکروسکوپی برگشت‌پذیر باشد، لازم است که برای هر

مسیر $W \approx \Delta F$ باشد؛ در این صورت نسبت توزیع‌ها واحد است و هیچ اتلاف خالصی رخ نمی‌دهد. کار اتلافی میانگین انحراف از برگشت‌پذیری را به صورت زیر بدست می‌دهد:

$$\langle W_{\rm diss} \rangle = \langle W \rangle - \Delta F \geq ۰ \qquad (۶)$$

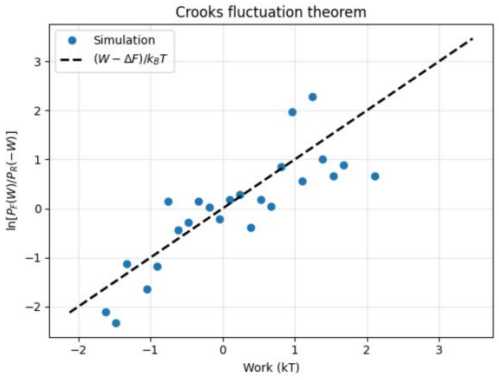
در حد فوق‌میرا ($m \to ۰$)، دینامیک به‌صورت زیر تغییر می‌کند:

$$\gamma \dot{x} = -U'(x) + F_{\rm ext}(t) + \sqrt{۲\gamma k_{\rm B} T}\,\xi(t) \qquad (۷)$$

اگر رانش به‌قدر کافی کند باشد، سیستم در تعادل باقی می‌ماند و توزیع کار متقارن می‌شود که در حد رانش کند به صورت $\langle W_{\rm diss} \rangle \propto ۱/\tau$ می‌شود. بنابراین، برای $\mathrm{Re}_{\rm conf}$ پایین، می‌توان صرفاً با کند کردن شیب ولتاژ به برگشت‌پذیری نزدیک شد.

تأیید قضیه Crooks

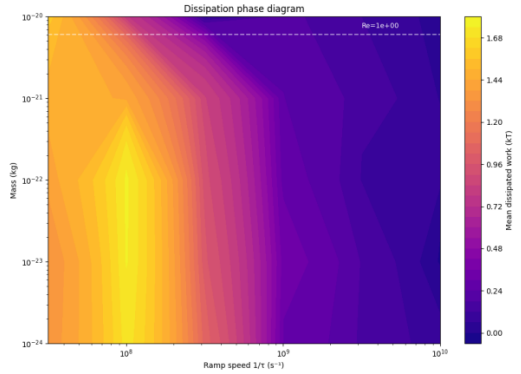
شکل ۱ توزیع‌های کار رفت و برگشت را برای حالت فوق‌میرا ($\mathrm{Re} = ۰/۰۱۳$ و $\tau = ۰/۵$ ns) نشان می‌دهد. نسبت لگاریتمی $\ln[P_F(W)/P_R(-W)]$ نسبت به W خطی و دارای شیب $۱/k_{\rm B}T$ و عرض از مبدأ صفر است که قضیه را تأیید و اعتبارسنجی می‌کند.



شکل ۱: تأیید کروکس برای حالت فوق‌میرا ($\mathrm{Re} = ۰/۰۱۳$ و $\tau = ۰/۵$ ns)

نمودار فاز برگشت‌پذیری

برای بررسی اثر متقابل اینرسی و سرعت رانش، جرم مؤثر m را از $۱۰^{-۲۴}$ kg تا $۱۰^{-۲۰}$ kg تغییر دادیم که متناظر با افزایش عدد رینولدز ساختاری $\mathrm{Re}_{\rm conf}$ از ۰/۰۱۳ (فوق‌میرا) تا ۱/۲۹ (کاملاً اینرسی) است. برای هر جرم، شیب‌های رفت با مدت τ در بازه ۰/۱ ns تا ۳۱/۶ ns اعمال شد و کار اتلافی میانگین به ازای هر نیم‌چرخه محاسبه شد. مجموعه کامل نتایج در جدول ۱ ارائه شده و همان داده‌ها به‌صورت یک نقشه گرمایی در شکل ۲ ترسیم شده است. عدم‌قطعیت‌های آماری به‌صورت خطای استاندارد میانگین ($\sigma/\sqrt{N}$) ارائه می‌شوند، با $N = ۱۵۰$ مسیر برای بیشتر مجموعه‌های پارامتری. برای نقطه $m = ۱۰^{-۲۰}$ kg و $\tau = ۱$ ns، از $N = ۵۰۰۰$ مسیر استفاده کردیم (انحراف معیار $۰/۰۰۹ k_{\rm B}T$).



شکل ۲: نقشه گرمایی کار اتلافی میانگین (برحسب $k_{\rm B}T$) به‌صورت تابعی از سرعت شیب $۱/\tau$ و $\mathrm{Re}_{\rm conf}$. خطاها کوچک‌تر از نقاط رسم‌شده هستند.

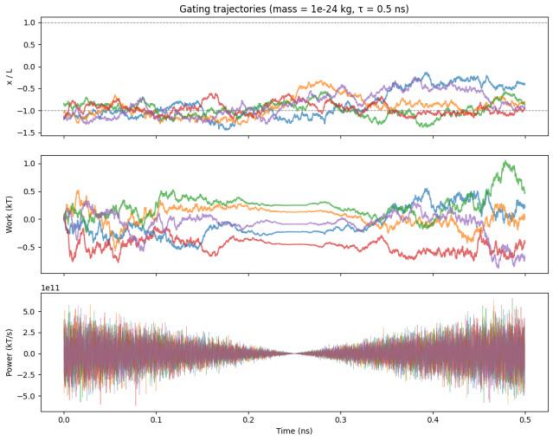
در پایین‌ترین عدد رینولدز ($\mathrm{Re}_{\rm conf} = ۰/۰۱۳$)، اتلاف با کندتر شدن شیب به‌طور یکنوا کاهش می‌یابد و از مقیاس‌بندی $\langle W_{\rm diss} \rangle \propto ۱/\tau$ پیروی می‌کند. این برای یک سیستم فوق‌میرا که شبه‌ساکن است انتظار می‌رود. برای سریع‌ترین شیب ($\tau = ۰/۱$ ns)، کار اتلافی تنها $۰/۰۷۲\, k_{\rm B}T$ است؛ این نشان‌دهنده این موضوع است که ذره فرصت عبور از سد را ندارد و در چاه اولیه باقی می‌ماند. در $\tau = ۳۱/۶$ ns اتلاف تا $۱/۳۴\, k_{\rm B}T$ افزایش می‌یابد، که همچنان زیر ارتفاع سد ($۲\, k_{\rm B}T$) است، اما نشان می‌دهد که شیب هنوز کاملاً شبه‌ساکن نیست. با این وجود روند کاهشی با افزایش τ تأیید می‌کند که دینامیک فوق‌میرا به فرایند اجازه می‌دهد با بی‌نهایت کند شدن رانش به برگشت‌پذیری نزدیک شود.

جدول ۱: میانگین کار اتلافی در هر نیم‌چرخه $\langle W_{\rm diss} \rangle / k_{\rm B}T$ برای جرم‌ها و زمان‌های شیب انتخاب‌شده. انحراف معیار معمولی $\sim ۰/۰۵ k_{\rm B}T$ به ازاء $N = ۱۵۰$ (a) مقدار خام $-۰/۰۱۰ k_{\rm B}T$ در محدوده خطا از صفر، برابر صفر گرفته شده است. (b) برای $N = ۵۰۰۰$ و انحراف معیار $۰/۰۰۹ k_{\rm B}T$

جرم (kg)	$\mathrm{Re}_{\rm conf}$	$\tau = ۰/۱$ ns	$\tau = ۱$ ns	$\tau = ۳۱/۶$ ns
۱×۱۰^{-۲۴}	۰/۰۱۳	۰/۰۷۲	۰/۲۹۶	۱/۳۴۲
۱×۱۰^{-۲۳}	۰/۰۴۱	۰/۰۰۰ (a)	۰/۳۳۲	۱/۳۲۶
۱×۱۰^{-۲۲}	۰/۱۲۹	۰/۰۷۸	۰/۲۷۲	۱/۴۱۳
۱×۱۰^{-۲۱}	۰/۴۰۷	۰/۰۵۶	۰/۲۴۱	۱/۴۸۹
۱×۱۰^{-۲۰}	۱/۲۸۷	۰/۰۲۰	۰/۱۹۲ (b)	۱/۵۹۰

مسیرهای دروازه‌بندی

شکل ۲ پنج مسیر شاخص را نشان می‌دهد. عبور تصادفی از سد قابل مشاهده است و کار اتلافی به‌صورت پله‌ای انباشته می‌شود که با رویدادهای عبور از سد هم‌زمان است؛ همچنین توان اتلافی در لحظه‌ای که ذره میان چاه‌ها گذار می‌کند به‌شدت به اوج می‌رسد.



شکل ۳: مسیرهای تصادفی (۵ نمونه) که موقعیت x/L، کار انباشته $W/k_{\mathrm{B}}T$، و توان dW/dt را برای $\mathrm{Re}_{\mathrm{conf}} = ۰/۰۱۳$ و $\tau = ۰/۵$ ns نشان می‌دهند.

نتیجه‌گیری

شبیه‌سازی‌های ما نشان می‌دهند که عدد رینولدز ساختاری $\mathrm{Re}_{\mathrm{conf}}$ مستقیماً برگشت‌پذیری ترمودینامیکی یک کانال یونی ولتاژ را کنترل می‌کند. در رژیم عمیقاً فوق‌میرا ($\mathrm{Re}_{\mathrm{conf}} \ll ۱$)، کار اتلافی میانگین از مقیاس‌بندی شبه‌ساکن $\langle W_{\mathrm{diss}} \rangle \propto 1/\tau$ پیروی می‌کند و با کند شدن شیب به مقداری که توسط ارتفاع سد تعیین می‌شود نزدیک می‌شود. این مقیاس‌بندی نشان می‌دهد که فرایند تنها در حد رانش بی‌نهایت کند به برگشت‌پذیری می‌رسد؛ در کندترین شیب شبیه‌سازی‌شده، اتلاف هنوز با ارتفاع سد قابل‌مقایسه است. وقتی جرم مؤثر چنان افزایش یابد که به $\mathrm{Re}_{\mathrm{conf}} \sim ۱$ برسد، کار اتلافی نایکنوا و وابسته به پروتکل می‌شود. این مقایسه نشان می‌دهد که ویژگی عدد رینولدز پایین دولایه لیپیدی صرفاً یک قید منفعل نیست، بلکه یک امر ضروری است که عملکرد بهینه کانال‌های یونی را تضمین می‌کند. اتلاف اندازه‌گیری‌شده ($\lesssim ۱/۵ k_{\mathrm{B}}T$) یک مرتبه بزرگی کمتر از انرژی آزاد هیدرولیز ($\approx ۲۰ k_{\mathrm{B}}T$) است، که تأیید می‌کند مرحله دریچه‌بندی هزینه متابولیکی جزئی است.

شیب خطی متقارن ساده‌ترین پروتکلی است که وارونی زمان قضیه کروکس را رعایت می‌کند. شکل‌موج ایده‌آل به‌جای یک پتانسیل عمل واقعی به‌کار گرفته شد تا تأثیر اینرسی و عدد رینولدز ساختاری را جدا کنیم. اگر کانال تقریباً برگشت‌پذیر تحت چنین محرک متقارنی پدیدار شود، آنگاه محیط با $\mathrm{Re}_{\mathrm{conf}}$ پایین، و نه یک ولتاژ دقیق، چیزی است که آن را کارآمد می‌سازد. شکل‌موج‌های نامتقارن ممکن است اتلاف مطلق را تغییر دهند، اما نمی‌توانند مقیاس‌بندی شبه‌ساکن استوار رژیم فوق‌میرا را بازگردانند.

این محاسبات دارای محدودیت‌هایی هم بود؛ نخست، زمان‌های شیب اگرچه دو مرتبه بزرگی را پوشش می‌دهند، همچنان زیر حد کاملاً شبه‌ساکن قرار دارند. کمترین اتلاف به‌دست‌آمده در $\tau = ۳۱/۶$ ns همچنان $\sim ۱/۳ k_{\mathrm{B}}T$ باقی می‌ماند که قابل‌مقایسه با ارتفاع سد است که نشان می‌دهد برای مشاهده اتلاف به رانش حتی کندتری نیاز خواهد بود. دوم، کانال یونی با یک درجه آزادی منفرد در یک پتانسیل چاه دوگانه متقارن با یک شیب نیروی خطی مدل‌سازی می‌شود؛ دومین‌های حسگر ولتاژ واقعی دستخوش تغییرات ساختاری چندمرحله‌ای در یک چشم‌انداز انرژی نامتقارن و کج‌شده می‌شوند و جفت‌شدگی با میدان الکتریکی غشا پیچیده‌تر از یک نیروی خارجی ساده است.

با ترمودینامیک تصادفی و مدلی ساده نشان دادیم که عدد رینولدز ساختاری، بر برگشت‌پذیری کانال حاکم است. در رینولدز پایین غشا، فرآیند تقریباً برگشت‌پذیر می‌شود. این ویژگی، هزینه انرژی هر پتانسیل عمل را به کمینه می‌رساند.

مرجع‌ها

[1] Catterall, W. A. (2010). Ion channel voltage sensors: structure, function, and pathophysiology. *Neuron*, **67**(4), 530-542.
[2] Risken, H. (1996). The Fokker-Planck Equation: *Methods of Solution and Applications* (2nd ed.). Springer. Chapter 6: Brownian Motion in a Periodic Potential (Overdamped Regime).
[3] Purcell, E. M. (1977). Life at low Reynolds number. *American Journal of Physics*, **45**(1), 3-11.
[4] Sekimoto, K. (1998). Langevin equation and thermodynamics. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, **130**, 17-27.
[5] Crooks, G. E. (1999). Entropy production fluctuation theorem and the nonequilibrium work relation for free energy differences. *Physical Review E*, **60**(3), 2721-2726.

شبیه‌سازی رایانه‌ای الگوی پراش XRD نانوذرات گارنت آلومینیوم ایتریوم

کاظمی، زاهده؛ رضوانی جلال، مسعود[۱]؛ سوری، داریوش[۲]

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

در مقاله پیش رو، الگوی پراش XRD مربوط به نانوذرات گارنت آلومینیوم ایتریوم[۱] با ساختار بلوری مکعبی مرکز سطحی مورد شبیه‌سازی قرار می‌گیرد. برای این کار، از فرمول‌بندی اصلی پراش نور که حالت بسیار کلی‌تری از رابطه پراش براگ است در یک کُد کامپیوتری بومی استفاده می‌شود. از نتایج حاصل از شبیه‌سازی معلوم می‌شود که برای ذرات کوچک‌تر از ۱۰ نانومتر شکل الگو و مخصوصاً پهنای قله‌ها به شدت به اندازه نانوذره وابستگی دارد. برای ذراتی که در محدوده اندازه نقاط کوانتومی قرار می‌گیرند (حدود ۱ نانومتر) الگوی پراش فاقد قله‌های تیز و مجزای پراشی می‌باشد.

واژه های کلیدی: *الگوی پراش XRD گارنت آلومینیوم ایتریوم ، شبیه‌سازی، نانوذرات، ساختار بلوری.*

Computer Simulation of the XRD Diffraction Pattern of of yttrium aluminum garnet Nanoparticles

Kazemi, Zahedeh; Rezvani Jalal, Masoud[1]; Souri, Dariush[2]

Department of Physics, Faculty of Science, Malayer University, Malayer

Abstract

In the following work, x-ray powder diffraction patten (XRD)[2] of yttrium aluminum garnet nanoparticles with body centered cubic crystal structure is simulated. To do this, the original formulation of light diffraction which is very more general than the Bragg diffraction relation, is used in a home-made computer code. The results of the simulation are that for nanoparticles with sizes smaller than 10 nm, the pattern shape and especially the peaks width depend strongly on the nanoparticle size. For particles which stay at sizes in the quantum dot region (nearly 1 nm) the pattern has no distinct and high diffraction peaks.

***Keywords**: XRD diffraction pattern, yttrium aluminum garnet, Simulation, nanoparticles, Crystal structure.*
PACS No. 78

---

[۱] $Y_3Al_5O_{12}$ (YAG)

[2] X-ray diffraction

مقدمه

پراش پرتو ایکس یکی از مهم‌ترین روش‌های تحلیل ساختار بلوری مواد است و تاریخچه‌ای طولانی دارد. تکنیک‌های پراش پرتو ایکس ابزار توصیفی بسیار مفیدی برای مطالعه غیرمخرب ساختار بلوری، ترکیب شیمیایی و خواص فیزیکی مواد بلوری هستند. از این تکنیک‌ها می‌توان برای اندازه‌گیری خواص ساختاری فازهای بلوری مانند کُرنش، چگالی نابجایی، اندازه دانه، ترکیب فازی و نقص ساختاری بهره گرفت [۱]. هنگامی که اندازه بلورک از ابعاد حجیم و کُپه‌ای به ابعاد نانو کاهش می‌یابد قله‌های XRD پهن می‌شوند [۲]. روش‌های متنوعی برای تحلیل الگوی XRD ارائه شده است که برای نانومواد مختلفی مورد استفاده قرار گرفته‌اند [۱]. یکی از بهترین روش‌ها برای این کار، استفاده از محاسبات عددی و شبیه‌سازی است. با انجام شبیه‌سازی XRD با تکیه بر مدل‌های صحیح فیزیکی می‌توان اطلاعات ارزشمندی از ساختار نانوذرات به دست آورد. یکی از مزایای شبیه‌سازی XRD نانوذرات بلوری این است که بدون نیاز به انجام آزمایش‌های پرهزینه و زمانبر می‌توان اطلاعات ارزشمندی کسب کرد.

سنتز نانوذرات و بررسی تجربی آنها معمولاً ساده نیست و به همین دلیل استفاده از شبیه‌سازی‌های کامپیوتری برای پیش‌بینی رفتار آنها در شرایط مختلف می‌تواند نقش حیاتی ایفا کند. یاقوت آلومینیوم گارنت (YAG، با فرمول $Y_3Al_5O_{12}$) به‌صورت تک‌بلور معمولاً به عنوان ماده‌ای برای شبکه میزبان لیزر، مواد درخش‌ساز یا فسفر استفاده می‌شود، به دلیل خواص شیمیایی و فیزیکی مطلوب آنها: ساختار مکعبی منحصربه‌فرد گارنت و ویژگی‌های همسان‌گرد نوری ناشی از آن، و همچنین پایداری شیمیایی عالی در دمای بالا. اخیراً نشان داده شده است که پودرهای YAG یا سرامیک‌های پلی‌کریستالی معادل یا بهتر از تک‌بلورهای ساخته‌شده به روش چکرالسکی عمل می‌کنند [۳]. گارنت آلومینیوم ایتریوم ($Y_3Al_5O_{12}$) مهم‌ترین ماده میزبان لیزر حالت جامد است. ویژگی‌هایی همچون انبساط حرارتی کم، شفافیت نوری بالا، تلفات صوتی پایین، آستانه بالای آسیب نوری، سختی، و پایداری عمومی در برابر تغییرات شیمیایی و مکانیکی، همگی در موفقیت آن به عنوان پرمصرف‌ترین ماده لیزری نقش دارند [۱و۲]. علاوه بر این، YAG را می‌توان به سرامیک‌های شفاف تف جوشی کرد که این امر آن را برای کاربردهای عملی جذاب‌تر می‌سازد [٤]. متاسفانه هیچ گزارشی از شبیه‌سازی پراش پرتو ایکس نانوذرات YAG در مراجع منتشر نشده است و این درحالی است که یافته‌های شبیه‌سازی می‌تواند اطلاعات بیشتری از ساختار آن به دست دهد. در این مقاله، به شبیه‌سازی XRD نانوذرات YAG با ساختار مکعبی مرکز حجمی (BCC) پرداخته می‌شود.

فرمول‌بندی الگوی پراش XRD

پراش پرتو ایکس از بلورها بر اساس قانون براگ انجام می‌شود. آشناترین فرمول قانون براگ به صورت زیر است:

$$n\lambda = 2dSin(\theta) \quad (۱)$$

که در آن n یک عدد صحیح، λ طول موج پرتو ایکس، d فاصله صفحات بلوری و θ نیز زاویه پراش می‌باشد. اگر فرض شود که بلور مورد بررسی یک بلور کامل است آنگاه فرمول پراش ساده‌تر می‌شود. اگر بردار انتشار پرتو x فرودی $\vec{k}$، بردار انتشار پرتوی پراکنده شده $\vec{k'}$ و بردار شبکه وارون نیز $\vec{G}$ باشد آنگاه فرمول پراش به شکل زیر در خواهد آمد:

$$\vec{k} - \vec{k'} = \vec{G} \quad (۲)$$

به عبارت دیگر، با داشتن بردارهای شبکه وارون و معلوم بودن جهت پرتو ایکس فرودی می‌توان تمام $\vec{k'}$ هایی که شرط فوق را برآورده می‌کنند پیدا کرد. جهت این $\vec{k'}$ ها در واقع همان موقعیت فضایی قله‌های پراشی را نشان خواهد داد. برای یک بلور کامل این قله‌ها کاملاً تیز و باریک هستند.

حال اگر بلوری که مورد مطالعه قرار دارد دارای نقایص بلوری باشد (مثلاً ابعاد آن محدود باشد) آنگاه فرمول (۲) در عین حالی که تقریب بسیار خوبی است ولی جامع نخواهد بود. در ابعاد نانومتری که شامل فقط چند ده الی چند صد یاخته بسیط شبکه است اعتبار رابطه (۲) باز هم کمتر می‌شود و دیگر خبری از قله‌های تیز و باریک پراشی نخواهد بود حتی ممکن است که ارتفاع قله‌های پراشی نیز تغییر کند. این بدان معناست که فرمول‌بندی پراش XRD در ابعاد ریز بلوری و مخصوصاً در قلمرو نانو از رابطه (۲) انحراف دارد. متاسفانه در این خصوص

فرمول‌بندی صریح و یکتایی وجود ندارد و باید به روش‌های محاسباتی روی آورد. اگر برای مثال N اتم در هر یاخته بسیط وجود داشته باشد و مکان هر اتم نیز با $\vec{r_n}$ مشخص شود آنگاه دامنه تداخلی پرتوی ایکس فرودی به این اتم‌ها (با بردار انتشار $\vec{k}$) و پرتوهای پراکنده شده از آنها (با بردار انتشار $\vec{k'}$) به صورت زیر خواهد بود:

$$E = \sum_{n=1}^{N} e^{i(\vec{k}-\vec{k'}).\vec{r_n}} \quad (۳)$$

این دامنه پراشی مربوط به یک یاخته بسیط شبکه است و اگر چندین یاخته وجود داشته باشد آنگاه با جمع همه آنها به راحتی می‌توان شدت پراش بر حسب زاویه پراکندگی و قله‌های پراشی را پیدا کرد. و در نهایت با میانگین گیری از رابطه (۳) به رابطه‌ی (٤) می‌رسیم که باعث سهولت در کار می‌شود. با استفاده از رابطه زیر به راحتی می‌توان الگوی XRD هر ذره‌ای را صرفاً با دانستن تعداد اتم‌های موجود در آن و مکان آنها با دقت کامل محاسبه و شبیه‌سازی کرد. این رابطه مخصوصاً در نانوبلورک‌ها و نقاط کوانتومی که تعداد اتم‌های تشکیل دهنده آنها خیلی زیاد نیست، می‌تواند بسیار کاربردی باشد.

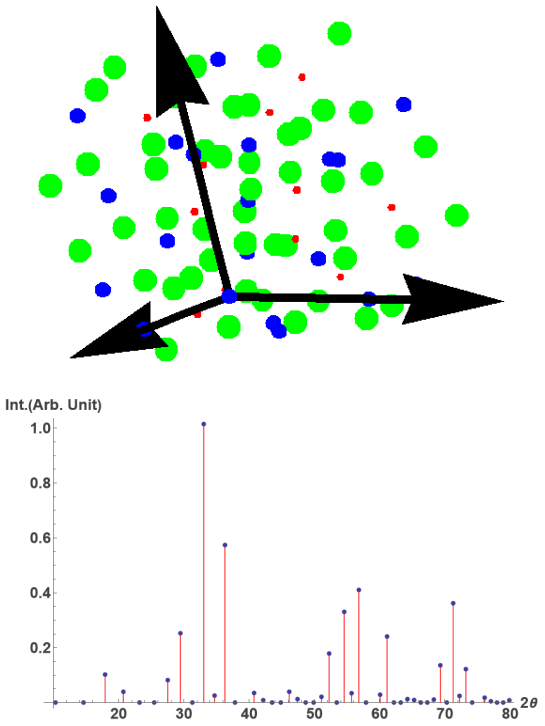
$$I(2\theta) = [1 + \mathrm{Cos}(2\theta)^2] \sum_{m,n} \frac{\mathrm{Sin}(2kr_{mn}\,\mathrm{Sin}(\theta))}{2kr_{mn}\,\mathrm{Sin}(\theta)} \quad (٤)$$

که در آن $\vec{r}_{mn} = \vec{r}_m - \vec{r}_n$ است و $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ است و ۲θ نیز زاویه‌ی بین راستای فرود و راستای پراش می‌باشد[۵].

شبیه‌سازی XRD

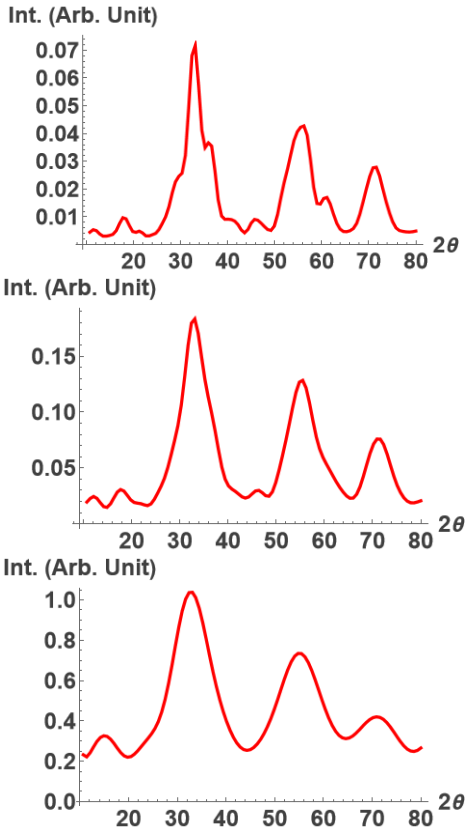
بلور YAG دارای ساختار مکعبی مرکز سطحی با ثابت شبکه a=12.004 Å است [٤]. و دارای ١٦٠ (٨٠) اتم در سلول مکعبی (اولیه) است. یون‌های Y مکان‌های ٢٤(c) را اشغال می‌کنند و هر یک در یک دوازده وجهی با ٨ اتم اکسیژن احاطه شده است (عدد همارایی ٨).

اتم‌های O مکان‌های ٩٦(h) را اشغال می‌کنند. دو مکان متفاوت برای Al وجود دارد:یکی در مکان ١٦(a) با تقارن نقطه‌ای هشت‌وجهی (C_{3i}) ودیگری در مکان‌های ٢٤(d) با تقارن نقطه‌ای چهاروجهی (S_4) را اشغال می‌کنند. ساختار گارنت را می‌توان به صورت هشت‌وجهی‌ها، چهاروجهی‌ها و دوازده‌وجهی‌های به هم پیوسته با اتم‌های O مشترک در گوشه‌ها در نظر گرفت[۳]. در شکل ۱–بالا سلول واحد شبکه این بلور ترسیم شده است. شبیه‌سازی الگوی XRD این بلور برای حالت کُپه‌ای توسط برنامه کامپیوتری مذکور نیز در شکل ۱–پایین دیده می‌شود.



شکل ۱: (بالا) سلول واحد شبکه برای بلور YAG با ساختار *BCC*. (پایین) الگوی XRD شبیه‌سازی شده برای بلور کپه‌ای YAG.

الگوی شبیه‌سازی شده به خوبی با الگوی استاندارد بلور YAG به شماره کارت JCPDS: 33–0040 همخوانی دارد و به گروه فضایی Ia-3d (230) متعلق است [٦]. اگر ابعاد بلور در ناحیه نانومتر باشد این الگو تغییراتی خواهد داشت. در شکل ۲ الگوی XRD مربوط به بلور YAG با ابعاد ۱، ۲ و ۳٫۵ نانومتر آورده شده است.



شکل ۲: الگوی XRD شبیه‌سازی شده نانوبلور YAG با اندازه‌های ۳٫۵، ۲ و ۱ نانومتر به ترتیب از پایین به بالا.

مشخص است که هرچه ابعاد بلور کوچک‌تر شده قله‌های پراشی هم پهن‌تر شده‌اند. تغییرات ایجاد شده روی الگوی XRD برای اندازه‌های کوچک‌تر، شتاب بیشتری نسبت به اندازه بلور دارد ولی در ابعاد بزرگ‌تر، کمتر محسوس است. نرم افزارهای دیگری همچون InteractiveXRDFit در مراجع وجود دارند که البته غالباً برای شبیه‌سازی XRD کپه‌ای هستند [۷]. در صورتی که شبیه‌سازی ارائه شده در اینجا برای بلورهایی با ابعاد نانومتر است. به وضوح مشخص است که پهن شدگی با اندازه ۱ نانومتری در قله‌های پراشی آنقدر زیاد است که بعضی از قله‌ها با هم ادغام شده‌اند و دیگر خبری از قله‌های شاخص و تیز XRD وجود ندارد.

نکته مهم دیگری که باید دقت شود این است که در محاسبه الگوی XRD نشان داده شده در شکل ۲ ، پرتو ایکس فرودی از جهت‌های متعددی به بلور تابیده شده تا بتواند وضعیت واقعی XRD پودری را شبیه‌سازی کند.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، الگوی پراش XRD نانوذرات YAG هم در حالت کپه‌ای و هم در ابعاد نانو با اندازه‌های ۱، ۲ و ۳٫۵ نانومتر توسط یک برنامه کامپیوتری بومی شبیه‌سازی گردید. معلوم شد که تغییرات الگوی پراش برای عمق ناحیه نانو (زیر ۱۰ نانومتر) خیلی سریع می‌باشد و پهنای قله‌ها و تغییر شکل الگو با کاهش اندازه به شدت محسوس می‌شود. برای ابعاد بزرگ‌تر عملاً تغییرات مشهودی در الگو مشاهده نمی‌گردد. می‌توان چنین نتیجه‌گیری کرد که الگوی پراش نانوذرات YAG برای ابعاد بیش از ۱۰ نانومتر همان الگوی پراش کپه‌ای است. توسعه برنامه کامپیوتری مذکور جزء کارهای در حال انجام نویسندگان مقاله می‌باشد.

سپاسگزاری

از دانشگاه ملایر به خاطر حمایت از مقاله قدردانی می‌شود.

مرجع‌ها

[۱] Saeed Ebrahimi, Dariush Souri, Alireza Khezripour, "*Strain-size features of bare ZnSe:Cu and ZnSe:Cu@ZnS core/shell quantum dots from extensive X-ray diffraction analysis, and their photoluminescence properties*", Journal of Luminescence 244 (2022) 118757.
[۲] Cameron F. Holder and Raymond E. Schaak, "*Tutorial on Powder X-ray Diffraction for Characterizing Nanoscale Materials*", ACS Nano (2019), 13, 7359−7365.
[۳] D. Michalik, M.Sopicka-Lizer, J. Plewa, T. Pawlik, "Application Of Mechanochemical Processing To Synthesis Of Yag:Ce Garnet Powder", Archives Of Metallurgy And Materials Volume 56 (2011).
[۴] Ke Liua,B, XIAOLIN Zhoua, Jing Changa, JUAN Chenga, Bing Dong. "*Electronic structure and optical propertiesof yttrium aluminum garnet (Y3Al5O12)under high pressure*", Optoelectronics And Advanced Materials Rapid Communications Vol. 8, No. 3-4, March - April (2014), P. 264 – 269.
[۵] A. E. Ross, D. G. Mc Culloch and D. R. McKenziea, "*Extending the Debye scattering equation for diffraction from a cylindrically averaged group of atoms: detecting molecular orientation at an interface*", Acta Cryst. A 76, 468–473, 2020.
[۶] Xiaowu He, Xiaofang Liu, Rongfeng Li, Bai Yang, Kaili Yu, Min Zeng, Ronghai Yu, "*Effects of local structure of Ce3+ ions on luminescent properties of Y3Al5O12:Ce nanoparticles*", Scientific Reports, (2016) 6:22238.
[۷] Ce´line Lichtensteiger, "*InteractiveXRDFit: a new tool to simulate and fit X-ray diffractograms of oxide thin films and heterostructures*", J. Appl. Cryst. (2018) 51, 1745–1751.

تاثیر ویژگی های اپتیکی و غلظت نانو ذرات بر اثر کازیمیر در میکرو دستگاه سه لایه‌ای

دادی گیو ، زهره

گروه علوم پایه دانشگاه صنعتی بیرجند، بیرجند

چکیده

در این مطالعه وابستگی نیروی کازیمیر به ویژگیهای اپتیکی صفحات میکرودستگاه سه لایه ای که بین صفحات آن فروسیال قرار دارد، بررسی شده است. افزودن نانو ذره به فروسیال باعث کاهش نیروی کازیمیر و با افزایش غلظت نانوذرات این کاهش شدیدتر می‌گردد.

واژه های کلیدی: *نیروی کازیمیر، ویژگی های اپتیکی، نظریه لیفشیتز، نانو ذره*

Effects of Optical Properties and Nanoparticle Concentration on the Casimir Effect in Three-Layer Microsystem

Dadigiv, Zohreh
Department of Basic Sciences, Birjand University of Technology, Birjand, Iran

Abstract

In this study, the dependence of the Casimir force on the optical properties in the three-layer microsystem containing a ferrofluid between its plates is investigated. The results show that the addition of nanoparticles to the ferrofluid leads to a reduction in the Casimir force. Furthermore, this reduction becomes more pronounced as the nanoparticle concentration increases.

Keywords: *Casimir Force, Optical Properties, Lifshitz Theory, Nanoparticle*

PACS No. ۷۸

مقدمه

پیشرفت فناوری سیستم‌های میکروالکترومکانیکی (MEMS) و نانوالکترومکانیکی (NEMS) طی دهه های اخیر موجب افزایش توجه به نیروهای سطحی و اثرات کوانتومی در مقیاس‌های میکرو و نانو شده است. در این ابعاد، نیروهای ناشی از افت و خیزهای کوانتومی امواج الکترومغناطیسی در خلاء می‌توانند نقش تعیین‌کننده‌ای در رفتار مکانیکی، پایداری و عملکرد اجزای میکروسیستم‌ها ایفا کنند. یکی از مهم‌ترین این پدیده‌ها، اثر کازیمیر است [۱] که نخستین بار توسط هندریک کازیمیر در سال ۱۹۴۸ پیش‌بینی شد[۲]. این اثر ناشی از تغییر چگالی حالت‌های میدان الکترومغناطیسی کوانتومی در فضای محدود میان دو سطح رسانا بوده و منجر به ایجاد نیروی جاذبه یا در برخی شرایط خاص نیروی دافعه میان اجسام می‌شود. برای دو صفحه موازی ایده‌آل در خلأ، نیروی کازیمیر بر واحد سطح به صورت زیر بیان می‌شود:

$$F_{Cas} = \frac{\pi^2 \hbar C}{240 z^4}$$

که در آن C سرعت نور، z فاصله بین صفحات ، $\hbar$ ثابت پلانک است. وابستگی شدید این نیرو به فاصله -سبب می‌شود که در مقیاس‌های میکرو تا نانومتری اثر آن به یکی از عوامل اصلی طراحی و بهره‌برداری از ساختارهای MEMS و NEMS تبدیل شود.در

سال‌های اخیر، مطالعه اثر کازیمیر در ساختارهای چندلایه مورد توجه گسترده قرار گرفته است. زیرا بسیاری از دستگاه‌های واقعی از محیط های ناهمگن شامل لایه‌های دی‌الکتریک، فلزی و نیمه‌رسانا تشکیل شده‌اند. در میان این ساختارها، میکرودستگاه‌های سه‌لایه به دلیل قابلیت تنظیم خواص اپتیکی و الکترومغناطیسی، امکان کنترل نیروهای ناشی از افت و خیزهای خلاء را فراهم می‌کنند. حضور یک لایه میانی با ضریب دی‌الکتریک مناسب می‌تواند اندازه و حتی علامت نیروی کازیمیر را تغییر دهد. این ویژگی در طراحی کلیدهای MEMS، رزوناتورها، حسگرهای فوق‌حساس و ادوات نانومقیاس اهمیت ویژه‌ای دارد.

توصیف نظری اثر کازیمیر در محیط‌های چندلایه عمدتاً بر پایه نظریه لیفشیتز انجام می‌شود[۳]. طبق این نظر یه، نیرو در واحد سطح صفحات از رابطه زیر بدست می آید.

$$F(T,d) = \frac{\hbar}{2\pi^2}\int_0^\infty d\omega\, coth\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) Re\int_0^\infty dqq|k_0|\, g(q,\omega)$$

q بردار موج درون صفحات و مولفه در راستای z آن با k_0 می‌باشد. تابع $g(q,\omega)$ توصیف کننده بازتاب‌های متوالی از سطح صفحات است

$$g(q,\omega) = \sum_{v=s,p} \frac{r_1^v r_2^v\, exp(2ik_0 d)}{1-r_1^v r_2^v\, exp(2ik_0 d)}$$

$r_{1,2}^v$ ضرایب بازتاب از صفحات ۱و ۲ هستند که $v = s,p$ به ترتیب نشان‌دهنده پلاریزه عرضی الکتریکی و مغناطیسی است. مطالعات متعدد نشان داده‌اند که انتخاب مناسب مواد در سیستم‌های سه‌لایه می‌تواند به کاهش پدیده چسبندگی ، افزایش پایداری مکانیکی و بهبود عملکرد دینامیکی ادوات میکرو و نانومقیاس منجر شود.

روش کار

در سیستم MEM مورد مطالعه، صفحات دستگاه از Au، SiC و SiO2 به ترتیب به‌عنوان رسانای قوی، رسانای (ضعیف) متوسط و نارسانا ساخته شده‌اند. لازم به ذکر است که صفحه بالایی متحرک و صفحه پایین ثابت می باشد. توسط دو ماده از نظر اپتیکی متفاوت (شکل۱) پوشش داده شده است. همچنین برای کنترل عملکرد پایدار دستگاه از هر دو فاز آمورف و بلوری یک ماده ی تغییردهنده‌ی فاز (PCM) نیز برای صفحات این میکروسیستم استفاده شده است. این مواد که از ویژگی های منحصربه‌فردی برخوردارند[٤].

بخش موهومی تابع دی الکتریک طلا در محدوده ی بسامدهای پایین (ناحیه فروسرخ) به‌سبب جذب بالای‌الکترون های رسانش بزرگ است. این امر موجب شده است تا این فلز در میکرودستگاه‌ها اثر کازیمیر بسیار قوی از خود نشان دهد. برای دستیابی به مقاومت و سختی بالا و یا حساسیت قوی به افت‌وخیزهای گرمایی، سیلیکون دی‌اکسید(SiO2) و سیلیکون کربید (SiC)گزینه های بسیار خوبی هستند. همچنین در لایه ی میانی بین اجزای سیستم، فروسیال به کار رفته است. سیال پایه که به‌عنوان مایع حامل در این پژوهش به‌کار رفته، کروسین با فرمول شیمیایی $C_{12}H_{26} - C_{15}H_{32}$ است. قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک این ماده بر حسب بسامد موهومی ماتسوبارا به صورت زیر است. [۵]:

$$\varepsilon_c(i\xi_n) = 1 + \frac{B}{1+\xi_n\tau} + \frac{C_{IR}}{1+\left(\frac{\xi_n}{\omega_{IR}}\right)^2} + \frac{C_{UV}}{1+\left(\frac{\xi_n}{\omega_{UV}}\right)^2}$$

بنابراین در یک میکروسیستم که فضای میان صفحه‌های آن با یک فروسیال به گذردهی $\varepsilon_{ff}(i\xi_n)$ و تراوایی μ_{ff} پر شده است، از فرمول ریلی به معادله‌ی زیر بدست می آید:

$$\varepsilon_{ff}(i\xi_n) = \frac{\varepsilon_m(i\xi_n)\varepsilon_c(i\xi_n)(1+2\Phi) + 2\varepsilon_c^2(i\xi_n)(1-\Phi)}{\varepsilon_m(i\xi_n)(1-\Phi) + \varepsilon_c(i\xi_n)(1+2\Phi)}$$

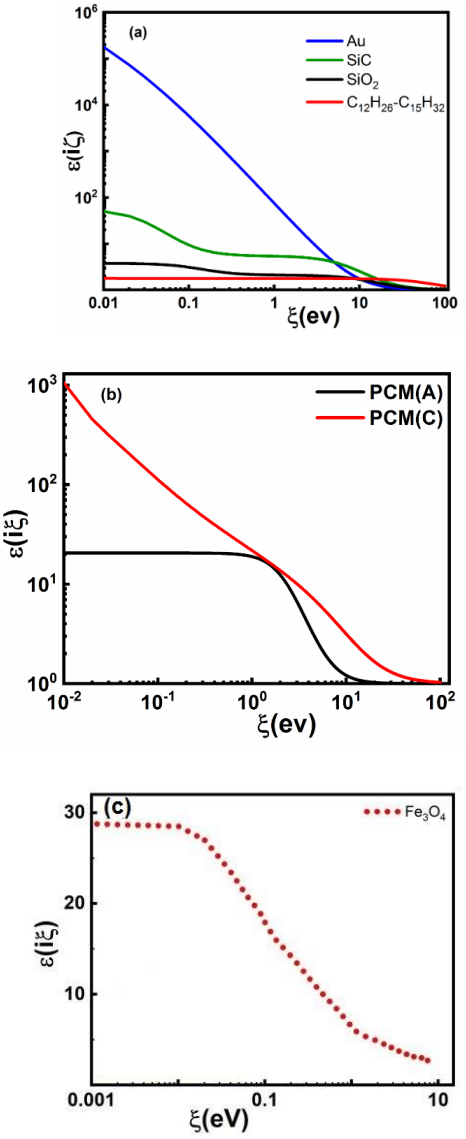
$\varepsilon_m(i\xi_n)$ گذردهی دی‌الکتریک نانوذرات مغناطیسی، $\varepsilon_c(i\xi_n)$گذردهی دی‌الکتریک کروسین و Φ غلظت نانوذرات مغناطیسی‌است.

μ_{ff} تراوایی مغناطیسی فروسیال، عامل مهم دیگر در بزرگی نیروی کازیمیر است که در شرایط مرزی ماکسول وارد می شود. ویژگی مغناطیسی تنها به‌واسطه‌ی بسامد صفر ماتسوبارا در فرمول لیفشیتز بر نیروی کازیمیر اثر (n = 1) می گذارد. زیرا در دمای اتاق، تراوایی مغناطیسی در بسامد های بسیار کوچک تر از بسامد اول ماتسوبارا

به سرعت به سمت یک میل می کند. بنابراین تراوایی مغناطیسی فروسیال را می‌توان به صورت زیر می باشد.

$$\mu_{ff}(0) = 1 + \frac{2\pi^2\Phi}{g}\frac{M_S^2 D^3}{K_B T}$$

M_S مغناطش اشباع در واحد حجم، D قطر نانو ذرات و K_B ثابت بولتزمن است. نانوذرات به‌کار رفته در فروسیال برای میکرودستگاه مورد مطالعه، ذرات Fe3O4 به قطر nm۱۰ است [۵].



شکل ۱: (a) و (b) تابع های دی الکتریک مواد به‌کار رفته برحسب بسامد موهومی. (c) تابع دی‌الکتریک نانوذرات Fe_3O_4 .

از آنجایی که بین صفحات دستگاه یک سیال قرار دارد پس نیروی هیدرودینامیک که در جهت مخالف حرکت است به همراه نیروی کازیمیر به شدت موجب فعال سازی دستگاه‌های میکروالکترومکانیکی در شرایط محیطی می شود. از یک طرف تغییرات سرعت سیال در راستای افق گرادیان سرعتی ایجاد می‌کند . از طرف دیگر در این میکروسیستم ، حرکت صفحه در راستای قائم، نیروی عمودی ایجاد می‌کند. بنابراین حرکت صفحه‌ی متحرک به سمت بالا و پایین سبب تغییرات فشار در راستای عمود می‌شود، درحالی‌که تغییر بزرگی مؤلفه‌ی مماسی سرعت سیال، گرادیان سرعت افقی ایجاد می کند که به شکل گیری نیروی کشش هیدرودینامیکی عمودی می‌انجامد. این نیرو که از طرف سیال بر هر جسم در حال حرکت درون آن وارد می‌شود با معادله

$$f_h(z) = -\frac{A\mu f}{z}\frac{dz}{dt}$$

داده می شود. در این رابطه A مساحت سطح، مربوط به هندسه ی سیستم است. برای مثال در میکروسیستم مورد پژوهش، مساحت صفحه ها و همچنین z فاصله ی جدایی بین صفحه‌هاست. μ ویسکوزیته ی سیال، و در صورت وجود نانو ذرات، ویسکوزیته ی نانوسیال تعریف می شود. f ضریب نیروی هیدرودینامیکی است که در واقع تصحیحات ناشی از جریان رینولدز بر اثر لغزش روی سطح جامد است. با فرض ثابت نگه داشتن تمام عوامل تأثیرگذار به جز غلظت در ویسکوزیته ی سیال، برای همه ی سیالات نیوتنی که رفتار آن ها با استفاده از قانون نیوتن قابل توصیف است، ویسکوزیته‌ی فروسیال در غلظت‌های کم را می توان از فرمول اینشتین محاسبه کرد. در این پژوهش، برای دو غلظت متفاوت از مدل های تئوری انیشتین و وند ، برای محاسبه‌ی ویسکوزیته‌ی فروسیال استفاده شده است. در واقع مدل وند یکی از مدل‌های تئوری تصحیحاتی از مدل اینشتین است. کروسین از جمله سیالات نیوتنی است که در دمای ثابت، ویسکوزیته ی آن ها بدون‌توجه به مقدار نیروی اعمال شده، مقداری ثابت است.

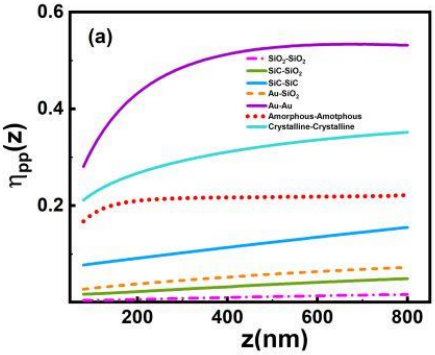
نتایج

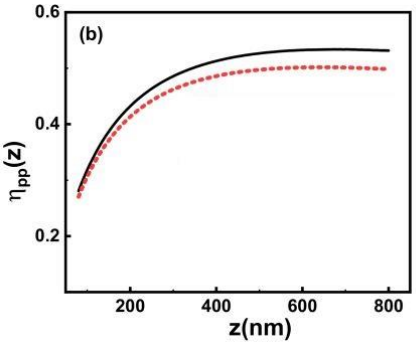
برای تجزیه و تحلیل درست و دقیق عملکرد دینامیکی میکروسیستم، بایستی اثر ویژگی اپتیکی اجزای تشکیل دهنده ی میکروسیستم بر

نیروی کازیمیر را بررسی کرد. به این منظور باید کمیت فاکتور کاهش ($\eta(z)$) که عبارت است از عامل کاهش میزان انحراف نیروی کازیمیری که از نظریه لیفشیتز بدست می آید ($F_{Cas}^{L}(z)$) نسبت به نیروی نیروی کازیمیر ایده آل بین دو صفحه ی رسانای کامل موازی در خلاء و دمای صفر مطلق ($F_{Cas}(z)$)؛ را محاسبه کرد.

$$\eta(z) = \frac{F_{Cas}^{L}(z)}{F_{Cas}(z)}$$

شکل ۲ فاکتور کاهش کازیمیر برای میکروسیستم های مختلف شامل فروسیال در لایه ی میانی را نمایش‌می‌دهد. غلظت نانوذرات $\Phi = 0.02$ و قطر آن‌ها $D = 10nm$ در نظر گرفته شده‌اند. مشاهده می شود که با افزایش رسانندگی صفحات دستگاه، نیروی کازیمیر و به دنبال آن فاکتور کاهش، افزایش می یابد. این‌فاکتور برای میکروسیستم $Au - Au$ بیشترین و برای میکروسیستم $SiO2 - SiO2$ کمترین مقدار است. همچنین در این شکل، نمودار b فاکتور کاهش برای میکروسیستم‌های $Au - Au$ و در دو غلظت $\Phi = 0.02$ و $\Phi = 0.08$ رسم شده است. بدیهی است که با افزایش غلظت نانوذرات به قطر $D = 10nm$ در لایه ی میانی، اثر کازیمیر و در نتیجه فاکتور کاهش، کم می شود که با نتایج مطالعات پیشین برای نانو ذرات با همین قطر سازگاری دارد [٦]. به این معنی که از یک طرف، با افزایش غلظت نانوذرات مغناطیسی، نیروی کازیمیر از حالت ایده‌آل فاصله گرفته است و از سوی دیگر ، میکروسیستمی که ویژگی نوری صفحه های آن ضعیف‌تر است، بیشتر تحت تأثیر خاصیت فروسیالی و در نتیجه، نیروی کازیمیر قرار می‌گیرد.





شکل ۲: فاکتور کاهش کازیمیر برای میکرودستگاه های سه‌لایه ای مختلف برحسب فاصله ی جدایی بین‌صفحه ها با فروسیال حاوی نانوذرات به غلظت $\Phi = 0.02$ (b) فاکتور کاهش کازیمیر برای‌میکرودستگاه سه‌لایه ای بر حسب فاصله ی جدایی با فروسیال حاوی نانوذرات به غلظت‌های$\Phi = 0.08$ و $\Phi=0.02$.

نتیجه گیری

با افزایش رسانندگی صفحات دستگاه، نیروی کازیمیر و به دنبال آن فاکتور کاهش، افزایش می یابد. با افزایش غلظت نانوذرات اثر کازیمیر کاهش می یابد لذا احتمال آنکه دستگاه دچار چسبندگی گردد کاهش یافته و انتظار داریم عملکرد پایداری داشته باشد.

مرجع‌ها

[1] Michael Bordag, Mohideen, U., & Mostepanenko, V. M. (2001). New developments in the Casimir effect. Physics Reports, **353**(2001)1.

[2] Hendrik B. G. Casimir. On the attraction between two perfectly conducting plates. Proceedings of the Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen, **51**(1948), 793–795.

[3] Evgeny M. Lifshitz , The theory of molecular attractive forces between solids. Soviet Physics JETP, **2**(1956), 73–83.

[4] F. Tajik, Z. Dadigiv, Physica B **718** (2025) 417881

[5] GL. Klimchitskaya, et al. “Impact of magnetic particles on dispersion forces in ferrofluid-based microdevices,” 2018 IEEE International Conference on Electrical En-gineering and Photonics (EExPolytech). IEEE, (2018).

[6] J. Philip, P. D. Shima, and Baldev Raj. “Nanofluid with tunable thermal properties,” Applied physics letters. 92.4 .(2008)

کنفرانس فیزیک ایران

دانشگاه قم – ۲ الی ۵ شهریور ۱۴۰۵

مجموعه مقالات شاخه

ماده چگال تجربی

www.psi.ir/f/physics1405

بررسی ساختاری و الکتریکی ساختار دو بعدی V_2N MXene و قدرت جذب اتم های Li توسط آن به عنوان الکترود در باتریهای یون لیتیومی

صورتیان ، سیدعلیرضا[1]؛ دوستی، حسین[2]

[1] گروه فیزیک، دانشگاه لرستان

[2] گروه فیزیک، دانشگاه لرستان

چکیده

در چاچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسباتی **Quantum ESPRESSO** *و توابع موج تخت(wave-plane) و پتانسیل تبادلی همبستگی GGA نشان داده شد که تک لایه مکسین V_2N ساختاری رسانا و پایدار است. همچنین نتایج این تحقیق نشان داد افزایش تراکم اتم های Li جذب شده در سطح V_2N باعث تغییر مکان تعادلی جذب و همچنین تغییر ثابت شبکه تعادلی می گردد. به گونه ای که در تراکم های کمتر از یک اتم Li به ازای هر یاخته ثابت شبکه تعادلی با افزایش جذب کاهش یافته و در تراکم های جذب یک اتم Li و یا بیشتر ثابت تعادلی شبکه افزایش می یابد. حداکثر جذب اتم های Li در سطح V_2N برابر با 4 پیش بینی شده است که معادل ظرفیت ذخیره سازی انرژی الکتریکی معادل 925mAh/gr است که مقدار بسیار نوید بخشی در حوزه باتریهای یون لیتیومی است.*

واژه های کلیدی:مکسین و باتری‌های یون- لیتیومی و نظریه تابعی چگالی و V_2N Mxene و لیتیوم

Investigation of the Structural and Electronic Properties of Two-Dimensional V_2N MXene and Its Ability to Adsorb Lithium Atoms as an Electrode for Lithium-Ion Batteries

Souratian, seyed Alireza[1]; Doosti, Hosien[2]

[1] *Department of Physics, University of Lorestan*
[2] *Department of Physics, University of Lorestan*

Abstract

In this study, the structural, electronic, and Li adsorption properties of the V_2N MXene monolayer were examined using DFT within the Quantum ESPRESSO package. The results show that V_2N is metallic and structurally stable. Li adsorption at different concentrations was analyzed, revealing that increasing Li coverage changes both the equilibrium adsorption site and the lattice constant. For Li concentrations below one atom per unit cell, the lattice constant decreases, while at one Li atom or higher, it increases. The maximum Li adsorption capacity was found to be four atoms, corresponding to a theoretical specific capacity of 925 mAh/g. These findings demonstrate the promising potential of V_2N MXene for lithium-ion battery applications.

***Keywords**: MXene, Battery lithium-ion, Density functional theory (DFT), V_2N Mxene, Li*

PACS No.

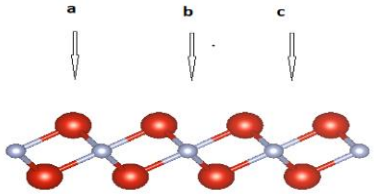
مقدمه

در دهه‌های اخیر، افزایش روزافزون تقاضای جهانی برای انرژی و ضرورت کاهش گازهای گلخانه‌ای، پژوهشگران را به سمت توسعه

سیستم‌های ذخیره‌سازی انرژی پاک و پایدار سوق داده است[1]. در این میان، باتری‌های یون لیتیومی Lithium-ion batteries (LIBs) به دلیل برخورداری از ظرفیت ذخیره سازی انرژی الکتریکی بالا، به فناوری غالب در تأمین توان دستگاه‌های الکترونیکی تبدیل شده‌اند[2]. عملکرد الکتروشیمیایی این باتری‌ها تا حد زیادی توسط خواص فیزیکی و شیمیایی مواد تشکیل‌دهنده الکترودهای آن‌ها تعیین می‌شود. در حال حاضر، گرافیت به‌عنوان الکترود استاندارد و تجاری در باتری‌های یون لیتیومی مورد استفاده قرار می‌گیرد. با این حال، ظرفیت نظری گرافیت محدود به حدود 372mAh /g است که این مقدار پاسخگوی نیاز بازار برای خودروهای الکتریکی با برد مسافتی بالا نیست[3], [4]. از این رو، طراحی و شناسایی مواد الکترود جدید که به‌طور هم‌زمان دارای ظرفیت ذخیره‌سازی بالا، سد نفوذی پایین جهت نفوذ سریع یون‌های لیتیوم، و رسانایی الکتریکی عالی باشند، از اولویت‌های اصلی پژوهش در حوزه باتری های یون لیتیومی است. در سال‌های اخیر، نانوساختارهای دوبعدی (2D) به دلیل ویژگی‌های منحصربه‌فرد ساختاری و الکترونیکی، توجه بسیاری را در حوزه الکتروشیمی به خود جلب کرده‌اند. در میان کاندیداهای گوناگون، خانواده مکسین‌ها (MXenes) که شامل کاربیدها، نیتریدها و کربونیتریدهای فلزات واسطه دوبعدی هستند به دلیل رسانایی الکتریکی و پایداری مکانیکی برجسته، پتانسیل بالایی برای استفاده به عنوان الکترود نشان داده‌اند[5]. با این حال، تعیین دقیق رفتار الکتروشیمیایی و پایداری ساختاری تک‌لایه‌های مکسینی جدید نیازمند بررسی‌های دقیق در مقیاس اتمی است. به منظور بررسی توانمندی ساختار مکسین V_2N در بکارگیری به عنوان الکترود در باتری های یون لیتیومی خواص الکتریکی و سپس پایداری مکانیکی این ساختار بررسی شده است. در ادامه قابلیت و قدرت جذب اتم های لیتیوم در سطح V_2N بررسی شده و حداکثر توانمندی جذب این ماده که پارامتر بسیار مهمی در مشخص نمودن ظرفیت ذخیره سازی انرژی الکتریکی است پیش بینی شده است.

روش محاسبات

این تحقیق در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) و با بهره‌گیری از بسته محاسباتی Quantum ESPRESSO انجام شده است. برای توصیف برهم‌کنش میان هسته و الکترون‌های ظرفیت، روش پتانسیل همبسته تقویت‌شده (PAW) به کار گرفته شده است. همچنین، به‌منظور در نظر گرفتن اثرات تبادلی و همبستگی الکترونی، تقریب گرادیان تعمیم‌یافته (GGA) با تابعی PBE مورد استفاده قرار گرفته است. توابع موج الکترونی بر پایه امواج تخت بسط داده شده اند و پس از انجام آزمون‌های همگرایی، انرژی برش مناسب جهت تضمین دقت محاسبات انتخاب گردیده است.



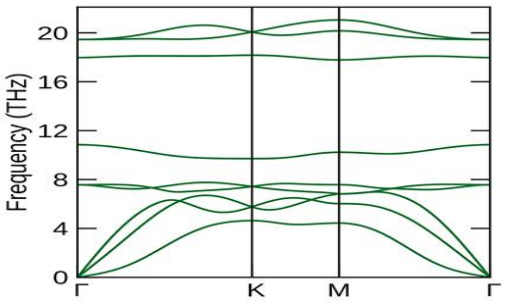
شکل 1 : نمای جانبی از تک‌لایه مکسین V_2N و موقعیتهای تقارنی جذب یونهای Li که با a ، b و c نشان داده شده اند و به ترتیب معادل قرار گیری در بالای اتم های V در لایه بالایی (TopV1) ، قرار گیری در بالای اتم های N یا (TopN) و قرار گیری در پایین اتم های V در لایه پایین (TopV2) است.

به‌منظور مدل‌سازی تک‌لایه دوبعدی V_2N و حذف برهم‌کنش بین لایه های متوالی در راستای عمود بر صفحه، یک لایه خلأ به ضخامت 20 A° در نظر گرفته شده است. تعداد نقاط k بهینه در فضای وارون با استفاده از تعداد 16×16×1 نقطه k به روش Monkhorst-Pack در ناحیه اول بریلوئن در نظر گرفته شد ه است. به منظور یافتن ساختار هندسی بهینه محاسبات واهلش تا دقت 10^{-5}ev/atom در محاسبات همگرایی انرژی و 0.01ev/ A° نیرودر نظر گرفته شده است.

نتایج ساختاری و الکتریکی V_2N

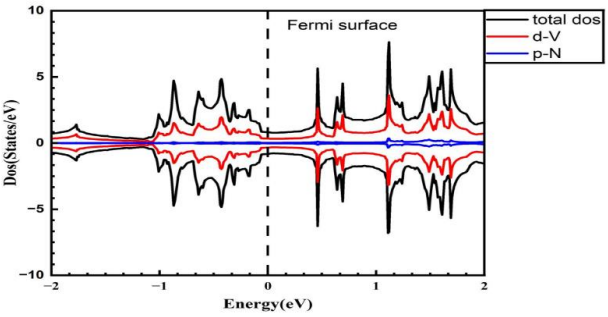
در ساختار بلوری تک‌لایه V_2N از خانواده مکسین ها، اتم‌های نیتروژن در میان دو لایه از اتم‌های وانادیم قرار می‌گیرند شکل 1 . نتایج محاسبات واهلش نشان داد که ثابت شبکه تعادلی این ساختار در حالت دو بعدی در صفحه x-y (ثابتهای شبکه a و b) برابر با

$2.893\ A^{\circ}$ است. همچنین، ضخامت لایه سه‌اتمی V_2N در حالت ساختار واهلش یافته برابر با $2.095\ A^{\circ}$ و طول پیوند بین اتم‌های



شکل2 : **منحنی پاشندگی فونونی محاسبه‌شده[6]**

وانادیم و نیتروژن برابر با $1.970\ A^{\circ}$ به‌دست آمد. به منظور بررسی پایداری دینامیکی تک لایه V_2N محاسبات فونونی انجام شده و چنانکه در شکل 2 نشان داده شده است، نمودار پراکندگی فونونی هیچ‌گونه فرکانس موهومی از خود نشان نمی دهد که بیانگر پایداری دینامیکی این ساختار است[6]. همچنین، بررسی ساختار نواری و چگالی حالت‌ها (DOS) در شکل3 نشان داده شده است. قطع شدن سطح فرمی توسط نوارهای انرژی نشان دهنده گاف نواری صفر و ماهیت فلزی ساختار است. پایداری ساختاری در کنار رسانندگی بسیار بهتر این ساختار در مقایسه با سایر ساختارهای دوبعدی مثل گرافن، مولیبدنیوم دی سولفاید و هگزاگونال بورون



شکل3 : نمودار چگالی حالت ها V_2N.

نیتراید نشان دهنده قابلیت بالای آن به عنوان الکترود دربا‌تری‌های یون لیتیومی است به شرط آنکه بتواند یونهای لیتیوم را در سطح خود جذب نماید.

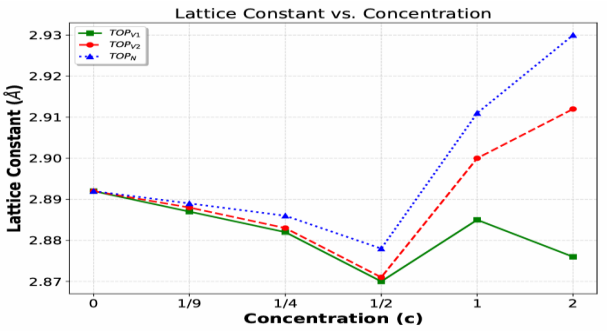
نتایج جذب اتمهای Li در سطح

برای بررسی قابلیت مکسین V_2N به‌عنوان ماده‌ی الکترودی در باتری‌های یون لیتیومی، قدرت جذب اتمهای Li توسط این لایه در تراکم های مختلف لیتیوم مورد بررسی قرار گرفت. برای این منظور ابتدا با استفاده از یک ابر یاخته 3×3 و افزودن یک اتم لیتیوم ثابت شبکه تعادلی و همچنین موقعیت جذب اتم لیتیوم در سه جایگاه تقارنی با استفاده از محاسبات VC-Relax بررسی گردید. در این محاسبات نه تنهای ثابت شبکه بهینه می شود بلکه همزمان موقعیت تعادلی اتم ها نیز با استفاده از محاسبات واهلش بهینه سازی می گردد. به همین دلیل این بخش از محاسبات جزو زمان برترین بخش محاسبات است. وجود یک اتم لیتیوم در یک ابریاخته 3×3 معادل تراکمی برابر با 1 به 9 به ازای هر یاخته V_2N یا معادل فرمول شیمیایی $V_2NLi_{1/9}$ است. این محاسبات در تراکمهای $V_2NLi_{1/4}$، $V_2NLi_{1/2}$، V_2NLi_1، V_2NLi_2 و V_2NLi_4 تکرار شد. هماهنگونه که در شکل 4 مشاهده می شود ثابت شبکه تعادلی در تراکم های کمتر از 1 با افزایش تراکم اتم های Li در سطح V_2N کاهش می یابد این امر می تواند بخاطر افزایش ارتفاع اتم های V از سطح اتمهای N باشد چراکه نتایج نشان می دهند با افزایش تراکم اتمهای Li تا زیر مقدار 1 ارتفاع اتم های V از سطح اتم های N افزایش یافته و این امر باعث جمع شدگی و کوچک شدن طول ثابت تعادلی در راستای a و b شده است. چنان که در شکل 4 مشاهده می شود. از تراکم 1 به بعد افزایش تراکم اتم های Li باعث افزایش ثابت شبکه می گردد که این موضوع می تواند به دلیل تراکم زیاد اتم های Li و به دنبال آن نیروی دافعه جانبی بین یون های Li و ایجاد کشش در سطح ساختار رخ دهد. افزایش تراکم اتم های Li در موقعیت تقارنی TopN بیشترین افزایش در ثابت شبکه تعادلی را از خود نشان داده است. به گونه ای که در تراکم c=2 ثابت تعادلی برابر با 2.93Å شده است و به اندازه 0.037Å نسبت به ثابت شبکه تعادلی V_2N افزایش یافته است. این موضوع در محاسبات، موضوع بسیار با اهمیتی است و چنانچه تغییر ثابت شبکه در تراکم های مختلف مد نظر قرار داده نشود منجر به نتایج گمراه کننده خواهد شد. در ادامه به منظور بررسی ظرفیت باتری یون لیتیومی این

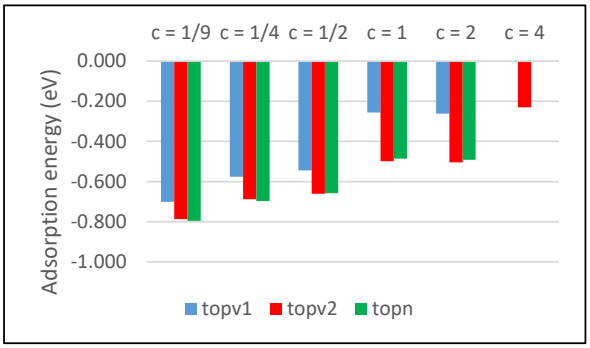
ساختار انرژی جذب اتم های Li (E_{ads}) در سطح ساختار V_2N با استفاده از رابطه (1) محاسبه شد و نتایج آن در شکل 5 نشان داده شده است.

$$E_{ads} = \left(E_{\text{tot}} - E_{V_2N} - cE_{Li}\right)/c \qquad (1)$$

چنانکه در شکل 5 مشاهده می شود در تراکم 1/9 بهترین جایگاه جذب موقعیت تقارنی TopN با انرژی جذب در حدود -800meV است. با افزایش چگالی اتم های لیتیوم جذب شده انرژی جذب چنانکه انتظار می رود کاهش یافته و در تراکم 1/2 انرژی جذب در دو موقعیت تقارنی TopNو TopV2 تقریبا با یکدیگر برابر شده و به مقدار حدود -660meV می رسد.



شکل4 : نمودار تغییرات ثابت شبکه بهینه در تراکم های مختلف در جایگاههای تقارنی جذب یونهای لیتیوم.



شکل5 : نمودار انرژی جذب برای تراکم های مختلف.

چنانکه در شکل 5 مشاهده می شود در تراکم های 1 و بیشتر از آن موقعیت تقارنی بهینه از TopN به موقعیت تقارنی TopV2 تغییر یافته و به مقدار -500meV در تراکم 2 کاهش می یابد. در این تحقیق محاسبات تا تراکم c=4 ادامه یافت و نتایج نشان داد انرژی جذب اتم های Li در c=4 برابر با -220mev است. با توجه به آنکه اتم لیتیوم تک ظرفیتی است نتایج حداکثر تراکم جذب اتم های لیتیوم در سطح V_2N در این تحقیق ظرفیت ذخیره سازی انرژی الکتریکی معادل با 925mAh/g را پیش بینی می کند. این مقدار در مقایسه با ظرفیت الکترودهای گرافیتی 372mAh/gr بسیار امیدوار کننده است.

نتیجه گیری

نتایج نشان داد که ثابت شبکه و جایگاه تقارنی جذب اتم های لیتیوم بر روی تک لایه V_2N تابعی از تراکم اتم های لیتیوم جذب شده می باشند و این موضوع در بررسی های مشابه باید رعایت شود. همچنین نتایج نشان داد که این ساختار توانمندی جذب حداکثر چهار اتم لیتیوم بر روی هر یاخته خود را داراست که معادل ظرفیت ذخیره سازی انرژی الکتریکی معادل 925mAh/g است.

مرجع‌ها

[1] International Energy Agency, Batteries and Secure Energy Transitions, 2024. Available: https://www.iea.org/reports/batteries-and-secure-energy-transitions.
[2] A. M. Ralls et al., "The Role of Lithium-Ion Batteries in the Growing Trend of Electric Vehicles," Materials, vol. 16, no. 17, p. 6063, 2023, doi: 10.3390/ma16176063. Available: https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC10488475/.
[3] M. Winter, B. Barnett, and K. Xu, "Before Li Ion Batteries," Chemical Reviews, vol. 118, no. 23, pp. 11433–11456, 2018 (Updated in Sustainable Energy & Fuels, 2020), doi: 10.1021/acs.chemrev.8b00422.
[4] S. He, S. Huang, S. Wang, I. Mizota, X. Liu, and X. Hou, "Considering Critical Factors of Silicon/Graphite Anode Materials for Practical High-Energy Lithium-Ion Battery Applications," Energy & Fuels, vol. 35, no. 3, pp. 1955–1968, 2021, doi: 10.1021/acs.energyfuels.0c02948.
[5] M. N. U. Chy et al., "MXene as Promising Anode Material for High-Performance Lithium-Ion Batteries: A Comprehensive Review," Nanomaterials, vol. 14, no. 7, p. 616, 2024, doi: 10.3390/nano14070616.
[6] H. Liu, Y. Cai, Z. Guo, and J. Zhou, "Two-Dimensional V2N MXene Monolayer as a High-Capacity Anode Material for Lithium-Ion Batteries and Beyond: First-Principles Calculations," ACS Omega, vol. 7, no. 21, pp. 17756–17764, 2022, doi: 10.1021/acsomega.2c00936.

بررسی تاثیر آلایش نقره بر بهبود عملکرد ابرخازنی الکترود مبتنی بر $NiMoO_4$

کریمی ، ارسلان[۱] ؛ کاملی، پرویز[۱] ؛ کاظمی کردابادی، فاطمه[۱] ؛ مومنی، محمد محسن[۲] ؛ اصلی بیگی، باقر[۳]

۱- دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان ، اصفهان، ۸۴۱۵۶۸۳۱۱۱ ، ایران

۲- دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی اصفهان ، اصفهان، ۸۴۱۵۶۸۳۱۱۱ ، ایران

۳ – دانشکده فیزیک دانشگاه تبریز ، تبریز، ۵۱۶۴۷۳۶۹۳۱ ، ایران

چکیده

در میان مواد الکترودی مختلف، مولیبدات نیکل ($NiMoO_4$) به دلیل ظرفیت ویژه بالا، رسانایی مناسب و ساختار پایدار، به‌عنوان ماده‌ای امیدبخش برای کاربرد در ابرخازن‌ها شناخته می‌شود. با این حال، محدودیت‌هایی نظیر رسانایی الکتریکی نسبتاً پایین و پایداری چرخه‌ای متوسط، استفاده گسترده از این ماده را با چالش مواجه کرده است. در این پژوهش، تأثیر آلایش نقره (Ag) بر عملکرد الکتروشیمیایی نانوساختارهای $NiMoO_4$ مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان داد که آلایش نقره با درصد بهینه ۵٪ وزنی منجر به افزایش ظرفیت ویژه($۷۰۰\ F\ g^{-1}$) به میزان بیش از دوبرابر نسبت به نمونه بدون آلایش ($۳۴۵\ F\ g^{-1}$) و افزایش پایداری چرخه‌ای الکترود می شود. نتایج این مطالعه می‌تواند مسیر مناسبی برای طراحی الکترودهای پیشرفته با کارایی بالا در سامانه‌های ذخیره‌سازی انرژی فراهم سازد.

واژه های کلیدی: *مولیبدات نیکل، آلایش نقره، نانوساختار، ذخیره‌سازی انرژی*

Investigating the effect of silver incorporation on improving the supercapacitor performance of $NiMoO_4$-based electrodes

Karimi, Arsalan[۱] ; Kameli, Parviz[۱] ; Kazemi Kerdabadi, Fatemeh[۱] ; Mohamad Mohsen Momeni ; Bagher Aslibeiki

۱- *Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan, ۸۴۱۵۶۸۳۱۱۱, Iran*

۲- *Department of Chemistry, Isfahan University of Technology, Isfahan, ۸۴۱۵۶۸۳۱۱۱, Iran*

۳- *Department of Physics, Tabriz University, ۵۱۶۴۷۳۶۹۳۱, Iran*

Abstract

Among various electrode materials, nickel molybdate ($NiMoO_4$) has attracted considerable attention as a promising material for supercapacitor applications due to its high specific capacitance, suitable electrical conductivity, and stable structure. However, limitations such as relatively low electrical conductivity and moderate cycling stability have restricted its widespread application. In this study, the effect of silver (Ag) doping on the electrochemical performance of $NiMoO_4$ nanostructures was investigated. The results demonstrated that Ag doping with an optimum concentration of ۵ wt% markedly improved the electrochemical performance, delivering a specific capacitance of $۷۰۰\ F\ g^{-1}$, which is approximately ۲ times higher than that of the pristine sample ($۳۴۵\ F\ g^{-1}$). In addition, the cycling stability of the electrode was improved after Ag doping. These findings suggest that optimized Ag doping can provide an effective strategy for designing advanced electrode materials with enhanced performance for energy storage systems.

Keywords: $NiMoO_4$, Silver Doping, Nanostructures, Energy Storage

مقدمه

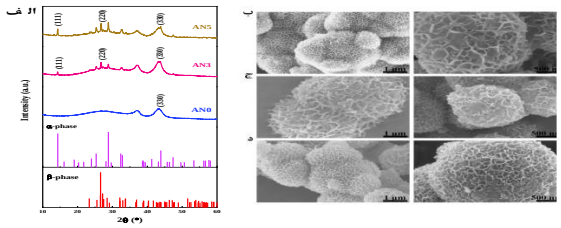
در دهه‌های اخیر، افزایش مصرف انرژی و توسعه فناوری، نیاز به سامانه‌های ذخیره‌سازی انرژی با عملکرد بالا را افزایش داده است. در این میان، ابرخازن‌های الکتروشیمیایی به دلیل چگالی توان بالا، سرعت شارژ/دشارژ سریع و طول عمر زیاد، توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده‌اند [۱]. عملکرد این سامانه‌ها به نوع ماده الکترودی وابسته است و در این راستا، ترکیبات فلزات واسطه به‌ویژه اکسیدها و مولیبدات‌ها، به دلیل ظرفیت ویژه و فعالیت الکتروشیمیایی مطلوب، گزینه‌های مناسبی برای الکترودهای ابرخازنی محسوب می‌شوند[۲]. در میان این ترکیبات، مولیبدات نیکل ($NiMoO_4$) به دلیل وجود چندین حالت اکسایش، ساختار پایدار و هزینه نسبتاً پایین، اهمیت ویژه‌ای یافته است [۳]. با وجود مزایای متعدد، رسانایی الکتریکی محدود و مقاومت داخلی نسبتاً زیاد $NiMoO_4$ از جمله عواملی هستند که موجب کاهش عملکرد الکتروشیمیایی آن می‌شوند. یکی از راهکارهای مؤثر برای بهبود این ویژگی‌ها، آلایش ساختار با عناصر فلزی رسانا است. نقره (Ag) به دلیل رسانایی الکتریکی بالا، تحرک مناسب حامل‌های بار و توانایی تسهیل انتقال الکترون، می‌تواند گزینه مناسبی برای بهبود عملکرد $NiMoO_4$ باشد. در این پژوهش، اثر آلایش نقره بر خواص الکتروشیمیایی و عملکرد ابرخازنی نانوساختارهای $NiMoO_4$ مورد بررسی قرار می‌گیرد. هدف اصلی این مطالعه، بررسی نقش اتم های نقره در افزایش ظرفیت ویژه، کاهش مقاومت انتقال بار و بهبود پایداری چرخه‌ای الکترود است. نتایج این تحقیق می‌تواند در توسعه مواد الکترودی پیشرفته برای نسل جدید سامانه‌های ذخیره‌سازی انرژی مؤثر واقع شود.

مواد و روشها

مطابق با پژوهش قبلی [۴]، نانوساختارهای $Ag\text{-}NiMoO_4$ به روش هیدروترمال سنتز شدند. بدین منظور، ۰,۲۹۰ گرم نیترات نیکل، ۰,۲۴۱ گرم مولیبدات سدیم، ۰,۲۴۰ گرم اوره و درصد هایی مختلف نیترات نقره در ۳۰ میلی‌لیتر آب دیونیزه حل شده و فوم نیکل در محلول قرار گرفت. سپس محلول در اتوکلاو تفلونی در دمای ۱۳۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۶ ساعت واکنش داده شد. نمونه‌های حاصل پس از شستشو با آب دیونیزه و اتانول، در ۶۵ درجه سانتی‌گراد خشک و سپس در ۴۵۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۲ ساعت کلسینه و به ترتیب میزان آلایش نقره نام گذاری شدند (به عنوان مثال نمونه AN۵ مربوط به آلایش ۵٪ نقره است). ساختار بلوری و مورفولوژی نمونه‌ها به‌ترتیب توسط آزمون‌های XRD و FESEM بررسی شد. همچنین عملکرد الکتروشیمیایی الکترودها در الکترولیت KOH با استفاده از آزمون‌های CV و GCD ارزیابی گردید.

نتایج و بحث

به‌منظور بررسی ساختار بلوری و مورفولوژی سطحی نمونه‌های $Ag\text{-}NiMoO_4$، آزمون‌های XRD و FESEM انجام شد که نتایج آن در شکل ۲ ارائه شده است. الگوهای XRD شکل ۱ (الف) تشکیل موفق فازهای آلفا و بتا $NiMoO_4$ را بدون حضور ناخالصی نشان می‌دهند. الگوهای XRD نشان‌دهنده حفظ ساختار بلوری $NiMoO_4$ پس از آلایش نقره و عدم تشکیل فازهای ناخواسته هستند. تصاویر FESEM شکل ۱(ب–د) ساختارهای گل‌مانند سه‌بعدی متشکل از نانولایه‌های به‌هم‌پیوسته را برای تمامی نمونه‌ها، از جمله نمونه بدون آلایش، نشان می‌دهند. وجود این ساختار متخلخل موجب افزایش سطح فعال و تسهیل نفوذ یون‌های الکترولیت می‌شود. علاوه بر این، آلایش نقره با بهبود رسانایی الکتریکی و کاهش مقاومت انتقال بار، عملکرد الکتروشیمیایی نمونه‌ها را ارتقا می‌دهد.

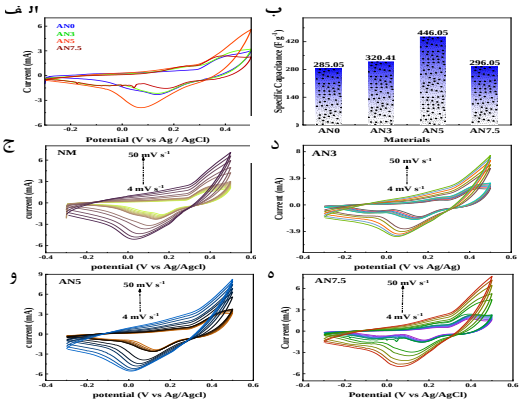


شکل ۱: (الف) نمودار XRD، (ب–د) تصاویر FE-SEM نمونه های AN۰, AN۳, AN۵

برای بررسی تأثیر آلایش نقره بر عملکرد الکتروشیمیایی نانوساختارهای $NiMoO_4$، آزمون‌های ولتامتری چرخه‌ای (CV) بر روی نمونه‌های مختلف انجام شد و تغییرات ظرفیت ویژه و رفتار شبه‌خازنی نمونه‌ها مورد مطالعه قرار گرفت. شکل ۲ نتایج CV نمونه‌های مختلف $Ag\text{-}NiMoO_4$ را نشان می‌دهد. شکل ۲(الف) منحنی‌های CV مربوط به نمونه‌های AN۰، AN۳، AN۵ و AN۷,۵ را در نرخ روبش ثابت ۱۰ $mV\ s^{-1}$ نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که تمامی نمونه‌ها دارای قله‌های اکسایش

و کاهش مشخص هستند که بیانگر رفتار شبه‌خازنی و وقوع واکنش‌های فارادای در فرآیند ذخیره‌سازی بار می‌باشد. همچنین با افزایش میزان آلایش نقره، مساحت زیر منحنی CV افزایش یافته است که نشان‌دهنده بهبود ظرفیت ذخیره‌سازی انرژی و افزایش فعالیت الکتروشیمیایی الکترودها است. در میان نمونه‌ها، نمونه AN۵ بیشترین مساحت زیر منحنی را نشان می‌دهد که بیانگر عملکرد الکتروشیمیایی بهتر آن نسبت به سایر نمونه‌ها است.

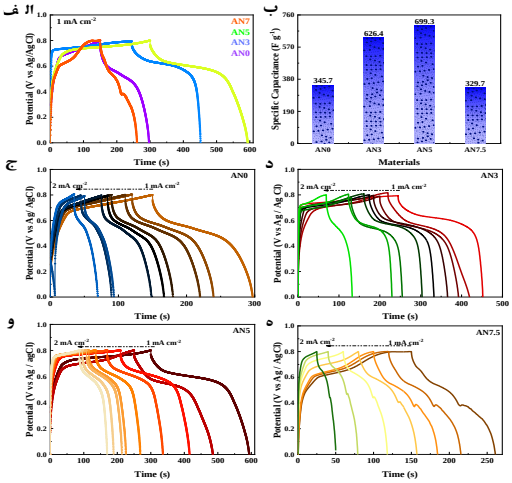
شکل ۲(ب) مقادیر ظرفیت ویژه نمونه‌های مختلف را نشان می‌دهد. مطابق نتایج، بیشترین ظرفیت ویژه مربوط به نمونه AN۵ است. این افزایش را می‌توان به بهبود رسانایی الکتریکی، تسهیل انتقال الکترون‌ها و افزایش تعداد سایت‌های فعال الکتروشیمیایی در اثر آلایش نقره نسبت داد. کاهش ظرفیت ویژه در غلظت‌های بالاتر نقره می‌تواند ناشی از تجمع ذرات و کاهش سطح مؤثر فعال باشد. شکل‌های ۲(ج–ه) منحنی‌های CV نمونه‌های مختلف را در نرخ روبش‌های متفاوت از ٤ تا $50\ mV\ s^{-1}$ نشان می‌دهند. با افزایش نرخ روبش، چگالی جریان و مساحت منحنی‌ها افزایش یافته است که نشان‌دهنده رفتار خازنی مناسب و قابلیت انتقال سریع یون‌ها در ساختار الکترود می‌باشد. همچنین حفظ شکل کلی منحنی‌ها در نرخ‌های روبش بالا بیانگر پایداری الکتروشیمیایی مطلوب و برگشت‌پذیری مناسب واکنش‌های اکسایش–کاهش است. رسانایی الکتریکی Ag را افزایش داده و مقاومت انتقال بار را از ۱٤,۲ به ۸,۹ Ω کاهش می‌دهد، در حالی که معماری متخلخل، انتشار یون و دسترسی به الکترولیت را افزایش می‌دهد. این ویژگی‌ها در مجموع سینتیک انتقال بار را بهبود بخشیده و ظرفیت خازنی ویژه را افزایش می‌دهند.



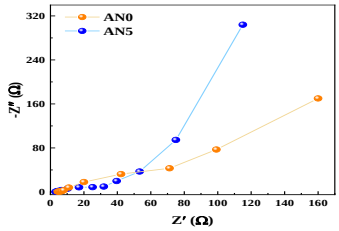
شکل ۲: (الف) نمودار مقایسه ای CV، (ب) ظرفیت خازنی محاسبه شده، (ج–ه) نمودار CV در سرعت روبش های مختلف

به‌منظور ارزیابی عملکرد ابرخازنی نمونه‌های مختلف Ag-$NiMoO_4$، آزمون GCD در چگالی جریان‌های مختلف انجام شد که نتایج آن در شکل ۳ نشان داده شده است. تمامی نمونه‌ها رفتار شارژ/دشارژ متقارن و برگشت‌پذیری الکتروشیمیایی مناسبی نشان دادند. در میان آن‌ها، نمونه AN۵ با بیشترین زمان دشارژ و ظرفیت ویژه حدود ۷۰۰ F g^{-1}، بهترین عملکرد را ارائه کرد که ناشی از بهبود رسانایی الکتریکی، افزایش مراکز فعال و تسهیل انتقال الکترون است. با افزایش چگالی جریان، زمان دشارژ کاهش یافت که به محدودیت نفوذ یون‌ها در نرخ‌های بالاتر مربوط می‌شود. همچنین، نمونه AN۵ افت ولتاژ کمتر و مقاومت داخلی پایین‌تری نسبت به سایر نمونه‌ها نشان داد. این عملکرد برتر به مورفولوژی متخلخل و ساختار گل‌مانند در کنار اثر آلایش نقره نسبت داده می‌شود. همچنین در شکل ٤ عملکرد برتر AN۵ ناشی از اثرات هم‌افزایی ترکیب Ag و مورفولوژی متخلخل گل‌مانند آن است. بلورینگی بهبود یافته، مکان‌های الکتروفعال فراوان و مقادیر کاهش‌یافته R_s و R_{ct}، انتقال بار و سینتیک واکنش فارادایی را افزایش می‌دهند و در نتیجه ظرفیت خازنی ویژه بالاتری ایجاد می‌کنند. افزودن نقره، خواص انتقال الکترونی $NiMoO_4$ را با ایجاد مسیرهای رسانایی و کاهش مقاومت مرز دانه بهبود می‌بخشد. در نتیجه، انتقال الکترون کارآمدتر می‌شود و منجر به قطبش کمتر و فعالیت الکتروشیمیایی بیشتر می‌شود. مقادیر کاهش‌یافته R_s و R_{ct} به‌دست‌آمده از اندازه‌گیری‌های EIS، نقش مثبت نقره در تسهیل انتقال بار را بیشتر تأیید می‌کند. علاوه براین، الکترود AN۵ پایداری چرخه‌ای خوبی از خود نشان داد و پس از ۱۰۰۰۰ چرخه، ۸۳٪ از ظرفیت اولیه خود را حفظ کرد. این دوام افزایش یافته به رسانایی الکتریکی بهبود یافته ناشی از ترکیب Ag و ساختار متخلخل گل مانند نسبت داده می‌شود که انتقال بار را تسهیل کرده و تخریب ساختاری را در طول چرخه‌های طولانی مدت کاهش می‌دهد. از دیدگاه فیزیکی، حضور نقره به دلیل رسانندگی الکتریکی بالاتر نسبت به ٤NiMoO موجب کاهش مقاومت مرزدانه‌ها و ایجاد مسیرهای رسانای مؤثر برای انتقال الکترون می‌شود. علاوه بر این، آلایش نقره

می‌تواند با افزایش چگالی حامل‌های بار و بهبود ارتباط الکتریکی میان نانوساختارهای مجاور، انتقال بار را در طی واکنش‌های فارادایی تسهیل نماید. در نتیجه، مقاومت انتقال بار کاهش یافته و ظرفیت ویژه و پایداری الکتروشیمیایی الکترود بهبود می‌یابد. این نتایج با کاهش مقادیر Rs و Rct در آزمون EIS و همچنین افزایش ظرفیت ویژه نمونه AN۵ سازگاری خوبی دارند.

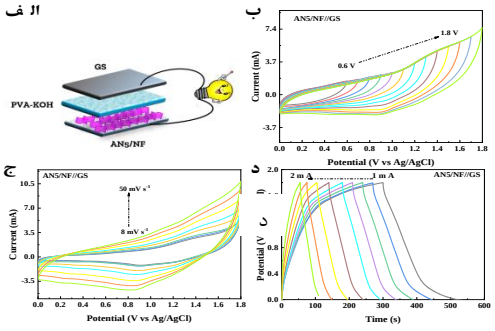


شکل ۳: (الف) نمودار GCD در جریان ثابت، (ب) ظرفیت خازنی محاسبه شده، (ج–ه) و نمودار GCD در چگالی های جریان مختلف تمام الکترودها



شکل ٤: نمودار انایکوئیست الکترود خالص و بهینه

به‌منظور بررسی عملکرد عملی ابرخازن نامتقارن مبتنی بر Ag-NiMoO₄، یک ابرخازن حالت جامد با الکترولیت ژلی PVA-KOH ساخته شد که شماتیک آن در شکل ۵ (الف) نشان داده شده است. در این ساختار، AN۵ به‌عنوان الکترود مثبت و کاغذ گرافیت (GS) به‌عنوان الکترود منفی استفاده شد. نتایج CV در شکل۵ (ب) نشان داد که پنجره ولتاژی ۱٫٦ ولت به‌عنوان مقدار بهینه انتخاب شد. همچنین، با افزایش سرعت روبش، چگالی جریان و مساحت منحنی‌ها افزایش یافت که بیانگر رفتار خازنی مناسب و انتقال سریع بار است. وجود قله‌های اکسایش و کاهش نیز غالب بودن رفتار شبه‌خازنی را تأیید می‌کند. منحنی‌های GCD در شکل ۵ (د) رفتار شارژ/دشارژ متقارن، بازده کولنی بالا و پایداری الکتروشیمیایی مناسب دستگاه را نشان می‌دهند. در مجموع، نتایج بیانگر نقش مؤثر آلایش نقره در بهبود ظرفیت ویژه، قابلیت نرخ‌دهی و عملکرد عملیاتی ابرخازن است.



شکل ۵: (الف) شماتیک دستگاه ابرخازن، (ب) نمودار CV ، (ج) و در سرعت روبش های مختلف، و (د) نمودار GCD در چگالی جریان های متفاوت

جمع بندی

در این پژوهش، نانوساختارهای Ag-NiMoO₄ به روش هیدروترمال سنتز و خواص الکتروشیمیایی آن‌ها بررسی شد. نتایج آنالیزهای ساختاری تشکیل موفق ساختار بلوری و مورفولوژی متخلخل را تأیید کرد. همچنین، آلایش نقره موجب افزایش ظرفیت ویژه، بهبود رسانایی الکتریکی و کاهش مقاومت انتقال بار شد. در میان نمونه‌ها، AN۵ بهترین عملکرد ابرخازنی و پایداری الکتروشیمیایی را نشان داد. نتایج این پژوهش بیانگر نقش مؤثر آلایش نقره در بهبود عملکرد ابرخازن‌های مبتنی بر NiMoO₄ است.

مراجع

[۱] N. Sinnur, B. S. Chikkatti, A. M. Sajjan, N. R. Banapurmath, S. A. Huddar and R. R. Kamble, *J. Alloys Compd.*, ۲۰۲٦, ۱۰٦۳, ۱۸۷۷۰٥.

[۲] J. Raghav, S. Raghav, V. Chavda, K. Diksha, K. Sakshi, S. Singh, V. S. Pandey, P. Jain and D. Kumar, *J. Energy Storage*, ۲۰۲٦, ۱٤٦, ۱۲۰۰۱٦.

[۳] A. P. Nagendra Babu, K. P. Shwetha and C. G. Renuka, *J. Energy Storage*, ۲۰۲٦, ۱٤۹, ۱۲۰۲۳۸.

[٤] F. K. Kerdabadi, P. Kameli, M. M. Momeni, T. Sarkar and B. Aslibeiki, *J. Mater. Chem. A*, ۲۰۲٦, ۱٤, ٥۷٥۱–٥۷٦٦.

سنتز نانوساختارهای آهن–مس بر روی فوم نیکل به عنوان الکتروکاتالیست‌های دوعملکردی کارآمد برای شکافت کامل آب

مروی، کیمیا؛ ابراهیمی، مهدی*

دانشکده فیزیک و مهندسی انرژی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

چکیده

طراحی الکتروکاتالیست‌های دوعملکردی مبتنی بر فلزات واسطه، راهکاری مؤثر برای بهبود کارایی فرایند شکافت الکتروشیمیایی آب و تولید هیدروژن سبز محسوب می‌شود. در این پژوهش، نانوساختارهای مبتنی بر آهن و مس بر روی فوم نیکل به روش ترسیب الکتروشیمیایی، در زمان‌های ۵۴۰ s و ۳۶۰، ۹۰ و ولتاژ V ۱- سنتز شدند. بررسی‌های مورفولوژی نمونه ها نشان داد که نمونه تهیه‌شده در زمان ۹۰ ثانیه (FeCu (-1V,90s)) دارای آرایش یکنواخت و ساختار بهینه بر سطح زیرلایه است که منجر به افزایش سایت‌های فعال و بهبود سینتیک واکنش‌های الکتروشیمیایی می‌شود. این نمونه در چگالی جریان $mA.cm^{-2}$ ۱۰۰، پتانسیل‌های مازاد ۴۹۹mV و ۳۵۶ mV را به‌ترتیب برای واکنش‌های تکامل اکسیژن[1] (OER) و تکامل هیدروژن[2] (HER) ارائه داد و عملکردی برتر نسبت به سایر نمونه‌ها نشان داد. نتایج این مطالعه بیانگر نقش تعیین‌کننده زمان ترسیب در کنترل مورفولوژی و ارتقای فعالیت الکتروکاتالیستی نانوساختارهای FeCu بوده و پتانسیل بالای این الکتروکاتالیست را برای کاربرد در شکافت کامل آب آشکار می‌سازد.

واژه های کلیدی: *نانوساختارهای آهن–مس، ترسیب الکتروشیمیایی، شکافت کامل آب، واکنش تکامل هیدروژن (HER)، واکنش تکامل اکسیژن (OER)*

Synthesis of Iron–Copper nanostructures on nickel foam as efficient bifunctional electrocatalysts for overall water splitting

Marvi, Kimia; Ebrahimi, Mahdi

Department of Physics and Energy engineering, University of Amirkabir, Tehran

Abstract

Design of bifunctional electrocatalysts based on transition metals is an effective strategy for improving the efficiency of electrochemical water splitting and green hydrogen production. In this study, FeCu-based nanostructures were synthesized on nickel foam via electrodeposition at a voltage of -1V for deposition times of 90, 360, and 540s. Morphological investigations of the samples revealed that the sample prepared at 90s (FeCu(-1V, 90s)) exhibits a uniform arrangement and an optimal structure on the substrate surface, leading to an increase in active sites and improved kinetics of the electrochemical reactions. At a current density of 100 $mA.cm^{-2}$, this sample delivered overpotentials of 499 mV and 356 mV for the Oxygen Evolution Reaction (OER) and Hydrogen Evolution Reaction (HER), respectively, demonstrating superior performance compared to the other samples. The results of this study highlight the decisive role of deposition time in controlling the morphology and enhancing the electrocatalytic activity of FeCu nanostructures, revealing the high potential of this electrocatalyst for application in overall water splitting.

***Keywords**: FeCu nanostructures, Electrodeposition, Overall water splitting, Hydrogen Evolution Reaction (HER), Oxygen Evolution Reaction (OER)*

PACS No.82.45.Yz, 81.07.Bc, 82.45.Jn

[1] Oxygen Evaluation Reaction
[2] Hydrogen Evaluation Reaction

مقدمه

افزایش تقاضای انرژی و پیامدهای زیست‌محیطی سوخت‌های فسیلی، توسعه فناوری‌های انرژی تجدیدپذیر را به یک ضرورت تبدیل کرده است. در این راستا، هیدروژن به دلیل چگالی انرژی بالا، قابلیت ذخیره‌سازی مناسب و تولید محصولات جانبی پاک، به‌عنوان حامل انرژی پایدار مورد توجه قرار گرفته است. در این راستا، الکترولیز آب با بهره‌گیری از منابع تجدیدپذیر، روشی مؤثر برای تولید هیدروژن و تحقق سامانه‌های انرژی کم‌کربن محسوب می‌شود [۱].

شکافت الکتروشیمیایی آب شامل واکنش‌های تکامل هیدروژن (HER) و اکسیژن (OER) است. با وجود ولتاژ ترمودینامیکی ۱/۲۳ ولت، محدودیت‌های سینتیکی، به‌ویژه در OER، انرژی مصرفی را افزایش می‌دهد؛ ازاین‌رو، توسعه الکتروکاتالیست‌های کارآمد برای کاهش پتانسیل مازاد و تسریع واکنش‌ها ضروری است [۲].

عملکرد الکتروکاتالیست‌ها به برهم‌کنش آن‌ها با گونه‌های حدواسط وابسته است. بر اساس اصل ساباتیه، انرژی جذب این گونه‌ها باید در یک بازه بهینه قرار گیرد؛ زیرا جذب بیش از حد ضعیف یا قوی به‌ترتیب موجب کاهش فعال‌سازی واکنشگرها و دشواری واجذب محصولات می‌شود. این اصل، مبنای نمودار ولکانو[3] است که در آن پلاتین به دلیل انرژی جذب بهینه هیدروژن، در نزدیکی قله فعالیت برای واکنش تکامل هیدروژن قرار دارد. همچنین اکسیدهای ایریدیوم و روتنیوم از جمله مؤثرترین مواد برای کاتالیز واکنش تکامل اکسیژن محسوب می‌شوند. با وجود عملکرد مطلوب این مواد، قیمت بالا آن‌ها، استفاده گسترده از این کاتالیست‌ها را در مقیاس صنعتی با چالش مواجه کرده است [۳].

در سال‌های اخیر، فلزات واسطه فراوان و کم‌هزینه نظیر آهن، مس، نیکل و کبالت به عنوان جایگزین مناسبی برای فلزات نجیب مورد توجه قرار گرفته‌اند. این عناصر به دلیل فراوانی، هزینه پایین و قابلیت تنظیم ساختار الکترونی، گزینه‌های امیدبخشی برای توسعه الکتروکاتالیست‌های کارآمد در فرآیند شکافت آب محسوب می‌شوند. علاوه بر این، ترکیب دو یا چند فلز واسطه می‌تواند از طریق ایجاد اثرات هم‌افزایی، تعداد مراکز فعال الکتروشیمیایی را افزایش داده و عملکرد کاتالیستی را بهبود ببخشند [۴-۵].

روش‌های متنوعی برای سنتز الکتروکاتالیست‌های مبتنی بر فلزات واسطه گزارش شده است که از جمله آن‌ها می‌توان به روش‌های هیدروترمال، سل-ژل و ترسیب الکتروشیمیایی اشاره کرد. در میان این روش‌ها، ترسیب الکتروشیمیایی به دلیل سادگی فرآیند، هزینه پایین، سرعت بالای سنتز و قابلیت مقیاس‌پذیری، به عنوان یکی از روش‌های مناسب برای تولید الکتروکاتالیست‌های نانوساختاری شناخته می‌شود [۶-۷].

همچنین استفاده از فوم نیکل به عنوان بستر رشد الکتروکاتالیست‌ها به دلیل ساختار سه‌بعدی متخلخل و هدایت الکتریکی بالا، موجب بهبود انتقال جرم و افزایش تعداد مراکز فعال در فرآیند الکترولیز آب می‌شود [۸].

در این پژوهش، نانوساختارهای مبتنی بر آهن و مس بر روی فوم نیکل به روش ترسیب الکتروشیمیایی، در ولتاژ ثابت ۱V- سنتز شدند. اثر زمان ترسیب در سه زمان ۵۴۰s، ۳۶۰ و ۹۰ مورد بررسی قرار گرفت.

بخش تجربی

فوم نیکل ابتدا در ابعاد $1\times4\ cm^2$ برش داده شد و به منظور حذف ناخالصی‌ها و اکسیدهای سطحی، به مدت ۳۰۰s با محلول هیدروکلریک اسید ۳۷ درصد ، اتانول و آب دیونیزه شست‌وشو داده می‌شود.

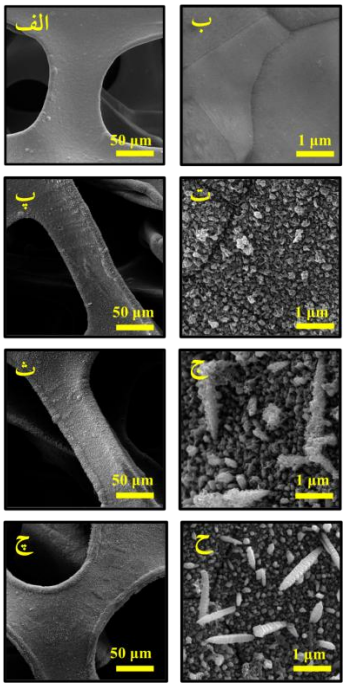
محلول الکترولیت با حل کردن مقادیر ۱/۰۴۲g از سولفات آهن ۷آبه ($FeSO_4\cdot7H_2O$)، ۰/۵۹۷g سولفات مس ۵آبه ($CuSO_4\cdot5H_2O$) و ۱/۷۹۲g اوره(NH_2CONH_2) در ۲۵mL آب دیونیزه تهیه می‌شود.

سنتز نمونه‌ها در یک سل سه‌الکتروده انجام می‌شود که در آن فوم نیکل به عنوان الکترود کاری، پلاتین به عنوان الکترود شمارنده و نقره/نقره کلرید به عنوان الکترود مرجع استفاده شده‌است. ترسیب الکتروشیمی در پتانسیل ثابت ۱V- و در زمان‌های ۵۴۰s، ۳۶۰ و ۹۰ انجام می‌گیرد. در پایان، نمونه‌ها با آب دیونیزه شسته و در دمای ۷۰ درجه توسط آون آزمایشگاهی خشک می‌شوند.

[3] Volcano plot

بررسی مورفولوژی سطح

تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی[4] (FESEM) ساختار سطحی فوم نیکل و نمونه‌های سنتز شده را نشان می‌دهند. همان‌طور که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، تصاویر FESEM مربوط به فوم نیکل و نمونه‌های سنتزشده ارائه شده‌است.

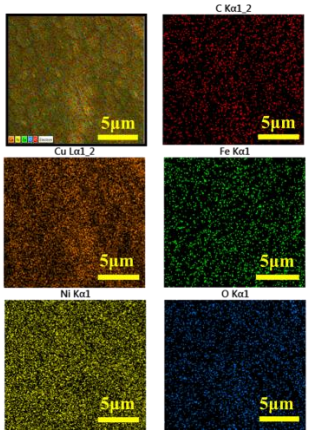


شکل ۱: تصاویر FESEM از مورفولوژی سطح (الف–ب) فوم نیکل به عنوان زیرلایه قبل از سنتز و نمونه‌های سنتز شده (پ–ت) FeCu (-1V,90s)، (ث–ج) FeCu (-1V,360s)، (چ–ح) FeCu (-1V,540s)، به ترتیب مربوط به بزرگ‌نمایی‌های ۱۰۰۰ و ۵۰۰۰۰ برابر.

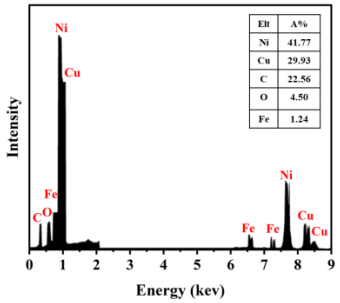
فوم نیکل دارای ساختار سه‌بعدی و متخلخل است که سطح ویژه بالایی را برای رشد نانوساختارها فراهم می‌کند.

در نمونه FeCu (-1V,90s)، نانوساختارها به صورت پوششی نسبتاً یکنواخت، متراکم و منظم بر روی سطح زیرلایه توزیع شده‌اند که می‌تواند موجب افزایش تعداد مراکز فعال الکتروشیمیایی شود. با افزایش زمان ترسیب به ۳۶۰s، رشد بیشتر نانوساختارها و تشکیل تجمعات موضعی مشاهده می‌شود. در نمونه با زمان ۵۴۰s نیز ادامه فرآیند رشد منجر به تشکیل ساختارهای درشت‌تر و میله‌ای‌شکل شده است که نشان‌دهنده تغییر مورفولوژی در اثر افزایش زمان رسوب‌دهی است. به طور کلی، نتایج FESEM نشان می‌دهد که زمان ترسیب نقش تعیین‌کننده‌ای در مورفولوژی و نحوه توزیع نانوساختارهای آهن–مس داشته و نمونه سنتز شده در ۹۰s از یکنواختی و نظم ساختاری مطلوب‌تری برخوردار است که می‌تواند در بهبود عملکرد الکتروکاتالیستی مؤثر باشد.

شکل‌های ۲ و ۳ به‌ترتیب نتایج طیف‌سنجی پراکندگی انرژی پرتو ایکس[5] (EDS) و نگاشت عنصری (Elemental Mapping) نمونه FeCu (-1V,90s) را نشان می‌دهند.



شکل ۲: نقشه‌های توزیع عنصری حاصل از آنالیز EDS برای نانوساختار FeCu (-1V,90s) بیانگر توزیع همگن عناصر Fe و Cu بر روی سطح زیرلایه و تشکیل موفق پوشش دوفلزی با پراکندگی مناسب عناصر.



شکل ۳: نگاشت عنصری نمونه FeCu (-1V,90s)، بیانگر حضور موفق عناصر Fe، Cu و Ni بر روی زیرلایه فوم نیکل.

طیف EDS حضور عناصر Ni، Fe، Cu و O را تأیید می‌کند که بیانگر تشکیل موفق پوشش FeCu بر روی زیرلایه فوم نیکل

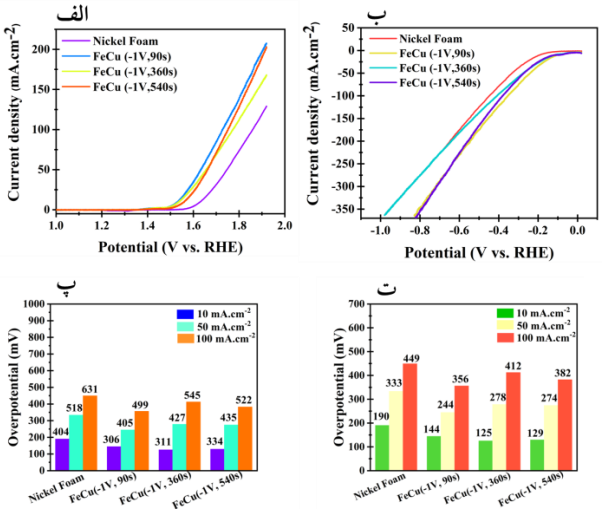
[4] Field Emission Scanning Electron Microscopy

[5] Electron Dispersive Spectroscopy

است. نگاشت عنصری، توزیع نسبتاً یکنواخت آهن و مس را نشان می‌دهد که بیانگر رشد همگن نانوساختارها در فرآیند ترسیب الکتروشیمیایی است. این توزیع یکنواخت با افزایش مراکز فعال، عملکرد الکتروکاتالیستی نمونه را بهبود می‌بخشد.

ارزیابی عملکرد الکتروشیمیایی کاتالیست‌ها

برای بررسی فعالیت الکتروشیمیایی نانوساختارهای سنتز شده، آزمون‌های ولتامتری چرخه‌ای (CV)[۶] بر روی تمامی نمونه‌ها انجام شد. همچنین، عملکرد الکتروکاتالیستی نمونه‌ها در واکنش‌های تکامل هیدروژن و تکامل اکسیژن در محیط قلیایی شامل محلول ۱M پتاسیم هیدروکسید مورد ارزیابی قرار گرفت. مقایسه نتایج آزمون‌های الکتروشیمیایی نمونه‌های مختلف در شکل ۴ ارائه شده است.



شکل ۴: مقایسه عملکرد الکتروشیمیایی فوم نیکل و الکترودهای سنتزشده: منحنی‌های ولتامتری چرخه‌ای برای (الف) واکنش تکامل اکسیژن، (ب) واکنش تکامل هیدروژن، (پ) پتانسیل مازادهای OER و (ت) پتانسیل مازادهای HER در چگالی جریان‌های ۱۰، ۵۰ و ۱۰۰ $mA.cm^{-2}$، به‌منظور ارزیابی اثر زمان رسوب‌دهی FeCu بر فعالیت الکتروکاتالیستی الکترودها.

نتایج نشان داد نمونه FeCu (-1V,90s)، در هر دو واکنش HER و OER فعالیت الکتروشیمیایی مطلوب‌تری نسبت به سایر نمونه‌ها از خود نشان می‌دهد. به‌ویژه در فرآیند HER، این نمونه در نواحی جریان‌های بالا عملکرد بهتری داشته که بیانگر بهبود سینتیک واکنش و افزایش تعداد سایت‌های فعال کاتالیستی است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، نانوساختارهای آهن–مس با موفقیت سنتز و عملکرد الکتروکاتالیستی آن‌ها در شکافت آب ارزیابی شد. نتایج نشان داد که زمان سنتز نقش تعیین‌کننده‌ای در عملکرد کاتالیستی دارد و نمونه سنتزشده در ۹۰s، با پتانسیل‌های مازاد ۴۹۹ mV و ۳۵۶ mV به‌ترتیب برای واکنش‌های OER و HER در چگالی جریان ۱۰۰ $mA.cm^{-2}$، بهترین عملکرد را ارائه داد. این بهبود، به مورفولوژی بهینه و اثر هم‌افزایی آهن و مس در تسهیل انتقال بار و افزایش سایت‌های فعال نسبت داده می‌شود. این یافته‌ها نشان می‌دهد که کنترل زمان سنتز راهبردی مؤثر برای بهینه‌سازی الکتروکاتالیست‌های مبتنی بر آهن–مس در کاربردهای شکافت آب است.

مرجع‌ها

[۱] Sadeq, A. M. and Homod, R. Z.; "*Hydrogen energy systems: Technologies, trends, and future prospects.*"; Science of The Total Environment 939 (2024): 173622.
[۲] Humayun, M. and Chikhaoui, E; "*Global hydrogen economy and hydrogen technologies: A new path to economic sustainability in the era of renewable energy.*"; Chemical Engineering Journal Advances (2026): 101209.
[۳] Ooka, H. and Huang, J.; "The sabatier principle in electrocatalysis: basics, limitations, and extensions."; *Frontiers in Energy Research 9 (2021):654460.*
[۴] Kaya, M. F. and Kıstı, M.; "Electrochemical methods and materials for transition metal-based electrocatalysts in alkaline and acidic media."; *Transition Metal-Based Electrocatalysts: Applications in Green Hydrogen Production and Storage. American Chemical Society, 2023. 219-248.*
[۵] Kamaruzaman, N. A. and Khairul, W. M.; "Advancements in carbon-based transition metal compounds for enhanced hydrogen production via electrochemical water splitting."; *International Journal of Electrochemical Science 19.9 (2024): 100740.*
[۶] Guo, T. and Yao, M.S.; "A comprehensive review on synthesis methods for transition-metal oxide nanostructures."; *CrystEngComm 17.19 (2015): 3551-3585.*
[۷] Raduwan, N.F. and Shaari, N.; "Structural transformation doubly triggered by hydrothermal temperature and reaction time in 3D mixed transition metal oxide: Great enhancement of pore size distribution and specific surface area."; *International Journal of Hydrogen Energy 48.70 (2023): 27289-27297.*
[۸] Tong, X. and Ran, X.; "In Situ Growth of MoS2-Modified Ni–Fe LDH on Hierarchical Porous Nickel Foam as an Efficient Bifunctional Electrolytic Catalyst for Water Splitting."; *ACS Applied Engineering Materials 3.10 (2025): 3612-3623.*

[6] Cyclic Voltammetry

ساخت و ارزیابی جمع‌کننده جریان متخلخل مسی تهیه شده به روش لایه‌نشانی فیزیکی بخار و آبکاری الکتروشیمیایی برای کاربرد در باتری

نادری، ابوذر؛ مرادی، مهرداد؛ رحیم آبادی، زهره

پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان

چکیده

در سال‌های اخیر استفاده از ساختارهای سه‌بعدی متخلخل به منظور بهبود عملکرد سامانه‌های ذخیره‌سازی انرژی مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است. در این پژوهش، یک جمع کننده جریان سه‌بعدی متخلخل مسی با استفاده از فوم پلیمری به عنوان قالب اولیه تهیه شد. ابتدا سطح فوم توسط روش لایه‌نشانی فیزیکی بخار (PVD) با مس پوشش داده شد. سپس به منظور افزایش ضخامت دیواره‌های فلزی و بهبود استحکام مکانیکی، فرآیند آبکاری الکتروشیمیایی در محلول سولفات مس انجام گرفت. ساختار نهایی به عنوان جمع کننده جریان در باتری مورد استفاده قرار گرفت و عملکرد الکتروشیمیایی آن در چرخه‌های مختلف بررسی شد. نتایج نشان داد که ساختار متخلخل تهیه شده دارای عملکرد مناسب در انتقال بار الکتریکی بوده و ظرفیت دشارژ نمونه در چرخه‌های اولیه افزایش یافته است. این رفتار نشان‌دهنده فعال شدن تدریجی الکترود و عملکرد مطلوب ساختار سه‌بعدی مسی در باتری می‌باشد.

واژه های *کلیدی: جمع کننده جریان سه‌بعدی، مس متخلخل، لایه‌نشانی فیزیکی بخار، ضخامت پوشش، آبکاری الکتروشیمیایی، باتری.*

Fabrication and evaluation of a porous copper current collector prepared via physical vapor deposition and electrochemical plating for battery applications

Naderi, Abozar; Moradi, Mehrdad; Rahimabadi, Zohreh

Institute of Nanoscience and Nanotechnology, University of Kashan, Kashan

Abstract

In recent years, the use of three-dimensional porous structures has attracted considerable attention from researchers for improving the performance of energy storage systems. In this study, a three-dimensional porous copper current collector was fabricated using polymer foam as a sacrificial template. First, the surface of the foam was coated with copper via the Physical Vapor Deposition (PVD) method. Then, to increase the thickness of the metal walls and improve mechanical strength, an electrochemical plating process was carried out in a copper sulfate solution. The final structure was used as a current collector in a battery, and its electrochemical performance was evaluated over multiple cycles. The results showed that the fabricated porous structure exhibited suitable charge transport performance, and the discharge capacity of the sample increased during the initial cycles. This behavior indicates the gradual activation of the electrode and the favorable performance of the three-dimensional copper structure in the battery.

***Keywords**: Three-dimensional current collector, porous copper, Physical Vapor Deposition (PVD), coating thickness, electrochemical plating, battery.*

PACS No. 81

مقدمه

افزایش روزافزون استفاده از تجهیزات الکترونیکی قابل حمل، خودروهای الکتریکی و سامانه‌های ذخیره‌سازی انرژی موجب شده است که توسعه باتری‌های با ظرفیت بالا و طول عمر مناسب به یکی از مهم‌ترین زمینه‌های تحقیقاتی تبدیل شود. عملکرد یک باتری تنها به ماده فعال محدود نمی‌شود، بلکه اجزای مختلف آن از جمله جمع کننده جریان نیز نقش مهمی در تعیین بازده و کارایی نهایی سیستم دارند [۱]. جمع کننده جریان وظیفه جمع‌آوری و انتقال الکترون‌های حاصل از واکنش‌های الکتروشیمیایی را بر عهده دارد [۲]. در بسیاری از باتری‌های متداول از فویل‌های فلزی صاف به عنوان جمع کننده جریان استفاده می‌شود. اگرچه این فویل‌ها

دارای هدایت الکتریکی مناسبی هستند، اما سطح تماس محدود و ساختار دو بعدی آن‌ها می‌تواند موجب کاهش بهره‌وری از ماده فعال و افزایش مقاومت داخلی سیستم شود [۳].

به منظور رفع این محدودیت‌ها، استفاده از کلکتورهای جریان سه‌بعدی متخلخل مورد توجه قرار گرفته است. این ساختارها به دلیل برخورداری از سطح ویژه بالا، حجم خالی مناسب برای نفوذ الکترولیت و مسیرهای متعدد انتقال الکترون، شرایط مطلوبی برای انجام واکنش‌های الکتروشیمیایی فراهم می‌کنند. یکی از فلزات مناسب برای ساخت کلکتور جریان، مس است. هدایت الکتریکی بالا، قابلیت آبکاری مناسب، هزینه نسبتاً پایین و پایداری شیمیایی مطلوب از مهم‌ترین مزایای این فلز محسوب می‌شود. در پژوهش حاضر، ساخت یک جمع کننده جریان سه‌بعدی متخلخل مسی با استفاده از فوم پلیمری، لایه‌نشانی فیزیکی بخار و آبکاری الکتروشیمیایی مورد بررسی قرار گرفته است.

بخش تجربی: مواد و روش‌ها

فوم پلیمری مورد استفاده ذاتاً نارسانا است و امکان انجام مستقیم آبکاری الکتروشیمیایی روی آن وجود ندارد. بنابراین ابتدا به کمک روش فیزیکی لایه نشانی (PVD) یک لایه نازک رسانا بر روی تمام سطوح فوم ایجاد شد تا مسیرهای هدایت الکتریکی اولیه شکل گیرد. سپس از آبکاری الکتروشیمیایی برای افزایش ضخامت دیواره‌های مسی و بهبود استحکام مکانیکی ساختار استفاده شد. استفاده از PVD به تنهایی برای دستیابی به ضخامت‌های بالا بسیار زمان‌بر و پرهزینه است. بنابراین ترکیب این دو روش راهکاری مؤثر برای تولید ساختار متخلخل فلزی محسوب می‌شود.

الف) آماده‌سازی قالب فومی

در این پژوهش از فوم پلیمری متخلخل به عنوان قالب اولیه استفاده شد. ساختار این فوم شامل حفرات باز و به‌هم‌پیوسته بوده که امکان ایجاد یک شبکه فلزی سه‌بعدی را فراهم می‌کند. پیش از انجام فرآیند لایه‌نشانی، فوم‌ها پس از برش در ابعاد ۱۳×۵ سانتی‌متر مربع، تمیز شده شدند. سپس نمونه‌های برش‌خورده بر روی نگهدارنده مخصوص قرار داده شدند. این نگهدارنده در داخل محفظه خلأ دستگاه لایه‌نشانی فیزیکی بخار (PVD) قرار دارد و به عنوان تثبیت‌کننده موقعیت فوم در حین فرآیند رسوب‌دهی عمل می‌کند.

ب) لایه‌نشانی مس به روش PVD

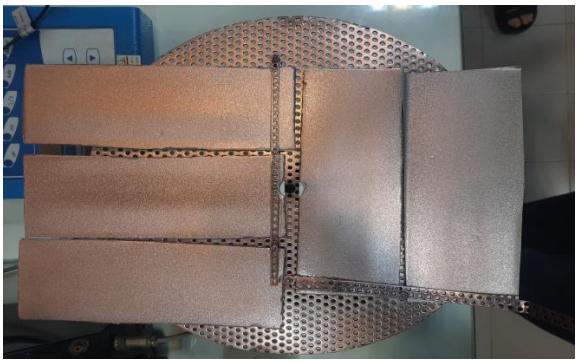
به منظور ایجاد یک لایه رسانا بر روی سطح فوم، فرآیند لایه‌نشانی فیزیکی بخار (PVD) انجام شد. در هر مرحله، پنج نمونه فومی بر روی نگهدارنده دستگاه نصب شدند. زیرلایه‌ها در فاصله ۱۴/۵ سانتی‌متری از بوته تبخیر قرار گرفتند. به دلیل تفاوت موقعیت نمونه‌ها نسبت به محور بوته، ضخامت لایه مس رسوب یافته بر روی هر نمونه متفاوت بود؛ به طوری که نمونه‌های در راستای بوته دارای بیشترین ضخامت و نمونه‌های دورتر دارای ضخامت کمتری بودند. برای انجام فرآیند لایه‌نشانی، فشار محفظه توسط سیستم ترکیبی پمپ روتاری و پمپ توربومولکولی به فشار ۳×۱۰^{-۵} میلی بار کاهش یافت. پس از دستیابی به شرایط خلأ مناسب، فرآیند تبخیر فلز مس آغاز شد و اتم‌های تبخیر شده بر روی فوم رسوب کردند. از آنجا که زیرلایه مورد استفاده از جنس فوم پلیمری بود، کنترل دما در طول فرآیند لایه‌نشانی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار بود. به همین منظور، دمای محفظه و نمونه‌ها به وسیله دماسنج نصب شده در دستگاه به طور مداوم کنترل شد. با توجه به حساسیت حرارتی فوم، افزایش بیش از حد دما می‌تواند منجر به نرم شدن، تغییر شکل یا ذوب شدن ساختار پلیمری گردد. بر این اساس، دمای فرآیند در محدوده ایمن نگه داشته شد و در صورت افزایش دما به ۷۰ درجه سانتی‌گراد، فرآیند لایه‌نشانی متوقف می‌شد تا از تخریب فوم و تغییر ساختار متخلخل آن جلوگیری شود. رعایت این محدودیت دمایی نقش مهمی در حفظ یکپارچگی فوم و دستیابی به پوشش یکنواخت مس بر روی سطح آن داشت.

به منظور اندازه‌گیری ضخامت لایه‌های رسوب داده شده، از ضخامت‌سنج کریستال کوارتز با ضریب تصحیح متناسب با موقعیت زیرلایه ها استفاده شد. حسگر ضخامت‌سنج در ارتفاعی برابر با زیرلایه‌ها و در فاصله افقی ۱۱/۵ سانتی‌متری از محور بوته قرار داشت. با توجه به اختلاف موقعیت نمونه‌ها نسبت به ضخامت‌سنج، برای محاسبه ضخامت‌ها، فاصله افقی بین زیرلایه‌ها و سر ضخامت‌سنج بوسیله روابط محاسبه و در نظر گرفته شد.

در این روش، در شرایط خلأ ۳×۱۰^{-۵} میلی بار و با استفاده از دستگاه PVD انجام شده که در شکل ۲ نمایش داده شده است. فلز مس به‌صورت فیزیکی تبخیر و اتم‌های آن در فضای خلأ به سمت زیرلایه حرکت می‌کنند. این اتم‌ها پس از برخورد با سطح فوم، بر روی تمامی سطوح داخلی و خارجی آن رسوب کرده و یک پوشش نازک، پیوسته و نسبتاً یکنواخت ایجاد می‌کنند (شکل ۲). با توجه به ساختار سه‌بعدی و متخلخل فوم، استفاده از روش PVD امکان پوشش‌دهی یکنواخت در عمق تخلخل‌ها را نیز فراهم می‌سازد، به‌گونه‌ای که علاوه بر سطح بیرونی، دیواره‌های داخلی حفرات نیز تا حدی پوشش داده می‌شوند. این لایه اولیه فلزی نقش کلیدی در ایجاد شبکه رسانای اولیه ایفا کرده و بستر مناسبی برای انجام فرآیندهای بعدی مانند آبکاری الکتروشیمیایی و افزایش ضخامت لایه مس فراهم می‌کند.



شکل ۱. دستگاه PVD برای لایه‌نشانی بخار فیزیکی بر روی فوم.



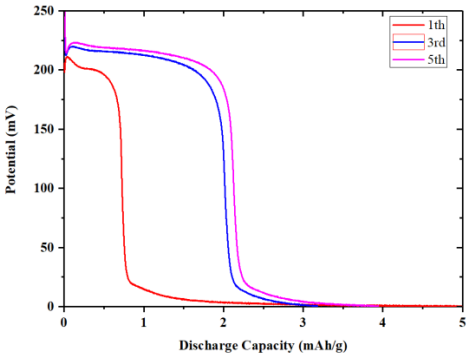
شکل ۲. فوم‌های قرارگرفته بر روی نگهدارنده پس از انجام فرآیند لایه‌نشانی مس به روش PVD.

ج) آبکاری الکتروشیمیایی

به منظور افزایش ضخامت لایه مس و بهبود استحکام ساختار، نمونه‌های پوشش داده شده در محلول سولفات مس تحت فرآیند آبکاری الکتروشیمیایی قرار گرفتند. در این مرحله یون‌های مس موجود در محلول بر روی پوشش اولیه رسوب کرده و موجب افزایش ضخامت دیواره‌های فلزی شدند. این فرآیند علاوه بر افزایش استحکام مکانیکی، هدایت الکتریکی ساختار را نیز بهبود بخشید.

نتایج و بحث

بررسی ظاهری نمونه‌های تهیه شده نشان داد که فرآیند لایه‌نشانی و آبکاری با موفقیت انجام شده است. پوشش اولیه ایجاد شده توسط روش PVD توانست سطح فوم را به صورت مناسبی پوشش دهد و بستر لازم را برای رشد بیشتر مس در مرحله آبکاری فراهم کند. پس از آبکاری، ضخامت دیواره‌های فلزی افزایش یافته و شبکه‌ای سه‌بعدی از مس تشکیل شد. وجود این شبکه باعث ایجاد مسیرهای رسانای متعدد در ساختار گردید. همچنین تخلخل موجود در ساختار حفظ شده و حفرات باز و به‌هم‌پیوسته در سراسر نمونه مشاهده شد. ساختار متخلخل تولید شده دارای سطح ویژه بالایی است. افزایش سطح ویژه موجب افزایش سطح مؤثر در دسترس برای واکنش‌های الکتروشیمیایی شده و امکان بارگذاری بیشتر ماده فعال را فراهم می‌کند. علاوه بر این، وجود حفرات متعدد موجب نفوذ بهتر الکترولیت به درون الکترود شده و دسترسی یون‌ها به سطوح واکنش را تسهیل می‌کند. شکل ۳ منحنی‌های دشارژ نمونه را در چرخه‌های اول، سوم و پنجم نشان می‌دهد.



شکل ۳. منحنی‌های دشارژ نمونه در چرخه‌های اول، سوم و پنجم.

مطابق شکل ۳، ظرفیت دشارژ نمونه در چرخه اول حدود ۰/۷۵ mAh/g اندازه‌گیری شد. با افزایش تعداد چرخه‌ها، ظرفیت دشارژ به طور قابل توجهی افزایش یافته و در چرخه سوم به حدود ۲/۰۵ mAh/g و در چرخه پنجم به حدود ۲/۱۵ mAh/g رسید. این نتایج نشان می‌دهد که ظرفیت دشارژ نمونه پس از چند چرخه اولیه تقریباً سه برابر افزایش یافته است. افزایش ظرفیت در چرخه‌های ابتدایی را می‌توان به فعال شدن تدریجی الکترود نسبت داد. در چرخه اول، نفوذ الکترولیت به تمامی نواحی ساختار متخلخل به طور کامل انجام نشده و بخشی از سطح فعال الکترود در فرآیندهای الکتروشیمیایی مشارکت نمی‌کند. با ادامه فرآیند شارژ و دشارژ، الکترولیت به تدریج در حفرات و کانال‌های موجود در ساختار سه‌بعدی نفوذ کرده و سطح بیشتری از ماده فعال در واکنش‌ها شرکت می‌کند.

علاوه بر این، بهبود تماس میان ماده فعال، الکترولیت و جمع کننده جریان سه‌بعدی موجب کاهش مقاومت انتقال بار و افزایش بهره‌برداری از ماده فعال می‌شود. نزدیکی ظرفیت‌های ثبت شده در چرخه سوم و پنجم نیز بیانگر پایداری مناسب ساختار متخلخل مسی و حفظ عملکرد الکتروشیمیایی آن در طول چرخه‌های متوالی است. توزیع یکنواخت جریان در ساختار سه‌بعدی از تمرکز جریان در نقاط خاص جلوگیری کرده و موجب استفاده مؤثرتر از ماده فعال می‌شود. همچنین وجود حفرات باز و به‌هم‌پیوسته امکان نفوذ بهتر الکترولیت به درون ساختار را فراهم می‌کند. ترکیب انتقال مؤثر الکترون و نفوذ مناسب یون‌ها باعث افزایش سطح فعال در دسترس و بهبود بازده واکنش‌های الکتروشیمیایی می‌شود.

افزایش ظرفیت در چرخه‌های اولیه بیانگر فعال شدن تدریجی الکترود و بهبود شرایط انتقال بار در ساختار متخلخل است. از سوی دیگر، اختلاف ظرفیت میان چرخه سوم و پنجم نسبتاً محدود بوده و تنها حدود ۰/۱ mAh/g است. این موضوع نشان می‌دهد که پس از چند چرخه اولیه، ساختار الکترود به حالت پایدار رسیده و عملکرد آن تثبیت می‌شود. عدم مشاهده افت ظرفیت در چرخه‌های بعدی بیانگر آن است که شبکه فلزی ایجاد شده توسط فرآیند لایه‌نشانی فیزیکی بخار و آبکاری الکتروشیمیایی توانسته است یکپارچگی ساختاری خود را در طول فرآیندهای شارژ و دشارژ حفظ نماید. این پایداری از اهمیت بالایی برخوردار است، زیرا یکی از عوامل اصلی افزایش طول عمر باتری، حفظ ساختار جمع کننده جریان و جلوگیری از تخریب آن در طول چرخه‌های کاری است.

نتیجه گیری

در این پژوهش، یک جمع کننده جریان سه‌بعدی متخلخل مسی با استفاده از فوم پلیمری، لایه‌نشانی فیزیکی بخار (PVD) و آبکاری الکتروشیمیایی در محلول سولفات مس تهیه شد. نتایج نشان داد که ساختار تولید شده دارای تخلخل مناسب، سطح ویژه بالا و شبکه رسانای پیوسته است که می‌تواند شرایط مطلوبی را برای انتقال الکترون و نفوذ الکترولیت فراهم کند .افزایش ظرفیت بیانگر فعال شدن تدریجی الکترود، بهبود نفوذ الکترولیت در ساختار متخلخل و افزایش بهره‌برداری از ماده فعال می‌باشد. همچنین اختلاف اندک ظرفیت میان چرخه‌های سوم و پنجم نشان‌دهنده پایداری مناسب ساختار سه‌بعدی مسی در طی فرآیندهای شارژ و دشارژ است. بر این اساس، جمع کننده جریان سه‌بعدی متخلخل تهیه شده در این پژوهش می‌تواند گزینه‌ای مناسب برای استفاده در باتری‌ها و سایر سامانه‌های ذخیره‌سازی انرژی باشد.

مرجع‌ها

[1] J.M. Tarascon, M. Armand, “Issues and challenges facing rechargeable lithium batteries”, Nature, 414, 359–367 (2001).
[2] Z. Wang, D. Pan, Y. Liang, B. Xia, B. Qin, M. Wang, “Fabrication of three-dimensional porous cu current collector for lithium-ion batteries using space holder method”, International Journal of Electrochemical Science, 16(6), 210664 (2021).
[3] A. Kitada, “Electrodeposition of metal foils for battery current collectors: Status and challenges”, Energy Storage Materials, 75, 104073 (2025).

بهبود عملکرد ابرخازن $NiCo_2O_4$ در اثر آلایش فلوئور

مصلح، زهرا [۱و۲] ؛ کاملی، پرویز [۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان 84156-83111 ایران

[۲] ایران- تهران- دانشگاه جامع علمی کاربردی- مرکز علمی کاربردی پیام

چکیده

یکی از مهم‌ترین ابزار ذخیره‌سازی انرژی که در سال‌های اخیر توجه پژوهشگران را به خود معطوف ساخته است، ابرخازن‌ها هستند. در این میان اکسیدهای دوتایی فلزات واسطه به دلیل خواص الکتروشیمیایی مناسب و قیمت پایین به عنوان گزینه مناسب برای ابرخازن مطرح شده‌اند. در این مقاله با استفاده از روش هیدروترمال به ساخت الکترود $NiCo_2O_4$ پرداخته شد و ویژگی‌های الکتروشیمیایی الکترود تهیه‌شده مورد بررسی قرار گرفت. به منظور بهبود عملکرد و افزایش کارایی الکترود تهیه‌شده آلایش فلور در این ساختار انجام شد. نتایج نشان داد در اثر آلایش فلوئور رفتار الکتروشیمیایی به طرز چشمگیری بهبود یافته است و ظرفیت ابرخازن از ۴۵۰ به ۱۹۵۰ فاراد بر گرم رسیده است.

واژه های کلیدی: *روش هیدروترمال، بررسی ویژگی‌های الکتروشیمیایی، آلایش فلوئور، ابرخازن.*

Enhanced Electrochemical Performance of $NiCo_2O_4$ Supercapacitor via Fluorine Doping

Mosleh, Zahra[1,2]; Kameli, Parviz[1]

[1] Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran.
[2] Center of Payam- University of Applied Science and Technology- Tehran- Iran.

Abstract

One of the most important energy storage devices that has attracted the attention of researchers in recent years is supercapacitors. Among them, binary transition metal oxides have been considered as suitable candidates for supercapacitors due to their favorable electrochemical properties and low cost. In this study, the $NiCo_2O_4$ electrode was fabricated using the hydrothermal method, and the electrochemical properties of the prepared electrode were investigated. To improve the performance and efficiency of the fabricated electrode, fluorine doping was applied to this structure. The results showed that fluorine doping significantly enhanced the electrochemical behavior, increasing the supercapacitor capacity from 450 to 1950 F/g.

Keywords: Hydrothermal method, Electrochemical properties, F- doping, Supercapacitor.
PACS No 75

مقدمه

افزایش روزافزون تقاضای جهانی برای انرژی و کاهش منابع سوخت‌های فسیلی، یکی از چالش‌های اصلی جهان است. استفاده از سوخت‌های فسیلی در طیف وسیعی از حمل‌ونقل، صنعتی و خانگی گازهای نامطلوبی به ویژه CO_2 تولید می‌کند که باعث آلودگی محیط زیست و گرمایش جهانی می‌شود. با توجه به کاهش

سریع منابع انرژی رایج و سنتی مانند نفت و زغال‌سنگ و نیز آلودگی‌های زیست‌محیطی ناشی از این سوخت‌ها استفاده از منابع انرژی پایدار، کارآمد و پاک بسیار ضروری است [۱]. در حال حاضر توجه گسترده به دستگاه‌های الکترونیکی هوشمند و خودروهای هیبریدی استفاده از مواد دارای قابلیت ذخیره‌سازی انرژی را بیش از پیش در کانون توجه قرار داده است و چالش‌های بزرگی را در جهت تقویت عملکرد الکتروشیمیایی این دسته از مواد ایجاد کرده است. از این رو فناوری‌های جدید ذخیره‌سازی و تبدیل انرژی مانند ابرخازن‌ها، باتری‌ها و پیل‌های سوختی راهبردهای کلیدی برای مقابله با بحران انرژی هستند. ابرخازن‌ها می‌توانند به سرعت انرژی را ذخیره و آزاد کنند و همین عامل آن‌ها را به گزینه‌ای مناسب برای استفاده در وسایل نقلیه الکتریکی، سیستم‌های انرژی تبدیل‌پذیر و شبکه‌های هوشمند تبدیل کرده است. ظرفیت شارژ/ دشارژ بالا و طول عمر بالای ابرخازن‌ها مدیریت انرژی و کاربردهای مفید آن‌ها را افزایش داده است [۲].

در سال‌های اخیر اکسیدهای دوتایی فلزات واسطه به دلیل خواص الکتروشیمیایی مناسب و قیمت پایین به عنوان گزینه مناسب برای ابرخازن مطرح شده است. این مواد واکنش‌های ردوکس فعالی از خود نشان دهد. علاوه بر این ماهیت نیم‌رسانایی این مواد امکان تنظیم خواص الکترونی را از طریق آلایش در ساختار ممکن می‌سازد. این ویژگی‌ها این مواد را به عنوان گزینه مناسبی برای کاربردهای ابرخازنی تبدیل کرده است [۳].

در این مقاله ساخت و بررسی ویژگی‌های ابرخازنی $NiCo_2O_4$ و اثر آلایش فلوئور در این ساختار مورد بررسی قرار گرفته است.

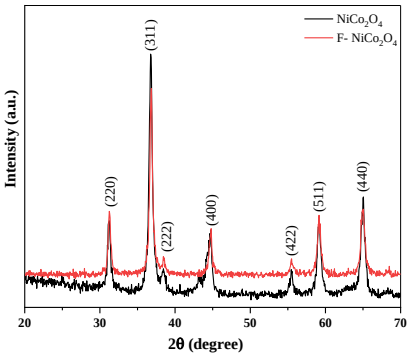
روش ساخت

برای ساخت نمونه ابتدا ۲mmol کلرید نیکل با ۴mmol کلرید کبالت و ۸mmol اوره در ۸۰ میلی‌لیتر آب یون‌زدایی‌شده حل شدند و محلول حاصل به مدت ۳۰ دقیقه بر روی همزن مغناطیسی به خوبی هم‌زده شد تا محلول شفافی به دست آید. محلول حاصل همراه فوم نیکل تجاری به درون تفلون اتوکلاو ریخته شد و اتوکلاو به مدت ۱۲ ساعت در دمای ۱۳۰ درجه‌سانتی‌گراد درون کوره قرار گرفت. رسوب حاصل چندین مرتبه با آب و اتانول شستشو داده شد و بر روی هیتر در دمای ۶۰ درجه سانتی‌گراد خشک شد و در نهایت به مدت ۲ ساعت تحت دمای ۴۰۰ درجه‌سانتی‌گراد درون کوره بازپخت شد. برای سنتز نمونه آلایش یافته با فلوئور مقدار ۳ میلی‌مول NH_4F استفاده کردیم وبقیه مراحل مشابه حالت قبل بود.

به‌منظور بررسی رفتار الکترودهای تهیه‌شده آنالیزهای مختلفی انجام شد. طیف XRD نمونه‌ها با استفاده از دستگاه پراش پرتو ایکس با اشعه Cu-kα اندازه‌گیری شد. همچنین رفتار الکتروشیمیایی نمونه‌ها از با استفاده از دستگاه پتانسیواستات مورد بررسی قرار گرفت.

نتایج و بحث

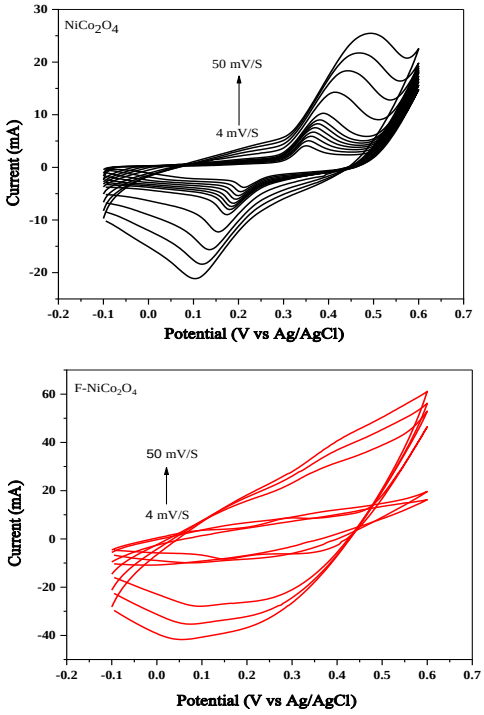
شکل (۱) طیف پراش نمونه خالص و نمونه آلایش‌یافته با فلور را نشان می‌دهد. از مقایسه طیف پراش به دست آمده با کارت استاندارد به شماره (۱۷۰۲-۰۱-۰۷۳) می‌توان دریافت که نمونه ساخته‌شده در حد دقت دستگاه اندازه‌گیری خالص و عاری از هرگونه فاز اضافی است [۴].



شکل ۱ : طیف پراش پرتو ایکس نمونه خالص و نمونه آلایش‌یافته با فلوئور.

در ادامه و بعد از اطمینان از خالص‌بودن نمونه‌های تهیه‌شده برای بررسی ویژگی‌های ابرخازنی از تست‌های ولتامتری چرخه‌ای و آزمون شارژ/ دشارژ گالوانواستاتیک استفاده کردیم. لازم به ذکر است تمامی تست‌ها در الکترولیت حاوی پتاسیم هیدروکسید ۳ مولار و در دمای اتاق انجام شد. شکل (۲) نمودار ولتامتری چرخه‌ای نمونه‌های تهیه‌شده را در سرعت اسکن ۵ تا ۵۰ میلی‌ولت بر ثانیه نشان می‌دهد. محدوده پنجره اعمال شده از ۰/۱- تا ۰/۶ ولت نسبت به الکترود مرجع انتخاب شده است.

برای نمونه خالص همان‌طور که مشاهده می‌شود قله اکایش/کاهش (ردوکس) در منحنی‌ها دیده می‌شود که نشان‌دهنده رفتار الکتروشیمیایی مطلوب مربوط به این نمونه است. این قله‌ها را می‌توان به واکنش‌های فارادایی یون‌های نیکل و کبالت نسبت داد. در رابطه با نمونه آلایش‌یافته با فلوئور به وضوح مشاهده می‌شود که مساحت حلقه افزایش می‌یابد و شکل نمودار تقریبا مستطیل شکل می‌شود. به نظر می‌رسد حذف قله‌های ردوکس در اثر آلایش فلور درون ساختار، سینتیک واکنش‌ها را سریع‌تر کرده است و نمودار به سمت مستطیل‌شکل شدن که معرف رفتار ابرخازنی است پیش می‌رود. این مطلب با سایر مطالعات انجام‌شده همخوانی دارد [۵].



شکل۲ : نمودار ولتامتری چرخه‌ای نمونه خالص و آلایش‌یافته با فلوئور.

به منظور مشخص‌شدن بهبود عملکرد نمونه آلایش‌یافته نسبت به نمونه خالص، ظرفیت الکترودها محاسبه شد. بر اساس منحنی ولتامتری چرخه‌ای ظرفیت ویژه الکترود از رابطه (۱) به دست می‌آید [۶].

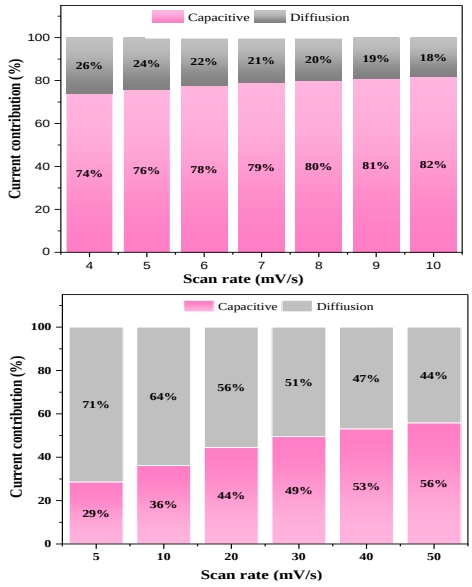
$$C = \frac{1}{2}\frac{\int_{V_i}^{V_f} i\,dV}{V\Delta V X} \qquad (1)$$

در این رابطه پارامتر V در مخرج کسر معرف سرعت روبش بر حسب ولت بر ثانیه است. پارامتر x معرف میزان ماده فعال بارگذاری‌شده بر سطح الکترود بر حسب گرم، I معرف جریان اعمالی بر حسب آمپر و ΔV پنجره پتانسیل بر حسب ولت می‌باشد. ظرفیت نمونه خالص ۴۵۰ فاراد بر گرم و ظرفیت نمونه آلایش‌یافته ۱۹۵۰ فاراد بر گرم است که به خوبی نشان می‌دهد عملکرد نمونه در اثر آلایش بهبود یافته است.

در ادامه به منظور درک بهتر از سرعت واکنش در سرعت‌های اسکن مختلف، جریان پخش و نفوذ در الکترودهای مورد بررسی حساب شد. برای تعیین سهم مربوط به جریان پخشی و جریان خازنی از رابطه (۲) استفاده کردیم. در این رابطه K_1 نشان‌دهنده سهم خازنی و K_2 نشان‌دهنده سهم پخشی است [۷].

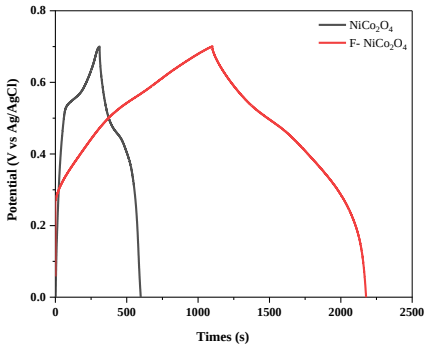
$$I(V) = K_1 V + K_2 V^{\frac{1}{2}} \qquad (2)$$

شکل (۳) سهم مربوط جریان خازنی و پخشی را در سرعت اسکن مختلف برای دو الکترود تهیه‌شده نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل (۳) نشان داده شده است به تدریج با افزایش سرعت اسکن سهم مربوط به جریان پخشی کاهش می‌یابد و سهم جریان خازنی غالب‌تر می‌شود.



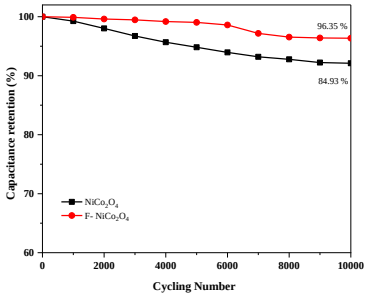
شکل۳ : سهم جریان خازنی و پخشی الکترودهای تهیه‌شده.

در نهایت نمودار شارژ/ دشارژ نمونه‌ها مورد بررسی قرار گرفت. برای این منظور در چگالی جریان‌های متفاوت نمودار شارژ/ دشارژ بررسی شد. به راحتی می‌توان دریافت که با افزایش جریان زمان شارژ/ دشارژ کاهش پیدا می‌کند. علت این امر آن است که فرایند شارژ/ دشارژ از طریق جذب– واجذب بار در مکان سطح الکترود یا از طریق نفوذ بار به بافت الکترود صورت می‌گیرد [۷]. شکل (٤) نمودار مقایسه شارژ/ دشارژ نمونه‌ها را در چگالی جریان ۱ آمپر بر گرم نشان می‌دهد. به وضوح می‌توان دریافت که نمونه آلایش یافته در جریان ۱ میلی آمپر زمان شارژ/ دشارژ بیشتری دارد که نشان دهنده عملکرد مطلوب‌تر این الکترود است.



شکل ٤ : مقایسه نمودار شارژ/ دشارژ نمونه خالص و آلایش‌یافته با فلوئور.

یکی از پارامترهای مهم در ابرخازن‌ها پایداری چرخه‌ای آن‌ها می‌باشد که نشان‌دهنده آن است که ابرخازن پس از استفاده طولانی مدت چه مقدار از ظرفیت اولیه خود را حفظ کرده است. طبیعی است هر چه میزان حفظ ظرفیت بیشتر باشد ابرخازن تهیه‌شده ارزش کاربردی و صنعتی بالاتری خواهد داشت. در این مقاله به منظور بررسی پایداری الکترودهای تهیه‌شده الکترودها تحت ۱۰۰۰۰ چرخه شارژ/ دشارژ قرار گرفتند. همان‌طور که در شکل (۵) نشان داده شده است بعد از طی ۱۰۰۰۰ چرخه نمونه آلایش‌یافته با فلوئور تنها ۳٫٦۵ درصد از ظرفیت اولیه خود را از دست داده است و ۹٦٫۳۵ درصد از ظرفیت اولیه خود را حفظ کرده است که بیانگر پایداری بالای این الکترود است. نتایج نشان داد که پایداری نمونه بدون آلایش بعد از طی ۱۰۰۰۰ چرخه شارژ/ دشارژ به ۸٤٫۹۳ درصد رسیده است. همان‌طور که انتظار می‌رفت آلایش فلوئور عملکرد الکترود را تا حد زیادی بهبود بخشیده است.



شکل ۵ : نمودار پایداری چرخه‌ای الکترودهای تهیه‌شده.

نتیجه گیری

نتایج این پژوهش نشان داد الکترود $NiCo_2O_4$ می‌تواند برای کاربردهای ابرخازنی مورد استفاده قرار گیرد. با این حال بررسی ساختار و ویژگی‌های این الکترود حاکی از آن بود که می‌توان عملکرد ابرخازنی این ماده را بهبود داد. نتایج نشان داد که آلایش فلوئور در ساختار می‌تواند ویژگی‌های ابرخازنی این الکترود را تا حد زیادی بهبود بخشد.

مرجع‌ها

[1] Nasser R, et al. "*Cooperation of F-doping and oxygen vacancies enhancing the electrochemical performances of $NiCo_2O_4$ for supercapacitor application*" Journal of Power Sources. **625** (2025).
[2] Gao, Kun, and Shu-Dal, Li. "*Hollow fibrous $NiCo_2O_4$ electrodes with controllable Zn substitution sites for supercapacitors* " Journal of Alloys and Compounds **832** (2020).
[3] Jiahao W, et al. "*Exploration of cobalt-based spinel oxide nanocatalysts MCo_2O_4 (M= Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) for glucose electrochemical sensing: $NiCo_2O_4$ exhibits largest Faradaic current*" Chemical Engineering Journal. **499** (2024).
[4] Zheng, Y., et al., "*Bimetal carbonaceous templates for multi-shelled $NiCo_2O_4$ hollow sphere with enhanced xylene detection*", Sensors and Actuators B: Chemical. **339** (2021).
[5] Noori ,A., et al., "*Towards establishing standard performance metrics for batteries, supercapacitors and beyond*" Chemical Society Reviews, **48**(5) (2019).
[6] Aruchamy, K., et al., "*One-step green route synthesis of spinel $ZnMn_2O_4$ nanoparticles decorated on MWCNTs as a novel electrode material for supercapacitor*" Materials Science and Engineering: B, **252** (2020).
[7] Benali, M., et al., "*Enhanced Electrochemical Performanceof Binder-Free Fluorine–Vanadium-Doped $CoMoO_4$ Nanosheets via In Situ MXene Integration for Energy Storage Applications*" ACS Applied Energy Materials, **8(15)** (2025).

بررسی ظرفیت ذخیره‌سازی الکتروشیمیایی هیدروژن در نانوکامپوزیت میل-۱۰۱(آهن)/گرافن اکساید

مالمیر، مریم[۱]

[۱] گروه فیزیک دانشگاه لرستان، خرم آباد ، لرستان

چکیده

این مطالعه به بررسی سنتز و خواص ذخیره‌سازی هیدروژن الکتروشیمیایی میل-۱۰۱(آهن) و نانوکامپوزیت آن با اکسید گرافن می‌پردازد. این مطالعه با نیاز به سیستم‌های کارآمد برای ذخیره‌سازی هیدروژن – برای تسهیل استفاده از هیدروژن به عنوان منبع انرژی پاک – انجام شد. نمونه‌ها با روش هیدروترمال سنتز شدند و سپس با استفاده از تکنیک‌های مختلف از جمله پراش اشعه ایکس و میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی، مشخصه‌یابی و تجزیه و تحلیل شدند. آزمایش‌های الکتروشیمیایی نشان داد که اکسید گرافن به طور قابل توجهی ظرفیت ذخیره‌سازی هیدروژن را افزایش می‌دهد. به طور خاص، نانوکامپوزیت میل-۱۰۱(آهن)/ اکسید گرافن در دشارژ دهم به ظرفیت ۵۴۷ میلی آمپر ساعت بر گرم دست یافت که بالاتر از نمونه خام است. این بهبود قابل توجه را می‌توان به افزایش تعداد مکان‌های جذب، بهبود انتقال یون و اثرات هم‌افزایی قوی بین میل-۱۰۱(آهن) واکسیدگرافن نسبت داد. این یافته‌ها نشان‌دهنده پتانسیل بالای این نانوکامپوزیت برای کاربردهای پیشرفته در زمینه ذخیره‌سازی هیدروژن ***است.*** *بررسی میزان ذخیره سازی هیدروژن در ، نانوکامپوزیت میل-۱۰۱(آهن)/ گرافن اکساید تا به حال در منابع علمی گزارش نشده وبه همین دلیل در این مطالعه مورد بررسی قرار گرفته است.*

واژه های کلیدی: ذخیره‌سازی هیدروژن، چارچوب های فلزی-آلی(MOF) ،نانوکامپوزیت‌ها، میل-۱۰۱(آهن) ((MIL-101(Fe)، اکسیدگرافن، هیدروترمال.

Investigation of the electrochemical hydrogen storage capacity in MIL-101 (Fe)/graphene oxide nanocomposite

Malmir, Maryam[1]

[1] Department of Physics, Lorestan University, Khorramabad, Lorestan

Abstract

This study investigates the synthesis and electrochemical hydrogen storage properties of MIL-101 (Fe)(and its graphene oxide nanocomposite. This study was driven by the need for efficient systems for hydrogen storage to facilitate the use of hydrogen as a clean energy source. The samples were synthesized by a hydrothermal method and then characterized and analyzed using various techniques including X-ray diffraction and field emission scanning electron microscopy. Electrochemical experiments showed that graphene oxide significantly enhances the hydrogen storage capacity. In particular, the MIL-101 (Fe) /GO nanocomposite achieved a capacity of 547 mAh g at DC10, which is higher than that of the raw sample. This remarkable improvement can be attributed to the increased number of adsorption sites, improved ion transport, and strong synergistic effects between MIL-101 (Fe) and graphene oxide. These findings indicate the high potential of this nanocomposite for advanced applications in the field of hydrogen storage. The study of the hydrogen storage capacity of MIL-101 (Fe)/graphene oxide nanocomposite has not been reported in scientific literature so far, and for this reason, it has been investigated in this study.

Keywords: *Hydrogen storage, metal-organic frameworks (MOFs), nanocomposites, MIL-101(Fe), graphene oxide, hydrothermal*

PACS No. *(۸٤-۸۱-٦۸)*

مقدمه

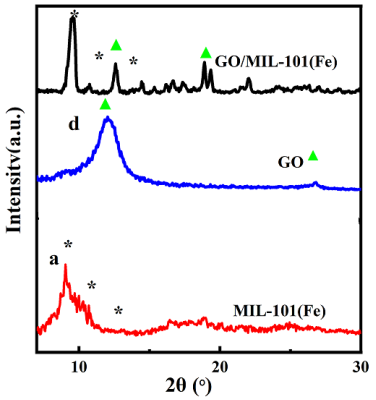
استفاده از هیدروژن به عنوان یک حامل انرژی ایمن، مطلوب و پاک به جای سوخت‌های فسیلی، تأثیر قابل توجهی در کاهش آلودگی هوا دارد. هیدروژن به عنوان یک سوخت تجدیدپذیر با راندمان انرژی بالا، مزایایی مانند فراوانی، سهولت تولید و غیرسمی بودن را ارائه می‌دهد. بنابراین، تحقیقات گسترده‌ای در زمینه ذخیره‌سازی هیدروژن انجام شده است. توسعه روش‌های ایمن و کم‌هزینه و همچنین مواد مؤثر می‌تواند عامل کلیدی و مهمی در ذخیره‌سازی این گاز باشد [۱]. محققان روش‌های متنوعی را برای بهبود عملکرد این مواد، از جمله نانوساختارسازی، دوپینگ کاتالیزوری و تکنیک‌های بی‌ثبات‌سازی، بررسی کرده‌اند. این رویکردها برای غلبه بر مشکلات مرتبط با سینتیک کند و دمای واجذب بالا که از نظر تاریخی کاربرد عملی بسیاری از سیستم‌های هیدرید را محدود کرده‌اند، طراحی شده‌اند. [۱]. چارچوب‌های آلی–فلزی (MOF ها) مواد متخلخل مختلف با مکان‌های فلزی قابل دسترس، پتانسیل ذخیره‌سازی هیدروژن فوق‌العاده‌ای را نشان داده‌اند. مساحت سطح بزرگ و ساختارهای منافذ قابل تنظیم این مواد، جذب قابل توجه هیدروژن را ممکن می‌سازد. شواهد نشان می‌دهد که آلیاژسازی و کامپوزیت چارچوب‌های آلی–فلزی تأثیر مثبتی بر عملکرد ذخیره‌سازی هیدروژن دارد [۲،۳]. بر این اساس، این مطالعه بر سنتز میل–۱۰۱(آهن) و نانوکامپوزیت آن با اکسید گرافن (GO) از طریق روش هیدروترمال تمرکز دارد. سپس، ظرفیت تخلیه هیدروژن این مواد در یک محیط الکتروشیمیایی قلیایی ارزیابی و مقایسه شد.

آزمایش

برای سنتز نانوکامپوزیت میل–۱۰۱(آهن)/اکسید گرافن، ۰.٤٧٤ گرم اسید ترفتالیک و ۱.٤٦ گرم $FeCl_3 \cdot 6H_2O$ در ۳۰ میلی‌لیتر N,N–دی‌متیل‌فرم‌آمید حل شده و به مدت ۱ ساعت در دمای اتاق هم‌زده شدند. سپس، ۰.۰۳ گرم اکسیدگرافن به ٦ میلی‌لیتر اتانول اضافه شد و قبل از اضافه شدن به مدت ٦۰ دقیقه به صورت اولتراسونیک پراکنده شد. محلول ترکیبی به طور منظم به مدت ۲۰ دقیقه تحت امواج فراصوت قرار گرفت تا از اختلاط کامل دو محلول اطمینان حاصل شود. سپس، مخلوط در یک اتوکلاو قرار داده شد و به مدت ٢٤ ساعت در دمای ۱۲۰ درجه سانتیگراد واکنش داده شد. پس از خنک شدن ظرف واکنش تا دمای اتاق، نمونه بدست آمده سانتریفیوژ و بارها با N،N–دی متیل فرمامید و اتانول مطلق شسته شد. پس از این، نمونه در فر با دمای ۷۰ درجه سانتیگراد خشک شد و به مدت ۱۰ ساعت در دمای ۱۵۰ درجه سانتیگراد با استفاده از خشک کن خلاء فعال شد [٤]

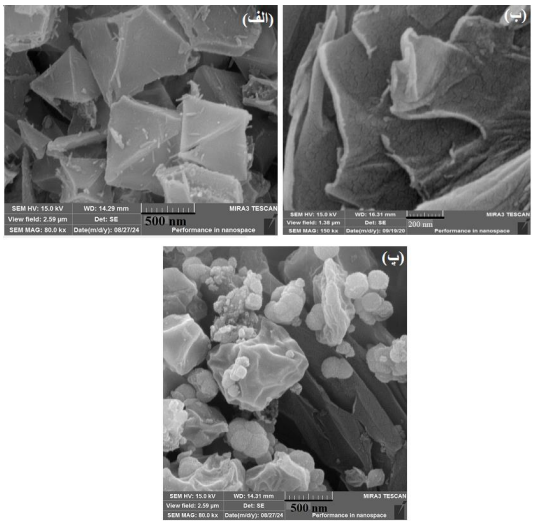
نتایج و بحث

الگوهای الگوهای پراش اشعه ایکس (XRD) مربوط به، گرافن اکساید، میل–۱۰۱(آهن) و نانوکامپوزیت آن در شکل (۱) نمایش داده شده‌اند. منبع CuKα با طول موج پرتو ایکس(۱.٥٤۱۰ انگستروم) در این آنالیزاستفاده شده است. الگوهای پراش اشعه ایکس مربوط به میل–۱۰۱(آهن) با مقالات قبلی [٤و٥] سازگار است. همانطور که در این شکل‌ها نشان داده شده است، پیک‌های پراش اولیه مربوط به میل–۱۰۱(آهن) هستند که فاز اصلی کامپوزیت را تشکیل می‌دهند. ترکیب کریستال‌های میل بین اکسیدگرافن منجر به تغییرات جزئی در شدت پیک‌ها در طیف‌های کامپوزیت می‌شود. در شکل (۱)، میل–۱۰۱(آهن) پیک‌های پراش مشخصه خود را در مقادیر 2θ برابر با°۹.۳٦، °۱۸.۹۸و °۲۳.۷۰ نشان می‌دهد که به ترتیب به صفحات کریستالوگرافی (۳۱۱)، (٥۱۱) و (۸٥۲) نسبت داده شده‌اند. شکل (۱) الگوی الگوی پراش اشعه ایکس گرافن اکسید را نشان می‌دهد که دارای پیکی در $2\theta = 11.21^\circ$ است که به صفحه (۰۰۲) اکسید گرافیت نسبت داده می‌شود. در نهایت، الگوی پراش اشعه ایکس نانوکامپوزیت به وضوح پیک‌های پراش مرتبط با میل–۱۰۱(آهن) و گرافن اکساید را نشان می‌دهد که ادغام موفقیت‌آمیز هر دو جزء را تأیید می‌کند. در مجموع، این نتایج ساختار بلوری و ترکیب فازی مواد سنتز شده را نشان می‌دهند و تهیه موفقیت‌آمیز نانوکامپوزیت‌های مورد نظر را تأیید می‌کنند.



شکل ۱: XRD نمونه های سنتز شده.

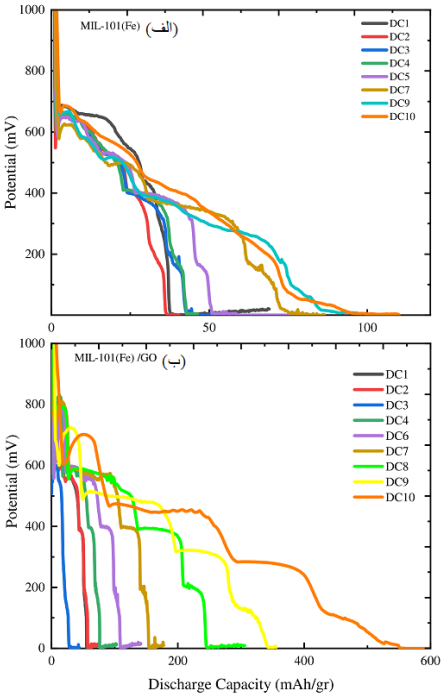
شکل (2) میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) از صفحات گرافن اکساید، میل-۱۰۱(آهن) و کامپوزیت آن با گرافن اکساید را نشان می‌دهد. میل-۱۰۱(آهن) شکل (۲) (الف) دارای شکل چندوجهی مشخصی با ساختار متخلخل است که شبیه اجسام هندسی کوچک با منافذ متعدد است. در مورد کامپوزیت میل-۱۰۱(آهن)/اکسید گرافن شکل (۲) (پ)، ذرات میل-۱۰۱(آهن) روی سطوح صفحه‌ای و صاف گرافن اکساید، شکل (۲)(ب)، پراکنده می‌شوند و ساختار اصلی خود را حفظ می‌کنند.



شکل ۲: تصاویرFESEM (الف) میل-۱۰۱ (آهن)، (ب) صفحات گرافن اکساید و (پ) نانوکامپوزیت میل-۱۰۱ (آهن)/گرافن اکساید.

ذخیره سازی الکتروشیمیایی هیدروژن

کرونوپتانسیومتری (CP) در جریان ثابت ۱ میلی‌آمپر برای بررسی عملکرد ذخیره‌سازی هیدروژن الکتروشیمیایی مواد ساخته شده به کار گرفته شد. آزمایش‌ها با استفاده از یک سیستم گالوانواستات/پتانسیواستات (SAMA500) انجام شد. این روش امکان ارزیابی کیفی و کمی ظرفیت تخلیه مواد سنتز شده را فراهم کرد. ظرفیت تخلیه با ضرب جریان در زمان به ازای گرم ماده فعال بر حسب میلی آمپر ساعت بر گرم محاسبه شد. میزان ماده فعال نمونه ها ۰.۰۰۱ گرم بوده است. شکل (۳) منحنی‌های ظرفیت تخلیه هیدروژن را برای میل (۱۰۱)-آهن و کامپوزیت آن نشان می‌دهد. ظرفیت با تعداد چرخه‌ها افزایش می‌یابد و از دشارژ یک (DC1) به دشارژ ده (DC10) افزایش می‌یابد (به عنوان مثال، ۹۸ میلی‌آمپر ساعت بر گرم در دشارژ ده در مقابل مقادیر کمتر در دشارژ یک برای میل-۱۰۱ (آهن)). چندین سطح ثابت در منحنی‌های تخلیه شکل (۳) (الف) نشان‌دهنده دفع چند مرحله‌ای هیدروژن یا مکان‌های اتصال ناهمگن هیدروژن است. افت شدید پتانسیل پس از هر سطح ثابت،



شکل ۳: ظرفیت تخلیه هیدروژن نمونه‌های سنتز شده.

تخلیه سریع هیدروژن در مکان‌های خاص میل-۱۰۱(آهن) را نشان می‌دهد. در شکل ۳ (ب) ظرفیت تخلیه هیدروژن برای نمونه کامپوزیت میل با گرافن اکساید سطوح ثابت طولانی‌تر در ظرفیت‌های بالاتر نشان‌دهنده آزادسازی پایدار هیدروژن است که احتمالاً به دلیل بهبود رسانایی و دسترسی به منافذ است استفاده از اکسید گرافن بهبود قابل توجهی را فراهم می‌کند، به طوری که ظرفیت آن در دشارژ ده به بیش از ۵۴۷ میلی‌آمپر ساعت بر گرم می‌رسد. در کامپوزیت میل-۱۰۱(آهن) / گرافن اکساید، چگالی بالای گروه‌های عاملی حاوی اکسیژن قطبی – مانند هیدروکسیل (–OH)، اپوکسی (–O–)، کربوکسیل (–COOH) و کربونیل (C--O) – روی سطح و لبه‌ها، آب‌دوستی قوی و رسانایی الکترونیکی بهبود یافته را ایجاد می‌کند و در نتیجه تعداد بیشتری از مکان‌های فعال برای جذب هیدروژن فراهم می‌کند [۶]

نتیجه گیری

در این مطالعه، عملکرد ذخیره‌سازی الکتروشیمیایی هیدروژن در دما و فشار محیط در میل-۱۰۱(آهن) و نانوکامپوزیت آن با گرافن اکساید بررسی شد. افزایش قابل توجهی در ظرفیت تخلیه هیدروژن در کامپوزیت باگرافن اکساید، ۵۴۷ میلی آمپر ساعت بر گرم حاصل شد. ذخیره‌سازی هیدروژن برتر به افزایش تعداد مکان‌های جذب، کاهش مقاومت انتقال بار و بهبود انتشار و ذخیره‌سازی هیدروژن ناشی از تخلخل اصلاح‌شده نسبت داده می‌شود. چگالی بالاتر گروه‌های عاملی حاوی اکسیژن قطبی – مانند هیدروکسیل (–OH)، اپوکسی (–O–)، کربوکسیل (–COOH) و کربونیل (C--O) – روی سطح و لبه‌های صفحات اکسید گرافن در کامپوزیت مبتنی بر اکسید گرافن، آبدوستی را افزایش می‌دهد، انتقال یون را بهبود می‌بخشد و پاسخ جریان آندی را افزایش می‌دهد و در نتیجه تعداد مکان‌های فعال بیشتری برای جذب هیدروژن فراهم می‌کند. بنابراین، هیبریدهای چارچوب‌های فلزی آلی-نانومواد کربنی پتانسیل بالایی برای ذخیره‌سازی پیشرفته هیدروژن نشان می‌دهند و احتمالاً می‌توانند پیشرفت‌های آینده در مواد برای اقتصاد انرژی مبتنی بر هیدروژن را در شرایط محیطی هدایت کنند.

مرجع‌ها

[1] V. Beschkov, E. Ganev, Perspectives on the development of technologies for hydrogen as a carrier of sustainable energy, Energies 16 (17) (2023) 6108.
[2] A. Bazgir, M. Malmir, M. Alipour, Sh. Varshoy, Hydrothermal Fabrication and Characterization of MIL-101 (Cr)-Based Nanocomposites with Graphene Oxide and Multi-Walled Carbon Nanotubes as Active Materials for Ambient Hydrogen Storage, *Journal of The Electrochemical Society* 2026 173 090536.
[3] Y. Cho, H. Cho, E. S. Cho, Nanointerface engineering of metal hydrides for advanced hydrogen storage, Chemistry of Materials 35 (2) (2023) 366–385.
[4] Q. Xie, Y. Li, Z. Lv, H. Zhou, X. Yang, J. Chen, H. Guo, Effective adsorption and removal of phosphate from aqueous solutions and eutrophic water by fe-based mofs of mil-101, Scientific reports 7 (1) (2017) 3316.
[5] L. He, Y. Zhang, Y. Zheng, Q. Jia, S. Shan, Y. Dong, Degradation of tetracycline by a novel mil-101 (fe)/tio2 composite with persulfate, Journal of Porous Materials 26 (6) (2019) 1839–1850.
[6] D. A. Dikin, S. Stankovich, E. J. Zimney, R. D. Piner, G. H. Dommett, G. Evmenenko, S. T. Nguyen, R. S. Ruoff, Preparation and characterization of graphene oxide paper, Nature 448 (7152) (2007) 457–460.

ساخت و مشخصه‌یابی الکترود انعطاف‌پذیر بر پایه گرافن القاشده توسط لیزر CO_2 به منظور تشخیص همزمان دوپامین و سروتونین

حیدری، مهسا[۱و۲]؛ تقی‌پور، مجتبی[۱و۲]؛ اسدیان، الهام[۳]؛ محدثه وفایی[۴]

[۱] پژوهشکده علوم و فناوری‌های همگرا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

[۲] دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

[۳] گروه مهندسی بافت و پزشکی بازساختی، دانشکده فناوری‌های نوین پزشکی، دانشگاه علوم پزشکی شهید بهشتی، تهران

[۴] دانشکده مهندسی پزشکی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

چکیده

در این پژوهش، یک حسگر الکتروشیمیایی بر پایه‌ی گرافن القاشده با لیزر (LIG) دی‌اکسید کربن که با نانوذرات پلیمر هادی پلی‌پیرول اصلاح سطحی شده است، به منظور تشخیص همزمان دوپامین و سروتونین توسعه داده شد. میکروساختار گرافنی حاصل از فرآیند لیزری با هدایت بالا، به همراه ویژگی‌های رسانایی و سطح موثر ارتقایافته ساختار میکرو/ نانوذراتی پلی‌پیرول، موجب افزایش چشمگیر حساسیت و بهبود سینتیک انتقال الکترون گردید. عملکرد حسگر در تشخیص دو انتقال‌دهنده‌ی عصبی مهم، دوپامین (DA) و سروتونین (5-HT) ، با استفاده از روش ولتامتری پالسی تفاضلی ارزیابی شد. نتایج نشان داد که الکترود بهینه‌شده دارای پاسخ‌دهی سریع، جریان پیک تقویت‌شده و تفکیک‌پذیری بالا میان سیگنال‌های DA و 5-HT است. محدوده خطی 10 نانومولار تا ۱۰ میکرومولار و حد تشخیص نانومولاری به دست آمده برای هر دو آنالیت، کارایی حسگر را برای کاربردهای آنالیز زیستی و پایش بالینی نشان می‌دهد.

واژه های کلیدی: حسگر الکتروشیمیایی، الکترود انعطاف‌پذیر، انتقال‌دهنده عصبی، گرافن القاشده با لیزر، دوپامین، سروتونین

Fabrication and Characterization of Laser-induced Graphene-based Flexible Electrodes for Simultaneous Sensing of Dopamine and Serotonin

Heydari, Mahsa[1]; Taghipoor, Mojtaba[2]; Asadian, Elham[3]

[1] *Institute for Convergence Science and Technology, Sharif University of Technology, Tehran*
[2] *Department of Mechanical Engineering, Sharif University of Technology, Tehran*
[3] *School of Advanced Technologies in Medicine, Shahid Beheshti University of Medical Sciences, Tehran*

Abstract

This study developed an electrochemical sensor based on CO_2 laser-induced graphene (LIG) modified with electrochemically deposited polypyrrole to improve conductivity and surface area. The synergistic properties enhanced electron transfer and sensor sensitivity. Using DPV, the sensor showed fast response, strong signals, and clear peak separation for dopamine and serotonin, with a wide linear range and low detection limits, indicating good potential for biological and clinical analysis.

***Keywords**: Electrochemical Sensors, Flexible Electrodes, Neurotransmitter, Laser-induced Graphene, Dopamine, Serotonin*
PACS No. 87

مقدمه

انتقال‌دهنده‌های عصبی نقش اساسی در تنظیم عملکردهای فیزیولوژیکی و شناختی بدن ایفا می‌کنند و تغییر در غلظت آن‌ها می‌تواند با بسیاری از اختلالات عصبی و روانی مرتبط باشد. در میان این ترکیبات، دوپامین (DA) و سروتونین (5-HT) از مهم‌ترین مونوآمین‌های زیستی محسوب می‌شوند که در فرآیندهایی مانند تنظیم خلق‌وخو، کنترل حرکت، حافظه، خواب و رفتارهای شناختی نقش دارند. اختلال در سطح غلظت این انتقال‌دهنده‌ها با بیماری‌هایی نظیر پارکینسون، افسردگی، اسکیزوفرنی، اضطراب و برخی اختلالات خواب مرتبط است. از این رو، توسعه روش‌های دقیق، سریع و حساس برای اندازه‌گیری همزمان این مولکول‌ها در نمونه‌های زیستی اهمیت زیادی در مطالعات زیست‌پزشکی، تشخیص بالینی و پایش سلامت دارد. در میان روش‌های تحلیلی مختلف، حسگرهای الکتروشیمیایی به دلیل حساسیت بالا، هزینه کم، سرعت پاسخ مناسب و امکان استفاده در اندازه‌گیری‌های درجا، به عنوان گزینه‌ای کارآمد برای تشخیص انتقال‌دهنده‌های عصبی مورد توجه قرار گرفته‌اند [1].

در سال‌های اخیر، الکترودهای گرافنی القاشده با لیزر (Laser-induced Graphene, LIG) به عنوان بستری نوین برای ساخت حسگرهای الکتروشیمیایی معرفی شده‌اند. این الکترودها از طریق تابش لیزر، معمولاً لیزر دی‌اکسید کربن، بر روی زیرلایه‌های بر پایه کربنی مانند پلی‌ایمید، کاغذ، و یا پارچه تولید می‌شوند و ساختاری سه‌بعدی، متخلخل و رسانا ایجاد می‌کنند. مساحت سطحی بالا، هدایت الکتریکی مناسب، پایداری شیمیایی و امکان ساخت سریع و کم‌هزینه از جمله مزایای مهم الکترودهای LIG است که آن‌ها را به گزینه‌ای مناسب برای کاربردهای حسگری تبدیل کرده است. علاوه بر این، ساختار متخلخل این مواد باعث افزایش تعداد سایت‌های فعال الکتروشیمیایی و بهبود انتقال الکترون در سطح الکترود می‌شود [3,2].

برای بهبود بیشتر عملکرد الکترودهای گرافنی، اصلاح سطح آن‌ها با مواد فعال مختلف مورد توجه قرار گرفته است. در این میان، پلیمرهای هادی به دلیل خواص الکتروشیمیایی مطلوب، زیست‌سازگاری و توانایی تسهیل انتقال بار، نقش مهمی در توسعه حسگرهای پیشرفته ایفا می‌کنند. پلی‌پیرول (PPy) یکی از شناخته‌شده‌ترین پلیمرهای هادی است که به دلیل سنتز آسان، پایداری مناسب و فعالیت الکتروکاتالیستی مطلوب، به طور گسترده در اصلاح سطح الکترودها مورد استفاده قرار گرفته است. ترکیب پلی‌پیرول با ساختارهای کربنی متخلخل می‌تواند منجر به افزایش مساحت سطحی مؤثر، بهبود سینتیک انتقال الکترون و افزایش حساسیت حسگر شود. در مطالعات مختلف، الکترودهای LIG اصلاح‌شده با پلی‌پیرول برای تشخیص گونه‌های زیستی مختلف مانند دوپامین، سروتونین، گلوکز و غیره مورد استفاده قرار گرفته‌اند و نتایج نشان‌دهنده بهبود قابل‌توجه پاسخ الکتروشیمیایی بوده است [4].

در این پژوهش، یک الکترود گرافنی القاشده با لیزر به عنوان بستر حسگری انعطاف‌پذیر توسعه داده شد و سطح آن با لایه‌ای از پلیمر هادی پلی‌پیرول اصلاح گردید. عملکرد این الکترود برای اندازه‌گیری همزمان دو انتقال‌دهنده عصبی مهم، دوپامین و سروتونین، مورد بررسی قرار گرفت. الکترود پیشنهادی می‌تواند به عنوان ابزاری مناسب برای آنالیز زیستی و پایش غیرتهاجمی انتقال‌دهنده‌های عصبی مورد استفاده قرار گیرد.

جستجوها نشان می‌دهد که هیچ گزارشی مبنی بر اصلاح LIG با تک پلیمر پلی‌پیرول صورت نگرفته و کامپوزیت این پلیمر با دیگر مواد گزارش شده است.

مواد و روش ساخت

الکترودهای مبتنی بر گرافن متخلخل سه‌بعدی از طریق حکاکی مستقیم لیزر کربن‌دی‌اکسید (شرکت rotech– مدل RT4040) بر روی ورق‌های کپتون (پلی‌ایمید) انعطاف‌پذیر ساخته شدند. برای ایجاد ریزساختارهای گرافنی، پارامترهای لیزر که شامل توان اعمالی، سرعت روبش و فاصله خطهای روبش می‌باشد، بهینه‌سازی شدند. این شرایط بر روی ورق‌های پلی‌ایمید که با اتانول (Merck) تمیز شده بودند اعمال شد.

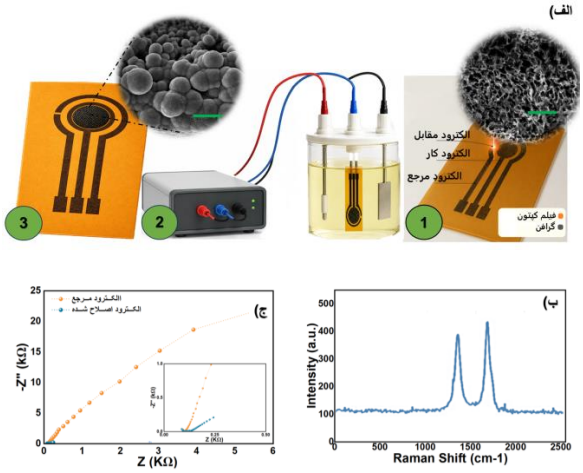
به منظور افزایش رسانایی الکترود و همچنین ارتقای مساحت فعال موثر، محلولی از پلیمر هادی پلی‌پیرول و سدیم دودسیل‌سولفات (Sigma Aldrich) در غلظت های ۰.۰۵، ۰.۱ و ۰.۲۵ مولار تهیه

و به روش کرونوآمپرومتری بر روی سطح الکترود با پتانسیل ۱.۲ ولت و در بازه های زمانی مختلف ۳۰ تا ۸۰۰ ثانیه لایه‌نشانی شد. به منظور انجام آنالیزهای الکتروشیمیایی از یک آرایش سه‌الکترودی شامل الکترود کار (دایره‌ای با قطر ۲ میلی‌متر)، الکترود پلاتین به‌عنوان الکترود کمکی و الکترود نقره/نقره کلرید به‌عنوان الکترود مرجع استفاده شد. به‌منظور جداسازی الکترود کار از سایر نواحی، یک لایه رزین بر روی الکترود LIG اعمال گردید.

تمامی اندازه‌گیری‌ها با استفاده از دستگاه اتولب (Autolab) مدل PGSTAT302N ساخت شرکت Metrohm AG در بافر PBS (Merck) انجام شد. برای ارزیابی عملکرد الکتروشیمیایی الکترودها در حسگری دوپامین و سروتونین (Sigma Aldrich)، از دو روش ولتامتری چرخه‌ای و ولتامتری پالسی تفاضلی در بازه پتانسیلی ۰ تا ۰/۸ ولت استفاده گردید که نتایج مربوط به روش دوم عملکرد بهتری را در تفکیک پیک دو آنالیت نشان دادند. همچنین از ولتامتری چرخه‌ای برای محاسبه مساحت سطح فعال الکتروشیمیایی با استفاده از معادله Randles–Ševčík بهره گرفته شد.

نتایج و بحث

شکل ۱–الف، طرحواره‌ای از مراحل ساخت الکترود را نشان می‌دهد که به صورت مختصر در بخش روش ساخت به آن اشاره شد. چنانچه در تصویر مشاهده می‌شود، تصویر FESEM مربوط به الکترود LIG ساختاری سه‌بعدی و متخلخل را نشان می‌دهد، همچنین صفحات دو بعدی گرافن که به صورت متقاطع با هم در تلاقی هستند قابل مشاهده است. این در حالی است که ساختار الکترود اصلاح‌شده، خوشه‌های میکروساختار پلی‌پیرولی است که از نانوکره‌های انبوه تشکیل شده است. حضور میکرو/نانوساختارهای پلی‌پیرول بر روی سطح الکترود LIG منجر به افزایش مساحت موثر سطحی و همچنین ارتقای رسانش الکتریکی و یونی الکترود مرجع می‌شود که در منحنی نایکوییست تایید شده است. تصویر ۱–ب، طیف رامان را نشان می‌دهد که تشکیل گرافن بر روی سطح فیلم کپتون را با حضور دو پیک مربوط به باندهای D و G در ۱۳۵۰و ۱۵۸۵ سانتی متر $^{-1}$ و



شکل۱: الف) طرحواره‌ای از روش ساخت و اصلاح الکتروشیمیایی سطحی الکترود انعطاف‌پذیر بر پایه گرافن تولیدشده از القای لیزر کربن دی اکسید و تصاویر سطحی FESEM از گرافن القا شده با لیزر و نانوذرات پلی‌پیرول. نوار مقیاس در تصاویر FESEM، ۲۰میکرومتر است. ب) طیف رامان از گرافن تشکیل شده بر روی فیلم کپتون. ج) منحنی نایکوییست، مقایسه‌ای از تغییرات مقاومت الکتریکی دو الکترود مرجع و اصلاح‌شده در حضور PBS.

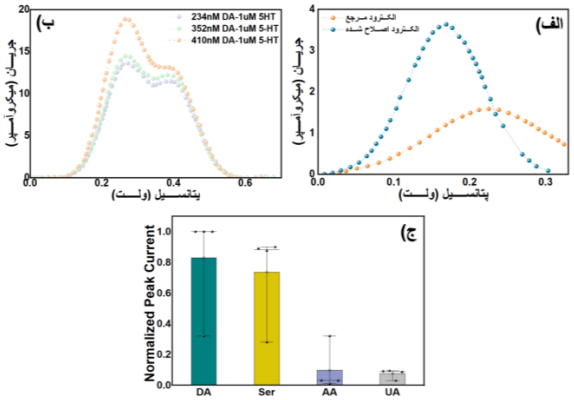
نسبت این پیک‌ها تایید می‌کند[۵]. همان‌طور که شکل ۱–ج نشان داده شده، قطر قوس منحنی در فرکانس‌های بالا که معادل با مقاومت ترابرد بار در الکترود می‌باشد، در حضور PPy بر سطح الکترود به طور چشمگیری کاهش یافته که نشان می‌دهد رسانایی الکترونی در سطح الکترود افزایش یافته است.

به منظور بررسی عملکرد الکترود اصلاح‌شده در سنجش دو گونه دوپامین و سروتونین، از تست ولتامتری پالس تفاضلی (DPV) به دلیل کاهش اثرات نویزی بیشتر در این روش بهره گرفته شد. بدین منظور غلظت‌های مختلفی از دو گونه مورد نظر در بافر PBS (PH=7.4) مورد آزمایش قرار گرفت. شکل ۲–الف مقایسه‌ای از عملکرد الکترود مرجع و اصلاح‌شده را در حضور ۱۰۰میکرومولار دوپامین نشان می‌دهد. همان‌طور که قابل‌مشاهده است با افزودن PPy بر روی سطح الکترود، پتانسیل اکسیداسیون از ۰.۲۲ ولت به ۰.۱۷ ولت کاهش یافته و جریان افزایش یافته است که به دلیل رسانش بالاتر الکترود اصلاح‌شده و برهم‌کنش‌های الکترون آزاد بین نیتروژن موجود در PPy و مولکول دوپامین می‌باشد. تست DPV در حضور هر دو گونه موردنظر به منظور بررسی قابلیت

جداسازی پیک‌ها، گزینش‌پذیری روش، و ارزیابی رفتار الکتروشیمیایی هم‌زمان آن‌ها انجام شد. همان‌طور که در شکل ۲-ب قابل‌ملاحظه است، الکترود اصلاح‌شده تفکیک قابل قبولی را در زمینه حسگری دو گونه نشان می‌دهد. درجه این تفکیک پذیری در PH های مختلف، متفاوت است و در محیط‌های اسیدی بهینه می‌شود.

بررسی‌ها برای سنجش آنالیت‌ها به صورت تک نشان دادند که با افزایش غلظت، جریان دو گونه مورد نظر افزایش یافته و رفتار خطی نشان دادند. با استفاده از داده کالیبراسیون به‌دست‌آمده از این دو منحنی، حساسیت و محدودیت تشخیص (LOD) برای دوپامین و سروتونین محاسبه شد. حساسیت برای سروتونین و دوپامین، به ترتیب برابر با ۱۶.۰۵ میکروآمپر بر میکرومولار و ۲۰ میکروآمپر بر میکرومولار به دست آمد. همچنین مقدار کمیت LOD برای هر دو گونه، به ترتیب برابر با ۱۸.۸۶ نانومولار و ۱۵٤نانومولار محاسبه گردید.

در این پژوهش، آزمون‌های تکرارپذیری و مطالعه اثر تداخل ترکیبات زیستی متداول نظیر آسکوربیک اسید و اوریک اسید نیز انجام شد که درشکل ۲-ج قابل مشاهده است. برای هر گروه به ازای ۵۰۰میکرومولار از هر آنالیت مورد نظر، ٤ تست انجام شد که میانگین داده‌ها تکرارپذیری جریان اندازه‌گیری‌شده را نشان



شکل۲: الف) مقایسه‌ای از عملکرد الکترود در حضور و عدم حضور پوشش پلیمری در ۱۰۰میکرومولار دوپامین. ب) منحنی DPV در حضور هر دو آنالیت به صورت همزمان در PBS و PH=7.4. ج) نتایج مربوط به آزمون تکرارپذیری و گزینش‌پذیری الکترود اصلاح‌شده در حضور آنالیت‌های مورد نظر و دو گونه مداخله‌کننده اوریک اسید و آسکوربیک اسید.

می‌دهد. همچنین نتایج مربوط به تست گزینش‌پذیری که در شکل قابل مشاهده است، نشان داد که الکترودهای تهیه‌شده در پاسخ به دو آنالیت مداخله‌گر پاسخدهی بسیار پایین‌تری داشته و الکترود اصلاح‌شده از گزینش‌پذیری و عملکرد الکتروشیمیایی مناسبی نسبت به دوپامین و سروتونین برخوردار است.

نتیجه گیری

در این مطالعه، یک حسگر الکتروشیمیایی مبتنی بر گرافن القاشده با لیزر اصلاح شده با پلی‌پیرول توسعه داده شد. نتایج نشان داد که این الکترود به دلیل اثر هم‌افزایی هدایت بالای گرافن و نانوساختار پلی‌پیرولی رسانا که منجر به افزایش مساحت سطحی فعال شد، عملکرد الکتروشیمیایی مطلوبی ارائه می‌دهد. حسگر پیشنهادی از حساسیت بالا، حد تشخیص پایین و تفکیک مناسب پیک‌های اکسایش برخوردار بود و امکان اندازه‌گیری همزمان آنالیت‌ها را فراهم کرد. همچنین پایداری و تکرارپذیری مناسب در کنار عملکرد قابل قبول در نمونه‌های واقعی، بیانگر پتانسیل بالای این الکترود برای کاربرد در حسگرهای زیستی و آنالیزهای الکتروشیمیایی است.

مراجع

[1] Tavakolian-Ardakani Z, Hosu O, Cristea C, Mazloum-Ardakani M, Marrazza G. Latest Trends in Electrochemical Sensors for Neurotransmitters: A review. *Sensors*. 2019 Apr 30;**19**(9):2037. https://doi.org/10.3390/s19092037.

[2] Kammarchedu V, Ebrahimi A. Advancing electrochemical screening of neurotransmitters using a customizable Machine Learning-Based multimodal system. *IEEE Sensors Letters*. 2023 Feb 22;**7**(3):1–4. https://doi.org/10.1109/lsens.2023.3247002

[3] Kumar S, Bhagat AK, Bhaiyya M, Amreen K, Dubey SK, Goel S. A machine learning approach for simultaneous electrochemical detection of dopamine and serotonin in an optimized carbon Thread-Based miniaturized device. *IEEE Sensors Journal*. 2024 Apr 17;**24**(13):21378–85. https://doi.org/10.1109/jsen.2024.3386655

[4] Alahmadi N, El-Said WA. Electrochemical sensing of dopamine using Polypyrrole/Molybdenum oxide Bilayer-Modified ITO electrode. *Biosensors*. 2023 May 26;**13**(6):578. https://doi.org/10.3390/bios13060578

[5] Ziyazadeh M, Vafaiee M, Mohammadpour R, Ehtesabi H. Dual-sided and Flexible Triboelectric Nanogenerator-based Hydrogel Skin Patch for Promoting Wound Healing. Nano Energy. 2025. 10.1016/j.nanoen.2024.110558

تصفیه آب از رنگدانه های آلاینده با استفاده از نانوکامپوزیت های مغناطیسی $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$

ملاحسینی، الهام[۱]؛ فرهمندزاده ، فرزاد[۱] ؛ ،زارع، حکیمه[۲]، ملایی، مهدی[۱]
[۱]گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه دانشگاه ولی عصر (عج)رفسنجان ، رفسنجان
[۲]گروه فیزیک، دانشکده فیزیک دانشگاه یزد ، یزد

چکیده

کمبود آب همچنان یکی از مهم‌ترین چالش‌های جهانی است که نیاز فوری به فناوری‌های کارآمد و پایدار برای تصفیه فاضلاب را برجسته می‌کند. در این پژوهش، نانوکامپوزیت‌های مغناطیسی $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ به روش مبتنی بر پروب اولتراسونیک سنتز شده و به‌عنوان کاتالیست‌های بسیار فعال در تاریکی برای تخریب سریع رنگزاهای آلی مورد استفاده قرار گرفتند. این نانوکامپوزیت‌ها با استفاده از آنالیزهای XRD و FT-IR به‌طور گسترده مورد شناسایی قرار گرفتند. نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ کارایی کاتالیستی قابل‌توجهی در تخریب متیلن بلو (MB) در محیط آبی نشان داد و منجر به حذف کامل این رنگزا تنها در مدت ۳ دقیقه در شرایط تاریکی شد. علاوه بر این، این نانوکامپوزیت کارایی بالایی در حذف رنگزاهای آلی مختلف مانند متیل اورانژ (MO) ، کریستال ویوله(CV) ، بریلیانت بلو (BB) و رودامین B (RhB) از خود نشان داد، به‌طوری که بازده‌های تخریب به‌ترتیب ۶۹٪، ۷۹٪، ۷۹٪ و ۸۴٪ به دست آمد. نتایج آزمایش‌ها نشان‌دهنده پتانسیل بالای نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ به‌عنوان یک نانوکاتالیست کارآمد و سازگار با محیط زیست برای کاربردهای پیشرفته تصفیه فاضلاب است.

واژه های کلیدی: $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$؛ سنتز اولتراسونیک؛ تخریب رنگزا؛ تصفیه آب؛ نانوکاتالیست مغناطیسی

Treatment of water from pollutant dyes by Magnetic $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ Nanocomposites

Molahosseini, Elham[1], Farhamndzadeh, Farzad[1]; Hakimeh Zare[2], Mehdi, Molaei[1]

[1] Department of Physics, Vali-E-Asr University of Rafsanjan, Rafsanjan
[21] Department of Physics, Yzad University, Yazd

Abstract

Water scarcity remains one of the most pressing global challenges, underscoring the urgent need for efficient and sustainable wastewater treatment technologies. In this work, magnetic $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ nanocomposites were synthesized via an ultrasonic probe-assisted method and employed as highly active dark catalysts for the rapid degradation of organic dyes. The nanocomposites were extensively characterized by XRD, and FT-IR analysis. The $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ nanocomposite exhibited remarkable catalytic efficiency toward the degradation of methylene blue (MB) in aqueous media, resulting in the complete removal of MB dye within only 3 minutes under dark conditions. Moreover, the nanocomposite demonstrated high catalytic efficiency in the removal of various organic dyes, such as methyl orange (MO), crystal violet (CV), brilliant blue (BB), and rhodamine B (RhB), with degradation efficiencies of 69%, 79%, 79%, and 84%, respectively. The experimental results highlight the high potential of $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ nanocomposites as efficient and eco-friendly nanocatalysts for advanced wastewater treatment applications.

***Keywords**: $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ nanocomposite; ultrasonic synthesis; dye degradation; water treatment; magnetic nanocatalyst performance*

PACS No. ۶۸

مقدمه

آلودگی آب ناشی از رنگزاها به دلیل ساختارهای کروموفوری قوی، حلالیت بالا و پایداری چشمگیر آن‌ها در محیطهای آبی، به یکی از چالش‌برانگیزترین مشکلات زیست‌محیطی تبدیل شده است [۱]. حتی غلظت‌های کم رنگزاها نیز می‌توانند نفوذ نور را کاهش داده و تعادل اکوسیستم‌های آبی را مختل کنند [۲]. افزون بر اثرات زیست‌محیطی، برخی آلاینده‌های رنگزای سنتزی مانند متیلن بلو (MB)، متیل اورانژ (MO)، کریستال ویوله (CV)، بریلیانت بلو (BB) و رودامین B (RhB) سمی هستند و می‌توانند در سلول‌های زنده پاسخ‌های سیتوتوکسیک (سمیت سلولی) و جهش‌زایی (موتاژنی) ایجاد کنند [۳].
در سال‌های اخیر، نانومواد به دلیل کاربردهای گسترده در روش‌های پیشرفته تصفیه فاضلاب، توجه قابل‌توجهی را به

خود جلب کرده‌اند [٤]. سطح ویژه بالا، قابلیت تنظیم ویژگی‌های شیمیایی سطح و تحرک مناسب حامل‌های بار، این مواد را به گزینه‌هایی بسیار مناسب برای تخریب کاتالیستی رنگزاهای آلاینده تبدیل کرده است [٥]. به‌ویژه، نانوذرات فریت کبالت ($CoFe_2O_4$) به دلیل خواص مغناطیسی، پایداری شیمیایی و هزینه تولید پایین، مورد توجه فراوانی قرار گرفته‌اند [٦].

از سوی دیگر، اکسید گرافن احیاشده (rGO) به دلیل سطح ویژه بالا، رسانایی الکتریکی مناسب و ساختار ورقه‌ای دوبعدی، به‌عنوان یک بستر مناسب برای توزیع نانوذرات و افزایش ظرفیت جذب آلاینده‌ها شناخته می‌شود. همچنین، حضور rGO با تسهیل انتقال الکترون و جلوگیری از تجمع نانوذرات، موجب بهبود عملکرد و پایداری نانوکامپوزیت‌های کاتالیستی می‌شود [٧].

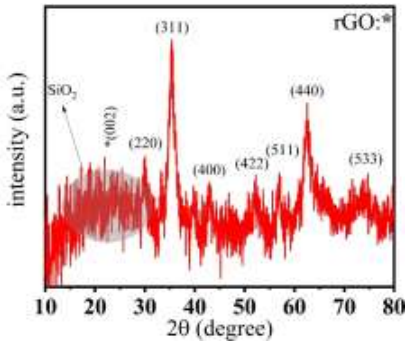
افزودن دی‌اکسید سیلیکون (SiO_2) به نانوکاتالیست، لایه‌ای اضافی از پایداری ساختاری را فراهم می‌کند و همچنین جایگاه‌های جذب بیشتری برای مولکول‌های آلی ایجاد می‌نماید. این امر موجب بهبود برهمکنش بین مولکول‌های رنگزا و سطح نانوکاتالیست شده و در نتیجه کارایی فرایند حذف و تخریب آلاینده‌ها را افزایش می‌دهد [٨]. در این پژوهش، نانوکامپوزیت‌های $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ با یک روش بر پایه التراسونیک پروبدار سنتز شدند. خواص فیزیکی و ساختاری نانوکامپوزیت‌های تهیه‌شده با استفاده از آنالیزهای XRD و FT-IR مورد بررسی قرار گرفت. همچنین، خاصیت کاتالیستی نانوکامپوزیت‌های $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ در شرایط مختلف مورد بررسی قرار گرفت.

سنتز نانوکامپوزیت $rGO/MoSe_2$

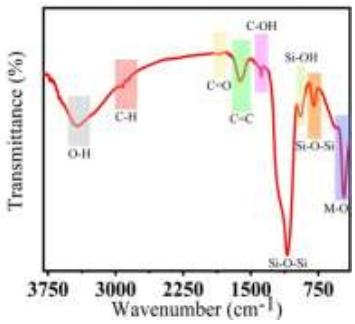
برای تشکیل نانوذرات دی‌اکسید سیلیکون (SiO_2) بر روی نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO$، ابتدا ۰/۲ گرم از $CoFe_2O_4/rGO$ در ۵۰ میلی‌لیتر اتانول به مدت ۱۵ دقیقه با استفاده از پروب اولتراسونیک پراکنده شد تا یک سوسپانسیون همگن حاصل گردد. سپس ۱۵ میلی‌لیتر محلول آمونیاک به آن افزوده شد و مخلوط به مدت ۱۰ دقیقه دیگر تحت فراصوت قرار گرفت. در ادامه، ۴۰۰ میکرولیتر تتراتیل اورتوسیلیکات (TEOS) در ۴۰ میلی‌لیتر اتانول حل شده و به‌صورت قطره‌ای به سوسپانسیون $CoFe_2O_4/rGO$ در حین اعمال مداوم امواج فراصوت اضافه گردید. فرآیند فراصوت به مدت ۲۰ دقیقه دیگر ادامه یافت تا رسوب‌دهی یکنواخت نانوذرات SiO_2 بر روی سطح $CoFe_2O_4/rGO$ تسهیل شود. در نهایت، نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ حاصل با استفاده از یک آهنربا از محیط واکنش جداسازی شد و چندین بار با اتانول شستشو داده شد تا بقایای واکنش‌نداده حذف شوند.

نتایج

الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ در شکل ۱ ارائه شده است. قله‌های پراش مشاهده‌شده در زوایای 2θ برابر با ۲۹/۹۹ درجه (۲۲۰)، ۳۵/۵۰ درجه (۳۱۱)، ۴۳/۱۲ درجه (۴۰۰)، ۵۲/۳۴ درجه (۴۲۲)، ۵۷/۰۵ درجه (۵۱۱)، ۶۲/۶۳ درجه (۴۴۰) و ۷۴/۴۹ درجه (۵۳۳) به ساختار مکعبی $CoFe_2O_4$ تعلق دارند که حضور نانوذرات فریت کبالت با ساختار اسپینل مکعبی را در نمونه تأیید می‌کند [۹]. یک قله پهن در حدود ۲۴ درجه نیز به بازتاب (۰۰۲) اکسید گرافن کاهش‌یافته (rGO) نسبت داده می‌شود. علاوه بر این، یک قله پراش گسترده در محدوده ۲۰ تا ۳۰ درجه نشان‌دهنده تشکیل نانوذرات آمورف (بی‌شکل) دی‌اکسید سیلیکون (SiO_2) در نانوکامپوزیت‌های سنتز شده است. نتایج تحلیل XRD به‌وضوح سنتز موفق نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ را تأیید می‌کنند.



شکل۱ : الگوی XRD نانوکامپوزیت‌های $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$



شکل۲ : آنالیز FT-IR نانوکامپوزیت‌های $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$

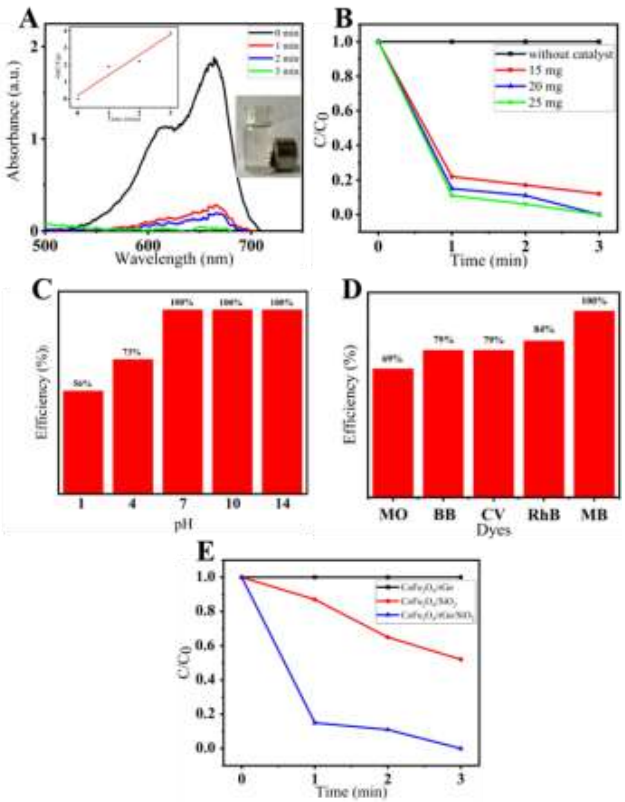
طیف FT-IR نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ در شکل B۳ ارائه شده است. چندین پیک مشخصه در حدود ۱۳۸۵,۶۹، ۱٦۱۹,۲۹، ۱۸۷۳,٦۸، ۲۸٤٤,۸۱، ۲۹۲۲,٤٥ و ۳٤۲۷,۰۷ سانتی‌متر معکوس (cm^{-1}) مشاهده شد که به‌ترتیب به ارتعاشات گروه‌های C–OH، C=C، C=O، C–H، C–H و O–H نسبت داده می‌شوند. علاوه بر این، پیک‌های FT-IR در حدود ۷۹۷,۸۸، ۹٤٦,۲۲ و ۱۰۹۱,۰۹ cm^{-1} به‌ترتیب مربوط به ارتعاشات Si–O–Si، Si–OH و Si–O–Si هستند که تشکیل موفق نانوذرات دی‌اکسید سیلیکون (SiO_2) را تأیید می‌کنند [۱۰]. همچنین، پیکی در حدود ٤٦۲

cm^{-1} به ارتعاشات M–O (پیوند فلز–اکسیژن)، به‌ویژه پیوندهای Co–O و Fe–O، نسبت داده شد. این نتایج به‌طور واضح ساخت موفق نانوذرات $CoFe_2O_4$ و SiO_2 بر روی سطح نانولایه‌های اکسید گرافن کاهش‌یافته (rGO) را تأیید می‌کنند.

به‌منظور بررسی فرآیند کاتالیستی متیلن بلو (MB) در تاریکی با استفاده از نانوکاتالیست $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$، مقدار ۲۰ میلی‌گرم از نانوکامپوزیت سنتز شده به محلول واکنش اضافه شد. شکل A۳ طیف‌های UV–Vis متیلن بلو ppm ۱۰ را که در طول فرآیند کاتالیز در تاریکی ثبت شده‌اند، نشان می‌دهد. پیک جذب مشخصه متیلن بلو در حدود ۶۶۴ نانومتر پس از تنها یک دقیقه از آغاز واکنش، کاهش شدیدی را نشان داد. ناپدید شدن کامل این پیک پس از ۳ دقیقه، بیانگر حذف کامل مولکول‌های متیلن بلو در حضور نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ است.

شکل B۳ تأثیر مقدار جرم نانوکاتالیست را بر عملکرد حذف نانوکامپوزیت‌های $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ در حذف رنگ متیلن بلو (MB) نشان می‌دهد. برای بررسی این پارامتر، مقادیر مختلفی از نانوکامپوزیت (۱۵ تا ۲۵ میلی‌گرم) مورد آزمایش قرار گرفت. همان‌طور که در شکل B۳ مشاهده می‌شود، در غیاب نانوکاتالیست هیچ حذف کاتالیستی قابل‌توجهی برای متیلن بلو رخ نداد. با این حال، افزودن نانوکاتالیست $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ موجب افزایش چشمگیر بازده کاتالیستی شد. هنگامی که از ۲۵ و ۲۰ میلی‌گرم نانوکاتالیست استفاده شد، فرآیند حذف کامل متیلن بلو در مدت ۳ دقیقه حاصل گردید. از آنجا که افزایش مقدار نانوکاتالیست از ۲۰ به ۲۵ میلی‌گرم بهبود محسوسی در زمان یا بازده حذف ایجاد نکرد، مقدار ۲۰ میلی‌گرم به دلیل مصرف کمتر نانوکاتالیست و صرفه‌جویی اقتصادی، به‌عنوان مقدار بهینه انتخاب شد. بنابراین، مقدار ۲۰ میلی‌گرم از نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ به‌عنوان مقدار بهینه برای حذف محلول متیلن بلو با غلظت ppm ۱۰ انتخاب شد.

شکل C۳ تأثیر pH را بر حذف کاتالیستی متیلن بلو (MB) در شرایط تاریکی با استفاده از نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ نشان می‌دهد. آزمایش‌های حذف در مقادیر مختلف pH شامل ۱، ۴، ۷، ۱۰ و ۱۴ انجام شدند. در شرایط خنثی (pH=7)، حذف کامل متیلن بلو در مدت ۳ دقیقه حاصل شد. برای تنظیم pH محلول، از NaOH جهت ایجاد محیط‌های قلیایی (pH=10 و ۱۴) و از HCl برای ایجاد محیط‌های اسیدی (pH=1 و ۴) استفاده شد. نتایج نشان داد که فعالیت کاتالیستی نانوکامپوزیت در محیط‌های قلیایی تقریباً بدون تغییر باقی مانده و حذف کامل متیلن بلو همچنان در مدت ۳ دقیقه انجام می‌شود. این رفتار را می‌توان به بار منفی سطح نانوکامپوزیت در محیط‌های خنثی و قلیایی و همچنین ماهیت کاتیونی متیلن بلو نسبت داد که موجب حفظ جاذبه الکترواستاتیکی و در نتیجه جذب و حذف مؤثر رنگزا می‌شود. با این حال، همان‌گونه که در شکل مشاهده می‌شود، بازده کاتالیستی در شرایط اسیدی به‌طور محسوسی کاهش یافت. در محیط‌های اسیدی، پروتون‌دار شدن گروه‌های عاملی موجود بر سطح rGO و SiO_2 موجب کاهش بار منفی سطح و در نتیجه کاهش جاذبه الکترواستاتیکی بین نانوکامپوزیت و مولکول‌های کاتیونی متیلن بلو می‌شود. علاوه بر این، یون‌های H^+ با مولکول‌های متیلن بلو برای اشغال جایگاه‌های فعال سطح نانوکامپوزیت رقابت کرده و باعث کاهش راندمان حذف می‌شوند. بنابراین، عملکرد نانوکامپوزیت در محیط‌های اسیدی نسبت به محیط‌های خنثی و قلیایی ضعیف‌تر است.



شکل۳ : تخریب رنگ متیلن بلو (A)، تخریب متیلن بلو با مقادیر مختلف کاتالیست (B) و در pHهای مختلف (C)، تخریب سایر رنگزاها (D)، و تأثیر نانوذرات SiO_2 و GO بر فرآیند تخریب متیلن بلو (E).

علاوه بر این، عملکرد کاتالیستی نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ در برابر رنگزاهای آلی مختلف مورد بررسی قرار گرفت. همان‌طور که در شکل D۴ نشان داده شده است، بازده‌های کاتالیستی به ۶۹٪ برای متیل اورانژ (MO)، ۷۹٪ برای بریلیانت بلو (BB) و کریستال ویوله (CV)، ۸۴٪ برای رودامین B (RhB) و تخریب کامل (۱۰۰٪) برای متیلن بلو (MB) رسید. این نتایج نشان‌دهنده عملکرد کاتالیستی بسیار خوب و قابلیت کاربرد گسترده نانوکامپوزیت

$CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ در حذف انواع مختلف رنگزاهای آلی است. حذف کامل متیلن بلو همچنین توان کاتالیستی قوی و واکنش‌پذیری بالای این نانوکامپوزیت را در برابر آلاینده‌های آلی تأیید می‌کند.

نقش نانوذرات SiO_2 و گرافن اکسید (GO) در حذف رنگ متیلن بلو (MB) با استفاده از نانوکامپوزیت‌های $CoFe_2O_4/rGO$، $CoFe_2O_4/SiO_2$ و $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ مورد بررسی قرار گرفت (شکل E۳). نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO$ در مدت زمان ۳ دقیقه مورد بررسی، حذف قابل‌توجهی از متیلن بلو نشان نداد. با این حال، با توجه به سطح ویژه بالای rGO، انتظار می‌رود این ماده در زمان‌های طولانی‌تر بتواند در جذب متیلن بلو نقش داشته باشد، اما در شرایط و بازه زمانی این مطالعه، این اثر قابل‌توجه نبود، در حالی که $CoFe_2O_4/SiO_2$ توانست ۴۹٪ از متیلن بلو را حذف کند. همچنین، نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ حذف کامل را در مدت ۳ دقیقه به دست آورد. این نتایج نشان می‌دهند که SiO_2 باعث افزایش فعالیت کاتالیستی می‌شود، در حالی که نانولایه‌های GO با افزایش سطح ویژه، عملکرد کلی را بهبود می‌بخشند. علاوه بر این، وجود نانوذرات مغناطیسی $CoFe_2O_4$ امکان جداسازی ساده و سریع نانوکامپوزیت‌ها توسط آهنربا (شکل داخل A۳) را از محیط واکنش فراهم می‌کند

نتیجه گیری

در این پژوهش، نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ با موفقیت از طریق یک روش سریع مبتنی بر پروب اولتراسونیک سنتز شد. بررسی‌های ساختاری و مورفولوژیکی، تشکیل یکنواخت نانوذرات $CoFe_2O_4$ و SiO_2 بر روی نانولایه‌های rGO را تأیید کردند. نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ فعالیت کاتالیستی بسیار خوبی در شرایط تاریکی از خود نشان داد و توانست در مدت ۳ دقیقه، تخریب کامل متیلن بلو ۱۰ ppm (MB)، همچنین ۶۹٪ از متیل اورانژ (MO)، ۷۹٪ از کریستال ویوله (CV) و بریلیانت بلو (BB)، و ۸۴٪ از رودامین B (RhB) را به دست آورد. علاوه بر این، حضور نانوذرات مغناطیسی $CoFe_2O_4$ امکان بازیابی آسان نانوکاتالیست پس از فرآیند تخریب را فراهم کرد. این یافته‌ها نشان می‌دهند که نانوکامپوزیت $CoFe_2O_4/rGO/SiO_2$ یک کاتالیست بسیار کارآمد و قابل جداسازی مغناطیسی است که برای حذف سریع رنگزاها از محلول‌های آبی مناسب می‌باشد.

مرجع‌ها

[1] Jorge AMS, Athira KK, Alves MB, Gardas RL, Pereira JFB. Textile dyes effluents: A current scenario and the use of aqueous biphasic systems for the recovery of dyes. J Water Process Eng 2023;55:104125. https://doi.org/10.1016/J.JWPE.2023.104125.

[2] Kolya H, Kang CW. Toxicity of Metal Oxides, Dyes, and Dissolved Organic Matter in Water: Implications for the Environment and Human Health. Toxics 2024, Vol 12, Page 111 2024;12:111. https://doi.org/10.3390/TOXICS12020111

[3] Farhan Hanafi M, Sapawe N. A review on the water problem associate with organic pollutants derived from phenol, methyl orange, and remazol brilliant blue dyes. Mater Today Proc 2020;31:A141–50. https://doi.org/10.1016/J.MATPR.2021.01.258.

[4] Epelle EI, Okoye PU, Roddy S, Gunes B, Okolie JA. Advances in the Applications of Nanomaterials for Wastewater Treatment. Environ 2022, Vol 9, Page 141 2022;9:141. https://doi.org/10.3390/ENVIRONMENTS9110141.

[5] Saleem H, Zaidi SJ. Developments in the Application of Nanomaterials for Water Treatment and Their Impact on the Environment. Nanomater 2020, Vol 10, Page 1764 2020;10:1764. https://doi.org/10.3390/NANO10091764.

[6] Haleem A, Shafiq A, Chen SQ, Nazar M. A Comprehensive Review on Adsorption, Photocatalytic and Chemical Degradation of Dyes and Nitro-Compounds over Different Kinds of Porous and Composite Materials. Mol 2023, Vol 28, Page 1081 2023;28:1081. https://doi.org/10.3390/MOLECULES28031081.

[7] Tamang, S., Rai, S., Bhujel, R., Bhattacharyya, N. K., Swain, B. P., & Biswas, J. (2023). A concise review on GO, rGO and metal oxide/rGO composites: Fabrication and their supercapacitor and catalytic applications. *Journal of Alloys and Compounds*, *947*, 169588. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2023.169588

[8] Gharbi AH, Hemmami H, Laouini SE, Amor I Ben, Zeghoud S, Amor A Ben, et al. Green synthesis of ZnO@SiO2 nanoparticles using Calligonum comosum L. extract: an efficient approach for organic pollutant degradation in wastewater. Biomass Convers Biorefinery 2023 151 2023;15:701–12. https://doi.org/10.1007/S13399-023-05063-2.

[9] Ünal B, Baykal A, Almessiere MA, Mihmanlı A. Influence of temperature and selenium substitution on electrical and dielectric characteristics of CoFe2O4 nanoparticles. J Indian Chem Soc 2025;102:101620. https://doi.org/10.1016/J.JICS.2025.101620.

[10] Al Maashani MS, Khalaf KA, Gismelseed AM, Al-Omari IA. The structural and magnetic properties of the nano-CoFe2O4 ferrite prepared by sol-gel auto-combustion technique. J Alloys Compd 2020;817:152786. https://doi.org/10.1016/J.JALLCOM.2019.152786.

اثر هم‌افزایی فعالسازی سطحی و میدان مغناطیسی خارجی در بهبود شکافت فوتوالکتروشیمیایی آب با فوتوآندهای هماتیت آلایش‌یافته با تیتانیوم

افشاری، مهدی[۱]؛ قربانی، محمد[۲]؛ مشفق، علیرضا[۳]، ناصری، نعیمه[۳و۴]

[۱] مرکز علوم و فناوری نانو، پژوهشکده علوم و فناوری‌های همگرا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران
[۲] انستیتو مهندسی الکترواپتیک، دانشگاه نرمال ملی تایوان، تایپه، تایوان
[۳] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران
[۴] دانشکده مهندسی مکانیک و هوافضا، دانشگاه موناش، ملبورن، استرالیا

چکیده

محدودیت‌های فوتوآند هماتیت در شکافت فوتوالکتروشیمیایی آب، باعث شده است که علی‌رغم اصلاحات مختلف از جمله آلایش عنصری، مهندسی مورفولوژی، ایجاد هتروساختار و اصلاح کاتالیستی ، عملکرد تجربی آن همچنان بسیار کمتر از حد تئوری باشد. در این پژوهش، ابتدا از یک روش الکتروشیمیایی درجا (in-situ) برای غیرفعال کردن تله‌های سطحی فوتوآندهای هماتیت استفاده و سپس تأثیر اعمال یک میدان مغناطیسی خارجی بر عملکرد سامانه مطالعه شده است. بدین منظور فوتوآندها به روش هیدروترمال سنتز شدند که نتایج طیف پراش اشعه ایکس و طیف‌سنجی رامان تشکیل موفق ساختار هماتیت آلایش‌یافته با تیتانیوم را تایید کردند. همچنین، تصویر میکروسکوپ الکترونی رویشی گسیل میدان مورفولوژی یکنواخت سطح را نشان داد. تصویر میکروسکوپ الکترونی عبوری با وضوح بالانیز نشان داد که بعد از فعال کردن سطح، یک لایه آمورف چند نانومتری بر روی سطح تشکیل می‌شود که می‌تواند باعث کاهش تله‌های سطحی و بازترکیب حاملهای بار شود. علاوه بر این، اثر اعمال یک میدان مغناطیسی خارجی بر رفتار فوتوآند، خواص انتقال بار و مقاومت بین‌سطحی نمونه‌ها با استفاده از اسپکتروسکوپی امپدانس الکتروشیمیایی مطالعه شد و نتایج نشان دادند که فعال کردن سطح و اعمال میدان مغناطیسی به طور قابل توجهی مقاومت انتقال بار را کاهش می‌دهند. ارزیابی نمودار ولتامتری رویش خطی نیز نشان داد که فعالسازی سطح باعث افزایش چگالی جریان از ۱ به ۱/۸ و بااعمال میدان به ۲/۰ میلی‌آمپر بر سانتی‌متر مربع در ولتاژ ۱/۲۳ ولت نسبت به الکترود استاندارد هیدروژن می رسد، که به ترتیب بیانگر بهبود ۸۰٪ و ۱۰۰٪ نسبت به قبل از فعالسازی سطح می‌باشد. نتایج به‌دست‌آمده بیانگر این است که اثر هم‌افزایی فعالسازی سطحی و اعمال میدان مغناطیسی خارجی می‌تواند به طور مؤثری بازترکیب الکترون–حفره را کاهش داده و راندمان فرایند شکافت آب را بهبود بخشد.

واژه های کلیدی: *شکافت فوتوالکتروشیمیایی آب، فوتوآند هماتیت، فعالسازی سطحی، میدان مغناطیسی، ولتامتری چرخه‌ای.*

Synergistic effect of surface activation and external magnetic field in photoelectrochemical water splitting enhancement through Ti-doped hematite photoanodes

Afshari, Mehdi[1]; Qorbani, Mohammad[2]; Moshfegh, Alireza[3]; Naseri, Naimeh[3,4]

[1]*Center for Nanoscience& Nanotechnology, Institute for Convergence Science & Technology, Sharif University of Technology, Tehran*
[2] *Institute of Electro-Optical Engineering, National Taiwan Normal University, Taipei, Taiwan*
[3] *Physics department, Sharif University of Technology, Tehran*
[4]*Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Monash University, Melbourne, Australia*

Abstract

The limitations of hematite photoanodes in photoelectrochemical water splitting have caused their experimental performance to remain significantly below theoretical limits, despite various modification strategies such as elemental doping, morphological engineering, heterostructure formation, and catalytic modification. In this study, we first used an in-situ electrochemical method to passivate the surface traps of hematite photoanodes and then investigated the effect of applying an external magnetic field on the system's performance. For this purpose, the photoanodes were synthesized via a hydrothermal method. X-ray diffraction and Raman

spectroscopy results confirmed the successful formation of titanium-doped hematite structure. In addition, Field-emission scanning electron microscopy images showed a uniform surface morphology. High-resolution transmission electron microscopy also revealed that after surface activation, a few-nanometer-thick amorphous layer forms on the surface, which can reduce surface traps and charge carrier recombination. Furthermore, the effect of an external magnetic field on the photoanode behavior, charge transfer properties, and interfacial resistance of the samples was studied using electrochemical impedance spectroscopy, and the results showed that surface activation and application of the magnetic field significantly reduce the charge transfer resistance. Evaluation of the linear sweep voltammetry (LSV) plot also indicated that surface activation increased the current density from 1 to 1.8 mA/cm², and upon applying the magnetic field, it reached 2.0 mA/cm² at 1.23 V vs. RHE, representing an 80% and 100% improvement, respectively, compared to the state before surface activation. The obtained results indicate that the synergistic effect of surface activation and an external magnetic field can effectively suppress electron–hole recombination and improve the efficiency of the water splitting process.

***Keywords**: Photoelectrochemical Water Splitting, Hematite Photoanode, Surface Activation, Magnetic Field, Cyclic Voltammetry.*
PACS No. *68, 75, 81*

مقدمه

هماتیت به عنوان یکی از جذب‌ترین فوتوآندها برای شکافت فوتوالکتروشیمیایی آب شناخته می‌شود، اما طول نفوذ حفره پایین، رسانندگی کم و نرخ بالای بازترکیب الکترون–حفره عملکرد این الکترودها را تحت تأثیر قرار داده است [۱]. به منظور غلبه بر این چالش‌ها، روش‌های متعددی از جمله آلایش عنصری، مهندسی مورفولوژی، اصلاح کاتالیستی و ... به کار گرفته شده‌اند اما هنوز اختلاف قابل توجهی بین بازدهی‌های تئوری و تجربی سامانه‌های فوتوالکتروشیمیایی و همچنین چگالی جریان‌های تئوری و تجربی وجو دارد [۲].

اخیراً، ولتامتری چرخه‌ای به عنوان یک روش الکتروشیمیایی درجا برای افزایش چگالی جریان نوری و بازدهی سیستم فوتوالکتروشیمیایی معرفی شده است که باعث بهبود ۶۰٪ در عملکرد سامانه شده است [۳]. همچنین، پژوهشگران نشان داده‌اند که میدان مغناطیسی می‌تواند از طریق فرایندهای مختلف در توده و سطح فوتوآند، بازدهی سلول‌های فوتوالکتروشیمیایی را افزایش دهد [۴].

در این کار، ابتدا از یک روش ولتامتری چرخه‌ای برای غیرفعال کردن تله‌های سطحی فوتوآند استفاده شده است و سپس با اعمال یک میدان مغناطیسی خارجی، اثر هم‌افزایی فعالسازی سطحی و میدان مغناطیسی بر بهبود عملکرد سامانه فوتوالکتروشیمیایی مطالعه شده است.

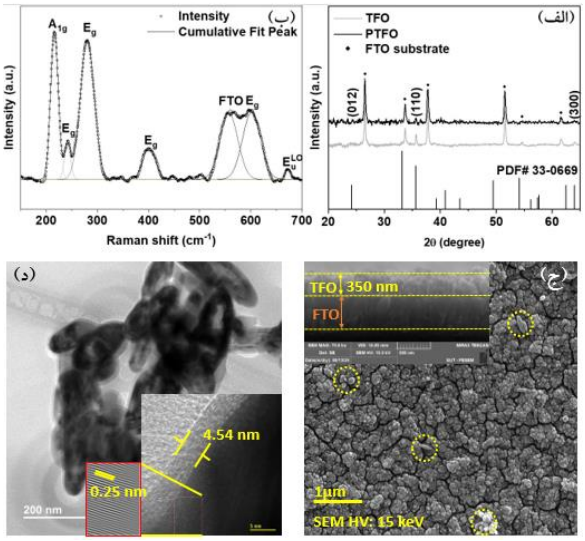
روش‌های آزمایش

فوتوآندهای هماتیت آلایش یافته با تیتانیوم به روش هیدروترمال تهیه شدند. بدین منظور، ابتدا ۲۰ میلی لیتر محلول ۰/۱۵ مولار آهن کلراید ۶ آبه و ۱ مولار سدیم نیترات تهیه شد. سپس، به منظور آلایش یک درصدی تیتانیوم در نمونه، در یک لوله آزمایش ۱۰ میکرولیتر تیتانیوم بوت‌اکساید را داخل ۵۰ میکرولیتر هیدروکلریک اسید ریخته و محلول تهیه شده قبلی به آن اضافه می‌شود تا بعد از ۲۵ دقیقه، محلول نهایی حاصل شود. محلول تهیه شده به یک تفلون اتوکلاو ۱۰۰ میلی‌لیتر که از قبل زیرلایه FTO با یک زاویه حدود ۳۰ درجه (بگونه‌ای که سطح آن به سمت دیواره باشد) در آن قرار گرفته است اضافه می‌شود. اتوکلاو به مدت ۱۳ ساعت در دمای ۹۸ درجه سلسیوس در یک آون (memmert ساخت آلمان) قرار گرفت تا نمونه FeOOH بدست آید. با قراردادن این نمونه در کوره جعبه‌ای به مدت ۳/۵ ساعت و در دمای ۵۵۰ درجه سلسیوس فوتوآندهای هماتیت آلایش‌یافته با تیتانیوم بدست آمدند.

تست‌های الکتروشیمیایی با استفاده از یک دستگاه پتانسیواستات (مدل origaflys- OGF01A)، در یک سلول سه الکترودی شامل الکترودهای پلاتین و Ag/AgCl به ترتیب به عنوان الکترودهای مقابل و مرجع، در محلول الکترولیت ۱ مولار KOH انجام شدند. همچنین از یک لامپ زنون (مدل ۱۰۹-۰۴۰ UL BALL BEARING) با شدت ۱۰۰ میلی‌وات بر سانتیمترمربع به عنوان شبیه‌ساز طیف نور خورشید استفاده شد.

نتایج و بحث

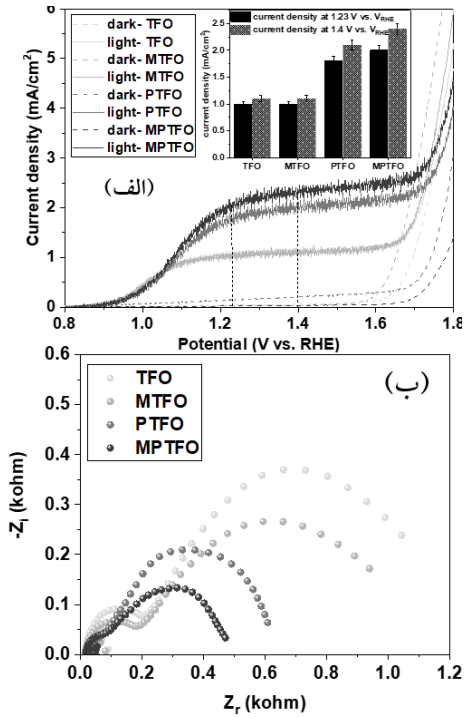
شکل ۱ (الف) طیف XRD (منبع پرتو ایکس CuK_{α} با طول موج ۱/۵۴۱۰ آنگستروم) نمونه هماتیت آلایش‌یافته با تیتانیوم (TFO) را نشان می‌دهد. قله‌های (۰۱۲)، (۱۱۰) و (۳۰۰) به ترتیب در زوایای ۲۴/۳، ۳۵/۶ و ۶۴/۰ درجه مطابق با کارت استاندارد ۰۶۶۹-۳۳ نشان دهنده تشکیل ساختار تک‌بلور هماتیت است. همچنین قله‌های مشاهده شده در طیف رامان (لیزر سبز با طول موج ۵۳۲ نانومتر) (شکل ۱ (ب)) ساختار هماتیت آلایش یافته با تیتانیوم را تأیید می‌کنند.



شکل ۱: (الف) طیف پراش اشعه ایکس برای نمونه TFO. قله‌های مشخص‌شده با نقاط سیاه رنگ مربوط به زیرلایه FTO است. (ب) طیف رامان و (ج) تصویر FESEM نمونه TFO. تصویر داخل شکل (ج)، مقطع عرضی نمونه و دایره‌های نقطه‌چین نیز مورفولوژی نانومیله‌ای هماتیت را نشان می‌دهد. (د) تصویر HRTEM برای نمونه اصلاح‌شده PTFO. تصویر داخل شکل ضخامت لایه آمورف سطحی و صفحات بلوری در قسمت توده را نشان می‌دهد.

مورفولوژی سطح نمونه با استفاده از تصاویر بررسی شد که نشان داد نمونه دارای سطحی یکنواخت همراه با ترک‌هایی است که می‌توانند به عنوان نقص باعث تضعیف عملکرد فوتوآند باشند (شکل ۱ (ج)). علاوه بر این، در برخی نقاط سطح ساختار نانومیله‌ای هماتیت بخوبی قابل مشاهده است. تصویر کوچک‌شده داخل شکل نیز مقطع عرضی نمونه TFO را نشان می‌دهد که بیانگر ضخامت حدود ۳۵۰ نانومتری لایه است.

به منظور اصلاح سطح فوتوآند و بهبود عملکرد آن، از یک روش الکتروشیمیایی درجا استفاده شد. بدین صورت که یک تست ولتامتری چرخه‌ای در ناحیه پتانسیلی که هیچ واکنش اکسایش یا کاهش آب صورت نمی‌گیرد، گرفته شد. برای مطالعه میکروساختار نمونه بعد از اصلاح الکتروشیمیایی تصویر HRTEM نمونه ثبت شد (شکل ۱ (د)). ساختار نانومیله‌ای هماتیت بخوبی در این شکل قابل مشاهده است و با فرآیند فعالسازی، یک لایه نانومتری آمورف یکنواخت بر روی سطح نانومیله‌ها شکل می‌گیرد. بدین ترتیب می‌توان گفت که ساختار دارای دو بخش آمورف (در سطح) و بلوری (در بخش توده) می‌شود. همانطور که تصویر داخل شکل نیز نشان می‌دهد، ضخامت لایه آمورف در حدود ۴/۵ نانومتر و فاصله صفحات در قسمت بلوری، ۰/۲۵ نانومتر است.



شکل ۲: (الف) نمودار LSV و (ب) نمودار نایکوئست بدست آمده از تست EIS به ترتیب برای نمونه‌های اولیه بدون و با اعمال میدان مغناطیسی (TFO و MTFO)، نمونه اصلاح‌شده (PTFO) و نمونه اصلاح شده با اعمال میدان مغناطیسی(MPTFO). نمودار میله‌ای داخل شکل (الف) نیز چگالی جریان نوری نمونه‌ها را همراه با میزان خطا در ولتاژهای ۱/۲۳ و ۱/۴ ولت نسبت به الکترود استاندار هیدروژن نشان می‌دهد.

فعالیت اکسایش آب فوتوآند با استفاده از ولتامتری روبش خطی (LSV)، قبل و بعد از فعالسازی سطح و در هر دو حالت بدون و با اعمال میدان مغناطیسی انجام شد (شکل ۲ (الف)). لازم به ذکر است که همه تست‌های الکتروشیمیایی حداقل برای شش نمونه با چگالی جریان اولیه یکسان انجام گرفته و مقادیر گزارش شده، مقدار میانگین هر کدام از کمیت‌ها است. برای نمونه TFO چگالی جریان ۱ میلی‌آمپر بر سانتی‌مترمربع در ولتاژ ۱/۲۳ ولت نسبت به الکترود استاندارد هیدروژن نشان داد. برای بهبود بیشتر عملکرد فوتوآند، از یک میدان مغناطیسی خارجی استفاده شد. بدین منظور، یک مگنت نئودیمیوم با پوشش کروم-نیکل، به‌گونه‌ای در پشت نمونه و چسبیده به آن قرار گرفت که میدان یکنواخت ۴۵ میلی-تسلا در جهت عمود بر سطح نمونه ایجاد شود. با اعمال میدان مغناطیسی اما چگالی جریان برای نمونه MTFO نسبت به نمونه TFO تغییری نکرد. با اینحال، با اصلاح سطح به روش الکتروشیمیایی درجا، نمودار LSV نشان داد که چگالی جریان نمونه (PTFO) با یک تغییر قابل توجه به ۱/۸ میلی‌آمپر بر سانتی-مترمربع می‌رسد. این نتایج نشان می‌دهد که با اصلاح الکتروشیمیایی و تشکیل یک لایه بسیار نازک آمورف بر روی سطح (همانطور که تصویر HRTEM نشان داد)، تا حدود زیادی تله‌های سطحی (که به عنوان مراکز بازترکیب عمل می‌کنند) غیرفعال شده، مقاومت انتقال بار در سطح کاهش یافته و در نتیجه افزایش ۸۰ و ۹۰ درصدی چگالی جریان به ترتیب در ولتاژهای ۱/۲۳ و ۱/۴ ولت حاصل می‌شود.

بعد از فعالسازی سطح، مجدداً میدان مغناطیسی اعمال شد و نشان داد که چگالی جریان در ولتاژ اکسایش آب از ۱/۸ برای نمونه PTFO به ۲/۰ میلی‌آمپر بر سانتی‌مترمربع برای نمونه MPTFO می‌رسد. برای تعیین اثر میدان بر مقاومت انتقال بار، نتایج EIS مطابق شکل ۲ (ب) ثبت شد که نشان داد، هم با اصلاح الکتروشیمیایی و هم اعمال میدان، مقاومت انتقال بار کاهش یافته است. اگرچه در نمونه MTFO علی‌رغم کاهش مقاومت انتقال بار اما چگالی جریان بهبود نداشت که به افزایش مقاومت در توده نمونه مربوط می‌شود. بنابراین، می‌توان چنین نتیجه گرفت که اصلاح الکتروشیمیایی و اعمال میدان بطور همزمان، می‌توانند تأثیر قابل توجهی در کاهش مقاومت انتقال بار، افزایش چگالی جریان و بهبود عملکرد سل فوتوالکتروشیمیایی داشته باشد.

نتیجه گیری

در این تحقیق، فوتوآند هماتیت آلایش‌یافته با تیتانیوم به روش هیدروترمال تهیه شدند. نتایج XRD و طیف رامان تشکیل ساختار هماتیت آلایش‌یافته با تیتانیوم را تأیید کردند. اصلاح الکتروشیمیایی درجای نمونه از طریق ولتامتری چرخه‌ای باعث تشکیل یک لایه بسیار نازک آمورف بر روی سطح نمونه شده و چگالی جریان را ۸۰ درصد افزایش داد که با اعمال میدان مغناطیسی، این مقدار به ۱۰۰ درصد رسید. این نتایج به همراه داده-های EIS نشان می‌دهد که اصلاح الکتروشیمیایی درجا با از بین بردن تله‌های سطحی و محدود کردن بازترکیب حامل‌ها، توأم با اعمال میدان مغناطیسی باعث کاهش مقاومت انتقال بار در سطح نمونه شده و بازدهی سل فوتوالکتروشیمیایی را بالاتر می‌برد. بنابراین، اثر هم‌افزایی فعال‌سازی سطح و میدان مغناطیسی می‌تواند به عنوان یک راهکار مناسب برای تقویت عملکرد سامانه‌های فوتوالکتروشیمیایی در نظر گرفته شود.

سپاسگزاری

نویسندگان از شورای پژوهش و فناوری دانشگاه صنعتی شریف و بنیاد ملی علم ایران تشکر و قدردانی می‌کنند.

مرجع‌ها

[1] T.T.H. Nguyen, J. Murphy, G. Aygur, E. Mayes, B.J. Murdoch, J. van Embden, D.E. Gómez, E. Della Gaspera, Dopant-induced strain moulation regulates the water oxidation performance of hematite photoanodes, J. Mater. Chem. A. (2026).

[2] B.G. Ghule, Y. Han, C. Pornrungroj, J.-H. Jang, Tuning Carrier Diffusion Length in Hematite Photoanodes via Strain Engineering, ACS Appl. Energy Mater. (2026).

[3] M. Fathabadi, M. Qorbani, A. Sabbah, S. Quadir, C.Y. Huang, K.H. Chen, L.C. Chen, N. Naseri, An ultrathin amorphous defective co-doped hematite passivation layer derived via an in situ electrochemical method for durable photoelectrochemical water oxidation, J. Mater. Chem. A. 10 (2022) 16655–16665.

[4] Q. Wang, L.I. Oldham, A. Giner-Requena, Z. Wang, D. Benetti, S. Montilla-Verdú, R. Chen, D. Du, T. Lana-Villarreal, U. Aschauer, N. Guijarro, J.R. Durrant, J. Luo, Enhancing Photoelectrochemical Water Oxidation Using Ferromagnetic Materials and Magnetic Fields, J. Am. Chem. Soc. 146 (2024) 34681–34689.

مطالعه سینتیک و بهینه‌سازی pH در تخریب فوتوکاتالیستی متیلن آبی توسط نانوکامپوزیت سه جزئی مغناطیسی $Fe_3O_4/ZnO/g\text{-}C_3N_4$

خراسانی پور ، ندا [۱] ؛ ایرانمنش، پروانه[۱]

[۱]گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر(عج)، رفسنجان

چکیده

نانوکامپوزیت سه جزئی $Fe_3O_4/ZnO/g\text{-}C_3N_4$ به روش دو مرحله‌ای همرسوبی و هیدروترمال سنتز شد. نیترید گرافن با نسبت مولی ۱:۳ (تیواوره به اوره) در دمای ۵۵۰ درجه سانتی‌گراد حرارت داده شد و با گوگرد دوپ گردید. آنالیز XRD حضور فازهای اسپینل مگنتایت، ورتزایت اکسید روی و ساختار لایه‌ای نیترید گرافن را تأیید نمود. تصاویر TEM مورفولوژی کروی نانوذرات با اندازه ۲۰–۳۵ نانومتر و توزیع یکنواخت آن‌ها بر روی ورقه‌های $g\text{-}C_3N_4$ را نشان داد. بررسی اثر pH بر عملکرد فوتوکاتالیستی نشان داد که با افزایش pH از ۳ به ۹، درصد تخریب متیلن بلو از ۱۴٪ به ۹۶٪ و ثابت سرعت ظاهری از ۰٫۰۱۳ به ۰٫۰۸۵ بر دقیقه افزایش می‌یابد. این رفتار به جاذبه الکترواستاتیکی قوی بین سطح منفی کاتالیست در pH قلیایی و رنگ کاتیونی متیلن آبی نسبت داده می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که نانوکامپوزیت با قابلیت جداسازی مغناطیسی و فعالیت فوتوکاتالیستی عالی، گزینه‌ای بسیار امیدوارکننده برای تصفیه پساب‌های صنعتی حاوی آلاینده‌های رنگی می‌باشد.

واژه های کلیدی: *نانوکامپوزیت مغناطیسی، $Fe_3O_4/ZnO/g\text{-}C_3N_4$، دوپینگ گوگرد، فوتوکاتالیست، متیلن آبی.*

Kinetic Study and pH Optimization in the Photocatalytic Degradation of Methylene Blue by Magnetic Ternary Nanocomposite $Fe_3O_4/ZnO/g\text{-}C_3N_4$

Khorasanipour, Neda[1]; Iranmanesh, Prvaneh[1]

[1]*Department of physics, Faculty of science, Vali-e- Asr University of Rafsanjan, Rafsanjan*

Abstract

The ternary nanocomposite $Fe_3O_4/ZnO/g\text{-}C_3N_4$ was synthesized via a two-step co-precipitation and hydrothermal method. Graphitic carbon nitride ($g\text{-}C_3N_4$) was prepared using a molar ratio of 1:3 (thiourea to urea), thermally treated at 550 °C, and subsequently doped with sulfur. XRD analysis confirmed the presence of spinel-phase magnetite, wurtzite-phase zinc oxide, and the layered structure of $g\text{-}C_3N_4$. TEM images revealed spherical morphology of the nanoparticles with an average size of 20–35 nm and their uniform distribution on the $g\text{-}C_3N_4$ sheets. Investigation of the pH effect on photocatalytic performance demonstrated that upon increasing pH from 3 to 9, the degradation percentage of methylene blue increased from 14% to 96%, and the apparent rate constant increased from 0.013 to 0.085 min⁻¹. This behavior is attributed to the strong electrostatic attraction between the negatively charged catalyst surface under alkaline pH and the cationic methylene blue dye. The results indicate that the as-synthesized nanocomposite, possessing both magnetic separability and excellent photocatalytic activity, is a highly promising candidate for the treatment of industrial wastewater containing dye pollutants.

***Keywords**: Magnetic nanocomposite, $Fe_3O_4/ZnO/g\text{-}C_3N_4$, Sulfur doping, Photocatalyst, Methylene blue.*

PACS No. 61, 78

مقدمه

آلودگی منابع آبی با رنگ‌های صنعتی مانند متیلن‌آبی (MB) (رنگ کاتیونی با سمیت بالا و پایداری شیمیایی قابل توجه) یکی از چالش‌های جدی زیست‌محیطی است. این آلاینده به دلیل مقاومت در برابر روش‌های تصفیه متداول، لزوم توسعه رویکردهای نوین را ضروری می‌سازد [۱]. در میان روش‌ها، فرآیندهای اکسیداسیون پیشرفته مبتنی بر فوتوکاتالیست‌های نیمه‌رسانا به دلیل کارایی بالا، هزینه مناسب و بهره‌برداری تحت نور مرئی، توجه ویژه‌ای یافته‌اند. اکسید روی (ZnO) گزینه‌ای مطلوب است، اما بازترکیبی سریع جفت الکترون–حفره و دشواری جداسازی، محدودیت‌های اصلی آن محسوب می‌شوند [۲]. ترکیب با Fe_3O_4 جداسازی مغناطیسی سریع را فراهم می‌کند و ساخت ناهم‌ساختار با $g\text{-}C_3N_4$ (دارای پایداری حرارتی–شیمیایی بالا، سطح ویژه مناسب و سنتز آسان) بازترکیبی حامل‌های بار را کاهش داده و پاسخ به نور مرئی را گسترش می‌دهد [۳].

پژوهش‌های اخیر بر نانوکامپوزیت‌های مغناطیسی سه‌جزئی تمرکز کرده‌اند. برای مثال، ضیاءالملکی و همکاران (۲۰۲۳) نانوکامپوزیت $g\text{-}C_3N_4/Fe_3O_4/ZnO$ را با کارایی بالا گزارش کردند [٤] و سیستم‌های دوپ‌شده با گوگرد مانند $S\text{-}g\text{-}C_3N_4/MnFe_2O_4$ راندمان ۹۳–۹۸٪ را نشان داده‌اند [۵]. با این حال، اکثر این سیستم‌ها تعادل مطلوب میان فعالیت فوتوکاتالیستی بالا، جذب نور مرئی بهبودیافته، جداسازی مغناطیسی آسان و پایداری ساختاری را همزمان ارائه نکرده‌اند. نوآوری اصلی این پژوهش در سنتز نانوکامپوزیت مغناطیسی $Fe_3O_4/ZnO/g\text{-}C_3N_4$ به‌عنوان یک سیستم یکپارچه و هم‌افزاست. این نانوکامپوزیت با ترکیب همزمان جداسازی مغناطیسی سریع Fe_3O_4، فعالیت فوتوکاتالیستی قوی ZnO و افزایش جذب نور مرئی از طریق دوپینگ گوگرد، به تخریب ۹۶٪ متیلن‌آبی در ۱۲۰ دقیقه دست یافته و قابلیت بازیافت آسان و پایداری بالای ساختاری در چرخه‌های تکراری را نشان می‌دهد. این رویکرد محدودیت‌های پژوهش‌های پیشین را برطرف کرده و گامی مهم به سوی فوتوکاتالیست‌های عملی، اقتصادی و قابل بازیافت برای تصفیه فاضلاب‌های رنگی صنعتی است. به علاوه، حضور ZnO (حساس به هیدروژن)، $g\text{-}C_3N_4$ (جذب گاز بالا) و Fe_3O_4 (جداسازی مغناطیسی) پتانسیل کاربردهای چندمنظوره از جمله حسگری گاز و ذخیره‌سازی انرژی را فراهم می‌آورد [٦،٧].

در این پژوهش، نانوکامپوزیت $Fe_3O_4/ZnO/g\text{-}C_3N_4$ به روش هم‌رسوبی–هیدروترمال سنتز شد. نیترید گرافن دوپ‌شده با گوگرد از مخلوط اوره و تیواوره (نسبت مولی ۱:۳) در دمای ۵۵۰ درجه سانتی‌گراد تهیه گردید. عملکرد فوتوکاتالیستی تحت نور مرئی (لامپ ٤٦٠ وات) با آزمایش‌های کنترل (جذب در تاریکی و بدون کاتالیست) ارزیابی و ساختار نمونه‌ها با XRD، TEM و UV-Vis مشخصه‌یابی شد.

روش‌های تجربی

برای سنتز نانوذرات مگنتایت ابتدا ۰٫۰۱ مول $FeCl_2$ و ۰٫۰۲ مول $FeCl_3$ جداگانه در ۲۵ میلی‌لیتر آب دیونیزه حل شدند. محلول‌ها مخلوط و در حمام گرمایی قرار گرفتند. pH محلول با آمونیاک تنظیم و به مدت ۳۰ دقیقه هم‌زده شد. رسوب سیاه توسط آهنربا جداسازی، شسته و در دمای ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۱۰ ساعت خشک گردید.

برای سنتز نانوذرات اکسید روی ابتدا ۰٫٤ گرم سولفات روی در ۲۵ میلی‌لیتر آب دیونیزه حل و ۲۰ دقیقه در حمام فراصوت قرار گرفت. ۰٫۲ گرم سدیم هیدروکسید در ۲۵ میلی‌لیتر آب حل و به قطره‌قطره به محلول سولفات روی افزوده شد و به مدت ۱ ساعت در حمام فراصوت نگهداری گردید. رسوب شسته و در دمای ۱۱۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ٢٤ ساعت خشک شد.

برای سنتز نیترید گرافن دوپ شده با گوگرد ابتدا اوره و تیواوره با نسبت مولی ۱:۳ (تیواوره به اوره) در ۲۵ میلی‌لیتر آب دیونیزه حل و ۳۰ دقیقه هم‌زده شدند. محلول در کوره با نرخ ۵ درجه بر دقیقه تا ۵۵۰ درجه سانتی‌گراد گرم و ۲ ساعت در این دما نگهداری شد. محصول نهایی پودر زردرنگ نیترید گرافن بود.

برای سنتز نانوکامپوزیت سه جزئی $Fe_3O_4/ZnO/g\text{-}C_3N_4$ ابتدا ۱ میلی‌گرم از هر سه جزء به همراه ۱ میلی‌گرم PVP در مخلوط ۲۵ میلی‌لیتر آب دیونیزه و ۲۵ میلی‌لیتر اتانول حل شدند. مخلوط Fe_3O_4 و ZnO ابتدا ۳۰ دقیقه تحت هم‌زنی قوی قرار

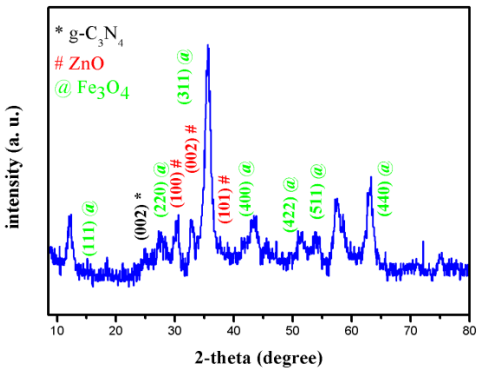
گرفت. سپس محلول $g\text{-}C_3N_4$ به آرامی اضافه و ۹۰ دقیقه تحت هم‌زنی و اولتراسونیک قرار گرفت. در نهایت، محلول به اتوکلاو منتقل و در دمای ۱۳۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۵ ساعت عملیات هیدروترمال انجام شد. محصول نهایی ۲ تا ۳ بار با آب دیونیزه و اتانول شسته و در دمای ۸۰ درجه سانتی‌گراد خشک گردید.

برای ارزیابی فعالیت فوتوکاتالیستی، محلول متیلن آبی با غلظت ۱۰ میلی‌گرم بر لیتر تهیه شد. ۰٫۰۲ گرم از نانوکامپوزیت به محلول رنگ افزوده و به مدت ۱ ساعت در تاریکی نگهداری شد تا تعادل جذب سطحی برقرار گردد. سپس محلول تحت تابش لامپ مرئی شبیه‌ساز نور خورشید قرار گرفت. هر ۱۵ دقیقه تا ۱۲۰ دقیقه، ٦ میلی‌لیتر از محلول برداشته و نانوکامپوزیت توسط آهنربا از محلول جدا گردید. غلظت باقیمانده رنگ با استفاده از طیف‌سنجی UV-Vis در طول موج ٦۵۰ نانومتر اندازه‌گیری شد.

نتایج و بحث

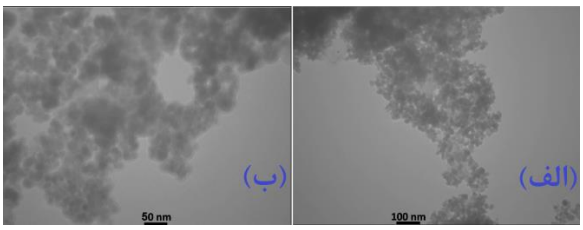
مشخصه‌یابی نانوکامپوزیت‌ها

الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) نانوکامپوزیت $Fe_3O_4/ZnO/g\text{-}C_3N_4$ در شکل ۱ نشان داده شده است. قله‌های مشخصه در زاویه‌های ۱۸٫۳°، ۳۰٫۳°، ۳۵٫٦°، ٤۳٫۱°، ۵۳٫۵°، ۵۷٫۱° و ٦۲٫۷° مربوط به ساختار اسپینل مگنتایت (Fe_3O_4) بوده و با کارت مرجع JCPDS No. 19-0629 مطابقت دارد [۸]. قوی‌ترین قله در ۳۵٫٦° نشان‌دهنده بلورینگی خوب فاز مغناطیسی است. قله‌های اکسید روی در زاویه‌های ۳۱٫۸°، ۳٤٫٤° و ۳٦٫۳° مربوط به ساختار ورتزایت اکسید روی بوده و با کارت مرجع JCPDS No. 36-1451 مطابقت دارد [۸]. قله‌ی پهن با شدت کم در ۲۷٫۵° مربوط به صفحه (۰۰۲) نیترید گرافن بوده و پهن بودن آن نشان‌دهنده ساختار لایه‌ای و آمورف نسبی است که با نتایج مطالعات پیشین همخوانی دارد [۹]. عدم مشاهده قله‌های ناخالصی نشان‌دهنده خلوص بالاست.



شکل ۱: الگوی پراش پرتو x نانوکامپوزیت $Fe_3O_4/ZnO/g\text{-}C_3N_4$.

ریخت‌شناسی و توزیع نانوذرات در نانوکامپوزیت با میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM) بررسی شد (شکل ۲). تصاویر TEM نشان می‌دهند که نانوذرات مگنتایت و اکسید روی دارای مورفولوژی تقریباً کروی با اندازه متوسط ۲۰–۳۵ نانومتر هستند. نانوذرات به‌صورت نسبتاً یکنواخت بر روی ورقه‌های لایه‌ای $g\text{-}C_3N_4$ توزیع شده‌اند و ساختار لایه‌ای این ماده به‌وضوح قابل مشاهده است. اتصال نزدیک و تماس مؤثر بین نانوذرات Fe_3O_4 و ZnO در بزرگنمایی‌های بالا (۵۰ و ۱۰۰ نانومتر) مشهود است که تشکیل ناهم‌ساختار مؤثر و تسهیل انتقال حامل‌های بار را تأیید می‌کند. اگرچه تجمع جزئی در برخی نواحی دیده می‌شود، توزیع کلی ذرات یکنواخت بوده و با نتایج XRD همخوانی دارد. این تعامل بین‌فازی، نقش پشتیبان $g\text{-}C_3N_4$ را تقویت کرده و برای عملکرد فوتوکاتالیستی مطلوب مناسب است.

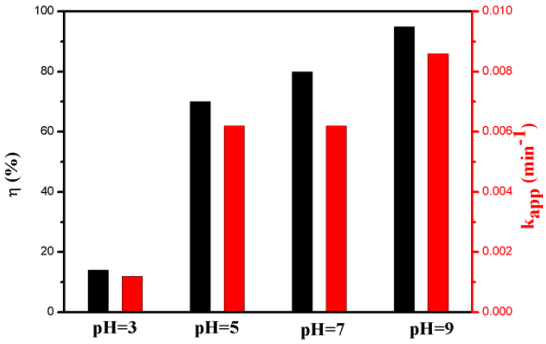


شکل ۲: تصاویر TEM نانوکامپوزیت $Fe_3O_4/ZnO/g\text{-}C_3N_4$ در بزرگنمایی‌های مختلف الف) ۱۰۰ نانومتر و ب) ۵۰ نانومتر.

نتایج مطالعه فوتوکاتالیستی رنگ متیلن آبی

در این پژوهش، اثر pH بر تخریب متیلن آبی در محدوده ۳ تا ۹ بررسی شد. این محدوده با توجه به پایداری کاتالیست (انحلال

در pH کمتر از ۳ و رسوب هیدروکسیدها در pH بزرگتر از ۹) و تطابق با pH طبیعی پساب‌های صنعتی انتخاب گردید. همان‌طور که در شکل ۳ مشاهده می‌شود، با افزایش pH از ۳ به ۹، درصد تخریب از ۱٤٪ به ۹٦٪ و ثابت سرعت ظاهری (k.app) از ۰٫۰۱۳ به ۰٫۰۸۵ بر دقیقه افزایش یافت (حدود ٦٫۵ برابر). این رفتار نشان‌دهنده نقش کلیدی محیط قلیایی در ارتقای کارایی فرایند است. متیلن آبی به عنوان رنگ کاتیونی (با بار مثبت) دچار دافعه الکترواستاتیکی شده و جذب سطحی کاهش می‌یابد. در مقابل، در pH قلیایی (۹)، سطح کاتالیست بار منفی پیدا کرده و جذب قوی رنگ را آسان می‌کند. علاوه‌بر این در محیط قلیایی تولید رادیکال‌های هیدروکسیل (•OH) افزایش می‌یابد [۱۰].



شکل۳: **اثر pH بر درصد تخریب (η%) و ثابت سرعت ظاهری (k_app) در تخریب فوتوکاتالیستی متیلن آبی.**

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، نانوکامپوزیت سه جزئی مغناطیسی $Fe_3O_4/ZnO/g\text{-}C_3N_4$ با موفقیت سنتز شد. دوپینگ گوگرد و روش هم‌رسوبی–هیدروترمال منجر به تشکیل نانوساختار با خلوص بالا، توزیع یکنواخت نانوذرات (۲۰–۳۵ نانومتر) و اتصال مؤثر بین فازها گردید که توسط XRD و TEM تأیید شد.

این نانوکامپوزیت در شرایط بهینه(pH قلیایی) توانست ۹٦٪ متیلن‌آبی را در ۱۲۰ دقیقه تحت نور مرئی تخریب کند. عملکرد برتر در محیط قلیایی به دلیل جذب الکترواستاتیکی قوی و تولید بیشتر رادیکال‌های •OH است. قابلیت جداسازی آسان با میدان مغناطیسی نیز بازیافت و پایداری مناسبی را فراهم آورد.

نوآوری این پژوهش، ترکیب هم‌زمان فعالیت فوتوکاتالیستی بالا، جداسازی مغناطیسی آسان و دوپینگ گوگرد در یک سیستم یکپارچه است که برتری قابل توجهی نسبت به سیستم‌های دوجزئی یا بدون دوپینگ گزارش‌شده ایجاد کرده است. این نانوکامپوزیت با توجه به سنتز ساده، هزینه پایین و کارایی برجسته، گزینه‌ای بسیار امیدوارکننده برای تصفیه پساب‌های صنعتی حاوی رنگ‌های آلی محسوب می‌شود. علاوه بر این، ساختار سه‌جزئی آن پتانسیل کاربرد در حسگری گاز (به‌ویژه هیدروژن) و ذخیره‌سازی انرژی را دارد که در تحقیقات آینده قابل بررسی است.

مرجع‌ها

[۱] M. Bharti; "Advanced Photocatalytic Degradation of Dyes, Drugs, and Organic Pollutants via Carbon-Supported Nanoparticles"; *International Journal of Pharmaceutical Sciences* **3**, No. 11 (2025) 3323-3340.

[۲] D.S. Shi, B. Hong, J.N. Mao, S.Y. Song, C.X. Li, J.C. Xu, Y.B. Han, H.X. Jin, X.L. Peng, J. Gong, H.L. Ge and X.Q. Wang; "Highly Improved Photocatalytic Activity of Magnetically Separable Ferroferric Oxide@Zinc Oxide/Carbon Nitride Nanocomposites and Interface Mechanism"; *Nano* **16**, No. 14 (2021) 2150164.

[۳] D. Mottammal, S.A. Thomas, J. Cherusseri, A. Kumar and D.N. Rajendran; "Photocatalytic Degradation of Methylene Blue: Performance, Mechanism, and Perspectives"; *Topics in Catalysis* **69**, No. 8 (2026) 1252-1292.

[٤] S. Ziaalmolki, B. Aslibeiki, M. Zarei, R. Torkamani and T. Sarkar; "Enhanced visible-light-driven photocatalysis via magnetic nanocomposites: A comparative study of g-C_3N_4, g-C_3N_4/Fe_3O_4, and g-C_3N_4/Fe_3O_4/ZnO"; *Materials Today Communications* **37**, (2023)107340.

[۵] M. Nanjappan, H. Rajagopalan, V. Pandurangan and P. Elaiyaraja; "Enhanced visible-light photodegradation of methylene blue and amoxicillin by sulfur-doped g-C_3N_4 coupled with $MnFe_2O_4$" ; *Ionics*, (2026)1-26.

[٦] A. Ibrahim, U. B. Memon, S. P. Duttagupta, R. R. Singh and A. Sarkar; "Synthesis, Characterization, and Hydrogen Gas Sensing of ZnO/g-C3N4 Nanocomposite"; *Engineering Proceedings* **10**, No. 1 (2021) 3.

[۷] A. Alaghmandfard and K. Ghandi; "A comprehensive review of graphitic carbon nitride (g-C_3N_4)–metal oxide-based nanocomposites: potential for photocatalysis and sensing"; *Nanomaterials*, **12** No. 2 (2022) 294.

[۸] A. Baqi, S. Sarwer, X. Hou, H. Noor, N. Fatima, H. Riaz, S.R. Ejaz, M. Bibi, M.I. Khan, A. Shanableh and R. Luque; "Tailoring iron-doped ZnO nanoparticles for photocatalytic degradation of methylene blue"; *Polyhedron* **258**, (2026) 117853.

[۹] V. Rahimkhoei, M. Hamadanian, K.H. Salem, L.Q.A. Al-Budair and M. Salavati-Niasari; "Synthesis and characterization of Sm_2FeMnO_6 double perovskites nanoparticles supported on graphitic carbon nitride as photocatalyst for the degradation of organic dyes under simulated sunlight"; *Energy Nexus* **19**, (2025) 100416.

[۱۰] C. Langa, N. Mabuba, L.M. Mahlaule-Glory, D.E. Motaung, Z. Tetana and N.C. Hintsho-Mbita; "Enhanced photocatalytic degradation of dyes and pharmaceutical pollutants using Fe/TiO_2-carbon nanospheres from Sutherlandia Frutescence"; *International Journal of Environmental Analytical Chemistry* **106**, No. 4 (2025) 790-820.

سنتز و بررسی کارایی فوتوکاتالیست مغناطیسی $Fe_3O_4/CdS/ZnO$

حلیمه هاشمی‌نژاد [۱] ؛ پروانه ایرانمنش [۲] ؛ ندا خراسانی‌پور [۳]

گروه فیزیک، دانشگاه ولی عصر (عج) ،رفسنجان

چکیده

در این پژوهش، نانوکامپوزیت مغناطیسی سه‌تایی $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ به روش هم‌رسوبی شیمیایی سنتز و توسط آنالیزهای XRD ، DLS و TEM از نظر ویژگی‌های ساختاری و ریخت‌شناسی بررسی شد. نتایج XRD تشکیل فازهای بلوری مگنتایت، سولفید کادمیم و اکسید روی را بدون ناخالصی تایید کرد. عملکرد فوتوکاتالیستی نانوکامپوزیت در تخریب رنگ ایوسین مورد ارزیابی قرار گرفت و شرایط بهینه شامل pH طبیعی رنگ (حدود ۶٫۵–۷٫۰)، مقدار فوتوکاتالیست g ۰٫۰۳ و غلظت ppm ۲۰ تعیین شد. نتایج آزمایش‌های اسکونجر نشان داد که رادیکال‌های هیدروکسیل (•OH) و حفره‌های القا شده با نور (h^+) گونه‌های فعال غالب هستند. افزایش فعالیت فوتوکاتالیستی نانوکامپوزیت نسبت به نمونه‌های خالص به تشکیل پیوند نامتجانس p–n و انتقال بار نسبت داده می‌شود که موجب جدایش مؤثر زوج‌های الکترون–حفره و کاهش بازترکیب آن‌ها می‌گردد. همچنین، قابلیت جداسازی مغناطیسی، بازیابی و استفاده مجدد از فوتوکاتالیست را امکان‌پذیر می‌سازد.

واژه های کلیدی: *نانوکامپوزیت $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ ، فوتوکاتالیست مغناطیسی، تخریب ایوسین، پیوند نامتجانس p-n .*

Synthesis and Evaluation of the Photocatalytic Performance of Magnetic $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ Photocatalyst

Halimeh, Hasheminejad[1]; Parvaneh, Iranmanesh[2] ; Neda, Khorasanipour[3]

Department of Physics, Vali-e-Asr University, Rafsanjan,

Abstract

In this study, a ternary magnetic $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ nanocomposite was synthesized via the chemical co-precipitation method and characterized in terms of its structural and morphological properties using XRD, DLS, and TEM analyses. The XRD results confirmed the formation of crystalline phases of magnetite, cadmium sulfide, and zinc oxide without any impurities. The photocatalytic performance of the nanocomposite was evaluated for the degradation of eosin dye, and the optimal conditions were determined to be the natural pH of the dye solution (approximately 6.5–7.0), a photocatalyst dosage of 0.03 g, and a dye concentration of 20 ppm. The scavenger test results revealed that hydroxyl radicals (•OH) and photogenerated holes (h^+) were the dominant reactive species. The enhanced photocatalytic activity of the nanocomposite, compared with the pure samples, was attributed to the formation of a p–n heterojunction and charge transfer, which promote the effective separation of electron–hole pairs and suppress their recombination. In addition, the magnetic separability of the nanocomposite enables the facile recovery and reuse of the photocatalyst.

***Keywords**: $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ nanocomposite; Magnetic photocatalyst; Eosin degradation; p-n heterojunction.*

PACS No. 61,78

مقدمه

اکسید روی (ZnO) و سولفید کادمیم (CdS) به‌عنوان نیم‌رساناهای با گاف نواری مستقیم، به دلیل خواص مناسب فوتوکاتالیستی مورد توجه قرار گرفته‌اند [۱،۲]. همچنین نانوذرات مگنتایت (Fe_3O_4) به‌دلیل زیست‌سازگاری و قابلیت جداسازی مغناطیسی، گزینه‌ای مناسب برای ساخت نانوکامپوزیت‌ها محسوب می‌شوند [۳]. در این راستا، توسعه فوتوکاتالیست‌های کارآمد می‌تواند نقش مهمی در تصفیه و بازچرخانی فاضلاب ایفا کند[٤].

مواد و روش‌ها

در این پژوهش از استات روی، استات کادمیوم، سولفات روی، دی‌سدیم سولفید، EDTA، آمونیاک و NaOH به‌عنوان پیش‌سازها و عوامل رسوب‌دهنده استفاده شد و رنگ ایوسین از شرکت مرک تهیه گردید. شناسایی ساختار و ویژگی‌های نانوکامپوزیت با استفاده از آنالیزهایXRD ، DLS، TEMو طیف‌سنجی فوتولومینسانس انجام شد.

سنتزنانوکامپوزیت Fe_3O_4/CdS

ابتدا ۱٫۱۶ گرم مگنتایت (تهیه‌شده به روش هم‌رسوبی) [۵]، در ۲۵ میلی‌لیتر آب دوبار یونیزه شده پراکنده شد. سپس محلول‌های استات کادمیم (۱٫۳۳ گرم) و EDTA (۱٫۸٦ گرم) به سوسپانسیون افزوده و ۳۰ دقیقه هم‌زده شدند. در ادامه، ۵٫۵۷ گرم دی‌سدیم سولفید (حل شده در ۵۰ میلی‌لیتر آب) به‌صورت قطره‌ای اضافه گردید. رسوب حاصل پس از شستشو با آب دوبار یونیزه شده، به مدت ۲٤ ساعت در دمای ۱۱۰ درجه سانتی‌گراد خشک شد.

سنتزنانوکامپوزیت $Fe_3O_4/CdS/ZnO$

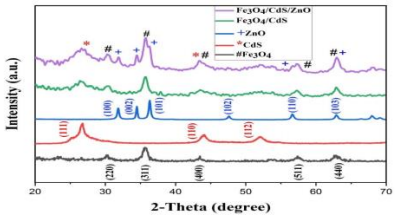
مقدار ۰٫۹٤ گرم از نانوکامپوزیت دوتایی مرحله قبل در ۲۵ میلی‌لیتر آب دوبار یونیزه شده با امواج فراصوت (۲۰ دقیقه) پراکنده شد. سپس محلول سولفات روی (۰٫٤ گرم) به آن اضافه و ٦۰ دقیقه تحت امواج فراصوت قرار گرفت. پس از افزودن قطره‌ای محلول هیدروکسید سدیم (۰٫۲ گرم)، واکنش به مدت ۱۲۰ دقیقه تحت تابش فراصوت ادامه یافت. در نهایت، محصول شستشو داده شده و در دمای ۱۱۰ درجه سانتی‌گراد (۲٤ ساعت) خشک گردید.

تخریب رنگ ایوسین

به‌منظور بررسی مکانیزم فوتوکاتالیستی و شناسایی گونه‌های فعال در تخریب رنگ ایوسین، آزمون‌های اسکونجر به‌صورت مجزا انجام شد. محلول ایوسین با غلظت ۲۰ ppm تهیه و ۲۰ میلی‌گرم نانوکامپوزیت $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ به آن افزوده شد. سوسپانسیون به‌مدت ٦۰ دقیقه در تاریکی هم‌زده شد تا تعادل جذب–واجذب برقرار گردد. سپس نمونه بدون اسکونجر تحت تابش قرار گرفت و کاهش جذب در طول‌موج بیشینه برای تعیین بازده اولیه ثبت شد. در ادامه، چهار اسکونجر مختلف به‌طور جداگانه به سیستم افزوده شده و آزمون فوتوکاتالیستی در شرایط مشابه تکرار شد. پس از تابش، درصد تخریب بر اساس تغییرات جذب محاسبه گردید.

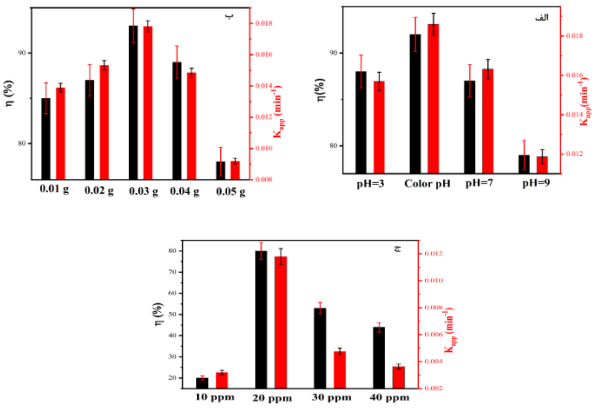
نتایج و بحث

شکل ۱ الگوهای XRD مربوط به Fe_3O_4، CdS، ZnO، نانوکامپوزیت دوتایی Fe_3O_4/CdS و نانوکامپوزیت سه‌تایی $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ را نشان می‌دهد. قله‌های پراش Fe_3O_4 در زوایای ۲θ حدود ۳۰٫۱، ۳۵٫۵، ٤۳٫۲، ۵۳٫۵، ۵۷٫۱ و ٦۲٫۷ درجه با ساختار اسپینل مکعبی مگنتایت (JCPDS No. 65-3107) منطبق است. بازتاب‌های CdS در ۲٦٫٦، ۲۸٫۲–۲۸٫۵، ٤٤٫۱ و ۵۲٫۲ درجه به فاز ورتزایت شش‌گوشی (JCPDS No. 05-0566) نسبت داده می‌شود. همچنین قله‌های ZnO در ۳۱٫۸، ۳٤٫٤، ۳٦٫۲، ٤۷٫۵، ۵٦٫٦، ٦۲٫۸ و ٦۷٫۹ درجه با ساختار ورتزایت شش‌گوشی ZnO (JCPDS No. 36-1451) همخوانی کامل دارد. در نمونه دوتایی Fe_3O_4/CdS، قله‌های مشخصه هر دو فاز مشاهده می‌شود و در نانوکامپوزیت سه‌تایی $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ نیز حضور هم‌زمان قله‌های Fe_3O_4، CdS و ZnO، گویای ادغام موفق سه جزء و حفظ ساختار بلوری آن‌هاست. واضح بودن و تیزی قله‌ها نشان‌دهنده بلورینگی بالای نانوذرات و سنتز موفق بدون فازهای آمورف یا ناخالصی قابل‌تشخیص است. عدم مشاهده قله‌های اضافی، یکپارچگی ساختاری و عدم جدایش فازی قابل توجه بین Fe_3O_4، CdS و ZnO را تأیید می‌کند. علاوه بر این، جابه‌جایی جزئی برخی قله‌ها به سمت زوایای ۲θ بالاتر در نمونه $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ بیانگر ایجاد کرنش شبکه‌ای و تنش بین‌وجهی بر اثر حضور نانوذرات ZnO و تغییر فاصله بین‌صفحه‌ای است [٦تا۸].



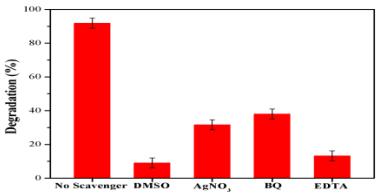
شکل۱ : الگوهای پراش پرتو ایکس (XRD) مربوط به Fe_3O_4 ، CdS، ZnO، نانوکامپوزیت دوتایی Fe_3O_4/CdS و نانوکامپوزیت سه‌تایی $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ به همراه شاخص‌های میلر. قله‌های مشخصه مربوط به Fe_3O_4 (#)، CdS (*)و ZnO (+) نمایه‌گذاری شده‌اند.

بررسی پارامترهای عملیاتی نشان داد که کارایی تخریب نانوکامپوزیت $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ به‌شدت تحت تأثیر pH محیط، مقدار فوتوکاتالیست و غلظت اولیه رنگ قرار دارد. همان‌طور که در شکل ۲(الف) مشاهده می‌شود، بیشترین میزان تخریب رنگ ایوسین (η) و ثابت نرخ ظاهری (k_{app}) در pH طبیعی رنگ (حدود ٦٫٥ تا ٧٫٠) رخ داده است؛ این امر به دلیل انطباق با نقطه بار صفر (PZC) فوتوکاتالیست و ایجاد جاذبه الکترواستاتیک بهینه بین گروه‌های سولفونات با بار منفی در رنگ‌زا و سطح کاتالیست است. علاوه بر این، بررسی مقدار فوتوکاتالیست در شکل ۲ (ب) نشان داد که مقدار ۰٫۰۳ گرم، مقدار بهینه برای فرآیند تخریب است؛ چرا که در این مقدار، تعداد سایت‌های فعال سطحی برای تولید رادیکال‌های هیدروکسیل به حداکثر می‌رسد، در حالی که در مقادیر بالاتر، پدیده کلوخه‌شدن و پراکندگی نور باعث کاهش بازده می‌گردد. در نهایت، مطابق با شکل ۲ (ج)، غلظت ۲۰ppm به عنوان غلظت بهینه رنگ‌زا شناسایی شد. نتایج کلی نشان می‌دهد که هم‌راستایی دقیق بین درصد تخریب و ثابت نرخ واکنش در تمامی مراحل، تأییدکننده پایداری و کارایی بالای این نانوکامپوزیت در شرایط عملیاتی بهینه برای تصفیه پساب‌های حاوی رنگ ایوسین است.



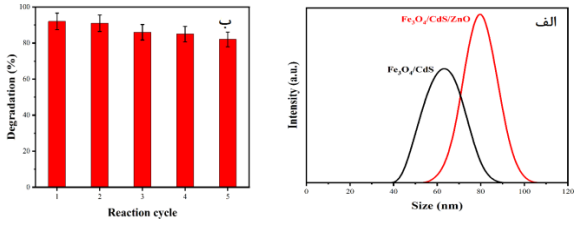
شکل ۲ : بهینه‌سازی پارامترهای عملیاتی در تخریب فوتوکاتالیستی ایوسین توسط نانوکامپوزیت $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ ؛ اثر (الف) pH محیط، (ب) مقدار نانوکامپوزیت (مقدار فوتوکاتالیست) و (ج) غلظت اولیه رنگ بر کارایی تخریب (η)و ثابت نرخ ظاهری(k_{app}).

جهت شناسایی گونه‌های فعال اکسیژنی (ROS) مؤثر در تخریب فوتوکاتالیستی ایوسین، آزمایش‌های اسکونجر با استفاده از DMSO (برای •OH)، $AgNO_3$ (برای e^-)، BQ (برای $\bullet O_2^-$) و EDTA (برای h^+) انجام شد. طبق نتایج شکل ۳، افزودن DMSO و EDTA بازدهی تخریب را به‌ترتیب به حدود ۱۰٪ و ۱۳٪ کاهش داد که نشان‌دهنده نقش کلیدی و غالب رادیکال‌های هیدروکسیل (•OH) و حفره‌های القا شده با نور (h^+) در فرآیند تخریب است. در مقابل، $AgNO_3$ و BQ تأثیر کمتری بر کاهش بازدهی (به‌ترتیب ۳۲٪ و ۳۸٪) داشتند که حاکی از نقش ثانویه الکترون‌ها و رادیکال‌های سوپراکسید در مکانیزم واکنش است. تشکیل پیوند p-n میان اجزا و ایجاد میدان الکتریکی داخلی، موجب انتقال الکترون‌ها از CdS به ZnO و مهاجرت حفره‌ها از ZnO به CdS و نهایتاً به Fe_3O_4 می‌شود. این ساختار با تسهیل جدایش بار و بهبود انتقال بین‌وجهی (توسط Fe_3O_4)، نرخ بازترکیب الکترون-حفره را به حداقل می‌رساند که منجر به بهبود عملکرد فوتوکاتالیستی نانوکامپوزیت می‌گردد. [۹].



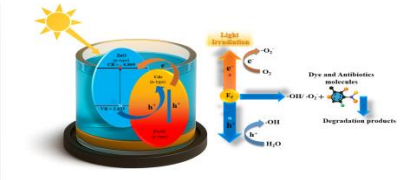
شکل۳ : تأثیر گونه‌های فعال DMSO، $AgNO_3$، BQ و EDTA بر بازده تخریب فوتوکاتالیستی ایوسین توسط نانوکامپوزیت $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ (خطابارها نشان‌دهنده انحراف معیار (±انحراف معیار)، با تعداد تکرار n = 3 هستند).

شکل ٤(الف) آنالیز DLS نشان می‌دهد که پیک اندازه ذرات در نانوکامپوزیت Fe_3O_4/CdS حدود ٦٠ نانومتر و در $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ حدود ٨٠ نانومتر است. افزایش اندازه هیدرودینامیکی بیانگر بارگذاری موفق ZnO و تشکیل نانوکامپوزیت سه‌تایی است. مطابق شکل ٤(ب)، نانوکامپوزیت $Fe_3O_4/CdS/ZnO$تا سه چرخه اول پایداری فوتوکاتالیستی خوبی نشان داد و در چرخه‌های چهارم و پنجم بازده به حدود ٨٥ ٪و ٨٠٪ کاهش یافت.



شکل٤ : الف)طیف DLS نانوکامپوزیت‌های Fe_3O_4/CdS و $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ ب) کارایی فوتوکاتالیستی طی پنج چرخه متوالی توسط نانوکاتالیست ۰٫۰۳ گرم $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ (خطابارها نشان‌دهنده انحراف معیار (±انحراف معیار)، با تعداد تکرار $n = 3$ هستند).

عملکرد برتر نانوکامپوزیت $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ ناشی از تشکیل پیوند نامتجانس p–n بین Fe_3O_4 (نوعp) و سیستم CdS/ZnO (نوعn) است که با ایجاد میدان الکتریکی داخلی، جدایش حامل‌های بار را تسهیل می‌کند. محاسبات لبه نواری طبق شکل ۵ انتقال آبشاری الکترون‌ها از نوار رسانش (CB) در CdS به ZnO و مهاجرت حفره‌ها از نوار ظرفیت (VB) در ZnO به CdS و سپس Fe_3O_4 را تایید می‌کند. این آرایش، جدایش فضایی حامل‌ها را بهینه و بازترکیب آن‌ها را کمینه می‌سازد. فعالیت تحت نور مرئی علی‌رغم گاف نواری پهن ZnO، به دو عامل نسبت داده می‌شود: ۱- حساس‌سازی نوری توسط ایوسین(تزریق الکترون به نوار رسانش کاتالیست) و ۲- ایجاد ترازهای میانی ناشی از نقص‌های ساختاری (مانند حفرات اکسیژنی) در فصل‌مشترک‌ها که برانگیختگی با فوتون‌های کم‌انرژی را ممکن می‌کند. در نهایت، واکنش الکترون‌ها در ZnO و حفره‌ها در Fe_3O_4 منجر به تولید گونه‌های فعال ($O_2^{\cdot}$و $^{\cdot}OH$) و معدنی‌سازی رنگ به CO_2 و H_2O می‌گردد.



شکل۵ : نمایش شماتیک مکانیزم تخریب فوتوکاتالیستی با استفاده از نانوکامپوزیت $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ تحت تابش نور.

نتیجه گیری

در این پژوهش، نانوکامپوزیت سه‌تایی $Fe_3O_4/CdS/ZnO$ به عنوان فوتوکاتالیستی کارآمد و قابل بازیابی مغناطیسی برای حذف آلاینده‌های رنگی سنتز شد. نتایج نشان داد ترکیب سه جزء مگنتایت، سولفید کادمیم و اکسید روی علاوه بر حفظ پایداری ساختاری، موجب هم‌افزایی در خواص نوری و کاتالیزوری می‌گردد. بهینه‌سازی پارامترها مشخص کرد که بیشترین بازدهی تخریب در pH خنثی (منطبق بر نقطه بار صفر کاتالیست) حاصل می‌شود. بررسی مکانیسم واکنش تایید کرد که تشکیل میدان الکتریکی داخلی در فصل‌مشترک نیمرساناها، مهاجرت حامل‌های بار را تسهیل و بازترکیب آن‌ها را کاهش می‌دهد. در نهایت، فعالیت بالا تحت نور مرئی، جداسازی مغناطیسی سریع و پایداری مناسب، این نانوکامپوزیت را به گزینه‌ای ایده‌آل و اقتصادی برای کاربردهای عملی در تصفیه پساب‌های صنعتی تبدیل می‌کند. تخریب رنگ در این پژوهش بر اساس تغییر رنگ محلول و کاهش/حذف پیک مشخصه آن در طیف UV–Vis ارزیابی شده است که بیانگر تجزیه ساختار کروموفوری مولکول رنگ می‌باشد.

مرجع‌ها

[1] U. Özgür et al.; "A Comprehensive Review of ZnO Materials and Devices"; Journal of Applied Physics **98** (2005) 041301.
[2] L. Cheng, Q. Xiang, Y. Liao, and H. Zhang; "CdS-based photocatalysts"; *Energy & Environmental Science* **11**, No. 6 (2018) 1362–1391.
[3] S. Laurent et al.; "Magnetic Iron Oxide Nanoparticles: Synthesis, Stabilization, Vectorization, Physicochemical Characterizations, and Biological Applications"; *Chemical Reviews* **108** (2008) 2064–2110.
[4] K. P. Gopinath, M. Rajagopal, A. Krishnan, and S. K. Sreerama; "A review on recent trends in nanomaterials and nanocomposites for environmental applications"; *Current Analytical Chemistry* **17**, No. 2 (2021) 202–243.
[5] S. R. Dafeh, P. Iranmanesh, and P. Salarizadeh; "Fabrication, Optimization, and Characterization of Ultra-Small Superparamagnetic Fe_3O_4 and Biocompatible Fe_3O_4@ZnS Core/Shell Magnetic Nanoparticles"; *Materials Science and Engineering: C* **98** (2019) 205–212.
[6] F. Soltani-Nezhad, A. Saljooqi, A. Mostafavi, T. Shamspur, Synthesis of Fe_3O_4/CdS–ZnS nanostructure and its application for photocatalytic degradation of chlorpyrifos pesticide and brilliant green dye from aqueous solutions, *Ecotoxicol. Environ. Saf.* **189** (2020) 109886.
[7] T. Xu, P. Wang, D. Wang, K. Zhao, M. Wei, X. Liu, and L. Yang; "Ultrasound-assisted synthesis of hyper-dispersed type-II tubular Fe_3O_4@SiO_2@ZnO/ZnS core/shell heterostructure for improved visible-light photocatalysis"; *Journal of Alloys and Compounds* **838** (2020) 155689.
[8] P. Wei, X. Yu, Y. Li, Preparation of Fe_3O_4/ZnO/ZnS composites with enhanced photoperformance under solar irradiation, *J. Electron. Mater.* **48** (2019) 4877.
[9] Y. H. Chin, J. W. Ho, Y. C. Lin, C. C. Chen, C. Y. Chen, 3-D/3-D Z-Scheme Heterojunction Composite Formed by Marimo-like Bi_2WO_6 and Mammillaria-like ZnO for Expeditious Sunlight Photodegradation of Dimethyl Phthalate, *Catalysts* **12** (2022) 1427.

طراحی و ساخت سامانه اندازه‌گیری مستقیم اثر مگنتوکالری و ارزیابی عملکرد آن با گادولینیوم

عزپور ، مائده[۱] ؛ جعفری ، منصوره[۱] ؛ نظیفی ، رعنا[۱] ؛ میرزایی ، سید ایمان [۱]

[۱] گروه فیزیک ماده‌چگال، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

چکیده

با توجه به کاربردهای گسترده‌ی اثر مگنتوکالری در سرمایش مغناطیسی و عدم وجود دستگاه اندازه‌گیری مستقیم آن در کشور ما، در این پژوهش دستگاهی برای اندازه‌گیری مستقیم اثر مگنتوکالری طراحی و ساخته شد. عملکرد دستگاه با استفاده از گادولینیوم (Gd) به‌عنوان ماده‌ی مرجع ارزیابی و نتایج با اندازه‌گیری‌های مقاومت الکتریکی و پذیرفتاری مغناطیسی راستی‌آزمایی گردید. بیشینه‌ی تغییر دمای شبه‌بی‌دررو گادولینیوم تحت میدان ۰٫۸۵ تسلا در دمای ۲۹۴ کلوین، ۰٫۹۴ کلوین به‌دست آمد. نتایج نشان‌دهنده‌ی پایداری و تکرارپذیری مناسب دستگاه بوده و اختلاف مشاهده‌شده با داده‌های مرجع معتبر، ناشی از محدودیت‌هایی نظیر عایق‌بندی حرارتی ناکامل و اعمال دستی میدان مغناطیسی شناسایی شده است. این دستگاه به‌عنوان گام نخست در طراحی سامانه‌های اندازه‌گیری مستقیم در کشور، قابلیت بهبود و اصلاح برای دستیابی به دقت بالاتر را دارا است.

واژه های کلیدی: *اثر مگنتوکالری، گادولینیوم، اندازه‌گیری مستقیم، مقاومت الکتریکی، سنجش پذیرفتاری مغناطیسی*

Design and construction of a direct magnetocaloric effect measurement system and its performance evaluation using Gadolinium

Ezpour, Maedeh[1]; Jafari, Mansoureh[1]; Nazifi, Rana[1]; Mirzaei, Seyed Iman[1]

[1] *Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Basic Sciences, Tarbiat Modares University, Tehran*

Abstract

Considering the wide applications of the magnetocaloric effect in magnetic refrigeration and the lack of a direct measurement system for this effect in our country, a device for direct measurement of the magnetocaloric effect was designed and constructed in this study. The performance of the device was evaluated using gadolinium (Gd) as a reference material, and the results were verified by electrical resistance and magnetic susceptibility measurements. The maximum quasi-adiabatic temperature change of gadolinium under a magnetic field of 0.85T at 294K was 0.94K. The results indicate proper stability and reproducibility of the device, and the observed deviation from reliable reference data is attributed to limitations such as imperfect thermal insulation and manual application of the magnetic field. This device, as a first step toward developing direct measurement systems in the country, has the potential for improvement and modification to achieve higher accuracy.

***Keywords**: Magnetocaloric effect, gadolinium, direct measurement, electrical resistance, magnetic susceptibility measurement*

PACS No. 75

مقدمه

افزایش تقاضای جهانی برای انرژی و پیامدهای نگران‌کننده تغییرات اقلیمی ناشی از انتشار گازهای گلخانه‌ای، نیاز مبرم به توسعه فناوری‌های کارآمد و سازگار با محیط‌زیست را بیش از پیش نمایان ساخته است[۱]. در این میان، سامانه‌های گرمایشی و تهویه مطبوع متداول که بر پایه فناوری فشرده‌سازی بخار عمل می‌کنند، سهم قابل‌توجهی در مصرف

انرژی جهانی دارند و از عوامل اصلی انتشار کلروفلوئروکربن‌ها و هیدروکلروفلوئروکربن‌ها هستند[۲]. یکی از امیدبخش‌ترین جایگزین‌ها، فناوری سرمایش مغناطیسی مبتنی بر اثر مگنتوکالری (MCE) است. این پدیده‌ی برگشت‌پذیر در مواد پارامغناطیس با اعمال و حذف میدان مغناطیسی، تغییر دمای قابل‌توجهی (به‌ویژه نزدیک گذار فاز) ایجاد می‌کند. برخلاف چرخه‌های متداول فشرده‌سازی بخار، سیستم‌های مگنتوکالری از سیالات مبرد سمی و مخرب محیط زیست استفاده نمی‌کنند، از بازده ترمودینامیکی بالاتری برخوردارند (بیش از ٪۶۰ بازده کارنو[۱])، و در عین حال طول عمر بیشتر و نیاز به نگهداری کمتری دارند[۲]. ایده‌ی استفاده از اثر مگنتوکالری برای سرمایش نزدیک دمای اتاق، نخستین بار در سال ۱۹۷۶ توسط براون مطرح شد[۳]. او عنصر گادولینیوم را به عنوان ماده‌ای مناسب در این حوزه معرفی کرد. عنصر گادولینیوم به دلیل نمایش اثر مگنتوکالری قابل‌توجه در نزدیکی دمای اتاق و گذار فاز مرتبه دوم پایدار، به یک ماده استاندارد و معیار برای ارزیابی مواد جدید و کالیبراسیون دستگاه‌های اندازه‌گیری تبدیل شده است. اولین یخچال مغناطیسی با کاربرد تجاری در سال ۲۰۱۶ توسعه یافت و Cooltech Applications اولین سیستم خود را راه‌اندازی کرد[٤].

آنتروپی کل (S_{Total}) یک ماده مغناطیسی در فشار ثابت را می‌توان به صورت زیر در نظر گرفت[۵]:

$$S_{Total}=S_M(T,H)+S_L(T,H)+S_E(T,H) \quad (۱)$$

که در آن $S_M(T,H)$ آنتروپی مغناطیسی، $S_L(T,H)$ آنتروپی شبکه و $S_E(T,H)$ آنتروپی الکترونی است.

در حضور میدان مغناطیسی ، آنتروپی مغناطیسی کاهش می‌یابد($\Delta S_M <0$). در فرایند بی‌دررو، آنتروپی شبکه و الکترونی به‌گونه‌ای تغییر می‌کنند که آنتروپی کل ثابت بماند.[٦]. سهم آنتروپی الکترونی در نزدیکی دمای اتاق ناچیز است[۷]، کاهش آنتروپی مغناطیسی موجب افزایش آنتروپی شبکه و گرم شدن نمونه میشود ($\Delta T_{ad} >0$). حذف میدان در شرایط بی‌دررو، روند عکس را سبب میشود.[٦]. از این رو، تغییر دمای بی دررو (ΔT_{ad}) و همچنین تغییر آنتروپی مغناطیسی (ΔS_M) در شرایط هم‌دما، دو مقدار مشخصه برای توصیف اثر مگنتوکالری محسوب می‌شوند. اثر مگنتوکالری را می‌توان با استفاده از روش‌های مستقیم و غیرمستقیم اندازه‌گیری کرد. در روش غیرمستقیم از نمودارهای ظرفیت گرمایی ویژه به عنوان تابعی از دما در میدان‌های مغناطیسی مختلف، و منحنی‌های مغناطش در دماهای مختلف، برای محاسبه تغییر دما و آنتروپی استفاده می‌کنند[٦, ۸]. در روش اندازه‌گیری مستقیم، تغییر دمای نمونه در شرایط بی‌دررو به صورت زیر محاسبه می‌شود[۹]:

$$\Delta T_{ad}=T_F(H_F)-T_I(H_I) \quad (۲)$$

که در آن $T_I(H_I)$ دما در میدان مغناطیسی اولیه و $T_F(H_F)$ دما در میدان مغناطیسی نهایی است.

روش‌های غیرمستقیم متداول‌ترند، ولی روش‌های مستقیم از دقت و قابلیت اطمینان بالاتری برخوردار بوده و برای راستی‌آزمایی داده‌های غیرمستقیم حیاتی هستند. طراحی و راه‌اندازی یک چیدمان اندازه‌گیری مستقیم MCE به دلیل نیاز به کنترل دقیق شرایط ترمودینامیکی و میدان مغناطیسی، یک چالش فنی محسوب می‌شود. هدف این مقاله تشریح طراحی، ساخت و ارزیابی عملکرد یک دستگاه اندازه‌گیری مستقیم اثر مگنتوکالری است. در همین راستا، دمای گذار فاز بدست آمده از این دستگاه با روش‌های مکمل مبتنی بر اندازه‌گیری پذیرفتاری مغناطیسی و مقاومت الکتریکی مقایسه شده‌است.

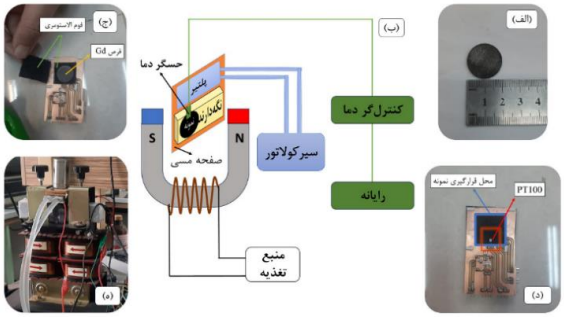
مواد و روش‌ها

ساخت قرص گادولینیوم: در این پژوهش از فلز گادولینیوم با خلوص ٪۹۹.۹ به‌صورت تراشه (تأمین‌شده از شرکت Aldrich، کد محصول263087_10G) استفاده شد. برای ساخت قرص گادولینیوم، مقدار ۳ گرم از تراشه‌های گادولینیوم در قالبی با قطر ۲ سانتی متر قرار داده شد و با استفاده از دستگاه پرس هیدرولیکی ۵۰ تنی تحت فشار قرار گرفت و قرصی با ضخامت تقریبی ۱.۵ تا ۲ میلی متر به‌دست آمد. ناهمگنی در توزیع فشار، باعث تغییر جزئی ضخامت قرص در برخی نواحی شده است. (شکل۱_الف).

ساخت دستگاه اندازه‌گیری اثر مگنتوکالری: نمای کلی چیدمان اندازه‌گیری مستقیم اثر مگنتوکالری در شکل۱_ب نشان داده شده است. اجزای اصلی سامانه عبارت‌اند از : نگه‌دارنده‌ی نمونه همراه با عایق حرارتی مناسب به‌منظور ایجاد شرایط شبه بی‌دررو (شکل۱_ج)، حسگر دما (شکل۱_د) و برد الکتریکی خوانش دما برای پایش و ثبت دقیق تغییرات دمایی نمونه، منبع تولید میدان مغناطیسی قوی (شکل۱_ه) و

ماژول ترموالکتریک در کنار سیرکولاتور آب به‌منظور سرد کردن یا گرم کردن نمونه (شکل ۱_ه).

در این سامانه، جریان الکتریکی از منبع تغذیه به الکترومگنت اعمال شده و میدان مغناطیسی در شکاف آن ایجاد می‌شود. این میدان به نمونه‌ی عایق‌بندی‌شده روی نگه‌دارنده اعمال می‌گردد. دمای نمونه توسط ماژول ترموالکتریک و سیرکولاتور آب کنترل شده و تغییرات دما به‌وسیله‌ی برد کنترل‌گر دما به‌طور پیوسته در رایانه ذخیره می‌شود.



شکل ۱ : الف) قرص گادولینیوم ساخته شده، ب) شماتیکی از نمای کلی چیدمان آزمایش، ج) نگهدارنده قرص، د) محل قرارگیری حسگر دما، ه) الکترومگنت مورد استفاده به همراه ماژول ترموالکتریک.

در این پژوهش، از روش نمونه ثابت با میدان مغناطیسی پالسی استفاده شد. میدان توسط الکترومگنتی با هسته‌ی مربعی (٤×٤ سانتی‌متر مربع) تأمین گردید. هسته برای کاهش انتقال گرمای اتلافی سیم‌پیچ‌ها به قطعه‌ی نگهدارنده‌ی نمونه، عایق‌بندی شد. با اعمال جریان ۱۰ آمپر، در شکافی در حدود ۵ میلی متر، میدان مغناطیسی موثر ۸۵۷۰ گاوس به دست آمد. در آزمایش‌ها میدان مغناطیسی به‌صورت دستی اعمال شد؛ به‌طور میانگین ٤۷ ثانیه روشن و ۹٤ ثانیه خاموش بود.

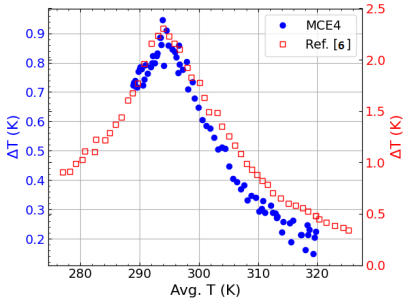
اندازه‌گیری پذیرفتاری مغناطیسی: در دمای گذار فاز فرومغناطیس به پارامغناطیس، پذیرفتاری مغناطیسی به‌طور چشمگیری کاهش می‌یابد. برای بررسی این کاهش، از دستگاه سنجش پذیرفتاری مغناطیسی جریان متناوب (طراحیشده در این گروه) استفاده شد[۱۰, ۱۱]. قرص گادولینیوم به‌همراه برد نگهدارنده نمونه و حسگر دمای PT100 بر روی مجموعه بلوک آلومینیومی متصل به سیرکولاتور و پلتیر قرار داده شدند. با استفاده از این سامانه، دمای نمونه ابتدا تا حدود ۳ درجه سانتی‌گراد کاهش داده شد و سپس به صورت تدریجی تا نزدیک ٦٤ درجه سانتی‌گراد افزایش یافته و داده‌های حساسیت مغناطیسی در هر لحظه ثبت شده‌است.

اندازه‌گیری مقاومت الکتریکی: از قرص با قطر ۲ سانتی‌متر و ضخامت ۰.۵ میلی‌متر، قطعه‌ای به طول ١٤ میلی‌متر و عرض ٤ میلی‌متر جدا گردید. برای اندازه‌گیری مقاومت از روش چهار پروب استفاده شد. دو پروب خارجی برای عبور جریان ۵۰ میلی‌آمپر و دو پروب داخلی برای اندازه‌گیری ولتاژ با استفاده از مولتی‌متر GW Instek GDM-8261A به کار رفتند. برای اندازه‌گیری مقاومت الکتریکی در دماهای مختلف، نمونه‌ی تهیه‌شده روی برد نگه‌دارنده و بر روی حسگر دمای PT100 قرار گرفت تا دما به‌طور دقیق اندازه‌گیری و توسط کنترل‌گر ثبت و به رایانه منتقل شود. چهار پروب با سیم‌های مسی یک‌میکرونی و چسب نقره به سطح نمونه متصل شدند و مجموعه برای جلوگیری از تبادل حرارتی، از بالا و پایین با عایق حرارتی پوشانده شد. با استفاده از سیرکولاتور و به‌کارگیری ماژول‌های پلتیر دمای نمونه به آهستگی از ۵۸ درجه سانتی‌گراد تا حدود ۱۰- درجه سانتی‌گراد کاهش یافت. در حین کاهش دما، ولتاژ الکتریکی در هر لحظه ثبت شد و مقاومت الکتریکی نمونه به کمک رابطه‌ی زیر محاسبه گردید:

$$R = \frac{V}{I} \qquad (۳)$$

نتایج و تحلیل داده‌ها

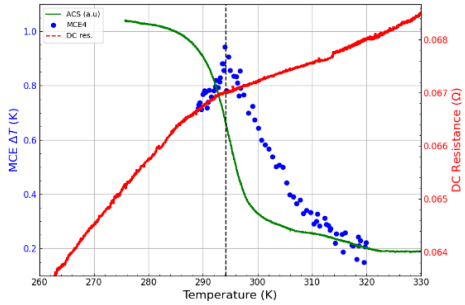
ابتدا تغییرات دمای نمونه‌ی گادولینیوم در اثر اعمال و حذف میدان مغناطیسی بررسی شد. شکل ۲ تغییر دمای بی‌دررو برحسب دما را برای دستگاه طراحی‌شده (نقاط توپر آبی) و داده‌های مرجع (مربع‌های قرمز توخالی) برای ماده گادولینیوم، به‌ترتیب در میدان‌های ۰/۸۵ و ۰/۸ تسلا نشان می‌دهد. تکرارپذیری نتایج با چهار آزمایش در روزهای مختلف تأیید شد.



شکل ۲ : تغییرات دمای ناشی از اثر مگنتوکالری در میدان ۰٫۸۵ تسلا (دستگاه ساخته‌شده، نقاط توپر آبی) با داده‌های مرجع [٦] در میدان ۰٫۸ تسلا (مربع‌های قرمز توخالی) مقایسه شده است.

در شکل ۲، دمای گذار اندازه‌گیری شده و مرجع تقریبا یکسان و در حدود ۲۹٤ کلوین است ولی مقدار ΔT_{ad} متفاوت است (۰.۹٤ کلوین برای اندازه‌گیری‌های انجام شده و بیش از ۲ کلوین برای اندازه‌گیری‌های منبع [٦]). این اختلاف در مقدار ΔT_{ad} می‌تواند ناشی از محدودیت‌های عایق‌بندی حرارتی، اعمال دستی و سرعت تغییر میدان مغناطیسی، یا تفاوت در خلوص نمونه باشد. در ادامه، پذیرفتاری مغناطیسی ماده اندازه‌گیری و با منابع [۱۲] مقایسه شد. خروجی دستگاه ما به‌صورت یک ولتاژ بر حسب دما ثبت می‌شود که آن ولتاژ با پذیرفتاری مغناطیسی (χ) نمونه رابطه‌ای خطی دارد. در اندازه‌گیری انجام شده که با رنگ سبز در شکل ۳ نشان داده شده است، با عبور از دمای گذار فاز از حالت فرومغناطیس به پارامغناطیس، مقدار پذیرفتاری کاهش می‌یابد. آزمون سنجش پذیرفتاری مغناطیسی دمای گذار نمونه را مشخص می‌کند و تطابق آن با بیشینه ΔT_{ad}، دقت دمایی و توانایی دستگاه در تشخیص ناحیه گذار فرومغناطیس به پارامغناطیس را تأیید می‌کند.

در مرحله بعد، مقاومت الکتریکی نمونه‌ی گادولینیوم به‌عنوان تابعی از دما اندازه‌گیری (شکل ۳، منحنی قرمز) و با داده‌های مرجع [۱۳] مقایسه شد. هر دو نمودار تغییر شیب در دمای کوری را نشان می‌دهند؛ این دما در آزمایش حاضر ۲۹٤ کلوین و در مرجع [۱۳] ۲۹۳ کلوین ثبت شده است. با توجه به اینکه تفاوت مقاومت الکتریکی و مقاومت ویژه تنها به یک ضریب هندسی وابسته است، مقایسه رفتار این دو کمیت امکان‌پذیر است. بروز تغییر شیب در مقاومت الکتریکی به‌خوبی نشان می‌دهد که گذار فاز در نمونه به‌درستی شناسایی شده است.



شکل ۳ : مقایسه‌ی اثر مگنتوکالری (رنگ آبی)، مقاومت الکتریکی(رنگ قرمز) و سنجش پذیرفتاری مغناطیسی(رنگ سبز) گادولینیوم در محدوده‌ی دمای کوری.

نتیجه گیری

در این پژوهش، دستگاه اندازه‌گیری مستقیم اثر مگنتوکالری طراحی و ساخته شد. نتایج نشان داد که دستگاه به‌درستی قادر به شناسایی دمای کوری گادولینیوم بوده و بیشینه‌ی تغییر دما بی‌دررو در این ناحیه مشاهده گردید. هم‌پوشانی نتایج با اندازه‌گیری‌های مقاومت الکتریکی و پذیرفتاری مغناطیسی، صحت عملکرد دستگاه در تشخیص دمای گذار را تأیید می‌کند. هرچند مقدار عددی تغییر دمای بی‌دررو اندازه‌گیری‌شده با داده‌های مرجع اختلاف دارد که می‌تواند ناشی از محدودیت‌های عایق‌بندی حرارتی ناکامل و دستی بودن اعمال میدان مغناطیسی باشد. این دستگاه به‌عنوان نمونه‌ی اولیه، قابلیت بهبود برای دستیابی به دقت بالاتر را داراست.

قدردانی

بدین‌وسیله از جناب آقای دکتر امیر بیات و سرکار خانم عاقله محمدی به‌سبب همکاری‌ها، راهنمایی‌های ارزشمند و حمایت‌های علمی‌شان در فرایند انجام این پژوهش صمیمانه قدردانی می‌کنیم.

مرجع‌ها

۱. Zhang, F., et al., *Advanced Magnetocaloric Materials for Energy Conversion: Recent Progress, Opportunities, and Perspective.* Advanced Energy Materials, 2024. **14**(21): p. 2400369.
۲. da Silva Pereira, C.S.G., *A Comprehensive Study of the Magnetocaloric Thermodynamic Properties of Bulk and Micrometric Gadolinium Samples*. 2024, Universidade do Porto (Portugal).
۳. Smith, A., et al., *Materials challenges for high performance magnetocaloric refrigeration devices.* Advanced Energy Materials, 2012. **2**(11): p. 12.۸۸-۱۳۱۸
۴. Szondy, D., *Magnetic fridge eliminates gases, drastically reduces energy use.* New Atlas, 2016.
۵. Sharma, V.K., *Iron-based low-cost magnetocaloric materials for near room temperature magnetic cooling*. 2019.
۶. Ghorbani Zavareh, M., et al., *Direct measurements of the magnetocaloric effect in pulsed magnetic fields: The example of the Heusler alloy Ni50Mn35In15.* Applied Physics Letters, 2015. **106**.(۷)
۷. Huang, B., *Design and Analysis of Magnetocaloric Devices for Cooling Heating and Waste Heat Recovery*. 2024, PhD Thesis.(TU Delft). https://doi. org/10.4233/uuid: 1027d16b-3082-438d.…
۸. Jeppesen, S., et al., *Indirect measurement of the magnetocaloric effect using a novel differential scanning calorimeter with magnetic field.* Review of Scientific Instruments, 2008. **79**.(۸)
۹. Tishin, A.M. and Y.I. Spichkin, *The magnetocaloric effect and its applications*. 2016: CRC Press.
۱۰. Mohammadi, A., *Analysis of Dynamic Magnetic Response of Fe3O4 Magnetic Nano Particles*. 2024, Tarbiat Modares University.
۱۱. Ghorbani, M., *Comparison of electrical resistivity and magnetic susceptibility methods in measuring the transition temperature of high Tc superconductors*. 2023, Tarbiat Modares University.
۱۲. McKenna, T., et al., *Domain effects near the order-disorder and order-order ferromagnetic transitions in Gd and Dy.* Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 1980. **20**(2): p. 207-211.
۱۳. Colvin, R. and S. Arajs, *Electrical Resistivity of Polycrystalline Gadolinium from 4 to 375 K.* physica status solidi (b), 1964 . :(۱)۴p. 37-42.

سنتز سبز نانوذرات مغناطیسی Fe_3O_4 با استفاده از عصاره گل ختمی و بررسی ویژگی‌های ساختاری، مغناطیسی و فوتوکاتالیستی

علیمحمدی، عرفانه ؛ زارعی مقدم ، رضا
دانشکده فیزیک دانشگاه اراک ، میدان بسیج ، بلوار کربلا ، اراک

چکیده

در این پژوهش، سنتز سبز نانوذرات مغناطیسی Fe_3O_4 به روش هم‌رسوبی و با استفاده از عصاره گل ختمی به‌عنوان عامل کاهنده و پایدارکننده انجام شد. ترکیبات زیستی موجود در عصاره، ضمن احیای یون‌های Fe^{2+} و Fe^{3+} ، از تجمع نانوذرات جلوگیری کرده و موجب تشکیل ساختاری پایدار می‌شوند. هدف این مطالعه، ارائه روشی ساده، کم‌هزینه و سازگار با محیط زیست برای تولید نانوذرات مگنتیت با ویژگی‌های مطلوب ساختاری و مغناطیسی بود. به‌منظور شناسایی و مشخصه‌یابی نمونه‌ها از تکنیک‌های XRD، FT-IR، VSM و UV-Vis استفاده شد. نتایج (XRD) تشکیل ساختار اسپینلی مکعبی مگنتیت با خلوص فازی بالا را تأیید کرد و اندازه متوسط بلورک‌ها حدود 35 نانومتر محاسبه شد. بررسی‌های (VSM) رفتار سوپرپارامغناطیسی و مغناطش اشباع حدود 60 emu/g را نشان داد. طیف (FT-IR) حضور پیوند Fe–O و گروه‌های عاملی مختلف منشأ گرفته از عصاره گل ختمی را آشکار ساخت که نقش آن‌ها در کنترل رشد و پایدارسازی نانوذرات را تأیید می‌کند. همچنین طیف(UV-Vis)جذب قابل توجهی در ناحیه فرابنفش و ابتدای ناحیه مرئی نشان داد.همچنین بازده فوتوکاتالیستی حدود 80% گزارش شد. نتایج حاکی از آن است که عصاره گل ختمی گزینه‌ای طبیعی، ارزان و مؤثر برای سنتز سبز نانوذرات Fe_3O_4 با کاربردهای بیومدیکال و کاتالیستی است.

واژه های کلیدی: *سنتز سبز، نانوذرات Fe_3O_4 ، عصاره گل ختمی*

Green synthesis of Fe_3O_4 magnetic nanoparticles using Althaea officinalis extract and investigation of structural, magnetic and photocatalytic properties

Alimohammadi, Erfaneh; Zarei Moghadam, Reza
Faculty of Physics, Arak University, Basij Square, Karbala Boulevard, Arak

Abstract

In this study, green synthesis of Fe_3O_4 magnetic nanoparticles was carried out by co-precipitation method using marshmallow extract as a reducing and stabilizing agent. The bio-compounds in the extract, while reducing $^{+}Fe^{2}$ and $^{+}Fe^{3}$ ions, prevent the aggregation of nanoparticles and lead to the formation of a stable structure. The aim of this study was to provide a simple, low-cost and environmentally friendly method for the production of magnetite nanoparticles with desirable structural and magnetic properties. XRD, FT-IR, VSM and UV-Vis techniques were used to identify and characterize the samples. The (XRD) results confirmed the formation of a cubic spinel structure of magnetite with high phase purity and the average crystallite size was calculated to be about 35 nm. (VSM) studies showed superparamagnetic behavior and saturation magnetization of about 60 emu/g. The FT-IR spectrum revealed the presence of Fe–O bond and various functional groups originating from the marshmallow extract, confirming their role in controlling the growth and stabilization of nanoparticles. The (UV-Vis) spectrum also showed significant absorption in the ultraviolet and early visible regions. Also the photocatalyst efficiency is obtained 80%. The results indicate that marshmallow extract is a natural, cheap and effective option for the green synthesis of Fe_3O_4 nanoparticles with biomedical and catalytic applications.

***Keywords**: Green synthesis, Fe_3O_4 nanoparticles, Althaea officinalis extract*

PACS No.80

مقدمه

در سال‌های اخیر، سنتز سبز نانوذرات به دلایل متعددی از جمله ایمنی بالا، پایداری زیست‌محیطی و هزینه پایین نسبت به روش‌های شیمیایی و فیزیکی، توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده است [1]. برخی عصاره‌های گیاهی حاوی ترکیباتی نظیر پلی‌فنول‌ها، فلاونوئیدها، قندهای کاهنده و اسیدهای آمینه هستند که قادر به احیای یون‌های فلزی و تثبیت نانوذرات بوده و سمیتی از خود نشان نمی‌دهند[2]. در میان نانوذرات اکسید فلزی، نانوذرات مگنتیت Fe_3O_4 به دلیل ویژگی‌های مغناطیسی منحصربه‌فرد، زیست‌سازگاری، پایداری شیمیایی و کاربرد در سیستم‌های جداسازی مغناطیسی، دارورسانی هدفمند و فوتوکاتالیست‌های قابل بازیابی، بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند [3].با این حال، روش‌های سنتز شیمیایی معمولاً نیازمند عوامل کاهنده سمی مانند هیدرازین و سدیم بوروهیدرید هستند که خطراتی برای محیطزیست وسلامت انسان دارند [4]. در مقابل، سنتز سبز با استفاده از عصاره‌های گیاهی، میکروارگانیسم‌ها و سایر منابع زیستی ،روشی سازگار با

محیطزیست، مقرون‌به‌صرفه و ایمن است و همچنین راهکاری مناسب برای تولید نانوذرات با آلودگی کمتربه شمار می‌رود. [5-6]. ترکیبات فنولی و فلاونوئیدی موجود در عصاره‌های گیاهی می‌توانند همزمان به‌عنوان عامل کاهنده و پایدارکننده عمل کنند [7].

گل ختمی [1]گیاهی دارویی با خواص ضدالتهابی، آنتی‌اکسیدانی و ضد میکروبی است که حاوی مقادیر قابل توجهی پلی‌فنول، فلاونوئید، موسین و پلی‌ساکارید می‌باشد [8]. رنگدانه‌های آنتوسیانینی و ترکیبات آنتی‌اکسیدانی موجود در عصاره گل ختمی قابلیت برهمکنش با یون‌های فلزی و کاهش آن‌ها را داشته واز رشد و تجمع آن‌ها جلوگیری می‌کنند.

در این پژوهش، برای اولین بار سنتز سبز نانوذرات Fe_3O_4 با عصاره گل ختمی به روش همرسوبی انجام شده و ویژگی‌های ساختاری، مغناطیسی و فوتوکاتالیستی آنها مورد بررسی جامع قرار گرفته است.Fe_3O_4 دارای ساختار اسپینلی معکوس مکعبی است که یون‌های Fe^{2+}و Fe^{3+} در مکان‌های بلوری مختلف قرار می‌گیرند. این ساختار عامل اصلی خواص فری مغناطیسی ویژه مگنتیت است. همچنین فازهای دیگری مانند γ-Fe_2O_3 و α-Fe_2O_3 ممکن است در سنتز تشکیل شوند که هر یک دارای ساختار بلوری و خواص مغناطیسی متفاوتی هستند، بنابراین شناسایی فاز خالص Fe_3O_4 توسط XRD ضروری است. با توجه به این که هدف مقاله بررسی ویژگی های فوتوکاتالیستی، مغناطیسی وساختاری نانومواد است ،در نتیجه از متیل اورانژ برای بررسی فعالیت فوتوکاتالیستی استفاده شده است.همچنین ازآنالیزهایی نظیرپراش پرتو ایکس(XRD، Philips,pw3040) که نشان‌دهنده کریستالیته مناسب نانوذرات است. طیف‌سنجی مادون قرمز تبدیل فوریه (FT-IR) با دستگاه (BURKER.alfa) که تأیید حضورمؤثر گروه‌های عاملی فعال را برعهده دارد. (UV/Vis) با دستگاه طیف سنجی (Nano Mabna Iranian) که به بررسی ویژگی‌های جذبی نانوذرات میپردازد و برای مغناطیس سنج ارتعاشی(VSM) از دستگاه (MDK made in Iran)استفاده شده است.

مواد

مواد مورد استفاده شامل ($FeCl_3{\cdot}6H_2$) ، ($FeSO_4{\cdot}7H_2O$)، سدیم هیدروکسید (NaOH) با خلوص 99٪ از شرکت مرک (Merck)و آب دیونیزه (DI) هستند. گل ختمی خشک شده از عطاری‌های معتبر شهر اراک تهیه گردید.

روش عصاره گیری

10گرم پودر گل ختمی (پس از آسیاب کردن) با 200 میلی‌لیتر آب دیونیزه مخلوط و در دمای 100 درجه سلسیوس به مدت 75 دقیقه توسط همزن مغناطیسی هم زده شد. سپس محلول در دمای اتاق سرد شده واز کاغذ صافی واتمن عبور داده شد تا عصاره یکنواخت و عاری از ذرات جامد به دست آید. عصاره در دمای 4 درجه سلسیوس نگهداری شد .

روش سنتز سبز نانوذرات Fe_3O_4

ابتدا0/01 مول ($FeCl_3{\cdot}6H_2O$) و0/007مول($FeSO_4{\cdot}7H_2O$) (نسبت مولی 2:1) در 100 میلی‌لیتر آب دیونیزه حل شدند و به مدت 30 دقیقه هم زده شدند. سپس 10 میلی‌لیتر عصاره گل ختمی به محلول اضافه گردید. پس از آن، محلول سدیم هیدروکسید 1 مولار به تدریج اضافه شد تا pH به 11 برسد. واکنش به مدت 20 دقیقه در دمای 80درجه سلسیوس ادامه یافت.در این مرحله، رسوب سیاه رنگ Fe_3O_4 تشکیل شد. رسوب سیاه رنگ حاصل پس از3بارسانتریفیوژ 3000دوردر10 دقیقه، در آون با دمای 80 درجه سلسیوس به مدت 12 ساعت خشک گردید. روش سنتز درشکل 1 نشان داده شده است.



شکل 1: سنتزنانوذراتFe_3O_4

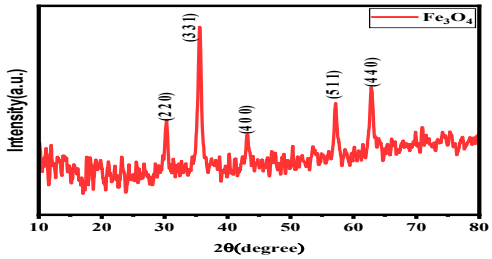
مباحث ونتایج

آنالیز پراش پرتو ایکس (XRD)

الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) نمونه در شکل 2 نشان داده شده است. قله‌های پراش در زوایای 30.2^o، 35.5^o، 43.2^o، 57.0^o و 62.8^o به ترتیب به صفحات (220)، (331)، (400)، (511) و (440) نسبت داده می‌شوند که مشخصه ساختار اسپینل مکعبی مگنتیت هستند که با ICDD Card No. 96-900-6317 مطابقت دارند. شدت بالای قله (331) نشان‌دهنده رشد ترجیحی بلورها در این راستا می‌باشد. عدم حضور قله‌های اضافی مربوط به فازهای اکسیدی دیگر آهن، خلوص فازی بالای نمونه را تأیید می‌کند.اندازه بلورک با استفاده از معادله شرر (K=0.9) (1) محاسبه شد.که D اندازه بلورک و K و $\lambda(Cuk_\alpha)$ به ترتیب برابر است با 0/9و1/54060نانومتر و β نیز پهنای پیک در نیمه ارتفاع ماکزیمم (FWHM) است میانگین اندازه بلورک حدود 35 نانومتر به دست آمد :

$$D = K\lambda/(\beta \cos \theta) \quad (1)$$

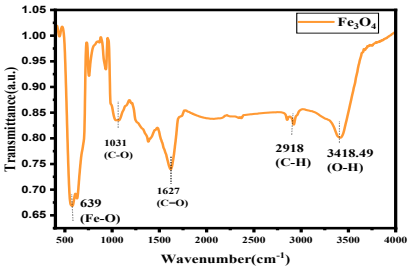
[1] Althaea officinalis



شکل 2: نمودار xrd، نانوذرات Fe3O4

طیف‌سنجی تبدیل فوریه فروسرخ(FT-IR)

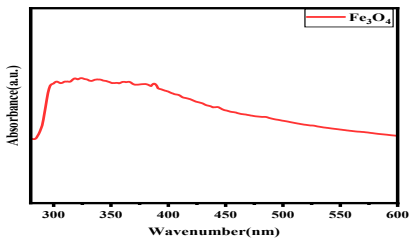
طیف FTIR نانوذرات Fe_3O_4 در شکل 3 ارائه شده است.باند جذبی مشاهده شده در $639cm^{-1}$ به ارتعاش کششی پیوند Fe–O نسبت داده می‌شود که تشکیل موفق ساختار مگنتیت را تأیید می‌کند. باندهای $1031\ cm^{-1}$ و $1627\ cm^{-1}$ به ترتیب مربوط به گروه‌های C–O و C=O بوده وهمچنین باند $2918\ cm^{-1}$ به ارتعاش کششی پیوند C–H و باند پهن $3418cm^{-1}$ به ارتعاش کششی گروه‌های هیدروکسیل (O–H) نسبت داده می‌شود. مشاهده باندهای مربوط به گروه‌های C–O، C=O، C–H و O–H در طیف FTIR ناشی از حضور ترکیبات زیستی باقی‌مانده از عصاره گل ختمی بر سطح نانوذرات است. حضور این گروه‌های عاملی ضمن جلوگیری از تجمع نانوذرات،بیانگر جذب مولکول‌های آلی و آب بر سطح نانوذرات ، نقش آن‌ها در افزایش پایداری کلوئیدی و فراهم شدن مراکز فعال سطحی برای کاربردهای فوتوکاتالیستی می‌شود.



شکل 3. نمودار آنالیز FTIR از Fe_3O_4

بررسی طیف سنجی (UV/Vis)

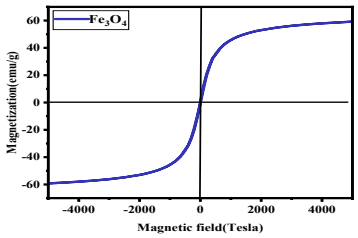
طیف UV–Vis نانوذرات Fe_3O_4 در شکل 4 ارائه شده است. نتایج نشان داد که جذب قابل توجهی در ناحیه فرابنفش و ابتدای ناحیه مرئی است. بیشترین جذب در محدوده 300–350 نانومتر مشاهده می‌شود که به انتقالات الکترونی مرتبط با یون‌های Fe^{2+}و Fe^{3+} در ساختار اسپینلی مگنتیت نسبت داده می‌شود. با افزایش طول موج، شدت جذب به تدریج کاهش می‌یابد که این رفتار، تشکیل موفق نانوذرات Fe_3O_4 و ویژگی‌های اپتیکی مناسب آن‌ها را تأیید می‌کند.



شکل 4: نمودار آنالیز UV–Vis از Fe_3O_4

مغناطیس سنج ارتعاشی(VSM)

منحنی مغناطش نانوذرات Fe_3O_4 اندازه‌گیری شده توسط VSM در شکل 5 ارائه شده است. نتایج نشان می‌دهد که مغناطش نمونه با افزایش میدان مغناطیسی به‌سرعت افزایش یافته و در میدان‌های بالا به مقدار اشباع حدود 60 emu/g می‌رسد. اندازه کوچک ذرات باعث می‌شود مقدار میدان واداردندگی و مغناطش پسماند تقریباً صفر شود .همچنین کوچک بودن حلقه پسماند و نزدیک بودن منحنی به رفتار خطی نشان‌دهنده رفتار سوپرپارامغناطیسی نانوذرات می‌باشد. این رفتار علاوه بر اندازه کوچک ذرات،ناشی از تشکیل نانوذرات تک‌دامنه مغناطیسی است. همچنین پوشش آلی حاصل از عصاره گل ختمی برهمکنش مغناطیسی بین ذرات را کاهش می‌دهد.



شکل 5. نمودار آنالیز VSM از Fe_3O_4

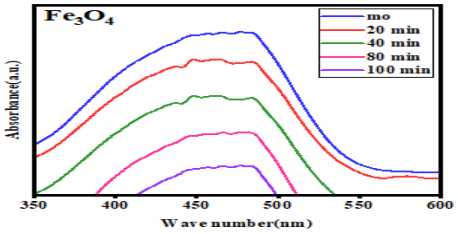
فعالیت فوتوکاتالیستی

فعالیت فوتوکاتالیستی نانوذرات Fe_3O_4 با تخریب رنگ متیل اورانژ تحت تابش لامپ زنون 50 وات بررسی شد. ابتدا نانوذرات در محلول متیل اورانژ با غلظت اولیه 15 ppm حل شده و پیش از تابش، سوسپانسیون پس از 30 دقیقه جذب در تاریکی برای تعادل جذب–واجذب میان مولکول‌های رنگ و سطح فوتوکاتالیست(به منظور افزایش بازدهی)، حال نمونه تحت تابش قرار گرفت و کاهش جذب رنگ هر 20 دقیقه یک بار توسط UV-Vis اندازه‌گیری شد. بازده فوتوکاتالیستی حدود 80% از رابطه (1)بدست آمد:

$$\%degradation = \left((A_t / A_0) \times 100\right) \qquad (1)$$

A_0 . جذب آغازین وA_t جذب در زمان t را نشان می دهد. کاهش تدریجی شدت جذب متیل اورانژ نشان‌دهنده تخریب مؤثر مولکول‌های رنگ در حضور نانوذرات Fe_3O_4 است.این عملکرد به تولید گونه‌های فعال اکسیدکننده و سطح ویژه مناسب نانوذرات نسبت داده می‌شود. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد نانوذرات سنتز شده دارای پتانسیل مناسبی برای حذف

آلاینده‌های آلی از محیط‌های آبی هستند.در شکل 6 تخریب رنگ متیل اورانژ توسط نانوذرات Fe_3O_4 نشان داده شده است.



شکل 6: فعالیت فوتوکاتالیستی نانوذراتFe_3O_4

نتیجه گیری

در این پژوهش، نانوذرات مغناطیسی سبزFe_3O_4 با استفاده از عصاره گل ختمی تهیه شدند. عصاره گیاه، نقش عامل کاهنده و پایدارکننده را ایفا کردند. آنالیز XRD تشکیل ساختار اسپینلی مکعبی و اندازه بلورک حدود 35 نانومتر را نشان داد. نتایج FTIR حضور گروه‌های عاملی گیاهی روی سطح نانوذرات را تأیید کرد. بررسی طیف UV-Vis جذب مناسب در ناحیه فرابنفش را نشان داد. همچنین نتایج VSM رفتار سوپرپارامغناطیسی با مغناطش اشباع حدود 60 emu/g را نشان داد . بازده فوتوکاتالیستی نیز حدود 80% گزارش شد. به طور کلی، نتایج این پژوهش نشان داد که عصاره گل ختمی می‌تواند به عنوان یک ماده زیستی ارزان، در دسترس و دوستدار محیط زیست برای سنتز نانوذرات Fe_3O_4 مورد استفاده قرار گیرد و نانوذرات حاصل دارای پتانسیل کاربرد در سامانه‌های فوتوکاتالیستی هستند.

مرجع‌ها

[1]Krishnia, L., P. Thakur, and A. Thakur, Synthesis of nanoparticles by physical route, in Synthesis and applications of nanoparticles. 2022, Springer. p. 45-59.
[2]Gnanasangeetha, D. and M. Suresh, A review on green synthesis of metal and metal oxide nanoparticles. Nature Environment and Pollution Technology, 2020. 19(5): p. 1789-1800.
[3]Al-darwesh, M.Y., S.S. Ibrahim, and M.A. Mohammed, A review on plant extract mediated green synthesis of zinc oxide nanoparticles and their biomedical applications. Results in Chemistry, 2024: p. 101368.
[4]Roychowdhury, A., et al., Magnetically addressable fluorescent Fe3O4/ZnO nanocomposites: Structural, optical and magnetization studies. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2013. 74(6): p. 811-818.
[5]Altaf, S., et al., Removal of levofloxacin from aqueous solution by green synthesized magnetite Fe_3O_4 nanoparticles using Moringa oleifera. Ecotoxicol. Environ. Saf., 2021. 226: p. 112826.
[6]Prasad, C., et al., Bio inspired green synthesis of Ni/Fe_3O_4 magnetic nanoparticles using Moringa oleifera leaves extract. J. Alloys Compd., 2017. 700: p. 252-258.
[7]Cuana, R., et al., Green Synthesis of Fe_3O_4/chitosan nanoparticles utilizing Moringa oleifera extracts. ECS J. Solid State Sci. Technol., 2022.
[8] Nguyen, M.M. and S. Karboune, Combinatorial interactions of essential oils enriched with polyphenols. Antioxidants, 2023.

سنتز سبز نانوکامپوزیت $ZnO:Dy(1.5\%)/Fe_3O_4/Biochar$ با استفاده از عصاره گیاه جاجق و بررسی ویژگی‌های ساختاری، مغناطیسی و فوتوکاتالیستی

منتظری، منیژه؛ قلی پور شهرکی، مهران؛ صمدی، هستی ؛

گروه فیزیک دانشکده علوم، دانشگاه اراک، اراک، .38156- 88349، ایران

چکیده

در این *پژوهش، نانوکامپوزیت اکسید روی دوپ‌شده با 1.5٪ دیسپروزیوم/مگنتیت/**بایوچار*** (ZDFB-1.5) *به روش سنتز سبز و با استفاده از عصاره گیاه جاجق به‌عنوان عامل کاهنده و پایدارکننده تهیه شد. هدف این مطالعه، بررسی اثر هم‌زمان دوپینگ دیسپروزیوم، حضور Fe_3O_4 و بستر بایوچار بر ویژگی‌های ساختاری، مغناطیسی و فوتوکاتالیستی سامانه بود. نتایج XRD تشکیل فاز ورتزایت ZnO و فاز اسپینلی Fe_3O_4 را تأیید کرد و اندازه بلورک حدود 28.8 nm به‌دست آمد. طیف FT-IR حضور گروه‌های عاملی اکسیژنی بایوچار و پیوندهای فلز–اکسیژن را نشان داد. همچنین، نتایج VSM رفتار مغناطیسی نرم با وادارندگی و مغناطش پسماند پایین را آشکار کرد که نشان‌دهنده قابلیت بازیابی مغناطیسی مناسب نمونه است. آزمون فوتوکاتالیستی با متیل اورانژ نیز بیانگر عملکرد مطلوب نانوکامپوزیت تحت تابش نوری بود. بعلاوه این نانوکامپوزیت بازده 71٪ را نشان داده که می تواند ناشی از هم‌افزایی Dy ، Fe_3O_4و Biochar نسبت داده شود.*

واژه‌های کلیدی :سنتز سبز، ZnO:Dy، Fe_3O_4، بایوچار، نانوکامپوزیت، فوتوکاتالیست، جداسازی مغناطیسی

Green Synthesis of ZnO:Dy(1.5%)/Fe₃O₄/Biochar Nanocomposite Using Jajagh (Demavandia pastinacifolia) Plant Extract and Investigation of Its Structural, Magnetic, and Photocatalytic Properties

Montazeri,Manijeh ; Gholipour Shahraki , Mehran, Samadie, Hastie;

Department of Physics, Faculty of Science, Arak University, Arak, 38156 88349 Iran

Abstract

This study reports the green synthesis of ZnO:Dy(1.5%)/Fe₃O₄/Biochar nanocomposite using Demavandia pastinacifolia (Jajagh) plant extract as a reducing and stabilizing agent. The synergistic effects of Dy doping, Fe₃O₄, and biochar on the structural, magnetic, and photocatalytic properties of the nanocomposite were systematically investigated. XRD analysis confirmed the formation of hexagonal wurtzite ZnO and spinel Fe₃O₄ phases; the crystallite size estimated by the Debye–Scherrer equation was approximately 28.8 nm. The absence of distinct Dy-related peaks suggests incorporation of Dy into the ZnO lattice or its high dispersion in the composite. FT-IR spectra verified oxygen-containing functional groups from biochar and metal–oxygen bonds in the nanocomposite. VSM measurements revealed soft magnetic behavior with low coercivity and remanence, confirming the suitability of the material for magnetic recovery after photocatalysis. Photocatalytic experiments using methyl orange as a model pollutant demonstrated promising degradation performance under light irradiation, attributed to improved charge separation and the synergistic contributions of Dy, Fe₃O₄, and biochar. Furthermore, the photocatalyst efficiency is reported about 71%.

Keywords: *green synthesis, ZnO:Dy(1.5%), Fe₃O₄, biochar, nanocomposite, photocatalysis,*

PACS No.

مقدمه

در سال‌های اخیر، سنتز سبز نانومواد به دلیل کاهش مصرف مواد سمی، سازگاری بیشتر با محیط‌زیست و هزینه کمتر نسبت به روش‌های شیمیایی متداول، مورد توجه گسترده قرار گرفته است. در این رویکرد، عصاره‌های گیاهی به دلیل دارا بودن ترکیبات زیست‌فعال مانند پلی‌فنول‌ها و فلاونوئیدها می‌توانند به‌عنوان عوامل کاهنده و پایدارکننده در تشکیل نانوذرات عمل کنند و فرایند سنتز

را به روشی ساده و دوستدار محیط‌زیست تبدیل نمایند [1]. ZnO **به‌عنوان یکی از نیمه‌رساناهای مهم در فتوکاتالیست شناخته می‌شود، اما بازترکیب سریع** زوج‌های الکترون–حفره محدودیت **اصلی آن است. در این میان، افزودن Fe_3O_4 به ساختار ZnO می‌تواند ضمن ایجاد خاصیت مغناطیسی، به بهبود انتقال بار و ارتقای عملکرد فتوکاتالیستی کمک‌کند[2].** دوپینگ ZnO باعناصرنادرخاکی مانند دیسپروزیوم Dy به‌عنوان راهکاری مؤثر برای کاهش بازترکیب حامل‌های بار و افزایش فعالیت نوری شناخته می‌شود. همچنین، Biocharبا ساختار متخلخل، گروه‌های عاملی سطحی و توانایی بالای جذب، می‌تواند نقش پشتیبان مؤثر برای بهبود عملکرد ZnO ایفا کند[3]. از سوی دیگر نیزحضور بایوچار در نانوکامپوزیت ، باعث توزیع بهتر نانوذرات، افزایش تعداد سایت‌های فعال و بهبود جذب آلاینده‌ها می‌شود. همچنین به دلیل رسانایی الکترونی و ساختار آروماتیک خود، انتقال الکترون را تسهیل کرده و با کاهش بازترکیب زوج الکترون–حفره، کارایی فتوکاتالیستی را به‌طور قابل توجهی افزایش می‌دهد[4] .در نتیجه، استفاده همزمان از Dy ، Fe_3O_4و Biochar می‌تواند به تولید سامانه‌ای با جدایش بار بهتر، جذب سطحی بیشتر و قابلیت بازیابی مغناطیسی منجر شود. [5]. بعلاوه، نوآوری اصلی این پژوهش در سنتز سبز و به‌کارگیری یک نانوکامپوزیت چندجزئی $ZnO:Dy(1.5\%)/Fe_3O_4$ تثبیت‌شده بر بستر Biochar است. این هم‌افزایی موجب افزایش تعداد سایت‌های فعال، بهبود جذب آلاینده‌ها، کاهش بازترکیب حامل‌های بار و تسهیل بازیابی کاتالیست پس از فرآیند می‌شود. از این رو، طراحی این نانوکامپوزیت هیبریدی می‌تواند رویکردی نوین برای دستیابی به عملکرد بالاتر در حذف آلاینده‌ها و فرآیندهای فتوکاتالیستی ارائه دهد.**بر این اساس، در این پژوهش** نانوکامپوزیت $ZnO:Dy(1.5\%)/Fe_3O_4$/Biochar به روش سنتز سبز و با استفاده از عصاره گیاه جاجق تهیه شد تا اثر همزمان دوپینگ دیسپروزیوم، حضور فاز مغناطیسی Fe_3O_4 و بستر بایوچار بر ویژگی‌های ساختاری، مغناطیسی و فوتوکاتالیستی آن بررسی شود.در این مطالعه، متیل اورانژ به‌عنوان آلاینده مدل انتخاب شد و نمونه‌های سنتز شده با استفاده از آزمون‌های XRD ، FT-IR، UV-Vis و VSM مورد شناسایی و ارزیابی قرار گرفتند.

مواد

مواد اولیه مورد استفاده شامل $Zn(NO_3)_2{\cdot}6H_2O$ ، $Dy(NO_3)_3{\cdot}xH_2O$، $FeCl_3{\cdot}6H_2O$، $FeCl_2{\cdot}4H_2O$ و NaOH با خلوص 99٪ از شرکت Merck بود. آب دیونیزه به‌عنوان حلال استفاده شد و بایوچار نیز از پیرولیز زیست‌توده گیاه جاجق در دمای 400 °C تهیه شد.

روش عصاره گیری و تهیه بایوچار

گیاه جاجق (DP) پس از جمع‌آوری، ابتدا با آب شهری و سپس آب دیونیزه شستشو داده شد تا آلودگی‌های سطحی و گرد و غبار آن حذف شود. سپس نمونه‌ها در سایه و با جریان هوای ملایم خشک شدند. مقدار 2.5 گرم از گیاه خشک و آسیاب‌شده در 100 میلی‌لیتر آب دیونیزه به مدت 25 دقیقه و در دمای حدود 80 درجه سانتیگرادتحت هم‌زدن مغناطیسی قرار گرفت تا ترکیبات زیست‌فعال آن استخراج شود. در نهایت، محلول حاصل پس از فیلتراسیون با کاغذ واتمن، به‌عنوان عصاره گیاهی برای سنتز سبز نانوذرات مورد استفاده قرار گرفت . بایوچار از 15 گرم گیاه خشک شده جاجق تهیه شد. ابتدا نمونه‌ها شسته، و سپس خشک شدند؛ سپس در شرایط پیرولیز با اکسیژن محدود، در بوته و در دمای 400 درجه سانتیگراد با نرخ گرمایش 5درجه سانتیگراد بر دقیقه به مدت 2 ساعت حرارت داده شدند تا به بایوچار متخلخل تبدیل شوند. بایوچار حاصل پس از سرد **شدن در 100 میلی‌لیتر آب دیونیزه معلق شد، هم‌زده و فیلتر گردیدوپس از فیلتراسیون برای سنتز نانوکامپوزیت استفاده شد.**

سنتز سبز نانوکامپوزیت ZnO/Fe_3O_4

برای سنتز $ZnO:Dy(1.5\%)$ ، ابتدا محلول‌های نمک روی و دیسپروزیوم در آب دیونیزه تهیه و روی همزن مغناطیسی به‌خوبی مخلوط شدند. سپس با افزودن عصاره گیاهی، pH**سامانه تا 10 تنظیم شد تا فرایند تشکیل رسوب آغاز شود. رسوب حاصل پس از سانتریفیوژ، شستشو و خشک‌کردن، در دمای 600 درجه**

سانتیگراد تحت بازپخت قرار گرفت تا ساختار بلوری نمونه بهبود یابد و نانوذرات ZnO دوپ‌شده با دیسپروزیوم به‌دست آید[6].

سنتز Fe_3O_4

برای سنتز Fe_3O_4 ، نمک‌های آهن (II)و آهن (III)با نسبت مولی 1:2 در آب دیونیزه حل و با یکدیگر مخلوط شدند. سپس عصاره گیاهی به محلول افزوده شد و با تنظیم pH ، تشکیل رسوب قهوه‌ای مایل به سیاه آغاز شد. رسوب حاصل پس از شستشو با آب دیونیزه و خشک‌کردن در دمای 80 **درجه سانتیگراد** ، به‌عنوان نانوذرات Fe_3O_4مورد استفاده قرار گرفت[7].

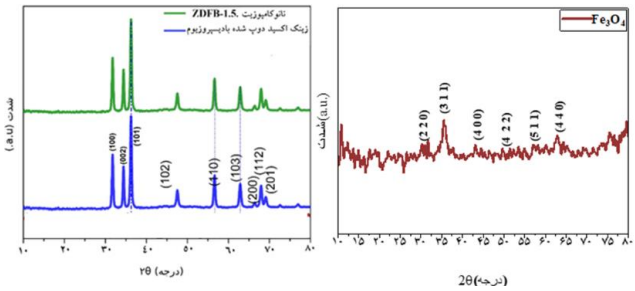
سنتز نانوکامپوزیت نهایی

در مرحله نهایی، ZnO:Dy، Fe_3O_4و Biochar با نسبت تقریبی 60:20:20 با یکدیگر ترکیب شدند تا نانوکامپوزیت ZnO:Dy(1.5%)/Fe_3O_4/Biocharبه‌دست آید. مخلوط نهایی پس از هم‌زدن، سانتریفیوژ و شستشو، در آون خشک شد **تا محصول نهایی برای انجام آزمون‌های ساختاری، مغناطیسی و فتوکاتالیستی آماده شود[8].**

مباحث ونتایج

آنالیز پراش پرتو ایکس

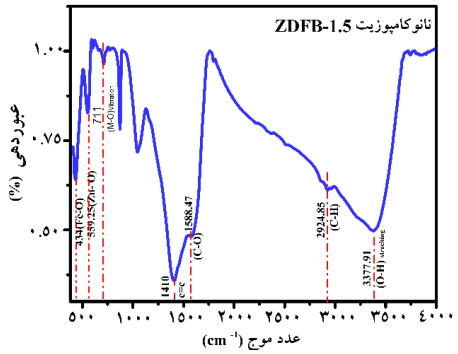
الگوی پراش پرتوایکس نمونه نشان داد که نانوکامپوزیت شامل فاز ZnO با ساختار ورتزایت هگزاگونال و فاز Fe_3O_4با ساختار اسپینلی مکعبی است. پیک‌های شاخص ZnO در حدود 31.7، 34.4 و 36.2 درجه و پیک‌های Fe_3O_4 در نواحی 30.1، 35.5 و 43.1 درجه مشاهده شدند که این موضوع تشکیل موفق فازهای موردنظر را تأیید می‌کند.
عدم مشاهده پیک مستقل مربوط به Dy می‌تواند به جانشینی آن در شبکه ZnOیا پراکندگی مناسب آن در ساختار نانوکامپوزیت نسبت داده شود. همچنین، بایوچار به دلیل ماهیت آمورف خود پیک بلوری مشخصی ایجاد نمی‌کند[9]. اندازه بلورک نانوکامپوزیت نیز بر اساس رابطه دبای–شرر حدود 28/.8 nmبرآورد شد که نشان‌دهنده تشکیل ذرات نانومتری است .هم‌پوشانی جزئی برخی پیک‌های Fe_3O_4 با ZnO نشان می‌دهد که فاز مغناطیسی به‌خوبی در ساختار نانوکامپوزیت پراکنده شده است.



شکل 1: الگوی پراش پرتو ایکس(XRD) نانوکامپوزیت.ZDFB-1.5

طیف‌سنجی تبدیل فوریه فروسرخ

طیف FTIR نانوکامپوزیت در بازه 400 تا 4000 cm^{-1} وجود گروه‌های عاملی سطحی و پیوندهای فلز–اکسیژن را نشان داد. باندهای مشاهده‌شده در حدود 3379.91، 1588 و 1410 cm^{-1} به گروه‌های اکسیژنی سطح بایوچار نسبت داده می‌شوند و می‌توانند در جذب آلاینده و تثبیت نانوذرات نقش داشته باشند.
همچنین، باندهای 711، 559.25 و 434 cm^{-1} به ارتعاشات پیوندهای فلز–اکسیژن مربوط هستند و تشکیل موفق فازهای ZnO و Fe_3O_4 را تأیید می‌کنند. این نتایج نشان می‌دهد که بایوچار نه‌تنها در ساختار نانوکامپوزیت حضور دارد، بلکه با فراهم کردن گروه‌های عاملی مناسب به استقرار و پایداری فازهای معدنی نیز کمک کرده است.نتایج آن در شکل (2) ارائه شده است.

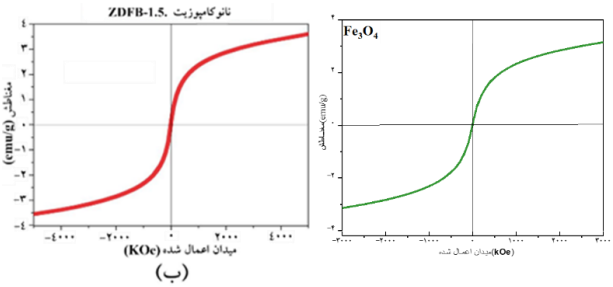


شکل 2. طیف فروسرخ تبدیل فوریه (FT-IR) نانوکامپوزیت .ZDFB-1.5

مغناطیس سنج ارتعاشی

منحنی‌های VSM نشان دادند که هر دو نمونه رفتار مغناطیسی نرم با وادارندگی و مغناطش پسماند بسیار کم دارند. مقدار مغناطش اشباع برای نمونه Fe_3O_4/Dy حدود 3.5–3.6 emu/g و برای

نانوکامپوزیت ZnO:Dy/Fe₃O₄/Biochar حدود 4.0–4.1 emu/g برآورد شد که بیانگر قابلیت مناسب بازیابی مغناطیسی نمونه‌ها پس از فرایند فوتوکاتالیستی است.



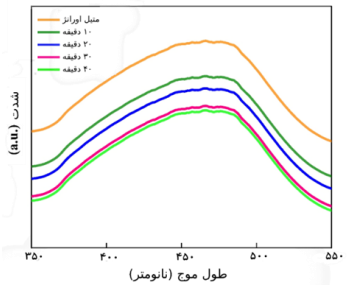
شکل 3: منحنی مغناطش- میدان (VSM) نانوکامپوزیت ZDFB-1.5

بررسی اثر فتوکاتالیستی

برای ارزیابی فعالیت فتوکاتالیستی، از محلول متیل اورانژ با غلظت 15ppm استفاده شد. مقدار 0.002 **g** از نمونه به محلول افزوده شد و پیش از تابش، سوسپانسیون به مدت 30 دقیقه در تاریکی قرار گرفت تا تعادل جذب–واجذب برقرار شود؛ سپس نمونه تحت تابش قرار گرفت و تغییرات جذب در فواصل 10 **دقیقه ای** بررسی شد. نتایج نشان داد که با افزایش زمان تابش، میزان تخریب متیل اورانژ افزایش می‌یابد که بیانگر عملکرد مطلوب نانوکامپوزیت است. این رفتار را می‌توان به اثر هم‌افزای Dy در بهبود جدایش الکترون–حفره، نقش Fe_3O_4 در تسهیل انتقال بار و امکان بازیابی مغناطیسی نسبت داد. در حالی که ساختار متخلخل بایوچار با فراهم کردن سطح ویژه بالا و تعداد زیاد سایت‌های فعال، ظرفیت جذب آلاینده‌ها را افزایش می‌دهد و تماس بین آلاینده و فوتوکاتالیست را بهبود می‌بخشد. همچنین، شبکه متخلخل بایوچار انتقال الکترون را تسهیل کرده و با کاهش بازترکیب زوج‌های الکترون–حفره، تولید گونه‌های فعال اکسیدکننده را افزایش می‌دهد که در نهایت موجب ارتقای فعالیت فوتوکاتالیستی می‌شود.بازده فوتوکاتالیستی این نانوکامپوزیت 71٪ گزارش شد که ازرابطه (1) بدست آمده است[10]:

$$\%degradation = \left((A_t / A_0) \times 100\right) \qquad (1)$$

A_0 جذب آغازین و A_t جذب در زمان t را نشان می دهد.



شکل 4: تغییرات بازده تخریب فوتوکاتالیستی متیل اورانژ در حضور نانوکامپوزیت ZDFB-1.5 بر حسب زمان تابش.

نتیجه گیری

دراین پژوهش، نانوکامپوزیت ZnO:Dy(1.5%)/Fe₃O₄/Biochar به روش سنتز سبز و با استفاده از عصاره گیاه جاجق با موفقیت تهیه شد. نتایج XRD تشکیل فازهای ZnO و Fe_3O_4 را تأیید کرد و FT-IR نیز حضور گروه‌های عاملی سطحی بایوچار و پیوندهای فلز–اکسیژن را نشان داد. اندازه بلورک نمونه حدود 28.8نانومتر برآورد شد و آزمون VSM رفتار مغناطیسی نرم با امکان بازیابی آسان نمونه را تأیید کرد. همچنین، نتایج فوتوکاتالیستی نشان داد که این نانوکامپوزیت توانایی مناسبی در تخریب متیل اورانژ دارد و بازده 71٪ را نشان داده که می‌تواند به اثر هم‌افزای Dy ، Fe_3O_4و Biochar نسبت داده شود.

مرجع ها

1. <*Ahir2024.pdf*>. 2024.
2. Zhao, A., et al., *Magnetic Adsorbent Fe(3)O(4)/ZnO/LC for the Removal of Tetracycline and Congo Red from Aqueous Solution.* Molecules, 2023. **28**(18).
3. Liu, X., et al., *Efficient photocatalytic degradation of tetracycline using magnetic biochar derived by iron-rich sludge.* Environ Sci Pollut Res Int, 2023. **30**(39): p. 90708-90720.
4. Gholizadeh, M., et al., *Understanding the dependence of biochar properties on different types of biomass.* Waste Management, 2024. **182**: p. 142-163.
5. <*coreshellsynthesis.pdf*>. 2010.
6. مشکینی, ف.ا.و.آ., سنتز سبز و مشخصه یابی نانوذرات روي اکسید با استفاده از عصاره گیاه زوفاي ایراني و بررسی ویژگیهاي ضداکسیدانی و ضدباکتریایی. 1402
7. Lv, C., H. Li, and X. Qin, *Preparation of trifunctional magnetic ZnO-based biochar for pollutions removal from wastewater.* Arabian Journal of Chemistry, 2025. **18**.
8. Sharma, S., et al., *Effect of sintering temperature on structural and photocatalytic properties of zinc oxide nanoparticles.* Next Materials, 2025. **7**.
9. Rudnik, E., *Advances in Dysprosium Recovery from Secondary Sources: A Review of Hydrometallurgical, Biohydrometallurgical and Solvometallurgical Approaches.* Molecules, 2026. **31**(1): p. 176.
10. Samadi, H., M.G. Shahraki, and R.Z. Mohgadam, *The effect of the shapes of Zinc oxide nanoparticles on antibacterial and photocatalytic activity via an eco-friendly method.* Iranian Journal of Catalysis, 2025.

بررسی خواص فوتوکاتالیستی سلنید قلع با سنجش رادیکالهای آزاد در محیط آبی و تاثیر اکسید گرافن کاهیده درآن با استفاده از دستگاه تشدید اسپین الکترونیESR

قربان شیروی زاده ، عزیز

گروه فیزیک، مرکز تحقیقات مواد و انرژی، واحد دزفول، دانشگاه آزاد اسلامی، دزفول، ایران

چکیده

در این پژوهش، میزان تغییرات در غلظت رادیکالهای آزاد در محلول آبی حامل نانوذرات سلنید قلع و تغییرات آن در اثر تابش نور خورشید با استفاده از دستگاه تشدید اسپین الکترون ESR مورد سنجش قرار داده شده است . اساس این تحقیق بر ایجاد اندرکنش اسپین الکترونهای ماده با میدان مغناطیسی اعمالی که منجر به شکافتگی ترازهای انرژی می شود و سپس ایجاد شرایط جذب انرژی با تابش امواج الکترومغناطیسی و مشاهده این جذب استوار است .نتایج این آزمایش می تواند اطلاعات ذی قیمتی را درسنجش رادیکالهای آزاد اکسید کننده درمحیطهای آبی با هدف پاکسازی آلودگی های آلی در آن دراختیار پژوهشگر قرار دهد.

واژه های کلیدی: *سلنید قلع، اکسید گرافن کاهیده، تشدید اسپین الکترونی(ESR) ، رادیکال‌های آزاد، فوتوکاتالیز*

Investigation of the Photocatalytic Properties of Tin Selenide through Free Radical Detection in Aqueous Media and the Effect of Reduced Graphene Oxide Using Electron Spin Resonance (ESR)

Gorban shiravizadeh, aziz

Department of Physics, Materials and Energy Research Center, Dez.C., Islamic Azad University, Dezful, Iran

Abstract

In this study, the variations in the concentration of free radicals in an aqueous solution containing tin selenide (SnSe) nanoparticles, as well as their changes under solar light irradiation, were investigated using Electron Spin Resonance (ESR) spectroscopy. The basis of this investigation relies on the interaction between electron spins in the material and an externally applied magnetic field, which leads to the splitting of energy levels. Under these conditions, the sample absorbs electromagnetic radiation at resonance, and this absorption can be detected and analyzed. The results of the ESR measurements provide valuable information for evaluating the concentration of oxidative free radicals in aqueous media. Such measurements can be effectively applied in the study of photocatalytic processes aimed at the degradation and removal of organic pollutants from water environments.

***Keywords**:Tin Selenide, Reduced Graphene Oxide (rGO), Electron Spin Resonance (ESR), Free Radicals, Photocatalysis*

Email:azizshiravi@iau.ac.ir

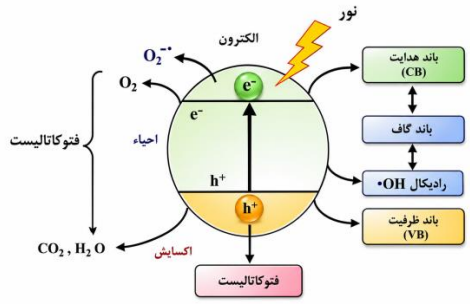
مقدمه

نانوذرات نیمه هادی سلنید قلع[1](SnSe) یکی از ساختارهای ترکیبی گروههای IV-VI جدول تناوبی می باشد.این ترکیب به دلیل دارا بودن خواص مطلوب نوری،الکتریکی و حرارتی میتواند بصورت بالقوه در مصارف صنعتی و انرژی استفاده شود. آخرین گزارشات علمی در مورد سلنید قلع،این ماده را به عنوان کاندید مناسبی برای تولید برق از گرمای زاید وسایل گرمایی به دلیل

[1] Tin selenide

هدایت گرمایی بسیار پایین و رسانندگی الکتریکی بسیار بالا،معرفی می کنند[۱].کاربردهای دیگری نیز در زمینه های دیگر مانند : سلول های خورشیدی[۲] ، دستگاه سوئیچینگ حافظه[۳] ،سیستم های ضبط هولوگرافیک، سنسور های مادون قرمز و قطعات مختلف ذخیره سازی انرژی مانند باتری های لیتیوم یون[٤] ،نیز انجام شده است. این ترکیب ساده و پایدار نسبت به دیگر نیمه رساناهای خانواده کالکوژناید دارای مزایایی از جمله غیر سمی بودن و دارای عناصر ارزان وفراوان بودن است که آن را به گزینه ای مهم برای جایگزین ساختن با دیگرنیمه رساناها مبدل ساخته است .این ترکیب دارای گاف انرژی مناسب وضریب جذب بالایی است که برای کاربرد در سلول های خورشیدی ایدآل می باشد[٥] . استفاده از نانوذرات سلنید قلع بعنوان نانوکاتالیست در فعالیت(شیروی و همکاران)[٦] مورد بررسی قرار گرفته است.

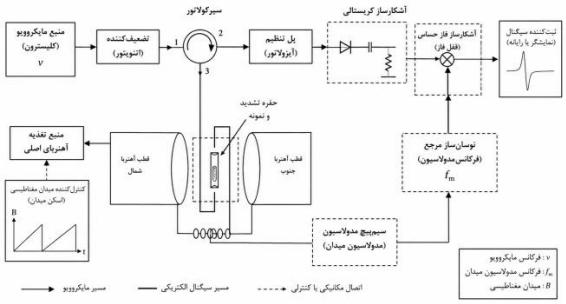
فوتوکاتالیست‌ها[۲]،مواد بسیار مناسبی برای زدایش آلودگی‌های شیمیایی الی هستند.سلنید قلع که بطور ذاتی نیمه هادی نوع P با گاف انرژی مستقیم۱,۳ev و غیر مستقیم ۰,۹ev،به خوبی با طیف خورشید هم پوشانی دارد.صفحات rGO[۳] به عنوان پذیرنده الکترون ها ،عمل می‌کنند و با دریافت الکترون‌های برانگیخته از نوار رسانش سلنید قلع،از بازترکیب سریع الکترون–حفره جلوگیری کرده و طول عمر حامل‌های بار را افزایش می‌دهند. این فرآیند باعث افزایش تولید گونه‌های فعال اکسیژن مانند •OH و $^{-}O_2$•می‌شود[۷،۸].در شکل(۱) مکانیزم تشکیل رادیکالهای آزاد اکسیدکننده و اکسیداسیون ترکیبات آلی وتشکیل مولکولهای ساده تر آب و دی اکسید کربن نشان داده شده است.عملکرد فوتوکاتالیستی بهبود یافته نانوکامپوزیت‌های SnSe/rGO را می‌توان به جدایش مؤثر جفت‌های الکترون–حفره تولیدشده در اثر تابش نور و همچنین افزایش تشکیل گونه‌های فعال اکسیژن (ROS)[٤]نسبت داد. حضور صفحات اکسید گرافن کاهیده (rGO) با تسهیل انتقال الکترون‌های برانگیخته از نوار رسانش سلنید قلع و جلوگیری از بازترکیب سریع حامل‌های بار،موجب افزایش طول عمر حامل‌ها و در نتیجه افزایش بازده فوتوکاتالیستی می‌شود.



شکل(۱) سازوکار فوتوکاتالیستی در تشکیل حفره‌ها و الکترون‌ها را در اثر تابش به سطح نانوذرات نیمه رسانا نشان می‌دهد.

تبیین پژوهش

اساس این پژوهش بر ایجاد اندرکنش اسپین الکترونهای ماده با میدان مغناطیسی اعمالی به کمک دستگاه تشدید اسپینی الکترون (ESR)[۵]که منجر به شکافتگی ترازهای انرژی و سپس ایجاد شرایط تشدید در جذب انرژی با تابش امواج الکترومغناطیسی استوار است.



شکل(۲):شماتیک آزمایش وقسمتهای مختلف دستگاهESR

شکل(۲) شماتیک آزمایش وقسمتهای مختلف دستگاه را نشان می دهد. همانطور که می دانیم ایجاد خاصیت فوتوکاتالیستی محلول های حامل نانو ذرات نیمه رسانا بر افزایش غلظت رادیکالهای آزاد خصوصاً اکسید کننده قوی هیدروکسیل(OH^*) استوار است که این رادیکال آزاد بعد از تولید آب اکسیژنه (H_2O_2) در محلول آبی و تقسیم آن به دو رادیکال آزاد هیدروکسیل بوجود می آید.با واکنش رادیکال آزاد OH^* با هر نوع مولکول آلی پیچیده و اکسید شدن

---

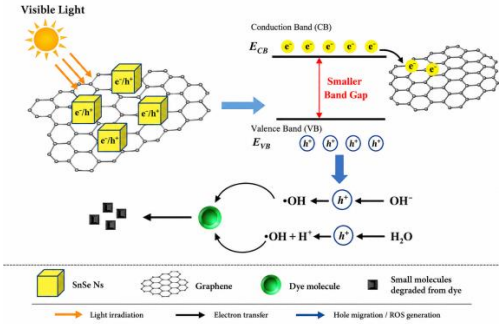
۲ Photocatalysis
۳ Reduced Graphene Oxide
٤ Reactive Oxygen Species
٥ Electron Spin Resonance

آنها ،ماهیت این مولکول ها تغییر کرده و بصورت ترکیبات آلی کوچکتر و تولید مقداری آب و دی اکسید کربن،استحاله می شوند. نمونه‌های سنتزشده SnSe برای بررسی فعالیت فوتوکاتالیستی به روش تشدید اسپین الکترونی (ESR) مورد ارزیابی قرار گرفته و طیف‌های ESR قبل و بعد از تابش نور خورشید ثبت و با یکدیگر مقایسه خواهد گردید.

اندازه شدت پیک تشدید میتواند بعنوان پارامتری برای سنجش میزان غلظت مولکول های پراکسید و هیدروکسید باشد.واکنش تولید رادیکالهای اکسنده هیدروکسید درشکل(۳)بصورت شماتیکی نشان داده شده است.همانطور که مشاهده میشود با تابش فوتونهای انرژی به نانو ذرات مستقل یا نهشت شده روی صفحات گرافن ،با ایجاد جفت الکترون حفره باعث اکسید شدن مولکولهای آب و تولید رادیکال های آزاد می شود.تاثیر وجود صفحات گرافن در بهتر کردن واکنش این است که به انتقال الکترونهای لایه ظرفیت روی صفحات گرافن،از باز ترکیب بین الکترون ها و حفره ها جلوگیری شده وعمر مفید حفره ها افزایش می یابد.ایجاد رادیکالهای آزاد اکسیدکننده OH^* و شکستن مولکولهای رنگ آلی و نقش گرافن در انتقال الکترونهای لایه هدایت و افزایش طول عمر اکسیتون را نشان می دهد. در نهایت محصول حاصل به کوچکترین واحد مولکولی تخریب شده تبدیل می شود.[۹،۱۰،۱۱]. همانطور که در روابط (۱) مشاهده می شود برای به تعادل رسیدن محلول آبی، رادیکال های آزاد با آب اکسیژنه بطور همزمان تولید می شوند. در این تحقیق بطور کاملاً ابتکاری این آزمایش در آزمایشگاه حالت جامد دانشکده فیزیک پلاسمای دانشگاه علوم و تحقیقات انجام گرفت .[۱۲،۱۳]

روش عملی پژوهش

در این تحقیق،ابتدا نانوذرات سلنید قلع (SnSe) و نانوکامپوزیت SnSe/rGO به روش هم‌رسوبی شیمیایی سنتز شدند.سپس نانوذرات سنتزشده بر روی صفحات اکسید گرافن کاهیده (rGO) نشانده شدند.جزئیات کامل مواد اولیه،شرایط سنتز،عملیات حرارتی و مشخصات ساختاری نمونه‌ها در مقاله پیشین نویسندگان ارائه شده است.[۶] در مرحله نخست، نانوذرات سلنید قلع خالص و چیدمان شده روی صفحات اکسیدگرافن کاهش یافته (SnSe/rGO) با دیسپرس ۰,۱ گرم از ماده پودری در ۵۰سی سی آب مقطر و همین مقدار به همراه ۰,۰۰۵ گرم متیلن بلو انجام گردید.جهت تعیین میزان تغییرات غلظت رادیکالهای آزاد، قبل از نوردهی از نمونه ها تست ESR گرفته شد.سپس نمونه ها در معرض نور آفتاب قرار گرفته و پس از بازه زمانی ۳۰ دقیقه مجدداً آزمایش ESR تکرار گردید .



شکل (۳): نمای شماتیکی از تولید الکترون و حفره در نانوذرات سلنید قلع، ایجاد رادیکالهای آزاد اکسیدکننده OH^* و شکستن مولکولهای رنگ آلی

$$SnSe + h\nu \rightarrow e^- + h^+ \ , \ H_2O \rightarrow H^+ + OH^- \ , \ h^+ + OH^- \rightarrow OH^\bullet \ , \ 2h^+ + 2H_2O \rightarrow 2H^+ + H_2O_2 \ , e^- + H_2O_2 \rightarrow OH^\bullet + OH^- \ , \ H_2O_2 \rightarrow OH^\bullet + OH^\bullet \ , \ OH^\bullet + MB \rightarrow H_2O + CO_2 + \ldots \quad (۱)$$

در جدول(۱) مقادیر پیک های ESR با تفکیک نمونه های مهیا شده از نانو ذرات سلنید قلع (SnSe) و چیدمان شده براکسیدگرافن (SnSe/rGO)، قبل و بعد از نوردهی درج گردیده است. با توجه به جدول (۱)و شکل(٤)،کاهش شدت پیک های تشدید که متناسب با افزایش غلظت پراکسید (H_2O_2) است برای دو حالت محلول آبی با نانوذرات سلنید قلع خالص(SnSe)و (SnSe/rGO) قابل مقایسه است. هر دونمونه در مقابل نور دهی با کاهش شدت پیک تشدید،رفتار مشابهی دارند. غلظت پراکسید ($OH^\bullet + MB \rightarrow H_2O + CO_2$) در حالتی که متیلن بلو MB در محیط وجود دارد به علت مصرف آن دراکسیداسیون متیلن بلو کم شده است، که تاییدی بر تاثیرزیادتر غلظت مولکول پراکسید در تغییرات پیک ESR است.نتیجه بسیار مهم که از این آزمایش گرفته می شود اثراکسید گرافن کاهش یافته بر کاهش شدید پیک ها است. ضریب کاهش برای محلول آبی با نانوذرات(SnSe)، ۱,٤٦برابر حالت خاموش وبرای نمونه (SnSe/rGO) ۷,۲۷ برابر

حالت خاموش اندازه گیری شده است که نشان دهنده افزایش ۵ برابری غلظت پراکسید نسبت به نمونه بدون گرافن می باشد.

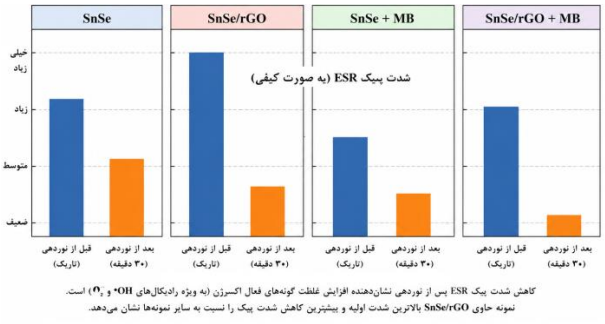
جدول(۱): پیک های تشدید اسپینی الکترون با تفکیک نمونه ها

پیک تشدید ESR		
بعد از نوردهی	بعد از نوردهی	قبل از نوردهی
SnSe&Water +MB	*SnSe& Water*	*SnSe&Water*
-۰/۹ v	**-۱/۱ v**	**-۰/۷۵ v**
SnSe/rGO&Water +MB	*SnSe/rGO&Water*	*SnSe/rGO&Water*
-۰/۷ v	**- ۸ v**	**-۱/۱ v**

در این پژوهش،تمرکز اصلی بر ارزیابی تشکیل گونه‌های فعال اکسیژن و رادیکال‌های آزاد به‌وسیله طیف‌سنجی تشدید اسپین الکترونی (ESR) بوده است. اگرچه در این مطالعه کاهش مستقیم غلظت متیلن بلو با روش‌های طیف‌سنجی نوری اندازه‌گیری نشد، اما در پژوهش پیشین نویسندگان [۶]، تخریب فوتوکاتالیستی متیلن بلو توسط نانوکامپوزیت SnSe/rGO به‌طور کامل بررسی و افزایش بازده فوتوکاتالیستی آن نسبت به نمونه خالص SnSe گزارش شده است.با این حال کاهش پیک در در حضور متیلن بلو (MB)قبل و بعد از نوردهی میتواند ناشی از مصرف رادیکالهای فعال در محلول و در نهایت کاهش غلظت MB باشد. بنابراین، نتایج حاضر را می‌توان به‌عنوان تأیید مستقلی از همان رفتار فوتوکاتالیستی و با تکیه بر اندازه‌گیری مستقیم گونه‌های فعال اکسیژن توسط ESR در نظر گرفت. نمونه حاوی rGO نسبت به نمونه خالص SnSe کاهش شدیدتری در شدت پیک ESR نشان داد که بیانگر افزایش غلظت پراکسیدها و رادیکال‌های آزاد در محیط است.این موضوع نقش rGO را در بهبود جدایش حامل‌های بار و کاهش بازترکیب الکترون–حفره تأیید می‌کند.

نتیجه گیری

در این پژوهش رفتار فوتوکاتالیستی نانوذرات سلنید قلع خالص و نانوکامپوزیت SnSe/rGO در محیط آبی با استفاده از طیف‌سنجی تشدید اسپین الکترونی بررسی شد.نتایج نشان داد تابش نور باعث افزایش تشکیل گونه‌های فعال اکسیژن (ROS)، شده و این افزایش با تغییر شدت پیک ESR قابل مشاهده است.



شکل (٤): مقایسه کیفی شدت نسبی سیگنال ESR .

بر اساس نتایج حاصل، نانوکامپوزیت SnSe/rGO می‌تواند گزینه مناسبی برای کاربردهای فوتوکاتالیستی تحت نور مرئی از جمله حذف آلاینده‌های آلی، تصفیه آب و سامانه‌های محیط‌زیستی مبتنی بر انرژی خورشیدی باشد.نتایج حاصل از آزمون ESR با نتایج آزمون تخریب فوتوکاتالیستی متیلن بلو که در پژوهش پیشین نویسندگان گزارش شده است، همخوانی داشته و نقش مؤثر نانوکامپوزیت SnSe/rGO را در افزایش گونه‌های فعال اکسیژن و در نتیجه بهبود عملکرد فوتوکاتالیستی تأیید می‌کند.

مراجع

[۱] Zhao, L.-D., et al.*Tin Selenide (SnSe): Growth, Properties, and Applications* .Advanced Science, ۲۰۱۸.

[۲] Kumar, M., et al;"Tin-selenide as a futuristic material: properties and applications".; RSC Advances, ۲۰۲۱. DOI: ۱۰,۱۰۳۹/D۰RA۰۹۸۰۷H

[۳] Ho, T. L., Ding, K., Lyapunov, N., et al. (۲۰۲۲).*Multi-Level Resistive Switching in SnSe/SrTiO۳ Heterostructure Based Memristor Device.*Nanomaterials, ۱۲(۱۳)

[٤] L. Zhao, S. Lo, Y. Zhang, H. Sun, G. Tan, C. Uher, C. Wolverton, V. Dravid, M. Kanatzidis,Nature, ۲۰۱٤, ۵۰۸, ۳۷۳-۳۷۷

[۵] Cheng, Z., Zhang, J., Lin, L., et al;" Pressure-Induced Modulation of Tin Selenide Properties"; A Review. Molecules, ۲۰۲۳,۲۸(۲٤), ۷۹۷۱

[٦] A.G Shiravizadeh., et al; "Effects of annealing atmosphere and rGO concentration on the optical properties and enhanced photocatalytic performance of SnSe/rGO nanocomposites"; *Physical Chemistry Chemical Physics* ۱۹ (۲۷), (۲۰۱۷)۱۸۰۸۹

[۷] Zhao, L., et al. "Recent progress in SnSe-based nanomaterials for photocatalytic applications." Journal of Materials Chemistry A, ۲۰۲۲.

[۸] Wang, Y., et al. "Enhanced visible-light photocatalytic performance of SnSe/reduced graphene oxide nanocomposites for degradation of organic pollutants." Applied Surface Science, ۲۰۲۱.

[۹] Li, H., et al. "Electron spin resonance investigation of reactive oxygen species in semiconductor photocatalysis." Journal of Physical Chemistry C, ۲۰۲۰.

[۱۰] Kumar, R., et al. "Reduced graphene oxide supported metal chalcogenides for environmental photocatalysis: a revie." Coordination Chemistry Reviews, ۲۰۲٤.

[۱۱] Chen, J., et al. "Reactive oxygen species generation and ESR detection in photocatalytic water purification systems." Environmental Research, ۲۰۲۳.

[۱۲] Instruction Manual (ESR APPARATUS Model SE-۹٦۳٦

[۱۳]جزوه آزمایشگاه حالت جامد مرکز فیزیک پلاسما(دکتر سبط) واحد علوم و تحقیقات(مولف:دکتر سید علی سبط)

تاثیر ناخالصی گادولینیوم بر ساختار و خواص مغناطیسی نقاط کوانتومی مغناطیسی برپایه Fe_3O_4

سلیمانی،صدیقه ؛ زارع، حکیمه*؛ دهقانیان،سمیه

دانشکده فیزیک دانشگاه یزد، یزد

چکیده

در این پژوهش، نقاط کوانتومی گرافن اکسید مغناطیسی آلاییده با گادولینیوم، به روش ساده هم‌رسوبی ساخته شد. از نمونه ها، آزمون های پراش اشعه ایکس، تصویر میکروسکوپ روبشی و عبوری، پراکندگی انرژی پرتو ایکس، نقشه عنصری و مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی گرفته شد. نتایج ارزیابی‌های ساختاری و مغناطیسی، ضمن تایید تشکیل فاز بلوری نانوذرات اکسید آهن، خاصیت ابرپارامغناطیس با مغناطش اشباع بالا را نشان داد. نتایج نشان داد حضور ناخالصی گادولینیوم به میزان ۵ درصد نسبت به آهن باعث افزایش مغناطش اشباع نقاط کوانتومی مغناطیسی می شود. بنابراین نانوساختارهای تهیه شده، دارای قابلیت کاربرد همزمان برای گرمادرمانی و تصویر برداری تشدید مغناطیسی هستند.

واژه های کلیدی: *نقاط کوانتومی اکسید گرافن، نانوذرات اکسید آهن، گادولینیوم، ،هم‌رسوبی*

The effect of gadolinium impurity on the structure and magnetic properties of Fe_3O_4-based magnetic quantum dots

Soleimani, Sedigheh; Zare, Hakimeh*; Dehghanian, Somayeh

Department of Physics, Yazd University, Yazd

Abstract

In this study, gadolinium-doped magnetic graphene oxide quantum dots were synthesized by a simple co-precipitation method. X-ray diffraction, scanning, transmittance electron microscopy, energy dispersive X-ray, elemental mapping, and vibrational magnetometer analysis were applied on the samples. The results of structural and magnetic evaluations confirmed the formation of a crystalline phase of iron oxide nanoparticles and showed the desired superparamagnetic behavior with high saturation magnetization. The results showed that the presence of 5% Gd as an impurity increases the magnetization of magnetic quantum dots. Therefore, the prepared nanostructures have the potential to be used simultaneously for thermotherapy and magnetic resonance imaging.
***Keywords**: Graphene oxide quantum dots, Fe3O4 nanoparticls, Gadolinium, Co-precipitation*

PACS No. (11 Times New Roman, italic)

مقدمه

نقاط کوانتومی، از جمله نانوساختارهای صفربعدی هستند که به دلیل ابعاد بسیار کوچک خود، رفتارهایی متفاوت از مواد توده‌ای نشان می‌دهند. در این نانوساختار، حرکت حامل‌های بار در هر سه بعد محدود می‌شود و ترازهای انرژی از حالت پیوسته به حالت گسسته تبدیل می‌شوند. این پدیده از ویژگی‌های اصلی مواد نانومقیاس است. خواص نوری و الکترونیکی نقاط کوانتومی به اندازه، شکل و ترکیب شیمیایی آن‌ها وابسته است. با کنترل ابعاد و ساختار نقاط کوانتومی می‌توان ویژگی‌هایی مانند شکاف انرژی، جذب نوری و گسیل نوری را تنظیم کرد [۱ و ۲]. با رشد نانوذرات مغناطیسی برروی نقاط کوانتومی، می‌توان نقاط کوانتومی مغناطیسی تهیه کرد و همزمان از ویژگی‌های نوری و مغناطیسی آنها در برخی از کاربردها مانند زیست فناوری، نانوحسگرها و فوتوکاتالیست‌ها استفاده نمود [۳ و ٤].

گادولینیوم به دلیل دارا بودن گشتاور مغناطیسی بالا وآرایش الکترونی پایدار، یکی از عناصر مناسب برای آلایش نقاط کوانتومی

محسوب می‌شود. آلایش نانوساختارها با گادولینیوم، می‌تواند موجب تقویت پاسخ مغناطیسی و تغییر در برهم‌کنش‌های داخلی آنها شود. همچنین، حضور این یون‌ها ممکن است بر ویژگی‌های نوری و الکترونیکی نقاط کوانتومی اثر گذاشته و امکان تنظیم بهتر خواص فیزیکی آن را فراهم کند [۵ و ۶]. بنابراین، نقاط کوانتومی مغناطیسی آلاییده با گادولینیوم را می‌توان به عنوان سیستم‌های چندکاربردی درنظر گرفت که در آن‌ها اثرات محدودشدگی کوانتومی، رفتارهای مغناطیسی و تغییرات ناشی از آلایش به‌طور هم‌زمان قابل بررسی است. این ویژگی‌ها موجب شده است که چنین نانوساختارهایی درپژوهش‌های نانوفیزیک، نانوالکترونیک و زیست فناوری اهمیت ویژه‌ای داشته باشند.

در این پژوهش، نقاط کوانتومی گرافن اکسید به روش پیرولیز ساخته شدند و سپس به روش هم رسوبی مغناطیسی شدند. تاثیر حضور گادولینیوم بر ساختار و ویژگی‌های مغناطیسی آنها بررسی شد.

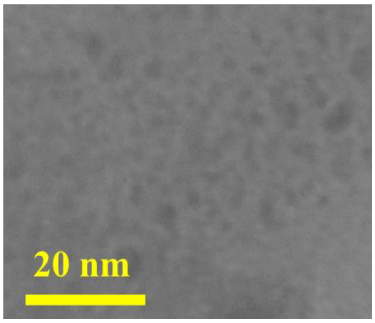
روش آزمایش

در این پژوهش، نقاط کوانتومی به روش ساده پیرولیز ساخته شد. برای این منظور، ابتدا اسید سیتریک و تیوره تا دمای ۲۰۰ درجه سانتیگراد حرارت دهی شد. سپس محلول سدیم هیدروکسید قطره قطره به مخلوط افزوده شد تا pH محلول به ۱۰ برسد. سپس محصول حاصل با اتانول شست‌وشو داده شد. برای تهیه نقاط کوانتومی مغناطیسی، نقاط کوانتومی پخش شده در آب، تحت امواج فراصوت به مدت ۱۰ دقیقه قرار گرفت. سپس دمای محلول حاوی نقاط کوانتومی افزایش یافت. سپس محلول کلرید آهن (III) به‌صورت تدریجی به محلول حاوی نقاط کوانتومی که تحت همزدن بود افزوده شد. بعد از مدت زمان کوتاهی، محلول سولفات آهن (II) به مخلوط اضافه شد. پس از گذشت زمان، آمونیاک به مخلوط افزوده شد و واکنش به مدت یک ساعت تحت همزدن ادامه یافت و در نهایت محصول به‌دست‌آمده، شست‌وشو داده شد. ساخت نقاط کوانتومی مغناطیسی آلاییده با گادولینیوم، به روش قبل انجام شد، با این تفاوت که در مرحله آماده‌سازی محلول کلرید آهن، نیترات گادولینیوم (نسبت مولی گادولینیوم به آهن ۱ به ۲۰) به محلول افزوده شد. همه‌ی نمونه های شستشو داده شده در گرمکن در دمای ۶۰ درجه سانتیگراد به مدت ۵ ساعت خشک شدند.

از دستگاه میکروسکوپ الکترونی روبشی (TESCAN MIRA۳, Germany) برای تصویر برداری از نقاط کوانتومی مغناطیسی استفاده شد. از دستگاه پراش اشعه ایکس (Bruker d۸, Germany) برای ارزیابی ساختار نقاط کوانتومی مغناطیسی استفاده شد.

نتایج وبحث

شکل ۱، تصویر میکروسکوپ الکترونی عبوی نقاط کوانتومی گرافن اکسید را نشان می‌دهد. بر طبق شکل ذرات دارای اندازه متوسط کمتر از ۳ نانومتر هستند و ذرات کاملا از یکدیگر مجزا هستند. شکل ۲، تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی نقاط کوانتومی مغناطیسی را نشان می‌دهد. بر طبق شکل، ذرات تشکیل شده کمتر از ۱۰ نانومتر هستند.

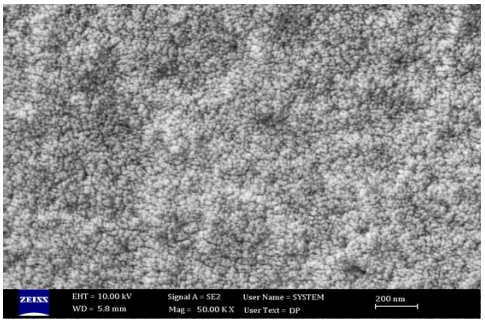


شکل ۱. تصویرمیکروسکوپ الکترونی عبوری نقاط کوانتومی

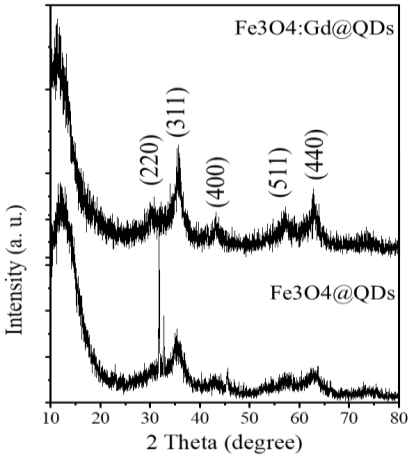
شکل ۳، الگوهای پراش اشعه ایکس نمونه‌های نقاط کوانتومی مغناطیسی بدون و با حضور ناخالصی گادولینیوم را نشان می‌دهد. قله مشخصه مربوط به گرافن اکسید در هر دو نمونه در زوایای $2\theta=12/2^{\circ}$ و $11/5^{\circ}$ درجه به ترتیب در الگوهای پراش اشعه ایکس نقاط کوانتومی مغناطیسی خالص و آلاییده قابل مشاهده است. این قله به صفحات (۰۰۱) گرافن اکسید مربوط می شود. قله‌های واقع در زوایای ۳۰/۲، ۳۵/۵، ۴۳/۱، ۵۷/۲ و ۶۲/۷ درجه است که به ترتیب مربوط به صفحات بلوری (۲۲۰)، (۳۱۱)، (۴۰۰)، (۵۱۱) و (۴۴۰) مربوط به صفحات بلوری ساختار اسپینل

معکوس مکعبی Fe_3O_4 اســـت. بر طبق نتایج، قله‌ای از ترکیبات دیگر در نمونه ها مشاهده نمی‌شود و نوع ساختار بلور با حضور گادولینیوم تغییر نکرده است و قله‌های پراش اشعه ایکس جاجایی نداشته است. اندازه بلورک نانوذرات قبل و بعد از ورود ناخالصی با استفاده از رابطه‌ی دبای شرر به ترتیب ۱/۷ و ۲/۵ نانومتر محاسبه شد. نتایج نشان می‌دهد افزودن گادولینیوم، باعث بهبود کیفیت بلور شده است. عدم تغییر در پارامتر شبکه می‌تواند ناشی از حضور اتم‌های گادولینیوم در مرز دانه‌ها یا جایگزینی اتمی بســیار محدود می‌باشد که تغییری در ابعاد سلول‌های واحد به وجود نیاورده است. آنالیز عنصـری نمونه‌ها با اسـتفاده از روش طیف‌سـنجی پراکندگی انرژی پرتو ایکس (EDX) انجام شد. شکل ٤. طیف EDX نقاط کوانتومی مغناطیسی آلاییده به گادولینیوم را نشان می‌دهد. علاوه بر قله‌های اصـــلی مربوط به عناصـــرآهن، اکســـیژن و کربن، قله‌های ضـعیف مربوط به ناخالصـی گادولینوم مشـاهده می‌شـود. شـکل ۵، نقشـه‌ی عنصـری نقاط کوانتومی مغناطیسـی آلاییده با گادولینیوم را نشـان می دهد. بر طبق شـکل، حضـور عناصـر گادولینیوم، آهن، اکسیژن و کربن به صـورت یکنواخت در شـکل توزیع شـده اسـت. این آزمون، حضور گادولینیوم را در نمونه تایید می‌کند.

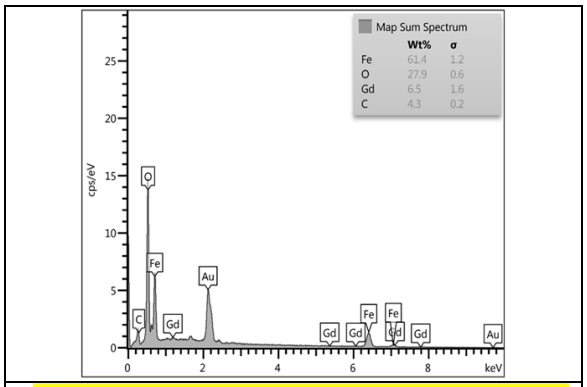
شـکل ٦، نمودار مغناطش نقاط کوانتومی مغناطیســی قبل و بعد از حضـور ناخالصـی گادولینیوم را نشـان می‌دهد. هر دو نمونه، دارای مغناطش پسماند (M_r) و وادارندگی مغناطیسی (H_c) صفر هستند. بنابراین، هر دو دارای خاصیت سوپر پارامغناطیس هستند. با اعمال میدان مغناطیسی ۱۵۰۰ Oe، مغناطش اشباع (M_s) نقاط کوانتومی مغناطیســی بدون و با حضـور گادولینیوم به ترتیب ۱۰ emu/g به ۱۳/۷ مقدار رسیده است. حضور گادلینیوم باعث افزایش مغناطش



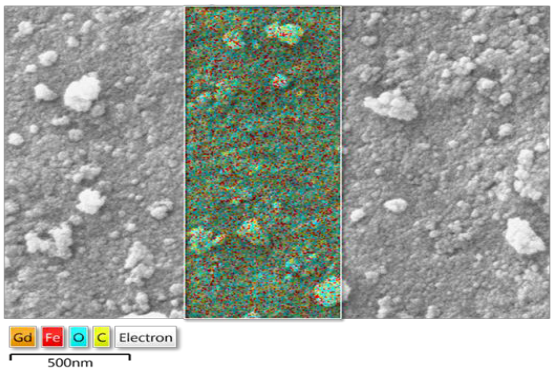
شکل ۲. تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی نقاط کوانتومی مغناطیسی



شکل ۳. الگوی پراش اشعه ایکس نقاط کوانتومی مغناطیسی با و بدون حضور گادولینیوم



شکل٤. طیف EDX نقاط کوانتومی مغناطیسی آلاییده به گادولینیوم

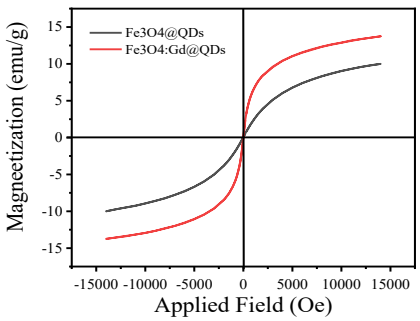


شکل ۵. تصویر میکروسکوپ الکترونی و نقشه‌ی عنصری نقاط کوانتومی مغناطیسی آلاییده با گادولینیوم

اشباع نقاط کوانتومی مغناطیسی شده است. یون‌های Gd^{+3} با داشتن آرایش الکترونی $4f^{7}$، ممان مغناطیسی ذاتی بالایی دارند. جایگزینی یون‌های Fe^{+3} با یون های Gd^{+3} می تواند باعث افزایش مغناطش نمونه شود. از طرفی، نتایج پراش اشعه ایکس نشان می‌دهد حضور یون‌های Gd می‌تواند منجر به افزایش نرخ رشد بلورها و بهبود درجه بلورینگی شود. بنابراین، با کاهش میزان نقص‌های ساختاری و مرزدانه‌ها، سهم فازهای پارامغناطیس یا غیرمغناطیسی در نمونه کاهش یافته که می‌تواند باعث افزایش مغناطش اشباع کل نمونه شود. نکته قابل توجه این است که با وجود افزایش اندازه بلورک و تقویت مغناطش اشباع، هیچ جابجایی در قله‌های پراش مشاهده نشد. این امر بیانگر آن است که گادولینیوم بدون ایجاد تنش ساختاری یا تغییر در پارامتر شبکه، بر خواص مغناطیسی اثر گذاشته است. این پدیده می‌تواند ناشی از حضور اتم‌های گادولینیوم در مرز دانه‌ها یا جایگزینی اتمی بسیار محدود باشد که بدون تغییر در ابعاد سلول واحد، باعث تقویت برهمکنش های تبادلی و در نتیجه افزایش گشتاور مغناطیسی کل سیستم می‌گردد.

نتیجه گیری

در این پژوهش، ساخت نقاط کوانتومی گرافن اکسید مغناطیسی خالص و آلاییده با گادولینیوم به روش ساده و در محیط آبی ساخته شد. نتایج نشان داد نقاط کوانتومی بدون و با حضور ناخالصی در ساختار بلوری اسپینل معکوس مکعبی متبلور می شوند. حضور



شکل ۶. نمودار مغناطش نقاط کوانتومی مغناطیسی قبل و بعد از حضور ناخالصی گادولینیوم

گادولینیوم باعث افزایش مغناطش اشباع نقاط کوانتومی مغناطیسی و اندازه بلورک نانوذرات اکسید آهن شده است. نتایج نشان می‌دهند نقاط کوانتومی مغناطیسی ساخته شده قابلیت کاربرد در زمینه های مختلف زیست پزشکی را دارد.

مرجع‌ها

۱. Zhou, W., & Coleman, J. J. (۲۰۱۶). Semiconductor quantum dots. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, *20*(۶), ۳۵۲-۳۶۰.

۲. Mohamed, W. A., Abd El-Gawad, H., Mekkey, S., Galal, H., Handal, H., Mousa, H., & Labib, A. (۲۰۲۱). Quantum dots synthetization and future prospect applications. *Nanotechnology Reviews*, *10*(۱), ۱۹۲۶-۱۹۴۰.

۳. Jing, L., Ding, K., Kershaw, S. V., Kempson, I. M., Rogach, A. L., & Gao, M. (۲۰۱۴). Magnetically engineered semiconductor quantum dots as multimodal imaging probes. *Advanced Materials*, *26*(۳۷), ۶۳۶۷-۶۳۸۶.

۴. Koole, R., Mulder, W. J., Van Schooneveld, M. M., Strijkers, G. J., Meijerink, A., & Nicolay, K. (۲۰۰۹). Magnetic quantum dots for multimodal imaging. Wiley Interdisciplinary Reviews: Nanomedicine and Nanobiotechnology, ۱(۵), ۴۷۵-۴۹۱

۵. Olusegun, S. J., de Oliveira Souza, G., Sutuła, S., Osial, M., Krajewski, M., Pękała, M., ... & Krysinski, P. (۲۰۲۴). Methotrexate anti-cancer drug removal using Gd-doped Fe_3O_4: adsorption mechanism, thermal desorption and reusability. *Groundwater for Sustainable Development*, *25*, ۱۰۱۱۰۳.

۶. Rananaware, P., & Brahmkhatri, V. (۲۰۲۳). Magnetic Quantum Dots for Magnetic Resonance Imaging (MRI) and Biomedical Applications. In Magnetic Quantum Dots for Bioimaging (pp. ۱۵۳-۱۶۷). CRC Press.

سنتز و مشخصه یابی فریت نیکل-اکسید تیتانیوم $TiO_2/NiFe_2O_4$

مالکی مقدم، میلاد[۱]؛ جمادی، فرناز[۲]؛ سیدیزدی، جمیله[۱*]
۱. گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی‌عصر (عج) رفسنجان، رفسنجان
۲. گروه فیزیک دانشگاه صنعتی سیرجان،سیرجان

چکیده
فریتهای اسپینلی به دلیل خواص مغناطیسی منحصربه فرد خود کاندیدای مناسبی برای جذب امواج الکترومغناطیسی هستند. فریت نیکل با مقاومت در برابر خوردگی و مغناطش اشباع نسبتا زیاد یکی از آنهاست که به صورت کامپوزیت با نیم رسانای دی اکسیدتیتانیوم توانایی جذب امواج مایکروویو را دارد. در این پژوهش نانو کامپوزیت فریت نیکل-دی اکسید تیتانیوم سنتز و مشخصه یابی شده است. آنالیزهای مشخصه یابی نشان داد که سنتز موفقیت آمیز بوده و این نانوکامپوزیت پتانسیل جذب امواج الکترومغناطیسی را دارد.
واژه های کلیدی: فریت نیکل، دی اکسید تیتانیوم، جذب امواج الکترومغناطیسی.

Synthesis and characteristics of nickel ferrite and titanium dioxide

Maleki Moghadam, Milad[1]; Jamadi, Farnaz[2]; Seyedyazdi, Jamileh[1]

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

Abstract
Spinel ferrites are suitable candidates for electromagnetic wave absorption due to their unique magnetic properties. Nickel ferrite, with its corrosion resistance and relatively high saturation magnetization, is one such material; when combined as a composite with the semiconductor titanium dioxide, it exhibits the ability to absorb microwaves. In this study, the nickel ferrite–titanium dioxide nanocomposite was synthesized and characterized. Characterization analyses confirmed the successful synthesis and the electromagnetic wave absorption potential of this nanocomposite.
***Keywords**:(nickel ferrite, titanium dioxide, electromagnetic wave absorption)*

PACS No.

مقدمه
مواد جاذب در برابر امواج الکترومغناطیسی می‌توانند شامل ترکیبات مغناطیسی نظیر فریت‌های اسپینلی با فرمول کلی MFe_2O_4 باشند که در آن M عناصری چون Fe، Ni، Co، Cu، Zn، Mn و Mg است. فریت‌ها به دلیل پایداری شیمیایی و حرارتی بالا و همچنین قابلیت تنظیم‌پذیری جذب امواج، شناخته شده‌اند. این مواد به واسطه خواص فری‌مغناطیسی خود قادرند انرژی الکترومغناطیسی را به طور مؤثر به انرژی گرمایی و دیگر اشکال انرژی تبدیل کنند [۱].
در این میان، فریت نیکل ($NiFe_2O_4$) به دلیل ویژگی‌های استثنایی خود نظیر مقاومت ویژه بالا، نفوذپذیری مغناطیسی زیاد، وادارندگی کم، مغناطش اشباع قابل توجه، میدان ناهمسانگردی بالا و مقاومت به خوردگی، قابل توجه است. این ویژگی‌ها، فریت نیکل را برای کاربردهای متنوعی از جمله ابرخازن‌ها، الکتروکاتالیز و جذب امواج مایکروویو ارزشمند ساخته است. علاوه بر این، خصوصیات منحصربه‌فرد آن، این ماده را به گزینه‌ای مناسب برای استفاده به عنوان ماده مغناطیسی نرم در کاربردهای فرکانس بالا تبدیل کرده است [۲-۳]. خواص دی‌الکتریک ذاتی و اثر هم‌افزایی را می‌توان با پوشش اجزای غیرمغناطیسی، از جمله کربن گرافیتی، نیمه‌رساناها (TiO_2، SnO_2، MnO_2، ZnO) و پلیمرهای رسانا (PPY، PANI، PODET) تنظیم کرد [۴].
با بهره‌گیری از طراحی متنوع مغناطیسی-دی‌الکتریک، کامپوزیت‌های هسته-پوسته می‌توانند تلفات مغناطیسی و اتلاف دی‌الکتریک را فراهم آورند که باعث جذب پهنای باند قوی امواج ماکروویو شوند [۵-۶].
در این پژوهش، نانوکامپوزیت $NiFe_2O_4/TiO_2$ به عنوان نمونه‌ای از این دسته مواد سنتز و مشخصه یابی می شود.

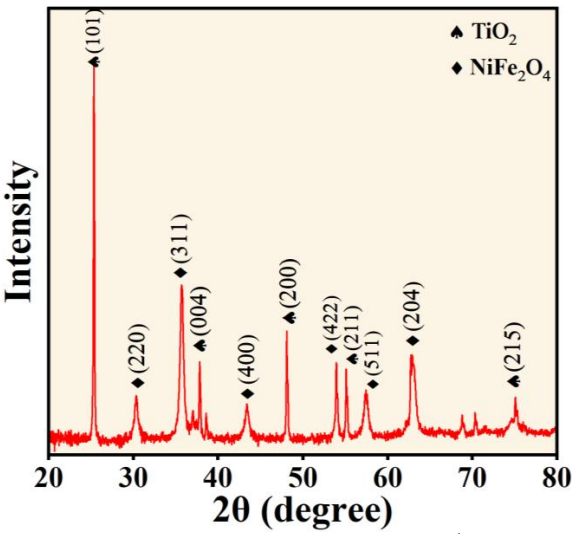
سنتز $NiFe_2O_4/TiO_2$
ابتدا نانوذرات $NiFe_2O_4$ به روش هیدروترمال سنتز شد. ۰٫۰۵ مول نیترات آهن ۹ آبه و ۰٫۰۲۵ مول نیترات نیکل ۶ آبه در آب دیونیزه با استفاده از همزن مغناطیسی حل شدند. پس از همزدن و تنظیم pH با آمونیاک، محلول تحت امواج فراصوت قرار گرفته و به اتوکلاو تفلونی منتقل شد. اتوکلاو

در دمای ۱۸۰ درجه‌ی سلسیوس به مدت ۲۴ ساعت حرارت داده شد و پس از خنک‌سازی، محصول شستشو و با آهنربا جداسازی شده و در دمای ۴۰ درجه خشک گردید.

سپس ۰٫۰۲ گرم پلی‌وینیل‌پیرولیدون (PVP) در ۴۰ میلی‌لیتر اتانول کاملاً حل شد تا یک محلول شفاف حاصل گردد. در ادامه ۱٫۲ گرم فریت نیکل که به روش هیدروترمال سنتز شده بود، به محلول اضافه گردید و مخلوط حاصل به عنوان محلول اول نامگذاری شد.
در مرحله بعد، ۰٫۸ گرم اکسید تیتانیوم در ۲۰ میلی‌لیتر اتانول به طور کامل حل و محلول دوم نامیده شد. محلول دوم به صورت قطره‌قطره به محلول اول افزوده شد و محلول حاصل به مدت ۲ ساعت در دمای محیط ۲۵ درجه سلسیوس تحت همزن مغناطیسی قرار گرفت تا کاملاً یکنواخت شود.
در نهایت، محلول همگن شده در آون با دمای ۸۰ درجه سلسیوس خشک گردید تا حلال به طور کامل تبخیر شده و محصول نهایی به دست آید.

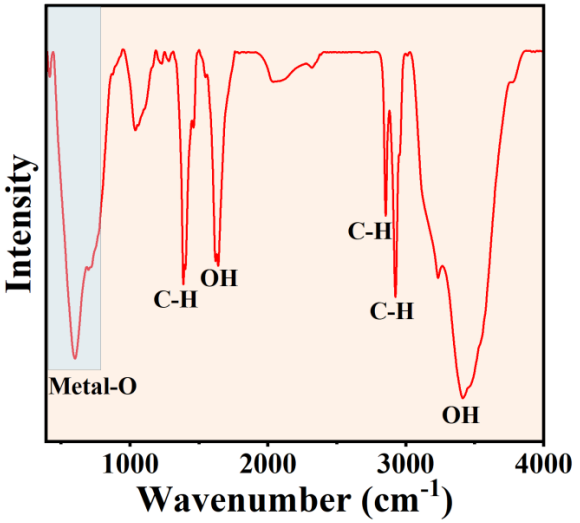
نتایج و بحث

آنالیز XRD نانوکامپوزیت $NiFe_2O_4/TiO_2$ (شکل ۱) به وضوح حضور همزمان دو فاز $NiFe_2O_4$ و TiO_2 را نشان می‌دهد، قله‌ها پراش مشاهده شده در زوایای ۳۰٫۳°، ۳۵٫۷°، ۴۳٫۴°، ۵۳٫۸°، ۵۷٫۴° و ۶۳° به ترتیب به صفحات کریستالی (۲۲۰)، (۳۱۱)، (۴۰۰)، (۴۲۲)، (۵۱۱) و (۴۴۰) اختصاص داشته و تأییدکننده ساختار اسپینل مکعبی $NiFe_2O_4$ هستند و همچنین، قله‌های مشخصه TiO_2 در زوایای ۲۵٫۳°، ۳۷٫۸°، 48°، ۵۳٫۹°، ۵۵٫۱° و ۶۲٫۶° به ترتیب منطبق بر صفحات (۱۰۱)، (۰۰۴)، (۲۰۰)، (۱۰۵)، (۲۱۱) و (۲۰۴) بوده و سنتز موفقیت آمیز نانوکامپوزیت $NiFe_2O_4/TiO_2$ را تایید می‌کنند.



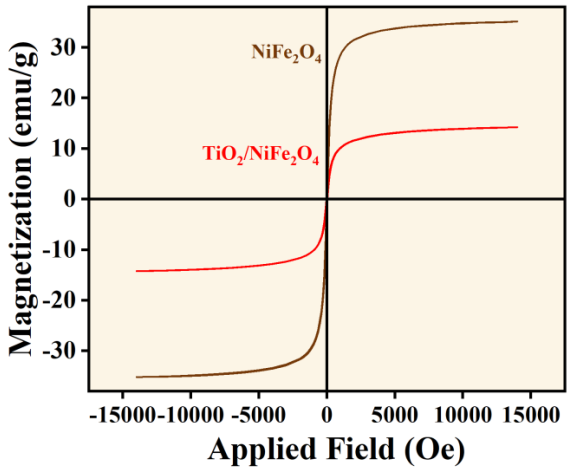
شکل ۱ الگوی پراش پرتو ایکس نانوکامپوزیت $NiFe_2O_4/TiO_2$

ساختار عاملی نانوکامپوزیت $NiFe_2O_4/TiO_2$ با استفاده از طیف‌سنجی تبدیل فوریه فروسرخ در محدوده $400\text{-}4000\ cm^{-1}$ نشان بررسی شد (شکل ۲). طیف FTIR حضور باندهای جذبی مشخصه هر دو جزء نانوکامپوزیت را تأیید می‌کند. باند جذبی پهن در حدود $400\text{-}1000\ cm^{-1}$ به ارتعاشات کششی Ti-O-Ti شبکه TiO_2 نسبت داده می‌شود؛ همچنین وجود یک قله در $1038\ cm^{-1}$ نشان دهنده حضور پیوند Ti-O-C ناشی از برهم کنش میان TiO_2 و PVP است. همچنین ارتعاشات شبکه اسپینلی $NiFe_2O_4$ در $600\ cm^{-1}$ و $417\ cm^{-1}$ مربوط به پیوندهای فلز-اکسیژن Ni-O و Fe-O هستندکه حاکی از تشکیل موفقیت‌آمیز نانوکامپوزیت است. قله جذبی در $1638\ cm^{-1}$ ناشی از ارتعاشات خمشی مولکول‌های آب جذب سطحی و باند پهن در $3427\ cm^{-1}$ مربوط به ارتعاشات کششی گروه‌های هیدروکسیل می‌باشد که نشان‌دهنده ماهیت آب‌دوست سطح نانوذرات است. عدم حضور قله‌های قوی در ناحیه $2800\text{-}3000\ cm^{-1}$ نشان می‌دهد که مواد آلی به طور مؤثر حذف شده‌اند. قله های $1385\ cm^{-1}$، ۲۸۵۳ و ۲۹۲۴ نشان دهنده پیوند C-H مربوط به پلی‌وینیل‌پیرولیدون باقیمانده از سنتز است.



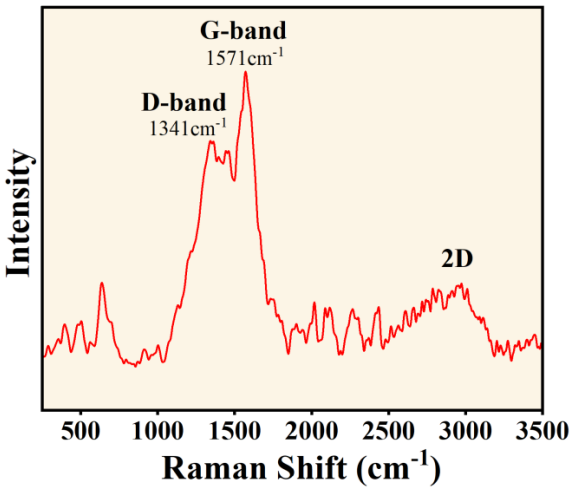
شکل ۲ طیف سنجی تبدیل فوریه فروسرخ نانو کامپوزیت $NiFe_2O_4/TiO_2$

شکل ۳ آنالیز مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی (VSM) نانوکامپوزیت $NiFe_2O_4/TiO_2$ را نشان می‌دهد. مغناطش اشباع فریت نیکل ۳۵ emu/g است. مغناطش اشباع با افزودن TiO_2 به فریت نیکل، کاهش یافته و به مقدار ۱۴٫۲۳emu/g (در میدان ۱۴ کیلواورستد) می‌رسد. کاهش مغناطش اشباع، با بهبود تطابق امپدانس و افزایش همزمان تلفات دی‌الکتریک ناشی از حضورTiO_2 ، شرایط برای جذب حداکثری امواج الکترومغناطیسی فراهم می شود.



شکل ۳ آنالیز مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی $NiFe_2O_4$ و نانوکامپوزیت $NiFe_2O_4/TiO_2$

ساختار فازی و ارتعاشی نانوکامپوزیت $NiFe_2O_4/TiO_2$ با استفاده از طیف‌سنجی رامان در محدوده cm^{-1} ۵۰۰-۳۵۰۰ مورد بررسی قرار گرفت (شکل ۴) طیف رامان به وضوح حضور همزمان هر دو فاز $NiFe_2O_4$ و TiO_2 را نشان می‌دهد. باند D در cm^{-1} ۱۳۴۱ و باند G در cm^{-1} ۱۵۷۱ ظاهر شده اند. وجود همزمان این مجموعه قله‌ها و عدم مشاهده قله‌های اضافی، خلوص فازی بالا و تشکیل موفقیت‌آمیز نانوکامپوزیت را تأیید می‌کند.



شکل ۴ طیف سنجی رامان نانوکامپوزیت $NiFe_2O_4/TiO_2$

نتیجه گیری

نانوکامپوزیت $NiFe_2O_4/TiO_2$ به روش هیدروترمال سنتز شده و آنالیزهای XRD، FTIR، رامان و VSM تشکیل موفق آن را تأیید کردند. الگوی XRD حضور همزمان فاز اسپینل مکعبی $NiFe_2O_4$ و فاز آناتاز TiO_2 را نشان داد. طیف سنجی FTIR به ترتیب باندهای ارتعاشی Ti-O-Ti (حدود cm^{-1} ۶۰۰) Fe-O/Ni-O (۴۱۷-۶۰۰cm^{-1}) را نشان داد. آنالیز VSM نشان داد که این نانوکامپوزیت رفتار نرم‌مغناطیسی با مغناطش اشباع ۱۴٫۲۳emu/g (در میدان ۱۴ کیلواورستد) است. این ویژگی‌ها همراه با تلفات مغناطیسی و دی‌الکتریک همزمان، نانوکامپوزیت را به گزینه‌ای مناسب برای جذب پهن‌باند امواج مایکروویو تبدیل می‌کند.

مرجع‌ها

[۱] Y. Cao, N. Farouk, N. Mortezaei, A. V. Yumashev, M. N. Akhtar, and Arash Arabmarkadeh. “Investigation on microwave absorption characteristics of ternary MWCNTs/$CoFe_2O_4$FeCo nanocomposite coated with conductive PEDOT-Polyaniline Co-polymers” *Ceramics International* **47**, no. 9 (2021): 12244-12251.

[۲] Q. A. Alsulami, “Structural, dielectric, and magnetic studies based on MWCNTs/$NiFe_2O_4$/ZnO nanoparticles dispersed in polymer PVA/PEO for electromagnetic applications” Journal *of Materials Science: Materials in Electronics* **32**, no. 3 (2021): 2906-2924.

[۳] J. Farnaz, J. Seyed-Yazdi, F. Ebrahimi-Tazangi, and S. M. Hosseiny. “The impact of RGO and MWCNT/RGO on the microwave absorption of $NiFe_2O_4$@Fe_3O_4 in the presence or absence of PANI” *Journal of Materials Chemistry A* **12**, no. 47 (2024): 32981-33002.

[۴] Q. Qi, L. Ma, B. Zhao, S. Wang, X. Liu, Y. Lei, and C. B. Park. “An effective design strategy for the sandwich structure of PVDF/GNP-Ni-CNT composites with remarkable electromagnetic interference shielding effectiveness” *ACS applied materials & interfaces* **2**, no. 32 (2020): 36568-36577.

[۵] M. Huang, L. Wang, Q. Liu, W. You, and R. Che. “Interface compatibility engineering of Multi-shell Fe@C@TiO_2@MoS_2 heterojunction expanded microwave absorption bandwidth” *Chemical Engineering Journal* **429** (2022): 132191.

[۶] L. Wang, X. Yu, X. Li, J. Zhang, M. Wang, and R. Che. “MOF-derived yolk-shell Ni@C@ZnO Schottky contact structure for enhanced microwave absorption” *Chemical Engineering Journal* **383** (2020): 123099.

ساخت و مطالعه خواص ساختاری، نوری و فیزیکی ترکیب روی تیتانات آلاییده شده با نیکل به عنوان یک رنگدانه سرامیکی جدید

تن سازان، شیما[۱]؛ خواجه امینیان، محسن[۱]؛ شهسواری، فاطمه[۲]

[۱] آزمایشگاه نانو رنگدانه‌ها و پوشش‌ها، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، کدپستی ۸۹۱۹۵-۷۴۱، یزد

[۲] دانشکده مهندسی، دانشگاه میبد، میبد

چکیده

این مطالعه رنگدانه‌های تیتانات روی آلاییده شده با نیکل را به عنوان رنگدانه‌های سرامیکی زرد پایدار توسعه می‌دهد ومحدودیت‌های رنگدانه‌های مرسوم که به عناصر خاکی کمیاب متکی هستند یا پایداری حرارتی ضعیفی نشان می‌دهند را برطرف می‌کند. پنج ترکیب از Zn_2TiO_4 تا $NiTiO_3$ با واکنش حالت جامد در دمای ۱۲۰۰ درجه سانتیگراد سنتز شدند. XRD، SEM، طیف سنجی بازتاب UV-Vis و رنگ سنجی اندازه گیری شد. رنگدانه‌ها در دمای ۱۱۰۰ درجه سانتیگراد روی کاشی چاپ شدند. با افزایش نیکل ساختار اسپینل مکعبی Zn_2TiO_4 به رومبوهدرال $NiTiO_3$ تغییر یافته و باعث تغییر رنگ از سفید به سبز و تا رنگ زرد پررنگ همراه است.

واژه های کلیدی: *رنگدانه زرد سرامیکی، نیکل تیتانات، روی تیتانات، رنگ‌ها، ویژگی‌های اپتیکی.*

Synthesis and Study of the Structural, Optical and Physical Properties of Ni-doped Zinc Titanate Compound as a Novel Ceramic Pigment

Tansazan, Shima[1]; Khajeh Aminian, Mohsen[1]; Shahsavari, Fatemeh[2]

[1]Nano Pigments and Coatings Laboratory, Department of Physics, Yazd University, 89195-741, Yazd
[2] Faculty of Engineering, Meybod University, Meybod

Abstract

This study develops Ni-doped zinc titanate pigments as sustainable yellow ceramic colorants, addressing the limitations of conventional pigments that rely on the rare-earth elements or exhibit poor thermal stability. Five compositions ranging from Zn_2TiO_4 to $NiTiO_3$ were synthesized by solid-state reaction at 1200°C and characterized by XRD, SEM, UV–Vis diffuse reflectance spectroscopy, colorimetry. The pigments were printed on tiles at 1100 °C. Increasing Ni content produced systematic phase transformation from cubic spinel Zn_2TiO_4 to rhombohedral $NiTiO_3$, accompanied by continuous color evolution from white through green to intense yellow.

***Keywords**: Yellow Ceramic pigment; Nickel titanate; Zinc titanate; Colorants; Optical properties*
PACS No

مقدمه

رنگدانه‌های سرامیکی به دلیل پایداری حرارتی و شیمیایی بالا، مقاومت در برابر تابش و دوام رنگی مناسب، کاربرد گسترده‌ای در صنایع کاشی، سرامیک و پوشش‌های صنعتی دارند. در سال‌های اخیر، توسعه رنگدانه‌های جدید با هدف کاهش هزینه تولید، افزایش سازگاری زیست‌محیطی و حذف ترکیبات سمی به یکی از موضوعات مهم پژوهشی تبدیل شده است[۱]. بسیاری از رنگدانه‌های تجاری زرد حاوی عناصر خاکی کمیاب گران‌قیمت هستند که استفاده گسترده از آن‌ها را با محدودیت‌هایی مواجه می‌سازد[۲].

یون نیکل به دلیل فراوانی نسبی، قیمت مناسب و توانایی ایجاد طیف‌های رنگی متنوع از طریق انتقالات d-d در محیط‌های کریستالی مختلف، گزینه‌ای مناسب برای توسعه رنگدانه‌های سرامیکی جدید محسوب می‌شود[۳]. ساختارهای تیتاناتی نیز به دلیل پایداری فازی مناسب و قابلیت پذیرش یون‌های آلاینده در شبکه بلوری، بستر مناسبی

برای طراحی رنگدانه فراهم می‌کنند[٤]. در پژوهش حاضر، رنگدانه‌های مبتنی بر روی‌تیتانات آلاییده با نیکل سنتز و از نظر ساختار بلوری، مورفولوژی و خواص نوری–رنگی مورد بررسی قرار گرفتند و جایگاه اقتصادی آن‌ها در مقایسه با رنگدانه‌های زرد تجاری ارزیابی شد.

مواد و روش‌ها

آماده‌سازی رنگدانه: پنج نمونه S1 تا S5 از طریق واکنش حالت جامد سنتز شدند. اکسید روی، اکسید نیکل (NiO(II)) و دی‌اکسید تیتانیوم به عنوان پیش‌سازها و NaF به عنوان کانی‌ساز استفاده شدند. مقادیر استوکیومتری مطابق جدول ۱ با آب مقطر مخلوط و پس از خشک شدن در ۱۱۰ درجه سانتیگراد، در دمای ۱۲۰۰ درجه سانتیگراد به مدت ۲ ساعت در جو هوا کلسینه شدند.

جدول ۱: ترکیبات اسمی، جرم‌های پیش‌ساز و نسبت‌های مولی برای روی آلاییده شده با نیکل سنتز شده

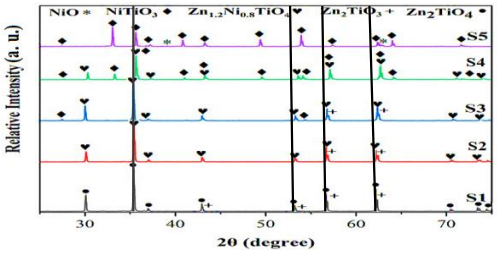
نمونه	S1	S2	S3	S4	S5
نسبت مولار (Zn:Ni:Ti)	۲,۰:۰,۰:۱,۰	۱,۷:۰,۳:۱,۰	۱,٤:۰,٦:۱,۰	۱,۲:۰,۸:۱,۰	۰,۰:۱,۰:۱,۰

آماده‌سازی جوهر و چاپ کاشی: پودرهای رنگدانه پس از آسیاب سیاره‌ای با حلال ۲–اتیل هگزیل استئارات مخلوط و با روش چاپ صفحه تخت روی بیسکویت سرامیکی تجاری اعمال شدند. کاشی‌های چاپ‌شده در شرایط صنعتی در دمای ۱۱۰۰ درجه سانتیگراد به مدت ٦۰ دقیقه پخت شدند و به ترتیب PS1 تا PS5 نامیده شدند.

مشخصه‌یابی: رنگدانه‌ها با استفاده از مشخصه یابی XRD (دستگاه X'Pert (40KV,30mA) و تابش (CuKα (λ=1.54Å)اندازه‌گیری شدند. مورفولوژی و ترکیب شیمیایی رنگدانه‌ها و کاشی‌های چاپ‌شده با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (FE-SEM) با استفاده از میکروسکوپ MIRA3 TESCAN که در ولتاژ ۳۰ کیلوولت کار می‌کند، مشخص شد. همچنین آزمون رنگ سنجی $CIELab^*$ و طیف بازتاب با دستگاه (X-Rite i1Pro 2 spectrophotometer) از تمامی نمونه‌ها اندازه گیری و مورد بحث و بررسی قرار گرفتند.

نتایج و بحث

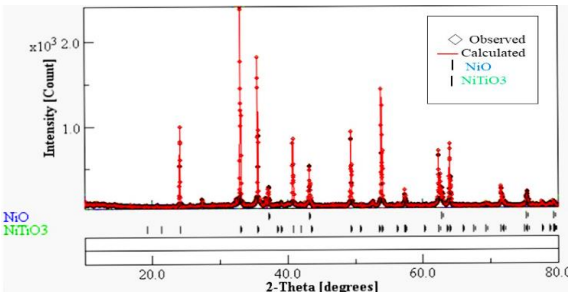
الگوهای XRD رنگدانه‌های رنگی تهیه شده (S1 تا S5) در شکل ۱ نشان داده شده است که تغییرات ساختاری از اسپینل مکعبی به رومبوهدرال را نشان می‌دهد، زیرا Ni^{2+}به تدریج جایگزین Zn^{2+}در شبکه کریستالی می‌شود. الگوی پراش نمونه بدون آلایش S1، بازتاب‌های مشخصی مربوط به فاز اسپینل مکعبی Zn_2TiO_4را نشان می‌دهد، با پیک‌های جزئی که به فاز ثانویه $Zn_2Ti_3O_8$ نسبت داده می‌شود. این فاز ثانویه معمولاً در سرامیک‌های تیتانات روی سنتز شده در دماهای متوسط مشاهده می‌شود و نشان دهنده واکنش ناقص یا تعادل ترمودینامیکی تحت شرایط کلسیناسیون به کار رفته است. با افزایش مقدار آلایش نیکل در ساختار تیتانات روی، الگوهای XRD برای رنگدانه‌ها (S2، S3 و S4)، جابجایی‌های تمام پیک‌های پراش به زوایای بالاتر را نشان می‌دهند که با تشکیل تدریجی محلول جامد اسپینل $Zn_{2-x}Ni_xTiO_4$ سازگار است. برای ترکیب اسمی S4 (x=0.8)، این مربوط به فاز $Zn_{1.2}Ni_{0.8}TiO_4$ است. طبق قانون براگ ($2d\sin\theta=n\lambda$)، جابجایی پیک مشاهده شده به سمت زوایای پراش بالاتر نشان دهنده کاهش فاصله بین صفحه‌ای d است که با انقباض شبکه ناشی از جایگزینی نیکل سازگار است. در نمونه S5 که کاملاً با نیکل جایگزین شده است، تبدیل کامل به ساختار $NiTiO_3$ رخ می‌دهد، به طوری که تمام پیک‌های پراش اصلی با فاز رومبوهدرال



شکل ۱: الگوهای XRD رنگدانه‌های S1 تا S5 که در دمای ۱۲۰۰ درجه سانتیگراد کلسینه شده‌اند.

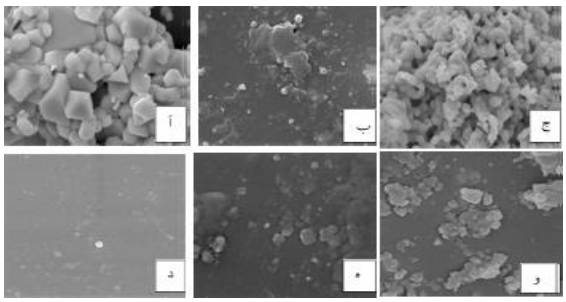
مطابقت دارند و تنها مقادیر ناچیزی از NiO باقیمانده شناسایی می‌شود. عدم وجود فازهای حاوی روی در S5 تأیید می‌کند که جایگزینی کمی

نیکل منجر به رنگدانه خالص $NiTiO_3$ می‌شود که رنگ زرد روشن مطلوبی را نشان می‌دهد. در شکل ۲ ریتولد ریفاینمنت برای نمونه S5 نمایش داده شده و نشان می‌دهد که ۸۸,۵ درصد فاز تشکیل شده فاز $NiTiO_3$ می‌باشد.



شکل ۲: تصویر ریتولد ریفاینمنت نمونه در ۱۲۰۰ درجه سانتیگراد

در شکل ۳ مورفولوژی رنگدانه‌های سنتز شده و کاشی‌های چاپ شده توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی FE-SEM مشخص شده است. به طور خاص، هم تخلخل و هم اندازه متوسط ذرات رنگدانه‌های کلسینه شده با افزایش محتوای Ni به تدریج کاهش می‌یابند.



شکل ۳: تصاویر FE-SEM با بزرگ نمایی ۲ میکرون (آ) S1، (ب) S3، (ج) S5، (د) PS1 ، (ه) PS3، (و) PS5.

این کاهش بدلیل جایگزینی یون‌های نیکل بجای یون‌های روی هست که شعاع یونی کوچکتری دارند و همچنین تغییر فازی که در نمونه‌ها صورت می‌گیرد.

جدول ۲: پارامترهای رنگ‌سنجی برای هر رنگدانه و هر کاشی چاپ‌شده در فضای رنگی CIE Lab*

نمونه	پارامترهای رنگ			
	L^*	a^*	b^*	رنگ
S1	۹۳,۸۱	۰,۰٤	٦,۳۷	
PS1	۸۷,٤۳	۱,٤۳	۸,۳۷	
S2	۷٥,۳	−۲۸,۱	۳٤,٤٦	
PS2	۷۹,٥۳	−۱,٥۹	۳۸,٦۹	
S3	٦۷,٦۱	−۲۳,٥	۳۷,۱۷	
PS3	۷٥,۸۹	−۱,۷۷	٤۱,۳٥	
S4	٥۷,٤٥	−٦,۷	۳٥,٦۸	
PS4	٦٤,۳۱	−۲,٦٤	۳۹,۲٤	
S5	٦۷	۸,۲۹	٥٤,۹۸	
PS5	۷٤,۳۷	٥,۹۸	٥٤,٥۲	

برای تشخیص رنگ رنگدانه‌ها و کاشی‌های چاپ شده از آزمون رنگ-سنجی CIELab* استفاده شده است. در این آزمون L بین ۰ تا ۱۰۰ و میزان روشنایی را نشان می‌دهد. b^* مثبت نشان دهنده رنگ زرد و منفی رنگ آبی هست. a^* مثبت رنگ قرمز و منفی میزان رنگ سبز را نشان می‌دهد. در جدول ۲ نتایج رنگ سنجی به همراه تصویر همه نمونه‌ها گزارش شده است.

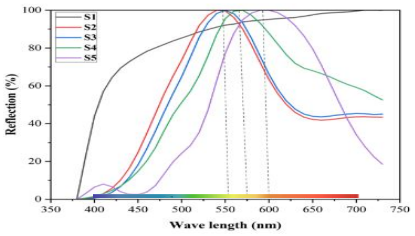
با مقایسه نتایج طیف بازتاب UV-Vis رنگدانه‌ها (شکل ٤) و کاشی‌های چاپ‌شده (شکل ٥)، چندین تفاوت کلیدی مشاهده شد:

۱. تغییر طیفی: نوارهای بازتاب برای کاشی‌های چاپ‌شده (۵۷۰ نانومتر و ٦۱۰ نانومتر) در مقایسه با رنگدانه‌های خام (٥٤۰ نانومتر و ٦۰۰ نانومتر) به سمت قرمز تغییر جهت می‌دهند. این تغییر نشان دهنده تغییر در خواص نوری رنگدانه‌ها هنگام ترکیب شدن در ماتریس لعاب است.

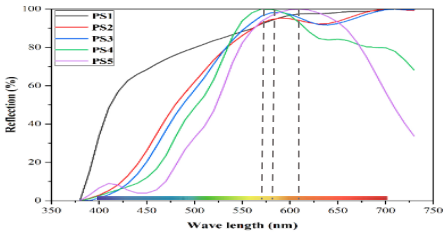
۲. محدوده رنگ: در حالی که رنگدانه‌های خام بازتاب‌هایی نشان دهنده رنگ‌های سبز و زرد نشان دادند، کاشی‌های چاپ‌شده در درجه اول رنگ‌های زرد و زرد–نارنجی را نشان می‌دهند. جزء سبز، به ویژه در رنگدانه‌های خام آلاییده شده با نیکل کمتر (S1 و S2) در ٥٤۰ نانومتر قابل توجه است، در طیف‌های کاشی چاپ‌شده آشکار نیست.

۳. شدت بازتاب: کاشی‌های چاپ‌شده، به ویژه آنهایی که محتوای نیکل کمتری دارند (PS1 تا PS3)، در مقایسه با پودر رنگدانه خود،

بازتاب کلی بالاتری نشان می‌دهند. این افزایش درخشندگی احتمالاً به دلیل برهمکنش با لعاب است.



شکل٤: طیف بازتاب رنگدانه‌های سنتز شده در دمای ۱۲۰۰ درجه سانتی‌گراد.



شکل٥: طیف بازتاب کاشی‌های چاپ شده در دمای ۱۱۰۰ درجه سانتی‌گراد.

در جدول ۳ مقایسه رنگدانه زرد $NiTiO_3$ به عنوان یک گزینه اقتصادی و نسبتاً سازگار با محیط زیست در مقایسه با برخی رنگدانه‌های زرد تجاری مورد بحث قرار گرفت.

جدول ۳: عملکرد مقایسه‌ای $NiTiO_3$ و رنگدانه‌های سرامیکی زرد تجاری

ویژگی‌ها		$NiTiO_3$ (این پژوهش)	Pr-$ZrSiO_4$ [2]	$BiVO_4$[2]
رنگ-سنجی (CIE $L^*a^*b^*$)	L^*	٦٧ رنگدانه ٧٤,٣٧ کاشی چاپ شده	٨١–٨٧	~٧٥–٨٠
	a^*	+٨,٢٩ / +٥,٩٨	٣- تا ٤+	٢+ تا ٦+
	b^*	٥٤,٩٨ / ٥٤,٥٢	٧٠–٧٥	~٧٨
	c^*	٥٤,٨٤/٥٥,٦	~٧١	~٧٨
پایداری حرارتی		پایداری 1200˚C	پایداری >1400˚C	پایداری ~900˚C
هزینه مواد اولیه		متوسط	زیاد	متوسط – زیاد
سازگاری لعاب		عالی	عالی (بدون برهمکنش)	خوب

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، پنج ترکیب رنگدانه بر پایه روی‌تیتانات آلاییده شده با نیکل با فرمول کلی $Zn_{2-x}Ni_xTiO_4$ که (x=0 تا x=1) از طریق واکنش حالت جامد در دمای ۱۲۰۰ درجه سانتیگراد سنتز و مورد مشخصه‌یابی قرار گرفتند. نتایج XRD تحول فازی پیوسته از اسپینل مکعبی Zn_2TiO_4 به رومبوهدرال $NiTiO_3$ را با افزایش محتوای نیکل تأیید کرد. این تحول فازی با تکامل رنگ از سفید، از طریق سبز تا زرد پررنگ همراه بود. رنگدانه $NiTiO_3$ نمونه S5 بهترین عملکرد رنگی را با مقادیر b* = 54.98 و C* = 55.6 نشان داد. آزمون چاپ صنعتی بر روی کاشی در دمای ۱۱۰۰ درجه سانتیگراد پایداری حرارتی مطلوب و سازگاری عالی با لعاب را تأیید کرد. مقایسه با رنگدانه‌های تجاری نشان داد که $NiTiO_3$ با هزینه مواد اولیه تقریبی درحدود یک سوم کمتر در مقابل Pr-$ZrSiO_4$، گزینه‌ای مقرون‌به‌صرفه و پایدار برای صنایع رنگدانه‌های سرامیکی است.

سپاسگزاری

نویسندگان از مدیریت و کارکنان محترم کارخانه دینا سرام یزد به‌دلیل فراهم نمودن شرایط لازم در زمینه تولید و چاپ کاشی، صمیمانه قدردانی می‌کنند.

منابع

[١]S.Y. Vaselnia, M. Khajeh Aminian, R. Dehghan Banadaki, Prediction of band gap and color of cobalt-doped gahnite ceramic pigment by combining machine learning, DFT, and experimental methods, *Results in Physics*, (2026).
[٢]E. Enríquez, J. Reinosa, V. Fuertes, J. Fernández, Advances and challenges of ceramic pigments for inkjet printing, *Ceramics International*, **48** (2022) 31080-31101.
[٣]J. Chen, Y. Li, G. Feng, F. Jiang, Q. Zhao, S. Lan, X. Zhang, F. Zhong, J. Liu, Q. Hu, Novel yellow to blackish green Ni-doped aluminium titanate ceramic pigments, *Processing and Application of Ceramics*, **15** (2021) 314-318.
[٤]J. Chen, G. Feng, F. Jiang, L. Yin, Q. Zhao, S. Lan, X. Zhang, J. Liu, Q. Hu, W. Jiang, Synthesis and coloring properties of novel Ni-doped tialite pigments, *Ceramics International*, **47** (2021) 33242-33251.

بررسی کاربرد هایپرترمیای مغناطیسی نانوذرات اکسید آهن با پوشش کربنی (Fe_3O_4@C)

ابراهمیان، ساناز[۱]؛ رحیمی، کوروش[۱]

[۱] گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا، تهران، ایران

چکیده

ابتدا نانوذرات مگنتیت (Fe_3O_4) با خاصیت سوپرپارامغناطیسی با استفاده از روش هیدروترمال، با کربن پوشش‌دهی شد و نانوساختار حاصل (Fe_3O_4@C) با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (FESEM) و طیف‌سنجی پراش انرژی پرتو-ایکس (EDS) و مغناطیس‌سنجی نمونه ارتعاشی (VSM) مشخصه‌یابی شد. در نهایت کاربرد نانوساختار حاصل در حوزه هایپرترمیای مغناطیسی بررسی شد و با نمونه بدون پوشش کربنی (Fe_3O_4) مقایسه شد. مشخص شد که مقدار نرخ جذب ویژه (SAR) در غلظت ۵ mg/ml نانوذرات خالص Fe_3O_4 پس از پوشش‌دهی کربنی از مقدار ۶/۹ W/g به ۲۰/۹ افزایش می‌یابد و این افزایش قابل ملاحظه به نقش پوشش کربنی در جلوگیری از کلوخه‌شدگی نانوذرات با ایجاد فاصله بین ذرات، کاهش برهم‌کنش‌های مغناطیسی و شرایط ریلکسیشن مؤثرتر نسبت داده می‌شود.

واژه های کلیدی: *هایپرترمیای مغناطیسی، سنتز هیدروترمال، نانوذرات، سوپرپارامغناطیس*

Investigation of magnetic hyperthermia application of carbon-coated iron oxide (Fe_3O_4@C) nanoparticles

Ebrahemian, Sanaz[1]; Rahimi, Kourosh[1]

[1] *Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Physics, Alzahra University, Tehran, 19938-93973, Iran*

Abstract

First, superparamagnetic magnetite nanoparticles (Fe_3O_4) were coated with carbon using a hydrothermal method, and the resulting nanostructure (Fe_3O_4@C) was characterized using field emission scanning electron microscopy (FESEM), energy dispersive X-ray spectroscopy (EDS), and vibrating sample magnetometry (VSM). Finally, the application of the resulting nanostructure in magnetic hyperthermia was investigated and compared with the sample without carbon coating (Fe_3O_4). It was found that the specific absorption rate (SAR) at a concentration of 5 mg/ml of pure Fe_3O_4 nanoparticles after carbon coating increased from 6.9 to 20.9 W/g, and this significant increase is attributed to the role of the carbon coating in preventing the agglomeration of nanoparticles by creating a distance between particles, reducing magnetic interactions, and more effective relaxation conditions.

***Keywords**: Magnetic hyperthermia, Hydrothermal synthesis, Nanoparticles, Superparamagnetism*

PACS No. 81

مقدمه

در سال‌های اخیر، نانوذرات مغناطیسی مبتنی بر اکسید آهن، به‌ویژه مگنتیت (Fe_3O_4)، به دلیل ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی مطلوب، به یکی از پرکاربردترین نانومواد در حوزه‌های زیست‌پزشکی و فناوری نانو تبدیل شده‌اند. این نانوذرات علاوه بر دارا بودن پاسخ مغناطیسی مناسب، از زیست‌سازگاری قابل قبولی برخوردار بوده و امکان اصلاح سطح آن‌ها با ترکیبات مختلف به سادگی فراهم است. چنین ویژگی‌هایی موجب شده است که از نانوذرات Fe_3O_4 در زمینه‌هایی مانند تصویربرداری تشدید مغناطیسی، جداسازی زیستی، کاتالیز، حسگرها و سامانه‌های انتقال دارو استفاده گسترده‌ای شود. در کاربردهای درمانی، قابلیت هدایت این نانوذرات توسط میدان مغناطیسی خارجی امکان انتقال هدفمند

عوامل دارویی به بافت‌های مورد نظر را فراهم کرده و در نتیجه می‌تواند موجب افزایش کارایی درمان و کاهش عوارض جانبی داروها شود. همچنین گزارش‌های متعددی نشان داده‌اند که ترکیب نانوذرات مگنتیت با پوشش‌های مناسب می‌تواند آزادسازی کنترل‌شده دارو را در شرایط فیزیولوژیکی مختلف تسهیل کند [۱].

با وجود مزایای فراوان، استفاده از نانوذرات Fe_3O_4 با چالش‌هایی نظیر اکسایش سطحی، کاهش پایداری در محیط‌های آبی و تمایل به تجمع و کلوخه‌شدن همراه است. این پدیده‌ها می‌توانند سبب کاهش سطح مؤثر، تغییر رفتار مغناطیسی و افت عملکرد نانوذرات در کاربردهای مختلف شوند. از این‌رو، اصلاح سطح و ایجاد یک لایه محافظ بر روی نانوذرات به عنوان راهکاری مؤثر برای بهبود پایداری و حفظ خواص عملکردی آن‌ها مورد توجه قرار گرفته است. در میان مواد مورد استفاده برای این منظور، کربن جایگاه ویژه‌ای دارد؛ زیرا علاوه بر افزایش مقاومت شیمیایی و حرارتی، می‌تواند از تماس مستقیم ذرات با یکدیگر جلوگیری کرده و بستری مناسب برای اتصال گروه‌های عاملی و مولکول‌های مختلف فراهم آورد [۲].

برای تولید نانوکامپوزیت‌های مبتنی بر Fe_3O_4 و کربن، روش‌های سنتزی متنوعی توسعه یافته است. در این میان، روش هیدروترمال به دلیل سادگی فرایند، بازده مناسب، هزینه نسبتاً پایین و امکان استفاده از پیش‌ماده‌های ارزان و زیست‌سازگار، توجه پژوهشگران را به خود جلب کرده است. این روش امکان تشکیل همزمان ساختار کربنی و پوشش یکنواخت سطح نانوذرات را فراهم می‌کند و در نتیجه می‌تواند بر ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی محصول نهایی تأثیر قابل توجهی داشته باشد [۳ و ٤].

در پژوهش حاضر، نانوذرات مگنتیت به کمک فرایند هیدروترمال با لایه‌ای از کربن پوشش‌دهی شدند. پس از مشخصه‌یابی ریخت‌شناسی و مغناطیسی نمونه حاصل، عملکرد آن در کاربرد هایپرترمیای مغناطیسی مورد ارزیابی قرار گرفت. همچنین تأثیر پوشش کربنی بر رفتار گرمایی این نانوذرات از طریق مقایسه نرخ جذب ویژه (SAR) نمونه‌های پوشش‌دار و بدون پوشش بررسی شد تا نقش این پوشش در بهبود بازده هایپرترمیای مغناطیسی روشن شود.

روش سنتز نانوساختار Fe_3O_4@C

ابتدا ۱۰۰ میلی‌گرم پودر نانوذرات مگنتیت Fe_3O_4 در ۲۰ میلی‌لیتر آب یون‌زدایی‌شده پخش و به مدت ۱۵ دقیقه تحت حمام اولتراسونیک قرار گرفت. سپس ۰.۵ گرم گلوکز در ۱۰ میلی‌لیتر آب یون‌زدایی‌شده حل شد و همزده شد تا محلولی شفاف حاصل گردد. سپس محلول گلوکز به آرامی به بشر نانوذرات Fe_3O_4 در آب اضافه شد و ۳۰ دقیقه هم زده شد. مخلوط آبی به دست آمده (حدود ۳۰ میلی‌لیتر) به داخل اتوکلاو ۵۰ میلی‌لیتری منتقل شد و اتوکلاو به مدت ۳ ساعت در آون در دمای ۱۸۰ درجه سانتی‌گراد قرار گرفت. پس از سرد شدن طبیعی اتوکلاو، مخلوط حاصل به مدت ۱۰ دقیقه تحت سانتریفیوژ ٤۰۰۰ rpm قرار داده شد تا پودر نانوساختار Fe_3O_4@C ته‌نشین شود. سپس پودر حاصل با آب یون‌زدایی‌شده و اتانول شستشو شد و رسوب سیاه‌رنگ حاصل در دمای ۸۰ درجه سانتیگراد خشک و جمع‌آوری شد.

روش‌های مشخصه‌یابی

برای بررسی مورفولوژی نانوساختارهای حاصل از آنالیز FESEM با دستگاه MIRA3 TESCAN استفاده شد. همچنین ویژگی‌های مغناطیسی و مغناطش اشباع نمونه‌ها با استفاده از آنالیز VSM با استفاده از دستگاه MDK اندازه‌گیری شد. نهایتا آنالیز هایپرترمیا با استفاده از دستگاه ساخت MDK (مغناطیس دانش‌پژوه کاشان، آزمایشگاه نانومغناطیس) در شدت میدان مغناطیسی ٤۰۰Oe تحت فرکانس ثابت ٤۰۰kHz انجام شد. در هایپرترمیا با نانوذرات مغناطیسی، بازده گرمایش نانوذرات مغناطیسی کمیت اصلی مورد استفاده برای تحلیل عملکرد است که با استفاده از نرخ جذب ویژه (SAR) انرژی تعیین می‌شود که نشان دهنده توان گرمایی تولید شده به ازای واحد جرم ذرات است. فرمول پایه‌ای برای SAR برای سوسپانسیون نانوذرات مغناطیسی در سیال آب به صورت زیر تعریف می شود [۵]:

معادله ۱
$$SAR\left(\frac{W}{g}\right) = 4.18\left(\frac{M_{suspension}}{m_{MNPs}}\right)\frac{\Delta T}{\Delta t}$$

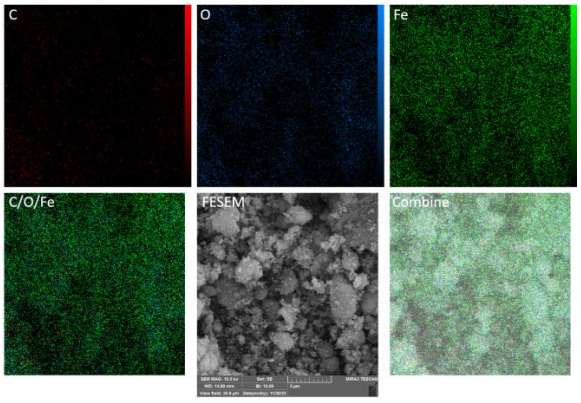
که در آن ضریب ٤.۱۸ J/g°C برابر است با ظرفیت گرمایی ویژه آب. کمیت $M_{suspension}$ جرم کل سوسپانسیون مورد استفاده

(سیال و نانوذرات مغناطیسی) و m_{MNPs} جرم نانوذرات مغناطیسی مورد استفاده است. همچنین $\Delta T/\Delta t$ برابر است با شیب منحنی دما–زمان. بنابراین به طور معادل برای سوسپانسیون نانوذرات مغناطیسی در سیال آب با غلظت C (mg/ml) می‌توان نوشت:

معادله ۲
$$SAR\ (\frac{W}{g}) = \frac{4.18 \times 1000}{C}\frac{\Delta T}{\Delta t}$$

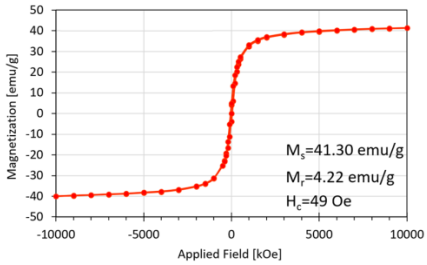
نتایج و تحلیل‌ها

شکل ۱ تصویر FESEM نانوساختار Fe_3O_4@C را به همراه نقشه عنصری EDS عناصر موجود در نمونه را نشان می‌دهد. در تصویر FESEM ذرات مجزا و همچنین ذرات تجمع‌یافته قابل مشاهده هستند. بازه قطر تقریبی این نانوذرات اندکی بزرگتر از نمونه خالص است، و همچنین می‌توان متوجه وجود پوشش بر روی آن‌ها شد. همانطور که در نقشه عنصری دیده می‌شود، عناصر آهن و اکسیژن به صورت یکنواخت در سرتاسر نمونه پراکنده هستند. همچنین عنصر کربن نیز به صورت یکنواخت اما با شدت کمتر در سرتاسر نمونه پراکنده شده است که می‌تواند نشان دهنده پوشش کربنی تشکیل شده بر روی نانوذرات Fe_3O_4 باشد. الگوی توزیع آهن و اکسیژن و کربن مانند یکدیگر است که دال بر یکنواختی نمونه است.



شکل ۱: تصویر FESEM و نقشه عنصری نانوذرات Fe_3O_4@C

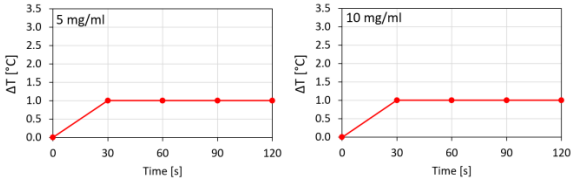
شکل ۲ نمودار VSM نانوساختار Fe_3O_4@C را نشان می‌دهد. همانطور که مشخص است، پس از پوشش‌دهی نانوذرات Fe_3O_4 با کربن به روش هیدروترمال به مدت ۳ ساعت، مقدار M_s برابر با ۴۱.۳۰ emu/g به دست آمده است، که اندکی از نمونه خالص بیشتر است. با توجه به ماهیت غیر مغناطیسی کربن، افزایش مشاهده شده احتمالا می‌تواند به این دلیل باشد که پوشش کربنی توانسته با ایجاد یک پوسته محافظ، از اکسایش بیشتر و کاهش مغناطش اشباع جلوگیری کند. همچنین مقادیر مغناطش پسماند (M_r) و وادارندگی مغناطیسی (H_c) نیز ناچیز اندازه‌گیری شدند که حاکی از رفتار سوپرپارامغناطیسی نمونه‌هاست که برای کاربردهای درون‌تنی و عدم تجمع، ضروری است. نسبت M_r/M_s کوچک است که بیانگر ماهیت مغناطیسی نرم و رفتار نزدیک به سوپرپارامغناطیس نمونه است. در مجموع، نکته مهم این است که حضور پوشش کربنی در این نمونه هیچ تأثیر منفی بر خواص مغناطیسی Fe_3O_4 نداشته است که برای کاربرد هایپرترمیای مغناطیسی ضروری است.



شکل ۲: نمودار VSM نانوذرات Fe_3O_4@C

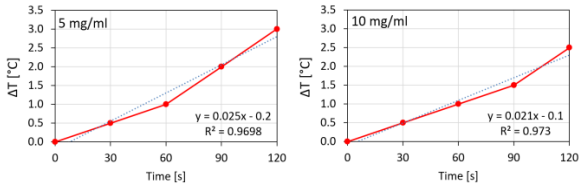
شکل ۳ منحنی تغییرات دما بر حسب زمان (ΔT-time) برای نانوذرات خالص Fe_3O_4 (بدون پوشش کربنی) در دو غلظت ۵ mg/ml و ۱۰ نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود، افزایش دما صرفا به اندازه ۱ °C در ۳۰ ثانیه ابتدایی صورت گرفت و در بازه ۳۰–۱۲۰ ثانیه هیچ تغییر دمایی دیگری مشاهد نشد. عدم مشاهده افزایش دما برای نانوذرات خالص Fe_3O_4 نشان می‌دهد که توان اتلاف مغناطیسی مؤثر این نانوذرات خالص بسیار پایین‌تر از حد قابل اندازه‌گیری بوده است. این مشاهده ممکن است به دلیل کلوخه‌شدگی شدید این نانوذرات خالص ناشی از عدم وجود پوشش کربنی جدا کننده باشد. در حقیقت، در غیاب پوشش کربنی، برهم‌کنش‌های مغناطیسی بین ذرات Fe_3O_4 افزایش یافته و خوشه‌های مغناطیسی بزرگ‌تر در محیط حلال تشکیل می‌شود. این

تجمع‌ها منجر به کاهش کارایی ریلکسیشن نیل و براونی می‌شوند، و در نتیجه اتلاف انرژی کاهش می‌یابد. این نتیجه به وضوح نشان می‌دهد که پوشش کربنی نقش کلیدی در بهبود عملکرد هایپرترمیا دارد و در غیاب آن، تغییرات دمایی بسیار محدود باقی می‌ماند. با توجه به اینکه نمی‌توان بر روی داده‌های ثبت شده خطی را برازش کرد، نمی‌توان معیار دقیقی از SAR برای این نمونه داشت. با این حال، برای مقایسه با نمونه‌های بعدی، مقادیر SAR برای غلظت ۵ mg/ml برابر ۶.۹۰ W/g و برای غلظت ۱۰ mg/ml برابر ۳.۴۵ W/g محاسبه شد.



شکل ۳: نمودار دما–زمان ناشی از اثر هایپرترمیا توسط نمونه Fe_3O_4

شکل ٤ منحنی تغییرات دما بر حسب زمان را برای نانوذرات Fe_3O_4@C نشان می‌دهد. در هر دو غلظت، تغییر ΔT با زمان، افزایشی و تقریباً خطی است که بیانگر پایدار بودن فرآیند اتلاف گرمایی تحت میدان مغناطیسی متناوب است. مقدار R^2 بالا در هر دو مورد نشان‌دهنده همبستگی مناسب خطی است. طبق توضیحات فوق، شیب بیشتر در غلظت پایین‌تر مستقیماً به نرخ گرمایش اولیه بالاتر منجر شده و در نتیجه مقدار SAR (طبق معادله ۲) برای نمونه ۵ mg/ml برابر با ۲۰.۹ W/g محاسبه شده است، در حالی که این مقدار برای نمونه ۱۰ mg/ml به ۸.۷ W/g کاهش یافته است. این کاهش SAR با افزایش غلظت را می‌توان به افزایش تجمع ذرات در غلظت بالاتر، برهم‌کنش‌های مغناطیسی قوی‌تر بین ذرات نزدیکتر، و محدود شدن حرکت ذرات در غلظت بالاتر نسبت داد که منجر به افت اتلاف انرژی مغناطیسی مؤثر می‌شود. لازم به ذکر است که مقادیر SAR نسبت به نمونه نانوذرات Fe_3O_4 بدون پوشش کربنی افزایش قابل ملاحظه‌ای داشته است. به عبارتی، پوشش کربنی در Fe_3O_4@C با ایجاد فاصله بین ذرات، کاهش برهم‌کنش‌های مغناطیسی، بهبود پخش‌پذیری و پایدارسازی سطح، ریلکسیشن مؤثرتری را فراهم کرده است.



شکل ٤: نمودار دما–زمان ناشی از اثر هایپرترمیا توسط نمونه Fe_3O_4@C

گوپتا و همکاران [٦] کاهش SAR را بعد از پوشش‌دهی نانوذرات Fe_3O_4 با ZnO از مقدار ۹۲ W/g با ۸۰ گزارش داده‌اند. تیواری و همکاران [۷] کاربرد هایپرترمیا توسط نانوذرات اکسید آهن پوشش‌دهی شده با کربن را گزارش داده‌اند.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، قابلیت گرمایش ذاتی نانوذرات مغناطیسی Fe_3O_4 با پوشش بررسی شد. مزیت کار کنونی نسبت به پژوهش‌های دیگر در روش ساده هیدروترمال برای اعمال پوشش کربنی بر روی نانوذرات خالص Fe_3O_4 است. نانوذرات خالص Fe_3O_4 افزایش دمای ناچیزی ایجاد کردند. در مقابل، نمونه‌ی پوشش‌دار Fe_3O_4@C رفتار گرمایی به‌مراتب بهتری نشان داد و دارای گرمایش خطی پایدار و SAR برابر با ۲۰.۹ W/g در غلظت ۵ mg/ml بود که بیانگر نقش کلیدی پوشش کربنی در کاهش تجمع، بهبود پخش‌پذیری و تقویت اتلاف مغناطیسی است.

مرجع‌ها

[1] M. D. Nguyen, et al; “Fe3O4 Nanoparticles: Structures, Synthesis, Magnetic Properties, Surface Functionalization, and Emerging Applications”. *Applied Sciences*, **11**(23), (2021) 11301.
[2] G. Qian, et al; “Construction of Fe3O4-Loaded Mesoporous Carbon Systems for Controlled Drug Delivery”. *ACS Applied Bio Materials*, **4**(6), (2021) 5304–5311.
[3] T. Wu, et al; “Facile Hydrothermal Synthesis of Fe3O4/C Core–Shell Nanorings for Efficient Low-Frequency Microwave Absorption”. *ACS Applied Materials & Interfaces*, **8**(11), (2016) 7370–7380.
[4] G.Y. Mao, et al; “One-Step Hydrothermal Synthesis of Fe3O4@C Nanoparticles with Great Performance in Biomedicine”. *Journal of Materials Chemistry B*, **2**(28), (2014) 4481–4488.
[5] S. K. Bhakar, et al; “Optimizing Synthesis Parameters to Achieve Phase-pure Superparamagnetic Fe3O4 Nanoparticles for Magnetic Hyperthermia”. *BioNanoScience*, **15**(3), (2025) 508.
[6] J. Gupta, et al; “Core-Shell Fe3O4@ZnO Nanoparticles for Magnetic Hyperthermia and Bio-Imaging Applications”. *AIP Advances*, **11**(2), (2021) 025207.
[7] A. Tiwari, et al; “Graphitic Carbon Coated Magnetite Nanoparticles for Dual Mode Imaging and Hyperthermia”. *ACS Applied Nano Materials*, **3**(1), (2020) 896–904.

بررسی خواص ساختاری و مغناطیسی مس جایگزین شده در هگزافریت باریم با نسبت‌های مولی مختلف مس به آهن

درازهی، عبدالوهاب[۱]؛ داورپناه، عبدالمحمود[۱]
[۱]گروه فیزیک دانشگاه سیستان و بلوچستان ، بلوار دانشگاه، زاهدان

چکیده

جایگزینی یون‌ها به عنوان یکی از روش‌های کارآمد برای بهبود خواص مغناطیسی هگزافریت‌های باریم در نظر گرفته می‌شود. هگزا فریت باریم و مس (Cu) افزوده شده بر آن ($BaFe_{12-x}Cu_xO_{19}$ که در آن $x=0, 1,3$) بوده با استفاده از روش سل-ژل سنتز شدند. خواص ساختاری و مغناطیسی پس از بازپخت در دمای هفتصد درجه سلسیوس مورد بررسی قرار گرفتند. نتاج پراش اشعه ایکس تشکیل فاز هگزافریت نوع M همراه فاز هماتیت را نشان داد. با افزایش xاز صفر تا یک اندازه بلورک‌ها افزایش و پس از آن تا $x=۳$اندازه بلورک‌ها کاهش یافته است. بیشترین اندازه بلورک‌ها در $x=۱$ پیدا شد. با افزایش مقدار مس میدان وادارندگی کاهش ولی مغناطش اشباع افزایش یافته است. همه نمونه‌ها طبیعت مغناطیس سخت از خود نشان دادند.

واژه های کلیدی: هگزافریت باریم، جانشینی مس، وادارندگی، مغناطش

Investigation of the structural and magnetic properties of the Cu-substituted barium hexaferrites with different molar ratios of Cu/Fe

Durrazehi, Abdul Wahab[1]; Davarpanah, Abdol Mahmood[1]

[1]*Department of Physics, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan,*

Abstract

Substitution of ions as an efficient method for improving the magnetic properties of barium hexafernites is considered. Barium hexaferrite and copper (Cu) added to it $BaCu_xFe_{12-x}O_{19}$ (x = 0, 1, 3) were synthesized using the sol-gel method. Structural and magnetic properties were investigated after annealing the samples at 700°C. X-ray diffraction results showed the formation of M-type hexaferrite phase along with hematite phase. With increasing x from zero to one, the particle sizes increased, and then decreased up to x = 3. The maximum particle size was found at x = 1. With increasing copper content, the coercivity decreased but the saturation magnetization increased. All samples exhibited hard magnetic nature.

***Keywords**: Barium hexaferrite, Cu substitution, Coercivity, Magnetization*

PACS No. 75

مقدمه

شرایط مختلفی وجود دارد که برای جایگزینی در ساختار بلوری هگزافریت‌ها بسیار مورد نیاز است، مانند نوع ناخالصی (کاتیون‌های مبتنی بر فلزات گذار/غیرگذار/ کمیاب خاکی)، اندازه ناخالصی (بر اساس شعاع یونی)، ظرفیت (دو ظرفیتی/سه ظرفیتی)، حلالیت اتم افزودنی، اولویت مکان، و گشتاورهای مغناطیسی کاتیون‌های افزودنی. فریت‌ها دسته‌ی وسیعی از مواد اکسیدی با طیف وسیعی از کاربردهای مهم فناوری هستند. هگزافریت‌های نوع M، که $BaFe_{12}O_{19}$ به عنوان یک ترکیب نمونه‌ی اولیه در نظر گرفته می‌شود، نویدبخش کاربردهای ویژه‌ای به عنوان ابزار ذخیره‌سازی داده‌ی مغناطیسی و مغناطیسی – نوری با چگالی بسیار بالا هستند. هنوز شکاف‌های جدی در درک ریشه‌های اساسی و رهیافت‌های حاکم بر خواص مغناطیسی این مواد وجود دارد. روابط دقیق بین این خواص و ساختار ماده در مقیاس‌های طولی نانومتری نیز به طور کامل درک نشده است [۳-۱].

تهیه نمونه و روش‌های آزمایشی

مواد اولیه با خلوص بیش از ۹۹ درصد برای تولید نانوهگزافریت‌های $BaFe_{12}O_{19}$ بدون انباشتگی و آلاییده شده با مس استفاده شد. این مواد اولیه شامل نیترات مس ($Cu(NO_3)_2{\cdot}3H_2O$)، نیترات آهن ($Fe(NO_3)_3{\cdot}9H_2O$)، نیترات باریم ($Ba(NO_3)_3{\cdot}9H_2O$، Merck)، اسید سیتریک ($C_6H_8O_7$)، اتیلن گلیکول ($C_2H_6O_2$) و محلول آمونیاک (NH_4OH) هستند. در اینجا، اسید سیتریک به عنوان سوخت، اتیلن گلیکول به عنوان پیش‌ساز ژل و محلول آمونیاک برای تثبیت pH محلول مورد نیاز استفاده شده است.

نمونه خالص $BaFe_{12}O_{19}$: به مقدار ۲۹/۰۹۰ گرم آهن نیترات، ۱/۵۶۸۸ گرم باریم نیترات و ۲/۲۶۸۴ گرم سیتریک اسید در داخل ظرفی قرار گرفت. پس از آن پنجاه میلی لیتر آب دوبار تقطیر به مواد

قبلی اضافه شد. رنگ محلول قبل از هم زدن قهوه‌ای مایل به قرمز بود.
بعد از آن محلول را روی همزن در دمای تقریبا ۸۰ درجه سلسیوس به مدت ۵۰ دقیقه قرار دادیم تا فلزات به خوبی در آب حل شوند. بعد از حل شدن کامل فلزات، محلول را در همان دما نگه داشتیم و آمونیاک را قطره قطره به آن اضافه کردیم تا محلول از نظر اسیدی و بازی خنثی شود ($pH\approx 7$) و رسوب تشکیل شود. بعد خنثی شدن محلول، آن را در همان دما گذاشتیم تا آب آن تبخیر شود و رسوب بماند. پس از آن رسوب را از داخل بشر جدا و در هاون کوبیده تا پودر یکنواخت بدست آید. پودر به دست آمده در دمای ۷۰۰ درجه سلسیوس بازپخت شد.

مراحل مربوط به آماده‌سازی نمونه‌های جانشینی مس به جای آهن به روش سل–ژل:

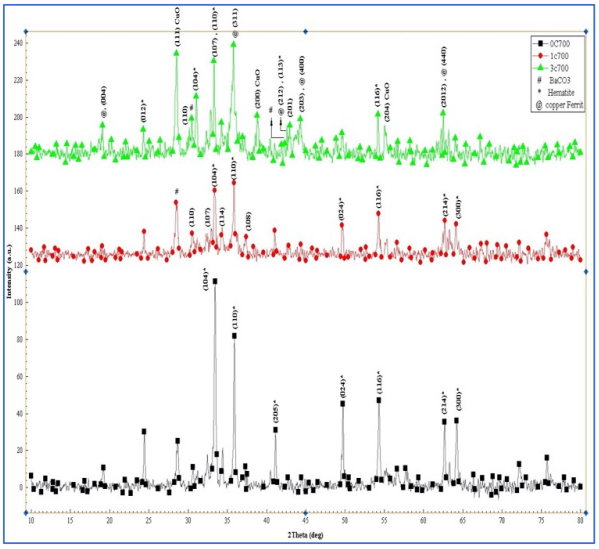
هگزافریت‌های نوع M دو ظرفیتی $BaCu_xFe_{12-x}O_{19}$ با استفاده از روش سل–ژل تهیه شدند که در آن x نسبت مولی مس به آهن، برابر صفر، یک و سه در نظر گرفته شد. تأثیر جایگزینی مس بر آهن بر خواص ساختاری و مغناطیسی فریت BaM بررسی شدند. ساختار، ترکیب و خواص نمونه‌های تهیه شده با استفاده از الگوهای پراش پرتو ایکس (XRD)، و اندازه ذرات و ریخت شناسی نمونه‌های تهیه شده با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) بررسی شد، اما خواص مغناطیسی با استفاده از دستگاه مغناطیس‌سنج نمونه ارتعاشی (VSM)، به دست آمد

نتایج پراش پرتو ایکس هگزافریت باریم بدون جایگزینی مس در ۷۰۰ °C:

در دما بازپخت ۷۰۰ درجه سلسیوس، ساختار هگزافریت شروع به شکل‌گیری کرده است، اما قله‌ها پهن و با شدت کم هستند که نشان‌دهنده بلورینگی متوسط و اندازه بلورک‌های کوچک است. فازهای واسطه‌ای مانند هماتیت و $BaCO_3$ نیز دیده شدند.

نتایج پراش پرتو ایکس هگزافریت باریم با جانشینی مس با نسبت‌های مولی مختلف، (مس به آهن) در دمای بازپخت ۷۰۰°C

الگوهای پراش پرتو ایکس هگزافریت باریم بدون جایگزینی مس و هگزافریت باریم با جانشینی مس با نسبت‌های مولی مختلف، (مس به آهن) در دمای بازپخت ۷۰۰ °C در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱. طیف‌های پراش پرتو ایکس مربوط به $BaCu_xFe_{12-x}O_9$ (x =0, 1, 3) در دمای بازپخت ۷۰۰ °C

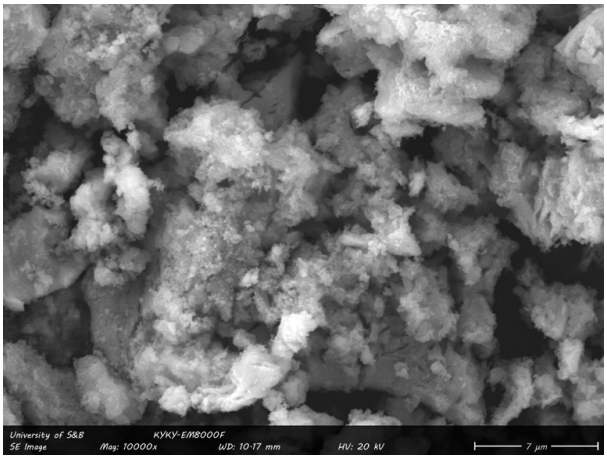
جدول ۱ پارامترهای ساختاری محاسبه‌شده از الگوهای پراش پرتو ایکس هگزافریت‌های باریم نوع M آلاییده شده با مس $BaCu_xFe_{12-x}O_9$ (x =0, 1, 3) در دمای بازپخت ۷۰۰ درجه سلسیوس را نشان می‌دهد. حجم سلول واحد و پارامتر c با افزایش مقدار مس کاهش ولی پارامترهای $a=b$ به طور نامنظم تغییر یافته است. این می‌تواند به اختلاف شعاع یونی اتمی مس و آهن نسبت داده شود. نتایج به دست آمده در توافق نسبتا خوبی با نتایج کمار و همکاران دارد [۳]

جدول ۱ پارامترهای ساختاری محاسبه‌شده از الگوهای پراش پرتو ایکس هگزا فریت‌های باریم نوع M آلاییده شده با مس $BaCu_xFe_{12-x}O_9$ (x =0, 1, 3) در دمای بازپخت ۷۰۰ درجه سلسیوس

نمونه	D (nm) اندازه بلورک‌ها	پارامترهای شبکه		c/a	V_{cell} ($Å^3$)
		$a=b$	c		
$BaFe_{12}O_{19}$	۴۵/۳۹	۵/۸۴۵۴	۲۴/۲۶۲۵	۴/۱۵۰۶	۷۱۷/۹۲۹۶
$BaCu_1Fe_{11}O_{19}$	۶۷/۱۴	۵/۸۸۷۹	۲۳/۱۷۶۷	۳/۹۳۶۳	۶۹۵/۸۰۹۴
$BaCu_3Fe_9O_{19}$	۳۵/۷۱	۵/۷۹۰۰	۲۲/۹۰۸۶	۳/۹۵۶۵	۶۶۵/۰۷۹۵

نتایج تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی هگزافریت باریم در دمای بازپخت ۷۰۰ درجه سلسیوس

اندازه ذرات و ریخت شناسی ریزساختاری نمونه‌های تهیه‌شده از نانوهگزافریت‌های باریم و جایگزین‌شده با مس با مطالعه تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) که در شکل ۲ نشان داده شده است، تأیید شد که اندازه متوسط از ۴۵ نانومتر به ۶۰ نانومتر افزایش می‌یابد.

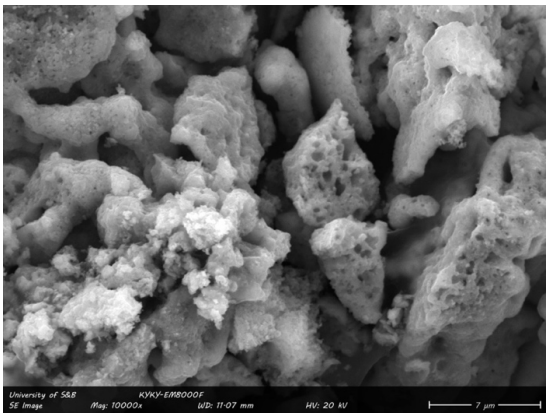


شکل ۲. تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی $BaCu_xFe_{12-x}O_{19}$ با نسبت مولی $x=0$ در دمای بازپخت ۷۰۰ °C

ساختار و اندازه ذرات نمونه‌ها با تصویربرداری میکروسکوپ الکترونی روبشی برای نمونه با $x=0$ در شکل ۲ نشان داده شده است. علاوه بر ذرات چند وجهی نیم دایره‌ای، وجود ذرات پلاکتی شش‌ضلعی بزرگ و کوچک وجود دارد. توزیع گسترده‌ای از اندازه ذرات با قطر ذرات از حدود ۲۲۰ نانومتر تا حدود ۳/۵ میکرومتر مشاهده شد که توزیع مشخصه آن حضور بیشتر ذرات با قطرهای معمول حدود ۳۵۰ تا حدود ۹۰۰ نانومتر است. اندازه فیزیکی ذرات به طور قابل توجهی بزرگتر در مقایسه با اندازه بلورک‌ها (جدول ۱) نشان می‌دهد که ذرات، احتمالاً به دلیل نقص‌های بلوری داخلی، دارای دامنه‌های تک ساختاری نیستند.

نتایج میکروسکوپ الکترونی روبشی هگزافریت باریم با جانشینی مس با نسبت مولی یک در دمای بازپخت ۷۰۰ درجه سلسیوس

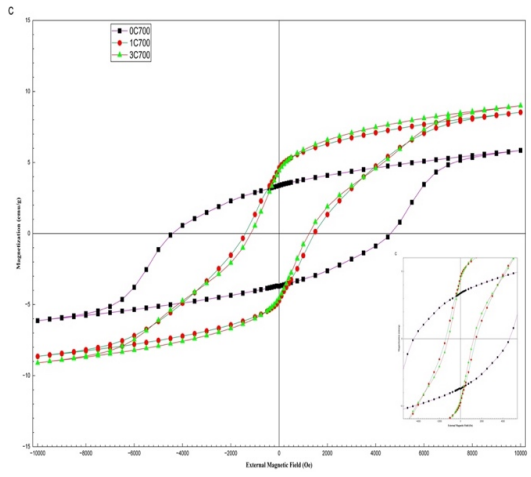
شکل ۳ تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی هگزافریت باریم در دمای بازپخت هفتصد درجه سلسیوس را نشان می‌دهد.



شکل ۳. تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی $BaCu_xFe_{12-x}O_{19}$ با نسبت مولی $x=1$ در دمای بازپخت ۷۰۰ °C

نتایج مغناطیس‌سنجی نمونه ارتعاشی حاصل از اثر نسبت مولی مس به آهن مختلف در دمای بازپخت ۷۰۰ درجه سلسیوس

حلقه‌های پسماند شکل ۴ برحسب تابعی از میدان مغناطیسی اعمال‌شده برای نانوهگزافریت‌های باریم (BaM) و نانوهگزافریت‌های باریم جایگزین شده با مس را برای نسبت‌های مولی x=۰, ۱, ۳ در دمای بازپخت هفتصد درجه سلسیوس را نشان می‌دهد که مغناطش اشباع با افزایش آلایش یون‌های مس دو ظرفیتی کاهش می‌یابد.



شکل ۴. منحنی‌های پسماند با نسبت‌های مولی مختلف در دمای بازپخت ۷۰۰ °C

جدول ۲. پارامترهای مغناطیسی محاسبه‌شده‌ی هگزافریت باریم نوع M با نسبت مولی مختلف x=۰, ۱, ۳ در دمای بازپخت ۷۰۰ °C را نشان می‌دهد. برای نانوهگزافریت‌های BaM نشان می‌دهد که: میدان وادارندگی با افزایش آلایش یون‌های مس دو ظرفیتی کاهش ولی مغناطش اشباع با افزایش آلایش یون‌های مس دو ظرفیتی افزایش می‌یابد چون مس وارد جایگاه شبکه شده است. مغناطش باقیمانده تا x=۳ افزایش و در x=۳ کاهش یافته است. میدان وادارندگی قابل توجه حدود ۴۵۹۴ Oe و مغناطش اشباع تا حدود ۵/۹ emu/g و مغناطش باقیمانده تا حدود ۳/۴ emu/g در هگزافریت بدون آلایش به دست آمده است.

جدول ۲. پارامترهای مغناطیسی محاسبه‌شده‌ی هگزافریت باریم نوع M با نسبت مولی مختلف $BaCu_xFe_{12-x}O_9$ (x =0, 1, 3) در دمای بازپخت ۷۰۰ °C

نسبت مولی مس به آهن x	وادارندگی $+H_c$ (Oe)	وادارندگی $-H_c$ (Oe)	مغناطش اشباع M_s(emu/g)	مغناطش باقیمانده M_r(emu/g)	نسبت M_r/M_s
صفر	۴۵۹۳/۸۹۳۱	۴۴۵۲/۳۲۴۷	۵/۸۵۲۶	۳/۳۸۴۱	۰/۵۷۸۲
۱	۱۴۸۵/۳۰۰۲	۱۳۸۶/۷۴۹۴	۸/۵۳۶۰	۴/۶۳۸۸	۰/۵۴۳۴
۳	۱۲۵۲/۸۷۹۹	۱۱۸۲/۰۹۵۷	۸/۹۹۵۵	۴/۴۳۵۰	۰/۴۹۳۰

افزایش مس (Cu) به شدت بر خواص مغناطیسی $BaFe_{12-x}Cu_xO_{19}$ $(x = 0, 1, 3)$، تأثیر می‌گذارد. با جایگزینی فزاینده Cu^{+2} با Fe^{+2}، در دمای بازپخت ۷۰۰ °C وادارندگی و مغناطش باقیمانده تمایل به کاهش دارند. از این یافته‌ها، خواص مغناطیسی برای کاربردهای مختلف در جاذب‌های مایکروویو، رسانه‌های ضبط، الکترودها و آهنرباهای دائمی را می‌توان با جایگزینی جزئی در بلورهای هگزافریت تنظیم کرد.

نتیجه گیری

نمونه‌های $BaFe_{12-x}Cu_xO_{19}$ $(x = 0, 1, 3)$ هگزافریت باریم به روش سل – ژل تهیه شدند. آنالیز پراش پرتو ایکس، میکروسکوپ الکترونی روبشی، مغناطیس‌سنجی نمونه ارتعاشی به شرح زیر خلاصه می‌شوند:

- آنالیز پراش پرتو ایکس تایید می‌کند که نمونه‌های تهیه‌شده از طریق روش سل – ژل، ساختار شش‌ضلعی ایده‌آلی را نشان می‌دهند. لازم به یادآوری است که پارامترهای شبکه (جدول ۱) به‌صورت یکنواخت با افزایش غلظت مس تا x=۱ از تحلیل الگوی پراش پرتو ایکس به‌دست آمده‌اند.
- تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) به وضوح تغییر پیکربندی $BaFe_{12-x}Cu_xO_{19}$ را با افزایش جایگزینی مس نشان می‌دهند.
- پودرهای هگزافریت باریم سنتز شده، مغناطش اشباع بالا، وادارندگی بالا، اتلاف مغناطیسی حداقل، پایداری شیمیایی بالا و ناهمسانگردی مغناطیسی قابل توجهی را نشان می‌دهند.

منحنی‌های پسماند همه نمونه‌ها در دمای اتاق، تحت میدان مغناطیسی اعمال شده با شدت ۱۰± KOe ثبت شدند. پارامترهای مغناطیسی ذکر شده در جدول ۲ با استفاده از منحنی پسماند به دست آمده است. تحلیل حلقه‌های پسماند ثابت می‌کند که همه نمونه‌ها دارای ماهیت مغناطیسی سخت هستند. مغناطش اشباع M_s با افزایش مس، افزایش یافته است. زیرا مس وارد جایگاه شبکه شده است.

سپاسگزاری

از همکاری حوزه معاونت پژوهشی دانشگاه سیستان و بلوچستان صمیمانه تشکر می‌کنیم.

مرجع‌ها

[1]. Steven Robert Kirk, Ab initio study of magnetic anisotropy of M-type hexaferrite thin films, PhD thesis, University of Salford, 2000

[2]. Anand Sharma, Rohit Jasrotia, Nisha Kumari, Sanjay Kumar, Suman, Ankit Verma, Sachin Kumar Godara, Jahangeer Ahmed, Saad M. Alshehri, Asiya M. Tamboli, Susheel Kalia, Khalid M. Batoo, Rajesh Kumar, Tailoring the structural and magnetic traits of copper modified $BaFe_{12}O_{19}$ nanostructured hexaferrites for recording media application, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **564** (2022) 170124

[3]. S. Kumar, S. Guha, S. Supriya, L.K. Pradhan, M. Kar, Correlation between crystal structure parameters with magnetic and dielectric parameters of Cu-doped barium hexaferrite, *J. Magn. Magn. Mater.* **499** (2020), 166213.

A.M.DAVARPANA@phys.usb.ac.ir
adurrazahi@gmail.com

بررسی خواص فوتوکاتالیستی دولایه تیتانیوم دی اکسید/نقره لایه نشانی شده به روش تبخیر حرارتی

گودرزی ، مریم[۱] ؛ زارعی‌مقدم، رضا[۱]؛ قلی‌پور شهرکی،مهران[۱]

[۱] گروه فیزیک دانشکده علوم، دانشگاه اراک، ۳۸۱۵۶-۸۸۳۴۹

چکیده

در این پژوهش، دولایه TiO_2/Ag به روش تبخیر حرارتی و در زوایای لایه‌نشانی ۶۰° و ۸۵° بر روی بستر شیشه‌ای تهیه شد. خواص نوری نمونه‌ها شامل جذب و عبور با استفاده از طیف‌سنج UV/Vis بررسی گردید که نتایج نشان داد با افزایش زاویه انباشت، جذب اپتیکی کاهش و عبور اپتیکی افزایش می‌یابد. مورفولوژی سطح نیز توسط آنالیز FESEM ارزیابی شد و افزایش زاویه لایه‌نشانی موجب افزایش تخلخل در دولایه‌های TiO_2/Ag گردید. همچنین فعالیت فوتوکاتالیستی نمونه‌ها از طریق تخریب رنگ متیل اورانژ تحت تابش UV در بازه‌های زمانی ۱۰، ۲۰، ۳۰، ۶۰ و ۹۰ دقیقه با استفاده از طیف‌سنج UV/Vis ارزیابی شد.

واژه های کلیدی: *دولایه تیتانیوم دی اکسید/نقره، تبخیر حرارتی، فوتوکاتالیست، متیل اورانژ*

Investigation of the photocatalytic activity of TiO_2/Ag thin films produced by thermal evaporation.

Goodarzi, Maryam[1]; Zarei Moghadam, Reza[1]; Gholipour shahraki, Mehran[1]

[1] *Department of Physics, Faculty of Science, University of Arak 88349-38156*

Abstract

In this research, TiO_2/Ag bilayers were prepared on glass substrates via the thermal evaporation method at deposition angles of 60° and 85°. The optical properties of the samples, including absorption and transmission, were investigated using UV/Vis spectroscopy, and the results showed that by increasing the deposition angle, optical absorption increases and optical transmission decreases. Surface morphology was also evaluated by FESEM analysis, and increasing the deposition angle caused an increase in porosity in the TiO_2/Ag bilayers. Furthermore, the photocatalytic activity of the samples was evaluated through the degradation of methyl orange under UV irradiation at intervals of 10, 20, 30, 60, and 90 minutes using UV/Vis spectroscopy.

***Keywords**: bilayer TiO_2/Ag, Thermal evaporation, Photocatalyst, Methyl Orange*

PACS No 68

مقدمه

تیتانیوم دی‌اکسید (TiO_2) به عنوان یک نیمه هادی، به‌طور گسترده‌ای در فعالیت های فوتوکاتالیستی مورد استفاده قرار می‌گیرد. با این وجود، کارایی آن به دلیل شکاف انرژی نسبتاً بالا و بازترکیب سریع الکترون و حفره‌ها محدود شده است. برای رفع این مشکل، دو راهکار اصلی شامل آلایش و ساخت پیوند ناهمگن پیشنهاد می‌شود. در این راستا، ساخت پیوند ناهمگن به عنوان روشی مؤثرتر شناخته می‌شود، زیرا با ایجاد یک میدان الکتریکی داخلی، جداسازی حامل‌های بار را بهبود می‌بخشد. زمانی که دو لایه نیمه هادی–فلز با سطوح انرژی متفاوت ترکیب می‌شوند، بازترکیب الکترون–حفره کاهش یافته و عملکرد فوتوکاتالیستی افزایش می‌یابد[۱]. این نانولایه‌ها، ساختاری قابل کنترل، سطحی یکنواخت و مرزهای بین‌لایه‌ای شفاف دارند و به خوبی نور را جذب می‌کنند[۱]. در این میان، لایه نقره (Ag) به عنوان یکی از

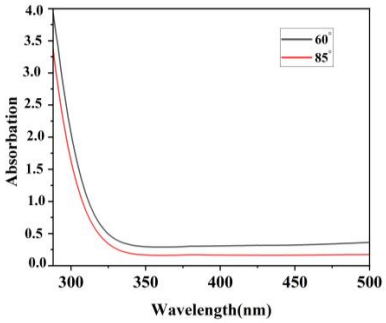
راهکارهای مؤثر برای غلبه بر محدودیت‌های فوتوکاتالیستی تیتانیوم دی‌اکسید مطرح است. ذرات نقره از طریق اثر پلاسمونیک سطحی، جذب نور مرئی را افزایش داده و از بازترکیب حامل‌های بار جلوگیری می‌کنند. با این حال، کارایی این سیستم به شدت به مورفولوژی سطح و پراکندگی نقره وابسته است[۲]. لایه‌نشانی در زاویه مایل یکی از روش‌های کارآمد در لایه‌نشانی بخار فیزیکی به شمار می‌آید که در آن زیرلایه با زاویه‌ای مشخص نسبت به جریان بخار قرار می‌گیرد و این امر منجر به رشد نانوساختارهای ستونی مجزا و قابل‌کنترل می‌شود.پدیده سایه‌زنی در زوایای بالا باعث افزایش تخلخل و سطح مؤثر می‌گردد. به دلیل این ویژگی‌ها، این روش به عنوان روشی مناسب برای طراحی ساختارهای متخلخل در کاربردهایی نظیر حسگرهای گازی و ادوات اپتوالکترونیکی شناخته می‌شود.

کارهای آزمایشگاهی

دولایه‌های TiO_2/Ag به روش تبخیر حرارتی بر روی زیرلایه‌های شیشه‌ای لایه‌نشانی شدند. برای این منظور از لام‌های شیشه‌ای با ابعاد $2\times2\ cm^2$ به‌عنوان بستر استفاده شد. پیش از فرایند لایه‌نشانی، زیرلایه‌ها به‌منظور حذف آلودگی‌های سطحی در حمام اولتراسونیک به‌ترتیب با محلول آب و صابون، الکل و استون، هر کدام به مدت ۱۰ دقیقه شست‌وشو داده شدند و سپس در دمای محیط خشک گردیدند. پس از آماده‌سازی، زیرلایه‌ها در نگهدارنده نمونه دستگاه قرار داده شدند.فرآیند لایه‌نشانی با استفاده از دستگاه پوشش‌دهی خلأ (Vacuum Coating Unit, Model 15F6) انجام شد. در این پژوهش از پودر TiO_2 با خلوص ۹۹٫۹۹٪ استفاده گردید که در بوته مولیبدنی قرار داده شد. با عبور جریان الکتریکی از بوته، ماده تبخیر شده و بر روی زیرلایه‌ها رسوب کرد. فشار پایه محفظه ابتدا توسط پمپ روتاری تا حدود 3×10^{-3} میلی‌بار و سپس به‌وسیله پمپ توربومولکولار تا حدود $2{,}8\times10^{-5}$ میلی‌بار کاهش داده شد. فاصله بین منبع تبخیر و زیرلایه‌ها حدود ۲۰ سانتی‌متر در نظر گرفته شد. سرعت رسوب‌دهی حدود $1{,}5\ Å/s$ بوده و ضخامت لایه TiO_2 حدود ۱۱۳ نانومتر با استفاده از ضخامت‌سنج بلور کوارتز کنترل شد.پس از لایه‌نشانی TiO_2، لایه نقره با ضخامت حدود ۱۷٫۵ نانومتر به همان روش و در همان شرایط خلأ بر روی لایه TiO_2 رسوب داده شد تا ساختار دولایه TiO_2/Ag تشکیل شود. لایه‌نشانی نمونه‌ها در دو زاویه مختلف 60° و 85° نسبت به جهت شار بخار انجام شد تا اثر زاویه لایه‌نشانی بر ساختار و خواص نمونه‌ها بررسی شود.برای بررسی خواص نوری نمونه‌ها، طیف جذب و عبور آن‌ها در بازه طول موج ۲۰۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر با استفاده از دستگاه طیف‌سنجی (OptizenPoP)UV/Vis اندازه‌گیری شد. مورفولوژی سطح نمونه‌ها نیز به کمک میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (TESCAN MIRA3)FESEM مورد مطالعه قرار گرفت. منظور ارزیابی فعالیت فوتوکاتالیستی، از محلول رنگ متیل اورانژ با غلظت ۱۵ ppm استفاده شد. نمونه‌ها تحت تابش یک لامپ زنون ۵۰ وات قرار گرفتند و در فواصل زمانی ۱۰، ۲۰، ۳۰، ۶۰ و ۹۰ دقیقه، جذب محلول با استفاده از طیف‌سنج UV/Vis اندازه‌گیری شد. تغییرات غلظت رنگ از طریق نسبت (C/C_0) محاسبه گردید که در آن (C_0) غلظت اولیه و (C) غلظت در زمان (t) است.

نتایج و بحث

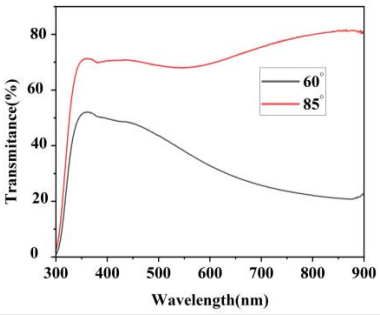
شکل ۱ طیف جذب دولایه TiO_2/Ag نشان می‌دهد نمونه تهیه‌شده در زاویه 60° جذب بیشتری نسبت به نمونه 85° نشان می‌دهد، در حالی‌که با افزایش زاویه رسوب به 85°، شدت جذب به‌طور محسوسی کاهش یافته و شفافیت در ناحیه مرئی بهبود می‌یابد. این رفتار را می‌توان به تغییرات ریزساختاری ناشی از رشد مایل در زوایای بالاتر نسبت داد که موجب افزایش تخلخل می‌شود.



شکل ۱ طیف جذب دولایهTiO_2/Ag در زوایای لایه نشانی 60° و85°.

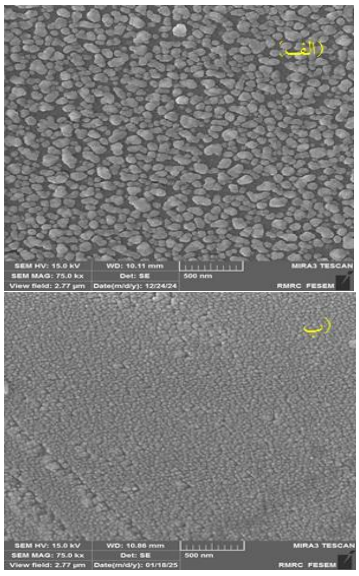
شکل ۲ طیف عبور دولایه TiO_2/Ag بیانگر اثر بارز زاویه لایه‌نشانی بر عملکرد اپتیکی ساختار است. با افزایش زاویه لایه نشانی از 60° به 85°، عبور نوری در گستره مرئی افزایش یافته و

رفتار طیفی پایدارتر می‌شود؛ به‌طوری‌که نمونه °۸۵ عبور بالا و تقریباً یکنواختی را نشان می‌دهد، در حالی‌که در °۶۰ کاهش تدریجی عبور در طول‌موج‌های بلندتر مشاهده می‌شود. این تفاوت به تغییرات ریزساختاری ناشی از رشد مایل در زاویه‌های بالاتر نسبت داده می‌شود[۳].



شکل ۲ طیف عبور دولایه TiO_2/Ag در زوایای لایه نشانی °۶۰ و °۸۵ .

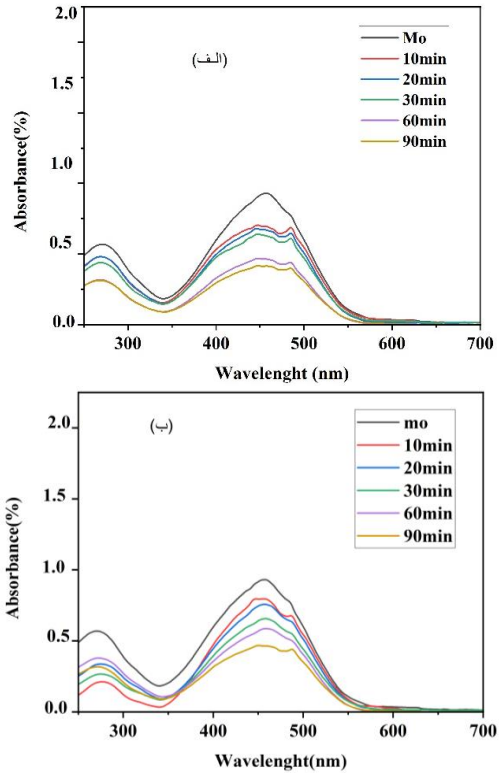
شکل ۳ تصاویر FESEM دولایه TiO_2/Ag را نشان می‌دهد که افزایش زاویه لایه‌نشانی از °۶۰ به °۸۵ منجر به افزایش تخلخل، کاهش قطر ستون های رشد و همچنین کاهش فاصله بین ستون‌های رشد یافته می‌شود. این پدیده ناشی از تشدید اثر سایه افکنی در رشد مایل است[٤].



شکل ۳ الف) تصویر FESEM نمونه°۶۰ ، ب) نمونه °۸۵.

در زاویه °۶۰، ساختار نسبتاً متراکم‌تری مشاهده می‌شود، در حالی‌که در °۸۵، ساختار متخلخلی وجود دارد. افزایش تخلخل باعث کاهش ضریب شکست مؤثر لایه می‌گردد که در نتیجه آن، جذب نوری کاهش یافته و عبور افزایش می‌یابد. بنابراین، تفاوت در رفتار طیف جذب و عبور دولایه TiO_2/Ag به‌طور مستقیم به تغییرات میزان تخلخل در زوایای بالاتر نسبت داده می‌شود؛ به‌گونه‌ای که نمونه °۸۵ به دلیل تخلخل بیشتر، شفافیت بالاتر و جذب کمتری را نشان می‌دهد.

شکل ٤ طیف جذب محلول متیل اورانژ در اثرفعالیت فوتوکاتالیستی دولایهTiO_2/Ag با زاویه‌لایه‌نشانی الف) °۶۰ ،ب) °۸۵ تحت تابش لامپ زنون با توان ۵۰ وات را نشان می‌دهد.

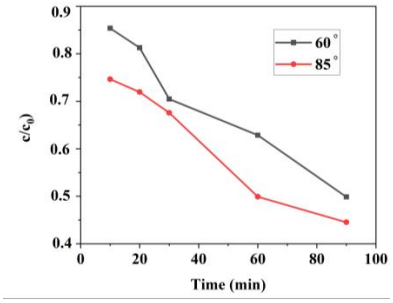


شکل ٤ طیف جذب محلول متیل اورانژ در اثرفعالیت فوتوکاتالیستی دولایه TiO_2/Ag با زاویه‌لایه‌نشانی الف) °۶۰ ،ب) °۸۵

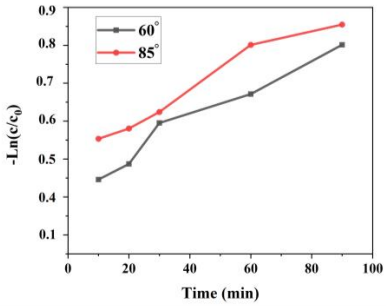
در این شکل می توان دید که با افزایش زمان تابش، شدت پیک جذب کاهش می‌یابد که این امر نشان‌دهنده تخریب فوتوکاتالیستی رنگ است.مقایسه نمودارها نشان می‌دهد که کاهش جذب در نمونه °۸۵ سریع‌تر از °۶۰ اتفاق می‌افتد و این موضوع بیانگر فعالیت فوتوکاتالیستی بالاتر آن می‌باشد.این بهبود عملکرد ناشی از تخلخل بیشتر در زاویه‌های بالاتر به دلیل اثر سایه‌زنی است که منجر به افزایش سطح ویژه و تماس بهتر آلاینده با سطح فعال

می‌شود[۵]. علاوه بر این، حضور لایه Ag با ایجاد پلاسمونیک سطحی موضعی، میدان الکترومغناطیس نزدیک سطح را تشدید کرده و جذب نور توسط TiO_2 را افزایش می‌دهد. این پدیده موجب تولید موثرتر جفت الکترون–حفره و کاهش بازترکیب آن‌ها می‌شود. درنتیجه گونه های فعال اکسیدکننده بیشتری تشکیل شده و فعالیت فوتوکاتالیستی تقویت می‌گردد.

شکل ۵ تغییرات نسبت (C/C_0) را برای دولایه TiO_2/Ag لایه‌نشانی‌شده در زوایای ۶۰° و ۸۵° نشان می‌دهد. هر دو نمونه با گذشت زمان افزایش فعالیت فوتوکاتالیستی را نشان می‌دهند، اما نمونه ۸۵° به دلیل تغییرات مورفولوژیکی و افزایش سطح فعال در زاویه لایه‌نشانی بالاتر، راندمان بیشتری دارد که به جداسازی مؤثرتر جفت الکترون–حفره و بهبود عملکرد فوتوکاتالیستی منجر می‌شود. همچنین، نمودار $(-\ln(C/C_0))$ در شکل ۶ بیانگر پیروی فرآیند از سینتیک شبه‌مرتبه اول برای هر دو نمونه است؛ با این حال، مقادیر بالاتر در نمونه ۸۵° نشان‌دهنده فعالیت فوتوکاتالیستی قوی‌تر آن نسبت به نمونه ۶۰° است.



شکل ۵ نمودار تخریب متیل اورانژ به صورت تابعی از زمان تابش



شکل ۶ نمودار $(-\ln(C/C0))$ در مقابل زمان تابش

نتیجه گیری

نتایج این پژوهش نشان می‌دهد افزایش زاویه لایه‌نشانی از ۶۰° به ۸۵° در دولایه TiO_2/Ag، به دلیل تشدید اثر سایه‌زنی، تخلخل و سطح ویژه را افزایش می‌دهد. این تغییر ریزساختاری، ضمن کاهش جذب و افزایش عبور در ناحیه مرئی، اثر پلاسمونیک سطحی لایه نقره را بهبود می‌بخشد. تشدید پلاسمون، میدان الکترومغناطیسی نزدیک سطح را تقویت کرده و تولید و جدایش جفت‌های الکترون–حفره را افزایش می‌دهد. در نتیجه، علی‌رغم عبور نوری بالاتر، فعالیت فوتوکاتالیستی بهبود می‌یابد. در مجموع، زاویه ۸۵° به دلیل بهره‌گیری همزمان از سطح ویژه بالا و اثر پلاسمونیک نقره، گزینه‌ای مناسب برای کاربردهای فوتوکاتالیستی است.

مرجع‌ها

۱. Subramanian, V., E. Wolf, and P.V. Kamat, *Semiconductor–metal composite nanostructures. To what extent do metal nanoparticles improve the photocatalytic activity of TiO2 films?* The Journal of Physical Chemistry B, 2001. **105**(46): p. 11439–11446.
۲. Mao ,T., et al., *Research progress of TiO2 modification and photodegradation of organic pollutants.* Inorganics, 2024. **12**(7): p. 178.
۳. Hawkeye, M.M. and M.J. Brett, *Glancing angle deposition: Fabrication, properties, and applications of micro-and nanostructured thin films.* Journal of Vacuum Science & Technology A, 2007. **25**(5): p. 1317–1335.
۴. Li, K.-D. and Y.-W. Dong, *Modeling the influence of incident angle and deposition rate on a nanostructure grown by oblique angle deposition.* Journal of Physics D: Applied Physics, 2017. **50**(6): p. 065302.
۵. Naas, L.-A., et al., *Effect of TiN thin films deposited by oblique angle sputter deposition on sol-gel coated TiO2 layers for photocatalytic applications.* Thin Solid Films, 2024. **793**: p. 140275.

مقایسه سنتز سبز نانوکامپوزیت ZnO/Fe_3O_4 بانانوذرات ZnOوFe_3O_4 با عصاره جلبک سبز کره ای و بررسی ویژگی های ساختاری و خواص فوتوکاتالیستی و مغناطیسی

صمدی، هستی ؛ زارعی مقدم، رضا؛ قلی پور شهرکی، مهران

دانشکده فیزیک دانشگاه اراک ، بلوار سردشت بلوار کربلا ، اراک

چکیده

در این پژوهش سنتز سبز نانوذرات اکسید روی (ZnO) و آهن (Fe_3O_4) توسط روش هم رسوبی و سنتز نانوکامپوزیت ZnO/Fe_3O_4 به روش لایه ای با استفاده از عصاره جلبک سبز انجام شد. جلبک سبز در این سنتز به عنوان عامل کاهنده و تثبیت کننده نانوذرات و نانوکامپوزیت عمل می کند. خواص فوتوکاتالیستی نانومواد با متیل اورانژ به عنوان آلاینده مورد بررسی قرار گرفت. خواص ساختاری، مورفولوژیکی ، فوتو کاتالیستی و مغناطیسی به ترتیب با استفاده از آنالیزهای پراش پرتو ایکس(XRD)، میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (FESEM)، مغناطیس سنج ارتعاشی (VSM) و اسپکتوفوتومتری مرئی فرابنفش (UV-Vis) بررسی شد. نتایج XRD نشان داد که ذرات کریستالی هستند و اندازه بلورک ها با استفاده از معادله دبای- شرر تعیین شد. نتایج مورفولوژی نشان داد که نمونه ها به شبه کروی هستند. بالاترین بازده فوتوکاتالیستی مربوط به نانوکامپوزیت ZnO/Fe_3O_4 ۹۷/۸ ٪ بدست آمد. خاصیت مغناطیسی نانوکامپوزیت نسبت به نانوذرات آهن کاهش یافت.

واژه های کلیدی: ***سنتز سبز ، نانو کامپوزیت ، فعالیت فوتوکاتالیست، نانو ذرات مغناطیسی و اکسید روی، عصاره جلبک سبز کره ای***

Comparison of green synthesis of ZnO / Fe_3O_4 nanocomposite ZnO and Fe_3O_4 nanoparticles with Korean green algae extract and investigation of structural features and photocatalytic and magnetic properties

Samadie, Hastie[1]; Zaree Moghadam, Reza; Gholipour Shahraki, Mehran

Department of Physics, University of Arak[123]

Abstract

In this study, green synthesis of zinc oxide (ZnO) and iron (Fe_3O_4) nanoparticles was carried out via the co-precipitation method, and the ZnO/Fe3O4 nanocomposite was prepared using a layered synthesis approach with green algae extract. In this synthesis, green algae act as both a reducing and a stabilizing agent for the formation of nanoparticles and the resulting nanocomposite. The photocatalytic properties of the nanomaterials were investigated using methyl orange as the model pollutant. Structural, morphological, photocatalytic, and magnetic properties were respectively evaluated using X-ray diffraction (XRD), field-emission scanning electron microscopy (FESEM), vibrating sample magnetometry (VSM), and UV–Vis spectrophotometry. The XRD results indicated that the particles are crystalline, and the crystallite sizes were determined using the Debye–Scherrer equation. Morphological results showed that the samples have a quasi-spherical shape. The highest photocatalytic efficiency was obtained for the ZnO/Fe_3O_4 nanocomposite, with a value of 71.23%. The magnetic properties of the ZnO/Fe_3O_4 nanocomposite decreased compared to the pure iron nanoparticles.

Keywords: *green synthesis, nanocomposite, ZnO and iron nanoparticles, Korean green algae extract, photocatalyst activity*

PACS No.

مقدمه

در سال های اخیر، استفاده از بیوسنتز برای تولید نانوذرات به دلایل مختلف، افزایش چشم گیری پیدا کرده است؛ که از میان آن ها می توان به ایمن تر بودن، پایداری بیشتر در محیط زیست و مقرون به صرفه بودن نسبت به مواد شیمیایی سنتی و روش های فیزیکی اشاره کرد [۱]. برخی عصاره های گیاهی حاوی ترکیباتی

مانند: آنتی اکسیدان ها، پلی فنول ها، قندهای کاهنده، بازهای نیتروژنی و اسیدهای آمینه هستند، که توانایی احیای یون های فلزی در نمک فلز را دارند. در نهایت منجر به تشکیل نانوذرات می شود. این ترکیبات نه تنها به افزایش پایداری ذرات کمک می کنند، بلکه هیچ سمیتی از خود نشان نمی دهند [۲]. در دهه های اخیر، توجه قابل ملاحظه ای به نانو مواد به ویژه، نانو ذرات اکسید فلزات شده است. در میان نانوذرات اکسید فلزی، نانوذرات اکسید روی خواص فیزیکی و شیمیایی امیدوار کننده ای ازجمله گاف نواری وسیع (۳/۳eV)، انرژی بستگی مناسب(۶۰meV)، پایداری حرارتی، سازگاری زیستی و خاصیت پیزوالکتریک از خود نشان می دهند [۳]. نانوذرات Fe_3O_4 به‌دلیل داشتن ویژگی‌های مغناطیسی و همچنین قابلیت ایجاد مسیرهای مؤثر برای جداسازی بارهای الکتریکی، در بسیاری از سامانه‌های فوتوکاتالیستی به‌عنوان جزء کمکی استفاده می‌شوند. این نانوذرات می‌توانند با تشکیل ناحیه‌های ناهمگن در کنار فوتوکاتالیست‌های دیگر (مثل ZnO) به کاهش بازترکیب الکترون–حفره کمک کنند؛ در نتیجه، تولید گونه‌های فعال مانند رادیکال‌های •OH یا سایر گونه‌های اکسیدکننده افزایش یافته و سرعت تجزیه آلاینده‌ها بیشتر می‌شود. از طرفی، وجود Fe_3O_4 در نانوکامپوزیت‌ها معمولاً باعث بهبود انتقال بار و گاهی نیز مشارکت در فرآیندهای ردوکس سطحی می‌گردد. همچنین به‌واسطه مغناطیسی بودن، بازیابی و جداسازی نانوکاتالیست از محیط واکنش برای استفاده‌های بعدی ساده‌تر می‌شود.

این مقاله به مقایسه ویژگی های مورفولوژی، نوری، مغناطیسی و فوتوکاتالیستی نانوذرات Fe_3O_4 و ZnO با نانوکامپوزیت *ZnO/Fe₃O₄ سنتز شده با* عصاره جلبک سبز پرداخته است. این جلبک سبز تک‌لایه‌ای با ساختار برگ‌مانند است و به‌دلیل جذب نیتروژن و فسفر، در سیستم‌های کشاورزی یکپارچه (IMTA) اهمیت زیست‌محیطی دارد. این جلبک علاوه بر ارزش غذایی، خواص ضدمیکروبی، ضدالتهابی دارد و تقویت‌کننده سیستم ایمنی، نیز هست.با توجه به این که تمرکز مقاله معطوف به ویژگی های فوتوکاتالیستی، مغناطیسی وساختاری این نانومواد است. از این رو متیل اورانژ برای بررسی فعالیت فوتوکاتالیستی استفاده شده وآنالیزهای پراش پرتو ایکس (XRD)، طیف‌سنجی تبدیل فوریه فروسرخ (FT-IR)(BURKER.alfa model) و میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (MIRA3TESCAN-XMU) و با دستگاه طیف سنجی UV/Vis(Nano Mabna Iranian) برای بررسی ویژگی های ساختاری و مورفولوژی و برای مغناطیس سنج ارتعاشی (*VSM*) (MDK made in Iran) انجام شده است.

مواد

مواد استفاده شده در این پژوهش عبارتند از:($ZnNO_3.6H_2O$) ، $FeCl_3.6H_2O$، ($FeCl_2{\cdot}4H_2O$)و (NaOH) با خلوص ۹۹ درصد از برند Merck به همراه آب دیونیزه (DI) است.

روش عصاره گیری

جلبک های کره ای از محصولات ارگانیک شرکت واندومیو[1] تهیه شده که فقط حاوی نمک استرالیایی است. جلبک ها را بعد از چند بار خیساندن در آب DI(به جهت حذف نمک در بسته بندی) در معرض نور خورشید خشک شده، سپس با چند بار آسیاب کردن، به صورت پودر یکنواخت درمی آیند.۱۰ گرم پودر را با ۱۰۰ میلی لیتر آب DI مخلوط کرده و به مدت ۲۰ دقیقه جوشانده می شود. در نهایت، آن را از کاغذ فیلترعبورداده تا عصاره یکنواخت حاصل شود.

سنتز سبز نانوکامپوزیت ZnO/Fe_3O_4

ابتدا ($ZnNO_3.6H_2O$)، ۰/۰۱ مولار را در ۳۰۰میلی لیترآب DI تهیه کرده، سپس۱۰ میلی لیتر عصاره را به آن اضافه کرده و pH محلول را به ۱۱ رسانده؛ پس از ۳بار سانتریفیوژ (۱۰ دقیقه در۲۰۰۰ rpm)، سوسپانسیون در دمای ۹۰°C درآون کاملاً خشک شد به مدت ۲ ساعت در کوره در دمای۶۰۰c° بازپخت می شود. سپس$FeCl_3.6H_2O$و$FeCl_2 \cdot 4H_2O$ به ترتیب با نسبت ۲:۱ مخلوط کرده پس از اضافه کردن ۱۰ میلی لیتر عصاره، pH محلول بالا برده تا رسوبات قهوه ای مایل به سیاه پدیدار شود. پس از شستشو با آب DI ، در دمای ۸۰°C خشک می شود.

در نهایت محلول ۱مولار نانوذراتFe_3O_4 و ZnO را تهیه کرده و با اضافه کردن عصاره(۱۰ میلی لیتر) و رسیدن pH به ۱۱ نانوکامپوزیت تشکیل می شود. پس ازسانتریفیوژ کردن در دمای ۱۲۰C° خشک

[1] Wandomiyeo

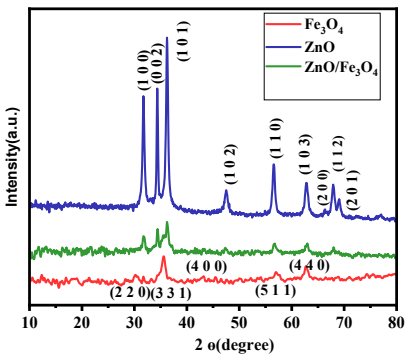
می شود.

مباحث ونتایج

آنالیز پراش پرتو ایکس

برای بررسی خواص ساختاری از نمونه طیف اشعه ایکس گرفته شد. الگوی XRD، نانوذرات اکسید روی و آهن در شکل ۲ نشان داده شده است. قله‌های مشترک در نانوکامپوزیت ZnO/Fe_3O_4 با کمی جابجایی در ۶۶/۳۱۴°، ۶۷/۸۷۳°، ۶۹/۰۳۲° و ۷۶/°۹۵۵ ۲θ=۳۴/۳۶°، ۳۵/۳۱°، ۳۹/۲۲۲°، ۴۷/۵۱۵°، ۵۳/۸۷۲°، ۶۳/۸۰۹° مشاهده شده است. این قله ها تشکیل نانوکامپوزیت را تأیید می کنند نشان می دهد اندازه نانوذرات با استفاده از معادله دبای- شرر، بدست آمد:

$$D = K\lambda/(\beta \cos\theta) \qquad (۱)$$

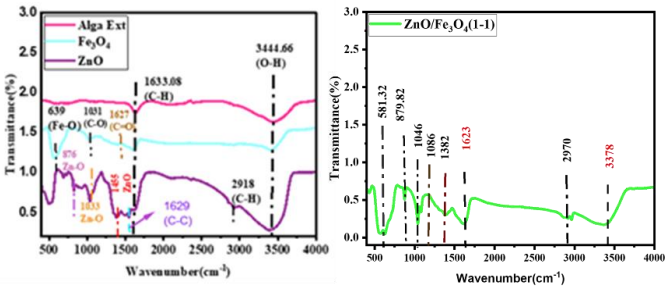


شکل۲: نمودار پراش پرتو ایکس نانومواد با عصاره جلبک سبز کره ای..

که D اندازه بلورک و K و $\lambda(Cuk_\alpha)$ به ترتیب برابر است با ۰/۹و۱/۵۴۰۶۰نانومتر و β نیز پهنای پیک در نیمه ارتفاع ماکزیمم (FWHM) است [۴]. با استفاده از رابطه شرر اندازه بلورک های ZnOوFe_3O_4 و ZnO/Fe_3O_4 به ترتیب۲/۰۵، ۱۲/۱ و ۱۸/۵۸ نانومتر بدست آمد.

طیف‌سنجی تبدیل فوریه فروسرخ

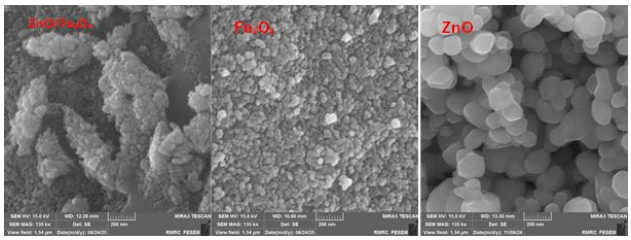
شکل ۳ مشخصه طیف FTIR گروه های عاملی، نانومواد را در محدوده طول موج $^{-1}$cm ۴۰۰۰- ۴۰۰ نشان می دهد [5]. طیف FTIR عصاره جلبک K. نوارهای جذبی قابل توجهی را در $^{-1}$cm ۳۴۴۴.۶۶ و۱۶۳۳/۰۸cm^{-1} نشان داد. کشش O-H، مرتبط با اسیدهای فنولیک و فنول‌ها، مربوط به کشش C=C است که به کشش آلکن واسطه موجود در حلقه آروماتیک نسبت داده می‌شود [۱۶]. علاوه بر این، در ZnO / Fe_3O_4، پیک‌های جذب مشاهده شده در ۵۸۱cm^{-1} و $^{-1}$cm ۶۳۳ به ترتیب مربوط به مدهای ارتعاشی کششی Fe-O و Zn-O هستند. پیک‌های جذب که در محدوده $^{-1}$cm(۲۹۲۵- ۲۹۷۰) قرار دارند، مربوط به ترکیبات آمین هستند. علاوه بر این، پیوندهای C=O، C=C و C-OH به ترتیب در ۱۶۲۳cm^{-1}، ۱۳۸۲cm^{-1} و $^{-1}$cm ۱۰۸۶پیک انقباض ناشی از انقباض را نشان می‌دهند[6] .



شکل۳: طیف FTIR گروه های عاملی نانومواد با عصاره جلبک سبز کره ای.

میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی

شکل۴ ویژگی های مورفولوژی نانوذرات اکسید روی، آهن و نانوکامپوزیت ZnO/Fe_3O_4 را توسط FESEM نشان می دهد. نانوساختارها تقریباً یکنواخت و به شکل شبه کروی هستند.



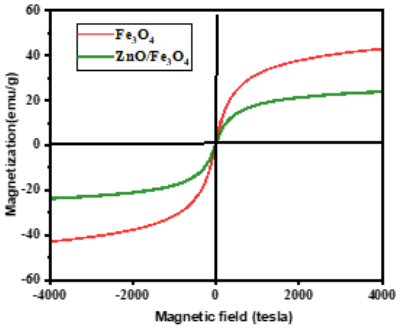
شکل۴: FESEM نانوساختارهای سنتز شده با عصاره جلبک سبز کره ای.

تقریبا مشابه این مورفولوژی قبلا هم برای این ساختارها گزارش شده است[۷].

مغناطیس سنج ارتعاشی

شکل ۵، ویژگی‌های سوپرپارامغناطیس (SPM) نانوذرات Fe_3O_4 و نانوکامپوزیت ZnO / Fe_3O_4 را نشان می دهد. با اضافه شدن اکسید روی، خاصیت مغناطیسی نانوذرات Fe_3O_4، کاهش پیدا کرده. این نتیجه توسط پژوهش های دیگر نیز اثبات شده است[8].

مقادیر مغناطش اشباع برای نانوکامپوزیت ZnO / Fe_3O_4 و برای نانوذرات Fe_3O_4 به ترتیب برابر است با ۲۰و۴۷ $emug^{-1}$.



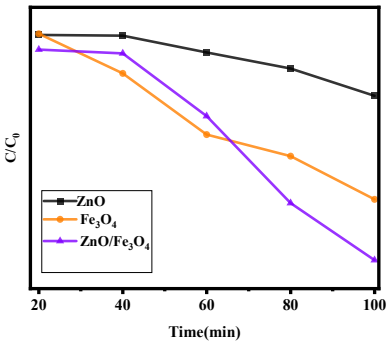
شکل۵: VSM نانوساختارهای مغناطیسی با عصاره جلبک سبز کره ای.

بررسی اثر فوتوکاتالیستی

برای مقایسه عملکرد نانوساختارها به عنوان فوتوکاتالیست (رنگ زدا) در فاضلاب از فوتوکاتالیز ناهمگن و تک ماده ای استفاده شده است. بدین منظور از متیل اورانژ ۱۵ppm، استفاده شده است. مقدار۰/۰۰۳ گرم از هر سه نمونه را جداگانه به محلول اضافه کرده و به مدت ۳۰ دقیقه در محیط تاریک روی همزن مغناطیسی قرار داده می شود؛ این کار به افزایش بازده اثر فوتوکاتالیست کمک می کند. محلول را در معرض لامپ زنون قرار داده و هر ۳۰ دقیقه یک بار از آن طیف جذبی گرفته شد. شکل ۶ تخریب متیل اورانژ به صورت تابعی از زمان تابش به وسیله نانوساختارهای سنتز شده با عصاره جلبک سبز را نشان می دهد. نرخ بازده فوتوکاتالیست از رابطه زیر بدست می آید:

$$\%degradation = \left((A_t / A_0) \times 100\right) \qquad (۱)$$

A_0 جذب آغازین و A_t جذب در زمان t را نشان می دهد. بازده فوتوکاتالیستی برای نانوذرات ZnO، Fe_3O_4 و نانوکامپوزیت ZnO/Fe_3O_4 به ترتیب ۲۳٪، ۵۶/۵٪ و ۷۱/۲۳٪ بدست آمد.



شکل۶: تخریب متیل اورانژ به صورت تابعی از زمان تابش به وسیله نانوساختارها سنتز شده با عصاره جلبک سبز کره ای

نتیجه گیری

سنتز سبز نانوذرات ZnO ، Fe_3O_4و نانوکامپوزیت ZnO/Fe_3O_4 با عصاره جلبک سبز کره ای و به روش هم رسوبی انجام گرفت. ویژگی های مورفولوژی، مغناطیسی و فوتوکاتالیستی آنها مورد بررسی قرار گرفت. جلبک سبز به عنوان یک عامل کاهنده و تثبیت کننده برای نانوساختارها عمل می کند. ذرات ساختار کریستالی دارند و متحد الشکل هستند. اندازه بلورک های نانوساختارها با رابطه دبای–شرر بدست آمد. بالاترین بازده فوتوکاتالیستی برای ZnO/Fe_3O_4 و ۷۱/۲۳٪ گزارش شد. این موضوع نشان داد که ساختار ناهمگن سبب افزایش واکنش های ردوکس در سطح شده و بازترکیب الکترون– حفره به تأخیر افتاده است.

مرجع ها

1. Krishnia, L., P. Thakur, and A. Thakur, *Synthesis of nanoparticles by physical route*, in *Synthesis and applications of nanoparticles*. 2022, Springer. p. 45-59.
2. Gnanasangeetha, D. and M. Suresh, *A review on green synthesis of metal and metal oxide nanoparticles.* Nature Environment and Pollution Technology, 2020. **19**(5): p. 1789-1800.
3. Al-darwesh, M.Y., S.S. Ibrahim, and M.A. Mohammed, *A review on plant extract mediated green synthesis of zinc oxide nanoparticles and their biomedical applications.* Results in Chemistry, 2024: p. 101368.
4. Zak, A.K., et al., *X-ray analysis of ZnO nanoparticles by Williamson–Hall and size–strain plot methods.* Solid State Sciences, 2011. **13**(1): p. 251-256.
5. Bocca, B., et al., *ICP-MS based methods to characterize nanoparticles of TiO2 and ZnO in sunscreens with focus on regulatory and safety issues.* Science of the total environment, 2018. **630**: p. 922-930.
6. Nguyen, M.M. and S. Karboune, *Combinatorial interactions of essential oils enriched with individual polyphenols, polyphenol mixes, and plant extracts: Multi-antioxidant systems.* Antioxidants, 2023. **12**(2): p. 486.
7. Samanta, P.K. and A. Saha, *Wet chemical synthesis of ZnO nanoflakes and photoluminescence.* Optik, 2015. **126**(23): p. 3786-3788.
8. Roychowdhury, A., et al., *Magnetically addressable fluorescent Fe3O4/ZnO nanocomposites: Structural, optical and magnetization studies.* Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2013. **74**(6): p. 811-818.

بررسی تأثیر دی‌اکسید تیتانیوم بر خواص ساختاری و دی‌الکتریک سرامیک‌های پایه ویلمیت

ترابی میرزایی ، نعیمه[۱] ؛ جعفری ندوشن، فاطمه[۱] ؛صوابیه ،حمید رضا[۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه یزد، یزد

[۲] دانشکده مهندسی مواد، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

چکیده

در این پژوهش، سرامیک ویلمیت (Zn_2SiO_4) به روش واکنش حالت جامد از مخلوط اکسید روی و سیلیس آمورف سنتز شد و اثر افزودن دی‌اکسید تیتانیم بر ریزساختار و خواص دی‌الکتریک آن مورد بررسی قرار گرفت. به منظور تعیین دمای مناسب تشکیل فاز، مخلوط اولیه توسط آنالیزهای گرماسنجی روبشی تفاضلی و گرماسنجی وزنی مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج نشان داد که تشکیل فاز ویلمیت در محدوده دمایی حدود ۱۰۰۰ تا ۱۱۰۰ درجه سلسیوس رخ می‌دهد. سپس نمونه‌ها در دمای ۱۱۵۰ درجه سلسیوس کلسینه شدند و تشکیل فاز ویلمیت با استفاده از پراش پرتو ایکس تأیید شد. در ادامه، مقادیر ۱۴/۵ و ۱۷/۵ درصد وزنی دی اکسید تیتانیم به پودر ویلمیت افزوده شد و نمونه‌ها پس از آسیاب، گرانول‌سازی، پرس و تفجوشی در دمای ۱۲۳۵ درجه سلسیوس مشخصه‌یابی شدند. نتایج پراش پرتو ایکس نمونه‌های پس از تفجوشی نشان داد که سامانه نهایی از دو فاز ویلمیت و دی‌اکسید تیتانیم تشکیل شده است. همچنین با افزایش مقدار دی‌اکسید تیتانیوم، چگالی نسبی از ۹۵/۲۸ درصد برای نمونه خالص به ۹۶/۲۵ درصد برای نمونه حاوی ۱۷/۵ درصد وزنی تیتانیا افزایش یافت. اندازه‌گیری خواص دی‌الکتریک نشان داد که ثابت دی‌الکتریک از ۶/۶ به ۱۱ افزایش یافته، در حالی که تانژانت تلفات همچنان در محدوده پایین باقی مانده است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که افزودن دی‌اکسید تیتانیوم می‌تواند روشی مؤثر برای بهبود خواص دی‌الکتریک سرامیک‌های پایه ویلمیت باشد.

واژه های کلیدی: *ویلمیت؛ دی‌اکسید تیتانیوم ؛ واکنش حالت جامد؛ پراش پرتو ایکس؛ خواص دی‌الکتریک*

Effect of Titanium Dioxide Addition on the Structural and Dielectric Properties of Willemite-Based Ceramics

Torabi, Naeime[1]; Jafari, Fateme[1]; Savabie, Hamidreza[2]

[1] Department of Physics, Yazd University, Yazd,
[2] Faculty of Materials Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

Abstract

In this study, willemite (Zn_2SiO_4) ceramics were synthesized by the solid-state reaction method using zinc oxide and amorphous silica as starting materials, and the effect of titanium dioxide addition on the microstructure and dielectric properties was investigated. Differential scanning calorimetry and thermogravimetric analyses were employed to determine the appropriate phase formation temperature. The results indicated that willemite formation occurred in the temperature range of approximately 1000–1100 °C. The calcined powders treated at 1150 °C were characterized by X-ray diffraction, confirming the formation of the willemite phase. Subsequently, 14.5 and 17.5 wt% TiO_2 were added to the willemite powder, and the samples were ball-milled, granulated, pressed, and sintered at 1235 °C. X-ray diffraction analysis of the sintered samples revealed that the final microstructure consisted of two phases, namely willemite and titanium dioxide. The relative density increased from 95.28% for the pure willemite sample to 96.25% for the sample containing 17.5 wt% TiO_2. Dielectric measurements showed that the dielectric constant increased from 6.6 to 11, while the loss tangent remained relatively low. The results demonstrate that TiO_2 addition is an effective approach for improving the dielectric properties of willemite-based ceramics.

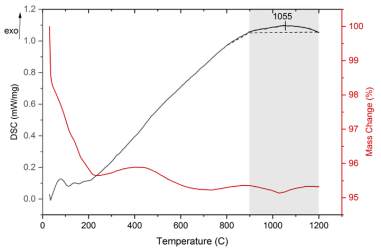
***Keywords**: willemite; titanium dioxide; solid-state reaction; X-ray diffraction; dielectric properties*

PACS No. 61

مقدمه

در سال‌های اخیر، توسعه مواد دی‌الکتریک با ثابت دی‌الکتریک مناسب، تلفات کم و پایداری حرارتی مطلوب به یکی از موضوعات مهم در حوزه سرامیک‌های الکترونیکی تبدیل شده است [۱]. افزایش نیاز به تجهیزات الکترونیکی با فرکانس بالا و ابعاد کوچک‌تر، پژوهشگران را به سمت طراحی و بهینه‌سازی مواد دی الکتریک جدید با عملکرد بهبود یافته سوق داده است [۲].

ویلمیت یکی از سرامیک‌های سیلیکاتی مهم است که به دلیل پایداری شیمیایی و حرارتی مناسب و خواص دی‌الکتریک مطلوب، مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است [۳]. این ماده کاربردهای بالقوه‌ای در زیرلایه‌های الکترونیکی، قطعات دی الکتریک و سرامیک‌های مورد استفاده در سامانه‌های مخابراتی دارد. با این حال، مقدار نسبتاً پایین ثابت دی‌الکتریک ویلمیت، استفاده از آن را در برخی کاربردهای پیشرفته محدود می‌کند. از این رو، اصلاح ترکیب و ریزساختار این ماده به منظور بهبود عملکرد دی‌الکتریک آن، مورد توجه قرار گرفته است[۴]. یکی از راهکارهای مؤثر برای بهبود خواص دی‌الکتریک سرامیک‌ها، افزودن فازهایی با قطبش‌پذیری بالاتر است. دی‌اکسید تیتانیم به دلیل ثابت دی‌الکتریک نسبتاً زیاد، پایداری شیمیایی مناسب و سازگاری با بسیاری از سامانه‌های سرامیکی، گزینه‌ای مناسب برای اصلاح خواص دی‌الکتریک ویلمیت به شمار می‌رود. علاوه بر این، حضور دی‌اکسید تیتانیم می‌تواند بر فرایند تفجوشی، تراکم و ریزساختار نهایی نمونه‌ها نیز تأثیرگذار باشد [۵].



شکل ۱: منحنی‌های گرماسنجی روبشی تفاضلی و گرماسنجی وزنی مخلوط اولیه اکسید روی و سیلیس آمورف

در این پژوهش، سرامیک ویلمیت به روش واکنش حالت جامد از مخلوط اکسید روی و سیلیس آمورف سنتز شد. روند تشکیل فاز توسط ارزیابی‌های وزنی و حرارتی تفاضلی بررسی گردید و تبلور آن با پراش پرتو ایکس تأیید شد. در ادامه، با افزودن مقادیر مختلف دی‌اکسید تیتانیم به پودر پایه، تأثیر این افزودنی بر ویژگی های ساختاری، ریزساختاری، چگالی نسبی و خواص دی‌الکتریک سرامیک‌های حاصل مورد ارزیابی قرار گرفت.

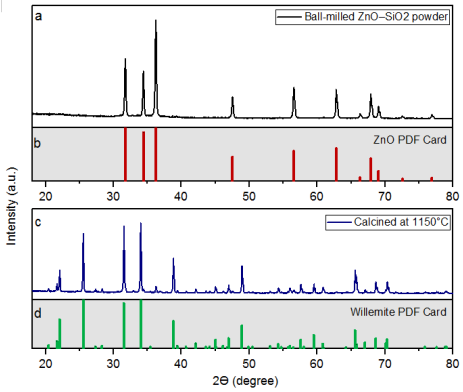
بخش تجربی

پودر ویلمیت از مخلوط اکسید روی و سیلیس آمورف با نسبت مولی متناظر با ترکیب ویلمیت، پس از آسیاب تر، خشک کردن و الک کردن، به روش واکنش حالت جامد سنتز شد. رفتارهای حرارتی مخلوط اولیه جهت تعیین دمای تشکیل فاز، توسط ارزیابی های وزنی و حرارتی تفاضلی بررسی گردید و پودر حاصل در دمای ۱۱۵۰ درجه سلسیوس کلسینه شد. در گام بعد، مقادیر ۱٤,۵ و ۱۷,۵ درصد وزنی دی‌اکسید تیتانیم به پایه ویلمیت اضافه شد و مخلوط‌ها پس از فرآوری مجدد، گرانول‌سازی و پرس، در دمای ۱۲۳۵ درجه سلسیوس تفجوشی شدند. بررسی‌های فازی، ریزساختاری و تحلیل عنصری نمونه‌ها به ترتیب با استفاده از پراش پرتو ایکس و میکروسکوپ الکترونی روبشی مجهز به طیف‌سنجی پراش انرژی انجام گرفت. در نهایت، چگالی نسبی به روش ارشمیدس و ثابت دی‌الکتریک و تانژانت اتلاف با استفاده از تحلیلگر شبکه برداری و روش موجبر مستطیلی WR-90 در فرکانس ۱۰ گیگاهرتز اندازه‌گیری شدند. نمونه‌ها به صورت مکعب مستطیل با ابعاد ۱۰ × ۱۰ × ۲۲,۸٦ میلی‌متر (منطبق با بعد پهن موجبر WR-90) تهیه شدند و مقادیر ثابت دی‌الکتریک و تانژانت اتلاف از پارامترهای پراکندگی (S_{11} و S_{21}) استخراج گردید.

تحلیل نتایج

به منظور تعیین شرایط بهینه عملیات حرارتی و درک سازوکار واکنش حالت جامد، ارزیابی‌های حرارتی (شامل کاهش وزن و رفتار سنجی حرارتی تفاضلی) تا دمای ۱۲۰۰ درجه سلسیوس انجام شد (شکل ۱). منحنی کاهش وزن، افت اولیه شدیدی را (حدود ٤ درصد) تا دمای ۲۵۰ درجه نشان می‌دهد که متناظر با پیک‌های گرماگیر پهن در منحنی حرارتی بوده و به تبخیر رطوبت سطحی و خروج آب محبوس در حفرات ناشی از آسیاب مرطوب

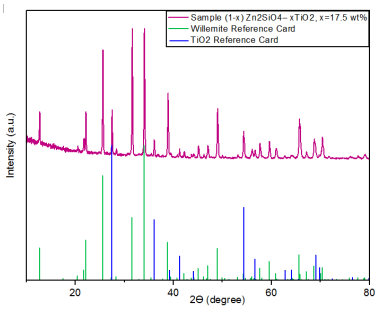
نسبت داده می‌شود. در بازه ۲۵۰ تا ۶۰۰ درجه، کاهش وزن بسیار ناچیزی (کمتر از ۰٫۵ درصد) رخ داده که ناشی از خروج آب از گروه‌های سیلانول سطحی است. با افزایش دما تا ۱۲۰۰ درجه، سیستم به پایداری وزنی نسبی می‌رسد؛ اما در منحنی حرارتی تفاضلی، یک پیک پهن گرماده با دمای اوج ۱۰۵۵ درجه سلسیوس ظاهر می‌شود.



شکل ۲: الگوهای پراش پرتو ایکس پودر آسیاب‌شده و نمونه کلسینه شده در ۱۱۵۰ درجه سلسیوس به همراه موقعیت قله‌های مرجع فازهای اکسید روی و ویلمیت.

ثبات وزن در این ناحیه تایید می‌کند که این پیک صرفاً ناشی از تحول فازی در حالت جامد، یعنی نفوذ متقابل یون‌ها برای جوانه‌زنی و تشکیل فاز ویلمیت است. بر همین اساس، دمای ۱۱۵۰ درجه سلسیوس به عنوان دمای کلسیناسیون انتخاب شد تا با عبور از نقطه اوج واکنش، انرژی محرکه لازم برای تکمیل نفوذ حالت جامد و دستیابی به خلوص فازی بالا فراهم شود.

شکل ۲ الگوهای پراش پرتو ایکس پودر آسیاب‌شده اکسید روی–سیلیس پیش از کلسینه شدن و نمونه کلسینه‌شده در دمای ۱۱۵۰ درجه سلسیوس را نشان می‌دهد. در الگوی مربوط به پودر آسیاب‌شده، قله‌های مشاهده‌شده با فاز اکسید روی تطابق مناسبی دارند که نشان‌دهنده حفظ ساختار بلوری این ترکیب پس از فرایند آسیاب تر است. از آنجا که سیلیس مورد استفاده ماهیت آمورف داشته است، انتظار مشاهده قله‌های پراش مشخص برای آن وجود ندارد. پس از کلسینه شدن در دمای ۱۱۵۰ درجه سلسیوس، تغییرات قابل توجهی در الگوی پراش مشاهده می‌شود. در این حالت، مجموعه‌ای از قله‌های جدید با شدت بالا ظاهر شده‌اند که با فاز ویلمیت تطابق دارند. تشکیل این قله‌ها نشان می‌دهد که واکنش حالت جامد میان اکسید روی و سیلیس آمورف در طی عملیات حرارتی انجام شده و فاز ویلمیت با موفقیت تشکیل شده است. شدت زیاد و پهنای کم قله‌های ویلمیت نشان‌دهنده بلورینگی مطلوب و رشد مناسب بلورها در طی فرایند کلسینه شدن است. این نتیجه با داده‌های گرماسنجی روبشی تفاضلی نیز سازگار است.

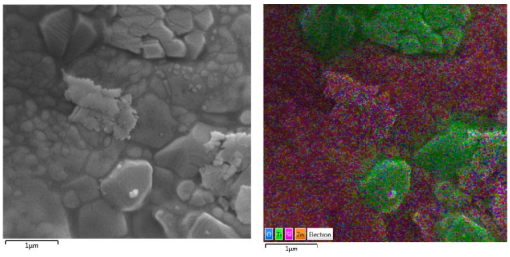


شکل ۳: الگوهای پراش پرتو ایکس نمونه حاوی ۱۷/۵ درصد وزنی تیتانیا به همراه موقعیت قله‌های مرجع فازهای تیتانیا و ویلمیت.

شکل ۳ الگوی پراش پرتو ایکس نمونه حاوی ۱۷٫۵ درصد وزنی دی‌اکسید تیتانیم را پس از فرآیند تفجوشی نشان می‌دهد. انطباق موقعیت بخش عمده قله‌های پراش با الگوی مرجع ویلمیت، تاییدکننده حفظ فاز اصلی و پایداری ساختاری آن پس از عملیات حرارتی است. علاوه بر فاز پایه، ظهور چند قله با شدت کمتر متعلق به دی‌اکسید تیتانیم، نشان می‌دهد که این افزودنی به طور کامل در شبکه ویلمیت حل نشده و به صورت فازی مجزا در ریزساختار باقی مانده است. همچنین، عدم تشکیل فازهای ثانویه ناخواسته، گویای آن است که در شرایط فرآیندی موجود، واکنش جانبی بین فاز پایه و افزودنی رخ نداده است. در مجموع، نتایج پراش تأیید می‌کند که حضور ۱۷٫۵ درصد وزنی دی‌اکسید تیتانیم ساختار زمینه را تغییر نداده و سامانه نهایی کاملاً از دو فاز پایدار ویلمیت و دی‌اکسید تیتانیم تشکیل شده است.

شکل ٤ تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی و طیف‌سنجی پراش انرژی پرتو ایکس نمونه حاوی ۱۷/۵ درصد وزنی تیتانیا پس از تفجوشی را نشان می‌دهد. تصویر ریزساختاری بیانگر تشکیل یک ساختار متراکم و تفجوشی مناسب نمونه در دمای ۱۲۳۵ درجه

سلسیوس است. تحلیل عنصری نقطه‌ای نشان‌دهنده توزیع یکنواخت عناصر روی و سیلیسیم در سراسر ریزساختار و در توافق با تشکیل فاز زمینه (ویلمیت) است. در مقابل، عنصر تیتانیم توزیع ناهمگنی داشته و تمرکز آن در نواحی روشن‌ترِ تصویر میکروسکوپی، از حضور دی‌اکسید تیتانیم به صورت یک فاز ثانویه مجزا حکایت دارد. این یافته با نتایج پراش پرتو ایکس و وجود قله‌های مستقل این افزودنی در نمونه پخت شده همخوانی کامل دارد. بنابراین مشخص می‌شود که در شرایط فرآیندی موجود، بخش عمده دی‌اکسید تیتانیم وارد شبکه بلوری ویلمیت نشده، بلکه به عنوان فازی مستقل در نواحی بین‌دانه‌ای یا مجاورت مرزدانه‌ها مستقر شده است.



شکل ٤ تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی و طیف‌سنجی پراش انرژی پرتو ایکس نمونه حاوی ۱۷/۵ درصد وزنی تیتانیا

جدول ۱ تغییرات چگالی نسبی، ثابت دی‌الکتریک و تانژانت تلفات نمونه‌های ویلمیت حاوی مقادیر مختلف تیتانیا

Sample (1-x) Zn2SiO4–xTiO2	X=0	x=14.5 wt%	x=17.5 wt%
Relative density (%)	95.28	95.74	96.25
Dielectric constant	6.6	10.1±0.08	11±0.05
Loss tan	0.0007	0.0009	0.00135

نتیجه گیری

در این پژوهش، سرامیک ویلمیت به روش واکنش حالت جامد از اکسید روی و سیلیس غیربلوری سنتز شد. تحلیل‌های حرارتی و پراش پرتو ایکس، تشکیل و تبلور موفق فاز ویلمیت را در بازه ۱۰۰۰ تا ۱۱۰۰ درجه سلسیوس و دمای کلسیناسیون ۱۱۵۰ درجه سلسیوس تأیید کردند. ارزیابی نمونه‌های پخت شده پس از افزودن دی‌اکسید تیتانیم نشان داد که ساختار نهایی شامل دو فاز پایدار ویلمیت و دی‌اکسید تیتانیم است. با افزایش این افزودنی، چگالی نسبی سرامیک از ۹۵,۲۸ به ۹۶,۲۵ درصد و ثابت دی‌الکتریک آن از ٦,٦ به ۱۱ ارتقا یافت، در حالی که تانژانت تلفات همچنان در محدوده مطلوبِ پایین باقی ماند. در مجموع، نتایج این تحقیق، افزودن دی‌اکسید تیتانیوم را به عنوان راهکاری مؤثر جهت بهبود خواص دی‌الکتریک سرامیک‌های پایه ویلمیت و توسعه آن‌ها در کاربردهای الکترونیکی و فرکانس بالا معرفی می‌کند.

سپاسگزاری

از همکاری و پشتیبانی شرکت نوین سرام صمیمانه تشکر می‌کنیم.

مرجع‌ها

1.D. Szwagierczak, B. Synkiewicz-Musialska, J. Kulawik and N. Palka, Materials **14** (4) (2021).
2.F. Kamutzki, S. Schneider, J. Barowski, A. Gurlo and D. A. H. Hanaor, Journal of the European Ceramic Society **41** (7), 3879-3894 (2021).
3.J. Varghese, N. Joseph, H. Jantunen, S. K. Behera, H. T. Kim and M. T. Sebastian, in *Handbook of Advanced Ceramics and Composites: Defense, Security, Aerospace and Energy Applications*, 2020), pp. 165-213.
4.Z. Xing, J. Song and H. Pan, International Journal of Applied Ceramic Technology **21** (4), 3024-3031 (2024).
5.Q. Diao, L. Chang, Y. Zeng and J. Chen, Journal of Materials Science **61** (16), 10858-10872 (2026).
6.M. Dong, Z. Yue, H. Zhuang, S. Meng and L. Li, Journal of the American Ceramic Society **91** (12), 3981-3985 (2008).

بررسی اثر دمای کلسیناسیون بر خواص ساختاری و مغناطیسی نانوذرات $La_{0.67}Sr_{0.33}MnO_3$

علی‌چراغی، لیلا ؛ قاسمی، علی؛پایمزد، ابراهیم

دانشکده مهندسی مواد، دانشگاه صنعتی مالک اشتر

چکیده

نانوذرات $La_{0.67}Sr_{0.33}MnO_3$ به روش سل–ژل تهیه و اثر دمای کلسیناسیون ۹۵۰، ۱۰۲۵ و ۱۱۰۰ °C بر ساختار و خواص مغناطیسی بررسی شد. الگوهای پراش پرتو ایکس نشان‌دهنده بهبود بلورینگی با افزایش دما بودند. طیف‌های FTIR تشکیل فاز پروسکایتی را تأیید کردند. نتایج VSM نشان داد که مغناطش در میدان ۱۰ kOe از ۱۴ به ۳۳ emu/g افزایش می‌یابد و میدان وادارندگی پایین رفتار مغناطیسی نرم را نشان می‌دهد. با توجه به خواص مغناطیسی متمایزشان، این نانومواد می‌توانند نویدبخش کاربردهایی نظیر هایپرترمی مغناطیسی و تصویربرداری تشدید مغناطیسی باشند.

واژه‌های کلیدی: *نانوذرات LSMO، سل–ژل، دمای کلسیناسیون، تبادل دوگانه.*

Investigation of the effect of calcination temperature on the structural and magnetic properties of $La_{0.67}Sr_{0.33}MnO_3$ nanoparticles

Alicheraghi, Leila; Ghasemi, Ali; Paimozd, Ebrahim

Faculty of Materials Engineering, Malek Ashtar University of Technology

Abstract

$La_{0.67}Sr_{0.33}MnO_3$ nanoparticles were synthesized via the sol-gel method, and the effect of calcination temperature 950, 1025, and 1100 °C on their structural and magnetic properties was investigated. X-ray diffraction patterns indicated an improvement in crystallinity with increasing temperature. FTIR spectra confirmed the formation of the perovskite phase defects. VSM results showed that the magnetization at a field of 10 kOe increased from 14 to 33 emu/g, and the low coercivity indicated soft magnetic behavior. Owing to their distinct magnetic properties, these manganite nanomaterials can be promising for applications such as magnetic hyperthermia and magnetic resonance imaging.

Keywords: *LSMO nanoparticles, sol-gel, calcination temperature, double exchange.*

PACS No. 81

مقدمه

منگنایت‌های پروسکایتی با فرمول کلی $AMnO_3$ به دلیل برهم‌کنش‌های پیچیده الکترونیکی، مغناطیسی و ساختاری، یکی از محبوب‌ترین خانواده‌های مواد محسوب می‌شوند [۱]. این مواد به‌ویژه به دلیل پدیده مغناطومقاومت عظیم (CMR)، گذار فلز – عایق و جفت شدگی قوی اسپین – شبکه، توجه زیادی در حوزه‌های فیزیک ماده چگال و کاربردهای فناورانه مانند اسپینترونیک، حسگرهای مغناطیسی، کاربردهای پزشکی و سامانه‌های خنک‌کننده مغناطیسی جلب کرده‌اند. در میان این ترکیبات، $La_{0.67}Sr_{0.33}MnO_3$ (LSMO) به دلیل دمای کوری بالاتر از دمای اتاق، رسانایی فلزی در فاز فرومغناطیسی و گشتاور مغناطیسی بالا، یکی از کاندیداهای برجسته برای کاربردهای عملی به شمار می‌رود. خواص مغناطیسی و ترابردی این ماده به شدت به پارامترهای ساختاری مانند طول پیوند Mn-O، زاویه Mn-O-Mn، اندازه دانه، خلوص فازی و نقص‌های شبکه‌ای وابسته است که همگی به شرایط سنتز، دمای کلسیناسیون و سینترینگ وابستگی شدیدی دارند [۲].

روش‌های سنتز مختلفی برای تهیه این مواد به کار می‌رود که در میان آن‌ها، روش سل – ژل به دلیل مزایایی نظیر دمای تف‌جوشی

پایین‌تر، توزیع یکنواخت اندازه ذرات، زمان واکنش کوتاه و امکان کنترل بهتر ترکیب شیمیایی، در مقایسه با روش‌هایی مانند حالت جامد، هیدروترمال و هم‌رسوبی برتری دارد [۳]. در مقیاس نانو، کاهش اندازه دانه و افزایش نسبت سطح به حجم موجب بروز اثرات مرزدانه‌ای، بی‌نظمی اسپینی و عدم اشباع کامل مغناطش در میدان‌های بالا می‌شود. این اثرات می‌توانند به‌طور مستقیم رفتار پسماند، مغناطش باقیمانده و میدان وادارندگی را تحت تأثیر قرار دهند [٤]. به همین دلیل، کنترل دقیق شرایط سنتز نقش کلیدی در تنظیم پاسخ مغناطیسی این مواد ایفا می‌کند. با این حال، دستیابی به اشباع مغناطیسی کامل در LSMOهای چندبلوری و نانومقیاس همچنان چالش‌برانگیز است و عمدتاً به اختلال اسپین سطحی و اثرات مرزدانه‌ای نسبت داده می‌شود. از منظر کاربردی، بهینه‌سازی خواص مغناطیسی LSMO، به‌ویژه افزایش مغناطش اشباع و کاهش اتلاف پسماند، آن را برای کاربردهایی نظیر هایپرترمی مغناطیسی، تصویربرداری تشدید مغناطیسی (MRI) به عنوان عامل کنتراست، دارورسانی هدفمند با کنترل میدان مغناطیسی مناسب می‌سازد. علاوه بر این، نانوذرات با خلوص فازی بالا و ساختار بلوری بهینه، به دلیل پاسخ مغناطیسی قوی‌تر در میدان‌های ضعیف، اهمیت ویژه‌ای در کاربردهای زیست‌پزشکی و زیست‌الکترونیکی دارند.

در این مطالعه، اثر دمای کلسیناسیون بر خواص ساختاری و مغناطیسی نانوذرات LSMO سنتز شده به روش سل – ژل بررسی شده است تا ارتباط میان رشد اندازه دانه، بهبود بلورینگی و رفتار مغناطیسی این ترکیب روشن شود.

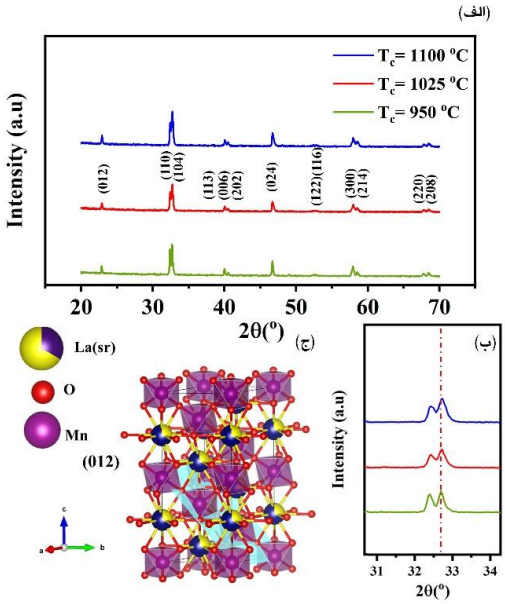
روش آزمایش

نانوذرات منگنایت LSMO به روش سل - ژل سنتز شدند. مقادیر استوکیومتری از پیش‌ماده‌های نیتراتی شامل $La(NO_3)_3\cdot 6H_2O$، $Mn(NO_3)_2\cdot 4H_2O$ و $Sr(NO_3)_2$ در آب دوبار حل شده و تحت هم‌زدن مداوم قرار گرفتند تا محلولی همگن حاصل شود. سپس اتیلن‌گلیکول و اسید سیتریک که به‌صورت جداگانه تهیه شده بودند، به آرامی به محلول افزوده شدند تا پایداری یون‌های فلزی افزایش یافته و فرآیند تشکیل ژل تسهیل گردد. محلول حاصل در دمای ۸۰ °C تحت هم‌زدن پیوسته حرارت داده شد تا حلال اضافی حذف شده و ژل ویسکوز تشکیل شود. ژل به‌دست‌آمده طی چند ساعت به دمای ۲۵۰ °C رسید تا پودر پیش‌ماده حاصل گردد. سپس پودر حاصل به‌طور کامل آسیاب شد. در ادامه، پودر خشک‌شده در دمای ۵۰۰ °C به مدت ۵ ساعت کلسینه شد تا بقایای آلی حذف شده و تشکیل فاز بهبود یابد. پس از آسیاب مجدد، پودرها در دماهای مختلف ۹۵۰، ۱۰۲۵ و ۱۱۰۰ °C، هرکدام به مدت ۱٦ ساعت کلسینه شدند.

ساختار بلوری نمونه‌های تهیه‌شده با استفاده از پراش پرتو ایکس (XRD) با استفاده از دستگاه Tongda مدل 3D-3700 با تابش Cu Kα در بازه زاویه‌ای 2θ از ۲۰ تا ۷۰ درجه و با گام ۰/۰۲ درجه بررسی شد. همچنین اندازه‌گیری‌های مغناطیسی با استفاده از مغناطومتر نمونه ارتعاشی (VSM) ساخت شرکت مغناطیس دقیق کاشان انجام گرفت. تشکیل پیوند در لایه‌ها از طریق طیف‌سنجی مادون قرمز تبدیل فوریه (FTIR) با استفاده از دستگاه شرکت Lumax مدل Infralum ارزیابی شد.

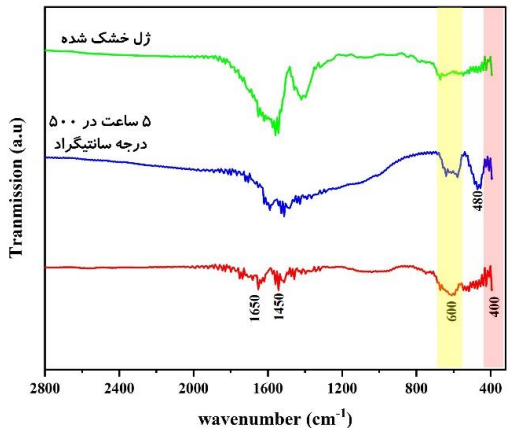
بحث و نتایج

شکل ۱ الگوهای پراش پرتو ایکس تمامی نمونه‌ها را نشان می‌دهد. الگوها تشکیل موفق پروسکایت $La_{0.67}Sr_{0.33}MnO_3$ را تأیید می‌کند [۵]. الگوهای پراش نشان می‌دهند که تمامی نمونه‌ها تقریباً تک‌فازی هستند و قله اضافی مربوط به فازهای ثانویه مانند اکسیدهای لانتانیم یا منگنز مشاهده نمی‌شود. این موضوع نشان می‌دهد که روش سل – ژل به همراه زمان طولانی کلسیناسیون، منجر به ورود کامل یون‌های La^{3+}، Sr^{2+} و Mn به ساختار پروسکایتی شده است. با افزایش دمای کلسیناسیون، افزایش قابل توجهی در شدت پیک‌ها و کاهش پهنای آن‌ها به‌ویژه در نمونه با دمای کلسیناسیون ۱۱۰۰ °C مشاهده می‌شود که نشان‌دهنده بهبود بلورینگی است. همچنین جابه‌جایی جزئی پیک‌های پراش به سمت زوایای کمتر در نمونه‌های با افزایش دمای کلسیناسیون مشاهده می‌شود (شکل ۱ (ب)). این تغییر می‌تواند به کاهش کرنش شبکه و رشد اندازه دانه در دماهای بالاتر نسبت داده می‌شود که این امر با بهبود بلورینگی و کاهش نقص‌های ساختاری همخوانی دارد. شکل ۱(ج) ساختار بلوری LSMO را نشان می‌دهد.



شکل ۱– الگوهای XRD پودرهای چندبلوری LSMO، (ب) الگوهای XRD از پیک‌های (۱۱۰) و (۱۰۴) و (د) ساختار بلوری LSMO.

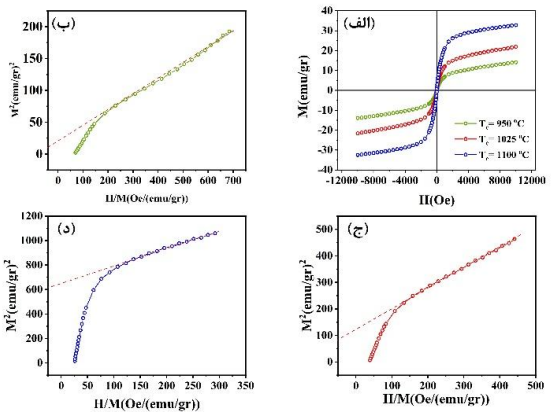
شکل ۲ طیف‌های FTIR مربوط به ژل خشک‌شده (پس از قرار گیری در دمای ۲۵۰ °C)، نمونه قرار داده شده در دمای ۵۰۰ °C به مدت ۵ ساعت و نمونه کلسینه شده در دمای ۱۱۰۰ °C را نشان می‌دهد. در تمامی نمونه‌ها باند جذبی در حدود ۱۶۵۰ cm^{-1} مشاهده می‌شود که به ارتعاش خمشی مولکول‌های آب جذب‌شده و گروه‌های هیدروکسیل نسبت داده می‌شود. همچنین باند موجود در حدود ۱۴۵۰ cm^{-1} به ارتعاشات گروه‌های کربناتی حاصل از پیش‌ماده‌ها و اسید سیتریک مربوط است. با افزایش دمای عملیات حرارتی، شدت این باند کاهش می‌یابد که نشان‌دهنده تجزیه تدریجی مواد آلی و حذف ترکیبات کربناتی ($SrCO_3$) است. باندهای موجود در ناحیه ۴۰۰–۶۰۰cm^{-1} به ارتعاشات شبکه‌ای هشت‌وجهی‌های MnO_6 در ساختار پروسکایتی مربوط می‌شوند [۶]. باند واقع در ۶۰۰ cm^{-1} به مد کششی پیوندهای Mn–O–Mn نسبت داده می‌شود، در حالی که باندهای ۴۰۰ cm^{-1} به مدهای خمشی این هشت‌وجهی‌ها مربوط هست. دمای کلسیناسیون °C ۱۱۰۰، شدت باند ۴۸۰ cm^{-1} کاهش داده و در نمونه با دمای کلسیناسیون ۱۱۰۰°C به‌طور کامل ناپدید می‌شود. این رفتار را می‌توان به کاهش اعوجاج شبکه، کاهش کرنش بلوری و افزایش نظم ساختاری در اثر رشد بلورها نسبت داد. بنابراین، غالب شدن باندهای مربوط به ارتعاشات MnO_6 و کاهش محسوس باندهای ناشی از ترکیبات کربناتی، تشکیل کامل فاز پروسکایتی و افزایش نظم ساختاری را تأیید می‌کند. این نتایج با داده‌های XRD که بهبود بلورینگی مشاهده‌شده در نمونه‌های کلسینه‌شده در دماهای بالاتر را نشان می‌دهد، همخوانی دارد. بهبود بلورینگی و کاهش نقص‌های ساختاری در دماهای بالاتر می‌تواند برهم‌کنش تبادل دوگانه–Mn^{3+} O–Mn^{4+} را تقویت کرده و در نتیجه در افزایش مغناطش و بهبود خواص مغناطیسی نمونه‌های LSMO نقش مؤثری ایفا کند.



شکل ۲– طیف‌های FTIR در دمای اتاق.

شکل ۳–(الف) حلقه‌های پسماند مغناطیسی تمامی نمونه‌ها را در دمای اتاق نشان می‌دهد. تمامی نمونه‌ها رفتار فرومغناطیسی مشخصی را با مقادیر پایین میدان وادارندگی نشان می‌دهند. با این حال، حلقه‌های پسماند حتی در بیشینه میدان اعمالی ۱۰ kOe به اشباع کامل نرسیده‌اند. این رفتار را می‌توان به اختلال اسپین‌های سطحی، اثرات مرزدانه‌ای، وجود ذرات سوپارامغناطیس و یا به عبارتی وجود نواحی با نظم مغناطیسی ناقص در نمونه‌های چندبلوری نسبت داد. مقدار مغناطش اندازه‌گیری‌شده در میدان kOe ۱۰ برای نمونه‌های کلسینه شده در دماهای ۹۵۰، ۱۰۲۵ و ۱۱۰۰ °C به‌ترتیب برابر با ۱۴، ۲۲ و ۳۳ emu/g به دست آمد. افزایش قابل توجه این مقدار با افزایش دمای کلسیناسیون نشان می‌دهد که رشد دانه‌ها و بهبود بلورینگی موجب تقویت برهم‌کنش تبادل دوگانه–$^{+}$ O–Mn^{4+} شده است. این نتیجه با نتایج XRD نیز سازگار است، به‌طوری که افزایش شدت آن‌ها در دماهای بالاتر، کاهش نقص‌های ساختاری را تأیید می‌کند. مغناطش باقیمانده نیز از ۰/۲۶ emu/g

برای نمونه با دمای کلسیناسیون ۹۵۰ °C به ۰/۶۸ emu/g برای نمونه با دمای کلسیناسیون ۱۱۰۰ °C افزایش می‌یابد. از سوی دیگر، مقادیر میدان وادارندگی برای نمونه‌ها به‌ترتیب افزایش دمای کلسیناسیون برابر با ۱۴، ۱۶و ۱۳ Oe به دست آمد. مقادیر پایین H_c نشان می‌دهد که تمامی نمونه‌ها در دسته مواد مغناطیسی نرم قرار می‌گیرند. امّا، افزایش جزئی میدان وادارندگی در نمونه با دمای کلسیناسیون ۱۰۲۵ °C را می‌توان به رقابت میان رشد دانه‌ها و مراکز پین‌کننده دیواره‌های حوزه نسبت داد، در حالی که کاهش H_c در نمونه با دمای کلسیناسیون ۱۱۰۰ °C احتمالاً ناشی از کاهش کرنش شبکه، کاهش چگالی عیوب و تسهیل حرکت دیواره‌های حوزه مغناطیسی دانست.



شکل ۳- (الف) حلقه‌های پسماند نمونه‌ها در دمای اتاق؛ نمودارهای ABK نمونه‌ها در دمای (ب) ۹۵۰ °C، (ج) ۱۰۲۵ °C و (د) ۱۱۰۰ °C.

به منظور بررسی دقیق‌تر نظم مغناطیسی، نمودارهای Arrott–Belov–Kouvel (ABK) از داده‌های مغناطیسی در دمای اتاق استخراج شدند. مقادیر عرض از مبدأ نمودارهای ABK، که متناظر با M^2 هستند، برای نمونه‌ها به‌ترتیب افزایش دمای برابر با ۱۰، ۸۳ و $(emu/g)^2$ ۶۱۲ به دست آمد. از این مقادیر، مغناطش خودبه‌خودی به‌ترتیب برابر با ۳/۱۶، ۹/۱۱ و ۲۴/۷۴ emu/g محاسبه شد. افزایش چشمگیر مغناطش خودبه‌خودی با افزایش دمای کلسیناسیون نشان‌دهنده بهبود نظم فرومغناطیسی، کاهش بینظمی اسپینی در سطح ذرات و تقویت برهم‌کنش تبادل دوگانه در ساختار LSMO است.

نتیجه گیری

در این پژوهش، نانوذرات منگنایت $La_{0.67}Sr_{0.33}MnO_3$ به روش سل - ژل سنتز و اثر دمای کلسیناسیون بر خواص ساختاری و مغناطیسی آن‌ها بررسی شد. نتایج پراش پرتو ایکس نشان داد که تمامی نمونه‌ها دارای ساختار پروسکایتی بوده و با افزایش دمای کلسیناسیون، شدت پیک‌های پراش افزایش می‌یابد که بیانگر بهبود بلورینگی است. نتایج FTIR نیز تشکیل موفق ساختار پروسکایتی را تأیید کرده و کاهش تدریجی باندهای مربوط به بقایای ترکیبات کربناتی و حذف باند $480\ cm^{-1}$ در نمونه کلسینه‌شده در ۱۱۰۰ °C، می‌تواند نشان‌دهنده‌ی کاهش اعوجاج شبکه و افزایش نظم ساختاری باشد. بررسی حلقه‌های پسماند مغناطیسی نشان داد که افزایش دمای کلسیناسیون موجب بهبود قابل توجه ویژگی‌های مغناطیسی نمونه‌ها گردد، به‌طوری‌که مقدار مغناطش با افزایش دمای کلسیناسیون به ترتیب در میدان ۱۰ kOe از ۱۴، ۲۲ و ۳۳ emu/g افزایش یافت. همچنین مقادیر پایین میدان وادارندگی، رفتار مغناطیسی نرم نمونه‌ها را نشان می‌دهد. تحلیل نمودارهای ABK نیز افزایش مغناطش خودبه‌خودی را با افزایش دمای کلسیناسیون نشان داد که بیانگر تقویت نظم فرومغناطیسی و برهم‌کنش تبادل دوگانه Mn^{3+}–O–Mn^{4+} است. در مجموع، نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که افزایش دمای کلسیناسیون تا ۱۱۰۰ °C منجر به بهبود بلورینگی، کاهش اعوجاج ساختاری و ارتقای خواص مغناطیسی LSMO می‌شود.

مرجع‌ها

[۱]. S. Feng, et al.; "A Review of Synthesis and Novel Transport Properties of Multivalent Manganate Perovskite: Progress, Opportunities, and Challenges"; Advanced Electronic Materials 10, No. 8 (2024) 2300867.

[۲]. M. Salim, et al.; "Optimizing Phase Formation of CMR Perovskite $La_{0.67}Sr_{0.33}MnO_3$ Through Grinding Time"; Applied Physics A 132, No. 4 (2026) 335.

[۳]. S. Jin, et al.; "Adjusting the K-Doping of $La_{1-x}K_xMnO_3$ ($0.1 \le x \le 0.35$) Films to Obtain High TCR and LFMR at Room Temperature"; Applied Surface Science 589 (2022) 152905.

[۴]. E. M. Jefremovas, L. Calus and J. Leliaert; "Coercivity-Size Map of Magnetic Nanoflowers: Spin Disorder Tunes the Vortex Reversal Mechanism and Tailors the Hyperthermia Sweet Spot"; Small Science 6, No. 1 (2026) e202500490.

[۵]. A. Ettayfi, et al.; "Structural, Magnetic, Magnetocaloric, and Critical Exponent Properties of $La_{0.67}Sr_{0.33}MnO_3$ Powders Synthesized by Solid-State Reaction"; Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 29, No. 1 (2016) 133–138.

[۶]. A. Rostamnejadi, et al.; "Superparamagnetic Behavior of $La_{0.67}Sr_{0.33}MnO_3$ Nanoparticles Prepared via Sol–Gel Method"; Journal of Magnetism and Magnetic Materials 321, No. 19 (2009) 3126–3131.

تأثیر زیرلایه فروالکتریک بر تحرک‌پذیری حامل ها در ترانزیستورهای اثر میدانی گرافنی

بیدمشکی پور، ثمینا[1]؛ عبدی، یاسر[2]؛ مظاهری، مجتبی[1]

[1] دانشگاه صنعتی همدان، گروه علوم پایه، همدان
[2]دانشکده فیزیک دانشگاه تهران ، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

چکیده

در این پژوهش، تأثیر زیرلایه فروالکتریک $LiNbO_3$ (لیتیوم نیوبات) بر تحرک حامل‌ها در ترانزیستورهای اثر میدان گرافنی با گیت بالا (G-FET) بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که در غلظت یکسان حامل‌های بار باقیمانده، تحرک حامل‌ها در ترانزیستورهای ساخته‌شده روی زیرلایه $LiNbO_3$ بیشتر از ترانزیستورهای ساخته‌شده روی زیرلایه SiO_2/Si است. این پدیده به کاهش پراکندگی کولنی نسبت داده می‌شود؛ به‌طوری‌که میدان ناشی از ناخالصی‌های باردار توسط میدان القاشده در زیرلایه فروالکتریک پوشانده (Screen) می‌شود. با این حال، این اثر تنها برای مقادیر تحرک کمتر از حدود $1000\ cm^2/V{\cdot}s$ قابل توجه است. تحلیل طیف‌های رامان و همچنین بررسی ارتباط بین تحرک حامل‌ها و تانژانت اتلاف مایکروویوی دی‌الکتریک گیت Al_2O_3 نشان می‌دهد که ناخالصی‌های باردار عمدتاً در دی‌الکتریک گیت یا در مرز مشترک گرافن/دی‌الکتریک گیت قرار دارند و احتمالاً با جای‌خالی‌های اکسیژن (Oxygen Vacancies) مرتبط هستند.

واژه های کلیدی: *گرافن، ترانزیستور اثر میدانی، فروالکتریک*

Effect of ferroelectric substrate on carrier mobility in graphene field-effect transistor

Bidmeshkipour, Samina[1]; Abdi, Yaser[2]; Mazaheri, Mojtaba[1]

[1]Basic Science groups, Hamedan University of Technology, Hamedan,
[2] Department of Physics, University of Tehran, Tehran, Department of Physics

Abstract

Effect of LiNbO3 ferroelectric substrate on the carrier mobility in top gated graphene field-effect transistors (G-FETs) is demonstrated. It is shown that, at the same residual concentration of the charge carriers, the mobility in the G-FETs on the LiNbO3 substrate is higher than that on the SiO2/ Si substrate. The effect is associated with reduction of Coulomb scattering via screening the charged impurity field by the field induced in the ferroelectric substrate, but significant only for mobilities below 1000 cm2/V s. Raman spectra analysis and correlations established between mobility and microwave loss tangent of the Al2O3 gate dielectric indicate that the charged impurities are located predominantly at the gate dielectric and/or at the gate dielectric/graphene interface and are likely associated with oxygen vacancies

***Keywords**: Graphene, Field-effect transistors (G-FETs), Ferroelectric*

PACS No. 60،77

مقدمه

ویژگی تحرک بسیار بالای حامل‌ها و سرعت انتقال بار در گرافن، امکان ساخت مدارهای الکترونیکی بسیار سریع‌تر از نیمه‌رساناهای متداول را فراهم می‌کند. تحرک ذاتی حامل‌ها در گرافن تک‌لایه در دمای اتاق بیش از $100{,}000\ cm^2/V{\cdot}s$ است که از تحرک موجود در بهترین ترکیبات نیمه‌رسانای گروه III-V نیز بیشتر است [1] . مطابق محاسبات نظری، ادوات فرکانس‌بالای مبتنی بر گرافن می‌توانند در محدوده فرکانسی تراهرتز عمل کنند و کاربردهای جذاب فراوانی را ارائه دهند.

با این حال، استفاده عملی از گرافن در الکترونیک فرکانس بالا با محدودیت مهمی روبه‌رو است؛ زیرا نزدیکی لایه‌های دی‌الکتریک باعث کاهش شدید تحرک حامل‌ها می‌شود. بیشترین مقادیر گزارش‌شده برای تحرک در ترانزیستورهای گرافنی دارای دی‌الکتریک‌هایی مانند Al_2O_3، HfO_2، BN، SiC، SiO_2 و پلیمرها کمتر از 24,000 $cm^2/V\cdot s$ بوده است[2].

دلیل اصلی این محدودیت، پراکندگی کولنی ناشی از ناخالصی‌های باردار است. این ناخالصی‌ها ممکن است در داخل زیرلایه قرار داشته باشند یا طی فرایند ساخت در نزدیکی مرز گرافن و زیرلایه ایجاد شوند. حضور آن‌ها موجب تشکیل پتانسیل کولنی ناهمگن و در نتیجه کاهش تحرک حامل‌ها می‌شود. منشأ دقیق این ناخالصی‌های باردار هنوز به‌طور کامل شناخته نشده است. برخی مطالعات آن‌ها را به مولکول‌های آب محبوس‌شده در مرز گرافن و زیرلایه نسبت می‌دهند و برخی دیگر جای‌خالی‌های اکسیژن موجود در دی‌الکتریک گیت را عامل اصلی می‌دانند

روش ساخت و نتایج آزمایش‌ها

روش ساخت نمونه‌ها

در این پژوهش، لایه‌های گرافن به روش رسوب‌دهی شیمیایی از فاز بخار (CVD) روی فویل مس رشد داده شدند و سپس به دو نوع زیرلایه منتقل گردیدند: زیرلایه سیلیکون با لایه ۹۰ نانومتری SiO_2 و زیرلایه فروالکتریک $LiNbO_3$.

زیرلایه $LiNbO_3$ از نوع تک‌بلور برش‌یافته در راستای z بود که دارای قطبش خودبه‌خودی رو به سطح است. ثابت دی‌الکتریک آن در راستای صفحه و عمود بر صفحه به‌ترتیب برابر ۸۵ و ۲۵ گزارش شده است.

برای ساخت ترانزیستورها، یک لایه دی‌الکتریک گیت از جنس Al_2O_3 با ضخامت نهایی 17.5 نانومتر به روش رسوب‌دهی لایه اتمی (ALD) در دمای 300 درجه سانتی‌گراد روی گرافن رشد داده شد. پیش از آن نیز یک لایه بذر (Seed Layer) از آلومینیوم اکسیدشده جهت بهبود رشد Al_2O_3 ایجاد گردید[3] .

ترانزیستورهای ساخته‌شده دارای طول گیت‌های مختلف (0.3، 0.6 و 1 میکرومتر) بودند. سپس مشخصه‌های الکتریکی و طیف‌های رامان نمونه‌ها در دمای اتاق اندازه‌گیری شد.

نتایج آزمایش‌ها

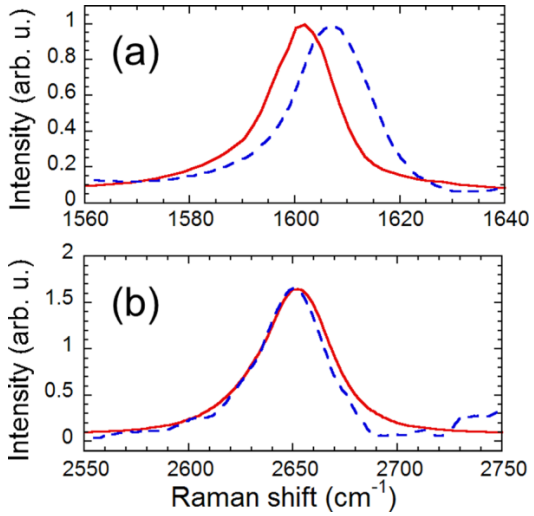
بررسی کیفیت گرافن با طیف رامان

شکل 1 مقاله طیف‌های رامان باندهای G و D2 را برای گرافن روی دو زیرلایه نشان می‌دهد.

نسبت شدت پیک 2D به G برای هر دو نمونه حدود 1.7 اندازه‌گیری شد. این نسبت شاخص مهمی برای تعیین میزان دوپینگ و غلظت حامل‌های بار در گرافن است.

نتایج نشان داد که پیش از ساخت ترانزیستورها، غلظت حامل‌های باقیمانده در هر دو نمونه کمتر از $2*10^{12}$ cm^{-2}است. بنابراین کیفیت اولیه گرافن روی هر دو زیرلایه تقریباً مشابه بوده و تفاوت‌های مشاهده‌شده در عملکرد ترانزیستورها ناشی از کیفیت متفاوت گرافن نیست.

همچنین جابه‌جایی جزئی پیک G در نمونه $LiNbO_3$ نشان می‌دهد که این نمونه احتمالاً دارای غلظت حامل اندکی بیشتر است.



شکل 1 : طیف رامان(a) باندG و (b) باند های2D لایه گرافن بر روی زیر لایه های SiO_2/Siخطوط تو پر و $LiNbO_3$ خطوط تیره

مشخصه‌های انتقالی ترانزیستورها

مقاومت درین برحسب ولتاژ گیت برای ترانزیستورهای دارای طول گیت 0.6 میکرومتر اندازه‌گیری شد.

منحنی‌ها یک بیشینه مشخص را نشان می‌دهند که متناظر با نقطه دیراک (Dirac Point) است. وجود این رفتار نشان می‌دهد که مکانیزم غالب محدودکننده تحرک، پراکندگی کولنی ناشی از ناخالصی‌های باردار است.

برای استخراج پارامترهای الکتریکی، داده‌های تجربی با یک مدل نیمه‌تجربی برازش داده شدند. نتایج برای نمونه‌های با طول گیت 0.6 میکرومتر به صورت زیر به دست آمد:

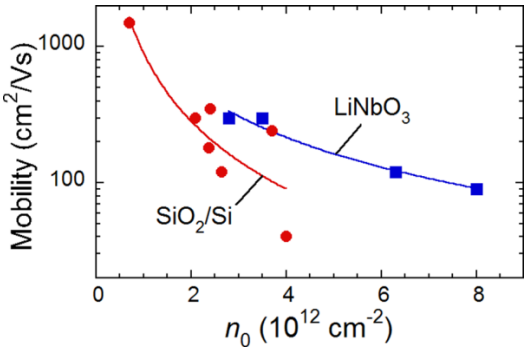
جدول 1 : پارامتر های الکتریکی ترانزیستورهای اثر میدانی

زیرلایه	تحرک($cm^2/V\cdot s$)	غلظت حامل باقیمانده(cm^{-2})
SiO_2/Si	300	2.1×10^{12}
$LiNbO_3$	300	3.5×10^{12}

اگرچه تحرک در این نمونه خاص مشابه است، اما غلظت حامل‌های باقیمانده در $LiNbO_3$ بیشتر گزارش شد که نشان‌دهنده وجود تعداد بیشتری ناخالصی باردار است.

ارتباط تحرک و غلظت حامل‌های باقیمانده

برای همه ترانزیستورهای ساخته‌شده، تحرک حفره‌ها برحسب غلظت حامل‌های باقیمانده در شکل 2 نشان داده شده است.



شکل 2 : تحرک حفره‌ها برحسب غلظت حامل‌های باقیمانده

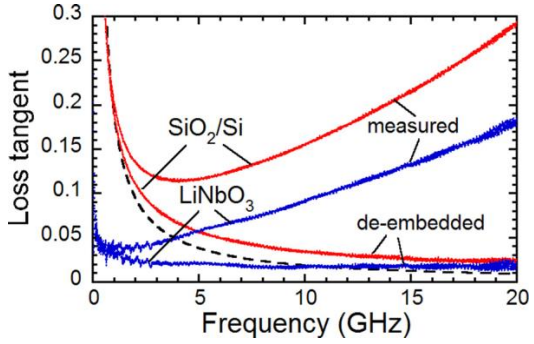
نتایج نشان داد با کاهش غلظت حامل‌های باقیمانده، تحرک افزایش می‌یابد. این رفتار ناشی از کاهش تعداد ناخالصی‌های باردار و در نتیجه کاهش پراکندگی کولنی است. در یک غلظت ثابت از حامل‌های باقیمانده، تحرک در نمونه‌های $LiNbO_3$ بیشتر از نمونه‌های SiO_2/Si است.

این موضوع نشان می‌دهد که قطبش فروالکتریک $LiNbO_3$ میدان الکتریکی ناشی از ناخالصی‌های باردار را مؤثرتر غربال می‌کند و در نتیجه شدت پراکندگی کاهش می‌یابد.

با این حال، نشان داده شد که این مزیت عمدتاً برای تحرک‌های کمتر از حدود $1000cm^2/Vs$ قابل توجه است و در تحرک‌های بالاتر اثر آن به‌تدریج کم‌رنگ می‌شود.

تعیین محل ناخالصی‌های باردار

یکی از پرسش‌های مهم مقاله این است که ناخالصی‌های باردار دقیقاً در کجا قرار دارند. برای پاسخ به این سؤال، تانژانت اتلاف (Loss Tangent) [4] دی‌الکتریک گیت Al_2O_3 در محدوده فرکانس مایکروویو اندازه‌گیری شد.



شکل 3 : تانژانت اتلاف دی‌الکتریک گیت Al_2O_3

نتایج بدست آمده نشان می دهد که افزایش غلظت حامل‌های باقیمانده با افزایش تلفات دی‌الکتریک همراه است. بین تحرک حامل‌ها و تانژانت اتلاف رابطه معکوس وجود دارد. بنابراین همان مراکز بارداری که موجب کاهش تحرک می‌شوند، عامل افزایش تلفات مایکروویوی دی‌الکتریک نیز هستند.

این همبستگی قوی نشان می‌دهد که ناخالصی‌های باردار عمدتاً در:

1. لایه دی‌الکتریک Al_2O_3
2. یا مرز مشترک گرافن و دی‌الکتریک گیت قرار دارند و نه در خود زیرلایه.

تحلیل مکانیزم اتلاف دی‌الکتریک نشان داد که محتمل‌ترین منشأ این ناخالصی‌های باردار، جای‌خالی‌های اکسیژن (Oxygen Vacancies) در Al_2O_3 است. این نقص‌ها بار الکتریکی موضعی ایجاد می‌کنند، باعث پراکندگی کولنی حامل‌ها می‌شوند، تحرک الکترون‌ها و حفره‌ها را کاهش می‌دهند، و همزمان تلفات مایکروویوی دی‌الکتریک را افزایش می‌دهند.

نتیجه گیری

این پژوهش نشان داد که استفاده از زیرلایه فروالکتریک $LiNbO_3$ می‌تواند با پوشاندن میدان ناشی از ناخالصی‌های باردار، تحرک حامل‌ها را در ترانزیستورهای گرافنی افزایش دهد. محدودیت اصلی تحرک در این ترانزیستورهای گرافنی نه خود گرافن، بلکه ناخالصی‌های باردار موجود در لایه دی‌الکتریک گیت است. زیرلایه فروالکتریک $LiNbO_3$ با غربال کردن میدان این ناخالصی‌ها بخشی از این مشکل را برطرف می‌کند، اما برای دستیابی به تحرک‌های بسیار بالا، کنترل و حذف جای‌خالی‌های اکسیژن در Al_2O_3 ضروری است.

مهم‌ترین نتایج عبارت‌اند از: تحرک حامل‌ها روی زیرلایه $LiNbO_3$ بیشتر از زیرلایه SiO_2/Si است. این افزایش ناشی از کاهش پراکندگی کولنی توسط قطبش فروالکتریک زیرلایه است. اثر مذکور عمدتاً برای تحرک‌های کمتر از $1000\ cm^2/V{\cdot}s$ قابل توجه است. ناخالصی‌های باردار عمدتاً در دی‌الکتریک گیت Al_2O_3 یا در مرز مشترک گرافن و دی‌الکتریک قرار دارند. جای‌خالی‌های اکسیژن در Al_2O_3 به احتمال زیاد منشأ اصلی این ناخالصی‌ها هستند. بهینه‌سازی فناوری ساخت لایه دی‌الکتریک می‌تواند موجب افزایش چشمگیر تحرک حامل‌ها و بهبود عملکرد ترانزیستورهای گرافنی شود. زیرلایه $LiNbO_3$ گزینه‌ای مناسب برای توسعه ترانزیستورهای گرافنی دولایه با گاف انرژی القاشده توسط فروالکتریک‌ها محسوب می‌شود.

مرجع‌ها

[1] J.-H. Chen, C. Jang, S. Xiao, M. Ishigami, and M. S. Fuhrer, *Nat Nanotechnol*. **3**, 206.(2008)

[2] Y. Wang, B.-C. Huang, M. Zhang, C. Miao, Y.-H. Xie, and J. C. S. Woo, *Symp. VLSI Technol., Dig. Tech*. Pap. 1, **116** (2011).

[3] B. Fallahazad, S. Kim, L. Colombo, and E. Tutuc, *Appl. Phys. Lett*. **97**, 123105 (2010).

[4] A. Vorobiev, P. Rundqvist, and K. Khamchane, *J. Appl. Phys*. **96**, 4642 (2004).

تاثیر لایه‌نشانی کرایوژنیک اتم‌های مس بر خواص ترابرد گرافن

خادمی، علی[۱]

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

چکیده

در یک سامانه خاص آزمایشگاهی خلأ فوق‌العاده بالا (فشار 3×10^{-10} Torr)، به ترتیب مقادیر ۰/۰۰۲۱، ۰/۰۲۱۲، ۰/۰۹۰۷، ۰/۲۱۰۲ تک لایه مس (Cu ML) بر روی یک گرافن تک لایه قرار گرفته بر روی ۳۰۰±۱۵ nm دی اکسید سیلیکون بر روی زیرلایه سیلیکون ($SiO_2/Si(100)$) در دمای ۸ کلوین با استفاده از روش تبخیر حرارتی لایه‌نشانی شد. سپس بستگی مقاومت گرافن به ولتاژ گیت، قبل و بعد از نشاندن اتم‌های مس در گام‌های مختلف در همان دمای ۸ کلوین بررسی شد. این بررسی تجربی نشان داد که هر اتم مس به طور میانگین ۰/۰۱ الکترون به گرافن می‌دهد که این عدد از پیش‌بینی‌های تئوری کمتر است. همان طور که انتظار می‌رفت، اتم‌های مس به صورت پراکنده کننده‌های جدید باعث کاهش تحرک‌پذیری حامل‌های بار در گرافن می‌شوند، به طوری که تحرک‌پذیری در گرافن آلاییده شده با مس به ۰/۷ تحرک‌پذیری گرافن خالص می‌رسد.

واژه‌های کلیدی: *گرافن، اتم افزوده، مس، ترابرد.*

The Impact of Copper Adatoms' Cryogenic Deposition on the Transport Properties of Graphene

Khademi, Ali[1]

[1] *Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran, Iran*

Abstract

In a unique ultra-high vacuum ($P= 3 \times 10^{-10}$ Torr) experimental setup, copper monolayers of 0.0021, 0.0212, 0.0907, and 0.2102 (Cu ML), respectively, were deposited onto a single-layer graphene placed on 300 ± 15 nm thick silicon oxide on a silicon substrate ($SiO_2/Si(100)$) at a temperature of 8 K using thermal evaporation deposition. Then, the dependence of the graphene resistance on the gate voltage was examined at 8 K before and after the deposition of the copper adatoms. This experimental study demonstrated that each copper atom gives an average of 0.01 electrons to graphene, much less than the theoretical predictions. As expected, copper adatoms act as new scatterers, reducing the mobility of charge carriers in graphene to 0.7 of its initial value.

***Keywords**: graphene, adatoms, copper, transport.*

PACS No. 72.80.Vp, 73.22.Pr, 73.63.−b, 72.10.Fk

مقدمه

لایه نشانی اتم‌ها بر گرافن می‌تواند خواص الکترونیکی و ترابردی گرافن را به طور منحصر به فردی تغییر دهد [۱، ۲]. القای حامل‌های بار منفی یا مثبت [۱–۵]، کاهش تحرک‌پذیری الکترون‌ها [۳–۵]، ایجاد پراکندگی دوربرد کولنی [۱–۶]، پراکندگی کوتاه برد [۶] و باز کردن شکاف نوار انرژی [۷–۱۰] از جمله آثار آلایش گرافن با اتم‌ها است. در میان تاثیرات اتم‌ها بر گرافن، افزایش برهم‌کنش اسپین–مدار توسط اتم‌های فلزات سنگین به حدی که گرافن ممکن است به یک نارسانای توپولوژیک دارای اثر هال اسپین کوانتومی تبدیل شود [۱۱، ۱۲]، یا اثر هال کوانتومی غیرعادی [۱۳] را تجربه کند، گامی حیاتی برای توسعه افزاره‌های اسپینترونیکی و نارساناهای توپولوژیکی مبتنی بر گرافن محسوب می‌شود [۵]. به غیر از القای برهم‌کنش اسپین–مدار در گرافن، افزایش برهمکنش تبادلی یا مغناطش در گرافن توسط اتم‌های

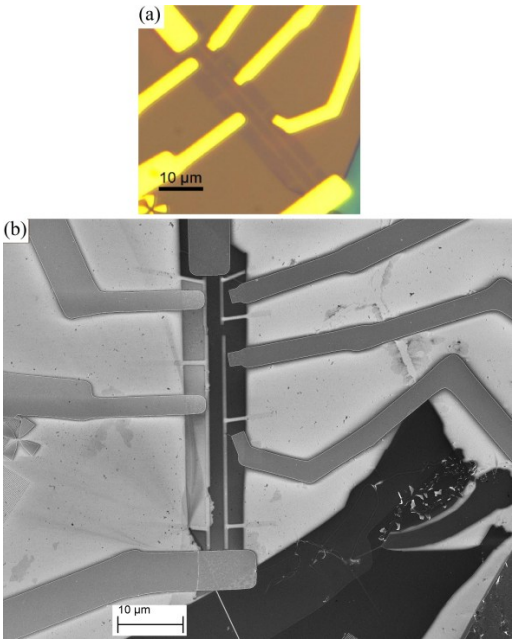
فلزات سنگین راه دیگری است که این اتم‌ها می‌توانند ساختار اسپینی در گرافن را تغییر دهند [۱٤، ۱۵].

یکی از نامزدهای افزایش برهم‌کنش اسپین–مدار و مغناطش در گرافن، اتم مس است [۱٦–۱۸]. برای مثال، به صورت تئوری پیش بینی شده است که پوشش ۱ درصدی اتم‌های مس می‌تواند برهم‌کنش اسپین–مداری با قدرت در حد چند ده meV در گرافن ایجاد کند [۱٦]. در این پژوهش، اثر نشاندن اتم‌های مس در دمای ۸ کلوین روی خواص ترابرد گرافن از قبیل تحرک‌پذیری و آلایش بررسی شده است.

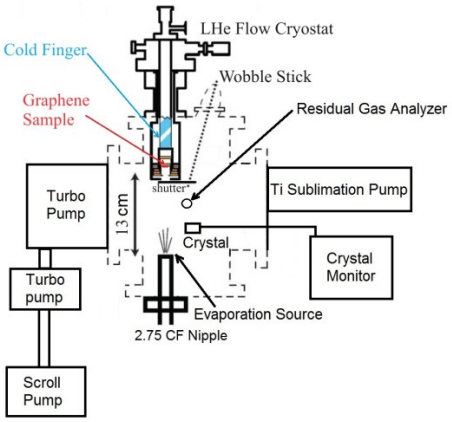
روش‌های آزمایش

آماده کردن نمونه: افزاره گرافنی متشکل از یک گرافن تک لایه قرار گرفته بر روی ۳۰۰±۱۵ nm دی اکسید سیلیکون بر روی زیرلایه سیلیکون ($SiO_2/Si(100)$) بود. گرافن تک لایه توسط روش لایه‌برداری مکانیکی تولید و سپس به روی زیرلایه‌های مذکور منتقل شد و نهایتا توسط روش لیتوگرافی پرتوالکترونی به شکل یک نوار هال با ابعاد ٤۲/٦ میکرون در ۲/۳ میکرون درآمد و اتصالات طلا و نیکل (Au 90 nm/Ni 5 nm) مطابق شکل ۱ به آن متصل شد. بعد از اتمام فرآیند ساخت، افزاره گرافنی در گازی متشکل از ۵/۷۲ درصد هیدروژن و مابقی نیتروژن به مدت ۱/۵ ساعت در دمای ۳۵۰ درجه سلسیوس بازپخت شد تا رزیستهای پلیمری باقیمانده از فرآیند لیتوگرافی پرتوالکترونی حذف شود. شکل ۱ تصاویر گرفته شده از این افزاره با میکروسکوپ نوری و میکروسکوپ الکترونی را نشان می‌دهد.

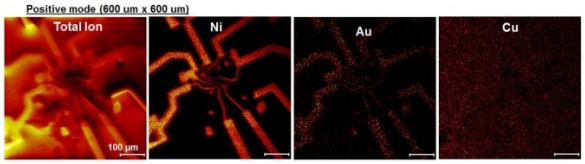
دستگاه اندازه‌گیری: برای مطالعه اثر اتم‌های مس بر گرافن، یک سامانه آزمایشگاهی خاص ساخته شد که ما را قادر می‌سازد اتم‌های فلزی مختلف را بر روی نمونه‌های گرافن درحالی که در دمای بسیار پایین و شرایط خلأ بسیار بالا هستند، با استفاده از روش تبخیر حرارتی لایه‌نشانی کنیم (شکل ۲). لایه نشانی و اندازه‌گیری‌ها در دمای ۸ کلوین و تحت خلأ فوق‌العاده بالا (UHV: $P = 3 \times 10^{-10}$ Torr) انجام شد. برای اطلاع از جزییات بیشتر در مورد دستگاه اندازه‌گیری به منبع [۱۹] رجوع کنید. منبع تبخیر در فاصله ۱۷/٤ سانتی‌متری از نمونه گرافن قرار داشت. برای تبخیر ایندیوم از گذراندن جریان از یک پیچه ایریدیومی که مس اطراف خود را گرم می‌کرد، استفاده شد. میزان لایهنشانی مس با استفاده از ریزترازوی بلور کوارتز (QCM) به طور درجا پایش شد. پس از پایان آزمایش، نمونه گرافن آلایش‌شده را با استفاده از طیف‌سنجی جرمی یون‌های ثانویه با زمان پرواز (ToF-SIMS) بررسی کردیم تا وجود مس بر روی آن تایید شود (شکل ۳).



شکل ۱ : (a) تصویر میکروسکوپ نوری از افزاره گرافنی. (b) تصویر میکروسکوپ الکترونی از افزاره گرافنی.



شکل۲ : جزییات سامانه آزمایشگاهی



شکل۳ : تصویر حالت مثبت طیف‌سنجی جرمی یون‌های ثانویه با زمان پرواز از افزاره گرافنی با یون‌های مختلف ردپایی واضح از مس را روی سطح گرافن نشان می‌دهد. تصاویر یون‌های نیکل و طلا، شکل اتصالات الکترونی افزاره را نمایش می‌دهد.

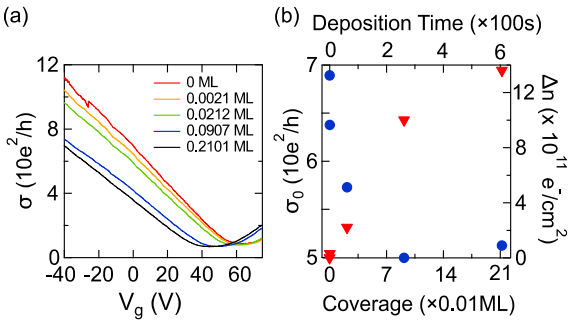
نتایج و بحث

شکل ٤(a) رسانندگی گرافن بر حسب ولتاژهای گیت را پیش و پس از لایه‌نشانی‌های مس نشان می‌دهد. جابه‌جایی نقطه کمینه رسانایی گرافن به سمت ولتاژهای گیت منفی‌تر در این شکل نشانگر آلایش الکترونی گرافن در اثر لایه‌نشانی‌های متوالی مس بر روی افزاره گرافن است. شکل ٤(b) تغییرات چگالی حامل‌های بار و رسانندگی ناشی از لایه‌نشانی‌های متوالی مس را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که در این مقاله، میزان مس لایه‌نشانی شده بر روی گرافن بر حسب تک‌لایه (۱ ML Cu) گزارش می‌شود که در آن یک تک‌لایه (۱ ML Cu) به معنای یک اتم مس جذب‌شده بر روی هر سلول واحد گرافن تعریف می‌شود، برابر با چگالی سطحی 1.653×10^{15} atoms/cm^2 = (2.46 Å)$^{-2}$. خوانش میزان لایه‌نشانی مس توسط QCM بر حسب Å با استفاده از ضریب تبدیل ۱/۹٤٥ Å/ML به میزان لایه‌نشانی مس بر حسب ML تبدیل می‌شود. این ضریب تبدیل با استفاده از محاسبه تعداد اتم‌های مس بر واحد سطح حساب می‌شود. تعداد اتم‌های مس بر واحد سطح cm^2 به ازای ۱ Å نشان داده شده با QCM برابر است با:

$$\text{Cu atoms/cm}^2 = \frac{(1\text{Å}\times\rho_{Cu})}{(\text{AMU}_{Cu}\times1.6605\times10^{-24}\ \text{g})} = 8.494\times10^{14}\ \text{cm}^{-2}\text{Å}^{-1} \quad (۱)$$

که در آن ρ_{Cu} چگالی مس و AMU_{Cu} جرم اتمی مس بر حسب یکای جرم اتمی است. در نهایت ضریب تبدیل به صورت زیر بدست می‌آید:

$$(1.653\times10^{15}\ \text{atoms cm}^{-2}\ \text{ML}^{-1})/(8.494\times10^{14}\ \text{cm}^{-2}\text{Å}^{-1}) = 1.945\ \text{Å/ML} \quad (۲)$$



شکل ٤ : (a) رسانندگی (σ) بر حسب ولتاژ گیت (V_g) برای گرافن خالص و آلاییده با مقادیر متفاوت از اتم‌های مس جذب‌شده بر روی نمونه گرافن در دمای ۸ کلوین. (b) کاهش رسانندگی در اثر لایه‌نشانی‌های متوالی مس (دایره‌های آبی). σ_0 نشان دهنده رسانندگی گرافن در چگالی الکترون $n=4.7\times10^{12}$ cm^{-2} معادل فاصله V ٦٤- از نقطه دیراک (نقطه کمینه رسانندگی) است. محور راست: چگالی بار القا شده توسط مس Δn (مثلث‌های قرمز).

در این آزمایش، همه فرآیندها اعم از لایه‌نشانی و اندازه‌گیری الکتریکی در حالتی انجام شد که گرافن در دمای ۸ کلوین قرار داشت. تحرک‌پذیری حامل‌های بار اعم از الکترون‌ها و حفره‌ها (μ) در گرافن با استفاده از رابطه (۳) محاسبه شد [۲۰]:

$$\mu = \sigma/(ne) \quad (۳)$$

که در آن n چگالی الکترون‌ها، e بار الکترون و σ رسانندگی گرافن است. همچنین چگالی الکترون‌ها (n) و ولتاژ گیت (V_g) با رابطه (٤) و (٥) با هم مرتبطند [۲۰]:

$$n = \alpha \times V_g \quad (٤)$$

$$\alpha = \varepsilon_{SiO2}/(e\, d_{SiO2}) \quad (٥)$$

که در آن α ضریب خازنی دی‌الکتریک متشکل از دی اکسید سیلیکون SiO_2، ε_{SiO2} گذردهی این ماده و d_{SiO2} ضخامت آن هستند. به همین ترتیب، جابه‌جایی قله دیراک گرافن (ΔV_g) در اثر لایه‌نشانی اتم‌های مس با چگالی بار القایی (Δn)، یعنی تغییر چگالی حامل‌های بار در گرافن، با رابطه $\Delta n = \alpha \times \Delta V_g$ مرتبط است. استفاده از این رابطه برای داده‌های آزمایش ما نشان داد که که هر اتم مس به طور میانگین ۰/۰۱ الکترون به گرافن می‌دهد که از مقدار پیش‌بینی شده ۰/۲ الکترون به ازای هر اتم خیلی کمتر است [١٦]. بازده محدود انتقال بار مشاهده‌شده در گرافن آلایش شده با اتم‌های مس به برهم‌کنش ناکافی در فصل مشترک اتم

جذب‌شده–گرافن نسبت داده می‌شود. علت محتمل، قرارگیری گرافن در معرض محیط پیش از فرآیند خلأ فوق بالا است که منجر به نفوذ مولکول‌هایی مانند آب، اکسیژن و نیتروژن بین گرافن–زیرلایه می‌شود. برای رها کردن گرافن از تاثیر این مولکول‌ها نیاز به یک مرحله بازپخت دمابالای (معمولاً در حدود ۹۰۰ کلوین) در خلأ است؛ فرآیندی که پیشتر ثابت شده است برای تسهیل برهم‌کنش‌های کارآمد اتم جذب‌شده–گرافن در نمونه‌های گرافن در معرض هوا حیاتی است [۳]. اما این کار در این پژوهش انجام نشده است. اشباع شدن زود هنگام تغییر چگالی حاملهای بار در افزاره گرافنی ما که در شکل ٤(b) مشهود است، نیز ناشی از همین پدیده وجود مولکول‌های بین گرافن و زیرلایه است [۳].

شکل ۵ نشان می‌دهد که بعد از لایه‌نشانی اتم‌های مس بر روی گرافن، این اتم‌ها به عنوان پراکننده کننده عمل می‌کنند و تحرک‌پذیری حامل‌های بار در گرافن به ۰/۷ مقدار آن در گرافن خالص می‌رسد. همان طور که قبلا دیدیم تغییر چگالی حامل‌های بار در گرافن Δn متناسب با چگالی اتم‌های مس جذب شده بر روی سطح گرافن n_{Cu} است. اگر تغییر رسانندگی در گرافن در اثر لایه‌نشانی مس به طور عمده ناشی از پراکندگی بلندبرد کولنی باشد، انتظار داریم که [۱]:

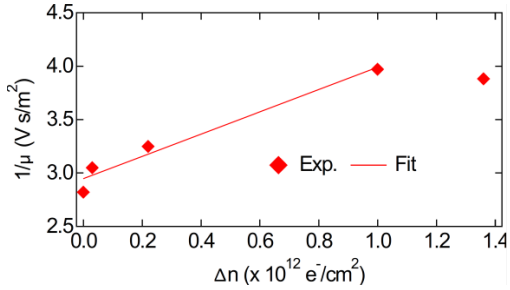
$$\sigma \sim n/n_{Cu} \quad (٦)$$

$$1/\mu = (ne)/\sigma \sim \Delta n \quad (٧)$$

که این دقیق همان اتفاقی است که در شکل ۵ قبل از اشباع در نقطه آخر اندازه‌گیری مشاهده می‌کنیم.

نتیجه گیری

لایه‌نشانی کرایوژنیک اتم‌های مس بر روی سطح گرافن، همان طور که به طور نظری پیش‌بینی شده بود، تحرک‌پذیری گرافن را کاهش داد داد و در آن هر اتم ایندیوم ۰/۰۱ الکترون به سطح گرافن اهدا کرد. همچنین اثر پراکندگی بلندبرد کولنی در تغییر تحرک‌پذیری گرافن بر اثر اتم‌های جذب شده مس مشهود بود. این پژوهش راه را برای انجام پژوهش‌های عمیق‌تر بر روی تاثیر اتم‌های فلزات سنگین روی خواص ترابرد گرافن باز می‌کند.



شکل۵ : اثر لایه‌نشانی مس بر تحرکپذیری افزاره گرافنی.

مرجع‌ها

[1] J-H. Chen, et al., Charged-impurity scattering in graphene. Nature Physics 4 (5), 377-381 (2008).

[2] C. Jang, et al., Tuning the effective fine structure constant in graphene: Opposing effects of dielectric screening on short-and long-range potential scattering. Physical review letters 101 (14), 146805 (2008).

[3] A. Khademi, et al., Alkali doping of graphene: The crucial role of high-temperature annealing. Physical Review B, 94 (20), 201405 (2016).

[4] A. Khademi, et al., Weak localization measurements of electronic scattering rates in Li-doped epitaxial graphene. Physical Review B, 100 (16), 161405 (2019).

[5] J.A. Elias, and E. A. Henriksen. Unexpected hole doping of graphene by osmium adatoms. Annalen der Physik 532 (2), 1900294 (2020).

[6] C. Straßer, et al., Long-versus short-range scattering in doped epitaxial graphene. Nano Letters 15 (5), 2825-2829 (2015).

[7] D.C. Elias, et al., Control of graphene's properties by reversible hydrogenation: evidence for graphane. Science 323 (5914), 610-613 (2009).

[8] S-H. Cheng, et al., Reversible fluorination of graphene: Evidence of a two-dimensional wide bandgap semiconductor. Physical Review B 81 (20), 205435 (2010).

[9] J.T. Robinson, et al., Properties of fluorinated graphene films. Nano letters 10 (8), 3001-3005 (2010).

[10] J. Katoch, Adatom-induced phenomena in graphene, Synthetic Metals 210, 68-79 (2015).

[11] C. Weeks, et al., Engineering a robust quantum spin Hall state in graphene via adatom deposition. Physical Review X 1 (2), 021001 (2011).

[12] J. Hu, et al., Giant topological insulator gap in graphene with 5d adatoms. Physical Review Letters 109 (26), 266801 (2012).

[13] H. Zhang, et al., Electrically Tunable Quantum Anomalous Hall Effect in Graphene Decorated by 5d Transition-Metal Adatoms. Physical Review Letters 108 (5), 056802 (2012).

[14] Eelbo, T., et al. Adatoms and Clusters of 3d Transition Metals on Graphene: Electronic and Magnetic Configurations. Physical Review Letters 110 (13), 136804 (2013).

[15] Baltic, Romana, et al., Magnetic properties of single rare-earth atoms on graphene/Ir (111). Physical Review B 98 (2), 024412 (2018).

[16] Frank, Tobias, et al., Copper adatoms on graphene: Theory of orbital and spin-orbital effects. Physical Review B 95 (3), 035402 (2017).

[17] Wawrzyniak-Adamczewska, Małgorzata. Electronic and magnetic properties of graphene densely decorated with 3 d metallic adatoms—the effect of structure privilege and spin–orbit interaction. Electronic Structure 1 (1), 015006 (2019).

[18] Murugesan, Ramasamy, et al., Tuning the spin texture of graphene with size-specific Cu n clusters: a first-principles study. Journal of Physics: Materials 6 (3), 035005 (2023).

[19] A. Khademi, Tuning graphene's electronic and transport properties via adatom deposition (Doctoral dissertation, University of British Columbia, Canada) (2017).

[20] S. Das Sarma, et al., Electronic transport in two-dimensional graphene. Rev. Mod. Phys, 83 (2), 407-470 (2011).

[21] Nakada, K., and A. J. S. S. C. Ishii. Migration of adatom adsorption on graphene using DFT calculation. Solid State Communications 151 (1), 13-16 (2011).

بررسی اثر ولتاژ گیت بر آشکارسازی نوری گرافن تک‌لایه

زارعی، مهرنوش ؛ کاظمی، آسیه‌السادات

دانشکده فیزیک دانشگاه علم و صنعت ایران

چکیده

گرافن به‌دلیل رسانایی الکتریکی بسیار بالا، تحرک قابل توجه حامل‌ها و شفافیت نوری، یکی از مواد مهم در حوزه الکترونیک و اپتوالکترونیک مطرح می‌شود. ترکیب آن با نیم‌هادی‌هایی نظیر سیلیکون، امکان بهره‌برداری هم‌زمان از ویژگی‌های برجسته هردو ماده را فراهم و منجر به ایجاد ساختارهای هیبریدی با عملکرد بهبودیافته می‌شود. در این پژوهش، ساختار هیبریدی گرافن و سیلیکون تحت تابش لیزر سبز بررسی شده است. همچنین، اثر ولتاژ گیت به‌عنوان یکی از عوامل کلیدی بر رفتار الکتریکی و عملکرد آشکارسازی نوری مورد مطالعه قرار گرفته‌است. بدین‌منظور، تغییرات جریان و ولتاژ درحضور و عدم حضور تابش نوری و در ولتاژهای مختلف گیت بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که ساختار پیشنهادی دارای پاسخ نوری پایدار، حساسیت مناسب و تکرارپذیری قابل توجهی است. علاوه بر این، اعمال ولتاژ گیت منجر به بهبود کنترل‌پذیری ویژگی‌های الکتریکی و نوری قطعه هیبریدی می‌گردد. یافته‌های این تحقیق می‌تواند گامی موثر درجهت توسعه نسل جدیدی از ادوات اپتوالکترونیکی مبتنی بر گرافن، به‌ویژه در کاربردهای آشکارسازی نوری و حسگری، محسوب شود.

واژه های کلیدی: گرافن، ساختار هیبریدی، ولتاژ گیت، پاسخ نوری، آشکارسازی نوری.

Investigation of gate voltage impact on monolayer graphene photodetection

Zareai, Mehrnoosh; Kazemi, Asieh Sadat

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

Abstract

Graphene, owing to its high electrical conductivity, remarkable carrier mobility and optical transparency, has emerged as one of the most promising materials in electronics and optoelectronics. Integrating graphene with semiconductors such as silicon enables simultaneous utilization of the advantageous properties of both materials, leading to the development of high-performance hybrid structures. In this study, a graphene-silicon hybrid structure and its optical response under green laser illumination are investigated. The effect of the gate voltage on the electrical behavior and photodetection performance is also systematically examined. The results show that the proposed structure exhibits a stable optical response, good sensitivity, and high repeatability. In addition, applying gate voltage improves the controllability of the electrical and optical properties, enabling tunable device performance. Overall, these findings can contribute to the development of next-generation graphene-based optoelectronic devices, particularly in optical sensing and photodetection applications.

***Keywords**: Graphene, Hybrid structures, Gate voltage, Optical response, Photodetectors.*

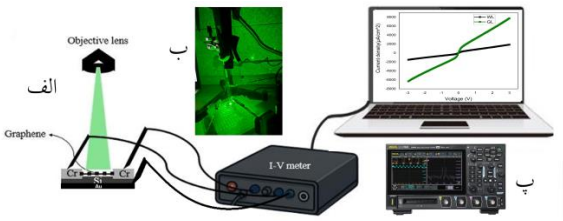
مقدمه

آشکارسازهای نوری به‌عنوان یک قطعه کلیدی در سیستم‌های اپتوالکترونیکی، سیگنال‌های نوری را به سیگنال‌های الکتریکی تبدیل می‌کنند. با پیشرفت تکنولوژی ارتباطات، تصویربرداری و فوتونیک، نیاز به آشکارسازهایی با پاسخ سریع و حساسیت بالا به‌طور قابل ملاحظه‌ای افزایش پیدا کرده‌است. درمیان مواد استفاده‌شده در ساخت قطعات اپتوالکترونیکی [1]، گرافن توجه زیادی را به‌خاطر ویژگی‌های منحصربه‌فرد ازجمله تحرک بالای حامل‌ها، رسانایی الکتریکی بالا، و ضخامت در مقیاس اتمی جلب کرده‌است. اگرچه، گرافن تک‌لایه فقط ۲.۳٪ از نور فرودی را جذب می‌کند که پاسخ نوری ذاتی آن را محدود می‌کند و گاف انرژی صفر آن، استفاده از آن را به‌عنوان یک نیمه‌هادی مستقل محدود می‌کند [2]. اگر آن را با یک نیمه‌هادی دولایه و سه‌لایه ترکیب کنیم، گرافن می‌تواند برای بسیار از کاربردهای اپتوالکترونیکی از جمله الکترودهای ضدانعکاسی و قطعات با سرعت بالا، ایده‌آل باشد. فوتونیک سیلیکونی می‌تواند داده‌های نوری با سرعت بالا را عبور دهد. در سال‌های اخیر، ساختارهای نامتجانس گرافن/سیلیکون به‌دلیل بالا بودن پاسخ نوری و

حساسیت بالا به‌عنوان یکی از سیستم‌های هیبریدی قابل ملاحظه در تولید فوتودیودها، فوتودتکتورها، و سلول‌های خورشیدی [3]، مورد توجه قرار گرفته‌اند [4]. در این ساختارها، گرافن نه‌تنها به عنوان یک الکترود نازک شفاف، بلکه به‌عنوان یک محیط فعال برای جمع‌آوری سریع حامل‌های نوری با تحرک بالای حامل‌ها و ماهیت دوبعدی ذاتی آن عمل می‌کند [5]. آشکارسازهای نوری گرافن/سیلیکون با یکی از مکانسیم‌های اثر فوتوولتائیک، اثر فوتوبولمتریک، اثر فوتوترموالکتریک و یا اثر فوتوگیتینگ عمل می‌کنند. در اثر فوتوولتائیک، فوتون‌ها در سیلیکون جفت‌های الکترون–حفره تولید می‌کند؛ در اثر فوتوبولمتریک، گرمایش ناشی از فوتون‌های فرودی، مقاومت اتصال را عوض می‌کند؛ در اثر فوتوترموالکتریک، گرادیان دمایی یک ولتاژ ترموالکتریکی را به‌وجود می‌آورد و در اثر فوتوگیتینگ، حامل‌های گیرافتاده در سطح مشترک، میدان الکتریکی موضعی را عوض می‌کنند و رسانایی گرافن که به نور وابسته است را ممکن می‌سازند [6]. دراینجا، ساختار هیبریدی گرافن تک‌لایه و سیلیکون برای آشکارسازی در محدود مرئی طیف الکترومغناطیسی ساخته شده‌است. همراه با مشخصه‌یابی سطح از طریق روش‌های میکروسکوپی و طیف‌سنجی، جریان نوری القایی توسط لیزر سبز روی نمونه اندازه‌گیری شده، اثر ولتاژ گیت بر روی این جریان‌ها بررسی شده و پاسخ زمانی نوری توسط یک چاپر و یک اسیلوسکوپ دیجیتال به‌دست آمده‌است.

مواد و روش

ابتدا لایه‌ای نازک از جنس کروم با ضخامت ۲۰ nm به‌روش انباشت بخار فیزیکی و در فشار 10^{-5} mbar روی ویفر Si نشانده و با اجرای فرآیند فوتولیتوگرافی استاندارد، الکترودها ایجاد گردید. با فرآیند کندوپاش، ۲۰ nm طلا به‌عنوان الکترود گیت، پشت ویفر Si لایه‌نشانی شد. با انتقال مرطوب گرافن رشدیافته به روش انباشت بخار شیمیایی (CVD) خریداری شده از Graphenea، پنج قطعه آشکارساز گرافن/سیلیکون تولید شد که همه در پاسخ نوری، موفقیت‌آمیز بودند. هر قطعه دارای دو جفت الکترود روبروی هم بود و هر جفت الکترود، که به‌واسطه گرافن بهم وصل شده بودند، سه مرتبه قبل و بعد لیزر و همچنین با گیت و بدون گیت بررسی شدند. مشخصه‌یابی الکتریکی از نمونه گرافن بدون لیزر و با نور لیزر در ناحیه مرئی با دستگاه I-V متر (نانوپژوهان راگا) و پروب‌های تیز فلزی با اعمال ولتاژ بین منبع و خروجی در محدوده ۳V- تا ۳V انجام شد. برای بررسی پاسخ نوری، تابش لیزر سبز با طول‌موج ۵۳۲ nm و توان خروجی اسمی ۲۰۰ mW، از طریق یک بازوی نوری متمرکز و با زاویه عمودی به محل اتصال و ناحیه فعال ساختار، تابانده شد (شکل ۱). به‌منظور بررسی ویژگی‌های ساختاری و سطحی گرافن، نمونه‌ها با طیف‌سنج رامان (N-541)، با طول موج ۵۳۲ nm، میکروسکوپ الکترونی روبشی (Vega-TescanII) و میکروسکوپ نیروی اتمی (آراپژوهش) مورد آنالیز قرار گرفتند. توان نوری لیزر بر سطح نمونه با استفاده از توان‌سنج نوری و پاسخ زمانی به‌وسیله یک چاپر و یک اسیلوسکوپ دیجیتال (Rigol) اندازه‌گیری شده است.

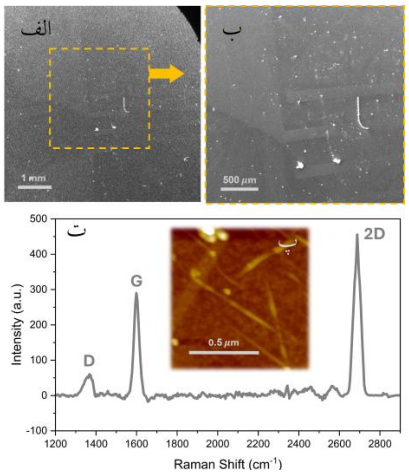


شکل ۱.(الف) طرح‌واره نمونه گرافن–سیلیکون با گیت پشت به‌همراه دستگاه مشخصه‌یابی الکتریکی با پروب‌های دقیق، (ب) تصویر اپتیکی از نمونه گرافن–سیلیکون زیر تابش لیزر سبز در اتاق تاریک، (ج) اسیلوسکوپ جهت اندازه‌گیری پاسخ زمانی.

نتایج و بحث

درشکل ۲(الف وب) تصویر SEM گرافن تک‌لایه منتقل شده بر روی الکترودهای کروم که از روش فوتولیتوگرافی روی سیلیکون ایجاده شده را نشان می‌دهد. روی سطح نمونه بقایای آلودگی ناشی از انتقال تر به‌خوبی دیده می‌شود. تصویر میکروسکوپ نیروی اتمی از نمونه گرافن در شکل ۲(پ)، سطحی یکنواخت با مورفولوژی همگن به‌همراه تعدادی چروک و ناخالصی سطحی را نشان می‌دهد. طیف رامان در شکل ۲(ت) نشان دهنده پیک G ($1603.9cm^{-1}$) و 2D ($۲۶۸۷.۸cm^{-1}$) است که به کیفیت بالای ساختار و تک‌لایه بودن نمونه گرافن تاکید دارد. علاوه بر

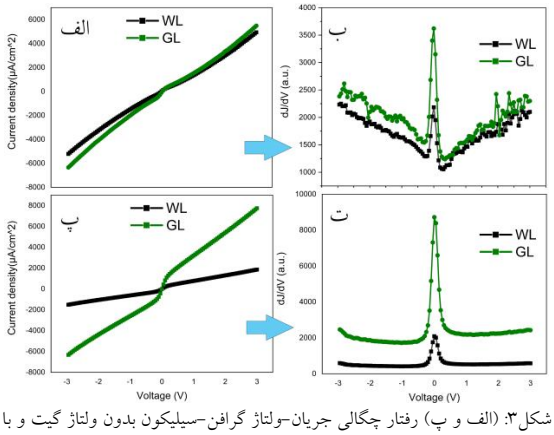
این، حضور پیک D در $1367.5\ cm^{-1}$ نشان‌دهنده تعدادی از نقص‌های شبکه کربن است. پیک G مربوط به ارتعاشات درون صفحه‌ای اتم‌های کربن و نرخ مناسب شدت بین پیک‌های G و 2D، خلوص و ساختار تک‌لایه بودن گرافن را بیشتر تایید می‌کند.



شکل۲ : (الف و ب) تصاویر SEM گرافن بر روی الکترود کروم روی Si، (پ) تصویر توپوگرافی دوبعدی میکروسکوپ نیروی اتمی از سطح گرافن، (ت) طیف رامان از گرافن تک‌لایه روی Si.

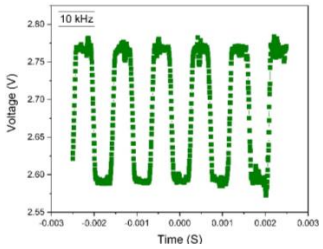
قطر لکه لیزر روی سطح نمونه ۱ mm بوده و حدود ۱۰٪ از توان لیزر به دلیل افت‌های ناشی از بازتاب و یا تلفات در مسیر نوری به نمونه نرسیده است. با توجه به اینکه گرافن فقط ۲/۳ ٪ از نور را جذب می‌کند و با توجه به مساحت ناحیه تحت اثر نور، توان جذب شده لیزر توسط نمونه فقط حدود ۴ mW است. مقادیر جریان عبوری از نمونه‌ها برای بی‌اثر کردن ابعاد هندسی بر مساحت گرافن تقسیم شده و چگالی جریان گزارش شده است. در اینجا، تابش لیزر به‌صورت عمود بر سطح نمونه اعمال شده است. مشخصه جریان–ولتاژ درشرایط تاریک (WL) و همچنین تحت تابش لیزر سبز (GL) با قرار دادن پروب‌ها بر روی الکترودهای منبع و خروجی اندازه‌گیری و مقایسه شده‌است. شکل ۳(الف) منحنی نسبتا خطی J-V را در شرایط WL نشان می‌دهد که تأییدکننده تماس اهمی است. نمودار dJ/dV در شکل ۳(ب) مشتق قسمت (الف) و با چگالی حالات گرافن مرتبط است. نوسانات به دلیل محاسبات نویز یا تفاضل محدود ظاهر شده است.

نتایج به‌دست آمده نشان می‌دهد که درحضور تابش نور، جریان عبوری از ساختار گرافن/سیلیکون نسبت به حالت تاریک تا حدی افزایش می‌یابد. این رفتار بیانگر ایجاد حامل‌های نوری و بهبود رسانش الکتریکی دراثر برهمکنش نور با ساختار هیبریدی گرافن–سیلیکون است. از دیدگاه الکترونیکی، تابش لیزر همچنین منجر به افزایش چگالی حامل‌ها و جابجایی سطح فرمی گرافن به سمت نوار رسانش می‌شود. انتقال بار القایی نوری بین سیلیکون و گرافن به طور مؤثر سطح فرمی گرافن را افزایش می‌دهد و در نتیجه مقاومت تماسی را کاهش داده و رسانایی کلی ساختار ناهمگن را افزایش می‌دهد. رسانایی تفاضلی غیرذاتی در شکل ۳(ب) به دلیل اثرات القایی نوری، در بایاس صفر حداکثر است. تابش لیزر، رسانایی را در نزدیکی نقطه تعادل (V=0) که در آن حداقل گرمایش ژول رخ می‌دهد، افزایش می‌دهد و در بایاس دیگر، بازترکیب جفت‌های الکترون–حفره یا پراکندگی، تحرک را کاهش می‌دهد. تابش GL، نقطه دیراک را کمی از حالت خنثی در V=0 دور می‌کند. در ولتاژهای بایاس بالاتر، قطعه به یک رژیم شبه‌اشباع نزدیک می‌شود که در آن مدولاسیون سطح فرمی کمتر مؤثر می‌شود، در حالی که در نزدیکی بایاس صفر، برانگیختگی نوری و انتقال بار بین سطحی بر رفتار انتقال غالب هستند. از سوی دیگر، اعمال ولتاژ گیت منجر به تغییر محسوسی در پاسخ الکتریکی قطعه شده است (شکل ۳(پ)). به‌طور مشخص، نسبت جریان GL به جریان WL با اعمال گیت، چند برابر بیشتر از همین نسبت در حالت بدون گیت است.



شکل۳: (الف و پ) رفتار چگالی جریان–ولتاژ گرافن–سیلیکون بدون ولتاژ گیت و با گیت در دو حالت WL و GL، (ب و ت) دیفرانسیل رسانندگی.

این موضوع نشان‌دهنده نقش کلیدی گیت در تنظیم سطح فرمی گرافن و کنترل چگالی حامل‌ها در ساختار است. در میان مقادیر بررسی شده، در ولتاژ گیت +3V بهترین پاسخ جریان مشاهده شده، هرچند سایر ولتاژهای گیت نیز رفتار نسبتاً مشابه و قابل قبولی از خود نشان دادند و این شباهت در پاسخ‌ها حاکی از پایداری عملکرد قطعه در ولتاژهای مختلف گیت و همچنین تکرارپذیری مناسب اندازه‌گیری‌ها است. در این اتصال، مقداری نشتی جریان گیت با فقدان لایه دی‌الکتریک اجتناب‌ناپذیر بوده است. اما به‌طور کلی، هردو عامل تابش نوری و اعمال ولتاژ گیت نقش مهمی در بهبود و کنترل پاسخ الکتریکی ساختار گرافن–سیلیکون دارند و می‌توان از آن‌ها برای تنظیم عملکرد ادوات اپتوالکترونیکی بهره گرفت و ساختار هیبریدی گرافن/سیلیکون به عنوان یک آشکارساز نوری کارآمد عمل می‌کند. در این ساختار، گرافن به عنوان یک الکترود شفاف و با تحرک بالا عمل می‌کند و استخراج سریع و بدون اتلاف انرژی حامل‌های تولید شده توسط نور را امکان‌پذیر می‌سازد. پاسخ زمانی آشکارساز نوری گرافن/سیلیکون تحت تابش پالسی GL با دستگاه چاپر در محدوده فرکانسی از ۱۰۰ Hz تا ۱۰ kHz بررسی شد که با افزایش فرکانس سوئیچینگ، شکل موج خروجی به تدریج از مربعی به شبه‌مثلثی تغییر شکل داد. این رفتار به محدودیت‌های اعمال شده توسط ثابت زمانی RC و زمان عبور حامل نسبت داده می‌شود. با این وجود، آشکارساز به طور مداوم تا ۱۰ kHz پاسخ نوری واضح و قابل تشخیصی ارائه داده است و شکل ۴ پاسخ زمانی نمونه را در فرکانس ۱۰kHz نشان می‌دهد. دراینجا، ولتاژ بین مقدار حداقل ۲.۵۸V و حداکثر ۲.۷۸V نوسان می‌کند. نوسانات بسیار کوچک در ولتاژ پیک تا پیک در طول چرخه‌های متوالی روشن–خاموش، پایداری و تکرارپذیری عالی قطعه را تأیید می‌کند. وجود نوسانات جزئی و پراکندگی در نواحی قله و دره سیگنال می‌تواند ناشی از عوامل مختلفی نظیر نویز سیستم اندازه‌گیری، محدودیت‌های ابزار دقیق، یا اثرات ذاتی نمونه باشد. زمان پاسخ نمونه فقط چند µs است در حالی‌که طول انتشار حرارتی در Si از مرتبه شعاع نقطه نورانی روی گرافن است. لذا می‌توان زمان مشخصه انتشار حرارتی را حدود ۲/۸ ms تخمین زد که از زمان پاسخ نمونه بسیار بیشتر است. بنابراین اثرات فوتوگرمایی بسیار ناچیز است.



شکل۴: منحنی پاسخ زمانی نمونه گرافن–سیلیکون تحت تابش نور لیزر سبز.

نتیجه گیری

در اینجا، تحت تابش نور لیزر سبز، چگالی جریان در قطعه فوتولیتوگرافی شده گرافن–سیلیکون به‌دلیل انرژی بالاتر فوتون‌ها به‌طور قابل توجهی افزایش یافته و اعمال ولتاژ گیت هم به جابه‌جایی بیشتر سطح فرمی و افزایش حامل‌ها کمک کرده است. از طرفی، این قطعه به طور مداوم از ۱۰۰ Hz تا ۱۰ kHz پاسخ نوری واضح و قابل تشخیصی ارائه داده است. پاسخ نوری از اثرات ترکیب حامل‌ها در سیلیکون، مدولاسیون سطح فرمی در گرافن و هم‌ترازی باند بین دو ماده ناشی شده است. این نتایج، نویدبخش ساختارهای هیبریدی گرافن/سیلیکون برای توسعه آشکارسازهای نوری سریع، مقرون‌به‌صرفه و با کارایی بالا هستند و مسیر علمی برای غلبه بر محدودیت‌های ذاتی سیلیکون و گرافن و افزایش عملکرد قطعه نامتجانس را هموار می‌کنند.

مرجع‌ها

[1] J. Fu, C. Nie, F. Sun, G. Li, and X. Wei, “Photodetectors Based on Graphene–Semiconductor Hybrid Structures: Recent Progress and Future Outlook,” *Adv. Devices Instrum.*, vol. **4**, p. 0031, Jan. 2023.
[2] S. Riazimehr *et al.*, “High Responsivity and Quantum Efficiency of Graphene/Silicon Photodiodes Achieved by Interdigitating Schottky and Gated Regions,” *ACS Photonics*, vol. **6**, no. 1, pp. 107–115, Jan. 2019.
[3] M. Wang *et al.*, “High-Performance Photodetectors Based on Semiconducting Graphene Nanoribbons,” *Nano Lett.*, vol. **24,** no. 1, pp. 165–171, Jan. 2024.
[4] Y. Singh and H. Subbaraman, “Recent Advances in Graphene-Enabled Silicon-Based High-Speed Optoelectronic Devices—A Review,” *Photonics*, vol. **10**, no. 12, p. 1292, Nov. 2023.
[5] S. K. Tiwari, S. Sahoo, N. Wang, and A. Huczko, “Graphene research and their outputs: Status and prospect,” *J. Sci. Adv. Mater. Devices*, vol. **5**, no. 1, pp. 10–29, Mar. 2020.
[6] F. Liu and S. Kar, “Quantum Carrier Reinvestment-Induced Ultrahigh and Broadband Photocurrent Responses in Graphene–Silicon Junctions,” *ACS Nano*, vol. **8**, no. 10, pp. 10270–10279, Oct. 2014.

مقایسه عملکرد حسگری هیدروژن در حسگر مقاومتی SnO_2 و نانوکامپوزیت $SnO_2/g\text{-}C_3N_4$

انصاری، وحیده[۱]؛ کاملی، پرویز[۲]؛ مدبراصل، علی[۱]؛ رنجبر، مهدی[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه یاسوج، یاسوج
[۲] گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

با گسترش کاربردهای هیدروژن در صنایع انرژی پاک، توسعه حسگرهای کارآمد برای تشخیص نشت این گاز ضروری است. در این پژوهش به توسعه حسگرهای گاز هیدروژن مبتنی بر نانوذرات اکسید قلع پرداخته می‌شود و اثر افزودن نانوصفحات نیترید کربن گرافیتی به نمونه بررسی می‌شود. نانوذرات اکسید قلع به مدت ۱۲ ساعت درون اتوکلاو در حضور آب‌اکسیژنه بازپخت شد و نانوصفحات نیترید کربن گرافیتی به روش تجزیه حرارتی اوره ساخته شد، سپس نانوذرات با لایه‌های نیترید کربن گرافیتی با درصد وزنی ۲۰ درصد به روش هیدروترمال ترکیب شدند. آنالیز پراش پرتو ایکس (XRD) تشکیل موفقیت‌آمیز نانوذرات و نانوکامپوزیت با خلوص فازی بالا را تأیید کرد. نتایج سنجش حسگری نشان داد که پاسخ نمونه کامپوزیتی نسبت به نمونه اکسیدقلع خالص از ۱۷۰ به ۶۵۰ افزایش یافته است که بیانگر بهبود حدود ۳/۸ برابری است. این بهبود عملکرد به تشکیل پیوند ناهمگون n-n بین SnO_2 و $g\text{-}C_3N_4$، افزایش سطح ویژه و بهبود انتقال بار الکترون نسبت داده می‌شود.

واژه های کلیدی: *حسگر گاز، اکسید قلع، نیترید کربن گرافیتی، گاز هیدروژن، نانوکامپوزیت*

Comparison of Hydrogen Sensing Performance in Resistive SnO_2 and $SnO_2/g\text{-}C_3N_4$ Nanocomposite Gas Sensors

Ansari, Vahideh[1]; Kameli, Parviz[2]; Modabberasl, Ali[1]; Ranjbar, Mehdi[2]

[1] Department of Physics, University of Yasuj, Yasuj
[2] Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

With the increasing applications of hydrogen in clean energy industries, the development of efficient sensors for detecting hydrogen leakage has become essential. In this study, the development of hydrogen gas sensors based on tin oxide nanoparticles is investigated, and the effect of adding graphitic carbon nitride nanosheets to the sample is examined. Tin oxide nanoparticles were annealed in an autoclave in the presence of hydrogen peroxide for 12 hours, and graphitic carbon nitride nanosheets were synthesized by thermal decomposition of urea. Then, the nanoparticles were combined with 20 wt% of g-C_3N_4 nanosheets using a hydrothermal method. X-ray diffraction (XRD) analysis confirmed the successful formation of the nanoparticles and the nanocomposite with high phase purity. Gas sensing results showed that the response of the composite sample increased from 170 to 650 compared to pure tin oxide, indicating an approximately 3.8-fold enhancement. This improved performance is attributed to the formation of an n-n heterojunction between SnO_2 and g-C_3N_4, increased specific surface area, and enhanced electron transfer.

***Keywords**: Gas sensor, Tin oxide, Graphitic carbon nitride, Hydrogen gas, Nanocomposite*

PACS No.: ۸۱

مقدمه

امروزه هیدروژن به عنوان یکی از مهم‌ترین حامل‌های انرژی پاک مطرح است که می‌تواند جایگزین مناسبی برای سوخت‌های

فسیلی باشد [۱]. این گاز اگرچه مزایای زیست‌محیطی فراوانی دارد، اما به دلیل بی‌رنگ و بی‌بو بودن و همچنین محدوده اشتعال‌پذیری وسیع (٤ تا ٧٥ درصد) با حداقل انرژی احتراق ۰/۰۱۷ میلی‌ژول، از ایمنی بالایی برخوردار نیست و نشتی آن می‌تواند خطرات جبران‌ناپذیری ایجاد کند [۳] [۲]. از این رو، توسعه سامانه‌های شناسایی سریع و دقیق برای پایش نشت هیدروژن در کاربردهای صنعتی امری ضروری تلقی می‌شود [٤].

در میان فناوری‌های مختلف حسگری، حسگرهای مقاومتی بر پایه نیمه‌هادی‌های اکسید فلزی به دلیل سادگی ساخت، هزینه پایین و پاسخ گویی مناسب مورد توجه قرار گرفته‌اند [٥]. اکسید قلع به عنوان یک نیمه‌هادی نوع n با حساسیت بالا، پاسخ سریع و پایداری مطلوب، گزینه‌ای پرکاربرد برای شناسایی گازهایی نظیر هیدروژن محسوب می‌شود [٦]. با این وجود، چالش‌هایی نظیر دمای کاری بالا و گزینش‌پذیری محدود، موانعی بر سر راه استفاده عملی از این حسگرها ایجاد کرده است. پژوهش‌های اخیر نشان داده‌اند که به کارگیری نانوساختارها و ترکیب با مواد دیگر می‌تواند عملکرد حسگرهای اکسید فلزی را ارتقا دهد [٧]. در این زمینه، نیترید کربن گرافیتی به عنوان یک نیمه‌هادی نوع n با گاف نواری ۲/۷ الکترون‌ولت، سطح ویژه بالا و پایداری شیمیایی عالی، گزینه مناسبی برای ترکیب با اکسید قلع است. تشکیل پیوند ناهمگون-n بین این دو ماده می‌تواند ضمن تسهیل جداسازی بار، غلظت گونه‌های اکسیژن جذب‌شده در سطح را افزایش داده و انتقال الکترون را بهبود بخشد [٧].

این مطالعه به بررسی اثر تشکیل نانو کامپوزیت اکسیدقلع/ نیترید کربن گرافیتی بر عملکرد حسگری گاز هیدروژن می‌پردازد.

مواد و روش ها

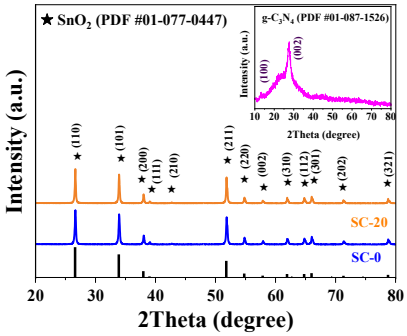
در این پژوهش، نانوذرات اکسید قلع و اوره ساخت شرکت مرک به عنوان ماده اولیه استفاده شدند. نانوذرات اکسید قلع درون اتوکلاو در حضور آب‌اکسیژنه بازپخت شدند. بدین منظور، مقدار ۰/۵ گرم پودر اکسید قلع در ۲۵ میلی‌لیتر آب اکسیژنه و ۵ میلی‌لیتر آب دیونیزه پراکنده شده و مخلوط به مدت ۲ ساعت همگن گردید. سپس مخلوط به اتوکلاو منتقل و به مدت ۱۲ ساعت در دمای ۱۸۰ درجه سانتی‌گراد حرارت داده شد. پس از سرد شدن، محصول شستشو و در دمای ٦٠ درجه سانتی‌گراد به مدت ۱۲ ساعت خشک شد و در نهایت به مدت ۱ ساعت در دمای ٤٠٠ درجه سانتی‌گراد بازپخت گردید. همچنین پودر نیترید کربن گرافیتی از روش تجزیه حرارتی اوره تهیه گردید. مقدار ۱۰ گرم اوره در کوره الکتریکی به مدت ۳ ساعت در دمای ۵۵۰ درجه سانتی‌گراد حرارت داده شد. برای ساخت نانوکامپوزیت، نانوذرات اکسیدقلع با نیترید کربن گرافیتی به نسبت وزنی ۲۰ درصد در ۱۰ میلی‌لیتر آب دیونیزه مخلوط شده و به مدت ٤٥ دقیقه تحت امواج فراصوت قرار گرفتند. سپس مخلوط به اتوکلاو منتقل و در دمای ۱۸۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۱۲ ساعت حرارت داده شد. محصول نهایی پس از شستشو با آب دیونیزه و اتانول در دمای ٦٠ درجه سانتی‌گراد به مدت ۱۲ ساعت خشک شد. ساختار بلوری نمونه‌ها با استفاده از آنالیز پراش پرتو ایکس (XRD) و ریخت‌شناسی آن‌ها با میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (FESEM) مورد بررسی قرار گرفت. برای سنجش حسگری، محلول حاوی نانوذرات و نانوکامپوزیت روی الکترود طلا قرار داده شد. سنجش حسگری به صورت دینامیک انجام شد. برای دستیابی به غلظت مطلوب هیدروژن، از آرگون به‌عنوان گاز رقیق‌کننده استفاده گردید ومقاومت پایه (R_{air}) در هوای محیط اندازه‌گیری شد. تزریق گاز به مدت ۱۰۰ ثانیه انجام شد و تمامی آزمایشات در فشار ۱ اتمسفر و دمای محیط ۲ ± ۲۵ درجه سانتی‌گراد صورت گرفت و رطوبت نسبی در حدود ۳۰٪ کنترل گردید. با کمک کنترل کننده شار گاز، پاسخ نمونه‌ها در مقدار مشخصی از گاز هیدروژن در دماهای مختلف مورد سنجش قرار گرفت. تغییرات جریان نمونه بر حسب زمان توسط دستگاه پتاسیواستات اندازه گیری شده و نمودار تغییرات جریان نمونه بر حسب زمان به دست آمد. براساس این تغییرات جریان، پاسخ حسگری نمونه با کمک رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$R=R_{air}/R_{gas} \quad (۱)$$

که در آن R_{air} مقاومت در هوای تمیز و R_{gas} مقاومت در حضور هیدروژن است.

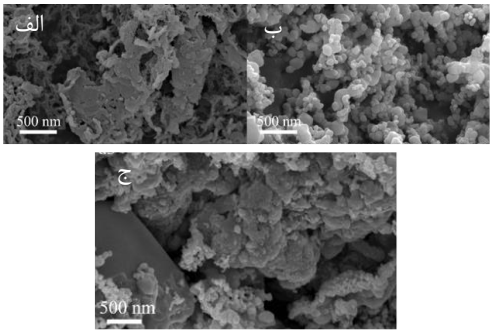
بحث و بررسی

شکل ۱ آنالیز پراش پرتوی ایکس نمونه‌ها را نشان می‌دهد. همان طور که در شکل ۱ مشخص است قله‌های پراش مطابق با کارت استاندارد ۰۱-۰۷۷-۰٤٤۷ و حاکی از ساختار بلوری تتراگونال بدون هیچ قله‌ی اضافی و با خلوص فازی بالاست. قله‌های اصلی پراش ناشی از صفحات بلوری (۱۱۰)، (۱۰۱) و (۲۱۱) و به ترتیب در زوایای ۲٦/٦، ۳۳/۹ و ۵۱/۸ درجه سانتی‌گراد می‌باشد. همچنین در نمودار نیترید کربن گرافیتی یک قله پهن در زاویه ۲۷/۷ درجه سانتی گراد مربوط به صفحه (002) قابل مشاهده است که تأییدکننده تشکیل موفقیت‌آمیز نانوکامپوزیت می‌باشد [٦]. شدت قله g-C_3N_4 (002) به دلیل همپوشانی با قله قوی SnO_2 (110) در ۲٦/٦ درجه، به صورت یک قله مجزا دیده نمی‌شود.



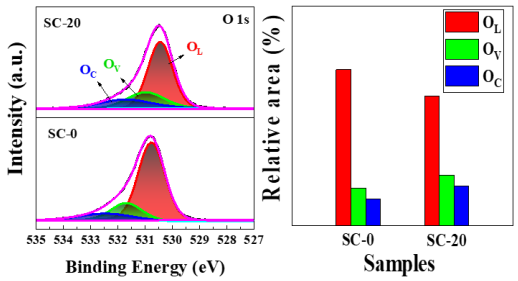
شکل۱: پراش پرتو ایکس نیترید کربن گرافیتی، نانوذرات اکسیدقلع و نانوکامپوزیت اکسیدقلع/ نیترید کربن گرافیتی

تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی در شکل ۲ نشان می‌دهد که نانوذرات اکسیدقلع خالص (SC-0) تقریباً به شکل کروی با اندازه ذرات در محدوده ۲۰ تا ۱۰۰ نانومتر هستند. ذرات به صورت تجمعی خوشه‌هایی تشکیل داده‌اند که ممکن است به دلیل برهمکنش‌های بین ذره‌ای باشد. در تصاویر مربوط به نانوکامپوزیت SC-20، ساختار صفحه‌ای g-C_3N_4 به وضوح قابل مشاهده است و نانوذرات اکسیدقلع روی سطح صفحات g-C_3N_4 پراکنده شده‌اند. توزیع ذرات نشان می‌دهد که حضور g-C_3N_4 از تجمع بیش از حد نانوذرات اکسیدقلع جلوگیری کرده و سطح مؤثر برای جذب گاز را افزایش می‌دهد [۸].



شکل۲: تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی الف) نیترید کربن گرافیتی، ب) نانوذرات اکسید قلع و ج) نانوکامپوزیت اکسید قلع/ نیتریدکربن گرافیتی

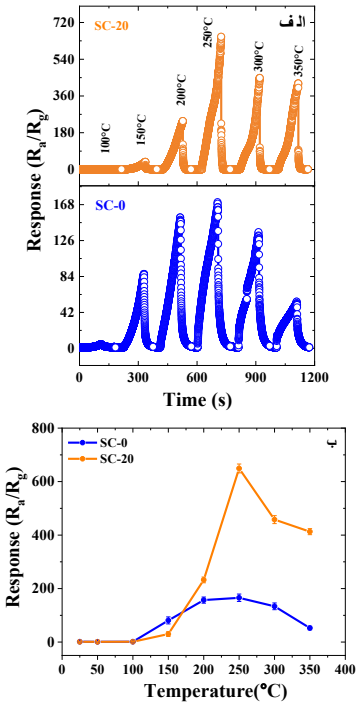
در شکل ۳ نتایج XPS و مقایسه طیف O 1s آمده است و سه مؤلفه اکسیژن شبکه‌ای، حفره‌های اکسیژنی و اکسیژن جذب‌شده سطحی را نشان می‌دهد. افزایش سهم مؤلفه مربوط به حفره‌های اکسیژنی در نمونه کامپوزیت نشان‌دهنده افزایش سایت‌های فعال سطحی است که می‌تواند جذب و فعال‌سازی گونه‌های اکسیژن را تقویت کند و عملکرد حسگر را بهبود بخشد.



شکل۳: **طیف‌سنجی فوتوالکترون پرتو ایکس نمونه ها و مقایسه طیف O 1s نمونه ها**

آزمایش‌های حسگری برای دو نمونه اکسید قلع خالص و SC-20 از دمای اتاق تا دمای ۳۵۰ درجه سانتی گراد و غلظت ۲/٤ درصد گاز هیدروژن انجام شد. نتایج به دست آمده در شکل ٤ ارائه شده است. بر اساس این نتایج، پاسخ حسگری نمونه SC-0 معادل ۱۷۰ و پاسخ نمونه نانوکامپوزیت SC-20 معادل ٦۵۰ به دست آمد که بیانگر بهبود تقریباً ۳/۸ برابری عملکرد حسگری نسبت به نمونه خالص می‌باشد. با افزایش دما، می‌توان گفت انرژی کافی برای غلبه بر سد فعال‌سازی واکنش‌های سطحی فراهم شده، سرعت واکنش‌های سطحی و تحرک حامل‌های بار افزایش یافته و پاسخ

حسگری به بیشینه می‌رسد، اما دمای بالاتر از آن باعث دفع گونه‌های جذب‌شده از سطح و کاهش پاسخ می‌گردد.



شکل٤: الف) نمودار سنجش حسگری نمونه ها، ب) مقایسه پاسخ حسگری نمونه ها با میله های خطا

این بهبود چشمگیر را می‌توان ناشی از تشکیل پیوند ناهمگون n-n بین SnO_2 و $g\text{-}C_3N_4$ دانست که با ایجاد میدان الکتریکی داخلی در ناحیه اتصال، جداسازی بار را تسهیل کرده و با انتقال الکترون‌ها از $g\text{-}C_3N_4$ به SnO_2، سبب گسترش لایه تخلیه می‌شود [۸] [۷]. از سوی دیگر، به نظر می‌رسد حضور صفحات دو بعدی $g\text{-}C_3N_4$ از تجمع نانوذرات اکسیدقلع جلوگیری کرده و سطح مؤثر در دسترس برای برهمکنش با گاز هدف را به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌دهد که شکل ۲ گویای این مطلب است. علاوه بر این، با توجه به شکل ۳ تشکیل نانوکامپوزیت SC-20 موجب افزایش غلظت حفره‌های اکسیژن در سطح نمونه می‌گردد که این حفره‌ها به عنوان مکان‌های فعال برای جذب و تفکیک مولکول‌های هیدروژن عمل می‌کنند. در مجموع، هم‌افزایی این عوامل سبب شده است که نانوکامپوزیت SC-20 عملکردی به مراتب برتر از نمونه اکسید قلع خالص از خود نشان دهد.

نتیجه گیری

در این مقاله، عملکرد SC-0 و SC-20 به عنوان حسگر مقاومتی برای تشخیص گاز هیدروژن مورد بررسی قرار گرفت. نتایج آنالیز XRD و FESEM تشکیل موفقیت‌آمیز نانوکامپوزیت با خلوص فازی بالا و پراکندگی نانوذرات اکسیدقلع روی سطح صفحات نیترید کربن گرافیتی را نشان داد. نتایج سنجش حسگری برای نشان می‌دهد عملکرد حسگری نانوکامپوزیت SC-20 حدود ۳/۸ برابر نسبت به نمونه خالص بهبود یافته است. این بهبود عملکرد به عوامل مختلفی از جمله تشکیل پیوند ناهمگون n-n، افزایش سطح ویژه، بهبود انتقال بار الکترون و افزایش غلظت حفره‌های اکسیژن نسبت داده می‌شود که نتایج داده ها از جمله XPS آن را تایید می‌کند. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که این کامپوزیت پتانسیل بالایی برای استفاده در حسگرهای گاز هیدروژن با کارایی بالا دارد.

مرجع‌ها

[۱] D. Gautam, Y. K. Gautam, K. Sharma, A. Kumar, A. Kumar, V. Srivastava, B. P. Singh; "Recent developments in SnO_2 nanostructures inspired hydrogen gas sensors"; Int. J. Hydrogen Energy; 81(2024) 313–345.

[۲] S. Hakimpour, S. Salari, P. Kameli, M. Ranjbar, T. Sarkar, B. Aslibeiki; "Hydrogen gas sensor incorporating bimetallic Pd–Ag decorated $ZnFe_2O_4$"; International Journal of Hydrogen Energy; 202 (2026) 153066.

[۳] A. M. Abdalla, S. Hossain, O. B. Nisfindy, A. T. Azad, M. Dawood, A. K. Azad; "Hydrogen production, storage, transportation and key challenges with applications: a review"; Energy Convers. Manag.; 165 (2018) 602–627.

[٤] S. Singh, R. Kumar, et al.; "A comprehensive review on metal oxide semiconductor-based hydrogen sensors"; Sens. Actuators Rep.; 5 (2023) 100145.

[٥] Y. Xie, C. Guo, J. Li, et al.; "Influence of SnO_2 particle size on the gas-sensing properties"; Sens. Actuators B Chem.; 163 (2012) 42–48.

[٦] R. Kyokunzire, P. Deng, Y. Tian, et al.; "Recent advance and perspectives in g-C_3N_4 based gas sensing materials: a review"; Microchem. J.; 185 (2023) 108202.

[۷] Y. Zhao, X. Shai, Q. Zhou, and K. Shen; "Construction of a novel Mott-Schottky heterostructure gas sensor g-C_3N_4/SnO_2 with layered nanorods array for high-sensitivity acetone detection"; Applied Surface Science; 680 (2025) 161333.

[۸] P. Birla, M. Shinde, S. Jagtap, S. Arbuj, S. Rane, and B. Kale; "Synergistic g-C_3N_4@SnO_2 nano heterostructures and their application for enhanced humidity sensing"; RSC Advances; 15 (2025) 39795–39806.

مقایسه و بررسی فیلم های YBCO ساخته شده به روش لایه نشانی چرخشی روی زیرلایه های طلا و نقره

مقدم[۱] ، زهرا ؛ دادرس[۱*]، صدیقه ؛ سنگ پور[۲]، پروانه
[۱] گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیك، دانشگاه الزهرا، تهران، ایران
۲ پژوهشگاه مواد و انرژی ، پژوهشکده فناوری نانو و مواد پیشرفته ،کرج ،البرز
*E-mail address: dadras@alzahra.ac.ir

چکیده
لایه های نازک YBCO روی دو زیر لایه طلا و نقره به روش لایه نشانی چرخشی ساخته شدند.جهت مشخصه یابی نمونه‌ها از آنالیزهای XRD, FESEM و AFM بهره بردیم. نتایج نشان می دهد لایه ای که روی زیرلایه طلا ساخته شده از کیفیت بهتری برخوردار است و دارای چگالی جریان بالاتری است و رسانندگی بالاتری نسبت به نمونه ای که روی زیر لایه نقره ساخته شده دارد.

واژه های کلیدی: ابررسانای YBCO، لایه نازک، لایه نشانی چرخشی .

Comparison and investigation of fabricated YBCO films by spin coating method on gold and silver substrates

Moghaddam[1], Zahra; Dadras[1*], Sedigheh; Sangpour[2], Parvaneh

[1]Department of Condensed MatterPhysics, Faculty of Physics, ALzahra University, Tehran, Iran.
[2] Materials and Energy Research Center, Department of Nanotechnology and Advanced Materials
*E-mail address: dadras@alzahra.ac.ir

Abstract

The YBCO thin films were fabricated on two gold and silver substrates by spin coating. We used FESEM, XRD, and AFM analyses to characterize the samples. The results show that, the film fabricated on the gold substrate has better quality and it has a higher current density and higher conductivity than the sample made on a silver substrate.

Keywords: spin coating, thin film, YBCO superconductors.

مقدمه

نانولوله‌های کربنی به دلیل نسبت سطح به حجم بزرگ و رسانایی خوب، به عنوان پرکننده‌های رسانا در مواد کامپوزیتی توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند [۱]. هنگامی که CNTها در مواد سرامیکی مانند (YBCO) گنجانده می‌شوند، می‌توانند به طور بالقوه خواص الکتریکی ترکیب را افزایش دهند
اکسید ایتریم-باریم-مس که معمولاً با نام YBCO شناخته می‌شود، یکی از مهمترین ابررساناهای دمای بالا است که به دلیل دمای بحرانی نسبتاً بالا (حدود ۹۲ کلوین) و قابلیت استفاده در کاربردهای الکترونیکی، مغناطیسی و انتقال توان، توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده است [۳-۲]. عملکرد لایه‌های نازک YBCO به شدت به کیفیت بلوری، استوکیومتری اکسیژن، ریزساختار و رابطه اپیتاکسی بین لایه و زیرلایه بستگی دارد [۱-۳]. از این‌رو، ساخت فیلم‌های نازک با کیفیت بالا مستلزم انتخاب مناسب زیرلایه است، زیرا خواص ابررسانایی این ماده به عدم تطابق شبکه‌ای، اختلاف ضرایب انبساط حرارتی، مورفولوژی سطح و سازگاری شیمیایی بین فیلم و زیرلایه حساس است [۴-۳].
زیرلایه‌های تک‌بلوری مختلفی از جمله $SrTiO_3$، $LaAlO_3$، MgO، $NdGaO_3$ و YSZ برای رشد لایه‌های YBCO مورد استفاده قرار گرفته‌اند [۵-۴]. در میان این زیرلایه‌ها، $SrTiO_3$ و $LaAlO_3$ به دلیل تطابق شبکه‌ای مناسب، امکان رشد اپیتاکسیال با کیفیت بالا و دستیابی به خواص ابررسانایی مطلوب را فراهم می‌کنند [۴-۳]. در مقابل، زیرلایه‌هایی مانند MgO و YSZ دارای عدم تطابق شبکه‌ای بیشتری هستند که می‌تواند منجر به ایجاد تنش و نابجایی در فیلم شود [۵-۴].

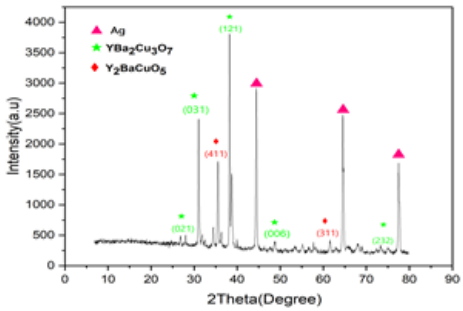
مطالعات نشان داده‌اند که تنش القاشده توسط زیرلایه و ویژگی‌های سطح آن نقش مهمی در مورفولوژی، بافت بلوری و خواص ابررسانایی فیلم‌های YBCO ایفا می‌کنند [۵-٤].
علاوه بر زیرلایه‌های تک‌بلوری، برای کاربردهای صنعتی و تولید هادی‌های پوشش‌دار، لایه‌های YBCO بر روی زیرلایه‌های فلزی با استفاده از فناوری‌هایی نظیر IBAD و RABiTS رشد داده می‌شوند [۷-٦]. این روش‌ها امکان تولید هادی‌های بلند با بافت بلوری مناسب و چگالی جریان بحرانی بالا را فراهم می‌کنند، هرچند واکنش‌های بین‌سطحی، نفوذ عناصر و اثرات مرزدانه‌ها همچنان از چالش‌های مهم در این ساختارها محسوب می‌شوند [۷-٦]. بنابراین، بررسی تأثیر زیرلایه‌های مختلف بر رشد، ریزساختار و خواص ابررسانایی لایه‌های نازک YBCO برای بهینه‌سازی فرآیندهای ساخت و توسعه کاربردهای ابررسانایی ضروری است [۳–۷].

روش آزمایش:

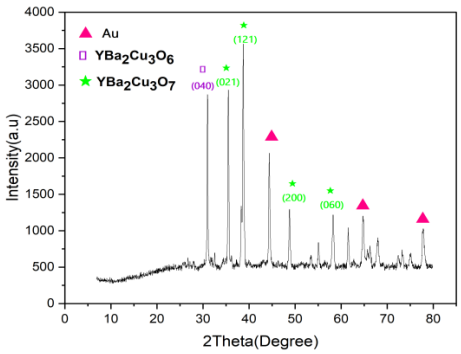
برای آماده سازی محلول جهت لایه نشانی از استات های فلزی با نسبت مولی Y:Ba:Cu=۱/۲/۳ و محلول (تری فلوئور استیک استات و آب به نسبت ۱ به۳) استفاده می‌کنیم. سپس برای تهیه پودر مورد نیاز محلول آماده را به مدت ٤ ساعت در دمای ۷٤ درجه سانتیگراد بر روی همزن مغناطیسی هم می زنیم تا همگن شده و پودر آبی رنگ به دست آید.
در ادامه برای تهیه محلول یک مولار مقدار ٤گرم از این پودر را به cc٦ متانول اضافه می‌کنیم، محلول آبی رنگ فوق را بر روی زیر لایه هایی از جنس نقره با ابعاد ۱ در ۲ سانتی‌متر و طلا با ابعاد ۱ در ۱ سانتی متر که قبلاً کامل تمیز شده بود می‌ریزیم و به روش چرخشی لایه نشانی می‌کنیم. لایه نشانی با سرعت ۳۰۰۰rpm به مدت ۱۰ ثانیه انجام می‌شود، سپس این لایه را به مدت ۱۰ دقیقه تحت خلا در دمای ۱۵۰ درجه سانتیگراد خشک می‌کنیم. لایه فوق پس از مراحل تکلیس و پخت نهایی در دمای ۹۰۰ درجه سانتیگراد آماده می‌شود.

اندازه گیری ها و نتایج:

به منظور تعیین ساختار نمونه‌ها طیف XRD آنها تهیه و توسط نرم‌افزار X pert High Score plus از طریق مطابقت با الگوهای استاندارد موجود مورد بررسی قرار گرفت که نتایج به دست آمده در شکل ۱ و ۲ نشان داده شده است.



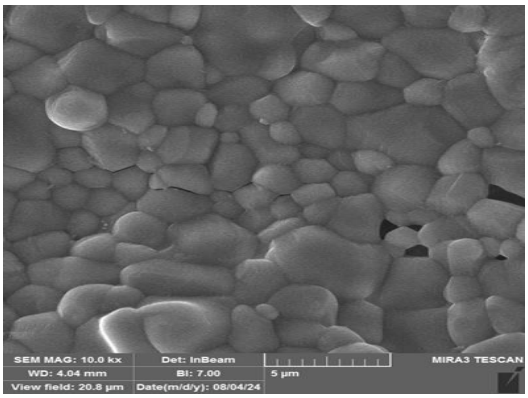
شکل۱ : الگوی پراش نمونه YBCO روی زیرلایه نقره



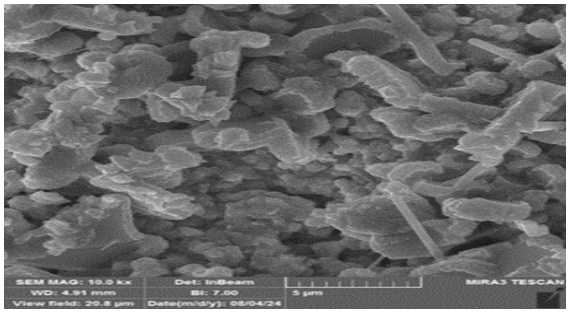
شکل۲ : الگوی پراش YBCO روی زیرلایه طلا

۱. نتایج طیف پراش اشعه ایکس نشان داد که همه نمونه‌ها دارای فاز قالب ارتورومبیک Y123می‌باشند. همچنین نانو ذرات CNT در هیچ یک از نمونه‌های آلاییده وارد ساختار ابررساناها نگردیده و فقط نقش بین دانه‌های دارند..
۲. با استفاده از رابطه دبای شرر متوسط اندازه بلورک‌های نمونه ها محاسبه شد متوسط اندازه بلورک های نمونه YBCOروی زیرلایه طلا ونقره به ترتیب حدود ۱۸۰ و ۲۷۰ نانومتراست.

به منظور بررسی ریز ساختار نمونه ها ، همگنی، دانه‌بندی، ابعاد دانه‌ها، اتصالات بین دانه‌ای آزمایش‌های FESEM روی نمونه‌ها انجام شد. شکل های ۳ و ٤ تصاویر FESEM نمونه های سنتز شده را نشان می دهند.

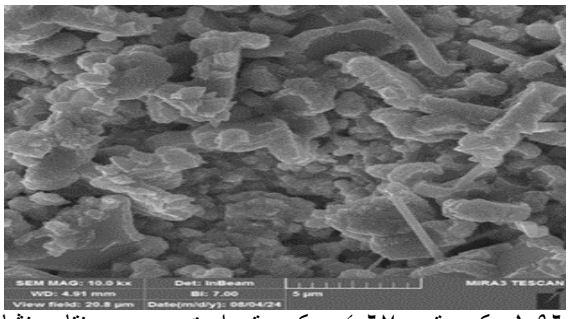


شکل۳: تصاویر FESEM نمونه YBCO روی زیر لایه نقره



شکل٤: تصاویر FESEM نمونه YBCO آ روی زیر لایه طلا

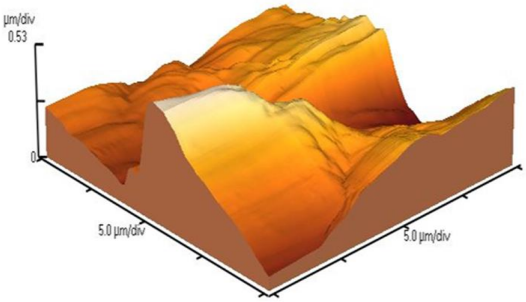
از بررسی FESEM نمونه‌ها در می‌یابیم که لایه نازکی که روی زیر لایه طلا ساخته شده اندازه دانه کوچک‌تری نسبت به نمونه‌ای که روی زیر لایه نقره ساخته شده است دارد اندازه دانه‌های نمونه ها روی زیرلایه طلا و نقره به ترتیب



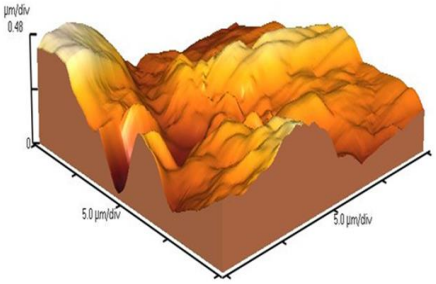
۱/۹٦میکرومتر و٤/٦٧ میکرومتر است. بررسی نتایج نشان می‌دهد لایه‌ای که دارای دانه‌های کوچکتری است تخلخل بین دانه‌ای در آن کاهش پیدا کرده و اتصالات قوی‌تری بین دانه‌ها دارد که این می‌تواند باعث افزایش چگالی جریان شود.

برای تصویربرداری سه بعدی از سطوح مختلف نمونه‌ها و اندازه‌گیری زبری سطح هر یک از نمونه‌ها آنالیز AFM انجام شد شکل های ٥ و٦ تصاویر آنالیز AFM نمونه ها را نشان می دهند.

از مقایسه دو شکل ٥ و ٦ مشخص است که پستی و بلندی سطح در شکل ٦ نسبت به شکل ٥ کمتر است . زبری سطح هر یک از نمونه‌ها به ترتیب روی زیرلایه نقره و طلا ۲۰۵ و ۱۱۹ نانومتر بدست آمد. بنابراین می توان گفت نمونه ای که روی زیرلایه طلا ساخته شده است از رسانندگی بالاتری برخوردار است زیرا هر چه زبری کمتر باشد، رسانندگی نمونه نیز افزایش پیدا می‌کند.



شکل ٥.آنالیز AFM نمونهYBCO روی زیرلایه نقره



شکل ٦.آنالیز AFM نمونهYBCO روی زیرلایه طلا

نتیجه گیری

ساخت لایه نازک YBCO به روش لایه نشانی چرخشی روی زیر لایه نقره و طلا مورد بررسی قرار گرفت.
با توجه به داده‌های آنالیزها می‌توان نتیجه گرفت نمونه‌ای که روی زیر لایه طلا ساخته شده از ویژگی‌های بهتری برخوردار است زیرا با کوچکتر بودن دانه‌هایش دارای چگالی جریان بالاتری است و باتوجه به زبری سطحی آن رسانندگی بالاتری نسبت به نمونه ای که روی زیر لایه نقره ساخته شده دارد.

سپاسگزاری:
از حمایت های دانشگاه الزهرا (س) و پژوهشگاه مواد و انرژی تشکر می شود.

مـرجع هـا

[1] Oh, Y., Lee, E., Baik, S., Choi, J., Suh, D., Kim, Y., & Mok, J. S. (2008). Silver-plated carbon nanotubes for silver/conducting polymer composites. Nanotechnology, 19(49), 495602.

[2] Rao, M. S. R., & Mohan, S., Pulsed Laser Deposition and Characterization of High-Tc $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ Superconducting Thin Films, Materials Science and Engineering R, 1998.

[3] Johansson, B., Laser Deposited $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ Thin Films and Heterostructures: Growth and Characterization, Chalmers University of Technology, 1993.

[4] Chen, C. H. et al., Investigation of the Evolution of $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ Films Deposited on Different Substrates, Physica C, 1997.

[5] Lin, Y. et al., Comparative Study of Microstructural Properties for $YBa_2Cu_3O_7$ Films on Single-Crystal and Ni-Based Metal Substrates, Journal of Materials Research, 2005.

[6] Feldmann, D. M. et al., A Review of the Influence of Grain Boundary Geometry on the Electromagnetic Properties of Polycrystalline YBCO Films, Journal of the American Ceramic Society, 2008.

[7] Hühne, R. et al., Chemical Solution Deposition of $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ Coated Conductors, Materials Today, 2007

تأثیر غلظت لیگاند بر خواص نوری و ساختاری نانوکریستال‌های پروسکایتی

فرخ فال، فاطمه[۱]، جودکی، محسن[۲]، مرندی، مازیار[۳]*

[۱]گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه اراک، اراک

چکیده

در این پژوهش، سنتز نانوکریستال‌های پروسکایتی و تأثیر غلظت لیگاندهای سطحی بر خواص نوری و ساختاری آن‌ها مورد بررسی قرار گرفت. هدف اصلی، بهینه‌سازی مقدار لیگاند در فرآیند سنتز به منظور کنترل رشد بلور، کاهش نقص‌های سطحی و بهبود ویژگی‌های فوتولومینسانس بود. نانوکریستال‌ها با استفاده از روش سنتز رسوب به کمک لیگاند (LARP) و با تغییر سیستماتیک نسبت مولی لیگاندها تهیه شدند و اثر این تغییرات با استفاده از طیف‌سنجی فوتولومینسانس (PL)، جذب UV–Vis، پراش پرتو ایکس (XRD) مورد ارزیابی قرار گرفت.

نتایج نشان داد که مقدار لیگاند نقش تعیین‌کننده‌ای در تعادل بین رشد بلوری و پایداری سطحی نانوکریستال‌ها دارد. در شرایط بهینه، پاسیو شدن مؤثر سطح موجب کاهش تله‌های غیرتابشی و افزایش شدت و بازده فوتولومینسانس شد. در مقابل، کمبود لیگاند منجر به تشکیل نانوکریستال‌های با نقص سطحی بالا و افت شدید خواص نوری گردید، در حالی که استفاده بیش از حد لیگاند نیز باعث اختلال در رشد بلوری و کاهش کیفیت ساختاری شد. این نتایج نشان می‌دهد که کنترل دقیق غلظت لیگاند در مرحله سنتز، پارامتری کلیدی برای دستیابی به نانوکریستال‌های پروسکایتی با کیفیت نوری و ساختاری مطلوب است.

واژه های کلیدی : *سنتز نانو کریستال‌های پروسکایتی، لیگاندهای سطحی، اولئیک اسید، اولئیل امین*

The effect of ligand concentration on optical and structural properties of perovskite nanocrystals

Farokhfal, Fatemeh[1], Joodaki, Mohsen[2], Marandi, Maziar[3,*]

[1]Department of Physics, Faculty of science, University of Arak, Arak
** Corresponding Author: m-marandi@araku.ac.ir*

Abstract

In this study, perovskite nanocrystals were synthesized and the effect of surface ligand concentration on their optical and structural properties was systematically investigated. The primary goal was to optimize ligand content during the synthesis process in order to control crystal growth, reduce surface defects, and enhance photoluminescence properties. The nanocrystals were prepared via ligand assisted reprecipitation (LARP) synthesis method with controlled variation of ligand molar ratios, and the resulting samples were characterized using photoluminescence (PL) spectroscopy, UV–Vis absorption spectroscopy, and, X-ray diffraction (XRD).
The results demonstrate that ligand concentration plays a critical role in balancing crystal growth and surface stabilization. At the optimal condition, effective surface passivation significantly reduced non-radiative recombination sites, leading to enhanced photoluminescence intensity and improved quantum yield. In contrast, insufficient ligand coverage resulted in highly defected nanocrystals with poor optical performance, while excessive ligand content hindered crystal growth and degraded structural quality. These findings highlight that precise control of ligand concentration during synthesis is a key parameter for obtaining high-quality perovskite nanocrystals with superior optical and structural properties
.

Keywords: *Synthesis of Perovskite Nanocrystals, Surface Ligands, Oleic Acid, Oleylamine*

PACS No. 81

مقدمه

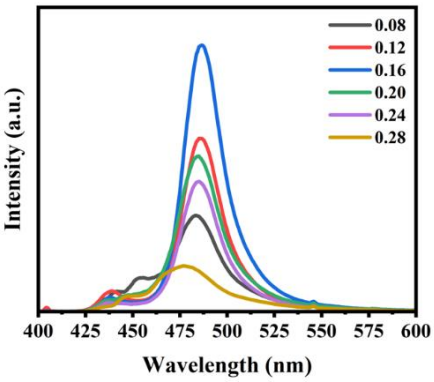
در سال‌های اخیر، نانوکریستال‌های پروسکایتی هالیدی به دلیل خواص نوری و الکترونیکی برجسته، به یکی از پرکاربردترین مواد در حوزه اپتوالکترونیک تبدیل شده‌اند. این مواد به واسطه بازده کوانتومی فوتولومینسانس بالا، پهنای باند نشر باریک و قابلیت تنظیم طول موج گسیل، گزینه‌های مناسبی برای کاربرد در دیودهای نورگسیل، سلول‌های خورشیدی و ... محسوب می‌شوند [۱].

خواص نهایی نانوکریستال‌های پروسکایتی به شدت تحت تأثیر شرایط سنتز قرار دارد. پروسکایت‌ها معمولا به روش سنتز در محل سنتز می‌شوند و پروسکایت‌ها حاصل، معمولا ترازهای تله و در نتیجه شدت فوتولومونیسانس پایینی دارند. در این پژوهش با استفاده از روش LARP، این مشکلات بر طرف می‌شود [۲]. در این روش، یکی از مهم‌ترین پارامترهای مؤثر در فرآیند سنتز، نوع و غلظت لیگاندهای مورد استفاده که علاوه بر کنترل فرآیند هسته‌زایی و رشد بلورها، نقش مهمی در پایدارسازی نانوکریستال‌ها و کاهش نقص‌های سطحی ایفا می‌کنند. در سنتز نانوکریستال‌های پروسکایتی، اولئیک اسید (OA) و اولئیل‌آمین (OAm) از متداول‌ترین لیگاندهای مورد استفاده هستند که با اتصال به سطح نانوکریستال‌ها، از تجمع ذرات جلوگیری کرده و موجب بهبود کیفیت بلوری و خواص نوری می‌شوند [۱و۳].

با وجود نقش مثبت لیگاندها، مقدار آن‌ها باید به دقت کنترل شود. کمبود لیگاند می‌تواند منجر به افزایش نقص‌های سطحی و کاهش شدت فوتولومینسانس شود، در حالی که استفاده بیش از حد از آن‌ها ممکن است رشد بلورها را محدود کرده و بر ساختار و ویژگی‌های نوری نانوکریستال‌ها تأثیر منفی بگذارد [۴ و ۵]. در پژوهش حاضر، نانوکریستال‌های $FAPbBr_3$ به روش LARP تهیه شدند و تأثیر تغییر غلظت لیگاندهای OA و OAm بر خواص ساختاری و نوری آن‌ها بررسی شدند.

روش آزمایش

به منظور بررسی تأثیر لیگاندهای آلی بر خواص نوری نانوکریستال‌های پروسکایتی سنتز شده، مقدار ۰/۱ mmol FABr و ۰/۱ mmol $PbBr_2$ در ۲ mL DMF حل شدند، سپس لیگاندها با

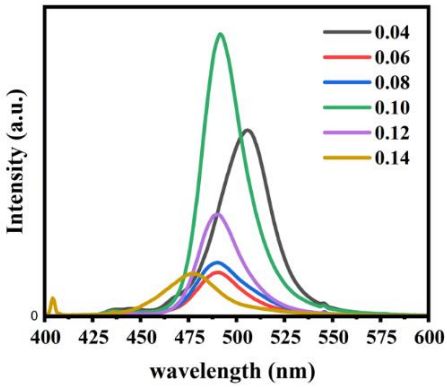


شکل ۱: طیف فوتولومینسانس در بررسی مقادیر مختلف OA در پروسکایت $FAPbBr_3$

نسبت‌های مختلف اضافه شدند. محلول به دست آمده در ۳۰ mL تلوئن تزریق شد و پروسکایت تشکیل شد. ابتدا اثر تغییر مقدار OA در حضور مقدار ثابت ۰/۲ mL OAm مورد مطالعه قرار گرفت. سپس با ثابت نگه داشتن مقدار بهینه OA، تأثیر تغییر مقدار OAm بر رفتار فوتولومینسانس نمونه‌ها بررسی شد.

شکل ۱ طیف‌های فوتولومینسانس نمونه‌های سنتز شده با غلظت ثابت OAm و غلظت متغیر OA را نشان می‌دهد. مطابق نتایج، تمامی نمونه‌ها دارای قله اصلی در محدوده ۴۸۵ nm تا ۴۹۰ nm هستند. مطابق شکل ۱ تغییر غلظت OA تأثیر محسوسی بر ساختار الکترونیکی و گاف انرژی ماده نداشته و عمدتاً بر کیفیت سطحی و فرآیندهای بازترکیب حامل‌ها اثرگذار بوده است . با افزایش مقدار OA از ۰/۰۸ mL به ۰/۱۶ mL، به طور قابل توجهی شدت فوتولومینسانس افزایش یافته است. این افزایش شدت را می‌توان ناشی از پوشش مؤثرتر سطح نانوکریستال‌ها توسط مولکول‌های OA دانست. از سوی دیگر، افزایش بیشتر مقدار OA به ۰/۲۰ mL، ۰/۲۴ mL و ۰/۲۸ mL موجب کاهش تدریجی شدت تابش می‌شود. این رفتار می‌تواند به پوشش بیش از حد سطح ذرات توسط لیگاندها، اختلال در فرآیند رشد بلوری و یا افزایش مسیرهای بازترکیب غیرتابشی نسبت داده شود.

پس از تعیین مقدار بهینه OA، تأثیر مقدار OAm بر خواص نوری نمونه‌ها مورد بررسی قرار گرفت. شکل ۲ طیف‌های نمونه‌های سنتز شده با مقادیر مختلف OAm به ازای OA به مقدار ۰/۱۶ mL را نشان می‌دهد. نتایج نشان می‌دهد که شدت فوتولومینسانس با افزایش مقدار OAm از ۰/۰۴ mL به ۰/۱۰ mL افزایش یافته و در



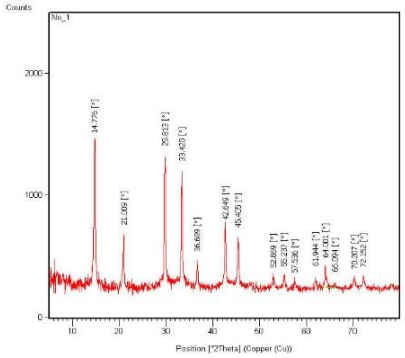
شکل۲: طیف فوتولومینسانس در بررسی مقادیر مختلف OAm در پروسکایت FAPbBr3

مقدار ۰/۱۰ mL به بیشترین مقدار خود می‌رسد. افزایش شدت PL در این محدوده را می‌توان به نقش OAm در کنترل رشد نانوکریستال‌ها، بهبود پایداری سطحی و کاهش مراکز تله نسبت داد.

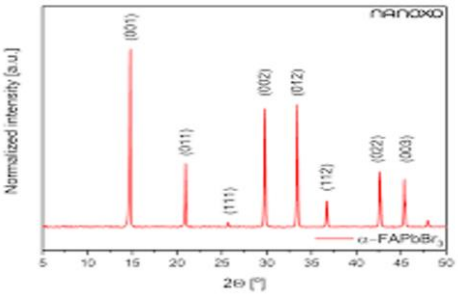
علاوه بر افزایش شدت، در نمونه حاوی ۰/۱۰ mL OAm جابه‌جایی جزئی قله نشر به سمت طول موج‌های کوتاه‌تر مشاهده می‌شود که می‌تواند نشان‌دهنده کوچک شدن جزئی در اندازه نانوکریستال‌ها باشد. با افزایش بیشتر مقدار OAm به ۰/۱۲ mL و ۰/۱۴ mL، شدت تابش به طور محسوسی کاهش می‌یابد. این کاهش می‌تواند ناشی از برهم خوردن تعادل لیگاندی در محیط سنتز، ایجاد اختلال در رشد بلوری و افزایش ترازهای تله باشد. همچنین حضور بیش از حد مولکول‌های آمینی ممکن است از تشکیل بلورها جلوگیری کنند.

بر اساس نتایج به دست‌آمده، شرایط بهینه سنتز در این پژوهش شامل ۰/۱۶ mL OA و ۰/۱۰ mL میلی‌لیتر OAm است که در این شرایط بیشترین شدت فوتولومینسانس مشاهده شده است که بیانگر کاهش نسبی نقص‌های سطحی و بهبود کیفیت اپتیکی نانوکریستال‌های سنتز شده است.

به منظور ارزیابی ساختار بلوری، شناسایی فازهای تشکیل‌شده و بررسی میزان بلورینگی نانوکریستال‌های پروسکایتی $FAPbBr_3$، آزمون پراش پرتو ایکس (XRD) مطابق شکل ۳ انجام شد و با مقایسه آن با کارت مرجع پروسکایت $FAPbBr_3$ (شکل ۴)، می‌توان نتیجه گرفت که شدت نسبتاً زیاد و تفکیک مناسب پیک‌های پراش نشان می‌دهد که نمونه از نظم شبکه‌ای قابل قبولی برخوردار بوده و رشد بلورها به‌صورت مؤثر انجام شده است.



شکل۳: طیف XRD مربوط به مقدار بهینه OA و OAm در پروسکایت $FAPbBr_3$



شکل ۴: کارت مرجع XRD پروسکایت $FAPbBr_3$

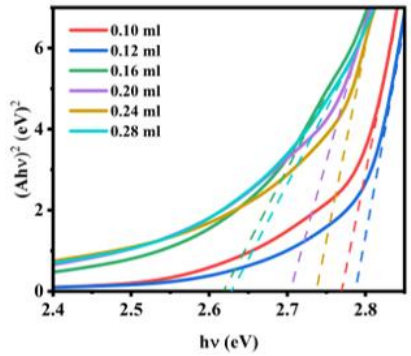
جدول ۱: زاویه و FWHM پیک‌های XRD شکل ۳

2θ	FWHM	D (nm)
۱۴/۸۳	۰/۴۲۵	۱۹/۷۰
۲۱/۰۸	۰/۳۸۵	۲۱/۹۴
۲۹/۹۸	۰/۴۹۹	۱۷/۲۳
۳۳/۵۳	۰/۴۲۷	۲۰/۳۱
۴۲/۷۳	۰/۶۷۱	۱۳/۲۹
۴۵/۷۳	۰/۴۴۲	۲۰/۳۹

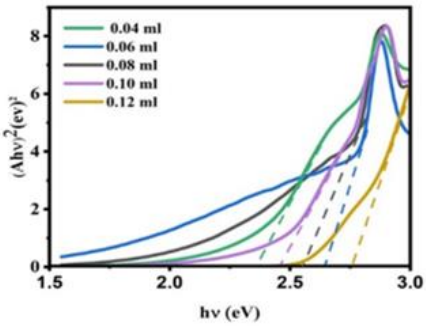
اگر بخواهیم تخمینی از اندازه متوسط بلورک‌ها داشته باشیم، از معادله شرر استفاده می‌کنیم:

$$D = \frac{k\lambda}{\beta \cos\theta} \qquad (۱)$$

که D اندازه بلورک، k ضریبی ثابت، λ طول موج تابش Cu-Kα برابر با ۰/۱۵۴۰۶ nm، β پهنای پیک در نصف بیشینه بر حسب رادیان و θ زاویه براگ است. مطابق جدول ۱، می‌توان گفت بلورک‌ها دارای اندازه متوسط ۱۸/۸۱ nm هستند که تایید کننده از بین رفتن کامل ترازهای تله و در نتیجه افزایش قابل توجه شدت فوتولومونیسنس است.



شکل ۵ : نمودارTauc در بررسی لیگاند OA در پروسکایت FAPbBr3



شکل ۶ : نمودارTauc در بررسی لیگاند OAm در پروسکایت FAPbBr3

به منظور بررسی اثر لیگاندهای OA و OAm بر خواص نوری نانوکریستال‌های $FAPbBr_3$، طیف‌های جذب فرابنفش–مرئی مورد مطالعه قرار گرفت و گاف انرژی نمونه‌ها از طریق روش Tauc محاسبه شد. نمودارهای $(Ahν)^2$ بر حسب hν برای نمونه‌های سنتز شده با مقادیر مختلف هر یک از لیگاندها در شکل‌های ۵ و ۶ نشان داده شده‌اند. مقدار گاف انرژی از طریق برون‌یابی بخش خطی منحنی‌ها و تعیین محل تقاطع با محور انرژی به دست آمد. طبق شکل ۵ تغییر غلظت OA نشان داد که افزایش مقدار این لیگاند در ابتدا منجر به کاهش گاف انرژی نمونه‌ها می‌شود. این موضوع بیانگر آن است که افزایش OA لزوما منجر به کاهش سایز نانوبلورها نمی‌شود. حضور OA در مقادیر مناسب باعث پایدارسازی سطح و کاهش مراکز بازترکیب غیرتابشی می‌شود. گاف انرژی نوری نمونه‌ها از طریق برون‌یابی بخش خطی نمودار **تاوک** $(\alpha h\nu)^2$ **بر حسب** $h\nu$ **محاسبه شد.** نتایج نشان می‌دهد که در بررسی لیگاند OAm، مقادیر گاف انرژی در محدوده **۲/۶۲ eV تا ۲/۸۰ eV** قرار دارند، در حالی که در بررسی مقادیر OA این مقادیر در بازه **۲/۴۵ eV تا ۲.۷۵ eV** تغییر می‌کنند. بنابراین، تغییر مقدارOAm دامنه تغییرات بزرگ‌تری در گاف انرژی نسبت به تغییرات OA نشان می‌دهد که بیانگر تأثیر بیشتر تغییر لیگاند محلول بر خواص نوری نمونه‌ها است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، تأثیر غلظت لیگاندهای OA و OAm بر خواص نوری نانوکریستال‌های $FAPbBr_3$ سنتز شده به روش محلولی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاصل از طیف‌سنجی فوتولومونیسنس، پراش اشعه ایکس و جذب فرابنفش–مرئی و تحلیل نمودارهای Tauc نشان داد که تغییر مقدار لیگاندها تأثیر مستقیمی بر گاف انرژی و در نتیجه خواص اپتیکی نانوکریستال‌ها دارد. بر اساس نتایج حاصل از نمودارهای Tauc، نمونه سنتز شده با مقدار ۰/۱۶ mL OA و ۰/۱۰ mL OAm کمترین گاف انرژی و مناسب‌ترین رفتار اپتیکی را از خود نشان داد. این موضوع بیانگر آن است که در این شرایط، تعادل مطلوبی میان رشد بلوری، پایدارسازی سطح و کاهش نقص‌های ساختاری برقرار شده است.

مرجع‌ها

[۱] Han, Dengbao, Muhammad Imran, Mengjiao Zhang, Shuai Chang, Xian-gang Wu, Xin Zhang, Jialun Tang et al. "Efficient light-emitting diodes based on in situ fabricated FAPbBr3 nanocrystals: the enhancing role of the ligand-assisted reprecipitation process." ACS nano 12, no. 8 (2018)

[۲] Yang, Shuhui, Xi Ke, Qizan Chen, Runda Huang, Weizhe Wang, Kunqiang Wang, Kaixiang Shu et al. "In-situ growth behavior of FAPbBr3 on two-dimensional materials for photocatalytic reaction to controllable products." *Journal of Catalysis* 402 (2021): 143-153.

[۳] Zhao, Haifeng, Hongting Chen, Sai Bai, Chaoyang Kuang, Xiyu Luo, Pengpeng Teng, Chunyang Yin et al. "High-brightness perovskite light-emitting diodes based on FAPbBr3 nanocrystals with rationally designed aromatic ligands." ACS Energy Letters 6, no. 7 (2021)

[۴] Shamsi, Javad, Alexander S. Urban, Muhammad Imran, Luca De Trizio, and Liberato Manna. "Metal halide perovskite nanocrystals: synthesis, post-synthesis modifications, and their optical properties." *Chemical reviews* 119, no. 5 (2019): 3296-3348.

[۵] Bhatia, Harshita, Biplab Ghosh, and Elke Debroye. "Colloidal FAPbBr 3 perovskite nanocrystals for light emission: what's going on?" *Journal of Materials Chemistry C* 10, no. 37 (2022): 13437-13461.

رشد و مشخصه یابی ساختاری و اپتیکی نانوساختار دی‌سلنید وانادیوم

خراسانی ، فهیمه [۱]؛ ایزدی فرد، مرتضی [۱] ؛ قاضی ، محمدابراهیم [۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود ، شاهرود

چکیده

در این پژوهش، نانوساختارهای دی‌سلنید وانادیوم (VSe_2) به روش گرما-آبی سنتز شدند و ویژگی‌های ساختاری و اپتیکی آن‌ها مورد بررسی قرار گرفت. نتایج پراش پرتو ایکس (XRD) تشکیل موفق فاز بلوری VSe_2را تأیید کرد و اندازه متوسط بلورک‌ها حدود ۳۵/۶ نانومتر محاسبه شد. تصاویر FESEM مورفولوژی لایه‌ای نمونه را نشان دادند و آنالیز EDS حضور عناصر وانادیوم و سلنیوم را تأیید نمود. همچنین طیف‌سنجی UV–Vis بیانگر جذب مناسب در ناحیه مرئی بود. گاف نواری اپتیکی نمونه از طریق نمودار تاوک حدود ۱/۳ الکترون‌ولت به دست آمد. نتایج نشان می‌دهد که نانوساختارهای سنتز شده از ویژگی‌های ساختاری و اپتیکی مطلوبی برخوردار بوده و می‌توانند برای کاربردهای اپتوالکترونیکی مورد توجه قرار گیرند.

واژگان کلیدی: *دی‌سلنید وانادیوم، گرما-آبی، خواص اپتیکی، گاف نواری*

Synthesis and characterization of the structural and optical properties of vanadium diselenide nanostructural

Khorasani, Fahime[1]; Izadifard, Morteza[1] ; Ghazi, Mohammad Ebrahim[1]

[1] Department of Physics, University of shahrood, shahrood

Abstract

Vanadium diselenide (VSe_2) nanostructures were synthesized via a hydrothermal route, and their structural and optical properties were investigated. X-ray diffraction (XRD) analysis confirmed the successful formation of crystalline VSe_2 with an average crystallite size of 35.6 nm. FESEM images revealed a layered morphology, while EDS analysis verified the presence of vanadium and selenium elements. UV–Vis spectroscopy demonstrated significant absorption in the visible region. The optical band gap, estimated from the Tauc plot, was found to be approximately 1.3 eV. These results indicate that the synthesized VSe_2 nanostructures possess favorable structural and optical characteristics, making them promising candidates for optoelectronic applications.

Keywords: Vanadiumdiselenide, Hydrothermalsynthesis, Opticalproperties
PACS No: 68, 6835, 6865, 73, 78

مقدمه

نانومواد دوبعدی فوق نازک، یکی از جذاب‌ترین و پرکاربردترین زمینه‌های علمی و فناوری نانوتکنولوژی است که در دهه‌های اخیر توجه زیادی را به خود جلب کرده است. این مواد، به‌صورت لایه‌هایی بسیار نازک با ضخامتی در حدود یک یا چند اتم یا مولکول تشکیل می‌شوند که خواص بسیار منحصربه‌فردی دارند[۱].یکی از مثال‌های معروف در این زمینه، گرافن است. گرافن، یک لایه از اتم‌های کربن است که به‌صورت دوبعدی تشکیل می‌شود. از جمله خواص منحصربه‌فرد گرافن می‌توان به هدایت الکتریکی بسیار بالا، مقاومت مکانیکی قوی، انعطاف‌پذیری بالا، و وزن سبک اشاره کرد. این ویژگی‌ها، گرافن را به یکی از مطرح‌ترین نانومواد برای کاربردهای مختلف از جمله الکترونیک، نانوحسگرها، حسگرهای زیستی و مواد تقویت‌کننده در کامپوزیت‌ها تبدیل کرده است[۲]. علاوه برگرافن تعداد زیادی نانو مواد دوبعدی فوق نازک گرافن مانند، از قبیل دی کالکوژنیدهای فلزات واسطه، اکسیدهای فلزی لایه‌ای، کاربیدهای فلزات واسطه و هیدروکسیدهای لایه‌ای دوبعدی با روش های مختلف تهیه شده

اند. این مثال‌ها نشان می‌دهد که نانومواد دوبعدی فوق نازک، با ویژگی‌های خاص و کاربردهای گسترده، از اهمیت بسیاری برخوردارند و در زمینه‌های مختلف علمی و فناوری، به‌عنوان مواد پایه و بستر برای نوآوری و پیشرفت شناخته می‌شوند[۳].

دی‌کالکوژنیدهای فلزات واسطه (TMD) یک دسته جذاب از مواد هستند که در سال‌های اخیر توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده‌اند. این مواد از فلزات واسطه گروه‌های ۴ تا ۱۰ جدول تناوبی مانند مولیبدن، تنگستن، وانادیوم و تیتانیوم تشکیل شده‌اند و ویژگی‌های متنوعی از نظر ساختاری، الکترونی، نوری و مکانیکی دارند. این ویژگی‌ها باعث می‌شود که TMD ها به‌عنوان مواد جذاب واکنش‌پذیر در زمینه‌های علمی و فناوری مورد استفاده قرار گیرند[۴]. ساختار بلوری لایه‌ای TMDها توسط لایه‌های پیوند کووالانسی که توسط نیروهای ضعیف وان‌درووالس به هم متصل شده‌اند تعیین می‌شود. این ساختار به لایه‌های فوق نازک اجازه می‌دهد تا به‌راحتی لایه‌برداری شوند و به وجود مواد دوبعدی با خواص مکانیکی منحصربه‌فرد بیانجامد. ویژگی‌های منحصربه‌فرد VSe_2، همراه با سنتز و روش‌های پردازش آسان آن، آن را به یک ماده همه‌کاره با کاربردهای بالقوه در زمینه‌های مختلف تبدیل می‌کند. دلایل علاقه محققان به ترکیب VSe_2 نه تنها به دلیل ویژگی‌های فردی آن، بلکه به دلیل قابلیت استفاده آن در سیستم‌های هیبریدی و ساختارهای ناهمسان است. با ترکیب VSe_2 با سایر مواد دوبعدی یا ادغام آن با نیمه هادی های معمولی، محققان می‌توانند قابلیت‌های جدیدی را مهندسی کرده و عملکرد دستگاه را افزایش دهند. برای مثال، ساختارهای ناهمسان متشکل از VSe_2 و گرافن، خواص الکترونی و نوری جدیدی را نشان داده‌اند و راه‌هایی را برای کاربردهای پیشرفته در دستگاه‌ها باز می‌کنند.[۵]. در پژوهش حاضر، نانوساختار دی‌سلنید وانادیوم به روش گرما–آبی سنتز شد و ویژگی‌های ساختاری و اپتیکی آن مورد بررسی قرار گرفت. ساختار بلوری نمونه توسط پراش پرتو ایکس (XRD) ارزیابی شد. همچنین ریختارشناسی سطح و ترکیب عنصری نمونه به ترتیب با استفاده از FESEM و EDS مورد مطالعه قرار گرفت. به منظور بررسی خواص اپتیکی، طیف‌های جذب و عبور فرابنفش–مرئی ثبت و تحلیل شدند و در نهایت گاف نواری اپتیکی نمونه از طریق رسم نمودار تاوک محاسبه گردید.

مواد اولیه

برای سنتز دی‌سلنید وانادیوم (VSe_2)، از متاوانادات آمونیوم (NH_4VO_3) به عنوان منبع وانادیوم و دی اکسید سلنیوم (SeO_2) استفاده شد. همچنین از فرمیک اسید به عنوان عامل کاهنده و آب دیونیزه به عنوان حلال استفاده گردید. تمامی مواد شیمیایی دارای خلوص آزمایشگاهی بوده و بدون هیچ‌گونه خالص‌سازی اضافی مورد استفاده قرار گرفتند.

سنتز VSe_2

ابتدا مقدار مشخصی از متاوانادات آمونیوم در آب دیونیزه حل شد و محلولی یکنواخت به دست آمد. سپس مقدار استوکیومتری دی اکسیدسلنیوم به محلول اضافه گردید و مخلوط حاصل به مدت ۳۰ دقیقه تحت هم‌زدن مغناطیسی قرار گرفت. در ادامه، مقدار مناسبی از فرمیک اسید به عنوان عامل احیاکننده افزوده شد و هم‌زدن تا تشکیل یک محلول یکنواخت ادامه یافت[۶].

محلول آماده‌شده به یک اتوکلاو تفلونی منتقل شد و فرآیند هیدروترمال در دمای ۲۰۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۲۴ ساعت انجام گرفت. پس از پایان واکنش، اتوکلاو به طور طبیعی تا دمای محیط سرد شد. رسوب سیاه‌رنگ چندین مرتبه با آب دیونیزه و اتانول شستشو داده شد تا ناخالصی‌های احتمالی حذف شوند. در نهایت نمونه در دمای ۶۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۱۲ ساعت خشک شد و برای انجام آزمون‌های مشخصه‌یابی مورد استفاده قرار گرفت[۶].

مشخصه‌یابی نمونه‌ها

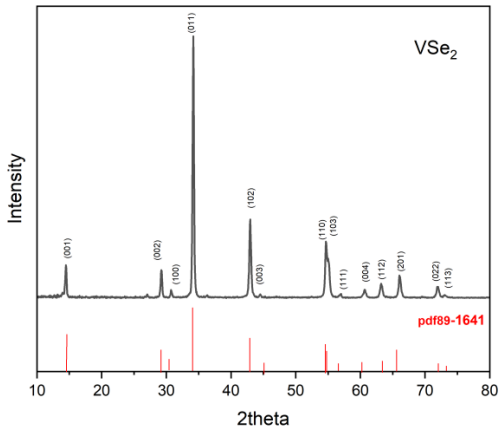
به منظور بررسی ساختار بلوری نمونه سنتز شده، از دستگاه پراش پرتو ایکس (XRD) با تابش Cu-Kα و طول موج ۱.۵۴۰۶ آنگستروم در محدوده زاویه‌ای ۱۰ تا ۸۰ درجه استفاده شد.

ریختارشناسی سطح و ویژگی‌های ریزساختاری نمونه توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (FESEM) مورد مطالعه قرار گرفت. همچنین ترکیب عنصری و توزیع عناصر

موجود در نمونه با استفاده از طیف‌سنجی پراکندگی انرژی پرتو ایکس (EDS) بررسی شد.

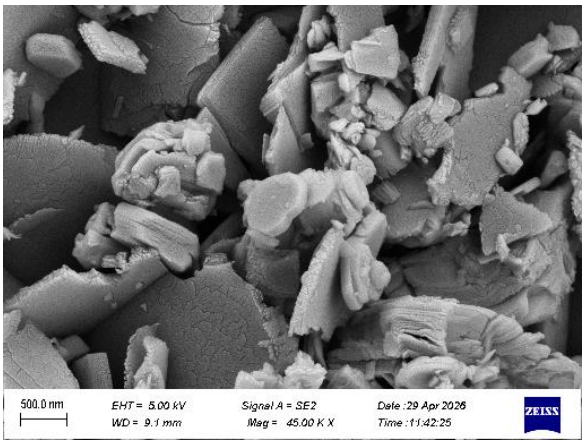
خواص اپتیکی نمونه با استفاده از طیف‌سنج فرابنفش–مرئی (UV-Vis) در محدوده طول موج ۲۰۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر اندازه‌گیری گردید. طیف‌های جذب و عبور نور ثبت شدند و برای تعیین گاف نواری اپتیکی از داده‌های جذب استفاده شد.

الگوی پراش پرتو ایکس نمونه سنتز شده در شکل ۱ نشان داده شده است. حضور قله‌های پراش مشخص و باریک بیانگر تشکیل موفق فاز بلوری دی‌سلنید وانادیوم و کیفیت مناسب ساختار بلوری نمونه است. موقعیت قله‌های مشاهده‌شده با داده‌های استاندارد VSe_2 مطابقت داشته و عدم مشاهده قله‌های اضافی بیانگر خلوص فازی مطلوب نمونه سنتز شده است. شدت نسبتاً زیاد قله‌ها نشان‌دهنده نظم بلوری مناسب و رشد موفق ساختار لایه‌ای ماده می‌باشد[۷]. اندازه متوسط بلورک‌ها با استفاده از رابطه شرر محاسبه شد که مقدار آن حدود ۳۵/۶ نانومتر به دست آمد. این مقدار نشان می‌دهد که محصول سنتز شده در محدوده نانومتری قرار داشته و دارای بلورینگی مناسبی است

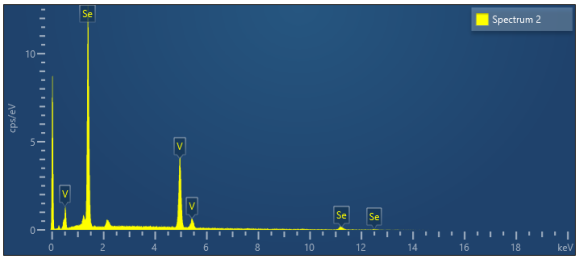


شکل ۱ طیف پراش پرتو ایکس VSe_2

توصیف ریختاری قرص‌های شش‌گوشی VSe_2 با تصویربرداری میکروسکپ الکترونی روبشی نشرمیدانی انجام شد. تصویربرداری در حالت اسکن سطح انجام شد، همان‌طور که در شکل ۲ نشان داده شده است. به وضوح دیده می‌شود که VSe_2 دارای ساختار لایه ای و ورقه‌ای است که یکی از ویژگی‌های رایج دی‌کالکوژنیدهای فلزات واسطه محسوب می‌شود. شکل ۳ آنالیز طیف‌سنجی پراکندگی انرژی پرتو ایکس (EDS) حضور عناصر وانادیوم و سلنیوم و نسبت مناسب آن‌ها را تأیید کرد.



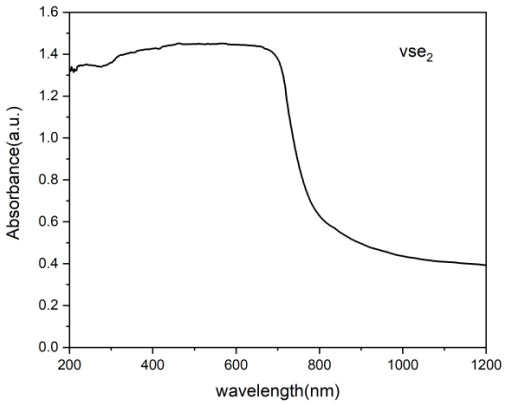
شکل۲ تصاویر Fesem از نمونه VSe_2



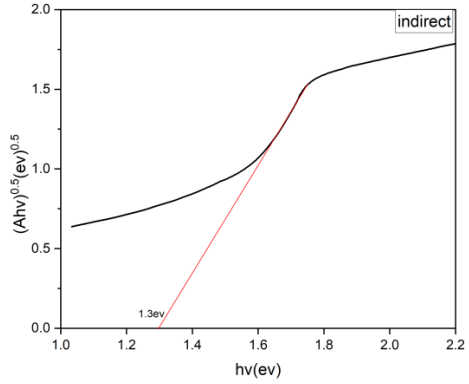
شکل ۳ تحلیل ترکیب عنصری (EDS)

برای بررسی خواص اپتیکی، طیف جذب در محدوده فرابنفش–مرئی ثبت شد. نتایج نشان داد که نمونه سنتز شده دارای جذب قابل توجهی در ناحیه مرئی است. گاف نواری اپتیکی نمونه با استفاده از نمودار تاوک برای هر دوگذار غیرمستقیم ومستقیم محاسبه شد و مقدار آن برای گاف نواری غیرمستقیم VSe_2 ۱/۳الکترون‌ولت و برای گذار مستقیم ۱/۶ الکترون ولت به دست آمد که با توجه به کوچکتر بودن گاف نواری غیرمستقیم و همخوانی بهتر با مقادیر گزارش شده گاف نواری نمونه ۱/۳ الکترون ولت گزارش می شود[۸]. این مقدار نشان می‌دهد که

VSe_2 سنتز شده دارای رفتار نیمه‌رسانایی مناسب بوده و توانایی جذب فوتون‌های ناحیه مرئی را داراست. .



شکل۴ طیف جذب نوری نمونه VSe_2



شکل ۵ نمودار گاف نواری VSe_2

نتیجه گیری

در این پژوهش، نانوساختارهای دی‌سلنید وانادیوم به روش گرما–آبی سنتز شدند. نتایج XRD تشکیل فاز بلوری VSe_2 را با خلوص مناسب تأیید کرد و اندازه متوسط بلورک‌ها با استفاده از رابطه شرر حدود ۳۵/۶ نانومتر به دست آمد. تصاویر FESEM ریختار لایه‌ای نمونه را نشان داد و آنالیز EDS حضور عناصر وانادیوم و سلنیوم را تأیید نمود. همچنین بررسی‌های خواص نوری نشان داد که نمونه دارای جذب مناسب در ناحیه مرئی بوده و گاف نواری اپتیکی آن حدود ۱/۳ الکترون‌ولت برای گذارغیرمستقیم محاسبه شد. نتایج نشان می دهد که روش گرما-آبی روش مناسب و کم هزینه برای سنتز نانوساختارهای VSe_2 با خواص ساختاری و نوری مطلوب است. با توجه به گاف نواری مناسب، ساختار لایه ای و کیفیت بلوری مطلوب، این نانوساختارها پتانسیل استفاده در حسگرهای گازی و نوری، آشکارسازهای نوری، فوتوکاتالیست ها و سایر ادوات اپتوالکترونیکی را دارند. پیشنهاد می شود در پژوهش آینده، اثر دوپینگ عناصر مختلف و همچنین تغییر شرایط سنتز بر خواص ساختاری و نوری و الکترونیکی این نانوساختارها بررسی شود.

مرجع‌ها

[1]. Deng, S., A.V. Sumant, and V. Berry, *Strain engineering in two-dimensional nanomaterials beyond graphene.* Nano Today, 2018. **22**: p. 14-35.
[2]. Jin, H., et al., *Emerging two-dimensional nanomaterials for electrocatalysis.* Chemical reviews, 2018. **118**(13): p. 6337-6408.
[3]. Mei, L., et al., *Two-dimensional nanomaterials beyond graphene for antibacterial applications: current progress and future perspectives.* Theranostics, 2020. **10**(2): p. 757.
[4]. Zhang, H., *Ultrathin two-dimensional nanomaterials.* ACS nano, 2015. **9**(10): p. 9451-9469.
[5]. Samal, R., P.V. Shinde, and C.S. Rout, *2D Vanadium diselenide supported on reduced graphene oxide for water electrolysis: a comprehensive study in alkaline media.* Emergent Materials, 2021. **4**(4): p. 1047-1053.
[6]. Liu, S., et al., *2D vanadium diselenide as a high performance catalyst.* Materials Science and Engineering: B, 2020. **260**: p. 114619.
[7]. Xu, K., et al., *Ultrathin nanosheets of vanadium diselenide: a metallic two-dimensional material with ferromagnetic charge-density-wave behavior.* Angewandte Chemie, 2013. **125**(40).
[8]. Parida A, Devarajan A, Naik R. High-performance, fast-response photodetectors based on hydrothermally synthesized V 1− x Mo x Se 2 nanosheets. Dalton Transactions. 2025;54(3):1111-26.

تاثیر افزودنی Sm_2O_3 و $LiNbO_3$ بر مشخصه های دی‌الکتریکی و پیزوالکتریکی سرامیک فروالکتریک PMN-PZT

روح‌الامین ، فاطمه[1*] ؛ جعفری فشارکی، مرجانه[2]؛ احمدوند، حسین[1]؛ یزدان مهر، محسن[3]

[1] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

[2] دانشکده فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران

[3] مجتمع دانشگاهی علوم کاربردی، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، اصفهان

چکیده

در این پژوهش، تاثیر افزودن Sm_2O_3 و $LiNbO_3$ بر خواص ساختاری، دی‌الکتریکی و پیزوالکتریکی سرامیک‌های PMN-PZT تهیه‌شده به روش حالت جامد مورد بررسی قرار گرفت. نتایج پراش پرتو ایکس (XRD) تشکیل ساختار پروسکایت خالص بدون حضور فازهای ثانویه را تایید کرد و تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل-میدانی (FE-SEM) دلالت بر ساختاری متراکم همراه با رشد مناسب دانه‌ها داشت. بررسی خواص الکتریکی نشان داد، افزودن Sm_2O_3 با ایجاد ناهمگنی ساختاری-قطبی و تسهیل حرکت دیواره‌ی حوزه‌ها، موجب افزایش چشمگیر ضریب پیزوالکتریک (d_{33}) شده است. به موازات آن استفاده از $LiNbO_3$ به عنوان کمک‌پخت و اصلاح‌کننده خواص الکتریکی، موجب بهبود پاسخ دی‌الکتریک و پیزوالکتریک در نمونه‌ها شده است. در نهایت، مقدار d_{33} از ۱۴۵ pC/N در نمونه خالص به ۴۸۰ pC/N در نمونه آلایش شده با Sm_2O_3 و ۶۰۰ pC/N در نمونه حاوی Sm_2O_3 و $LiNbO_3$ افزایش یافته است. همچنین، افزودن هم زمان Sm_2O_3 و $LiNbO_3$ راهکاری مؤثر برای دستیابی به سرامیک‌های PMN-PZT با پاسخ پیزوالکتریک بالا است.

واژه های کلیدی *Sm_2O_3، $LiNbO_3$، پیزوالکتریک، فروالکتریک، PMN-PZT.*

Effect of Sm_2O_3 and $LiNbO_3$ Additives on the Dielectrical and Piezoelectric Properties of PMN-PZT Ferroelectric Ceramic

Rouholamin, Fatemeh[1*]; Jafari Fesharaki, Marjaneh[2]; Ahmadvand, Hossein[1]; Yazdanmehr, Mohsen[3]

[1] Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan
[2] Department of Physics, Payame Noor University, Tehran
[3] Faculty of Applied Sciences, Malek Ashtar University of Technology, Isfahan

Abstract

In this study, the effects of adding Sm_2O_3 and $LiNbO_3$ on the structural, dielectric, and piezoelectric properties of PMN-PZT ceramics prepared via a solid-state method were investigated. X-ray diffraction (XRD) results confirmed the formation of a pure perovskite structure without any secondary phases, and field-emission scanning electron microscopy (FE-SEM) images indicated a dense microstructure with proper grain growth. Electrical characterization showed that the addition of Sm_2O_3, by creating structural–polar heterogeneity and facilitating domain wall motion, significantly increased the piezoelectric coefficient (d_{33}). In parallel, the use of $LiNbO_3$ as a sintering aid and electrical property modifier, improved the dielectric and piezoelectric response of the samples. Ultimately, the d_{33} value increased from 145 pC/N for the pure sample to 480 pC/N for the Sm_2O_3-doped sample and to 600 pC/N for the sample containing both Sm_2O_3 and $LiNbO_3$. Furthermore, the simultaneous addition of Sm_2O_3 and $LiNbO_3$ is an effective strategy for achieving PMN-PZT ceramics with a high piezoelectric response.

***Keywords**: Sm_2O_3, $LiNbO_3$, Piezoelectric, Ferroelectric, PMN-PZT.*

PACS No. (70,77)

مقدمه

مواد فروالکتریک نقش مهمی در بسیاری از دستگاه‌های تبدیل الکترومکانیکی از جمله محرک‌ها، حسگرها و مبدل‌ها ایفا می‌کنند[۱]. مواد پیزوالکتریک می‌توانند با اعمال نیروی مکانیکی، بارهای الکتریکی تولید کنند، یا زمانی که در معرض میدان الکتریکی قرار می‌گیرند، کرنش مکانیکی از خود نشان دهند که برای کاربردهای متعددی مانند تصویربرداری فراصوت پزشکی، آکوستیک زیر آب و محرک‌ها و غیره استفاده می‌شوند [۲]. فروالکتریک‌های واهلشی[1] پایه‌ی سرب با فرمول کلی $Pb(B'B'')O_3$ به دلیل وجود مرز فاز مورفوتروپیک[2] و ناهمگنی ساختاری در مقیاس نانو، خواص پیزوالکتریکی بالایی از خود نشان می‌دهند؛ به‌طوری که سیستم PMN-PT اصلاح شده با Sm با d_{33} تا ۱۵۰۰ pC/N، به‌عنوان یکی از برترین مواد پیزوالکتریک شناخته می‌شود. با این حال، دمای کوری پایین این سیستم کاربرد آن را در دماهای بالا محدود می‌کند. افزودن $PbZrO_3$ به‌عنوان عضو انتهایی با دمای کوری بالا به سیستم PMN-PT، راه‌حلی مؤثر برای بهبود پایداری حرارتی با حفظ خواص پیزوالکتریک مطلوب است [۱].

در طی دهه‌های اخیر روش‌های مختلفی چون آلایش عنصری، تغییر استوکیومتری و بهینه‌سازی قطبیدگی برای افزایش ضریب بار پیزوالکتریک بررسی شده‌اند که در این میان، طراحی یک مرز فاز مورفوتروپیک از طریق تغییر استوکیومتری، روشی مؤثر و کارامد است [۳]. با این حال امروزه بهبود خواص پیزوالکتریک صرفاً با طراحی اجزای MPB به بن‌بست رسیده است. بر اساس تحقیقات انجام شده بر روی فروالکتریک‌های واهلشی، مشخص شده است که ناهمگنی ساختاری موضعی می‌تواند تأثیر زیادی بر ضریب پیزوالکتریک داشته باشد. اخیراً، محققان دریافته‌اند که آلایش برخی عناصر خاکی کمیاب خاص مانند Sm, Eu, Gd می‌تواند با ایجاد ناهمگنی‌های موضعی، خواص پیزوالکتریک ترکیبات پایه PZT را بهبود بخشد [۲]. در سال ۲۰۲۰ لی و همکارانش، به بررسی تأثیر افزودن عناصر خاکی کمیاب به سرامیک PMN-PT پرداختند [۲].

در مقاله حاضر، از Sm به عنوان یک اصلاح کننده در ساخت سرامیک PMN-PZT استفاده شده است. از بین عناصر خاکی کمیاب، Sm کوچکترین یونی است که می‌تواند وارد جایگاه A شود بنابراین موثرترین عنصر خاکی کمیاب برای ایجاد فصل مشترک‌های ناهمگن است که در آنها قطبش و کرنش ناپیوسته‌اند [۲].

تف‌جوشی[3] مهم‌ترین مرحله در تولید سرامیک‌های پیزوالکتریک است. به منظور بهبود فرآیند تف‌جوشی عموماً از کربنات لیتیوم به عنوان کمک پخت استفاده می‌شود. کمک پخت‌ها در طول فرآیند پخت، فاز مایعی تشکیل می‌دهند که به دلیل سرعت نفوذ بالای خود، باعث تف‌جوشی سریع‌تر و در برخی موارد، تف‌جوشی در دماهای پایین‌تر می‌شود [٤]. در سال ۲۰۲٤ پنگ و همکارانش، از $LiNbO_3$ به عنوان یک افزودنی در سرامیک PNN-PZT و با دمای تف‌جوشی ۱۲۵۰ درجه سانتی‌گراد، استفاده کردند [٤, ٥]. در پژوهش حاضر تأثیر استفاده‌ی هم‌زمان Sm به عنوان یک افزودنی و $LiNbO_3$ به عنوان کمک پخت در سرامیک PMN-PZT بررسی می‌شود.

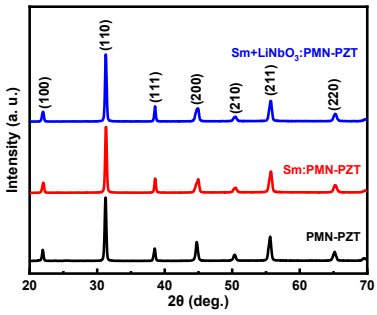
روش انجام آزمایش

سرامیک 40PMN-23.8PZ-36.2PT به ترتیب در سه مرحله: الف) بدون افزودنی (نمونه خالص)، ب) با آلایش Sm_2O_3 و ج) آلایش هم زمان $LiNbO_3$, Sm_2O_3 به روش حالت جامد دو مرحله‌ای از ترکیب پودرهای PbO (۹۹.۹٪)، Nb_2O_5 (۹۹.۹٪)، ZrO_2 (۹۹.۹۹٪)، TiO_2 (۹۹٪) و MgO (۹۹.۹٪) ساخته شد. پیش ماده‌ی ساخته شده $MgNb_2O_6$ به همراه سایر پودرهای اکسیدی طی دو مرحله به مدت ۱۲ تا ۲٤ ساعت تحت آسیاب کاری قرار گرفت و پس از آن در دمای ۸۰۰ تا ۹۰۰ °C گرمادهی شد. پودر بدست آمده در قالب‌هایی با قطر ۱٦ میلی‌متر تحت فشار ۱۰۰ MPa در پرس هیدرولیک قرص شد و در نهایت در دمای ۱۲۰۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۲ ساعت پخت شد. سرامیک‌ها پس از الکترودگذاری با چسب نقره، تحت میدان ۲۰ تا ۳۰Kv/cm به مدت ۱۰ دقیقه در دمای اتاق قطبیده شدند.

[1] Relaxor Ferroelectrics
[2] Morophotropic Phase Boundary (MPB)
[3] Sintering

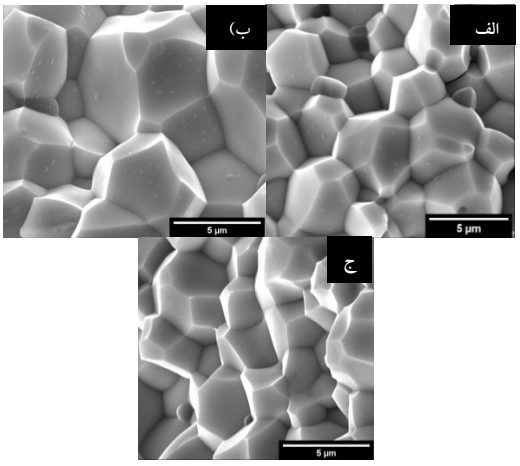
بحث و تحلیل نتایج

شکل ۱ الگوی XRD سرامیک PMN-PZT در غیاب افزودنی و در حضور افزودنی‌های Sm_2O_3 و $LiNb_2O_3$ نشان می‌دهد. همان طور که در شکل هم مشهود است هیچ گونه فاز ناخالصی اضافی در نمونه وجود ندارد و ساختار پروسکایت بدون هیچ فاز پایروکلر تشکیل شده است.



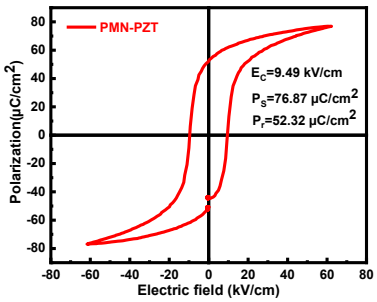
شکل ۱ : الگوی XRD سرامیک PMN-PZT در غیاب و در حضور افزودنی

همان طور که در شکل۲ مشهود است، نمونه با تراکم بالا (بدون حضور تخلخل و حفره) تهیه شده است. میانگین اندازه ذرات در نمونه بدون افزودنی ۵ میکرون است. با افزودن Sm میانگین اندازه ذرات تا ۷ میکرون افزایش می‌یابد و افزودن $LiNbO_3$ باعث کاهش اندازه ذرات تا ٦ میکرون می‌شود.



شکل ۲ : تصویر FE-SEM الف) سرامیک PMN-PZT ب) با افزودنی Sm ج) با افزودنی‌های Sm و $LiNbO_3$

شکل ۳ نمودار قطبش بر حسب میدان الکتریکی (P-E) نمونه PMN-PZT را نشان می‌دهد. با افزایش شدت میدان الکتریکی از صفر تا میدان ٦۰kV/cm، قطبش نمونه به تدریج افزایش یافته و به مقدار اشباع خود، ۷٦/۸۷ $\mu C/cm^2$ می‌رسد. این مقدار بالا مؤید چرخش قابل‌توجه دوقطبی‌ها و راستایابی حوزه‌های فروالکتریک تحت میدان خارجی است. پس از آن با کاهش میدان الکتریکی، قطبش به طور کامل از بین نمی‌رود. مقدار قطبش باقی‌مانده، ۵۲/۳۲ $\mu C/cm^2$ می باشد و نشان‌دهنده‌ی پایداری حوزه‌ها پس از حذف میدان خارجی است. میدان وادارندگی که نشان‌دهنده‌ی حداقل میدان لازم برای چرخش حوزه‌ها است برای نمونه‌ی PMN-PZT برابر ۹/٤۹ kV/cm به دست آمد.



شکل ۳ : منحنی قطبش الکتریکی بر حسب میدان (P-E)

شکل ٤، وابستگی ثابت دی الکتریک و اتلاف را برای سرامیک PMN-PZT بدون افزودنی و در حضور افزودنی های Sm_2O_3 و $LiNb_2O_3$ نشان می دهد. با افزودن یون‌های Sm^{3+} به سرامیک‌های PMN-PZT، از آنجایی که شعاع یونی Sm^{3+} کوچکتر از Pb^{2+} است، Sm^{3+} عمدتاً در جایگاه A جانشین Pb^{2+} می‌شود و به عنوان یک آلاینده بخشنده[1] عمل می‌کند. مطابق شکل٤، یکی از پیامدهای آلایش Sm، کاهش دمای کوری؛ T_C است که نتایج آن در جدول ۱ گردآوری شده است. در PMN-PZT، قطبش خودبه‌خودی تا حد زیادی از هیبریداسیون قوی پیوندهای Pb–O ناشی می‌شود. هنگامی که Sm^{3+} جایگزین Pb^{2+} می‌شود، تعداد یون‌های سرب فعال در ایجاد قطبش کاهش یافته و در نتیجه هیبریداسیون Pb–O ضعیف می‌شود که نتیجه آن کاهش قطبش خودبه‌خودی و در نهایت کاهش دمای کوری است. اگرچه آلایش Sm سبب کاهش نسبی T_C و تا حدی کاهش پایداری فروالکتریک می‌شود، اما با افزایش ناهمگنی ساختاری، کاهش جای‌خالی اکسیژن و تسهیل حرکت دیواره‌ی حوزه‌ها، در نهایت

[1] Donor Dopant

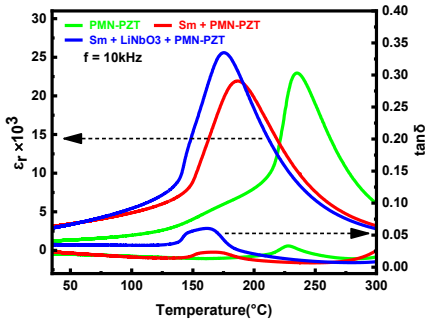
می‌تواند موجب افزایش قابل توجه در ضریب پیزوالکتریک d_{33} شود [۲, ۶].

با افزودن $LiNbO_3$ به سرامیک‌های PMN-PZT، یون Li^+ در طی فرآیند تف‌جوشی، فاز مایع ایجاد می‌کند و باعث افزایش ضریب پیزوالکتریک می‌شود. بخشی از یون‌های Li^+ در جایگاه A جانشین Pb^{2+} و یون‌های Nb^{5+} در جایگاه B جانشین Ti^{4+} یا Zr^{4+} می‌شوند. در نهایت دوقطبی‌های نقص[1] ایجاد شده تحت میدان الکتریکی به آسانی در راستای قطبش فروالکتریک جهت‌گیری می‌شوند و موجب تسهیل فرایند قطبیدگی، افزایش تحرک حوزه‌ها و در نتیجه بهبود ضریب پیزوالکتریک می‌شوند. دوقطبی‌های نقص ساختارهایی هستند که از ترکیب دو نقص نقطه‌ای با بارهای مخالف در شبکه‌ی بلوری تشکیل می‌شوند. در سیستم حاضر، جانشینی Li^+ در جایگاه A و Nb^{5+} در جایگاه B به‌ترتیب نقص‌های با بار منفی (Li'_{Pb}) و مثبت $(Nb^{\bullet}_{Zr/Ti})$ ایجاد می‌کنند که با جفت‌شدن با یکدیگر این دوقطبی‌ها را می‌سازند. همچنین حضور Nb به عنوان یک آلاینده نرم[2] سبب افزایش پاسخ دی‌الکتریک می‌شود. از این رو، در مقادیر بهینه $LiNbO_3$ معمولاً افزایش ثابت دی‌الکتریک و بهبود قابل توجه d_{33} مشاهده می‌شود. تأثیر $LiNbO_3$ بر دمای کوری، معمولاً بسیار کمتر از دوپنت‌هایی مانند Sm است، زیرا $LiNbO_3$ مستقیماً هیبریداسیون Pb–O و نظم فروالکتریک را تخریب نمی‌کند. در عوض، نقش اصلی آن تغییر ساختار عیوب، افزایش قطبیدگی و بهبود پاسخ حوزه‌ها است. بنابراین بهبود خواص در نمونه‌های حاوی $LiNbO_3$ عمدتاً ناشی از افزایش تحرک حوزه‌ها، افزایش گذردهی دی‌الکتریک و تشکیل دوقطبی‌های نقص است [۴].

جدول ۱ : مقایسه خواص دی‌الکتریکی و پیزوالکتریکی

نمونه	d_{33} (pC/N)	ε_r	T_C (°C)
PMN-PZT	۱۴۵	۲۲۹۶۵	۲۳۵
Sm PMN-PZT	۴۸۰	۲۱۹۴۰	۱۸۶
Sm , LN PMN-PZT	۶۰۰	۲۵۵۹۰	۱۷۵

[1] Defect Dipoles
[2] Soft Dopant



شکل ٤ : وابستگی ثابت دی‌الکتریک و اتلاف نسبت به دما

نتیجه گیری

در این پژوهش اثر افزودن Sm_2O_3 و $LiNbO_3$ بر خواص سرامیک‌های PMN-PZT بررسی شد. نتایج نشان داد که تمامی نمونه‌ها دارای ساختار پروسکایت خالص بوده و آلایش Sm با جانشینی در جایگاه A موجب افزایش ناهمگنی ساختاری–قطبی، تسهیل حرکت دیواره‌ی حوزه‌ها و در نتیجه افزایش چشمگیر ضریب پیزوالکتریک و افت دمای کوری گردید. افزودن $LiNbO_3$ نیز از طریق ایجاد دوقطبی‌های نقص، افزایش قطبیدگی و کاهش موانع حرکت دیواره‌ی حوزه‌ها، موجب افزایش ثابت دی‌الکتریک و ضریب پیزوالکتریک شد؛ هم‌چنین با ایجاد فاز مایع در طی فرایند تف‌جوشی، دمای تف‌جوشی را تا ۹۷۰ درجه سانتی‌گراد کاهش داد. در میان نمونه‌های مورد بررسی، نمونه حاوی Sm_2O_3 و $LiNbO_3$ بهترین عملکرد را با d_{33} = ۶۰۰ pC/N ، ε_r = ۲۵۵۹۰ و دمای کوری ۱۷۵ °C نشان داد.

مرجع‌ها

۱. Wang, P., et al., *"Modified Pb (Mg1/3Nb2/3) O3-PbZrO3–PbTiO3 ceramics with high piezoelectricity and temperature stability"*. *Journal of the American Ceramic Society*, 2021. **104**(10): p. 5127-5137.
۲. Li, C., et al., *"Atomic-scale origin of ultrahigh piezoelectricity in samarium-doped PMN-PT ceramics"*. *Physical Review B*, 2020. **101**(14): p. 140102.
۳. Fang, Z., et al., *"Enhanced piezoelectric properties of Sm3+-modified PMN-PT ceramics and their application in energy harvesting"*. *Ceramics International*, 202 :(۶)۴۸ .۲p. 7550-7556.
۴. Peng, W., et al., *"Ultrahigh piezoelectricity of PNN–PZT ceramics via constructing defect dipoles"*. *Ceramics International*, 2024. **50**(4): p. 6598-6605.
۵. Peng, W., et al., *"Enhanced piezoelectric properties and thermal stability of LiNbO3-modified PNN–PZT ceramics"*. *Journal of Materiomics*, 2024. **10**(5): p. 995-1003.
۶. Yang, J., et al., *"The evidence of samarium substitution defect contributing to local structural-polar heterogeneity and Tc in Sm-doped 0.68 PMN-0.32 PT ceramics compensated by B-site vacancies"*. *Applied Physics A*, 2025. **131**(6): p. 496.

بررسی تاثیر ضخامت لایه فعال تنگستن دی‌سولفید بر عملکرد آشکارسازی نوری آن

یزدانی، فاطمه[۱]؛ ستایش‌مهر، محبوبه[۱]؛ خادمی، علی[۱]؛ مشفق، علیرضا[۱و۲]

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

[۲] مرکز علوم و فناوری نانو، پژوهشکده علوم و فناوری‌های همگرا دانشگاه صنعتی شریف، خیابان آزادی، تهران

چکیده

با توجه به نقش تعیین‌کننده ضخامت لایه فعال در عملکرد آشکارسازهای نوری و اهمیت آشکارشوندگی ویژه (D) به‌عنوان یکی از پارامترهای اصلی این ادوات، در این پژوهش وابستگی D* به ضخامت لایه WS_2 به‌صورت نظام‌مند و با استفاده از کانتراست نوری به‌عنوان شاخصی برای برآورد ضخامت لایه بررسی شد. به همین منظور، ابتدا لایه‌های نازک WS_2 به روش لایه‌برداری مکانیکی با کانتراست‌های ۲۸٪، ۵۵٪ و ۸۳٪ تهیه و مقدار D* آنها تحت تابش انواع LED ها با طول موج‌های مختلف در چگالی توان یکسان اندازه‌گیری گردید. بر اساس تحلیل نتایج به‌دست آمده، مقدار کمیت D* با افزایش کانتراست از ۲۸٪ به ۵۵٪ در طول موج ۷۵۰ نانومتر، حدود ۳/۵ برابر افزایش پیدا کرد و به بیشینه مقدار $1/6\times10^{11}$ Jones رسید. اما این روند با افزایش بیشتر کانتراست به‌شدت افت کرده و مقدار $5/5\times10^{9}$ Jones برای نمونه با کانتراست ۸۳٪ در همان شرایط به دست آمد. همچنین توان معادل نویز (NEP) برای نمونه با کانتراست ۵۵٪ برابر $1/8\times10^{-14}$ وات بر جذر هرتز محاسبه شد که برای نمونه با کانتراست ۸۳٪ به $7/5\times10^{-12}$ وات بر جذر هرتز افزایش یافت. این نتایج وجود یک کانتراست بهینه در حدود ۵۵٪ را برای دستیابی به عملکرد مناسب آشکارسازی در WS_2 نشان می‌دهد.*

واژه های کلیدی: *تنگستن دی‌سولفید، مواد دوبعدی، آشکارساز نوری، آشکارشوندگی ویژه، لایه‌برداری مکانیکی، کانتراست نوری.*

Effect of WS_2 Active Layer Thickness on its Photodetection Performance

Yazdani, Fateme[1]; Setayeshmehr, Mahboubeh[1]; Khademi, Ali[1]; Moshfegh, Alireza[1,2]

[1] *Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran, 11155-9161, Iran*

[2] *Nanoscience and Nanotechnology Center, Institute for Convergence Science & Technology, Sharif University of Technology, Tehran 14588-89694, Iran*

Abstract

Considering the decisive role of active-layer thickness in the performance of photodetectors and the importance of specific detectivity (D) as one of the key performance parameters of these devices, the dependence of D* on the thickness of WS_2 layers was systematically investigated in this study using optical contrast as an indicator for estimating layer thickness. To this end, thin WS_2 flakes were first prepared by mechanical exfoliation with optical contrasts of 28%, 55%, and 83%, and their D* values were measured under illumination from LEDs with different wavelengths at the same power density. Based on the analysis of the obtained results, D* increased by approximately a factor of 3.5 as the contrast increased from 28% to 55% at a wavelength of 750 nm, reaching a maximum value of 1.6×10^{11} Jones. However, with a further increase in contrast, this value decreased sharply, reaching 5.5×10^{9} Jones for the sample with 83% contrast under the same conditions. In addition, the noise-equivalent power (NEP) for the sample with 55% contrast was calculated to be 1.8×10^{-14} $W\,Hz^{-1/2}$, while it increased to 7.5×10^{-12} $W\,Hz^{-1/2}$ for the sample with 83% contrast. These results indicate the existence of an optimum contrast of around 55% for achieving favorable photodetection performance in WS_2 photodetectors.*

***Keywords**: Tungsten disulfide (WS_2), Two-dimensional materials, photodetector, Special Detectivity (D*), Mechanical exfoliation, Contrast.*

PACS No.73, 78

مقدمه

آشکارسازهای نوری از اجزای بنیادی بسیاری از فناوری‌های اپتوالکترونیکی، از جمله تصویربرداری حرارتی، ارتباطات نوری و سنجش از راه دور، به شمار می‌روند و نیاز به نسل جدیدی از آن‌ها با حساسیت بالا، پاسخ سریع و قابلیت کوچک‌سازی همچنان رو به افزایش است[1]. در این میان، مواد دوبعدی، به‌ویژه دیکالکوژنیدهای فلزات واسطه (TMDs)، به‌دلیل خواص منحصربه‌فردی همچون گاف انرژی مناسب، برهم‌کنش قوی نور–ماده و تحرک بالای حامل‌ها، به‌عنوان گزینه‌هایی امیدبخش برای نسل آینده آشکارسازهای نوری مطرح شده‌اند[2].

در بین TMDهای گوناگون، دی‌سولفید تنگستن (WS_2) با گاف نواری تنظیم‌پذیر، ضریب جذب بالا و پایداری شیمیایی مناسب، توجه زیادی را به خود جلب کرده است[3]. گزارش‌های متعدد نشان داده‌اند که آشکارسازهای نوری مبتنی بر WS_2 دارای آشکارشوندگی ویژه (D^*) در بازه 10^{8} تا 10^{11} Jones هستند که قابلیت این ماده را برای رقابت با آشکارسازهای تجاری نشان می‌دهد[4].

کیفیت بلور و ضخامت لایه از عوامل کلیدی در عملکرد آشکارسازهای نوری مبتنی بر مواد دوبعدی هستند. در میان روش‌های مختلف تهیه لایه‌های نازک، لایه‌برداری مکانیکی همچنان گزینه‌ای مناسب برای دستیابی به خلوص بلوری بالا، چگالی عیوب پایین و نیز امکان تهیه نمونه‌ها در ضخامت‌های متفاوت به‌شمار می‌رود. همه این ویژگی‌ها در افزاره‌های الکترونیکی برای کاهش بازترکیب و نویز اهمیت زیادی دارد[5].

اکثر پژوهش‌های پیشین بر روی تک‌لایه‌ها، چندلایه‌ها یا ساختارهای هیبریدی بر پایه WS_2 متمرکز بوده‌اند؛ برای نمونه، در گزارش Ortiz و همکاران، یک فیلم WS_2 چندلایه با ضخامت حدود ۵ نانومتر و آشکارشوندگی ویژه $1/35\times10^{8}$ Jones در ۶۷۰ نانومتر و بایاس صفر گزارش شده است[4]. با این حال، بررسی مستقل تأثیر ضخامت لایه جاذب بر مشخصه‌های عملکردی آشکارساز، به‌ویژه D^* و نویز، کمتر مورد توجه قرار گرفته است. در این مقاله، آشکارسازهای نوری مبتنی بر WS_2 با ضخامت‌های مختلف لایه فعال ساخته شدند و پاسخ آن‌ها تحت تابش طول‌موج‌های گوناگون بررسی شد. هدف اصلی این پژوهش، بررسی وابستگی عملکرد آشکارسازی به ضخامت لایه و تعیین ناحیه بهینه آشکارشوندگی ویژه است.

روش تجربی

زیرلایه‌های $SiO_2(300nm)/Si(100)$ با ضخامت لایه اکسید ۳۰۰ نانومتر به‌روش استاندارد شسته و سپس به‌مدت ۱ دقیقه تحت پلاسمای ملایم اکسیژن قرار گرفتند. لایه‌های WS_2 به‌روش لایه‌برداری مکانیکی (Mechanical Exfoliation) از یک تک‌بلور توده (bulk) با استفاده از چسب آبی (blue tape) تهیه و روی زیرلایه آماده‌شده منتقل شدند. پس از انتقال، نمونه‌ها به‌مدت ۲ دقیقه در دمای ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد گرم شدند و سپس نوار چسب با دقت جدا شد. در ادامه، نواحی مناسب با میکروسکوپ نوری شناسایی و برای ساخت افزاره انتخاب شدند.

پس از تعیین موقعیت صفحات مورد نظر، فوتورزیست منفی به روش spin coating با سرعت زاویه‌ای ۲۰۰۰ دور در دقیقه (rpm) در مدت ۳۰ ثانیه روی نمونه نشانده شد. سپس با استفاده از ماسک طراحی‌شده، فرآیند لیتوگرافی نوری انجام و الگوی الکترودها منتقل شد. در مرحله بعد، ۱۰ نانومتر کروم به‌عنوان لایه چسبنده به روش تبخیر پرتو الکترونی و ۵۰ نانومتر طلا به روش تبخیر حرارتی روی سطح نمونه نشانده شد. در پایان، مرحله lift-off در استون انجام شد و اتصالات الکتریکی بین پدهای طلا و سیم‌های مسی با چسب نقره برقرار گردید.

اندازه‌گیری‌های اپتوالکتریکی در یک جعبه تاریک انجام شد. در نهایت، پاسخ نوری افزاره‌ها تحت تابش LED ها در طول موج‌های ۳۷۰، ۴۲۰، ۴۷۰، ۶۱۰، ۶۶۰ و ۷۵۰ نانومتر و با چگالی توان با مقدار تقریبی ۶۰ میکروووات بر واحد سطح اندازه‌گیری شد.

نتایج و بحث

برای بررسی اثر ضخامت لایه فعال بر عملکرد آشکارساز، ابتدا تصاویر میکروسکوپی نوری سه نمونه منتخب از WS_2 با ضخامت‌های مختلف بر اساس شدت بازتاب نوری و ظاهر اپتیکی که در شکل (۱) نشان داده شده است، ثبت شدند. کانتراست نوری (Contrast) لایه WS_2 و زیرلایه SiO_2/Si با استفاده از نرم‌افزار Fiji (ImageJ) و بر اساس رابطه (۱) محاسبه گردید:

$$\text{Contrast} = C = \frac{I_{flake}-I_{Sub}}{I_{Sub}} \times 100 \qquad (۱)$$

که در آن I_{Sub} شدت میانگین پیکسل‌های بستر اکسید سیلیکون ۳۰۰ نانومتر و I_{flake} شدت میانگین پیکسل‌های ناحیه مربوط به لایه WS_2 است.

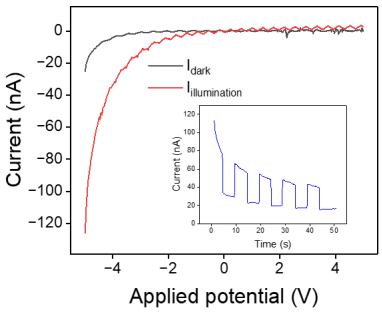
طبق رابطه فوق، هرچه لایه ضخیم‌تر باشد، نور کمتری از خود عبور می‌دهد (بازتاب نور بیشتری دارد) و در نتیجه I_{flake} در حالت بازتابی میکروسکوپ افزایش یافته و مقدار کانتراست بزرگ‌تر می‌شود. رابطه مستقیم کانتراست با ضخامت و تعداد لایه‌ها در دی‌سولفید تنگستن پیش‌تر به‌خوبی گزارش شده است[6]. بر همین اساس، سه نمونه با کانتراست‌های تقریبی ۲۸٪، ۵۵٪ و ۸۳٪ به‌عنوان

نمونه‌هایی با ضخامت کم، متوسط و زیاد برای دسته‌بندی نمونه‌ها گزینش شدند.



شکل۱: تصاویر میکروسکوپی صفحات تنگستن دی‌سولفید با کانتراست (Contrast) الف)۲۸ درصد (ضخامت کم) ب) ۵۵درصد (ضخامت متوسط) ج)۸۳ درصد (ضخامت زیاد)

به‌منظور محاسبه مشخصه‌های عملکردی آشکارساز نوری، ضروری است رفتار الکتریکی پایه سنسور نوری ارزیابی شود. شکل (۲) منحنی جریان–ولتاژ (I-V) نمونهٔ با کانتراست ۲۸٪ را در تاریکی و تحت تابش طول‌موج ۷۵۰ نانومتر نمایش می‌دهد. همچنین در داخل همین شکل، پاسخ نوری آشکارساز در طول زمان (کرونوآمپرومتری) در چرخه‌های روشن و خاموش ثبت شد تا پایداری و برگشت‌پذیری پاسخ نوری ارزیابی شود.



شکل۲: منحنی جریان–ولتاژ نمونه با کانتراست ۲۸٪ در تاریکی و تحت تابش LED با طول‌موج ۷۵۰ نانومتر و پاسخ نوری آشکارساز در طول زمان (کرونوآمپرومتری) برای چند چرخه تابش و تاریک همین نمونه

اکنون جریان نوری (I_{Ph}) با استفاده از داده‌های مربوط به اندازه‌گیری‌های جریان–ولتاژ شکل (۲) برای هر سه نمونه در شش طول‌موج اندازه‌گیری‌شده از رابطه (۲) به‌دست می‌آید:

$$I_{Ph}=I_{illumination}-I_{dark} \qquad (۲)$$

که در آن $I_{illumination}$ جریان تحت تابش و I_{dark} جریان در تاریکی است. پاسخ‌دهی نوری (Responsivity, R) که بیانگر قابلیت سنسور در تبدیل نور به جریان الکتریکی است، با رابطه (۳) تعریف می‌شود:

$$R = \frac{I_{Ph}}{P_{in}} \qquad (۳)$$

که P_{in} توان نوری فرودی بر مساحت فعال قطعه است. توان معادل نویز (NEP) نیز از نسبت ریشه میانگین مربع‌ها جریان تاریک نمونه‌ها به پاسخ‌دهی نوری آنها مطابق رابطه (٤) محاسبه گردید :

$$NEP = \frac{\sqrt{\overline{I_{dark}^2}}}{R} \qquad (٤)$$

و در نهایت آشکارشوندگی ویژه (Special Detectivity, D*) که معیار تشخیص سیگنال‌های ضعیف نوری است، با رابطه (۵) بیان می‌شود:

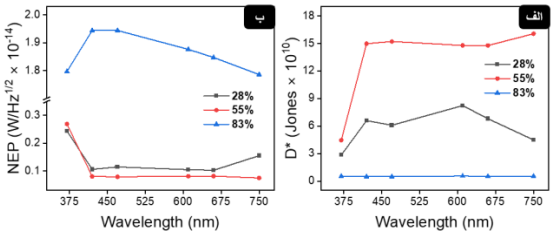
$$D^* = \frac{\sqrt{A_d \Delta f}}{NEP} \qquad (۵)$$

که در آن A_d مساحت فعال قطعه که برای افزاره‌های ساخته شده برابر ۰/۰۱ میلی‌متر مربع می‌باشد و Δf فرکانس پهنای باند اندازه‌گیری است[7].

شکل (۳–الف) منحنی‌های D* بر حسب طول‌موج را برای سه نمونه با کانتراست‌های ۲۸٪، ۵۵٪ و ۸۳٪ مقایسه می‌کند. در همه طول‌موج‌ها، D* با افزایش کانتراست از ۲۸٪ (ضخامت کم) به ۵۵٪ (ضخامت متوسط) به‌طور محسوسی افزایش می‌یابد؛ به عنوان مثال، در طول‌موج ۷۵۰ نانومتر D* نمونه با کانتراست ۵۵٪ به $۱/۶\times۱۰^{۱۱}$ Jones می‌رسد که ۳/۵ برابر بزرگ‌تر از آشکارشوندگی ویژه نمونه با کانتراست ۲۸٪ است. این بهبود با افزایش جذب نور در لایه‌های ضخیم‌تر توجیه می‌شود. با این حال، با افزایش بیشتر کانتراست به ۸۳٪ (ضخامت بالا)، D* در همه طول‌موج‌ها به‌شدت افت می‌کند و به‌ازای طول موج ۷۵۰ نانومتر به مقدار $۵/۵\times۱۰^{۹}$ Jones می‌رسد که حتی از مقادیر نمونهٔ ۲۸٪ نیز پایین‌تر می‌آید. چنین روندی یک وابستگی غیریکنواخت به ضخامت را آشکار می‌سازد.

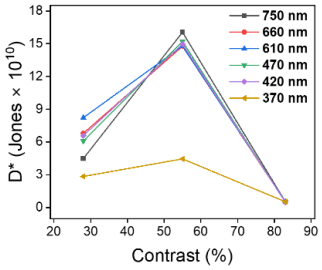
برای روشن‌شدن منشأ این رفتار، NEP هر سه افزاره در شکل (۳–ب) رسم شده است. NEP برای نمونه با کانتراست ۸۳٪ به‌مراتب بزرگ‌تر از دو نمونه دیگر است؛ مثلاً در ۷۵۰ نانومتر NEP به $۱/۸\times۱۰^{-۱۴}$ وات بر جذر هرتز ($W/Hz^{1/2}$) می‌رسد، در حالی‌که برای نمونه ۵۵٪ این مقدار برابر با $۷/۵\times۱۰^{-۱۲}$ است. از آنجا که NEP مطابق رابطه (٤) نسبت مستقیمی با جریان تاریک دارد، این افزایش شدید نشان می‌دهد که جریان تاریک و نویز قطعه در

ضخامت‌های بالا به‌طور قابل‌توجهی رشد کرده است. در لایه‌های ضخیم‌تر، کاهش مقاومت کانال و افزایش عیوب و مراکز بازترکیب می‌تواند موجب افزایش جریان تاریک شود[8]. در نتیجه، اگرچه جذب نور با افزایش ضخامت تا کنتراست ۸۳٪ همچنان افزایش می‌یابد، اما غلبه جریان تاریک بر بهره آشکارسازی نوری باعث افت شدید D* می‌شود.



شکل۳: الف) منحنی‌های آشکارشوندگی ویژه بر حسب طول‌موج برای سه نمونه با کنتراست‌های ۲۸٪، ۵۵٪ و ۸۳٪ ب) منحنی‌های توان معادل نویز بر حسب طول‌موج برای سه نمونه با کنتراست‌های ۲۸٪، ۵۵٪ و ۸۳٪

شکل (٤) نمودار D* را بر حسب کنتراست (و به‌طور معادل ضخامت) برای شش طول‌موج اندازه‌گیری شده نشان می‌دهد که مقادیر مربوطه در جدول (۱) آورده شده است. در تمام طول‌موج‌ها الگوی یکسانی مشاهده می شود: D* از کنتراست ۲۸٪ به ۵۵٪ افزایش یافته و سپس در ۸۳٪ کاهش می‌یابد. این روند تایید می‌کند که اثر مخرب جریان تاریک در نمونه‌های ضخیم‌تر، مستقل از طول‌موج، بر مزیت جذب بیشتر غلبه دارد. بنابراین، در میان نمونه‌های بررسی شده، ضخامت متناظر با کنتراست حدود ۵۵٪ بهترین توازن میان جذب نور و نویز را فراهم می‌کند و بالاترین D* را ارائه می‌دهد. این یافته نشانگر وجود یک کنتراست بهینه در آشکارسازهای نوری WS_2 است که در آن عملکرد آشکارسازی بیشینه می‌شود.



شکل٤: منحنی‌های آشکارشوندگی ویژه بر حسب کنتراست (به‌طور معادل ضخامت) برای شش طول‌موج ۷۵۰و ٦٦٠و ٦١٠و ٤٧٠و ٤٢٠و ۳۷۰ نانومتر

جدول۱: مقادیر D* به ازای کنتراست‌های منتخب برای شش طول‌موج اندازه‌گیری‌شده

طول موج (نانومتر)	D* (Jones×10^{10}), C=28%	D* (Jones×10^{11}), C=55%	D* (Jones×10^{9}), C=83%
۷۵۰	۴٫۵	۱٫۶	۵٫۵
۶۶۰	۶٫۸	۱٫۵	۵٫۳
۶۱۰	۸٫۲	۱٫۵	۵٫۶
۴۷۰	۶٫۱	۱٫۵	۵٫۰
۴۲۰	۶٫۶	۱٫۵	۵٫۱
۳۷۰	۲٫۹	۰٫۵	۵٫۴

نتیجه گیری

در این پژوهش، آشکارسازهای نوری مبتنی بر WS_2 با ضخامت‌های مختلف ساخته و اثر ضخامت لایه فعال بر عملکرد اپتوالکتریکی آنها به‌ویژه D* بررسی شد. نتایج نشان داد که با افزایش ضخامت از حالت نازک به متوسط، آشکارشوندگی ویژه به دلیل افزایش جذب نور بهبود می‌یابد، اما با ضخیم‌تر شدن بیشتر لایه، افزایش جریان تاریک و نویز باعث افت شدید D* می‌شود. در میان نمونه‌های بررسی‌شده، لایه با کنتراست حدود ۵۵٪ بهترین توازن بین جذب نور و نویز را ارائه داد و بیشترین آشکارشوندگی ویژه را در تمام طول‌موج‌های اندازه‌گیری‌شده نشان داد. نتایج این پژوهش وجود یک ضخامت بهینه برای لایه جاذب آشکارسازهای نوری WS_2را تأیید کرد؛ امری که می‌تواند برای طراحی و بهینه‌سازی نسل بعدی آشکارسازهای نوری مبتنی بر مواد دوبعدی راهگشا باشد.

مرجع‌ها

[1] M. Malik, M. A. Iqbal, J. R. Choi, and P. V. Pham, “2D materials for efficient photodetection: overview, mechanisms, performance and UV-IR range applications,” *Front. Chem.*, vol. **10**, p. 905404, 2022.
[2] W. Ahmad, J. Wu, Q. Zhuang, A. Neogi, and Z. Wang, “Research process on photodetectors based on group-10 transition metal dichalcogenides,” *Small*, vol. **19**, no. 16, p. 2207641, 2023.
[3] C. Li, D. Sang, S. Ge, L. Zou, and Q. Wang, “Recent excellent optoelectronic applications based on two-dimensional WS2 nanomaterials: a review,” *Molecules*, vol. **29**, no. 14, p. 3341, 2024.
[4] W. Ortiz *et al.*, “Two-dimensional tungsten disulfide nanosheets and their application in self-powered photodetectors with ultra-high sensitivity and stability,” *Vacuum*, vol. **201**, p. 111092, 2022.
[5] M. Samadi, N. Sarikhani, M. Zirak, H. Zhang, H.-L. Zhang, and A. Z. Moshfegh, “Group 6 transition metal dichalcogenide nanomaterials: synthesis, applications and future perspectives,” *Nanoscale Horiz.*, vol. **3**, no. 2, pp. 90–204, 2018.
[6] H. Huang *et al.*, “2D-Layer-Dependent Behavior in Lateral Au/WS_2 /Graphene Photodiode Devices with Optical Modulation of Schottky Barriers,” *ACS Appl. Nano Mater.*, vol. **1**, no. 12, pp. 6874–6881, Dec. 2018, doi: 10.1021/acsanm.8b01695.
[7] J. Luo, G. S. Selopal, X. Tong, and Z. Wang, “Colloidal quantum dots and two-dimensional material heterostructures for photodetector applications,” *Electron*, vol. **2**, no. 2, p. e30, May 2024, doi: 10.1002/elt2.30.
[8] H. Tan, Y. Fan, Y. Zhou, Q. Chen, W. Xu, and J. H. Warner, “Ultrathin 2D photodetectors utilizing chemical vapor deposition grown WS2 with graphene electrodes,” *ACS Nano*, vol. **10**, no. 8, pp. 7866–7873, 2016.

آشکارساز نور خودتوان و سریع مبتنی بر $NiFe_2O_4/p\text{-}Si$

جنتی، سعید؛ کاملی، پرویز؛ کریمی، ارسلان؛ احمدوند، حسین

ایران، اصفهان ۸۳۱۱۱-۸۴۱۵۶، دانشگاه صنعتی اصفهان، دانشکده فیزیک

چکیده

در این پژوهش، آشکارساز نوری خودتوان مبتنی بر ساختار $NiFe_2O_4/p\text{-}Si$ ساخته و بررسی شد. لایه نازک $NiFe_2O_4$ به روش لایه‌نشانی لیزر پالسی بر روی زیرلایه سیلیکون نوع p رشد داده شد و ویژگی‌های ساختاری و فوتوالکتریکی آن مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج XRD تشکیل فاز اسپینلی مکعبی و بلورینگی مناسب فیلم را تأیید کرد. آشکارساز ساخته‌شده در ناحیه مرئی تا فروسرخ نزدیک پاسخ نوری مطلوبی از خود نشان داد و در بایاس صفر قادر به عملکرد خودتوان بود. بیشینه پاسخ‌دهی و آشکارسازی ویژه دستگاه به‌ترتیب حدود ۵۰ mA/W و $3/5\times10^{11}$ Jones به‌دست آمد. همچنین زمان‌های افزایش و کاهش به ترتیب ۲۸۶ و ۲۶۳ میکروثانیه بدست امد که نشان‌دهنده پاسخ سریع دستگاه است. نتایج این پژوهش بیانگر آن است که ساختار $NiFe_2O_4/p\text{-}Si$ می‌تواند گزینه‌ای مناسب برای آشکارسازهای نوری پرسرعت و کم مصرف آینده باشد.

واژه های کلیدی: *آشکارسازهای نور، لایه نازک، فصل مشترک.*

Self-powered and fast photodetector based on $NiFe_2O_4/p\text{-}Si$

Jannati, Saeid; Kameli, Parviz; Karimi, Arsalan; Ahmadvand, Hossein

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran

Abstract

In this work, a self-powered photodetector based on the $NiFe_2O_4/p\text{-}Si$ heterostructure was fabricated and investigated. The $NiFe_2O_4$ thin film was grown on a p-type silicon substrate using the pulsed laser deposition (PLD) technique, and its structural and photoelectrical properties were systematically studied. XRD results confirmed the formation of a cubic spinel phase with good crystallinity. The fabricated photodetector exhibited an appropriate photoresponse in the visible to near-infrared region and was capable of operating in self-powered mode at zero bias voltage. The maximum responsivity and detectivity were approximately 50 mA/W and 3.5×10^{11} Jones, respectively. In addition, the rise and fall times were obtained as 286 and 263 μs, respectively, indicating the fast response behavior of the device. The obtained results demonstrate that the $NiFe_2O_4/p\text{-}Si$ structure can be considered a promising candidate for future high-speed and low-power photodetector applications.

***Keywords**: Photodetectors, Thin film, Interface.*

PACS No.89

مقدمه

آشکارسازهای نور به عنوان اجزای کلیدی سامانه‌های اپتوالکترونیکی، در کاربردهایی مانند تصویربرداری، ارتباطات نوری و حسگرها اهمیت زیادی دارند [1], [2]. در سال‌های اخیر، توسعه آشکارسازهایی با حساسیت بالا، پاسخ سریع و مصرف توان پایین مورد توجه قرار گرفته است [3]. در این میان، پیوندهای ناهمگون مبتنی بر اکسیدهای فلزی به دلیل هزینه کم، پایداری مناسب و سهولت ساخت، گزینه‌های مناسبی برای آشکارسازی نور محسوب می‌شوند [3]. فریت نیکل ($NiFe_2O_4$) که از ترکیب اکسید نیکل و اکسید آهن تشکیل شده است، به دلیل ساختار

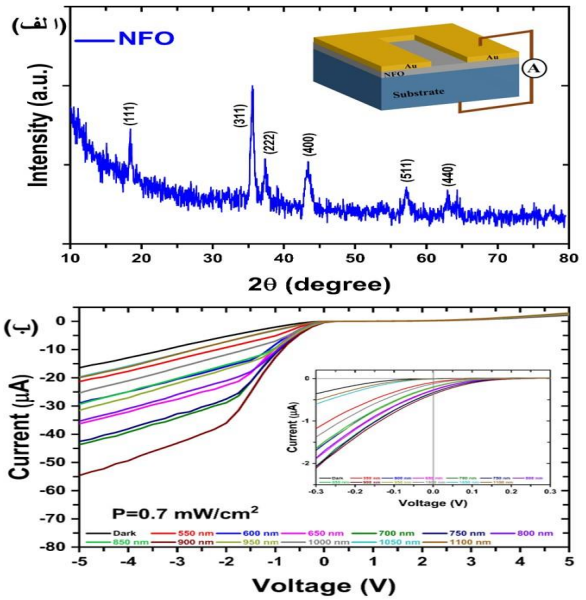
اسپینلی، پایداری شیمیایی و قابلیت جذب نور در ناحیه مرئی و فروسرخ نزدیک، ماده‌ای امیدوار کننده برای فوتودتکتورها به شمار می‌رود [4]. این ماده می‌تواند جدایش و انتقال حامل‌های بار را بهبود داده و در نتیجه عملکرد نوری دستگاه را ارتقا دهد. با وجود گزارش‌های متعدد درباره آشکارسازهای مبتنی بر فریت‌های اسپینلی، چالش‌هایی مانند زمان پاسخ نسبتاً بالا، جریان نشتی و نیاز به ولتاژ بایاس زیاد همچنان وجود دارد [6]–[4]. از این جهت، طراحی آشکارسازهای خودتوان که بر پایه میدان الکتریکی داخلی در فصل مشترک عمل می‌کنند، اهمیت ویژه‌ای یافته است زیرا در این ساختارها جداسازی حامل‌ها بدون نیاز به بایاس خارجی انجام می‌شود و توان مصرفی کاهش می‌یابد. در این پژوهش، آشکارساز نوری خودتوان مبتنی بر $NiFe_2O_4$/p-Si ساخته و عملکرد فوتوالکتریکی آن بررسی شد. نتایج نشان داد این ساختار به دلیل هزینه ساخت پایین، پایداری مناسب، پاسخ سریع و عملکرد مطلوب در ناحیه مرئی تا فروسرخ نزدیک، می‌تواند گزینه‌ای مناسب برای نسل آینده آشکارسازهای نوری پر سرعت و کم مصرف باشد .

تجربی

لایه نازک $NiFe_2O_4$ (NFO) با استفاده از روش لایه‌نشانی لیزر پالسی (PLD) بر روی زیرلایه سیلیکون نوع p و در دمای زیرلایه ۵۰۰ درجه سانتی‌گراد رسوب داده شد. پیش از فرآیند لایه‌نشانی، زیرلایه سیلیکونی به‌صورت متوالی با استون، اتانول و آب دی‌یونیزه شستشو داده شد تا هرگونه آلودگی سطحی حذف گردد. فرآیند رسوب‌دهی با استفاده از لیزر Nd:YAG-Ce، با فرکانس ۳ هرتز و تعداد ۱۰۰۰۰ پالس، در فشار اکسیژن زمینه ۲۰ میلی‌تور انجام شد.. پیش از آغاز لایه‌نشانی، محفظه تا فشار پایه حدود 10^{-6} تور تخلیه گردید سپس اکسیژن به داخل محفظه تزریق شد و فشار آن در طول فرآیند لایه‌نشانی به صورت ثابت در مقدار ۲۰ میلی‌تور حفظ شد. پس از پایان لایه‌نشانی، نمونه تحت همان فشار اکسیژن اعمال شده در حین رشد لایه، تا دمای اتاق سرد شد. سپس، یک لایه طلا به عنوان الکترود بر روی لایه NFO به روش کندوپاش لایه‌نشانی شد. ویژگی‌های جریان–ولتاژ (I-V) نمونه با استفاده از دستگاه منبع تغذیه Keithley 2400 اندازه‌گیری شد. عملکرد آشکارساز نور با استفاده از یک سیستم مشخصه‌یابی پاسخ نوری شامل لامپ زنون، تک فام ساز، چاپر الکترونیکی، منبع تغذیه Keithley 2400 و اسیلوسکوپ Tektronix TDS 2024C بررسی شد. الگو پراش پرتو ایکس (XRD) توسط دستگاه ASENWARE AW-DXM 300 ثبت شد.

نتایج و بحث

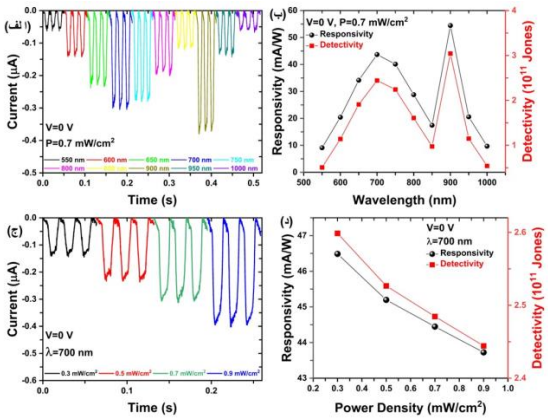
برای تأیید تشکیل فاز و بررسی ساختار بلوری لایه نازک NFO رشد یافته بر روی زیرلایه Si، اندازه‌گیری پراش پرتو ایکس با تابش مایل (GIXRD) انجام شد که نتایج آن در شکل ۱ (الف) نشان داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، نمونه از بلورینگی مطلوبی برخوردار است و قله‌های پراش مشاهده شده به فاز مکعبی اسپینلی فریت نیکل نسبت داده می‌شوند که تطابق مناسبی با گزارش‌های پیشین دارد [8] ,[7].



شکل ۱ : الف) الگوی پراش پرتو ایکس نمونه NFO (قسمت داخلی: طرحواره‌ای از نمونه NFO/Si و پیکربندی اندازه‌گیری‌های الکتریکی)، ب) مشخصات جریان–ولتاژ در تاریکی و تحت تابش نور با طول موج‌های مختلف (قسمت داخلی: منحنی‌های جریان–ولتاژ بزرگ نمایی شده).

قسمت داخلی شکل ۱ (الف) شماتیک ساختار نمونه NFO/Si و پیکربندی اندازه‌گیری الکتریکی را نشان می‌دهد. شکل ۱ (ب)

مشخصه‌های جریان–ولتاژ دستگاه را در تاریکی و تحت تابش نور با طول موج‌های مختلف در بازه ۵۵۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر و در چگالی توان نوری ثابت ۰/۷ mW/cm^2 نشان می‌دهد. در مقایسه با جریان تاریک، فوتوجریان تحت تابش نور به سرعت افزایش می‌یابد که بیانگر توانایی مناسب آشکارساز NFO/Si در آشکارسازی نور در این محدوده طیفی است. قسمت داخلی شکل ۱ (ب) منحنی‌های جریان–ولتاژ بزرگ نمایی شده را نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌شود، دستگاه رفتار یکسوسازی مشخصی همراه با ولتاژ مدار باز و جریان اتصال کوتاه قابل توجه از خود نشان می‌دهد که تشکیل پیوند ناهمگون در فصل مشترک NFO/Si را تأیید می‌کند. وجود فوتوجریان قابل اندازه‌گیری در بایاس خارجی صفر نشان می‌دهد که آشکارساز نوری NFO/Si قادر است در حالت خود توان و تحت تأثیر میدان الکتریکی داخلی فصل مشترک عمل کند. همچنین با افزایش بایاس معکوس، فوتوجریان افزایش می‌یابد که این موضوع به افزایش عرض ناحیه بار فضایی در بایاس معکوس نسبت داده می‌شود [6]. طول موج قطع دستگاه حدود ۱۱۰۰ نانومتر بدست آمد که متناظر با گاف انرژی سیلیکون است [9].



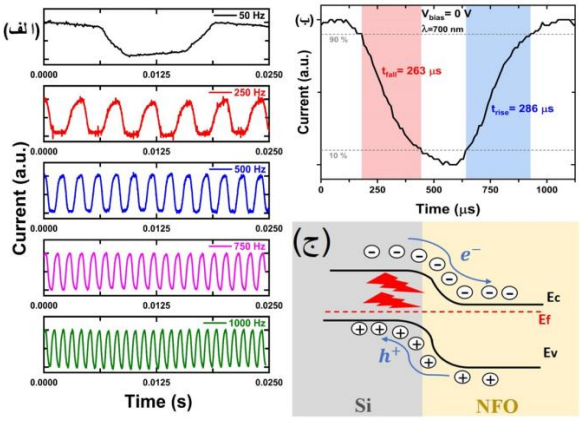
شکل۲ : الف) نمودار جریان–زمان تحت تابش طول موج‌های مختلف، (ب) پاسخ‌دهی و آشکارسازی نسبت به طول موج، (ج) نمودار جریان-زمان در چگالی‌های مختلف توان نور (د) پاسخ‌دهی و آشکارسازی نسبت به چگالی توان نور.

شکل۲ (الف) نمودار جریان–زمان آشکارساز NFO/Si را تحت تابش طول موج‌های مختلف نشان می‌دهد. این آشکارساز عملکرد سوئیچینگ روشن/خاموش پایدار و تکرارپذیری را در بازه طول موجی ۵۵۰ تا ۱۰۰۰ نانومتر از خود نشان می‌دهد. عملکرد آشکارساز با استفاده از پارامترهای پاسخ‌دهی (R) و آشکارسازی ویژه (D^*) مورد ارزیابی قرار گرفت که نتایج آن در شکل۲ (ب) ارائه شده است. این پارامترها از روابط زیر محاسبه می‌شوند:

$$R = \frac{I_P - I_D}{P \times S} \quad (۱)$$

$$D^* = \frac{R}{\sqrt{2eI_D/S}} \quad (۲)$$

که در آن I_p فوتوجریان، I_D جریان تاریک، S سطح مؤثر دستگاه، P توان نوری تابشی، e بار الکترون است [10]. نتایج شکل۲ (ب) نشان می‌دهد که پاسخ‌دهی و آشکارسازی ویژه دستگاه در بایاس صفر و در طول موج ۹۰۰ نانومتر، به‌ترتیب به حدود ۵۰ mA/W و Jones $۳/۵\times۱۰^{۱۱}$ می‌رسند. شکل۲ (ج) نمودار جریان-زمان دستگاه را در چگالی‌های مختلف توان نوری، در بایاس صفر و تحت تابش طول موج ۷۰۰ نانومتر نشان می‌دهد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، دستگاه عملکرد سوئیچینگ روشن/خاموش مناسبی از خود نشان می‌دهد. نتایج شکل۲ (د) بیانگر آن است که پاسخ‌دهی و آشکارسازی ویژه با افزایش چگالی توان نور کاهش می‌یابند.



شکل۳ : الف) پاسخ نوری آشکارساز در فرکانس‌های مختلف، ب) پاسخ زمانی همراه با زمان‌های افزایش و کاهش دستگاه، ج) طرحواره‌ای از سازوکار آشکارسازی نور.

شکل۳ (الف) پاسخ نوری آشکارساز را در فرکانس‌های مختلف، تحت چگالی توان نوری ۰/۷ mW/cm^2، در بایاس صفر و طول موج ۷۰۰ نانومتر نشان می‌دهد. شکل۳ (ب) پاسخ زمانی دستگاه را در بایاس صفر، تحت تابش طول موج ۷۰۰ نانومتر و شدت توان

ثابت mW/cm^2 ۰/۷ نشان می‌دهد. زمان‌های افزایش و کاهش دستگاه به ترتیب برابر با ۲۸۶ و ۲۶۳ میکروثانیه محاسبه شدند. مکانیزم دقیق پاسخ سریع در این فوتودتکتورها هنوز به‌طور کامل مشخص نشده است. با این حال، گمان می‌رود که تغییر ارتفاع سد شاتکی در هنگام روشن و خاموش شدن نور نقش مهمی در این رفتار داشته باشد [6]. پاسخ سریع، ظرفیت بالای ساختار NFO/Si را برای کاربرد در آشکارسازی نوری پر سرعت و سامانه‌های اپتوالکترونیکی فرکانس بالا نشان می‌دهد. برای ارزیابی جامع عملکرد فوتودیود NFO/Si شاخص‌های کلیدی شامل پاسخ‌دهی، آشکارسازی ویژه، زمان پاسخ و ولتاژ بایاس اعمالی با سایر آشکارسازهای مبتنی بر فریت‌ها مقایسه شد که نتایج آن در جدول۱ خلاصه شده است. دستگاه NFO/Si زمان پاسخ سریع، پاسخ‌دهی مناسب و آشکارسازی ویژه نسبتاً بالایی را نشان می‌دهد. علاوه بر این، قابلیت آشکارسازی نور از ناحیه مرئی تا فروسرخ نزدیک، این ساختار را برای کاربردهای مختلف مناسب می‌سازد. همچنین مواد اولیه استفاده شده غیر سمی، فراوان و کم هزینه هستند، از این جهت این دستگاه را می‌توان به سادگی و با هزینه پایین تولید کرد. در نهایت، سازوکار آشکارسازی نوری کارآمد و خودتوان در ساختار NFO/Si مورد بررسی قرار گرفت که طرحواره‌ای از آن در شکل۳ (ج) نشان داده شده است. به طور کلی، این نوع آشکارسازی به حامل‌های نوری تولید شده در ناحیه بار فضایی فصل مشترک NFO و Si مربوط می‌شود. اختلاف سطح فرمی میان NFO و Si منجر به تشکیل میدان الکتریکی داخلی در فصل مشترک می‌شود. در حضور این میدان داخلی، حامل‌های نوری تولید شده به طور مؤثر از یکدیگر جدا شده و بدون نیاز به اعمال بایاس خارجی، فرآیند آشکارسازی نوری در حالت خودتوان انجام می‌شود [9], [10].

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، آشکارساز نوری خودتوان مبتنی بر ساختار $NiFe_2O_4$/p-Si ساخته و بررسی شد. نتایج XRD تشکیل فاز اسپینلی مکعبی و بلورینگی مناسب لایه $NiFe_2O_4$ را تأیید کرد. دستگاه ساخته‌شده در ناحیه مرئی تا فروسرخ نزدیک پاسخ نوری مطلوبی نشان داد و در بایاس صفر عملکرد خودتوان داشت. بیشینه پاسخ‌دهی و آشکارسازی به‌ترتیب حدود ۵۰ mA/W و Jones $۳/۵\times۱۰^{۱۱}$ بدست آمد. همچنین زمان‌های افزایش و کاهش سریع در حد ۲۸۶ و ۲۶۳ میکروثانیه نشان‌دهنده عملکرد مناسب دستگاه برای کاربردهای پرسرعت است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که ساختار $NiFe_2O_4$/p-Si می‌تواند گزینه‌ای مناسب برای توسعه آشکارسازهای نوری کم مصرف و پرسرعت آینده باشد.

جدول۱ : مقایسه عملکرد آشکارساز NFO/Si با سایر آشکارسازها.

مرجع	زمان افزایش/کاهش (ms)	پاسخ دهی (mA/W)	طول موج (nm)	ولتاژ بایاس (ولت)	دستگاه
[6]	۱۰/۶–۹/۹	۴۵۰۰	۶۳۰	–۵	Co-$ZnFe_2O_4$
[4]	۱۸۵–۸۹	۱۲۳۵۰	۹۰۰	۰	$NiFe_2O_4$
[5]	۷/۸۵–۶/۹۰	۵۰۰	۶۳۰	–۲	$MnCuFe_2O_4$
این کار	۰/۲۸۶–۰/۲۶۳	۴۷	۷۰۰	۰	$NiFe_2O_4$

مرجع‌ها

[1] A. Rani, A. Verma, and B. C. Yadav, “Advancements in transition metal dichalcogenides (TMDCs) for self-powered photodetectors: challenges, properties, and functionalization strategies,” *Materials Advances*, vol. **5**, no. 9, pp. 3535–3562, 2024.

[2] U. Ahsan *et al.*, “Advances in visible and ultraviolet self-powered photodetectors: exploring 2D materials and Janus heterostructures,” *Nanoscale*, vol. **18**, no. 2, pp. 537–574, 2026.

[3] V. Goel, Y. Kumar, G. Rawat, and H. Kumar, “Self-powered photodetectors: a device engineering perspective,” *Nanoscale*, vol. **16**, no. 19, pp. 9235–9258, 2024.

[4] N. K. R. Nallabala *et al.*, “Self-powered and improved photoresponsive broadband photodetecting sensors using Au/NiFe2O4/p-Si heterojunction architecture,” *Materials Science in Semiconductor Processing*, vol. **156**, p. 107266, 2023.

[5] Y.-M. Lee *et al.*, “Manganese Copper Ferrite Thin Films for Visible--Near-Infrared Region Photodetector Applications,” *physica status solidi (RRL)--Rapid Research Letters*, vol. **16**, no. 7, p. 2200074, 2022.

[6] P.-H. Chung, C.-T. Kuo, T.-H. Wang, Y.-Y. Lu, C.-I. Liu, and T.-R. Yew, “A sensitive visible light photodetector using cobalt-doped zinc ferrite oxide thin films,” *ACS applied materials \& interfaces*, vol. **13**, no. 5, pp. 6411–6420, 2021.

[7] T.-A. Nguyen *et al.*, “Enhanced light-harvesting efficiency in Au metal--NiFe2O4 semiconductor hetero-nanostructures with implications for photoelectrochemical sensors towards the sensitive detection of paracetamol in human urine,” *RSC advances*, vol. **14**, no. 46, pp. 34471–34485, 2024.

[8] N. E. Naji, R. A. Ismail, and A. A. Aljubouri, “Optoelectronic characteristics of NiFe2O4 nanoparticles/porous silicon heterojunction fabricated by drop casting method,” *Optical and Quantum Electronics*, vol. **57**, no. 1, p. 48, 2024.

[9] S. Jiang *et al.*, “Solution-processed NiO/Si heterojunctions for efficient self-powered UV--Vis-NIR broadband photodetection,” *ACS Applied Electronic Materials*, vol. **6**, no. 4, pp. 2525–2533, 2024.

[10] S. Jannati, R. Sedeyan, A. Rafiei, and S. M. Mohseni, “Self-powered, fast and broadband p-Co3O4/n-WS2 photodetector enhanced by pyro-phototronic effect,” *Materials Science in Semiconductor Processing*, vol. **204**, p. 110276, 2026.

ساخت و بررسی حسگر هیدروژن بر پایه لایه نازک پالادیوم/اکسید قلع روی زیرلایه اسپان‌باند با استفاده از روش لایه‌نشانی پالسی لیزری

فرزین پور، سید محمد حسین[۱]؛ رنجبر، مهدی[۱]؛ شاه آبادی، شهره[۱]، کیانی، سمیه[۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، صندوق پستی ۸۴۱۵۶۸۳۱۱۱ ، اصفهان، ایران.

[۲] گروه آموزش فیزیک، دانشگاه فرهنگیان، صندوق پستی ۸۸۹-۱۴۶۶۵، تهران، ایران.

چکیده

در این پژوهش، ساخت یک حسگر انعطاف‌پذیر هیدروژن بر پایه لایه‌های نازک SnO_2/Pd بر روی زیرلایه پارچه‌ای اسپان‌باند مورد بررسی قرار گرفت. ابتدا لایه‌های نازک SnO_2 به روش لایه‌نشانی پالسی لیزری (PLD) بر روی زیرلایه رشد داده شدند. سپس نمونه‌ها در محلول کلرید پالادیوم غوطه‌ور شده و تحت تابش فرابنفش به مدت ۱۰ دقیقه قرار گرفتند تا نانوذرات پالادیوم بر سطح لایه تشکیل شوند. به منظور بررسی ویژگی‌های ساختاری و مورفولوژیکی نمونه‌ها از آزمون‌های پراش پرتو ایکس (XRD)، میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (FESEM) و آنالیز EDS استفاده شد. نتایج نشان داد که لایه SnO_2 با موفقیت بر روی الیاف اسپان‌باند رشد کرده و نانوذرات پالادیوم به طور یکنواخت بر سطح آن توزیع شده‌اند. همچنین الگوی XRD تشکیل ساختار بلوری SnO_2 و حضور فاز پالادیوم را تأیید کرد. این نتایج بیانگر قابلیت مناسب ساختار SnO_2/Pd برای کاربرد در حسگرهای انعطاف‌پذیر هیدروژن است.

واژه های کلیدی: *حسگر هیدروژن، پالادیوم، اکسید قلع، لایه‌نشانی پالسی لیزری، زیرلایه انعطاف‌پذیر، تابش فرابنفش.*

Fabrication and Characterization of a Flexible Pd/SnO_2 Hydrogen Sensor on a Spunbond Substrate Using Pulsed Laser Deposition

Farzin Poor, Seyed Mohammad Hosein[1]; Ranjbar, Mehdi[1]; Shahabadi, Shohreh[1]; Kiani, Somayeh[2]

[1] Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan, 8415683111, Iran.
[2] Department of Physics Education, Farhangian University, P.O. Box 14665889, Tehran, Iran.

Abstract

Hydrogen is considered one of the most promising clean energy carriers; however, its high flammability necessitates the development of reliable sensing systems for leakage detection. In this work, a flexible hydrogen sensor based on palladium-decorated tin oxide (Pd/SnO_2) thin films deposited on spunbond textile substrates was fabricated and investigated. SnO_2 thin films were first deposited onto flexible spunbond substrates using the Pulsed Laser Deposition (PLD) technique. Subsequently, the samples were immersed in a palladium chloride ($PdCl_2$) solution and exposed to ultraviolet (UV) irradiation for different durations ranging from 30 s to 10 min to promote the formation of palladium nanoparticles on the film surface. The structural and morphological characteristics of the prepared samples were examined using X-ray diffraction (XRD) and scanning electron microscopy (SEM). Hydrogen sensing performance was then evaluated and correlated with the UV irradiation time. The results revealed that UV exposure significantly influences the surface morphology, palladium nanoparticle formation, and consequently the sensing behavior of the fabricated devices. Enhanced sensing performance is attributed to the catalytic activity of palladium, which facilitates hydrogen dissociation and improves charge-transfer processes at the Pd/SnO_2 interface. The findings demonstrate that UV-assisted surface modification is an effective approach for improving the performance of flexible hydrogen sensors and provides a promising route toward the development of wearable and lightweight hydrogen monitoring devices.

***Keywords**: Hydrogen sensor, Palladium, Tin oxide, Pulsed laser deposition, Flexible substrate, UV irradiation.*
PACS No.

مقدمه

هیدروژن به عنوان یکی از مهم‌ترین حامل‌های انرژی پاک، نقش کلیدی در توسعه سامانه‌های انرژی پایدار و فناوری‌های کم‌کربن ایفا می‌کند. با وجود مزایای فراوان، این گاز به دلیل بی‌رنگ و بی‌بو بودن و همچنین گستره اشتعال‌پذیری بالا (۴–۷۵ درصد حجمی در هوا)، خطرات ایمنی قابل توجهی ایجاد می‌کند. از این رو، توسعه حسگرهای قابل اعتماد برای آشکارسازی سریع نشت هیدروژن به یکی از موضوعات مهم پژوهشی در سال‌های اخیر تبدیل شده است [۱].

در میان فناوری‌های مختلف آشکارسازی هیدروژن، حسگرهای مقاومتی مبتنی بر نیمه‌رساناهای اکسیدی به دلیل ساختار ساده، هزینه پایین، پایداری مناسب و قابلیت کوچک‌سازی مورد توجه گسترده قرار گرفته‌اند. اکسید قلع (SnO_2) یکی از مهم‌ترین نیمه‌رساناهای نوع n است که به دلیل پایداری شیمیایی بالا، سطح ویژه زیاد و خواص الکترونیکی مطلوب در حسگرهای گازی کاربرد گسترده‌ای دارد [۲].

با این حال، عملکرد حسگرهای مبتنی بر SnO_2 خالص معمولاً با محدودیت‌هایی نظیر دمای کاری نسبتاً بالا، گزینش‌پذیری محدود و پاسخ ضعیف در غلظت‌های کم هیدروژن مواجه است.

یکی از مؤثرترین راهکارهای بهبود عملکرد حسگرهای مبتنی بر SnO_2، استفاده از فلزات نجیب نظیر پالادیوم، پلاتین و طلا است. در میان این فلزات، پالادیوم به دلیل توانایی بالای جذب و تفکیک مولکول‌های هیدروژن از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. نانوذرات پالادیوم از طریق ایجاد اثر سرریز، افزایش تعداد مراکز فعال سطحی و تسهیل انتقال بار در فصل مشترک فلز ـ نیمه‌رسانا، موجب افزایش حساسیت و بهبود ویژگی‌های دینامیکی حسگر می‌شوند [۳].

همزمان با پیشرفت فناوری‌های پوشیدنی، توسعه حسگرهای انعطاف‌پذیر و سبک‌وزن نیز مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفته است. استفاده از زیرلایه‌های پارچه‌ای علاوه بر کاهش وزن و هزینه ساخت، امکان طراحی حسگرهایی با قابلیت خم‌شوندگی و سازگاری مکانیکی بالا را فراهم می‌کند. در این راستا، زیرلایه‌های اسپان‌باند به دلیل استحکام مناسب، انعطاف‌پذیری مطلوب و قیمت پایین، گزینه مناسبی برای ساخت حسگرهای پوشیدنی محسوب می‌شوند [۴].

از سوی دیگر، روش لایه‌نشانی پالسی لیزری (PLD) به دلیل قابلیت کنترل دقیق ضخامت لایه، حفظ ترکیب شیمیایی ماده هدف و امکان رشد لایه‌های یکنواخت بر روی زیرلایه‌های مختلف، یکی از روش‌های کارآمد برای ساخت لایه‌های نازک حسگر به شمار می‌رود. همچنین، استفاده از تابش فرابنفش (UV) برای احیای یون‌های پالادیوم و تشکیل نانوذرات فلزی بر سطح نیمه‌رسانا، روشی ساده و کم‌هزینه برای اصلاح سطح و افزایش عملکرد حسگری محسوب می‌شود [۵].

در این پژوهش، حسگر انعطاف‌پذیر هیدروژن مبتنی بر ساختار Pd/SnO_2 بر روی زیرلایه اسپان‌باند ساخته شد. لایه SnO_2 به روش لایه‌نشانی پالسی لیزری تهیه و سپس با استفاده از محلول $PdCl_2$ و تابش UV اصلاح سطح شد. نتایج FESEM، EDS و XRD تشکیل موفق ساختار Pd/SnO_2 را تأیید کردند. همچنین بررسی عملکرد حسگری نشان داد که حسگر بیشترین پاسخ را در دمای کاری ۱۰۰ °C از خود نشان می‌دهد. نتایج بیانگر قابلیت مناسب این ساختار برای کاربرد در حسگرهای انعطاف‌پذیر هیدروژن است.

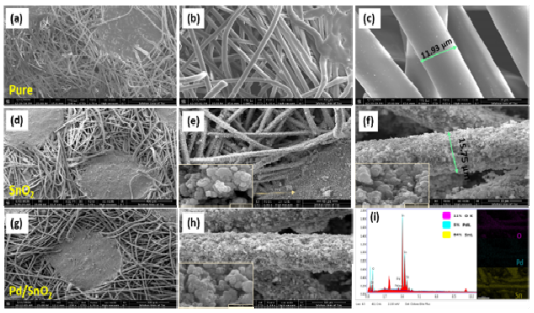
مواد و روش ها

ابتدا زیرلایه‌های اسپان‌باند پس از تمیزکاری آماده فرآیند لایه‌نشانی شدند. سپس لایه‌های نازک SnO_2 با استفاده از دستگاه لایه‌نشانی پالسی لیزری (PLD) بر روی زیرلایه‌ها رشد داده شدند. پارامترهای لایه‌نشانی شامل انرژی لیزر، تعداد پالس‌ها، فشار محفظه و فاصله تارگت تا زیرلایه مطابق شرایط بهینه دستگاه تنظیم شد. پس از لایه‌نشانی، نمونه‌ها در محلول کلرید پالادیوم ($PdCl_2$) غوطه‌ور شدند. در ادامه، به منظور احیای یون‌های پالادیوم و تشکیل نانوذرات پالادیوم بر سطح لایه SnO_2، نمونه‌ها تحت تابش فرابنفش (UV) به مدت ۱۰ دقیقه قرار گرفتند. به منظور ارزیابی عملکرد حسگر، نمونه‌ها در معرض گاز هیدروژن با غلظت ۱۰ vol.٪ قرار گرفتند و پاسخ حسگری آن‌ها در دماهای

مختلف اندازه‌گیری شد. پاسخ های حسگری از رابطه R_a/R_g محاسبه می شوند. R_a و R_g به ترتیب مقاومت الکتریکی در هوا و گاز هیدروژن هستند.

بررسی مورفولوژی سطح

شکل ۱ تصاویر FESEM زیرلایه اسپان‌باند خالص را در بزرگنمایی‌های مختلف نشان می‌دهد. ساختار الیافی به صورت شبکه‌ای درهم تنیده مشاهده می‌شود و قطر متوسط الیاف حدود ۱۱/۹۳ میکرومتر است.



شکل ۱. تصاویر FESEM مربوط به (a–c) زیرلایه اسپان‌باند خالص (Pure)، (d–f) زیرلایه پوشش داده شده با لایه نازک SnO_2 و (g–i) نمونه Pd/SnO_2 تهیه شده تحت تابش فرابنفش به مدت ۱۰ دقیقه. تصاویر بزرگنمایی بالاتر، تشکیل پوشش نانوساختاری SnO_2 بر روی الیاف اسپان‌باند و توزیع یکنواخت نانوذرات پالادیوم بر سطح نمونه را نشان می‌دهند. همچنین نتایج EDS و نگاشت عنصری حضور و توزیع عناصر Sn، O و Pd در ساختار حسگر را تأیید می‌کنند.

پس از لایه‌نشانی SnO_2 ، سطح الیاف توسط ساختارهای دانه‌ای پوشیده شد که بیانگر تشکیل موفق لایه اکسید قلع بر روی زیرلایه است. همچنین قطر متوسط الیاف پس از پوشش‌دهی به حدود ۱۵.۷۵ میکرومتر افزایش یافت که تشکیل پوشش را تأیید می‌کند.

تصاویر FESEM نمونه Pd/SnO_2 تحت تابش ۱۰ دقیقه‌ای UV نشان می‌دهد که نانوذرات به صورت یکنواخت سطح الیاف را پوشش داده‌اند. افزایش زبری سطح و ایجاد ساختار نانومتری می‌تواند تعداد مراکز فعال جذب گاز را افزایش دهد.

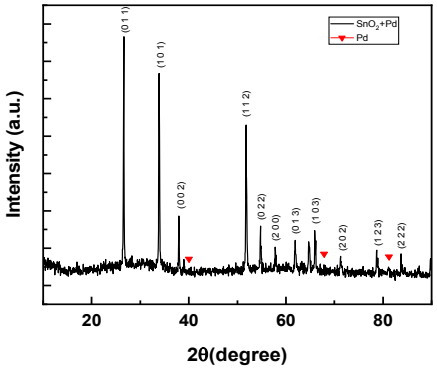
آنالیز EDS و نگاشت عنصری

نتایج EDS حضور عناصر Sn ، Oو Pd را در ساختار نمونه تأیید می‌کند. آنالیز کمی نشان داد که نمونه شامل حدود ۸٤ درصد اتمی Sn ، حدود ۱۱ درصد O و حدود ۵ درصد Pd است. همچنین تصاویر Mapping توزیع یکنواخت پالادیوم در سطح نمونه را نشان می‌دهد که بیانگر موفقیت فرآیند اصلاح سطح است.

آنالیز XRD

الگوی پراش پرتو ایکس نمونه SnO_2/Pd در شکل ۲ نشان داده شده است. پیک‌های مشاهده شده در زوایای مختلف با ساختار تتراگونال SnO_2 مطابقت دارند و به صفحات (۱۱۰)، (۱۰۱)، (۲۰۰)، (۲۱۱)، (۲۲۰)، (۰۰۲)، (۳۱۰)، (۱۱۲)، (۲۰۲)، (۳۲۱) و (۲۲۲) نسبت داده می‌شوند.

علاوه بر این، پیک‌های ضعیفی مربوط به پالادیوم فلزی نیز مشاهده شد که تشکیل موفق نانوذرات پالادیوم بر سطح SnO_2 را تأیید می‌کند. عدم مشاهده پیک‌های اضافی نشان می‌دهد که در فرآیند ساخت، فاز ناخواسته‌ای تشکیل نشده است. شدت غالب پیک (۱۱۰) نشان‌دهنده جهت‌گیری ترجیحی رشد بلورهای SnO_2در این راستا است. این جهت‌گیری می‌تواند تعداد مراکز فعال سطحی را افزایش داده و در بهبود فرآیند جذب گاز مؤثر باشد.



شکل ۲. الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) نمونه Pd/SnO_2 تهیه‌شده بر روی زیرلایه اسپان‌باند پس از ۱۰ دقیقه تابش فرابنفش. پیک‌های مشاهده‌شده با ساختار تتراگونال SnO_2 مطابقت داشته و حضور پیک‌های ضعیف پالادیوم، تشکیل موفق نانوذرات Pd بر روی سطح لایه SnO_2 را تأیید می‌کند.

مکانیزم پیشنهادی حسگری هیدروژن

در هوای محیط، مولکول‌های اکسیژن بر سطح SnO_2 جذب شده و با دریافت الکترون از نوار رسانش، گونه‌های یونی اکسیژن ایجاد می‌کنند. این فرآیند موجب افزایش مقاومت الکتریکی حسگر می‌شود.

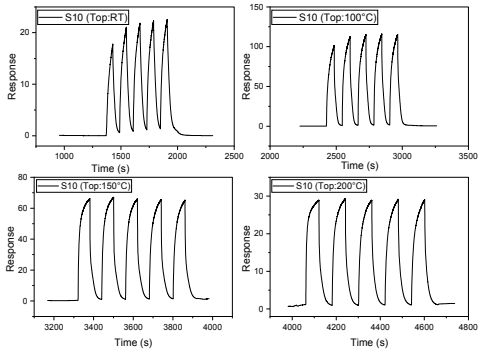
در حضور هیدروژن، مولکول‌های H_2 ابتدا بر سطح پالادیوم جذب و تفکیک می‌شوند. اتم‌های هیدروژن حاصل با گونه‌های اکسیژن جذب شده واکنش داده و الکترون‌ها را به SnO_2 بازمی‌گردانند. در نتیجه ضخامت لایه تهی کاهش یافته و مقاومت حسگر تغییر می‌کند. وجود پالادیوم موجب تسریع جذب و تفکیک هیدروژن و افزایش پاسخ حسگری می‌شود.

نتایج حسگری هیدروژن

شکل ۳ پاسخ حسگری نمونهSnO_2/Pd تهیه‌شده تحت ۱۰ دقیقه تابش فرابنفش را در دماهای کاری مختلف نشان می‌دهد (به دلیل محدودیت حجم مقاله، تنها نتایج نمونه منتخب ۱۰ دقیقه تابش UV ارائه شده است.). نتایج نشان می‌دهد که پاسخ حسگر به طور محسوسی به دمای کاری وابسته است. با افزایش دما از دمای اتاق به°C ۱۰۰ ، پاسخ حسگری افزایش یافته و به بیشینه مقدار خود می‌رسد. این رفتار را می‌توان به افزایش تعداد گونه‌های اکسیژن جذب‌شده فعال و تسهیل واکنش بین مولکول‌های هیدروژن و سطح حسگر نسبت داد.

با افزایش بیشتر دما به°C ۱۵۰ و°C ۲۰۰ ، پاسخ حسگر کاهش می‌یابد. این کاهش می‌تواند ناشی از افزایش سرعت واجذب مولکول‌های هیدروژن و کاهش زمان ماندگاری گونه‌های جذب‌شده بر سطح باشد. در دماهای بالا، اگرچه سرعت واکنش‌های سطحی افزایش می‌یابد، اما کاهش میزان جذب سطحی گاز موجب افت پاسخ حسگری می‌شود.

دستیابی به بیشترین پاسخ در دمای نسبتاً پایین°C ۱۰۰ بیانگر نقش مؤثر نانوذرات پالادیوم در بهبود عملکرد حسگر است. پالادیوم با جذب و تفکیک مولکول‌های هیدروژن به اتم‌های هیدروژن، فرآیند انتقال بار را تسهیل کرده و موجب افزایش حساسیت حسگر در دماهای پایین‌تر می‌شود. این ویژگی از نظر کاربردهای عملی و سامانه‌های پوشیدنی بسیار حائز اهمیت است، زیرا مصرف انرژی حسگر را کاهش داده و امکان عملکرد در شرایط نزدیک به دمای محیط را فراهم می‌کند.



شکل ۳. پاسخ حسگری نمونه SnO_2/Pd تهیه‌شده تحت ۱۰ دقیقه تابش فرابنفش در دماهای کاری مختلف در حضور گاز هیدروژن. بیشترین پاسخ حسگری در دمای°C ۱۰۰ مشاهده شد.

نتیجه گیری

در این پژوهش، حسگر انعطاف‌پذیر هیدروژن مبتنی بر ساختار Pd/SnO_2 بر روی زیرلایه اسپان‌باند به روش PLD ساخته شد. نتایج FESEM، EDS و XRD تشکیل موفق لایه SnO_2 و حضور نانوذرات پالادیوم را تأیید کردند. بررسی عملکرد حسگری نشان داد که پاسخ حسگر به دمای کاری وابسته بوده و بیشترین پاسخ در دمای ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد حاصل شد. نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که ساختار Pd/SnO_2 بر روی زیرلایه اسپان‌باند گزینه‌ای مناسب برای توسعه حسگرهای انعطاف‌پذیر هیدروژن با مصرف انرژی پایین است.

مرجع‌ها

[1] Gautam, D., Gautam, Y. K., Sharma, K., Kumar, A., Kumar, A., Srivastava, V., & Singh, B. P. (2024). Recent developments in SnO2 nanostructures inspired hydrogen gas sensors. International Journal of Hydrogen Energy, 81, 313-345.
[2] Wang, C., Yin, L., Zhang, L., Xiang, D., & Gao, R. (2010). Metal oxide gas sensors: sensitivity and influencing factors. sensors, 10(3), 2088-2106.
[3] Bo-Xun Zhu, Jing-Shiuan Niu, Jia-Jin Jian, Wen-Chau Liu. (2024). Hydrogen sensing characteristics of an Al-doped SnO2 thin film incorporated with palladium nanoparticles, International Journal of Hydrogen Energy, 55, 1234-1241.
[4] Islam, G. N., Ali, A., & Collie, S. (2020). Textile sensors for wearable applications: A comprehensive review. Cellulose, 27(11), 6103-6131.

بررسی ویژگی‌های ساختاری و نوری ترکیب دوتایی $NiO-SnO_2$ سنتز شده به روش سل ژل و هیدروترمال

جانی پور، زینب[۱]؛ اردیانیان، مهدی[۲]؛ باقری محققی، محمدمهدی[۳]؛ فرقرازی، مهسا[۴]؛

[۱و۲و۳و۴] دانشکده فیزیک دانشگاه دامغان، دامغان

چکیده

در این پژوهش، ترکیب دوتایی $NiO-SnO_2$ با نسبت وزنی ۸۰:۲۰ به روش هیدروترمال سنتز و از نظر ساختاری، ریخت‌شناسی و خواص نوری بررسی شد. نتایج پراش پرتو ایکس (XRD)، حضور همزمان فازهای مکعبی NiO و تتراگونال SnO_2 را بدون مشاهده فازهای ناخالصی تأیید کرد. تصاویر FESEM نشان داد که ذرات چندوجهی NiO بستر اصلی را تشکیل داده و صفحات نانومتری SnO_2 به‌طور نسبتاً یکنواخت روی آن توزیع شده‌اند. بررسی طیف‌های جذب فرابنفش-مرئی (UV-Vis)، افزایش جذب نوری ترکیب دوتایی را در مقایسه با SnO_2 خالص نشان داد. گاف انرژی نوری برای نمونه‌های خالص NiO، SnO_2 و ترکیب دوتایی $NiO-SnO2$ به‌ترتیب ۲.۹، ۳.۷ و ۲.۸ eV به دست آمد. نتایج نشان داد که تشکیل ترکیب دوتایی $NiO-SnO2(80:20\ wt.\%)$ موجب بهبود جذب نوری و کاهش گاف انرژی شده است که در ناحیه مرئی، بیانگر پتانسیل بالای این ترکیب دوتایی سنتز شده برای کاربردهای آینده در زمینه مواد جاذب اپتیکی و ادوات اپتوالکترونیکی است.

واژه های کلیدی: *ترکیب دوتایی $NiO-SnO_2$، هیدروترمال، گاف انرژی، خواص نوری.*

Structural and Optical Properties of $NiO-SnO_2$ Binary compound synthesized by Hydrothermal and Sol gel

Janipour, Zeinab[1]; Ardyanian, Mehdi[2]; Bagheri Mohagheghi, Mohammad Mehdi[3]; Fargharazi, Mahsa[4];

[1,2,3,4] Department of Physics, Damghan University, Damghan, Iran

Abstract

In this study, the binary composite $NiO-SnO_2$ with a weight ratio of 80:20 was synthesized via hydrothermal methods, and its structural, morphological, and optical properties were investigated. X-ray diffraction (XRD) results confirmed the simultaneous presence of cubic NiO and tetragonal SnO_2 phases, with no detectable impurity phases. Field-emission scanning electron microscopy (FESEM) images revealed that polyhedral NiO particles form the primary matrix, onto which SnO_2 nanoplates are relatively uniformly distributed. Ultraviolet–visible (UV–Vis) absorption spectroscopy indicated an enhancement in optical absorption for the binary composite compared with pure SnO_2. The optical bandgap energies were found to be 2.9, 3.7, and 2.8 eV for pure NiO, pure SnO_2, and the $NiO-SnO_2$ (80:20 wt.%) binary composite, respectively. The results demonstrate that the formation of the $NiO-SnO_2$ binary composite leads to improved optical absorption and a reduced bandgap in the visible region, underscoring the considerable potential of the as-synthesized composite for future applications in optical absorbing materials and optoelectronic devices.

***Keywords**: NiO-SnO_2 nanocomposite, hydrothermal, bandgap energy, optical properties.*

PACS No. 61,78,81

مقدمه

نیمرساناهای اکسیدی نانوساختار به دلیل پایداری شیمیایی مناسب، هزینه تولید پایین و خواص الکترونی و نوری قابل تنظیم، توجه زیادی را در زمینه حسگرهای گازی، فوتوکاتالیست‌ها و ادوات اپتوالکترونیکی جلب کرده‌اند. در میان این مواد، اکسید نیکل (NiO) به عنوان یک نیمرسانای نوع p با گاف انرژی نسبتاً باریک و اکسید قلع (SnO_2) به عنوان یک نیمرسانای نوع n با شفافیت نوری بالا و پایداری مناسب شناخته می‌شوند [۱–۳]. ترکیب این دو اکسید در قالب یک ترکیب دوتایی ناهمگون می‌تواند منجر به تشکیل پیوندگاه p–n و ایجاد اثرات هم‌افزایی در انتقال بار، جذب نور و خواص الکترونی شود [۴,۵]. با وجود مطالعات انجام شده، بررسی ارتباط بین ساختار، ریخت‌شناسی و خواص نوری این ترکیب‌ها با نسبت‌های وزنی مختلف همچنان مورد توجه است [۶]. در این پژوهش، با سنتز ترکیب دوتایی NiO/SnO2 (80:20 wt.%) به روش هیدروترمال، سعی شده است تا با مهندسی فصل مشترک، جذب نوری در ناحیه مرئی به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش یابد که از نظر کاربردی، نوآوری کار محسوب می‌شود. ویژگی‌های ساختاری، ریخت‌شناسی و نوری نمونه سنتز شده با نمونه‌های خالص مقایسه شده و تأثیر تشکیل ترکیب دوتایی بر رفتار نوری و گاف انرژی مورد بررسی قرار گرفته است.

روش سنتز آزمایشگاهی

ابتدا، برای سنتز نانوذرات NiO و SnO_2 به روش سل–ژل، برای سنتز NiO، مقدار ۴.۷۵۴g کلرید نیکل ($NiCl_2.6H_2O$) در۱۰۰mLحل شد. در ظرف جداگانه، ۴.۲۰۲g اسید سیتریک (عامل کمپلکس‌ساز) در ۵۰mL آب و ۱.۲۴g اتیلن گلیکول (عامل پلیمرساز) حل گردید. دو محلول مخلوط و به مدت ۳ ساعت در حمام روغن با دمای ۱۲۰°C تحت رفلاکس قرار گرفتند. ژل حاصل در دمای ۵۰۰ °C به مدت ۳ ساعت کلسینه شد. برای سنتز SnO_2، مقدار ۴.۵۱۲g کلرید قلع ($SnCl_2.2H_2O$) با همان مراحل استفاده شد. در مرحله دوم ، برای سنتز هیدروترمال ترکیب دوتایی NiO/SnO_2 (80:20 wt.%)، با نسبت وزنی ۸۰٪ NiO و ۲۰٪ SnO_2، مقدار ۰.۸ g از پودر NiO و ۰.۲ g از پودر SnO_2 در ۵۰mL آب یون‌زدایی شده به صورت سوسپانسیون قرار گرفتند. سپس اسید سیتریک به عنوان عامل کمپلکس ساز اضافه و مخلوط به مدت ۴۰ دقیقه هم زده شد. محلول به مدت ۱ ساعت روی حرارت ۷۵°C قرار گرفت و سپس در اتوکلاو با دمای ۱۵۰°C به مدت ۱۸ ساعت، فرایند واکنش هیدروترمال کامل شد. رسوب حاصل سپس سانتریفیوژ، شسته و در نهایت در کوره با دمای ۵۰۰°C به مدت ۲ ساعت کلسینه شد.

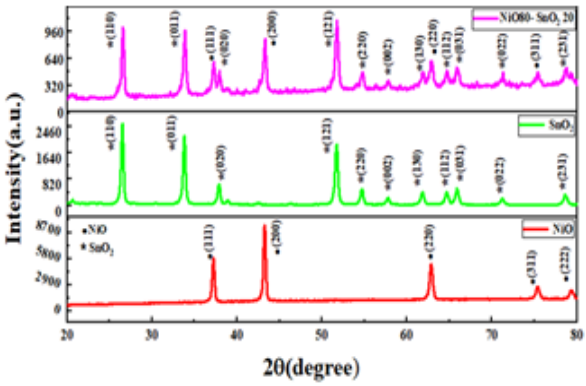
مشخصه‌یابی

برای بررسی ساختار بلوری از پراش پرتو ایکس (XRD) با دستگاه D8 بروکر(تابش تک رنگ Cu-Kα) استفاده شد. ریخت‌شناسی به وسیله میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (FESEM) مدل Mira3 ساخت شرکت TESCAN انجام گرفت. خواص اپتیکی با دستگاه اسپکتروفتومتر UV–Vis–NIR مجهز به یکپارچه ساز کروی (مدل UV-1700 ساخت شرکت شیمادزو) بررسی و گاف انرژی با استفاده از نمودار (Tauc) محاسبه شد.

نتایج و بحث

ساختار بلوری (XRD)، الگوی XRD نمونه NiO/SnO_2 (80:20 wt.%) در شکل ۱ نشان می‌دهد که قله‌های اصلی در زوایای 2θ برابر ۳۷.۲°، ۴۳.۳° و ۶۲.۸° مربوط به صفحات (۱۱۱)، (۲۰۰) و (۲۲۰) فاز مکعبی NiO (JCPDS - ۴۷-۱۰۴۹) است. همچنین قله‌های ۲۶.۶°، ۳۳.۸° و ۵۱.۷° مربوط به صفحات (۱۱۰)، (۱۰۱) و (۲۱۱) فاز تتراگونال (SnO_2 JCPDS–۱۰۰–۹۶ ۰۰۶۳) مشاهده می‌شود. حضور همزمان قله‌های مشخصه هر دو فاز و عدم مشاهده قله‌های اضافی، بیانگر تشکیل موفق ترکیب دوتایی و خلوص فازی مناسب نمونه است. علاوه بر این، عدم جابه‌جایی محسوس در موقعیت قله‌ها نشان می‌دهد که ساختار بلوری هر یک از فازها پس از تشکیل ترکیب دوتایی حفظ شده است. پهن‌شدگی نسبی قله‌های پراش نیز به‌دلیل ماهیت نانوساختاری ذرات سنتز شده است. تشکیل موفق ترکیب

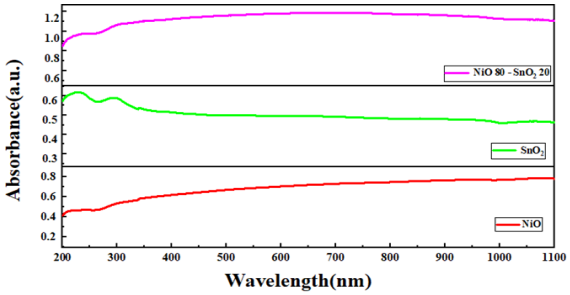
NiO/SnO_2 می‌تواند نقش مهمی در بهبود خواص نوری و انتقال بار در فصل مشترک دو نیمرسانا ایفا کند.



شکل ۱ : نمودارمقایسه XRD ترکیب دوتایی‌های NiO-SnO2 (80:20 wt.%) و نمونه های خالص NiO و SnO_2؛ قله‌های شاخص فاز مکعبی NiO با علامت(●) و فاز تتراگونال SnO_2 با علامت (*) مشخص شده‌اند.

خواص اپتیکی (UV-Vis)

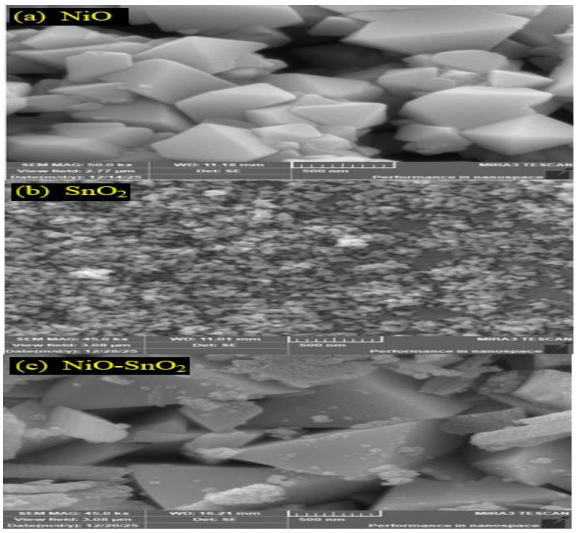
طیف‌های جذب فرابنفش–مرئی نمونه‌های خالص و ترکیب دوتایی در شکل ۲ ارائه شده است. نتایج نشان می‌دهد که ترکیب دوتایی NiO-SnO2 (80:20 wt.%) در مقایسه با SnO_2 خالص، جذب نوری بیشتری در ناحیه فرابنفش و مرئی از خود نشان می‌دهد. در طول موج ۶۰۰nm شدت جذب نمونه ترکیب دوتایی بیشتر از نمونه SnO_2 خالص اندازه‌گیری شد. علاوه بر این، حفظ جذب نسبتاً بالا در محدوده ۶۰۰nm تا ۱۱۰۰nm نشان‌دهنده گسترش پاسخ نوری نمونه به سمت طول موج‌های بلندتر است که می‌تواند برای کاربردهای فوتوکاتالیستی و اپتوالکترونیکی مطلوب باشد [۹].



شکل ۲: طیف‌های جذب فرابنفش– مرئی برای نمونه‌های خالص و کامپوزیت NiO-SnO2 (80:20 wt.%)

ریخت‌شناسی

تصاویر FESEM مربوط به ترکیب دوتایی NiO-SnO2 (80:20 wt.%) در شکل ۳ نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهد که ذرات NiO عمدتاً دارای ریختار چندوجهی بوده و به عنوان بستر اصلی ترکیب دوتایی عمل می‌کنند. همچنین صفحات نانومتری SnO_2 به صورت نسبتاً یکنواخت بر سطح ذرات NiO توزیع شده‌اند. این نوع آرایش ساختاری موجب افزایش سطح تماس بین دو نیمرسانا شده و شرایط مناسبی را برای تشکیل فصل مشترک ناهمگون فراهم می‌کند. ریختار مشاهده شده با گزارش‌های پیشین برای سامانه‌های NiO-SnO2 مطابقت دارد.[۷–۹].

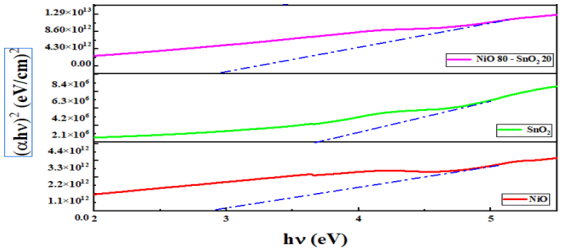


شکل۳: تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از a) نمونه NiO خالص، b) نمونه SnO_2 خالص، c) نمونه NiO-SnO2 (80:20 wt.%).

گاف انرژی نوری

برای تعیین گاف انرژی نوری نمونه‌ها، نمودار تاوک[۲۱] بر اساس رابطه $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب انرژی فوتون $(h\nu)$ رسم شد. مقادیر گاف انرژی برای SnO_2 خالص، NiO خالص و ترکیب دوتایی NiO/SnO2 (80:20 wt.%) به ترتیب برابر ۳.۷ eV، ۲.۹ eV و ۲.۸ eV به دست آمدند.

[1] . Tauc



شکل ٤ : نمودار تغییرات $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب انرژی فوتون $(h\nu)$.

کاهش گاف انرژی در ترکیب دوتایی ناشی از ایجاد حالت‌های الکترونی جدید در اثر خمیدگی نوارها در فصل مشترک NiO و SnO_2 است. این حالت‌های میانی، امکان جذب فوتون‌های با انرژی کمتر (طول موج بلندتر) را فراهم می‌کنند [۹]. این نتیجه با داده‌های طیف جذب فرابنفش–مرئی نیز همخوانی دارد و علت اصلی افزایش جذب نوری در نمونه ترکیب دوتایی را توضیح می‌دهد.

به منظور ارزیابی، نتایج حاصل با پژوهش‌های مشابه [۹–۸–۷] مقایسه شده است. که گاف انرژی به‌دست‌آمده برای ترکیب NiO-SnO_2 در این مقاله (۲.۸ eV) نسبت به بسیاری از گزارش‌های قبلی که عمدتاً در محدوده ۳.۰ eV تا ۳.۵ eV قرار دارند، کمتر است. این کاهش معنی‌دار گاف انرژی، عمدتاً به دلیل روش سنتز هیدروترمال و توزیع یکنواخت نانوصفحات SnO_2 روی ذرات NiO است که منجر به ایجاد فصل مشترک ناهمگون مؤثرتر و در نتیجه جذب بیشتر نور مرئی می‌شود. این امر نشان‌دهنده برتری روش و نتایج این پژوهش نسبت به برخی از کارهای مشابه است.

نتیجه گیری

در این پژوهش، ترکیب دوتایی NiO-SnO_2 با نسبت وزنی ۸۰:۲۰ به روش هیدروترمال سنتز و مشخصه‌یابی شد. نتایج XRD حضور همزمان فازهای مکعبی NiO و تتراگونال SnO_2 را بدون فاز ناخالصی تأیید کرد و تصاویر FESEM توزیع نسبتاً یکنواخت صفحات SnO_2 بر روی ذرات چندوجهی NiO را نشان داد. بررسی خواص نوری نشان داد که ترکیب دوتایی سنتز شده در مقایسه با SnO_2 خالص، جذب بیشتری در ناحیه مرئی داشته و گاف انرژی آن از ۳.۷ eV به ۲.۸ eV کاهش یافته است.

این نتایج بیانگر تأثیر مهم تشکیل ترکیب دوتایی NiO/SnO_2 بر بهبود جذب نوری و گسترش پاسخ نوری در ناحیه مرئی بوده و می‌تواند آن را به گزینه‌ای مناسب برای کاربردهای پیشرفته در زمینه فوتوکاتالیست‌ها و ادوات اپتوالکترونیکی تبدیل کند.

مرجع‌ها

[1] Bai, H., Feng, C., Chen, Y., Yan, Y., Feng, Y., Liu, K., ... & Guo, F. (2024). Chemiresistive room temperature H2S gas sensor based on MoO3 nanobelts decorated with MnO2 nanoparticles. *Sensors and Actuators B: Chemical*, *420*, 136468.

[2] Yang, H., Suematsu, K., Mitamura, K., Yanagawa, R., Saito, H., Watanabe, K., & Shimanoe, K. (2025). Enhancement in gas sensing performance of MoO3-loaded SnO2 sensor via improving adsorption and partial oxidation. *Sensors and Actuators B: Chemical*, *427*, 137176.

[3] Fang, H., Chen, H., Tan, R., Ge, L., Zhao, T., Wang, H., ... & Wang, D. (2025). A CuO/MoO3-based SO2 gas sensor with moisture resistance and ultra-fast response at 90° C. *Sensors and Actuators B: Chemical*, *422*, 136627.

[4] Barsan, N., & Weimar, U. D. O. (2001). Conduction model of metal oxide gas sensors. *Journal of electroceramics*, *7*(3), 143-167.

[5] Zappa, D.; Galstyan, V.; Kaur, N.; Munasinghe Arachchige, H.M.M.; Sisman, O.; Comini, E. "Metal Oxide-Based Heterostructures for Gas Sensors"—A Review. Anal. Chim. Acta 2018, 1039, 1–23.

[6] Batzill, M., & Diebold, U. (2005). The surface and materials science of tin oxide. *Progress in surface science*, *79*(2-4), 47-154.

[7] Varshney, B., Siddiqui, M. J., Anwer, A. H., Khan, M. Z., Ahmed, F., Aljaafari, A., ... & Azam, A. (2020). Synthesis of mesoporous SnO2/NiO nanocomposite using modified sol–gel method and its electrochemical performance as electrode material for supercapacitors. *Scientific reports*, *10*(1), 11032.

[8] Haq, S., Sarfraz, A., Menaa, F., Shahzad, N., Din, S. U., Almukhlifi, H. A., ... & Shahzad, M. I. (2022). Green synthesis of NiO-SnO2 nanocomposite and effect of calcination temperature on its physicochemical properties: impact on the photocatalytic degradation of methyl orange. *Molecules*, *27*(23), 8420.

[9] Shah, S., Hussain, S., Din, S. U., Ibrahim, T. K., Zhao, X., Manavalan, R. K., ... & Qiao, G. (2025). H2S gas sensors based on NiO@ SnO2 heterojunction with SnO2 nanoparticles decorated MOF derived NiO hollowspheres. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 118997.

بررسی خواص لایه‌های نازک دی اکسید تلوریم تهیه شده با روش ساده تبخیر حرارتی پودر تلوریم

توحیدی، توکل [۱]؛ حمدی محمدآباد، پروین [۲]؛ طالب‌زاده، رباب [۳]

[۱] پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده کاربرد پرتوها- مجتمع پژوهشی شمال‌غرب کشور (بناب)، ایران

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد مهاباد، مهاباد، ایران

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

چکیده

در این کار، لایه‌های نازک دی اکسید تلوریم TeO_2 روی زیرلایه‌های شیشه‌ای با روش آسان و کم هزینه تبخیر حرارتی در کوره مافل در سه دمای مختلف و سه فاصله متفاوت پودر تلوریم با زیرلایه تهیه گردید. زیرلایه در دمای ۴۰۰ درجه سانتیگراد قرار گرفت و فاصله‌های زیر لایه از پودر فلزی برابر با ۱ mm، ۲ mm و ۳ mm بود. ساختار بلوری با روش XRD و مورفولوژی سطح لایه‌ها با روش SEM مورد بررسی قرار گرفت.

واژه های کلیدی: *دی اکسید تلوریم، لایه نازک، خواص ساختاری، تبخیر حرارتی.*

Investigation of the properties of TeO_2 thin films prepared by a simple thermal evaporation method of Te powder

Tohidi, Tavakkol [1]; Hamdi Mohammadabad, Parvin [2]; Talebzadeh, Robabeh[3]

[1]*Northwest Research Complex, Radiation Applications Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Bonab, Iran*

[2] *Department of Physics, Mahabad Branch, Islamic Azad University, Mahabad, Iran*

[3]*Department of Physics, Ta. C., Islamic Azad University, Tabriz, Iran*

Abstract

In this work, thin films of tellurium dioxide (TeO_2) were prepared on glass substrates by a simple and low-cost thermal evaporation method in a muffle furnace at a constant temperature and three different distances of tellurium powder from the substrate. The substrate was heated to 400 °C and the distances from the substrate to the metal powder were 1 mm, 2 mm, and 3 mm. The crystal structure and the surface morphology of the films was investigated by XRD and SEM, respectively.

Keywords: *TeO_2, Thin film, Structural properties, Thermal evaporation.*

PACS No. *68*

مقدمه

مفید بودن خصوصیات لایه‌های نازک و جالب توجه بودن مطالعه بر روی رفتار جامدهای دو بعدی باعث شده که چه از نظر علمی و چه از نظر تکنولوژی به لایه‌های نازک توجه ویژه‌ای شود. مواد نیمه‌رسانا به صورت لایه نازک (از جمله اکسیدهای فلزی) جزو مواد مهم می‌باشند که به خاطر خواص جالب توجه اپتیکی و الکتریکی و متفاوت از نمونه‌های حجمی، مورد توجه بسیاری قرار گرفته‌اند به طوریکه در سال‌های اخیر تحقیقات گسترده روی آنها

شروع شده‌است. اکسیدهای فلزی بطور گسترده در کاربردهای تکنولوژیکی نظیر پوشش‌دهی، کاتالیزور، الکتروشیمیایی، فیبرهای نوری، سنسورها و غیره استفاده می‌شوند [۱].

خواص مختلف لایه‌های نازک TeO_2 روی زیر لایه‌های مختلف و روش‌های گوناگون توسط محققان بررسی شده است. لیو و همکارانش [۲] با روش ساده تبخیر حرارتی در کوره مافل با استفاده از منبع تلوریم روی زیر لایه سیلیکونی موفق به تهیه نانو سیم‌های TeO_2 شدند و خواص حسگر گازی آنها را بررسی کردند. کیم و همکارانش [۳] نانوساختارهای TeO_2 یک بعدی را با تبخیر پودر Te سنتز کردند و تغییرات مورفولوژی را در دماهای رشد از ۴۰۰ تا ۵۰۰ درجه سانتیگراد بررسی کردند. چاندرا و همکارانش [٤] تأثیر نقایص بر خواص نوری و الکتریکی لایه‌های نازک TeO_2 رسوب داده شده به روش بخار حرارتی در دماهای مختلف بازپخت و ارتباط آن با تشکیل نقص را مورد بررسی قرار دادند. در کار قبلی ما ماده TeO_2 به صورت پودری به روش تبخیر در اتمسفر هوا (داخل کوره مافل) روی زیرلایه‌های شیشه‌ای و سیلیکونی لایه‌نشانی گردید. مقایسه مورفولوژی‌های مختلف TeO_2 با تغییر نوع زیر لایه و دمای لایه‌نشانی در این کار مورد بررسی قرار گرفت. [۵].

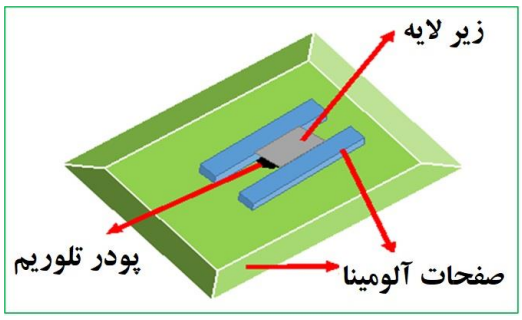
مورفولوژی مواد از جمله دی اکسید تلوریم (TeO_2) بسیار مهم است زیرا ابزاری مستقیم و قدرتمند برای تنظیم خواص عملکردی ماده برای کاربردهای خاص، به ویژه در الکترونیک و اپتیک است. شکل، اندازه و ساختار کریستالی آن را می‌توان با توجه شرایط تهیه کنترل کرد تا رفتارهای مورد نظر را آشکار یا بهبود بخشد. اهمیت تغییرات مورفولوژیکی از این جهت است که اشکال مختلف بر عملکرد ماده تأثیر می‌گذارند. در اصل، مورفولوژی TeO_2 یک ویژگی تصادفی نیست، بلکه یک پارامتر طراحی اولیه است. دانشمندان با کنترل شکل، اندازه و فاز کریستالی آن می‌توانند به طور مؤثر این ماده را طوری طراحی کنند که حسگر بهتری، ساطع‌کننده نور روشن‌تر یا قطعه‌ای با خواص الکترونیکی جدید برای فناوری‌های پیشرفته باشد.

در این کار، روش ساده تبخیر حرارتی در کوره مافل بدون نیاز به خلاء برای تهیه لایه‌های نازک TeO_2 مورد استفاده قرار گرفت. لایه‌ها روی زیر لایه‌های شیشه‌ای در دمای ثابت ۴۰۰ $^{\circ}C$ پودر Te و سه فاصله ۱، ۲، و ۳ میلی‌متر پودر Te از زیرلایه تهیه و خواص ساختاری و ریخت‌شناسی آن‌ها بررسی شد.

مواد و روش‌ها

برای لایه نشانی TeO_2 به روش تبخیر حرارتی در اتمسفر هوا با تبخیر پودر تلوریم از کوره مافل استفاده گردید پودر Te روی صفحه Al_2O_3 قرار داده شد که دقیقاً در مرکز کوره مافل قرار گرفته بود. سپس برای ایجاد فاصله‌های دلخواه از صفحات کوچک Al_2O_3 استفاده گردید (شکل ۱). مدت زمان لایه‌نشانی ۱ ساعت بود. پس از آن کوره مافل به طور طبیعی تا دمای اتاق خنک شد. زیرلایه‌ایی که برای لایه‌نشانی فیلم نازک مورد استفاده قرار گرفت از نوع شیشه‌های اپتیکی بودند. در ابتدا زیرلایه‌های شیشه‌ای در اسید نیتریک رقیق به مدت ۲٤ ساعت قرار داده شدند. سپس با آب مقطر شسته شده و همراه با استون به مدت ۱۵ دقیقه در آلتراسونیک قرار گرفتند. در نهایت با آب مقطر شسته شدند و در آون خشک شدند.

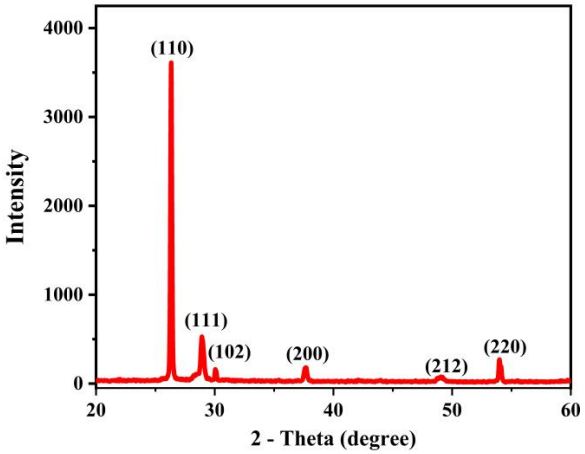
بررسی مورفولوژی سطح لایه‌ها با دستگاه SEM مدل EVD 18 ساخت شرکت Carl و ساختار آن‌ها با دستگاه XRD مدل D8-Advance Bruker با طول موج تابشی Cu-Kα (λ=1.5406 Å) بررسی گردید.



شکل۱ : شماتیکی از آرایش واقع در کوره مافل شامل: پودر Te، زیرلایه، صفحه آلومینا پایینی و دو صفحه آلومینا کوچک.

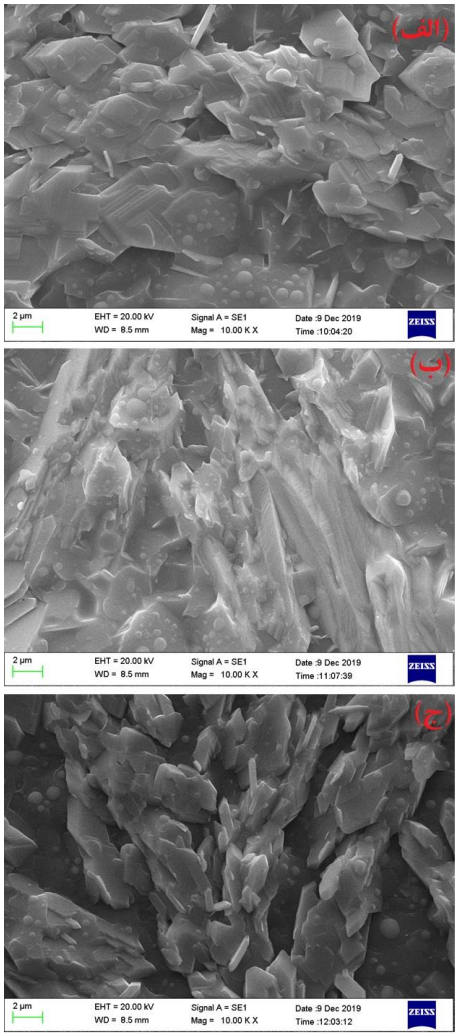
نتایج و بحث

در شکل ۲، الگوی پراش اشعه X لایه‌های نازک TeO_2 تهیه شده در شرایط دمای ۴۰۰ درجه سلسیوس، زمان ۶۰ دقیقه و فاصله ۱ میلیمتری زیرلایه از پودر تلوریم نشان داده شده است. با توجه به شکل مشاهده می‌شود شش پیک عمده تقریباً در زاویه‌های ۲۶/۳، ۲۸/۹، ۳۰/۱، ۳۷/۶، ۴۹/۱۵ و ۵۳/۹۷ به ترتیب متناظر با اندیس‌های میلر (۱۱۰)، (۱۱۱)، (۱۰۲)، (۲۰۰)، (۲۱۲) و (۲۲۰) وجود دارد که بر اساس کارت استاندارد شماره 78-1713، لایه TeO_2 دارای ساختار چهار گوشی می‌باشد. رشد ترجیحی در زاویه ۲۶/۳ درجه مربوط به صفحه میلر (۱۱۰) می‌باشد. این نتایج نشان می‌دهد که لایه‌های بدست آمده با جهت‌های رشد ترجیحی قوی رشد کرده و از کیفیت و خلوص بالایی برخوردار هستند زیرا هیچ پیک قابل اندازه‌گیری از سایر فازها یا ناخالصی‌ها مشاهده نشده است.



شکل۲: طیف XRD برای لایه نازک TeO_2 پوشش داده شده روی زیر لایه شیشه‌ای

مورفولوژی نمونه‌های بدست آمده با میکروسکوپ الکترونی مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. شکل ۳ تصاویر SEM لایه TeO_2 لایه‌نشانی شده روی زیرلایه شیشه‌ای که در فاصله‌های ۱، ۲ و ۳ میلی‌متری زیرلایه از پودر Te در ۶۰ دقیقه زمان لایه‌نشانی و دمای ۴۰۰ درجه سانتیگراد تهیه شده‌اند، را نشان می‌دهد. تصاویر SEM نشان دهنده‌ی لایه‌های نازک پیوسته و فشرده به شکل ورق است. مشاهده می‌شود که ورقه‌های TeO_2 از تعداد زیادی ذرات کروی TeO_2 با اندازه تقریبا مساوی که بر روی سطح توزیع شده است، تشکیل شده است. با این حال، در فاصله ۱ میلی‌متر، تعداد ورق‌ها بیشتر و منظم‌تر از فاصله‌های ۲ و ۳ میلی‌متری می‌باشد و فشردگی لایه در فاصله ۳ میلی‌متری نسبت به دو حالت دیگر کمتر می‌باشد.



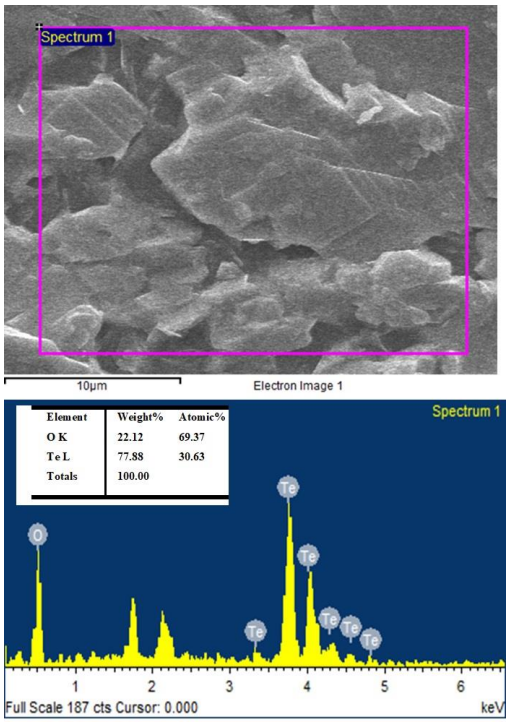
شکل۳ : تصاویر SEM رشد لایه نازک TeO_2 بر روی زیرلایه شیشه‌ای در دمای تبخیر مختلف ۴۰۰ °C و فاصله‌های مختلف پودر از زیرلایه الف) ۱ mm ، ب) ۲ mm و ج) ۳ mm.

به طور کلی، مکانیسم رشد در لایه‌نشانی فاز بخار را می‌توان به صورت: بخار – جامد[1] (VS) و بخار – مایع – جامد[2] (VLS)

[1] vapor–solid
[2] vapor–liquid-solid

طبقه بندی کرد. رشد بخار– جامد در صورت عدم وجود کاتالیزور صورت می‌گیرد. اما، مکانیسم بخار – مایع – جامد به طور کلی نیاز به حضور کاتالیزور (ذرات فلزی دیگر مانند Au) دارد. با این حال، فرض بر این است که در غیاب هرگونه کاتالیزور، ذرات TeO_2 بر روی زیرلایه قرار گرفته‌اند که به عنوان مراکز خود کاتالیزوری عمل می‌کنند. در دمای مناسب، پودرهای Te بخار شده و متعاقباً مولکول‌های گازی Te با گاز O_2 در محیط هوا واکنش انجام داده و سپس مولکول‌های گازی TeO_2 شکل می‌گیرند. در مرحله بعد، این مولکول‌های گازی TeO_2 روی زیرلایه متراکم می‌شوند، که به عنوان بلورهای بذر برای مکان‌های هسته‌بندی عمل می‌کنند. بنابراین، ساختارهای TeO_2، با توجه به شرایط لایه–نشانی، با تجمع پیوسته مولکول‌های بیشتر TeO_2 از طریق مکانیسم رشد بخار– جامد به فرم‌های مناسب رشد می‌کنند [٦].

در شکل ٤ تصویر مربوط به آنالیز EDX لایه نازک TeO_2 نشان داده شده است.



شکل٤ : تصاویر EDX لایه نازک TeO_2 تهیه شده بر روی زیر لایه شیشه‌ای در دمای تبخیر ٤٠٠ °C و فاصله پودر از زیرلایه ۱ mm. درصد اتمی و وزنی عناصر O و Te در داخل شکل نشان داده شده است.

تصویر EDX مربوط به نمونه‌ای است که بر روی زیرلایه شیشه‌ای در دمای تبخیر ٤٠٠ درجه سانتیگراد، زمان لایه‌نشانی ٦٠ دقیقه و فاصله ۱ میلیمتری زیرلایه از پودر تلوریم تهیه شده است. این تصویر تشکیل TeO_2 خالص را تأیید می‌کند. پیک‌های اضافی مربوط به زیرلایه هستند. همچنین درصد اتمی و وزنی عناصر O و Teدر قسمت داخلی شکل نشان داده شده است.

نتیجه گیری

لایه‌های نازک TeO_2 با روش آسان و ساده تبخیر حرارتی در اتمسفر هوا در سه فاصله مختلف پودر Te از زیرلایه روی زیرلایه‌های شیشه‌ای تهیه گردید. نتایج SEM نشان داد که لایه‌های نازک TeO_2 دارای سطحی یکنواخت و با تغییر فاصله، مورفولوژی سطح تغییر کرد. آنالیز عنصری نشان داد که لایه نازک تهیه شده فقط شامل عناصر O و Te می‌باشد و تشکیل TeO_2 خالص را تأیید می‌کند. نتایج XRD نشان داد که لایه‌ها دارای ساختار چهار گوشی می‌باشند. جهت‌های رشد ترجیحی قوی و عدم مشاهده هر نوع پیک قابل اندازه‌گیری از سایر فازها یا ناخالصی‌ها نشان دهنده این است که لایه‌های بدست آمده از کیفیت و خلوص بالایی برخوردار هستند.

مرجع‌ها

[۱] E. Dönmez, *et al*,; "The Electrical Characterization of TeO_2-based Metal-Oxide-Semiconductor Devices"; *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **14** (2025) 044011.

[۲] Z. Liu, et al.,; "Synthesis and characterization of TeO_2 nanowires" *Japanese Journal of Applied Physics* **47**, (2008) 771.

[۳] S.S. Kim, *et al*,;, "Drastic change in shape of tetragonal TeO_2 nanowires and their application to transparent chemical gas sensors"; Appl. Surf. Sci. **258**, (2011) 501–506.

[٤] K. Chandra, M.G. Mahesha and P.K. Shetty; "Defect-Mediated Optical and Electrical Behaviour in γ- and β-Phase TeO_2 Thin Films"; *J. Electron. Mater.* **55**, (2026) 949–959.

[٥] P. Hamdi-Mohammadabad, T. Tohidi, R. Talebzadeh, R. Mohammad Rezaei, S. Rahmatallahpur; "Evaluation of structural and optical properties of TeO_2 nano and micro structures grown on glass and silicon substrates using thermal evaporation method"; *Materials Science in Semiconductor Processing* **139**, (2022) 106363.

[٦] Y. Shen, et al.,; "A low-temperature n-propanol gas sensor based on TeO_2 nanowires as the sensing layer"; *RSC Advances* **5**, No. 37 (2015) 29126-29130.

پاسخ حسگر تشدید پلاسمون سطحی به غلظت‌های مختلف گلوکز

رحیم آبادی، زهره[۱]؛ مرادی، مهرداد[۱]؛ طاهری، رمضانعلی[۲]

[۱] پژوهشکده علوم و فناوری نانو دانشگاه کاشان، کاشان

[۲] مرکز تحقیقات نانوبیوتکنولوژی، دانشگاه علوم پزشکی بقیه الله، تهران

چکیده

تشدید پلاسمون سطحی (SPR) یکی از روش‌های اپتیکی بسیار حساس برای بررسی تغییرات کوچک ضریب شکست در مجاورت سطح فلزی است که کاربرد گسترده‌ای در سامانه‌های زیست‌حسگری دارد. در این پژوهش، تراشه حسگر مبتنی بر لایه نازک کروم/طلا با استفاده از روش تبخیر حرارتی مقاومتی تهیه شد و عملکرد آن برای بررسی تغییرات ضریب شکست محیط بررسی گردید. ارزیابی عملکرد حسگری تراشه با استفاده از دستگاه Autolab ESPR-IT و اندازه‌گیری پاسخ آن در برابر محلول‌های گلوکز با غلظت‌های ۱، ۲، ۳، ٤ و ۵ درصد انجام شد. نتایج نشان داد که با افزایش ضریب شکست محلول گلوکز، زاویه تشدید پلاسمون سطحی به سمت مقادیر بزرگ‌تر جابه‌جا می‌شود. این جابه‌جایی در قالب تغییرات پله‌ای در سنسوگرام ثبت شد که بیانگر حساسیت قابل‌توجه تراشه نسبت به تغییرات ضریب شکست است. تحلیل داده‌ها نشان داد که تغییرات کوچک ضریب شکست منجر به تغییر قابل اندازه‌گیری در زاویه تشدید می‌شود، که این موضوع کارایی سامانه SPR برای کاربردهای حسگری نشان می‌دهد. میانگین حساسیت محاسبه شده برای غلظت‌های فوق ۲۰۸ درجه بر RIU می‌باشد.

واژه های کلیدی: *تشدید پلاسمون سطحی، ضریب شکست، گلوکز، حساسیت.*

Response of surface plasmon resonance sensor to different glucose concentrations

Rahimabadi, Zohreh[1]; Moradi, Mehrdad[1]; Taheri, RamezanAli[2]

[1] *Institute of Nanoscience and Nanotechnology, University of Kashan, Kashan*
[2] *Nanobiotechnology Research Center, Baqiyatallah University of Medical Sciences, Tehran*

Abstract

Surface plasmon resonance (SPR) is a highly sensitive optical method for studying small changes in the refractive index in the vicinity of a metal surface, which has wide application in biosensing systems. In this study, a sensor chip based on a thin layer of chromium/gold was prepared using the resistive thermal evaporation method and its performance was investigated for studying changes in the refractive index of the environment. The evaluation of the sensing performance of the chip was carried out using the Autolab ESPR-IT device and its response to glucose solutions with concentrations of 1, 2, 3, 4 and 5% was measured. The results showed that with increasing the refractive index of the glucose solution, the surface plasmon resonance angle shifts towards larger values. This shift was recorded in the form of step changes in the sensogram, which indicates the significant sensitivity of the chip to changes in the refractive index. Data analysis showed that small changes in the refractive index lead to a measurable change in the resonance angle, indicating the effectiveness of the SPR system for sensing applications. The average sensitivity calculated for the above concentrations is 208 degrees per RIU.

***Keywords**: Surface plasmon resonance, refractive index, glucose, sensitivity*

PACS No. ٤٢

مقدمه

تشدید پلاسمون سطحی (Surface Plasmon Resonance; SPR) به عنوان یک پدیده نوری جذاب، برای اولین بار در سال ۱۹۰۲ توسط وود مشاهده شد [۱]. این پدیده نوری زمانی اتفاق می‌افتد که یک پرتو نور با قطبش مغناطیسی عرضی (TM) یا نور با قطبش P با زاویه‌ای بزرگتر از زاویه بحرانی به مرز مشترک فلز–

دی‌الکتریک تابانده می‌شود: در نتیجه بازتاب کلی داخلی (TIR) رخ داده و یک موج میرا بر سطح فلز ایجاد می‌شود. موج میرای بوجود آمده، باعث تحریک الکترون‌های آزاد سطح فلز و نوسان همدوس آن‌ها شده و موج پلاسمون سطحی بوجود می‌آید [۳و۲]. بردار موج انتشار پلاسممون‌های سطحی از معادله ۱ بدست می‌آید:

$$K_{sp} = \frac{\omega}{c}\sqrt{\frac{\varepsilon_1\varepsilon_0}{\varepsilon_0+\varepsilon_1}} \qquad (۱)$$

در این رابطه، ε_0 و ε_1 ثابت دی‌الکتریک محیط فلزی و دی‌الکتریک می‌باشد. در حالت عادی، بردار موج نور همواره کوچک‌تر از بردار موج پلاسمون‌های سطحی است، بنابراین پدیده SPR تنها با تابش مستقیم نور اتفاق نمی‌افتد. در نتیجه برای افزودن تکانه اضافی به نور فرودی و تأمین شرط تطابق فاز لازم برای برانگیختگی SPR از روش‌های جفت‌شدگی با منشور، توری و موجبر استفاده می‌شود که رایج‌ترین آن، جفت‌شدگی با منشور می‌باشد که عمدتا با استفاده از ساختار کریشمن انجام می‌شود. شرط تطابق بردار موج از طریق معادله ۲ برآورده می‌شود:

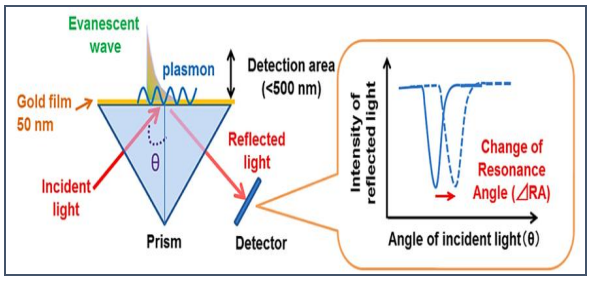
$$k_{sp} = k_x \quad \text{و} \quad k_x = k_0\ n_0\sin(\theta) \qquad (۲)$$

که در این معادله K_x مولفه موازی بردار موج نور فرودی، n_p ضریب شکست منشور و θ زاویه نور فرودی می‌باشد [٤]. بنابراین در جفت‌شدگی منشوری، افزایش بردار موج موثر نور از طریق عبور آن از طریق منشوری با ضریب شکست بالا امکان‌پذیر می‌شود.

زمانی‌که شرایط ذکر شده برقرار باشد، پلاسمون‌های سطحی نور فرودی را به شدت جذب می‌کنند: در نتیجه شدت نور بازتابی کاهش ی‌یابد و یک دره بازتابی در زاویه مشخص در طیف بازتاب ظاهر می‌شود که به این زاویه تشدید می‌گویند:

$$\theta_{SP} = sin^{-1}\sqrt{\frac{\varepsilon_0\varepsilon_1}{(\varepsilon_0+\varepsilon_1)\varepsilon_p}} \qquad (۳)$$

افزایش جزئی ضریب شکست محیط مجاور فلز باعث انتقال زاویه تشدید به سمت زوایای بزرگ‌تر می‌شود [٦و٥]. شکل ۱ طرح شماتیکی از حسگرهای SPR با پیکربندی کریشمن را نمایش می‌دهد.



شکل ۱: حسگر SPR با پیکربندی کریشمن [۷].

از آنجا که شدت و موقعیت زاویه‌ای سیگنال SPR نسبت به تغییرات بسیار کوچک محیط نزدیک سطح فلزی حساس است، این روش برای بررسی تغییرات ضریب شکست، پایش برهم‌کنش‌های سطحی و تحلیل نمونه‌های شیمیایی و زیستی مورد استفاده قرار می‌گیرد. در سامانه‌های SPR، هرگونه تغییر در ترکیب یا غلظت محیط مجاور سطح حسگر می‌تواند شرایط جفت‌شدگی نور با پلاسمون‌های سطحی را تغییر داده و در نتیجه موجب جابه‌جایی زاویه تشدید یا تغییر شدت سیگنال بازتابی شود. بر این اساس، در این پژوهش پاسخ تراشه SPR ساخته‌شده نسبت به تغییرات ضریب شکست ناشی از حضور محلول‌های گلوکز با غلظت‌های مختلف بررسی شد تا قابلیت حسگر در بررسی تغییرات اپتیکی محیط اطراف سطح فلزی ارزیابی گردد.

بخش تجربی

در این مطالعه، ابتدا تراشه‌های SPR مبتنی بر لایه نازک کروم/ طلا لایه‌نشانی شده بر روی زیرلایه شیشه‌ای، با روش تبخیر حرارتی مقاومتی ساخته شدند. لایه کروم برای افزایش چسبندگی طلا به شیشه استفاده شده است و ضخامت آن باید کمتر از ۵ نانومتر باشد تا از تلفات اپتیکی جلوگیری شود. ضخامت تراشه ساخته شده حدودا ۵۵ نانومتر می‌باشد [۸].

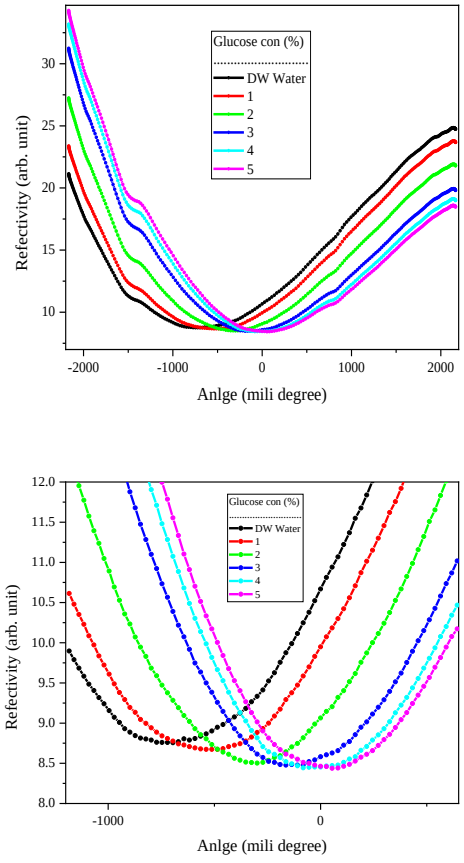
به منظور بررسی عملکرد حسگری تراشه‌ها در تشخیص تغییرات ضریب شکست، از دستگاه Autolab ESPR-IT ساخت کشور هلند استفاده شد و پاسخ تراشه‌ها در برابر محلول‌های گلوکز با غلظت‌های مختلف گلوکز ارزیابی شدند. این مدل دستگاه SPR ٤۰۰۰ میلی‌درجه را جاروب کرده و از زاویه ۲۰۰۰۰- تا ۲۰۰۰ میلی‌درجه را اسکن می‌کند.

ابتدا به منظور از بین بردن آلودگی‌های سطحی، تراشه ساخته شده سه مرتبه با اتانول و آب دی‌یونیزه شستشو داده شد. سپس تراشه با کمک یک قطره روغن ایمرسیون که ضریب شکست آن متناسب با ضریب شکست منشور و زیرلایه می‌باشد (n=1.517) بر روی منشور قرار داده شد. این کار به منظور جلوگیری از پخش‌شدگی نور یا بازتاب‌های مختلف از سطح تراشه انجام می‌گردد. دستگاه دارای کووت دو کاناله می‌باشد و کووت با کمک پیچ مخصوص بر روی تراشه محکم شد و برای هر مرحله، حجم مشخصی از محلول (۵۰ الی ۶۰ میکرولیتر) با استفاده از سوزن‌های دستگاه روی سطح تراشه تزریق شد. شش غلظت مختلف گلوکز ۱، ۲، ۳، ۴ و ۵ درصد، با افزودن ۵۰، ۱۰۰، ۱۵۰، ۲۰۰ و ۲۵۰ میلی‌گرم گلوکز به ۵ میلی‌لیتر آب مقطر تهیه شد. در ابتدا برای رسیدن به سیگنال پایدار، تزریق آب دی‌یونیزه از طریق کووت، بر روی سطح تراشه انجام می‌شود و تا رسیدن به یک سیگنال پایدار، دو تا سه دوره ۱۲۰ ثانیه‌ای را طی کند. سپس به ترتیب، غلظت‌های مختلف گلوکز به سطح تراشه تزریق گردید و تغییرات زاویه تشدید و پاسخ سنسوگرام ثبت گردید.

در این آزمایش‌ها هیچ‌گونه اصلاح شیمیایی یا عامل‌دارسازی زیستی بر روی سطح فلزی انجام نشده است؛ بنابراین تغییرات مشاهده‌شده در سیگنال SPR صرفاً ناشی از تغییر ضریب شکست محیط و برهم‌کنش‌های فیزیکی و غیر اختصاصی محلول با سطح فلز است. در نتیجه، جابجایی زاویه تشدید را می‌توان مستقیماً به تغییرات ضریب شکست محیط دی‌الکتریک مجاور سطح فلزی نسبت داد.

نتایج و بحث

به منظور توصیف رفتار تراشه ساخته شده، نمودار بازتابندگی در برابر زاویه تابش برای غلظت‌های مختلف گلوکز توسط تراشه ساخته شده تحت شرایط یکسان رسم شد. در حالت اولیه که آب دی‌یونیزه به عنوان محیط مرجع روی سطح حسگر تزریق شد، کمینه بازتاب در زاویه مشخصی ۶۹۵/۱۶۴- میلی‌درجه مشاهده شد. پس از تزریق محلول‌های گلوکز با غلظت‌های متفاوت، کمینه بازتاب جابه‌جا می‌شود. به طوری‌که با افزایش غلظت نمونه، زاویه تشدید به سمت مقادیر بالاتر منتقل می‌شود. این رفتار به افزایش ضریب شکست محیط مجاور سطح تراشه طلا نسبت داده می‌شود. افزایش تعداد مولکول‌های گلوکز در محلول باعث تغییر شرایط اپتیکی محیط شده و در نتیجه شرایط جفت‌شدگی نور با پلاسمون سطحی تغییر می‌کند. محور افقی نمودارهای بازتاب دستگاه در محدوده منفی ۲۰۰۰ تا مثبت ۲۰۰۰ میلی‌درجه است. همانطور که در شکل ۲ نشان داده شده است، حداقل زوایای SPR برای غلظت‌های ۱، ۲، ۳، ۴ و ۵ درصد به ترتیب ۵۱۲/۲۵۷-، ۲۹۸/۴۵۴-، ۱۰۸/۸۲۹-، ۸۱/۶۳۷- و ۵۴/۴۳۲ میلی‌درجه است. نتایج حاصل از اندازه‌گیری منحنی‌های بازتاب نشان داد که حضور محلول‌های گلوکز باعث تغییر موقعیت زاویه‌ای تشدید پلاسمون سطحی می‌شود. هچنین، حداقل بازتابندگی حدودا ۸/۵ است.



شکل ۲: نمودار بازتاب برای غلظت‌های مختلف گلوکز (شکل بالا) و نمودار بزرگنمایی شده (شکل پایین)

در سامانه‌های حسگری، عملکرد حسگر، با پارامترهایی از جمله حساسیت و عدد شایستگی (FOM) و FWHM (عرض کامل در نصف حداکثر) محاسبه می‌شود. در این مطالعه، پارامتر حساسیت از طریق رابطه ٤ محاسبه می‌شود:

$$S = \frac{\Delta\theta_{spr}}{\Delta n} = \frac{\theta_{SPR\ (glucose)} - \theta_{SPR\ (water)}}{n_{(glucose)} - n_{(water)}} \qquad (٤)$$

ضریب شکست محلول‌ها از رابطه $n=0.001436 \times C+1.3317$ محاسبه شد که C در این رابطه نشان‌دهنده غلظت بر حسب درصد است [۹]. با توجه به این رابطه ضریب شکست محلول‌های گلوکز با غلظت‌های ۱، ۲، ۳، ٤ و ٥ درصد به ترتیب ۱/۳۳۲۱، ۱/۳۳٤٦، ۱/۳۳٦، ۱/۳۳۷٤ و ۱/۳۳۸۸و ضریب شکست آب نیز ۱/۳۳۱۷ می‌باشد. با توجه به رابطه ٤، پارامتر حساسیت برای هر یک از غلظت‌های گلوکز محاسبه شده و میانگین حساسیت تراشه ساخته شده ۲۰۸ درجه بر RIU محاسبه شد. هچنین میانگین FWHM حدود ۱٤۲٥ میلی‌درجه است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش پاسخ حسگری یک تراشه SPR مبتنی بر لایه طلا در برابر تغییرات ضریب شکست ناشی از محلول‌های گلوکز بررسی شد. نتایج نشان داد که افزایش غلظت گلوکز باعث جابه‌جایی زاویه تشدید پلاسمون سطحی می‌شود. همچنین اندازه‌گیری‌های زمانی نشان داد که تراشه قادر است تغییرات محیطی را به صورت مرحله‌ای ثبت کند. بر اساس نتایج به‌دست‌آمده، تراشه مورد بررسی قابلیت استفاده به عنوان بستر حسگری برای اندازه‌گیری تغییرات ضریب شکست و توسعه حسگرهای SPR را دارد.

سپاسگزاری

از همکاری دانشگاه علوم پزشکی بقیةالله تهران به خاطر امکان استفاده از دستگاه SPR صمیمانه تشکر می‌کنیم.

مرجع‌ها

[1] R. Schasfoort; “History and Physics of Surface Plasmon Resonance”; (2017).
[2] J. Zhou, Y. Wang, & G. Zhang; “State-f-the-art strategies of surface plasmon resonance biosensors in clinical analysis: A comprehensive review”; Coordination Chemistry Reviews, 520, (2024) 216149.
[3] D. Capelli, V. Scognamiglio, R. Montanari; “TrAC, Trends Anal.Chem”; 163 (2023) 117079.
[4] B. D. Gupta and R. Kant; “Opt. Laser Technol”; 101, (2018) 144–161.
[5] E. Kretschmann; “Die Bestimmung optischer Konstanten von Metallen durch Anregung von Oberflächenplasmaschwingungen,” Zeitschrift für Phys. A Hadron. Nucl., 241(4), (1971) 313–324.
[6] L. Novotny and B. Hecht; “Principles of Nano-Optics”; Cambridge University Press, (2012).
[7] Y. Yanase and T. Hiragun; “Surface Plasmon Resonance for Cell-Based Clinical Diagnosis”; *Sensors 14,* (2014), 4948–4959.
[۸] رحیم آبادی، زهره؛ مرادی، مهرداد؛ رمضانعلی طاهری؛ «بررسی عملکرد حسگری تراشه اپتیکی تشدید پلاسمون سطحی ساخته شده بوسیله دستگاه تبخیر حرارتی: کاربرد در سنجش گلوکز»؛ *مجلهٔ نانومقیاس*، سال ۱٤۰٤.
[9] A. Belay and G. Assefa, “Concentration, Wavelength and Temperature Dependent Refractive Index of Sugar Solutions and Methods of Determination Contents of Sugar in Soft Drink Beverages using Laser Lights,” Journal of Lasers, Optics & Photonics, 5(2), 1000187, (2018).

ساخت نانوسیم‌های بلوری سربی با استفاده از روش نانوقالب‌گیری مکانیکی-گرمایی

احمدی عصر بدر، امیررضا [۱]؛ خادمی ، علی [۱]

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

چکیده

برای نخستین بار با استفاده از روش نانوقالب‌گیری حرارتی-مکانیکی ساخت نانوسیم‌های بلورین سربی با قطر میانگین ۱۲۰ نانومتر در داخل قالب آلومینیم اکسید آندیزه شده انجام گردید. با اعمال فشار میانگین ۵۰۰ مگاپاسکال و دمای ۷۰ درجه‌ی سلسیوس در طول ۵۵ دقیقه بر روی ماده اولیه سربی فرآیند نانوقالب گیری انجام گرفت. طول محاسبه شده نظری برای نانوسیم‌ها در شرایط بالا برابر با ۱۳.۳ میکرون می‌باشد. به وسیله میکروسکوپ الکترونی رویشی تشکیل نانوسیم‌ها با قطر مورد انتظار تایید شد (با حداکثر طول ۲.۷ میکرون) و طیف‌سنجی پراش انرژی پرتو ایکس جنس نانوسیم‌های مشاهده شده در تصویربرداری را تایید نمود. با شرایط کاملا یکسان نمونه دیگری از نانوسیم‌ها تهیه و با استفاده از طیف سنجی پراش اشعه ایکس بلوری بودن نمونه مورد بررسی و تایید گردید.

واژه های کلیدی: *ساخت در مقیاس نانو، نانوقالب‌گیری مکانیکی-گرمایی، نانوسیم های سرب*

Fabrication of Crystalline Pb Nanowires Using Thermomechanical Nanomolding (TMNM)

Ahmadi Asrbadr, Amirreza[1]; Khademi, Ali[1]

[1]Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran, Iran

Abstract

For the first time the fabrication of lead (Pb) nanowires with an average diameter of 120nm was done inside an AAO mold using the method of thermomechanical nanomolding (TMNM). This process was done by applying a pressure of 500 MPa at a temperature of 70°C for 55 minutes to the lead feedstock. With said conditions, a theoretical length of 13.3 μm is calculated. With SEM imaging formation of the aforementioned wires was confirmed with expected diameters and EDS analysis confirmed the wires composition to be lead. Another sample was made with the exact conditions and was tested by XRD spectroscopy. This test confirmed that the nanowires are single crystalline.
***Keywords**: Nanofabrication, Thermomechanical nanomolding, Pb nanowires*

PACS No 61.05.C– Nc 07.10.Pz 61.82.Bg 66.30.Fq 68.37.Hk

مقدمه

روش نانوقالب‌گیری مکانیکی-گرمایی به عنوان روشی بسیار انعطاف پذیر برای ساخت مواد تک بعدی مورد توجه قرار گرفته است [۱-۷]. این روش برخلاف روش‌های دیگر ساخت در مقیاس نانو مانند لایه نشانی بخار شیمیایی، نیاز به بهینه سازی دقیق ندارد. به عنوان مثال در فرآیند CVD به خصوص برای ابعاد نانومتری نیاز به بهینه سازی پارامترهایی مانند دما، نرخ ورود گازهای واکنش دهنده، جنس زیرلایه و قرارگیری آن و فشار وجود دارد [۱]. اما در روش نانوقالب‌گیری مکانیکی-گرمایی، تنها با تنظیم دو پارامتر دما (برابر یا بیشتر از حدود نصف دمای ذوب) و فشار وارد شده (در ابعاد چند صد مگاپاسکال) می‌توان نانوسیم بسیاری از مواد (بسیاری از فازهای منظم از جمله فلزات بلورین) را تولید کرد [۲-۷]. این فرآیند، به صورت خودتنظیم، نانوسیم‌هایی تک کریستالی با قطر و ساختار یکنواخت برای فازهای منظم تولید می‌کند [۳].

در ساخت نانوسیم‌هایی با قطر کمتر از ۲۰۰ نانومتر در روش نانوقالب‌گیری مکانیکی-گرمایی، فرآیند حاکم بر تشکیل نانوسیم‌ها

پدیده پخش می‌باشد [۲-۷]. در قطر چند میکرونی یا بیشتر، پدیده پخش دیگر غالب نیست و پدیده لغزش نابجایی در جامدات بلورین غالب می‌گردد [٤] که در اینجا مورد بحث ما نیست.

سرب، ماده ای بسیار نرم و انعطاف پذیر با دمای ذوب پایین (۳۲۷.۵ درجه‌ی سلسیوس یا ٦۰۰.۲ کلوین) می‌باشد [۸]. بنابراین حتی در دمای اتاق (حدود ۳۰۰ کلوین)، که بیش از نصف دمای ذوب سرب برحسب کلوین است، نیز می‌توان قالب‌گیری آن را به شیوه بالا انجام داد. از طرف دیگر چون سرب توده‌ای در دمای ۷.۲ کلوین در فشار اتمسفر خاصیت ابررسانایی پیدا می‌کند[۹]، خاصیت ابررسانایی نانوسیم‌های سربی نیز دور از انتظار نیست.

به دلیل اینکه قطر نانوسیم‌های ساخته شده با این روش می‌تواند قابل مقایسه یا کوچک‌تر از طول همبستگی زوج کوپر (حدود ۹٤ نانومتر[۱۰]) باشد، نشان داده شده که این نانوسیم‌ها خواص متفاوتی با ماده توده‌ای دارند (به عنوان مثال سرب توده‌ای در دمای ۲ کلوین با اعمال میدان ۰.۷٤ kOe به رسانای عادی تبدیل می‌شود، اما برای نانوسیم‌های تک بلور در همین دما با قطرهای ۵۵ و ۷۰ نانومتری، میدان بحرانی به حدود ۲۱ kOe می‌رسد [۱۱].)

پیش از این نانوسیم‌های سربی تک کریستالی با استفاده از روش‌هایی مانند رسوب دهی الکتریکی [۱۱و۱۲] و ریخته‌گری [۱۳] تولید شده بودند. اما تا جایی که نویسندگان این مقاله مطلع هستند، روش نانوقالب‌گیری مکانیکی-گرمایی برای سرب به کار نرفته باشد. در این پژوهش، برای اولین بار، به بررسی ساخت نانوسیم‌های سربی با قطر ۱۲۰ نانومتری به روش مذکور می‌پردازیم.

بررسی کمی پدیده پخش در نانوقالب‌گیری

فرآیند پخش می تواند در اینجا به دو شکل انجام گیرد: پخش از حجم و پخش از فصل مشترک [۲و٤]. آزمایشات مختلف نشان می‌دهند که در ابعاد مورد نظر، پدیده پخش از سطح مشترک غالب است [٤و۵]. بنابراین تنها به پخش از سطح مشترک می‌پردازیم.

چنانچه نانوسیم‌ها را استوانه‌هایی با ارتفاع L و قطر d بگیریم، با استفاده از قانون فیک، می‌توان نشان داد [۲و٤]:

$$L = \sqrt{\frac{8p\Omega t}{k_B T}\frac{\delta D_I}{d}} \qquad (۱)$$

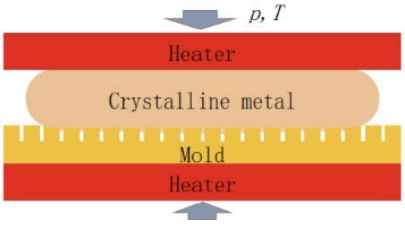
که در آن D_I ضریب پخش اتمی از فصل مشترک، p فشار اعمالی، T دما، Ω میانگین حجم اتم های ماده‌ی اولیه، k_B ثابت بولتزمن، t زمان سپری شده و δ ضخامت لایه فصل مشترک را نمایش می‌دهند. در این حالت نتیجه می‌گردد که طول نانوسیم با $d^{-1/2}$ متناسب است، یعنی نانوسیم‌هایی با قطر کوچک‌تر، سریع‌تر رشد خواهند کرد. نتیجه این که در این روش حد پایینی برای قطر نانوسیم وجود ندارد و نه تنها ساخت نانوسیم‌هایی با قطر کوچک‌تر دشوارتر نیست، بلکه ابعاد کوچک‌تر فرآیند را تسریع می‌کند.

روش انجام آزمایش

قالب، ماده اولیه و آماده سازی ماده اولیه:

ماده اولیه تهیه شده ورقه سربی با خلوص ۹۹.۹۵٪ می‌باشد. برای از بین بردن لایه اکسید تشکیل شده بر روی ماده اولیه پیش از انجام قالب‌گیری سنباده‌زنی انجام گردید، هرچند پس از تشکیل نانوسیم‌ها در مجاورت اکسیژن هوا پوسته‌ای به قطر ۳ تا ٤ نانومتر بر روی آنها تشکیل شده و مانع اکسایش بیشتر نانوسیم می‌گردد [۱۱].

قالب AAO مورد استفاده دارای حفره‌هایی با قطر میانگین ۱۲۰ نانومتر و با واریانس ۱٤ نانومتر می‌باشد. قطر قالب برابر با ۵ میلیمتر و ضخامت آن ۵۰ میکرون است.



شکل ۱: شماتیکی از چگونگی انجام نانوقالب‌گیری مکانیکی-گرمایی[۲]

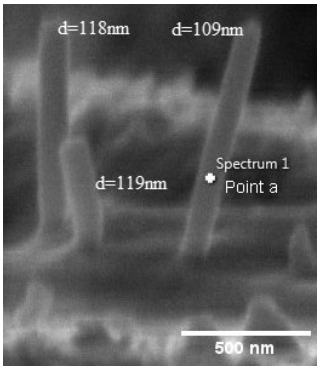
انجام نانوقالب‌گیری:

همان طور که در شکل ۱ دیده می‌شود، در روش نانوقالب‌گیری مکانیکی-گرمایی، پس از افزایش دما به اندازه حدود نصف دمای ذوب ماده مورد نظر، به ماده فشاری در مقیاس چند صد مگاپاسکال اعمال می‌گردد و به دلیل اختلاف فشار، اتم‌ها به داخل نانوحفره‌ها شارش می‌کنند [۲-۷]. در این پژوهش، با استفاده از پرس هیدرولیک فشار ۵۰۰ MPa مدت ۵۵ دقیقه و در دمای ۷۰ درجه سلسیوس بر روی ورق سربی بر روی قالب AAO اعمال گردید.

نتایج و بحث:

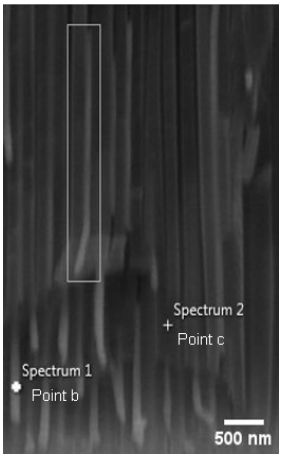
ابتدا طول مورد انتظار نانوسیم‌ها را به دست می‌آوریم. پارامتر δD_I در دمای ۳۴۳ کلوین (دمای انجام آزمایش) برابر است با: 8.1×10^{-16} $sec^{-1}cm^3$ [۱۴]. شعاع اتمی سرب را ۱.۷۵ آنگستروم در نظر می‌گیریم [۱۵] و حجم اتمی را از روی آن حساب می‌کنیم. در نهایت از رابطه‌ی (۱) انتظار داریم در شرایط آزمایش نانوسیم‌هایی با طول ۱۳.۳ میکرون حاصل گردند.

پس از انجام نانوقالب‌گیری، قالب AAO از وسط شکسته شد تا امکان تصویربرداری از نانوسیم‌های داخل آن به وسیله میکروسکوپ الکترونی وجود آید. شکل‌های ۲ و ۳ نتیجه این تصویر برداری را نشان می‌دهند.



شکل ۲: تصویر مقطعی SEM از نانوسیم‌ها. برای بررسی جنس نانوسیم‌ها، تست EDS در نقطه‌ی a انجام شده است که موقعیت آن روی شکل قابل مشاهده است.

قطر نانوسیم‌های تشکیل شده در شکل ۲، با قطر حفره‌های قالب مطابقت دارد. تست EDS برای نقطه a که در جدول ۱ نمایش داده شده درصد قابل توجهی از سرب را نشان می‌دهد. وجود آلومینیم و اکسیژن به خاطر استفاده از قالب AAO و تشکیل اکسیدهای سرب قابل پیش بینی بود. وجود کربن به علت استفاده از چسب کربنی در طول تصویربرداری SEM برای ثابت نگه داشتن نمونه می‌باشد و به مراحل ساخت نانوسیم‌ها مرتبط نیست.

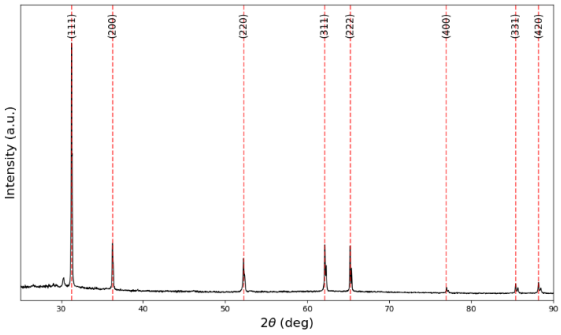


شکل ۳: تصویر مقطعی از قالب شکسته شده. در اینجا دیده می‌شود که حین دونیم کردن قطعه، نانوسیم‌ها از ماده اولیه کنده شده و به قالب چسبیده‌اند. نانوسیم مشخص شده در کادر به نظر بلندترین می‌رسد و طول ۲.۷ میکرون و قطر ۹۹ نانومتری دارد. در دو نقطه مشخص شده c و b تست EDS انجام گرفته است.

به نظر می‌رسد در شکل ۳ ساختارهای میله مانند با رنگ روشن‌تر، نانوسیم‌های سربی مورد نظر باشند. طیف EDS نقطه‌ای این فرض را تایید می‌کند. در نقطه b که در جدول ۱ و شکل ۳ مشخص شده است و بر روی یکی از نانوسیم‌ها قرار گرفته، درصد جرمی دوبرابری سرب را در مقایسه با نقطه c که بر روی پیش‌زمینه قرار دارد شاهد هستیم. اندازه قطر ۹۹ نانومتری نیز با فرضیات قبلی سازگار به نظر می‌رسد. متاسفانه چند تکه شدن نانوسیم‌های سربی در هنگام شکستن قالب به دو بخش موجب شد که اندازه‌گیری طول کامل نانوسیم‌ها ناممکن شود. علت این که طول ۱۳ میکرونی در تصاویر میکروسکوپ الکترونی دیده نشده است نیز می‌تواند به علت شکسته شدن نانوسیم‌ها در هنگام شکستن قالب باشد.

جدول ۱: نتیجه طیف سنجی EDS نقاط شکل ۲ و ۳

عنصر	درصد جرمی نقطه a (شکل ۲)	درصد جرمی نقطه b (شکل ۳)	درصد جرمی نقطه c (شکل ۳)
Pb	٦٤.٨٢	٤٧.٥٤	٢٣.١٧
O	١٢.٩١	١٩.٨٨	٣٠.٤٧
Al	٧.٦٦	٢١.٠٣	٢٩.٥٠
C	١٤.٦١	١١.٥٦	١٦.٨٦
مجموع	١٠٠.٠٠	١٠٠.٠٠	١٠٠.٠٠



شکل ٤: طیف XRD نمونه حاصل از نانوقالب‌گیری که دقیقا همانند نمونه استفاده شده در عکسبرداری توسط SEM آماده شده است. خطوط قرمز نقطه‌چین پیک‌های استاندارد سرب بلوری را نشان می‌دهند. یک پیک مرتبط با منوکسید سرب در ۳۰.۳۲ درجه مشاهده می‌گردد.

شکل ٤ طیف XRD نمونه حاصل از نانوقالب‌گیری را نشان می‌دهد. مطابق منبع [١٦]، نیز تمامی قله‌های مشاهده شده نمونه منطبق با سرب بلوری می‌باشند، به جز یک قله در ۳۰.۳۲ درجه که مربوط به صفحه (۲۰۰) منوکسید سرب می‌باشد [١٧]. تشکیل اکسیدهای سرب را نیز از ابتدا انتظار داشتیم. از این طریق بلوری بودن نمونه ثابت می‌گردد.

در طیف XRD حاصل از نانوسیم‌های به دست آمده از طریق لایه نشانی الکتریکی [١٢] و ریخته‌گری [١٣] نیز قله‌های بدست آمده مانند شکل ٤ منطبق با صفحات سرب بلورین هستند، هرچند شدت نسبی قله‌ها بسته به قطر نانوسیم‌ها تغییر می‌کند [١٣].

بنابراین روش نانوقالب‌گیری مکانیکی–گرمایی با موفقیت در مورد سرب انجام شد. از آنجایی که این روش برای ساخت نانوسیم‌های عناصر بلورین فلزی Cu، Au، Ag، Bi و Pt با موفقیت انجام شده است[٧]، انتظار موفقیت این روش برای نانوسیم‌های سربی نیز می‌رفت.

نتیجه‌گیری

نانوسیم‌های سربی به قطر ۱۲۰ نانومتر با روش نانوقالب‌گیری مکانیکی–گرمایی با طول میکرونی در قالب AAO رشد یافتند (بیشینه طول ۲.۷ میکرون در SEM مشاهده شد). وجود و جنس این نانوسیم‌ها با EDS و SEM بررسی شد. با استفاده از XRD به بلوری بودن ساختارهای مذکور پی بردیم.

منابع:

[1] Kiani et al.;" Searching for materials for next-generation on-chip interconnects", *Newton* (2025)
[2] Z. Liu et al.; "Nanomolding of Crystalline Metals: The Smaller the Easier"; *Phys. Rev. Lett*. **122**, 036101 (2019)
[3] N. Liu et al.; "General Nanomolding of Ordered Phases"; *Phys. Rev. Lett.* **124**, 036102 (2020)
[4] N. Liu et al.; "Unleashing nanofabrication through thermomechanical nanomolding"; *Sci. Adv.* **7** (47), eabi4567 (2021)
[5] Quynh P. Sam et al.: "Nanomolding of Two-Dimensional Materials"; *ACS Nano* **2024** *18* (1), 1110-1117
[6] A. Raj et al.; "Nanomolding of Gold and Gold−Silicon Heterostructures at Room Temperature"; *ACS Nano* **2021**, *15*, 14275−14284 (2021)
[7] Z. Liu; "One-step fabrication of crystalline metal nanostructures by direct nanoimprinting below melting temperatures"; *Nature Communications* **volume 8**, Article number: 14910 (2017)
[8] Lide, D. R., ed.; "*CRC Handbook of Chemistry and Physics*" (85th ed.) (2005).
[9]H. A. Boorse, D. B. Cook, and M. W. Zemansky; "Superconductivity of Lead"; *Phys. Rev*. **78**, 635 (1950)
[10] J. J. Hauser; "Measurement of the coherence distance of a pure type-I superconductor"; *Phys. Rev. B* **10**, 2792 (1974)
[11] J. Wang et al.;" Superconductivity in single crystalline Pb nanowires contacted by normal metal electrodes"; *Physical Review B* **86**, 035439 (2012)
[12] Y. T. Pang et al.; "Arrays of ordered Pb nanowires with different diameters in different areas embedded in one piece of anodic alumina membrane"; *J. Phys.: Condens. Matter* **14** 11729 (2002)
[13] Jung-Hsuan Chen *et al.; "*Microstructure and Properties of Pb Nanowires Fabricated by Casting";2008 *Jpn. Appl. Phys.* **47** 4815
[14] D. Gupta and K. K. Kim; "Grain-boundary self-diffusion in Pb"; *Journal of Applied Physics* **51**, 2066 (1980)
[15] Callister; "*Materials Science and Engineering*"; Wiley (1994)
[16] Swanson, Tatge., *Natl. Bur. Stand. (U.S.), Circ. 539*, **I**, 34, (1953)
[17] Kay, M.I., "*Acta Crystallographica*" (1,1948-23,1967), **14**, 80, (1961)

LK-99 و چالش های روبرو

اصغری ، زهرا؛ دادمهر، وحید

دانشکده فیزیک دانشگاه الزهرا ، آزمایشگاه پژوهشی مغناطیس و ابررسانا ، تهران، ایران

گروه نانو فیزیک، دانشگاه الزهرا ، تهران

چکیده

در این مقاله، ادعای ابررسانایی دمای اتاق در فشار محیطی برای ماده LK-99 با ساختار آپاتیت اصلاح‌شده ($Pb_9Cu(PO_4)_6O$) از منظر نظری و تجربی مورد بررسی و نقد جامع قرار گرفته است. محاسبات اصول اولیه و نظریه الیاشبرگ نشان می‌دهند که پارامتر جفت‌شدگی الکترون–فونون در فازهای پایدار این ماده بسیار ضعیف (۰/۰۵ تا ۰/۳ $\lambda \approx$) است و دمای بحرانی پیش‌بینی‌شده از فرمول مک‌میلان تنها به ۱ تا ۲ کلوین می‌رسد. از منظر ساختاری، اختلاف انرژی ۱/۰۸ eV میان دو موقعیت Pb1 و Pb2 در دمای سنتز، احتمال نشستن مس در موقعیت مطلوب Pb1 را به نسبت زیادی کاهش می‌دهد و سنتز هدفمند فاز ابررسانا را عملاً ناممکن می‌سازد. مدل چاه کوانتومی ابررسانا (SQW) و پدیده شبه‌جوزفسون پیشنهادی، اگرچه مفهوماً جالب هستند، فاقد پشتیبانی کمّی مستقل‌اند. از نظر تجربی، سنتز تک‌کریستال‌های خالص LK-99 رفتار عایق با مقاومت چند مگااهم را اثبات کرد و نیم‌شناوری مشاهده‌شده به اثرات فرومغناطیسی ناخالصی Cu_2S نسبت داده شد.

واژه های کلیدی: *ابررسانای دمای اتاق، ساختار آپاتیت، چاه کوانتومی ابررسانا.*

LK-99 and the challenges it faces

Asghari, Zahra ; Daadmehr, Vahid

Faculty of Physics, University of Alzahra, AlZahra Magnetism and Superconductor Research Laboratory,Tehran,Iran
Nanophysics Department, Alzahra University, Tehran

Abstract

This paper provides a comprehensive theoretical and experimental review and critique of the claim of room-temperature superconductivity at ambient pressure for the LK-99 material with a modified apatite structure ($Pb_9Cu(PO_4)_6O$). First-principles calculations and Eliashberg theory indicate that the electron-phonon coupling parameter in the stable phases of this material is very weak ($\lambda \approx 0.05$ to 0.3), and the critical temperature predicted by the McMillan formula reaches only 1 to 2 K. From a structural perspective, an energy difference of 1.08 eV between the Pb1 and Pb2 sites at the synthesis temperature reduces the probability of copper occupying the preferred Pb1 site Reduces by a large proportion, rendering the targeted synthesis of the superconducting phase practically impossible. Although the Superconducting Quantum Well (SQW) model and the proposed quasi-Josephson phenomenon are conceptually intriguing, they lack independent quantitative support. Experimentally, the synthesis of pure LK-99 single crystals demonstrated insulating behavior with megaohm-range resistance, and the observed semiconductivity was attributed to the ferromagnetic effects of Cu2S impurities.

***Keywords**: Room-temperature superconductor, Apatite structure, Superconducting Quantum Well (SQW).*

PACS No.۷۰,۷۴,۸۱

مقدمه

ابررسانایی یکی از شگفت‌انگیزترین پدیده‌های فیزیک ماده چگال است که در آن مقاومت الکتریکی ماده به‌طور کامل از بین می‌رود. از زمان کشف این پدیده، دستیابی به ابررسانایی در دمای اتاق و فشار محیطی به یکی از بزرگ‌ترین اهداف پژوهشی در فیزیک تبدیل شده است. مکانیزم پایه‌ای ابررسانایی بر اساس نظریه BCS بر همراهی الکترون‌ها با فونون‌ها، یعنی نوسان‌های شبکه اتمی ماده، استوار است. در شرایط دمای پایین، زوج‌های الکترونی–فونونی می‌توانند جریان الکتریکی را بدون هیچ‌گونه مقاومتی منتقل کنند.گروه‌های پژوهشی بسیاری نیز در دماهای پایین و فشارهای بسیار بالا به ابررسانایی دست یافتند[۱].

در این میان، رویداد مهمی در تابستان ۲۰۲۳ رخ داد. لی و همکاران در یک مقاله منتشرشده در arXiv، ادعا کردند که ماده‌ای

با نام LK-99 را سنتز کرده‌اند که اولین ابررسانای دمای اتاق در فشار محیطی است. این ماده از ترکیب سرب، مس، فسفر و اکسیژن با ساختار آپاتیت اصلاح‌شده ($Pb_9Cu(PO_4)_6O$) ساخته شده بود[۲]. این ادعا موجی از هیجان و توجه گسترده در جامعه علمی جهان برانگیخت و در اوت ۲۰۲۳ حدود ۵۰ مقاله برای بررسی و تکرار این نتایج منتشر شد.

با این حال، بررسی‌های گسترده‌ای که در پی این ادعا انجام شد، نتایج متفاوتی به دست داد. تحقیقات نشان داد که رفتارهای ابررسانایی که در LK-99 مشاهده شده بود، عمدتاً ناشی از ناخالصی Cu_2S و انتقال فازی آن در دمای حدود ۴۰۰ کلوین بوده است[۷]. مطالعات تئوری نیز نشان دادند که اگرچه LK-99 دارای باندهای تخت در نزدیکی سطح فرمی است، این ویژگی به تنهایی ابررسانایی را تضمین نمی‌کند[۴،۵]. سنتز تک‌کریستال‌های خالصی از LK-99 که رفتار عایق با مقاومت چندین مگااهم از خود نشان دادند، به‌طور قطعی ابررسانایی این ماده را رد کرد و اجماع علمی تا اواخر ۲۰۲۴ به این نتیجه رسید که LK-99 نه ابررسانا، بلکه یک عایق یا نیمه‌رسانا است[۵،۶].

با وجود این شکست، ماجرای LK-99 نشان داد که جستجو برای ابررسانای دمای اتاق همچنان یکی از پرشورترین عرصه‌های پژوهشی فیزیک است و جامعه علمی با حساسیت و سرعت بالا آماده بررسی هر ادعای جدیدی در این زمینه است. در این مقاله، به بررسی دقیق‌تر ساختار، خواص و دلایل شکست LK-99 در دستیابی به ابررسانایی پرداخته می‌شود.

جزییات آزمایشگاهی کار تجربی

در این مقاله ما ابتدا با استفاده ازآنالیزحرارتی TG-DTA دماهای هر مرحله از سنتز را به صورت تجربی بدست آوردیم تا اطمینان کامل داشته باشیم از دماهای گزارش شده در مقالات و سپس در سه مرحله سنتز دقیق LK-99 انجام شد و محصول نهایی ($Pb_9Cu(PO_4)_6O$) بدست آمد.

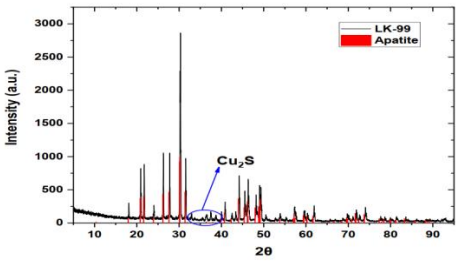
برای این کار ما ابتدا نسبت مولی مساوی از پودرهای PbO و $PbSO_4$ به مقدار ۰/۰۸۲۵۹ گرم مخلوط می کنیم و سپس درcrucible دستگاه ریخته و دما را تا ۱۰۰۰ درجه بالا می بریم تا دمای دقیق واکنش را بدست بیاوریم که با نتایج بدست آمده دماهای ۷۲۵ و ۵۵۰ و ۹۲۵ به ترتیب تایید شد بر طبق مقاله اصلی[۲] .

سپس در مرحله اول سنتز نمونه LK-99 ، از روش واکنش حالت جامد به صورت دو مرحله‌ای دقیق استفاده شده است. ما در مرحله اول، lanarkite یا Pb_2SO_5 با مخلوط کردن پودرهای PbO و $PbSO_4$ در نسبت مولی دقیق ۱:۱ در هاون عقیق به مدت ۲ ساعت به دست آوردیم. این مخلوط سپس به بوته آلومینایی منتقل شده و در لوله کوارتز تحت گاز نیتروژن به مدت ۲۴ ساعت در دمای ۷۲۵ درجه سلسیوس حرارت داده می‌شود. پس از اتمام واکنش، پودر سفید رنگ lanarkite حاصل شده و با هاون مجدداً خرد می‌گردد تا کاملاً یکنواخت شود.

در مرحله دوم، فسفید مس یا Cu_3P را که از طریق تفجوشی دمای بالای مخلوط پودرهای مس Cu خالص (۹۹/۹۹٪) و فسفر P (۹۹/۹۹٪) با نسبت مولی ۳:۱ تهیه می شود را سنتز کردیم. این پودرها درهاون عقیق مخلوط شد و به لوله کوارتز منتقل گردید. لوله تحت خلاء بسیار بالا یعنی 10^{-5} تور آب‌بندی شد و به مدت ۴۸ ساعت در دمای ۵۵۰ درجه سلسیوس در کوره واکنش داد.

حالا در مرحله اصلی سنتزLK-99 ، lanarkite و Cu_3P به نسبت مولی ۱:۱ به طور کاملاً یکنواخت در هاون عقیق مخلوط کردیم. این مخلوط به لوله واکنش منتقل شده و مجدداً تحت خلاء 10^{-5} تور آب‌بندی گردید. واکنش اصلی در دمای بسیار بالا ۹۲۵ درجه سلسیوس به مدت ۱۰ ساعت انجام شد.

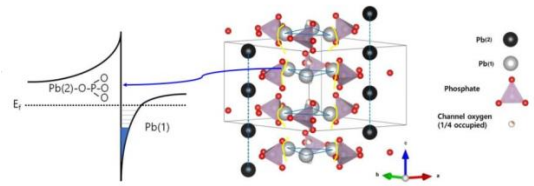
پارامترهای شبکه بلوری نمونه آماده شده LK-99، $a = 9.843$ Å و $c = 7.428$ Å بدست آمد که نسبت به آپاتیت سربی خالص (a = ۹،۸۶ Å، $c = 7.431$ Å) حدود ۰/۴۸٪ کاهش حجم نشان می‌داد که این اطلاعات دقیق از طریق نرم افزار MAUD با روش ریتولد و به کمک ایجاد یک نمونه شاهد بدست آمده است. در شکل ۱ طیف XRD بلور LK-99 که توسط لی و همکاران بدست آمده قابل مشاهده می باشد[۲]. فرآیند سنتز از طریق واکنش حالت جامد در دمای بالا انجام شد و جایگزینی جزئی سرب با مس در ساختار آپاتیت، کرنش ساختاری ایجاد کرده و مسئول پیدایش ابررسانایی در دمای اتاق و فشار محیطی است.



شکل ۱ : طیف XRD از بلور LK-99 [۲] .

ایده چاه کوانتومی ابررسانا

ایده‌ی چاه کوانتومی ابررسانا (SQW) در ماده‌ی LK-99، مبتنی بر ایجاد یک محیط دوبعدی برای حرکت الکترون‌هاست. طبق این فرضیه، جایگزینی مس به‌جای سرب باعث ایجاد تنش و انقباض در شبکه می‌شود که در نهایت منجر به تغییر در هندسه پیوندهای ستون‌های Pb1 می‌گردد. این تغییرات ساختاری، پتانسیل الکترونی را در نواحی مرزی به‌صورت چاله‌های باریک و کم‌انرژی تغییر می‌دهد که الکترون‌ها در آن‌ها محبوس شده و یک «گاز الکترونی دوبعدی» تشکیل می‌دهند. از دیدگاه نظری، این تمرکز و نظمِ خاص در لایه‌های بسیار نازک، چگالی حالت را افزایش داده و برهم‌کنش‌های لازم برای تشکیل جفت‌های کوپر را فراهم می‌کند. شکل ۲ این پدیده را نشان می دهد[۲].



شکل ۲ : مدل چاه کوانتومی[۲].

پدیده نیم شناوری

جذاب‌ترین شواهد بصری که ادعای لی و همکاران را در سطح جهانی پربازتاب کرد، مشاهده نیم‌شناوری در نمونه‌های کوچک LK-99 روی مغناطیس دائمی بود. این رفتار در ابتدا به دو شکل تفسیر شد: نخست به‌عنوان نشانه‌ای از دیامغناطیسی قوی مشابه اثر مایسنر در ابررساناها، و دوم به‌عنوان شواهدی از پین شدن شار مغناطیسی که از ویژگی‌های مشخص ابررساناهای نوع دوم است. در یک ابررسانای واقعی، اثر مایسنر باعث اخراج کامل شار میدان مغناطیسی از داخل ماده شده و شناوری پایدار و مستقل از تماس فیزیکی ایجاد می‌کند[۲،۳] .بررسی‌های بعدی نشان داد آنچه در LK-99 مشاهده می‌شود از ترکیب اثرات فرومغناطیسی و دیامغناطیسی ضعیف ناشی می‌شود.

واکنش جامعه علمی و رد ادعا

یکی از محکم‌ترین ردیه‌های نظری توسط کابزاس و همکاران ارائه شد. این گروه با انجام محاسبات اصول اولیه (DFT) و نظریه الیاشبرگ نشان دادند که LK-99 در دو فاز بلوری قابل تشکیل است:

۱–فاز هگزاگونال: دارای پارامتر جفت‌شدگی الکترون–فونون نسبتاً بالاتر (λ بزرگ‌تر)، اما از نظر ارتعاشی ناپایدار است (فرکانس‌های فونونی موهومی دارد).

۲–فاز تری‌کلینیک: پایداری ارتعاشی بالاتری دارد، اما پارامتر جفت‌شدگی آن بسیار ضعیف است (۰/۰۵ تا ۰/۱ ≈ λ).

نتیجه کلیدی این بود که هیچ فاز پایداری با λ کافی برای ابررسانایی وجود ندارد. با جایگذاری این مقادیر در فرمول مک‌میلان دمای بحرانی پیش‌بینی‌شده به ۱ تا ۲ کلوین می‌رسد، نه ۳۰۰ کلوین[۵].

نظریه الیاشبرگ –چرا مکانیزم فونونی شکست خورد؟[۴]

نظریه الیاشبرگ به‌عنوان تعمیم‌یافته‌ی نظریه BCS، پیش‌بینی دقیق‌تری از T_c ارائه می‌دهد. بر این اساس، T_c به عامل اصلی چگالی حالات در سطح فرمی بستگی دارد که به دلیل وجود باندهای تخت ماتریس المان جفت‌شدگی الکترون –فونون بسیار ضعیف است. برای دو جایگاه سرب که مس جایگزین آن‌ها شده: λ برای Pb1 ≈ ۰/۱ تا ۰/۳ (بسیار ضعیف) و برای Pb2 ≈ ۰/۰۵ (تقریباً صفر) بدست آمد. اگرچه نوارهای تخت چگالی بالای حالات در سطح فرمی ایجاد می‌کنند، اما این شرط لازم است نه کافی. ضعف شدید جفت‌شدگی الکترون–فونون به این معناست که مکانیزم BCS–فونونی نمی‌تواند دمای بحرانی بالا را توضیح دهد. در صورت صحت ابررسانایی، باید مکانیزم دیگری مانند نوسانات مغناطیسی یا برهم‌کنش‌های الکترونی مطرح شود[۴،۵].

رد ادعای استدلال کرنشی با دو مانع بنیادین روبروست. نخست آنکه کرنش مؤثر تنها در صورتی ایجاد می‌شود که مس در موقعیت

Pb1 قرار گیرد، که از نظر ترمودینامیکی بعید است. دوم آنکه حتی با فرض وجود کرنش، محاسبات الیاشبرگ ثابت کردند جفت‌شدگی الکترون–فونون در هر دو فاز پایدار چنان ضعیف است که T_c بالا را توجیه نمی‌کند[۴] .

از موارد مهم دیگرمسئله پایداری انرژی و جایگاه‌های مس است. محاسبات DFT گریفین یکی از اساسی‌ترین موانع ساختاری LK-۹۹ را آشکار کرد[۶].. در ساختار آپاتیت سرب–فسفات دو موقعیت برای اتم سرب وجود دارد که از نظر خواص الکترونیکی و پایداری انرژی کاملاً متضادند شکل۲ [۲].

موقعیت Pb1 در چارچوب اصلی ساختار قرار دارد و با تتراهدرال های PO_4 گوشه‌اشتراکی دارد. جایگزینی مس در این موقعیت، همسایگی اکسیژن را از ۹ به ۶ کاهش داده و منشور مثلثی تحریف‌یافته‌ای با فواصل نابرابر Cu-O (۲/۰۶ Å و ۲/۳۵ Å) می‌سازد. این محیط خاص باعث ظهور نوارهای تخت Cu-d با پهنای ~۱۳۰ meV در سطح فرمی می‌شود که با شکاف ۱۶۰ meV از سایر نوارهای والانس جدا هستند؛ دقیقاً همان ویژگی الکترونیکی مطلوب برای ابررسانایی. اما این موقعیت از نظر انرژی ناپایدار است[۶].

موقعیت Pb2 در ساختار شش‌ضلعی مرکزی قرار دارد. جایگزینی مس در اینجا ساختار شش‌ضلعی آپاتیت را از هم می‌پاشد، تقارن را کاهش می‌دهد و محیط چهاروجهی با ۴ همسایه اکسیژن ایجاد می‌کند. در این حالت هیچ نوار تختی ظاهر نمی‌شود و خواص الکترونیکی با ابررسانایی بی‌ارتباط است؛ اما این موقعیت ۱/۰۸ eV پایدارتر از Pb1 است[۶].

گروه‌های تجربی — نقش ناخالصی Cu_2S:

یکی از مهم‌ترین یافته های تجربی که ادعای LK-۹۹ را زیر سؤال برد، شناسایی نقش ناخالصی Cu_2S بود. چندین گروه مستقل از پژوهشگران نشان دادند که Cu_2S در دمای حدود ۴۰۰ کلوین دچار انتقال فاز می‌شود که با افت ناگهانی مقاومت همراه است که شبیه به رفتار ابررسانایی به نظر می‌رسد. اثر مایسنر جزئی مشاهده‌شده نیز می‌تواند از خواص دیامغناطیسی ناخالصی ناشی شود.قطعی‌ترین رد تجربی از طریق سنتز تک‌کریستال خالص LK-۹۹ حاصل شد. گروه‌هایی که موفق به تهیه نمونه‌های تک‌کریستال با خلوص بالا شدند، یافتند که مقاومت الکتریکی نمونه‌ها در حد چندین مگااهم است. رفتار ماده با عایق یا نیمه‌رسانا انطباق دارد و هیچ‌گونه افت مقاومت یا اثر مایسنر قابل‌استناد مشاهده نشد. [۷].

نتیجه گیری

بررسی جامع نظری و تجربی LK-۹۹ نشان می‌دهد که ادعای ابررسانایی دمای اتاق در فشار محیطی، از پایه‌های استواری برخوردار نبود. محاسبات الیاشبرگ و فرمول مک‌میلان نشان دادند که پارامتر جفت‌شدگی الکترون–فونون در هر دو فاز پایدار این ماده (۰/۰۵ تا ۰/۳ $\lambda \approx$) آن‌قدر ضعیف است که دمای بحرانی را در محدوده ۱ تا ۲ کلوین نگه می‌دارد. که حتی اگر LK-۹۹ ابررسانا بود، مکانیزم BCS–فونونی به‌هیچ‌وجه قادر به توضیح آن نبود. اختلاف انرژی ۱/۰۸ eV میان دو موقعیت Pb1 و Pb2؛ سنتز هدفمند مس در موقعیتی که نوارهای تخت و خواص الکترونیکی مطلوب ایجاد کند، از نظر ترمودینامیکی عملاً ناممکن است. سنتز تک‌کریستال‌های خالص LK-۹۹ با مقاومت چند مگااهم، رفتار عایق این ماده را اثبات کرد. نیم‌شناوری مشاهده‌شده ناشی از ترکیب اثرات فرومغناطیسی و دیامغناطیسی ضعیف شناسایی شد، نه اثر مایسنر. ناخالصی Cu_2S با انتقال فازساختاری در ~۴۰۰ کلوین نیز توضیح قانع‌کننده‌ای برای افت‌های مقاومت گزارش‌شده در نمونه‌های اولیه فراهم کرد. اجماع علمی تا اواخر ۲۰۲۴ به‌روشنی LK-۹۹ را نه ابررسانا، بلکه عایق یا نیمه‌رسانا معرفی کرد.

مرجع‌ها

[1] Bardeen, J., Cooper, L. N., & Schrieffer, J. R. “Theory of superconductivity”. Physical Review, 108(5), 1175–1204. (1957).
[2] Lee, S., Kim, J., H. & Kwon, Y.W; “The First Room-Temperature Ambient-Pressure Superconductor”; - arXiv:2307.12008 Le(2023)
[3] Lee, S., Kim, J., Kim, H.-T., et al.; “Superconductor $Pb_{1\ 0\ -\ x}Cu_x(PO_4)_6O$ showing levitation at room temperature and atmospheric pressure and mechanism”; arXiv:2307.12037 (2023).
[4] Javiera, Cabezas-Escares., Nicolás, F. Barrera., Carlos, A Cardenas., Francisco, MunozFrancisco Munoz. “Theoretical insight on the LK-99 material”, arXiv:2308.01135v1 (Aug 2023)
[5] Cabezas-Escares, J., et al. “Electronic Structure and Vibrational Stability of Copper-substituted Lead Apatite (LK-99)” arXiv:2308.01135 (2024).
[6] Griffin, S.M. “Origin of correlated isolated flat bands in copper substituted lead phosphate apatite”; arXiv:2307.16892 (Lawrence Berkeley National Laboratory) (2023).
[7] T. Habamahoro[1,2]; T. Bontke[1,2]; M. Chirom[2,3]; Z. Wu1,[2]; J. M. Bao[2,3,4]; L. Z. Deng1,2*; C. W. Chu1,2*; “Replication and study of anomalies in LK-99—the alleged ambient pressure, room-temperature superconductor” (2024) .

حسگر تشدید پلاسمون سطحی خودتمیزشونده متشکل از آلومینیوم و نانودیسک‌های دی اکسید تیتانیوم برای پایش محیط زیست با حساسیت بالا، هزینه کم و قابلیت استفاده مجدد

ستارالعیوب ، علی ؛ اخوان ، امید ؛ خادمی ، علی

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شریف ، خیابان آزادی ، تهران

چکیده

حسگرهای تشدید پلاسمون سطحی (SPR) که در ناحیه آبی و فرابنفش طیف کار می‌کنند، به دلیل کاهش عمق نفوذ پلاسمون‌های سطحی، حساسیت سطحی بالا یی دارند، اما کاربرد عملی آن‌ها با محدودیت‌هایی مانند تلفات نوری مواد، پیچیدگی ساخت، و کثیف‌شدن سطح مواجه است. در این مقاله، یک حسگر SPR با آرایه‌ای دوره‌ای از نانودیسک‌های TiO_2 بر روی یک لایه نازک آلومینیوم، و تابش نور 405 نانومتر پیشنهاد می‌شود. نانودیسک‌های TiO_2 علاوه بر تقویت خواص پلاسمونی، می‌توانند به عنوان یک دی‌الکتریک فوتوکاتالیست که قادر به تمیزکردن سطح حسگر تحت تابش فرابنفش است، عمل کنند. عملکرد سامانه پیشنهادی با شبیه‌سازی با روش المان محدود بررسی شد و حسگر، حساسیتی برابر 21deg/RIU و پهنای خط 2.01 درجه نشان داد که آن را در زمره حسگرهای باکیفیت در طیف آبی-فرابنفش قرار می‌دهد. به دلیل استفاده از آلومینیوم، لیزر ارزان قیمت و نانوساختارهای کم هزینه TiO_2 ، طراحی پیشنهادی مسیری امیدوارکننده به سوی پایش کم‌هزینه محیط زیست و نسل بعدی حسگرهای پلاسمونی خود-تمیزشونده ارائه می‌دهد .

واژه های کلیدی: *رزونانس پلاسمون سطحی، پلاسمونیک آلومینیوم، دی‌اکسید تیتانیوم، پایش محیط زیست، بازتولید سطح*

Self-cleaning Surface Plasmon Resonance Sensor with Aluminum and TiO_2 Nanodisks for High Sensitivity, Low-cost and Reusable Environmental Monitoring

Sattaraloyube, Ali; Akhavan, Omid; Khademi, Ali

Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran

Abstract

Surface plasmon resonance (SPR) sensors in the blue/UV range offer enhanced surface sensitivity due to reduced field penetration depth, but face challenges from optical losses, fabrication complexity and surface fouling. Here, we propose a grating-coupled SPR sensor using TiO_2 nanodisks on a smooth aluminum film under 405 nm illumination. The TiO_2 nanodisks enhance plasmonic effects, and are also able to act as a photocatalytic interface that enables sensor regeneration under UV light. Finite-element simulations show a sensitivity of 21 deg/RIU and linewidth of 2.01°, competitive with other aluminum-based SPR sensors. With low-cost aluminum, commercial 405 nm lasers, and fabrication-tolerant TiO_2 structures, this design offers a path to low-cost and self-regenerating environmental monitoring sensors.

***Keywords**: Surface Plasmon Resonance (SPR), Aluminum, Titanium Dioxide (TiO_2), Environmental Monitoring, Surface Regeneration*

PACS No. 81

مقدمه

در دهه‌های اخیر، در پی گسترش فعالیت‌های صنعتی، توسعه شهرنشینی و افزایش بهره‌برداری‌های کشاورزی، آلودگی محیط زیست به یکی از مهم‌ترین چالش‌های جهانی تبدیل شده است. ورود آلاینده‌های مختلف از جمله ترکیبات آلی، آفت‌کش‌ها و رنگ‌های صنعتی به منابع آبی می‌تواند پیامدهای جبران‌ناپذیری برای

اکوسیستم‌ها و سلامت انسان به همراه داشته باشد. ازاین‌رو، توسعه روش‌های سریع، حساس و تجدیدپذیر برای پایش آب‌های محیط زیست اهمیت فزاینده‌ای یافته است [۱]. حسگرهای مبتنی بر تشدید پلاسمون سطحی (SPR) به دلیل حساسیت بالا و قابلیت آشکارسازی بدون برچسب، از گزینه‌های مطرح برای این کاربرد هستند [۲]. در این سامانه‌ها، جذب مولکول‌ها بر سطح حسگر موجب تغییر ضریب شکست محیط و در نتیجه جابه‌جایی تشدید پلاسمونی می‌شود که مبنای آشکارسازی در آن‌هاست [۲و۳]. در این حسگرها، استفاده از طیف طول موج‌های کوتاه‌تر در ناحیه آبی–فرابنفش می‌تواند حساسیت سطحی حسگر را افزایش داده و آشکارسازی مؤثرتر آلاینده‌های کوچک را امکان‌پذیر سازد. در این طیف نوری، فلزات پلاسمونی رایجی مانند طلا و نقره به دلیل گذارهای بین‌ترازی و افزایش تلفات اپتیکی، عملکرد مطلوبی برای حسگرهای SPR ندارند و در نتیجه آلومینیوم به یکی از گزینه‌های مناسب برای این بازه طیفی تبدیل می‌شود [٤]. اما سامانه‌های مبتنی بر آلومینیوم معمولاً با پهنای تشدید نسبتاً زیاد و افت کیفیت تفکیک‌پذیری روبه‌رو هستند [٤]. از سوی دیگر، در کاربردهای محیط‌زیستی، آلودگی و پوشش سطح حسگر می‌تواند دقت اندازه‌گیری و قابلیت استفاده مجدد را کاهش دهد [٥]. بنابراین طراحی حسگرهای قابل استفاده مجدد، به‌ویژه برای کاربردهای پایش محیط زیست، از اهمیت بالایی برخوردار است. بر این اساس، در این پژوهش یک حسگر SPR مبتنی بر آرایه نانودیسک‌های TiO_2 روی لایه آلومینیوم در طول موج 405 نانومتر پیشنهاد و بررسی شده است. نانودیسک‌های TiO_2 در این ساختار علاوه بر تأمین جفت‌شدگی و تقویت پاسخ پلاسمونی، به دلیل خواص فوتوکاتالیستی خود می‌توانند به بازتولید و خودتمیزشوندگی سطح نیز کمک کنند [٦]. استفاده از آلومینیوم، هندسه ساده نانودیسک‌های TiO_2 و یک منبع نوری 405 نانومتر، این پیکربندی را به گزینه‌ای مناسب برای حسگرهای فشرده و قابل حمل تبدیل می‌کند

مبانی نظری و روش محاسباتی

پلاریتون‌های پلاسمون سطحی (SPP) مدهای الکترومغناطیسی مقید در فصل مشترک فلز–دی‌الکتریک هستند که از برهم‌کنش نور فرودی با نوسانات جمعی الکترون‌های آزاد فلز ایجاد می‌شوند. از آنجا که بردار موج این مدها همواره از بردار موج نور کمتر است، تحریک مستقیم این مدها توسط نور فرودی امکان‌پذیر نبوده و به سازوکار تطبیق تکانه نیاز است [۷]. در ساختارهای دوره‌ای، شبکه تناوبی بخشی از تکانه مورد نیاز را فراهم می‌کند و شرط تشدید به صورت زیر نوشته می‌شود [۷]:

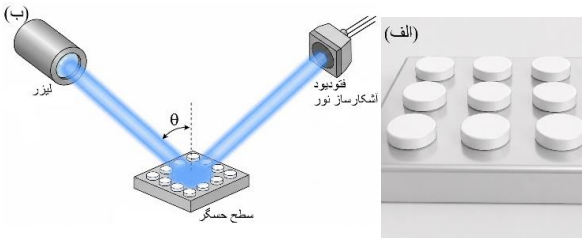
$$k_{SPP} = k_0\, n_d\, sin\theta + m\frac{2\pi}{\Lambda} \qquad (1)$$

که در آن n_d ضریب شکست محیط، θ زاویه تابش، m مرتبه پراش و Λ تناوب شبکه است. همچنین k_0 بردار موج نور فرودی و k_{SPP} بردار موج مد SPP است. در اغلب مطالعات، از جمله این کار، تنها مرتبه غالب پراش $(m = 0)$ درنظر گرفته می‌شود [۷]. تفاوت اصلی ساختار حاضر با بسیاری از سامانه‌های متداول در آن است که تطبیق تکانه در آن نه از طریق شیاردهی مستقیم فلز، بلکه به‌وسیله یک آرایه دی‌الکتریک کم‌اتلاف بر روی سطح فلزی صاف تأمین می‌شود. این نوع پیکربندی‌ها در سال‌های اخیر به دلیل توانایی در شکل‌دهی پاسخ‌های نوری باریک و پایدار، به‌ویژه در ناحیه‌های مرئی و فروسرخ، مورد توجه قرار گرفته‌اند [۸و۹]. با این حال، بررسی آن‌ها در ناحیه آبی–فرابنفش کمتر مورد مطالعه قرار گرفته است.

با قرار دادن یک آرایه دوره‌ای از نانودیسک‌های دی‌الکتریک با ضریب شکست بالا بر روی فلز، این نانوساختارها علاوه بر تأمین شرط تطبیق تکانه، موجب تمرکز بیشتر میدان الکترومغناطیسی در نزدیکی سطح می‌شوند [۱۰]. به علاوه در صورتی که انرژی حامل‌های داغ حاصل از واپاشی مدهای پلاسمونی از سد شاتکی فصل مشترک فلز–دی‌الکتریک بیشتر باشد، این حامل‌ها می‌توانند به نوار رسانش دی‌الکتریک تزریق شده و واکنش های مربوط به حالت برانگیخته دی الکتریک را فعال کنند [۱۱]. در ساختار Al/TiO_2 مورد بررسی، انرژی مد SPP که برابر با انرژی فوتون‌های 405 نانومتر است (حدود 3.08 الکترون‌ولت)، بیشتر از ارتفاع گزارش‌شده سد شاتکی این فصل مشترک (حدود 1 الکترون‌ولت) است [۱۱]. بنابراین آرایه نانودیسک‌های TiO_2 می‌تواند به طور همزمان سه نقش کلیدی در عملکرد حسگر ایفا کند: تأمین تکانه

لازم برای برانگیزش مدهای پلاسمونی، افزایش تمرکز میدان و فراهم‌کردن بستری برای فرایندهای فوتوکاتالیستی و بازتولید سطح پس از اندازه گیری.

ساختار پیشنهاد شده (شکل۱) به روش المان محدود (FEM) و با استفاده از ماژول ewfd در نرم‌افزار COMSOL شبیه‌سازی شد. این ساختار با یک سلول واحد با شرایط مرزی دوره‌ای Floquet طراحی شده و تحت تابش موج تخت TM با طول موج 405 نانومتر قرار گرفت و پاسخ آن با روش تغییر زاویه تابش و اندازه گیری توان بازتابی بررسی شد.



شکل ۱: (الف) شماتیک ساختار شبیه سازی شده نانودیسک های TiO_2 بر روی لایه آلومینیوم. (ب) شماتیک نحوه عملکرد حسگر. آشکارساز، میزان نور بازتابی را اندازه گیری می‌کند. زاویه تابش با θ نمایش داده شده.

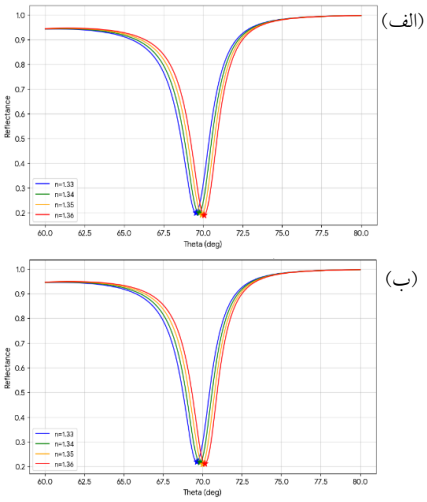
پارامترهای هندسی ساختار شامل نانودیسک‌های TiO_2 با قطر 160 نانومتر و ارتفاع 26 نانومتر در یک آرایه مربعی با تناوب 200 نانومتر است. آرایه روی یک لایه نازک آلومینیوم 100 نانومتری قرار گرفته است. آلاینده‌ها به صورت لایه‌های نازک با ضریب شکست مختلط (n+ik) و ضخامت 5 nm بر روی سطح TiO_2 آناتاز با ضریب شکست 2.5 [۱۲] مدل‌سازی شدند و اثر آن‌ها بر شرایط تشدید مورد بررسی قرار گرفت.

نتایج و بحث

عملکرد حسگری ساختار پیشنهادی ابتدا با استفاده از حسگری ضریب شکست حجمی (Bulk) ارزیابی شد. ضریب شکست محیط اطراف از 1.33 تا 1.36 با گام‌های 0.01 تغییر داده شد و طیف‌های بازتاب زاویه‌ای متناظر محاسبه گردید. با افزایش ضریب شکست، تشدید SPR به سمت زوایای تابش بزرگتر جابه‌جا شد و از روی جابه‌جایی‌های تشدید ، حساسیت S=21 deg/RIU به دست آمد و پهنای خط (FWHM) تشدید معادل 2.01 درجه اندازه گیری شد. بنابراین ضریب شایستگی (FOM) برابر است با:

$$FOM=\frac{S}{FWHM}=\frac{21\ deg/RIU}{2.01\ deg}=10.44\ RIU^{-1} \qquad (2)$$

همچنین برای بررسی اثر اکسیداسیون آلومینیوم، یک لایه 2 نانومتری Al_2O_3 بر روی سطح فلز در نظر گرفته شد. نتایج نشان داد که در این حالت، حساسیت حسگر تنها حدود پنج درصد کاهش می‌یابد و پهنای خط آن بدون تغییر قابل توجه باقی می‌ماند (شکل۲).

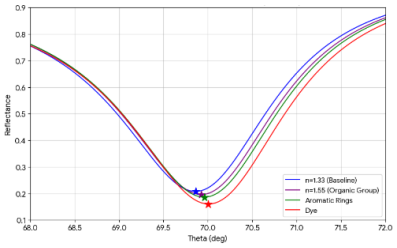


شکل ۲: تغییر زاویه تشدید با تغییر ضریب شکست محیط (الف) بدون اکسیداسیون آلومینیوم، (ب) پس از اکسیداسیون.

مقایسه عملکرد این حسگر با گزارش‌های پیشین پلاسمونیک آلومینیوم که اغلب ضریب شایستگی را در بازه 5 تا 10 بر واحد ضریب شکست گزارش می‌کنند [٤]، بیانگر عملکرد رقابتی ساختار پیشنهادی است .پهنای نسبتاً باریک تشدید و همچنین افت ناچیز عملکرد پس از اکسیداسیون آلومینیوم را می‌توان به معماری سطح فلزی صاف و آرایه نانودیسک‌های دی‌الکتریک با ضریب شکست بالا نسبت داد. در این پیکربندی جفت‌شدگی پلاسمونی بدون ایجاد شیار مستقیم در فلز انجام می‌شود و در نتیجه تلفات پراکندگی و پهنای خط تشدید کاهش می‌یابد [۱۰-۸]. از سوی دیگر، ضریب شکست بالای TiO_2 موجب تمرکز بخش مهمی از میدان پلاسمونی در محیط دی‌الکتریک بالای سطح می‌شود؛ بنابراین هم‌پوشانی میدان

با لایه اکسید فلز محدود مانده و اثر این لایه بر پاسخ حسگر کاهش می‌یابد [۱۰].

به منظور بررسی پاسخ حسگر به آلاینده‌های محیطی، لایه‌های جذب‌شده به صورت پوشش‌های نازک، با خواص نوری مختلف بر روی سطح نانودیسک ها مدل‌سازی شدند. سه دسته نماینده شامل آلاینده‌های آلی با ضریب شکست 1.55، ترکیبات آروماتیک با ضریب شکست 1.65+0.01i و مولکول‌های رنگ با ضریب شکست 1.8+0.05i در نظر گرفته شد. این ارقام براساس بازه عددی گزارش شده برای ضریب شکست لایه های نازک مواد آلی انتخاب شدند [۱۳و۱۴]. نتایج نشان داد که هر دسته از آلاینده‌ها اثر متفاوتی بر زاویه تشدید، پهنای خط و عمق تشدید حسگر دارد (شکل ۳). افزون بر این، با توجه به فعالیت فوتوکاتالیستی TiO_2 سینتیک واجذب یا تجزیه آلاینده‌های جذب‌شده تحت تابش نور نیز برای گونه‌های مختلف متفاوت است [۶]؛ بنابراین مطالعه زمانی پاسخ حسگر نیز می‌تواند اطلاعات تکمیلی درباره آلاینده فراهم کند.



شکل ۳: تغییر زاویه تشدید حسگر پس از جذب سطحی آلاینده های متفاوت. نمودار آبی متعلق به آب خالص، بنفش پس از جذب گروه آلی، سبز پس از جذب گروه های آروماتیک و قرمز متعلق به رنگ هاست.

نتیجه گیری

در این پژوهش، عملکرد یک حسگر SPR مبتنی بر آرایه نانودیسک‌های TiO_2 روی لایه آلومینیوم در طول موج 405 نانومتر برای پایش آلاینده‌های محیطی بررسی شد. نتایج نشان داد که ساختار پیشنهادی، توانایی دستیابی به یک تشدید نسبتاً باریک در ناحیه آبی–فرابنفش و حفظ بخش عمده عملکرد حسگر پس از درنظرگرفتن اکسید طبیعی آلومینیوم را دارد. از سوی دیگر، معماری Al/TiO_2 پیشنهادی تنها یک طرح حسگری با تفکیک‌پذیری بالا نیست، بلکه از منظر ساخت نیز مزیت دارد. استفاده از نانودیسک‌های دایره ای TiO_2 باعث می‌شود ساختار، برخلاف بسیاری از نانوساختارهای تیزگوشه و پیچیده، با روش‌های رایج لیتوگرافی قابل پیاده‌سازی باشد و دستیابی به پهنای خط باریک نیز بدون نیاز به هندسه‌های بسیار حساس، ناپایدار یا پرهزینه حاصل شود. در کنار این مزیت، حضور TiO_2 امکان بهره‌گیری از فرایندهای فوتوکاتالیستی را نیز فراهم کرده و می‌تواند هم در حین اندازه گیری، اطلاعاتی از سینتیک آلایندگی‌ها به‌دست آورد و هم توانایی بازتولید سطح پس از فرآیند حسگری را فراهم می‌کند. در مجموع، نتایج این کار نشان می‌دهد که این پیکربندی می‌تواند گزینه‌ای مناسب برای توسعه حسگرهای پلاسمونی آبی–فرابنفش کم‌هزینه، مقیاس‌پذیر، فشرده و قابل استفاده مجدد در پایش محیط زیست باشد.

مرجع‌ها

[1] Khan, S., Naushad, M., Govarthanan, M., Iqbal, J., & Alfadul, S. M. (2022). Emerging contaminants of high concern for the environment: Current trends and future research. *Environmental Research*, **207**, 112609.
[2] Masson, J. F. (2017). Surface plasmon resonance clinical biosensors for medical diagnostics. *ACS sensors*, *2*(**1**), 16-30.
[3] Farnood, A., Ranjbar, M., Azarian, A., & Salamati, H. (2022). Hydrogen sensing by plasmon decoupling effect in nanostructured Pd/Au films. *International Journal of Hydrogen Energy*, *47*(32), 14759-14765.
[4] Karpiński, K., Zielińska-Raczyńska, S., & Ziemkiewicz, D. (2021). Aluminium-based plasmonic sensors in ultraviolet. *Sensors*, **21**(12), 4096.
[5] Chau, Y. F. C. (2026). Converging Nanophotonics and Environmental Science: Plasmonic Biosensors for Smart, Distributed Monitoring. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 123224.
[6] Tran, H. D., Nguyen, D. Q., Do, P. T., & Tran, U. N. (2023). Kinetics of photocatalytic degradation of organic compounds: a mini-review and new approach. *RSC advances*, **13**(25), 16915-16925.
[7] Murugan, D., Tintelott, M., Narayanan, M. S., Vu, X. T., Kurkina, T., Rodriguez-Emmenegger, C., ... & Pachauri, V. (2024). Recent advances in grating coupled surface plasmon resonance technology. *Advanced Optical Materials*, **12**(34), 2401862.
[8] Yang, K., Chen, Y., Yan, S., & Yang, W. (2023). Nanostructured surface plasmon resonance sensors: Toward narrow linewidths. *Heliyon*, *9*(6).
[9] Yang, Y., Miller, O. D., Christensen, T., Joannopoulos, J. D., & Soljacic, M. (2017). Low-loss plasmonic dielectric nanoresonators. *Nano letters*, *17*(5), 3238-3245.
[10] Kuznetsov, A. I., Miroshnichenko, A. E., Brongersma, M. L., Kivshar, Y. S., & Luk'yanchuk, B. (2016). Optically resonant dielectric nanostructures. *Science*, **354**(6314), aag2472.
[11] Clavero, C. (2014). Plasmon-induced hot-electron generation at nanoparticle/metal-oxide interfaces for photovoltaic and photocatalytic devices. *Nature Photonics*, *8*(2), 95-103.
[12] Usami, A., & Ozaki, H. (2005). Optical modeling of nanocrystalline TiO_2 films. *The Journal of Physical Chemistry B*, **109**(7), 2591-2596.
[13] Aziz, S. B., Brza, M. A., Nofal, M. M., Abdulwahid, R. T., Hussen, S. A., Hussein, A. M., & Karim, W. O. (2020). A comprehensive review on optical properties of polymer electrolytes and composites. *Materials*, **13**(17), 3675.
[14] Tompkins, H., & Irene, E. A. (2005). *Handbook of ellipsometry*. William Andrew.

حسگری کوانتومی میدان مغناطیسی به کمک مراکز نیتروژن-تهی‌جا در الماس

قنبری مبارکه، مهرداد[۱]؛ محمدی رنانی، دانیال[۱]؛ احمدوند، حسین[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان ، بلوار دانشگاه صنعتی اصفهان ، اصفهان

چکیده

حسگرهای کوانتومی مبتنی بر مراکز نیتروژن-تهی‌جا (Nitrogen-Vacancy) در الماس، به دلیل قابلیت عملکرد در دمای اتاق، حساسیت بالا و پایداری مناسب، به یکی از ابزارهای نوین اندازه‌گیری میدان‌های مغناطیسی تبدیل شده‌اند. در این پژوهش، اصول اولیه حسگری مغناطیسی مبتنی بر مراکز NV مورد بررسی قرار گرفته است. ابتدا ساختار مراکز نیتروژن-تهی‌جا و ترازهای انرژی الکترونی آن معرفی شده و سپس روش تشدید مغناطیسی آشکارسازی‌شده به کمک نور (ODMR) به عنوان مبنای اندازه‌گیری میدان مغناطیسی تشریح می‌شود. به منظور ارزیابی عملکرد سامانه، طیف‌های ODMR در حضور و عدم حضور میدان مغناطیسی خارجی ثبت و تحلیل شده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که اعمال میدان مغناطیسی موجب شکافتگی فرکانس‌های تشدید و جابه‌جایی قله‌های طیف ODMR می‌شود که امکان استخراج مقدار میدان مغناطیسی را فراهم می‌کند. همچنین، پارامترهای کلیدی شامل کنتراست طیف و حساسیت مغناطیسی از داده‌های تجربی محاسبه شده‌اند. نتایج این مطالعه بیانگر قابلیت مراکز NV در الماس برای توسعه حسگرهای کوانتومی دقیق و غیرتهاجمی جهت اندازه‌گیری میدان‌های مغناطیسی ضعیف در کاربردهای فناورانه است.

واژه های کلیدی: *فناوری کوانتومی، حسگر کوانتومی، حسگری میدان مغناطیسی، مراکز نیتروژن-تهی‌جا.*

Magnetic Field Quantum Sensing using NV Centers in Diamonds

Ghanbari Mobarakeh, Mehrdad[1]; Mohammadi Renani, Danyal[1]; Ahmadvand, Hossein[1]

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

Abstract

Nitrogen-vacancy (NV) center-based quantum sensors in diamond have emerged as powerful tools for magnetic field sensing due to their room-temperature operation, high sensitivity, and excellent stability. In this study, the fundamental principles of NV-based magnetic sensing are investigated. First, the structure of nitrogen-vacancy centers and their electronic energy levels are introduced. Subsequently, optically detected magnetic resonance (ODMR) is described as the underlying technique for magnetic field measurements. To evaluate the performance of the sensing system, ODMR spectra were recorded and analyzed both in the presence and absence of an external magnetic field. The results demonstrate that the applied magnetic field induces resonance frequency splitting and shifts in the ODMR spectral peaks, enabling the extraction of the magnetic field strength. In addition, key performance parameters, including ODMR contrast and magnetic sensitivity, were calculated from the experimental data. The findings highlight the potential of diamond NV centers for the development of precise and non-invasive quantum sensors for the detection of weak magnetic fields in technological applications.

***Keywords**: Quantum Technology, Quantum Sensing, Magnetic Field, NV Centers.*

PACS No. 78

مقدمه

حسگری کوانتومی به عنوان یکی از حوزه‌های نوظهور در فیزیک و فناوری‌های کوانتومی، امکان اندازه‌گیری کمیت‌های فیزیکی با دقت بسیار بالا را فراهم کرده است. در میان پلتفرم‌های مختلف، مراکز نیتروژن-تهی‌جا (NV Centers) در الماس به دلیل قابلیت کار در دمای اتاق و حساسیت مناسب به میدان‌های مغناطیسی، توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند[۱].

مراکز نیتروژن-تهی جا نوعی عیب نقطه ای در شبکه ی بلوری الماس هستند که از یک اتم نیتروژن جانشینی در کنار یک جای خالی کربن تشکیل می شوند. ساختار ترازهای انرژی این مرکز امکان کنترل و خوانش اسپین الکترونی را از طریق نور لیزر و مایکروویو فراهم می‌کند. یکی از روش‌های کلیدی در بهره‌برداری از این سیستم، آشکارسازی نوری تشدید مغناطیسی (Optically Detected Magnetic Resonance) است که در آن تغییرات

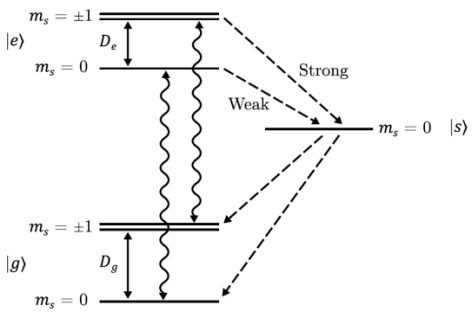
شدت فلورسانس به عنوان تابعی از فرکانس مایکروویو اندازه‌گیری می‌شود.

در حضور میدان مغناطیسی خارجی، ترازهای اسپینی مرکز NV دچار شکافت زیمن شده و این امر منجر به تغییر موقعیت قله‌های طیف ODMR می‌گردد. این ویژگی اساس کاربرد NV در حسگری مغناطیسی با دقت بالا را تشکیل می‌دهد[۳،۲]. در این مقاله، ابتدا ساختار فیزیکی مراکز NV و اصول ODMR به صورت مختصر معرفی شده و سپس طیف‌های ODMR در شرایط مختلف میدان مغناطیسی بررسی می‌شوند. در ادامه، پارامترهای مهمی مانند کنتراست و حساسیت حسگر از داده‌های به‌دست‌آمده استخراج و تحلیل خواهند شد.

ساختار فیزیکی مراکز NV

مراکز NV شامل یک حالت پایه سه‌تایی، یک حالت برانگیخته سه‌تایی و یک حالت تکتایی میانی هستند. در حالت پایه و برانگیخته، زیرترازهای اسپینی $m_s=0$ و $m_s=\pm1$ حتی در نبود میدان خارجی به دلیل شکافت زیمن صفر (ZFS) از هم جدا می‌شوند که به‌ترتیب مقادیر $D_g=2.87GHz$ و $D_e=1.42GHz$ دارند. گذار نوری بین حالت‌های پایه و برانگیخته در طول موج 637nm رخ می‌دهد که طی این گذار اسپین پایسته می‌ماند، در حالی که حالت میانی مسیر واپاشی غیرتابشی و گزینش‌گر اسپینی را فراهم می‌کند.

پمپاژ نوری با لیزر 532nm باعث برانگیختگی و سپس قطبش اسپینی می‌شود، به طوری که جمعیت به مرور در زیرتراز $m_s=0$ در حالت پایه تجمع پیدا می‌کند. این زیرتراز به دلیل نرخ گسیل فلورسانس بالاتر به عنوان حالت روشن (bright state) شناخته می‌شود، در حالی که $m_s=\pm1$ به دلیل مسیرهای غیرتابشی از طریق حالت میانی، شدت فلورسانس کمتری داشته و حالت تاریک (dark state) را تشکیل می‌دهد. این تفاوت در نرخ واپاشی، اساس کنتراست در طیف ODMR را ایجاد می‌کند. در نهایت، اعمال تابش مایکروویو گذارهای $m_s=0$ به $m_s=\pm1$ و برعکس را تحریک کرده و با ایجاد تغییر در جمعیت این زیرترازها، باعث کاهش شدت فلورسانس در فرکانس‌های تشدید می‌شود که مبنای اندازه‌گیری ODMR است[۳]. ساختار الکترونی مراکز NV و گذارهای ذکر شده در شکل ۱ مشخص شده است.



شکل ۱. نمایش شماتیک سطوح انرژی الکترونی در مراکز نیتروژن-تهی‌جا[۴]

اساس کار ODMR

در حضور پمپاژ نوری پیوسته، اعمال تابش مایکروویو با فرکانس متناظر با گذارهای اسپینی مرکز NV موجب انتقال جمعیت از حالت روشن ($m_s=0$) به حالت‌های تاریک ($m_s=\pm1$) می‌شود. از آنجا که شدت فلورسانس در حالت‌های تاریک کمتر است، در فرکانس تشدید کاهش محسوسی در سیگنال فلورسانس مشاهده می‌شود. با ثبت شدت فلورسانس برحسب فرکانس مایکروویو، طیف آشکارسازی نوری تشدید مغناطیسی (ODMR) به دست می‌آید. در نبود میدان مغناطیسی خارجی، این طیف یک فرورفتگی تشدید در حوالی فرکانس 2.87GHz نشان می‌دهد.

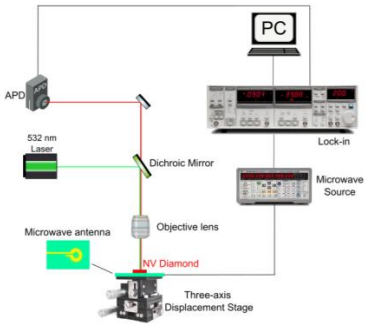
اعمال میدان مغناطیسی خارجی موجب شکست تبهگنی زیرترازهای $m_s=\pm1$ در اثر زیمان شده و در نتیجه فرکانس تشدید به دو مؤلفه مجزا تقسیم می‌شود. در این حالت، طیف ODMR شامل دو فرورفتگی متناظر با گذارهای $m_s=0$ به $m_s=1$ و $m_s=0$ به $m_s=-1$ خواهد بود. فرکانس این گذارها از رابطه زیر به دست می‌آید[۳]:

$$f_{\pm} = D_g \pm \frac{g_e \mu_B}{h} B \qquad \text{(رابطه ۱)}$$

که در آن g_e ضریب ژیرومغناطیسی مراکز NV، μ_B مگنتون بوهر و B مؤلفه میدان مغناطیسی در راستای محور مرکز NV است. از اندازه‌گیری فاصله بین دو فرکانس تشدید می‌توان مقدار میدان مغناطیسی اعمالی را تعیین کرد.

چیدمان آزمایشگاهی

چیدمان آزمایش مورد استفاده برای اندازه‌گیری طیف ODMR و حسگری کوانتومی مراکز NV در الماس در شکل ۲ نشان داده شده است. در این سامانه، از یک الماس تجاری شرکت elementSix با شناسه DNV-B14 استفاده شده است. یک لیزر سبز با طول موج ۵۳۲ نانومتر برای برانگیختگی مراکز NV به کار گرفته شد. نور فلورسانس گسیل‌شده از الماس توسط یک عدسی شیئی جمع‌آوری شده و پس از عبور از فیلترهای نوری مناسب، توسط آشکارساز نوری ثبت می‌گردد. به منظور تحریک گذارهای اسپینی، سیگنال مایکروویو تولیدشده توسط مولد فرکانس از طریق یک آنتن نزدیک نمونه اعمال شد. همچنین، می‌توان میدان مغناطیسی خارجی را به کمک یک سیم‌پیچ در محل نمونه ایجاد کرد تا اثر آن بر طیف ODMR مورد بررسی قرار گیرد. در طول آزمایش، شدت فلورسانس بر حسب فرکانس مایکروویو اندازه‌گیری و طیف‌های ODMR در شرایط مختلف میدان مغناطیسی ثبت می‌شوند.



شکل ۲. چیدمان آزمایشگاهی

طیف ODMR در غیاب میدان مغناطیسی

در ابتدا، طیف ODMR در غیاب میدان مغناطیسی خارجی اندازه‌گیری شد تا مرجع مناسبی برای تحلیل‌های بعدی فراهم گردد. در این حالت، به دلیل عدم شکست زیمن، زیرترازهای $m_s=\pm1$ هم‌انرژی بوده و تنها یک فرورفتگی تشدید در حوالی فرکانس 2.87GHz مشاهده می‌شود (شکل ۳). این فرورفتگی ناشی از گذارهای اسپینی $m_s=0$ به $m_s=\pm1$ در حالت پایه است که به‌طور همزمان رخ می‌دهند. عمق این فرورفتگی متناظر با کنتراست ODMR بوده و به اختلاف نرخ فلورسانس بین حالت روشن ($m_s=0$) و حالت‌های تاریک ($m_s=\pm1$) مربوط می‌شود. همچنین پهنای خط تشدید تحت تأثیر زمان واهمدوسی اسپینی و نرخ‌های پمپاژ نوری قرار دارد. این طیف به عنوان مبنای استخراج پارامترهای اولیه سیستم و مقایسه با حالت حضور میدان مغناطیسی مورد استفاده قرار می‌گیرد.

طیف ODMR در حضور میدان مغناطیسی

در ادامه، طیف ODMR در حضور یک میدان مغناطیسی خارجی اندازه‌گیری شد. اعمال میدان باعث شکست تبهگنی زیرترازهای $m_s=\pm1$ در اثر زیمان شده و در نتیجه یک فرورفتگی تشدید به دو مؤلفه مجزا تقسیم می‌شود (شکل ۳). این دو پیک متناظر با گذارهای اسپینی $m_s=0$ به $m_s=1$ و $m_s=0$ به $m_s=-1$ هستند که فرکانس آن‌ها به صورت خطی با بزرگی میدان مغناطیسی تغییر می‌کند. با اندازه‌گیری فاصله بین دو فرکانس تشدید، مقدار میدان مغناطیسی خارجی قابل استخراج است. این شکافت فرکانسی مبنای اصلی حسگری مغناطیسی در سیستم‌های مبتنی بر مراکز NV را تشکیل می‌دهد و امکان اندازه‌گیری میدان‌های ضعیف با دقت بالا را فراهم می‌سازد.

محاسبه میدان مغناطیسی، کنتراست و حساسیت

به منظور استخراج پارامترهای مغناطیس‌سنجی، طیف‌های ODMR با تابع لورنتزی زیر برازش شدند.

$$y(f)=y_0+\frac{2A}{\pi}\frac{\omega}{4(f-f_0)^2+\omega^2} \qquad \text{(رابطه ۲)}$$

کنتراست ODMR از رابطه ۳ محاسبه شد که در آن I_{off} شدت فلورسانس خارج از تشدید و I_{res} شدت فلورسانس در فرکانس تشدید است.

$$C=\frac{I_{off}-I_{res}}{I_{off}} \qquad \text{(رابطه ۳)}$$

در حضور میدان مغناطیسی، فاصله فرکانسی بین دو پیک ODMR از اثر زیمن ناشی شده و مقدار میدان با توجه به رابطه ۱ از رابطه زیر محاسبه می‌شود که در آن $\gamma_{NV}=28GHz/T$ ضریب ژیرومغناطیس اسپین الکترونی مراکز NV است.

(رابطه ۴) $$B = \frac{f_+ - f_-}{2\gamma_{NV}}$$

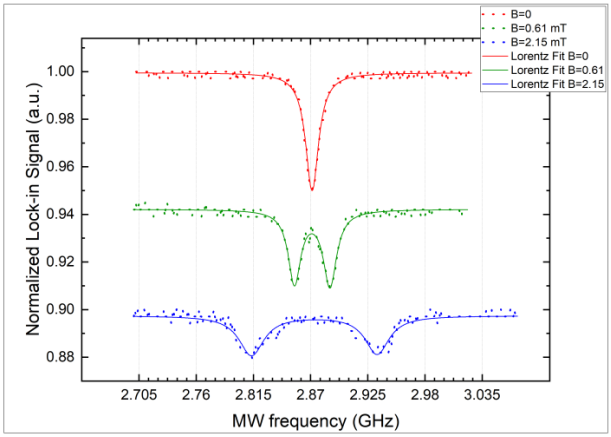
از آن‌جایی که داده‌ها توسط تقویت کننده قفل شونده (Lock-in Amplifier) ثبت شده‌اند و نرخ واقعی شمارش فوتون در دسترس نبوده است، به جای حساسیت مطلق، شاخص حساسیت نسبی از رابطه زیر محاسبه شده است. در این رابطه $\Delta\nu$ پهنای خط تشدید و C کنتراست ODMR است. مقادیر کوچک‌تر η_{rel} نشان‌دهنده عملکرد بهتر حسگر هستند[۴].

(رابطه ۵) $$\eta_{rel} = \frac{\Delta\nu}{\gamma_{NV} C}$$

جدول ۱ نتایج حاصل از برازش و همچنین شکل ۳ نمودار مربوط به طیف‌های ODMR را نشان می‌دهد.

نتایج

طیف‌های ODMR در میدان صفر و دو میدان مغناطیسی B_1 و B_2 ثبت شدند که هر طیف با یک (میدان صفر) و دو (میدان غیر صفر) درّه لورنتزی برازش شد (شکل ۳). در میدان صفر تشدید در فرکانس $f_0 = 2.87146 GHz$ رخ داد که با مقدار شکافت زیمن صفر سازگار است. در حضور میدان مغناطیسی قله تشدید با توجه به اثر زیمن به دو مولفه شکافته می‌شود. در این حالت میدان مغناطیسی اول $0.61mT$ و همچنین میدان مغناطیسی دوم $2.15mT$ بدست آمده است. با افزایش میدان مغناطیسی، پهنای خط به طور قابل توجهی افزایش و کنتراست کاهش یافته است که این رفتار مربوط به ناهمگنی میدان مغناطیسی در راستای مراکز NV در شکافت زیمن بزرگتر است. شاخص حساسیت نیز برای هر سه حالت محاسبه شد. طیف میدان صفر بهترین حساسیت را از خود نشان داد در حالی که با افزایش میدان مغناطیسی، حساسیت کاهش یافت که ناشی از اثر پهن شدگی پهنای خط و کاهش کنتراست است. این نتایج نشان می‌دهد که بهترین حساسیت در نزدیکی میدان صفر به‌دست می‌آید، جایی که کنتراست بیشینه و پهنای خط کمینه است، در حالی که میدان‌های اعمال‌شده بزرگ‌تر عمدتاً از طریق پهن‌شدن پهنای خط، حساسیت را کاهش می‌دهند. به‌طور کلی، این نتایج نشان‌دهنده قابلیت مراکز NV برای کاربرد در مغناطیس‌سنجی کوانتومی هستند و این سامانه به‌عنوان زیرساخت اولیه‌ای برای فعالیت‌های پژوهشی آتی این گروه، از جمله بهینه‌سازی پارامترهای تجربی، توسعه پروتکل‌های ODMR پالسی و اندازه‌گیری زمان‌های اسپینی، مورد استفاده قرار خواهد گرفت.



شکل ۳. طیف ODMR و برازش لورنتزی آن

مرجع‌ها

[1] Marcus W. Doherty, Neil B. Manson, Paul Delaney, Fedor Jelezko, Jörg Wrachtrup, Lloyd C.L. Hollenberg; The nitrogen-vacancy colour centre in diamond; *Physics Reports* **528**, 1–45 (2013)
[2] Li, Y., Li, H., Yi, T., Li, C., & Wei, J. (2025). A review of the study of diamond NV color centers: fabrication, application and challenge. *Functional Diamond*, **5**(1) (2025).
[3] Kim, K., Moon, J. S., Lee, D., Lee, J. H., Lee, Y., Park, C., ... & Kim, J. H.; Quantum sensing with spin defects: principles, progress, and prospects for use cases. *Advanced Photonics*, **7**(6), 064002-064002(2025).
[4] Barry, John F. and Schloss, Jennifer M. and Bauch, Erik and Turner, Matthew J. and Hart, Connor A. and Pham, Linh M. and Walsworth, Ronald L.; Sensitivity optimization for NV-diamond magnetometry; *Rev. Mod. Phys.* **92**, 015004 (2020)
[5] Ahmadi, S; Continuous-Wave Magnetic Field Sensing with Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond; Technical University of Denmark, Lyngby, Denmark (2018).

میدان مغناطیسی (mT)	پهنای خط (MHz)	کنتراست (٪)	شاخص حساسیت ($mT/\sqrt{Hz}$)
$B_1 = 0$	15.36	4.94	11.1
$B_2 = 0.61$	14.58 – 14.86	3.07 – 3.21	17 – 16.5
$B_2 = 2.15$	32.29 – 23.47	1.73 – 1.67	67 – 69.1

جدول ۱. نتایج مربوط به محاسبه کنتراست و حساسیت

بررسی اثر تبدیل همدیس آرایه های پین شدگی کاگومه بر چگالی جریان بحرانی در نوار های ابررسانا

نامداربیلوئی ، فائزه[1] ؛ حسینی، سیدمهدی[1] ؛ اوجی فرد، زهرا[1]

[1] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز، بلوار مدرس، شیراز

چکیده

در این پژوهش تاثیر اعمال تبدیل همدیس روی شبکه کاگومه و تغییرات ایجاد شده در چگالی جریان بحرانی در حضور مقادیر مختلف نیروی پین شدگی مورد ارزیابی قرار گرفته است. معادله لانژوین با اعمال شرایط مرزی برای گردابه ها حل شد و دینامیک حرکت گردابه ها با استفاده از روش دینامیک مولکولی محاسبه و چگالی جریان بحرانی بدست آمده است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که اعمال تبدیل همدیس بر شبکه کاگومه، علیرغم تلاش برای بهبود چگالی جریان بحرانی، فرصت‌های جدیدی برای بررسی رفتار و عملکرد ورتکس‌ها فراهم کرده است و در برخی شرایط، مقادیر مشاهده‌شده نسبت به شبکه کاگومه، زمینه‌ای برای تحلیل دقیق‌تر و بهینه‌سازی‌های آینده ایجاد می‌کند. همچنین با افزایش نیروی پین‌شدگی، چگالی جریان بحرانی در هر دو ساختار افزایش می‌یابد.

واژه های کلیدی: *نوار های ابررسانا، چگالی جریان بحرانی،آرایه های پین شدگی همدیس کاگومه،دینامیک گردابه ها*

Investigation of the Effect of Conformal Transformation of Kagome Pinning Arrays on the Critical Current Density in Superconducting Tapes

Namdarbilooi, Faezeh[1]; Hosseini, Seyyed Mehdi[1] ;Owjifard, Zahra[1]

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

Abstract

In this study, the effect of applying a conformal transformation to a Kagome pinning array and the resulting changes in the critical current density under different pinning-force strengths were investigated. The Langevin equation was solved by incorporating appropriate boundary conditions for vortices, and the vortex dynamics were simulated using the molecular dynamics method to determine the critical current density.The results indicate that applying a conformal transformation to the Kagome array, while not leading to a substantial enhancement of the critical current density, provides valuable insights into vortex behavior and dynamics. In certain magnetic-field regimes, the conformally transformed structure exhibits performance comparable to that of the original Kagome array, offering opportunities for further analysis and optimization of pinning landscapes. Furthermore, the results show that the critical current density increases with increasing pinning force in both structures, highlighting the dominant role of pinning strength in enhancing superconducting performance.

Keywords:*Superconducting tapes,Critical current density,Conformal Kagome pinning arrays,Vortex dynamics*

PACS No.(74)

مقدمه

یکی از مهم‌ترین و بنیادی‌ترین خواص ابررساناها، مقاومت الکتریکی صفر است که امکان انتقال جریان الکتریکی بدون اتلاف انرژی را فراهم می‌سازد. در ابررساناهای نوع دوم، که نسبت به ابررساناهای نوع اول کاربردهای بسیار گسترده‌تری دارند، با افزایش میدان مغناطیسی اعمالی فراتر از میدان بحرانی اول، شار مغناطیسی به صورت گردابه هایی (ورتکس ها) درون ابررسانا نفوذ می‌کند. حرکت گردابه ها تحت تاثیر نیروی لورنتس موجب اتلاف انرژی، کاهش چگالی جریان بحرانی و در نتیجه محدود شدن کاربرد های عملی ابررسانا ها به ویژه در میدان های مغناطیسی بالا میشود[1]. نیرویی که مانع حرکت ورتکس ها می-شود نیروی پین‌شدگی نام دارد. کارایی مراکز پین شدگی به شدت به هندسه آنها وابسته است و ساختار های متنوعی از جمله شبکه مربعی[2,3]، مثلثی[4,5]، مویر[6,7] لانه زنبوری [8,9]، کاگومه [8]،همدیس [10,11]وسایر هندسه ها برای این منظور پیشنهاد شده اند. در این میان، شبکه کاگومه به دلیل هندسه ویژه و وجود ناکامی هندسی، رفتار متفاوتی در آرایش گردابه‌ها ایجاد می‌کند و می‌تواند موجب افزایش پایداری شبکه گردابه‌ای و بهبود پین‌شدگی شود[8]. در این مطالعه با اعمال تبدیل همدیس برروی شبکه کاگومه به بررسی تغییرات ایجاد شده در چگالی جریان بحرانی پرداخته شده است.[10,11].

جزئیات شبیه سازی

رفتار دینامیکی گردابه ها در یک سلول دو بعدی با استفاده از معادله حرکت نیوتنی در یک محیط با ویسکوزیته بالا به صورت زیر توصیف می شود[5,8]

$$\eta v_i = f_i + f_i^{vv} + f_i^{vp} + f_i^{T} \qquad (1)$$

در این معادله که معادله لانژوین نامیده می شود η ویسکوزیته، v_i سرعت گردابه i ام، f_i نیروی کل وارد بر گردابه i ، f_i^{vv} نیروی برهم کنش گردابه ها، f_i^{vp} نیروی برهم کنش گردابه-پین شدگی و f_i^{T} نیروی افت وخیز گرمایی می باشد.

$$f_i^{vv} = f_0 k_1\left(\frac{|r_i - r_j|}{\lambda}\right)\hat{r}_{ij} \qquad (2)$$

که در آن k تابع بسل تعمیم یافته نوع دوم، λ عمق نفوذ، r_i و r_j مکان گردابه ها ، $\hat{r}_{ij}$ برداریکه در راستای اتصال دو گردابه و مقدار f_0 دامنه نیروی برهم کنش گردابه ها است و از رابطه زیر محاسبه می گردد:

$$f_0 = \frac{\phi_0^2}{8\pi^2\lambda^3} \qquad (3)$$

$$\hat{r}_{ij} = \frac{(r_i - r_j)}{|r_i - r_j|} \qquad (4)$$

$$\phi_0 = \frac{hc}{2e} \qquad (5)$$

که در آن Φ_0 کوانتوم شار مغناطیسی است.

$$f_i^{vp} = \left(\frac{f_p}{r_p}\right)|r_i - r_k^{(p)}|\,\Theta\left(\frac{r_p - |r_i - r_k^{(p)}|}{\lambda}\right)\hat{r}_{ij}^{(p)} \qquad (6)$$

f_p دامنه نیروی پین شدگی، r_p شعاع مراکز پین‌شدگی $r_k^{(p)}$ یک بردار که موقعیت هندسی نقطه پین شدگی K ام را در فضا نشان می دهد.

$$\langle f_i^{T}(t)\rangle = 0 \qquad (7)$$

$$\langle f_i^{t}(t) f_i^{t}(t')\rangle = 2\eta k_B T\,\delta_{ij}\,\delta(t - t') \qquad (8)$$

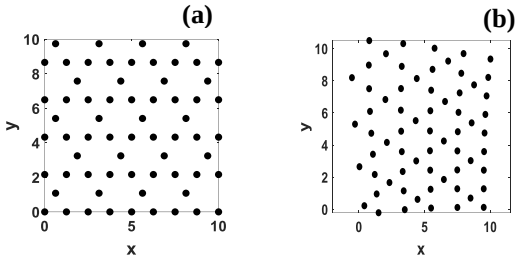
K_B ثابت بولتزمن، δ_{ij} تابع دلتای کرونکر و $\delta(t)$ تابع دلتای دیراک می باشد.

$$J_c(\phi) \propto \frac{N_v^{p}(\phi)}{N_v(\phi)} \qquad (9)$$

که در آن J_c چگالی جریان بحرانی است که متناسب با $N_v^p(\Phi)$ تعداد گردابه های پین شده به تعداد کل گردابه ها $Nv(\Phi)$ می باشد.

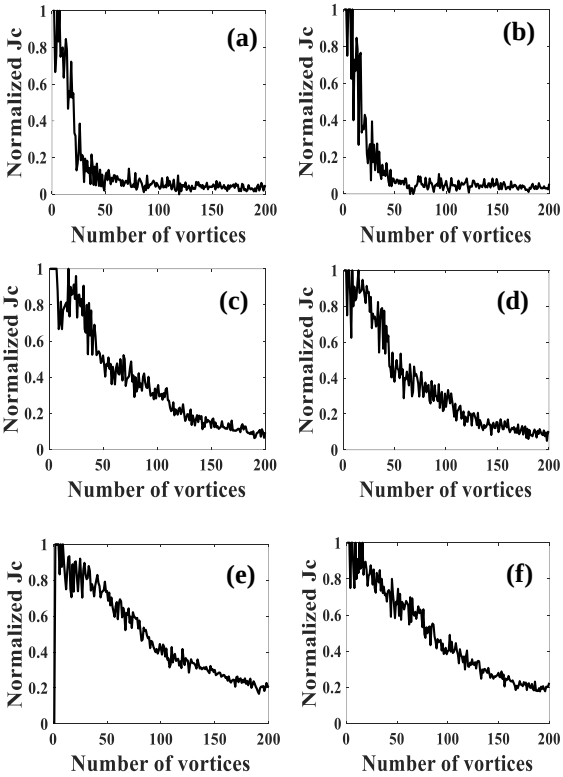
در این مطالعه ابررسانا تحت یک میدان متغیر قرار داده شده است به گونه ای که تعداد گردابه ها بین ۰ تا ۲۰۰ تغییر می کند.

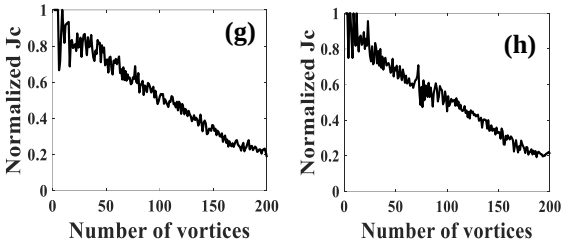
نتایج و بحث



شکل ۱: شبکه کاگومه *(a)* وتبدیل همدیس کاگومه *(b)* میباشد.

شکل ۲ تغییرات چگالی جریان بحرانی را بر حسب تعداد گردابه ها برای آرایه‌های پین‌شدگی کاگومه و همدیس کاگومه در مقادیر مختلف نیروی پین‌شدگی $f_p=0.5,1,2,4$ نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، چگالی جریان بحرانی با افزایش تعداد گردابه ها (میدان مغناطیسی) روندی کاهشی از خود نشان میدهد که ناشی از تراکم گردابه ها و تقویت بر هم کنش های بین گردابه ها است.

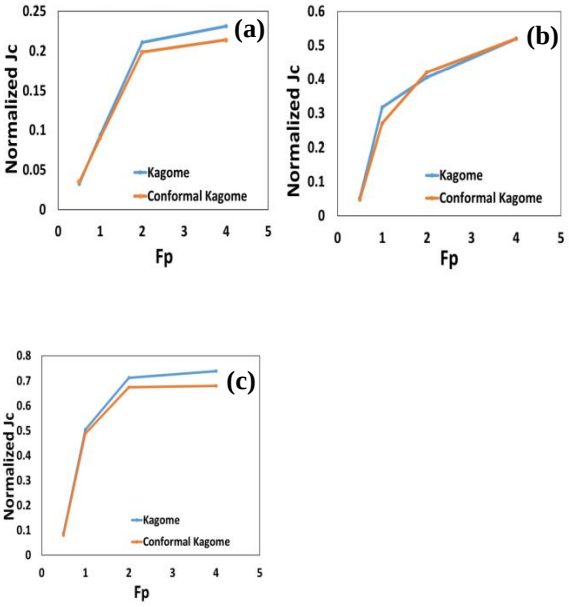




شکل۲ : تغییرات چگالی جریان بحرانی بر حسب تعداد گردابه ها برای شبکه کاگومه *(a)*و تبدیل همدیس کاگومه *(b)* در $f_p=0.5$، شبکه کاگومه *(c)*و تبدیل همدیس کاگومه *(d)* در $f_p=1$، شبکه کاگومه *(e)*و تبدیل همدیس کاگومه *(f)* در $f_p=2$، شبکه کاگومه *(g)*و تبدیل همدیس کاگومه *(h)* در $f_p=4$است. شعاع مراکز پین شدگی در همه ی حالت ها $r_p=0.1$ می باشد.

همچنین، نتایج مقایسه‌ای نشان می‌دهد که شبکه کاگومه همدیس‌شده عملکردی نزدیک به شبکه کاگومه اولیه دارد و هر دو ساختار در اغلب شرایط رفتاری مشابه از خود نشان می‌دهند.

شکل۳ تغییرات چگالی جریان بحرانی را بر حسب نیروی پین‌شدگی آرایه های کاگومه و همدیس در میدان‌های بالا*(a)* ، متوسط *(b)*و پایین *(c)* نشان می‌دهد. برای این منظور، میانگین چگالی جریان بحرانی در بازه های تعداد گردابه ۴۰ تا ۶۰، ۹۰تا ۱۱۰و ۱۸۰ تا ۲۰۰به ترتیب به عنوان میدان‌های پایین، متوسط و بالا محاسبه شده است.



شکل۳ : تغییرات چگالی جریان بحرانی بر حسب نیروهای پین شدگی $f_p=0.5,1,2,4$ برای میدان های بالا *(a)*، متوسط *(b)* و پایین *(c)*.

همان‌گونه که مشاهده می‌شود، افزایش نیروی پین‌شدگی در هر دو ساختار موجب افزایش چگالی جریان بحرانی می‌شود که بیانگر نقش مؤثر مراکز پین‌شدگی در محدود کردن حرکت ورتکس‌ها است. مقایسه نتایج نشان می‌دهد که تبدیل همدیس اعمال‌شده بر شبکه کاگومه، عملکردی نزدیک به ساختار اولیه در گستره وسیعی از میدان های مغناطیسی ارائه می‌دهد. اگرچه شبکه کاگومه در بیشتر بازه های مورد بررسی مقادیر بزرگ‌تری از چگالی جریان بحرانی را نشان می‌دهد، نتایج حاکی از آن است که ساختار همدیس در ناحیه‌ای از میدان‌های متوسط توانسته است بهبود نسبی در عملکرد ایجاد کند. این رفتار بیانگر آن است که اعمال تبدیل همدیس می‌تواند در شرایط مشخصی بر دینامیک ورتکس‌ها اثرگذار باشد و زمینه را برای توسعه و بهینه‌سازی بیشتر این نوع آرایش‌ها در مطالعات آینده فراهم سازد.همچنین با افزایش نیروی پین‌شدگی، اختلاف عملکرد دو ساختار در میدان‌های پایین و بالا افزایش یافته و برتری شبکه کاگومه آشکار تر می شود.

نتیجه گیری

در این پژوهش، اثراعمال تبدیل همدیس بر آرایه پین‌شدگی کاگومه از طریق بررسی چگالی جریان بحرانی در نوارهای ابررسانا مطالعه شد. نتایج نشان داد که افزایش نیروی پین‌شدگی نقش مؤثری در بهبود عملکرد هر دو ساختار و افزایش چگالی جریان بحرانی دارد. همچنین نتایج نشان داد که اعمال تبدیل همدیس بر شبکه کاگومه، عملکردی قابل مقایسه با ساختار اولیه ارائه می‌دهد و ویژگی‌های مطلوب آن را تا حد زیادی حفظ می‌کند. این یافته بیانگر کارایی بالای شبکه کاگومه در پین‌کردن ورتکس‌ها و افزایش چگالی جریان بحرانی است. به طور کلی، نتایج حاکی از آن است که در شرایط مورد بررسی، نقش نیروی پین‌شدگی درتعیین چگالی جریان بحرانی برجسته‌تر بوده و اثر آن نسبت به تغییرات هندسی ناشی از تبدیل همدیس غالب است. این موضوع می‌تواند راهنمای ارزشمندی برای طراحی وبهینه‌سازی آرایه‌های پین‌شدگی در پژوهش‌های آینده باشد.

مرجع‌ها

[1]Blatter, G., M.V. Feigel'man, V.B. Geshkenbein, A.I. Larkin and V.M. Vinokur, "Vortices in high-temperature superconductors", Reviews of Modern Physics, 66(4): p. 1125–1388 (1994).

[2] Zarei, A., Hosseini, M., Owjifard, Z. and Moftakharzadeh, A., "Effect of Pinning Size on the Critical Current Density in Superconducting Films with Slightly Distorted Square Arrays of Pinning Sites", Journal of Superconductivity and Novel Magnetism,38(1),p.45,(2025).

[3] Van Look, L., B.Y. Zhu, R. Jonckheere, B.R. Zhao, Z.X. Zhao and V.V. Moshchalkov, "Anisotropic vortex pinning in superconductors with a square array of rectangular submicron holes", Physical Review B, 66(21): p. 214511 (2002).

[4]Owjifard Z., Tavana A., Hosseini M., "Geometric Engineering of Pinning Arrays in Superconductor Tapes for Critical Current Density Enhancement Using Conformal Transformation", AIP Advances, 15, 025008(2025).

[5] Reichhardt, C. and N. Grønbech-Jensen, "Critical currents and vortex states at fractional matching fields in superconductors with periodic pinning arrays", Physical Review B, 63(5): p. 054510 (2001).

[6]Li, W., C.J.O. Reichhardt, B. Jankó and C. Reichhardt, "Vortex dynamics, pinning, and magic angles on moiré patterns", Physical Review Research, 3(1): p. 013115 (2021).

[7] Owjifard, Z., Tavana, A. and Hosseini, M., "Critical Current Density Enhancement in Superconductor Tapes Using Moiré Pinning Centers for Device and Power Applications", Journal of Alloys and Compounds, p. 180676 (2025).

[8]Reichhardt, C. and Olson Reichhardt, C.J., "Vortex Molecular Crystal and Vortex Plastic Crystal States in Honeycomb and Kagome Pinning Arrays", Physical Review B, 76(6): p.064523 (2007).

[9] Reichhardt, C. and C.J. Olson Reichhardt, "Moving vortex phases, dynamical symmetry breaking, and jamming for vortices in honeycomb pinning arrays", Physical Review B, 78(22): p. 224511 (2008).

[10] Ray, D., C. Reichhardt and C.J. Olson Reichhardt, "Pinning, ordering, and dynamics of vortices in conformal crystal and gradient pinning arrays", Physical Review B, 90(9): p. 094502 (2014).

[11] Ray, D., C. Reichhardt, B. Jankó and C.J. Olson Reichhardt, "Strongly enhanced pinning of magnetic vortices in type-II superconductors by conformal crystal arrays", Physical Review Letters, 110(26): p. 267001 (2013).

ایده‌های جدید برای حذف آلودگی‌های زیست محیطی

سرانجام، فاطمه ؛ فربد، منصور

گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز

چکیده

آلودگی پلاستیکی یکی از مشکلات بنیادی زیست محیطی در دنیای امروز به شمار می‌رود و معضلی است که در کشورهای در حال توسعه به علت عدم وجود سامانه‌های جمع‌آوری و یا بازیافت زباله، نمود بیشتری پیدا می‌کند. این مشکل، سلامت جامعه، زیستگاه‌های طبیعی و حیات وحش را تهدید می‌کند. اگرچه راه‌کارهای مختلفی برای بازیافت مواد پلاستیکی وجود دارد ولی به علت تولید بسیار زیاد این مواد راه حل‌های مبتکرانه برای تبدیل آنها به محصولات جدید نیاز همیشگی جامعهٔ امروزی است. هدف این تحقیق تبدیل مواد پلاستیکی به محصولی نانوفناورانه به نام نانوکره‌های کربنی و کنترل اندازه‌ی آن‌ها از طریق شکستن ملکول‌های پلاستیک‌ها در درون یک راکتور استیلی در حضور یک کاتالیزور می‌باشد. عواملی مختلفی از قبیل غلظت کاتالیزور و دما بر روی میزان تولید، شکل و اندازه‌ی نانوکره‌ها مؤثر هستند. نانو کره‌های تهیه شده با میکروسکوپ الکترونی SEM و همچنین آنالیز EDX مورد بررسی قرار گرفتند.

واژه های کلیدی: *نانو کره‌های کربنی- کاتالیزور- زباله‌های پلاستیکی.*

Production of carbon nanospheres a new idea to eliminate environmental plastic pollution

Fateme, Saranjam 1; Farbod, Mansoor 1

[1] *Department of Physics, Shahid Chamran University of Ahwaz, Ahwaz*

Abstract

Plastic pollution is one of the fundamental environmental problems in today's world, and it is a problem that has become more prominent in developing countries due to the lack of waste collection or recycling systems. This problem threatens the health of society, natural habitats and wildlife. Although there are various solutions for recycling plastic materials, due to the huge production of these materials innovative solutions to transform them into new products are a constant need of today's society. The purpose of this research is to transform plastic materials into a nanotechnological product called carbon nanospheres and control their size by breaking the plastic molecules inside a steel reactor in the presence of a catalyst. Various factors such as catalyst concentration and temperature are effective in the amount of production, shape and size of nanospheres. The prepared nanospheres were analyzed by SEM and EDX analysis.

***Keywords**: carbon nanospheres, catalyst, plastic waste*

PACS No. 61.46.-w

مقدمه

با افزایش گرایش مردم جهان به مدرن‌تر شدن و مصرف‌گرایی، اثرات مخرب آن را بر محیط زیست مشاهده می‌کنیم. اگرچه فناوری در صدد افزایش راحتی بیشتر برای زندگی انسان هاست؛ ولی زیاد اتفاق می‌افتد که محیط زیست نه تنها از این پیشرفت‌ها بهره‌ای نمی‌برد بلکه موجب تخریب آن و از بین رفتن زیست بوم جانوارن گشته و آنها را با شرایط دشواری روبرو می‌کنند. محیط زیست توسط عوامل بسیاری مانند افزایش آلودگی هوا، خالی شدن منابع انرژی، شرایط آب و هوایی متغیر و زباله‌های پلاستیکی آسیب دیده است [۱].

منابع مختلف آلودگی باعث تغییر ترکیب آب، هوا و خاک و محیط زیست می‌شوند. آلاینده می‌تواند هر ماده شیمیایی (فلز سمی، رادیونوکلئیدها، ترکیبات ارگانوفسفره و گازها)، ماده ژئوشیمیایی (گردوغبار و رسوب)، ارگانیسم‌های بیولوژیکی (تغییر یافته ژنتیکی) و یا یک پدیده فیزیکی مثل گرما و نور زیاد و یا امواج صوتی باشد [۲].

آلودگی محیط زیست با مواد غیر قابل تجزیه موجب آلودگی دائم می‌گردند و از طریق راه‌یابی به بدن حیوانات و گیاهان و سپس بدن انسان زندگی را برای هر سه گونه به خطر می‌اندازد. مصرف بی‌رویه سوخت‌های فسیلی، رها شدن زباله‌های صنعتی و خانگی در طبیعت از این نمونه هستند [۳].

از جمله راه‌کارهایی که برای جلوگیری از آلودگی محیط زیست وجود دارد می‌توان به کاشت درختان بیشتر، استفاده کمتر از پلاستیک‌ها، استفاده از منابع جایگزین انرژی، استفاده از حمل و نقل عمومی، تمیز نگه‌داشتن محیط اطراف، حفظ منابع طبیعی، استفاده مجدد از آب باران، کاهش آلودگی، بازیافت بیشتر و افزایش آگاهی نسبت به این مسائل اشاره کرد [٤].

پلیمرهای گرمانرم

به انواعی ازترکیبات پلیمری گفته می‌شود که در یک دمای خاص و مشخص، شکل‌پذیر و منعطف می‌شوند و پس از سرد شدن، جامد می‌شوند. پلیمرهای گرمانرم با افزایش دما، بدون تغییر شیمیایی ذوب می‌شوند. می‌توان آن‌ها را مکرراً، بدون اینکه در ماهیتشان تغییری حاصل شود، با اعمال حرارت، نرم و به‌وسیله خنک‌کردن سخت نمود. قابلیت بازیافت دارند و فرایند تولید آن‌ها کم هزینه‌تر است. پلی اتیلن (PE)، پلی پروپیلن (PP)، پلی استایرن (PS)، پلی وینیل کلراید (PVC)، پلی کربنات (ABS)، نایلون و برخی دیگر از انواع پلیمرها جزء این دسته از مواد می‌باشند [۵].

پلی‌اتیلن فشرده

اتیلن یا اتن، ساده‌ترین هیدروکربن غیر اشباع بوده و اولین عضو از گروه آلکن‌ها می‌باشد. فرمول شیمیایی آن C_2H_4 بوده، بین دو اتم کربن پیوند دوگانه وجود دارد. اتیلن گازی بیرنگ و آتش‌گیر به‌شمار می‌رود و در ترکیب نفت و گاز طبیعی یافت می‌شود.

پلی‌اتیلن فشرده زنجیره‌های پلیمری بسته دارد و کاملاً فشرده هستند، در نتیجه از پلی‌استر محکم‌تر و سخت‌تر است. از این پلاستیک برای کیسه‌های خوار و بار فروشی، بطری‌های مات شیر، آب‌میوه، شامپو و بطری‌های پزشکی استفاده می‌کنند [٦].

پلی‌اتیلن با چگالی کم

پلی‌اتیلن با چگالی کم (LDPE) منبع بالقوه آلودگی محیطی است. کاربرد پلی‌اتیلن بسیار زیاد است و به دلیل هزینه نسبتاً کم و عدم سختی آنها محبوبیت بالایی دارند، در دهه گذشته افزایش استفاده از پلاستیک و تجمع پلی‌اتیلن در محیط زیست در سرتاسر جهان مورد توجه کارشناسان و دانشمندان محیط زیست قرار گرفته است [۷]. پلی‌اتیلن پرکاربردترین پلیمر در بسته‌بندی است [۸]. پلی‌اتیلن با فرآیندهای حرارتی مانند دمیدن فیلم، اکستروژن ورق یا پوشش اکستروژن روی بسترهایی مانند مقوا به مواد بسته‌بندی تبدیل می‌شود. یکی از پیش نیازهای مهم برای مواد بسته‌بندی مواد غذایی این است که موادی از خود متصاعد نکنند که با محصول تداخل داشته باشد، یعنی باعث بو و طعم شود. به دلیل دماهای بالا که در پردازش پلیمر استفاده می‌شود، تخریب رخ می‌دهد [۸]. قرار گرفتن فیلم LDPE در شرایط جوی، به‌ویژه در برابر تابش خورشیدی در محدوده ۲۹۰–٤۰۰ نانومتر، بر ساختار شیمیایی و در نتیجه خواص مکانیکی و فیزیکی آن تأثیر می‌گذارد [۹].

پلیمرهای گرماسخت

پلیمرهای گرماسخت خانواده‌ای از پلاستیک‌ها هستند که مشخصهٔ آنها این است که معمولاً در مرحله‌ای از فرآیند شکل‌دهی و تولید خود مایع هستند و به‌طور برگشت‌ناپذیری به یک ماده جامد در طول مرحله گرمایش تبدیل می‌شوند. تهیه پلیمرهای گرماسخت معمولاً با دو پدیدهٔ مستقل ژل شدن و شیشه‌ای شدن

مشخص می‌شوند. ژل شدن مربوط به تشکیل شبکهٔ اولیه و شیشه‌ای شدن شامل تبدیل از حالت مایع به حالت جامد است [۱۰].

پلیمرهای گرماسخت به کمک حرارت، کاتالیست‌ها و یا دیگر روش‌های شیمیایی تهیه می‌شوند. پلی استرها و فنولیک‌ها از انواع آنها هستند و بدنه ادوات برقی، تلفن، پریزها و پمپ‌ها از آنها ساخته می‌شوند. به منظور تبدیل انواع پلاستیک‌ها به نانوکره‌های کربنی آزمایش‌های متعددی صورت گرفت که در زیر شرح داده می‌شوند.

شرح آزمایش

در این کار، نانوکره‌های کربنی از پلاستیک‌های دور ریختنی و غیر قابل تجزیه تولید شدند. ابتدا پلاستیک‌های مورد نظر را تهیه و تا وزن مورد نظر اندازه‌گیری و سپس درون یک راکتور استیلی (محفظه استیلی با دریچه بدون منفذ) قرار داده شدند. به منظور انجام واکنش‌های لازم، از نیترات کروم به عنوان کاتالیست استفاده شد. نسبت جرم کاتالیست به جرم پلاستیک به عنوان پارامتر قابل تنظیم در نظر گرفته شد. مقادیر محاسبه شده از پلاستیک‌های مورد نظر و کاتالیست، درون راکتور قرار گرفته و به منظور انجام واکنش در آن محکم بسته شد.

نمونه‌ها در دمای ۷۰۰ درجهٔ سانتی گراد به مدت ۵ ساعت حرارت‌دهی شدند و سپس تا دمای اتاق سرد گردیدند. از نمونه‌ها تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) و آنالیز EDX (آزمایش شناسایی عناصر تشکیل دهنده نمونه‌ها) تهیه شد.

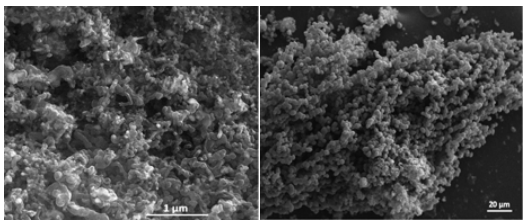
در جدول ۱ شرایط تهیه نمونه‌ها لیست شده‌اند. با توجه به هر یک از شرایط، نمونه‌ها تهیه و آزمایش‌های لازم بر روی محصولات صورت گرفت.

جدول۱ : شرایط تهیه نمونه‌ها را نشان می‌دهد.

شماره نمونه	نوع پلاستیک	جرم پلاستیک (g)	جرم کاتالیست (mg)	دمای واکنش (°C)	زمان حرارت دهی (h)
۱	پلی اتیلن	۲/۵	٤۰۰	۷۰۰	۵
۲	پلی اتیلن	۲/۵	٤۵۰	۷۰۰	۵
۳	پلی اتیلن	۲/۵	۷۵۰	۷۰۰	۵
٤	پلی اتیلن	۲/۵	۸۰۰	۷۰۰	۵

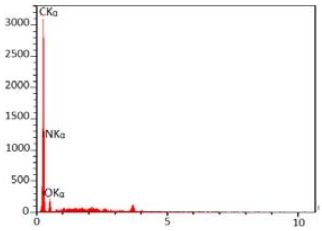
تصاویر SEM و آنالیز EDX

شکل ۱ تصاویر SEM نمونه اول در دو بزرگنمایی متفاوت را نشان می‌دهد. ملاحظه می‌شود که با شرایط نمونه اول نانوکره‌های کربنی تهیه شده‌اند. لازم به ذکر است که با استفاده از نرم افزار دیجی‌مایزر اندازه نانوکره‌ها کمتر از ۱۰۰ نانومتر اندازه‌گیری شد.



شکل ۱: تصاویر SEM نمونه اول. نانوکره‌های کربنی به وضوح دیده می‌شوند.

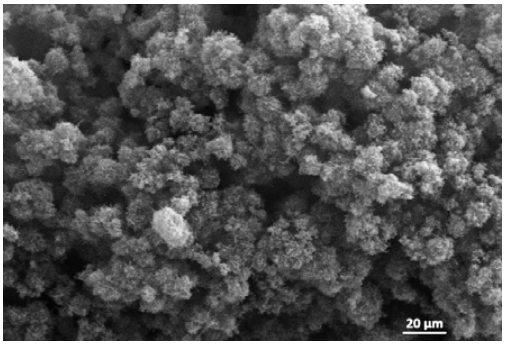
همچنین شکل ۲ آنالیز EDX و جدول عناصر تشکیل دهنده این نمونه را نشان می‌دهد. ملاحظه می‌گردد که حدود ۸۰ درصد جرم مواد تولید شده از کربن تشکیل شده و مابقی عناصر از ازت و اکسیژن تشکیل شده است.



Elt	W%	A%
C	78.43	82.32
N	6.10	5.49
O	15.47	12.19
	100.0	100.00

شکل ۲: آنالیز EDX نمونه اول و جدول عناصر تشکیل دهنده.

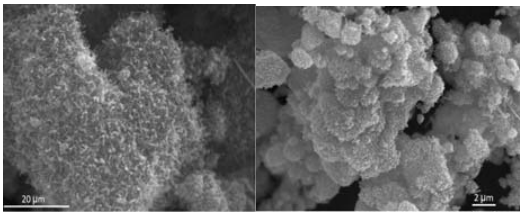
در نمونه‌ی دوم پلاستیک مورد نظر با ٤۵۰mg نیترات کروم در راکتور قرار گرفتند. شکل ۳ تصاویر SEM نمونهٔ دوم مشاهده می‌شود.



شکل ۳: تصاویر SEM نمونهٔ دوم.

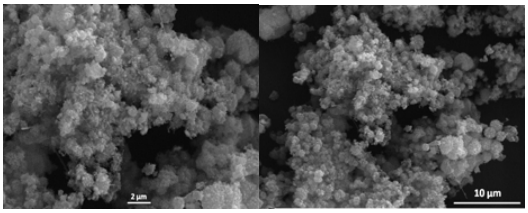
با توجه به مقیاس شکل، ملاحظه می‌گردد که ذرات کربنی با اندازه‌های نانویی تهیه شده‌اند.

در نمونه‌ی سوم پلاستیک مورد نظر با ۷۵۰mg نیترات کروم در کوره قرار گرفتند. شکل ٤ تصاویر SEM نمونهٔ سوم را نشان می‌دهد.



شکل ٤: تصاویر SEM نمونهٔ سوم.

در نمونه چهارم پلاستیک مورد نظر با ۸۰۰mg نیترات کروم در راکتور قرار گرفتند. شکل ٥ تصاویر SEM نمونهٔ چهارم ملاحظه می‌شود.



شکل ٥: تصاویر SEM نمونهٔ نمونه چهارم.

نانوکره‌های کربنی به دلیل پایداری شیمیایی و حرارتی عالی، هدایت الکتریکی بالا و اندازهٔ قابل کنترل، علاقه زیادی را در فناوری‌های تبدیل و ذخیره‌سازی انرژی به خود جلب کرده‌اند. در واقع، این ساختارها در طیف گسترده‌ای از زمینه‌های فناوری مانند جذب، کاتالیز، ذخیره‌سازی هیدروژن یا الکترونیک کاربرد دارند [۱۱].

نتیجه‌گیری

نانوکره‌ها و نانوذرات کربنی از طریق حرارت دادن انواع پلاستیک‌های مورد استفاده روزمره در راکتور مخصوص تهیه شدند. در این روش از نیترات کروم به عنوان کاتالیزور استفاده شد. تاثیر عوامل مختلفی از قبیل مقدار کاتالیزور و نوع پلاستیک بررسی گردید. نتایج نشان می‌دهد با افزایش مقدار کاتالیزور نانوذرات شکل منظم‌تری به خود می‌گیرند و هماهنگ‌تر می‌شوند، افزایش مقدار کاتالیزور راه مناسبی برای کنترل اندازهٔ نانوذرات به‌نظر می‌رسد.

مرجع‌ها

[1] Donohoe, M; "Causes and health consequences of environmental degradation and social injustice"; *soc. Sci. med* **56**, No. 2 (2003) 573-587
[2] Rathnamala, G. V and Ashwini, R. M and Babitha, N; "domestic environmental destructions due to lack of solid waste management in rural areas"; *Adv. Math., Sci. J.* **10**, No. 3 (2021) 1807-1819
[3] Taghavi, N and Udugama, I. A and Zhuang, W-Q and Baroutian, S; "Challenges in biodegradation of non-degradable thermoplastic waste: From environmental impact to operational readiness"; *Biotechnol. Adv.* No. **49**, NO. 4 (2021), 107731.
[4] Schmaltza, E and Melvina, E. C and Dianaa, Z and Gunadyb, E. F and Rittschofa, D and Somarelli, J.A and Virdind, J and Dunphy-Dalya, M.M; "plastic pollution solutions: emerging technologies to prevent and collect marine plastic pollution"; *Environ. Int.* **144**, (2020) 106067.
[5] De Alwis, N and Reeves, J. A and Dolan, M.T and Valloppilly, S and Zanjani, M.B and Ye, Z and Konkolewicz, D; "wavelength-controlled synthesis and degradation of thermoplastic elastomers based on intrinsically photoresponsive phenyl vinyl ketone"; *macromolecules*. **53,** NO. 12 **(**2020), 5199-5207.
[6] Rojas-Lema, S and Torres-Giner, S and Quiles-Carrillo, L and Gomez-Caturla, J and Garcia-Garcia, D and Balart, R; "on the use of phenolic compounds present in citrus fruits and grapes as natural antioxidants for thermo-compressed bio-based high-density polyethylene films"; *Antioxidants*. **10**, (2021), 14.
[۷] Abraham, J and Ghosh, E and Mukherjee, P and Gajendiran, A; "microbial degradation of low density polyethylene"; *AIChE.* **3**, (2015), 462-473.
[۸] Andersson, T and Stålbom, B and Wessle´n, B; "degradation of polyethylene during extrusion, degradation of low-density polyethylene, linear low density polyethylene and high density polyethylene in film extrusion"; *J. Appl. Polym. Sci.* **91**, NO. 3 (2004), 1525-1537.
[۹] Briassoulis, D and Aristopoulou, A and Bonora, M and Verlodt, I; "Degradation characterisation of agricultural low-density polyethylene films"; *Biosyst. Eng.* **88**, NO. 1 **(**2004), 131-143.
[۱۰] Pascault, J-P and Williams, R. J. J; *Thermosetting polymers, CRC press.* **64**, (2002), 519-532.
[۱۱] Nieto-Márquez, A and Romero, R and Romero, A and Valverde, J.L; "Carbon nanospheres: Synthesis, physicochemical properties and applications"; *Journal of Materials Chemistry.* **21**, NO. 5 **(**2011), 1664-1672.

طراحی آئروژل‌های فوق‌سبک سلسله‌مراتبی مبتنی بر کیتوسان حاوی $MoSe_2$/MMT و $MoSe_2$/MMT/MWCNT با عملکرد تقویت‌شده در جذب امواج مایکروویو

دهقانی دشتابی ، مهدیه[۱] ؛ حمت آرا، هدی[۲]؛محبی، مسعود

[۱،۲،۳]دانشکده فیزیک دانشگاه ولیعصر (عج)، رفسنجان

چکیده

جاذب‌های سبک و متخلخل امواج الکترومغناطیسی به دلیل نقش مؤثر در کاهش آلودگی الکترومغناطیسی، محافظت از تجهیزات الکترونیکی حساس و بهبود عملکرد سامانه‌های مخابراتی و راداری، توجه فزاینده‌ای را به خود جلب کرده‌اند. در این پژوهش، آئروژل‌های فوق‌سبک $MoSe_2$/MMT-Chitosan و $MoSe_2$/MMT/MWCNT-Chitosan به روش خشک‌کردن انجمادی سنتز شدند. آئروژل حاوی کربن نانوتیوب حداقل افت بازتاب ۴۱- دسی‌بل را در ضخامت ۱٫۷ میلی‌متر نشان داد بطوریکه پهنای باند جذب مؤثر ۱۰ گیگاهرتزی آن کل باندهای X و Ku راپوشش می‌دهد. عملکرد برجسته جذب مایکروویو به اثر هم‌افزایی اتلاف هدایتی، قطبش بین‌سطحی و دوقطبی، و همچنین بازتاب و پراکندگی چندگانه ناشی از ساختار متخلخل آئروژل نسبت داده می‌شود. نتایج حاصل، قابلیت بالای این ساختار سبک و پایدار را برای استفاده در جاذب‌های پیشرفته امواج مایکروویو و سامانه‌های محافظت الکترومغناطیسی نشان می‌دهد.

واژه های کلیدی: *جذب مایکروویو، $MoSe_2$، مونت موریلونیت، کیتوسان.*

Design of Hierarchical Ultralight Chitosan-Based Aerogels Incorporating $MoSe_2$/MMT and $MoSe_2$/MMT/MWCNT with Enhanced Microwave Absorption Performance

Dehghani-Dashtabi; Mahdieh[1], Hekmatara; Hoda[2], Mohebbi, Masoud[3]

[1,2,3] Department of Physics, University of Vali-e-Asr, Rafsanjan

Abstract

Lightweight and porous electromagnetic absorbers have attracted increasing attention due to their important role in electromagnetic attenuation, shielding of sensitive electronic equipment, and improving the performance of communication and radar systems. In this study, ultralight aerogels $MoSe_2$/MMT-Chitosan and $MoSe_2$/MMT/MWCNT-Chitosan were synthesized by freeze-drying method. The carbon nanotube-containing aerogel showed a minimum reflectance loss of -41 dB at a thickness of 1.7 mm, and its 10 GHz material absorption bandwidth covers the entire X and K bands. The outstanding microwave performance is attributed to the synergistic effect of conduction loss, interfacial and dipole polarization, as well as reflection and multiple performance due to the porous structure of the aerogel. The results demonstrate the superior capability of this lightweight and stable structure for use in advanced microwave absorbers and electromagnetic shielding systems.

***Keywords**: Microwave absorption, $MoSe_2$, Montmorillonit, Chitosan*

PACS No.61.78

مقدمه

گسترش استفاده از سامانه‌های الکترونیکی و مخابراتی موجب افزایش آلودگی‌های الکترومغناطیسی در محیط شده است که می‌تواند عملکرد تجهیزات حساسی مانند سیستم‌های مخابراتی، ناوبری و راداری را مختل کند. بنابراین، توسعه مواد جاذب امواج مایکروویو به‌عنوان راهکاری مهم برای کاهش تداخل الکترومغناطیسی و بهبود عملکرد سامانه‌ها مورد توجه قرار گرفته است. [۱]. نانوماده دی‌سلنید مولیبدن ($MoSe_2$) دارای چگالی کم و توانایی ایجاد جریان تحت میدان الکترومغناطیسی هستند، اما رسانایی پایین آن‌ها کاربرد مستقیمشان را به‌عنوان جاذب محدود می‌کند. ترکیب این نانوذرات با مواد کربنی می‌تواند با کنترل مورفولوژی و جلوگیری از تجمع ذرات، اتلاف و تطابق امپدانس را بهبود داده و بازده جذب امواج مایکروویو را به‌طور قابل توجهی افزایش دهد[۲].ازجمله مواد سرامیکی جاذب از قبیل مونت موریلونیت (MMT) ، یک ماده دوبعدی سبک و مقرون‌به‌صرفه است که دارای سطح ویژه بالا و ساختار لایه‌ای تک‌لایه می‌باشد و به دلیل فضای بین‌لایه‌ای خود قابلیت تبادل یونی دارد. این ویژگی‌ها باعث شده‌اند که MMT در کاربردهای متنوعی مانند زیست‌حسگرها و کاتالیزورها نیز مورد استفاده قرار گیرد [۳].

در سال‌های اخیر، استفاده از جاذب‌های سبک بر پایه بیوپلیمرهای متخلخل به‌عنوان رویکردی نوین مطرح شده است. این مواد به دلیل ساختار منظم نانویی، با افزایش قطبش سطحی و پراکندگی چندگانه، موجب بهبود تطابق امپدانس و افزایش اتلاف انرژی می‌شوند. در این میان، کیتوسان به‌عنوان یک بیوپلیمر زیست‌تخریب‌پذیر و ارزان، به دلیل وجود گروه‌های عاملی فعال، گزینه‌ای مناسب برای توسعه جاذب‌های سبز امواج الکترومغناطیسی محسوب می‌شود. [۴].

هدف این پژوهش، سنتز آئروژل‌های سبک $MoSe_2$/MMT-Chitosan و $MoSe_2$/MMT/MWCNT-Chitosan و بررسی اثر افزودن نانولوله‌های کربنی چنددیواره بر ریزساختار و مکانیزم‌های اتلاف امواج الکترومغناطیسی است. همچنین، ارتباط بین ویژگی‌های ساختاری و عملکرد جذب مایکروویو به‌منظور دستیابی به جاذب‌های سبک با پهنای باند جذب گسترده و عملکرد بالا به‌صورت نظام‌مند ارزیابی شد

روش های تجربی:

ساختار بلوری نمونه‌ها با آزمون XRD (Philips PW1730) ، مورفولوژی با FESEM (TESCAN MIRA2) از جمهوری چک و خواص الکترومغناطیسی با استفاده از آنالیز شبکه برداری (VNA) مجهز به موجبر کالیبره‌شده WR-90 اندازه‌گیری شد.

ساخت نانوکامپوزیت $MoSe_2$/MMT:

برای سنتز $MoSe_2$/MMT ، ابتدا پیش‌ماده‌های مولیبدن و سلنیوم در آب دی‌یونیزه حل شده و با استفاده از عامل کاهنده تحت هم‌زدن و سونیکیشن واکنش احیا آغاز شد. سپس مونتموریلونیت به محلول اضافه شد و مخلوط در شرایط هیدروترمال در اتوکلاو واکنش داده شد. در نهایت، محصول پس از شست‌وشو و خشک‌کردن در دمای پایین به‌دست آمد.

ساخت $MoSe_2$/MMT/MWCNT:

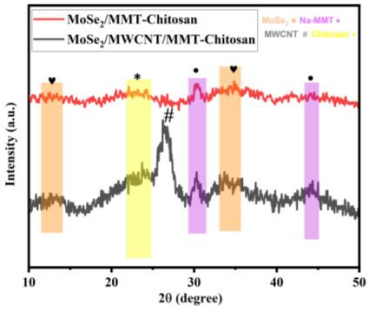
ابتدا مقدار ۰/۲ گرم از کامپوزیت $MoSe_2$/MMT همراه با ۰/۱گرم MWCNTدر مخلوط آب و اتانول (نسبت ۱:۱) پراکنده شد. سپس محلول به مدت ۳۰ دقیقه سونیکیت و ۲۴ ساعت در دمای محیط هم زده شد. در نهایت، نمونه در آون در دمای ۴۰ درجه سانتی‌گراد خشک گردید.

ساخت آئروژل $MoSe_2$/MMT/MWCNT-Chitosan:

۲ گرم کیتوسان در محلول اسید استیک حل شده و هیدروژل یکنواختی تشکیل شد. سپس نانوکامپوزیت $MoSe_2$/MWCNT/MMTدر آب دی‌یونیزه پراکنده و به هیدروژل اضافه گردید. پس از افزودن گلوتارآلدئید به‌عنوان عامل شبکه‌ای‌کننده و هم‌زدن ۲۴ ساعته، مخلوط در قالب ریخته شده و تحت فرآیند خشک‌کردن انجمادی قرار گرفت تا آئروژل نهایی تشکیل شود.

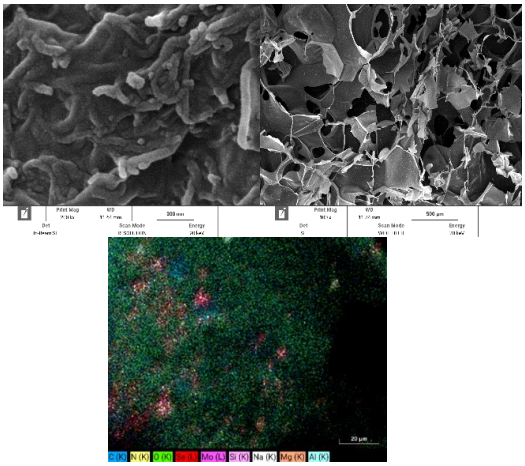
بحث و نتایج:

الگوهای XRD آئروژل‌های سنتز شده در شکل ۱ ارائه شده‌اند. قله‌های مشاهده‌شده در زوایای ۱۲/۱۶°، ۳۳/۱۱° به صفحات بلوری (۰۰۲) و(۱۰۲) فاز 2H-$MoSe_2$ نسبت داده می‌شوند که تشکیل موفق این فاز را تأیید می‌کنند [۵].همچنین، قله ۳۰/۲۸° و ۴۳/۲۸° مربوط به ساختار لایه‌ای MMT بوده و قله ضعیف ۱۸°/ ۲۳به ماهیت نیمه‌بلوری کیتوزان ناشی از پیوندهای هیدروژنی بین گروه‌های آمین و هیدروکسیل اختصاص دارد همچنین ظهور پیک ۲۶/۱۳°نشان‌دهنده حضور موفق MWCNT در ساختار کامپوزیت است [۶–۷].عدم تغییر محسوس موقعیت پیک‌های اصلی بیانگر حفظ ساختار بلوری اجزا پس از تشکیل کامپوزیت بوده و عدم مشاهده پیک‌های اضافی نیز نشان‌دهنده خلوص فازی مناسب و عدم تشکیل فازهای ثانویه در نمونه‌های سنتز شده است.



شکل۱: الگوی پراش پرتو ایکس آئروژل $MoSe_2$/MMT/MWCNT-Chitosan

شکل۲ تصاویر FESEM آئروژل متخلخل $MoSe_2$/MWCNT/MMT-Chitosan کیتوسان را نشان می‌دهد. این تصاویر وجود یک ساختار سه‌بعدی متخلخل با حفرات نسبتاً یکنواخت و دیواره‌های زبر و پیوسته را آشکار می‌سازد. این مورفولوژی متخلخل ناشی از برهم‌کنش مناسب میان نانوذرات $MoSe_2$، نانولوله‌های کربنی چنددیواره، صفحات لایه‌ای MMT و ماتریس کیتوسان است. حضور نانولوله ها به عنوان چارچوب‌های تقویت‌کننده و سطح ویژه بالای MMT موجب افزایش استحکام دیواره‌های حفرات و حفظ ساختار متخلخل در طی فرآیند خشک‌کردن شده است. همچنین، توزیع مناسب اجزای صفربعدی $MoSe_2$، یک‌بعدیMWCNT ، دوبعدی MMT و ماتریس سه‌بعدی کیتوزان، تشکیل موفق ساختار چندبعدی 0D/1D/2D/3D را تأیید می‌کند .نتایج آنالیز نگاشت عنصری نیز حضور و توزیع یکنواخت عناصرC ، O وN مربوط به ماتریس کیتوسان و کربن نانوتیوب، عناصر Mo و Se مربوط به $MoSe_2$ و عناصرMg ، Si و Al مربوط به مونتموریلونیت سدیمی را نشان می‌دهند. این نتایج بیانگر پراکندگی مناسب اجزای مختلف و تشکیل موفق نانوکامپوزیت $MoSe_2$/MWCNT/MMT-Chitosan است[۸].



شکل۲: تصاویر FESEM و نگاشت عنصری از آئروژل $MoSe_2$/MMT/MWCNT-Chitosan

بررسی عملکرد جذب مایکروویو آئروژل ها

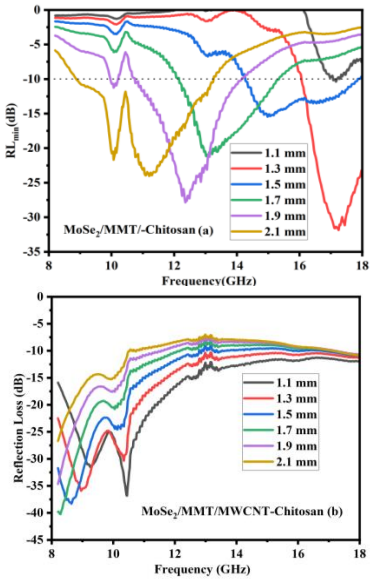
مواد جاذب امواج الکترومغناطیسی مطلوب باید علاوه بر برخورداری از وزن کم و ضخامت پایین، توانایی جذب مؤثر امواج در پهنای باند وسیع را نیز داشته باشند. به‌منظور ارزیابی عملکرد جذب مایکروویو، پارامترهای الکترومغناطیسی نمونه‌ها در محدوده فرکانسی ۸–۱۸ گیگاهرتز با استفاده از آنالیز شبکه برداری (VNA) اندازه‌گیری و مقادیر اتلاف بازتاب (RL) در ضخامت‌های ۱/۱ تا ۲/۱ میلی‌متر با استفاده از نظریه خطوط انتقال محاسبه شدند که روابط مربوطه در ادامه ارائه شده است.

$$RL(dB) = 20\log\left|\frac{Z_{in}-Z_0}{Z_{in}+Z_0}\right| \quad (1)$$

$$Z_{in} = Z_0\sqrt{\mu_r/\varepsilon_r}\tan h\left[j\left(\frac{2\pi f d}{c}\right)\sqrt{\varepsilon_r\mu_r}\right] \quad (2)$$

در این روابط ، Z_0 به امپدانس محیط خلا اشاره دارد و Z_{in} نمایانگر امپدانس ورودی ماده جاذب است. در اینجا، f نشان‌دهنده فرکانس، c سرعت انتشار موج الکترومغناطیسی در خلاء، و d ضخامت ماده

جاذب می‌باشد. همچنین، j به عنوان واحد موهومی در نظر گرفته شده است. نمودار افت بازتاب بر حسب فرکانس برای آئروژل‌های MoSe2/MMT–Chitosan(a) و MoSe2/MMT/MWCNT–Chitosan(b)در باندهای X و Ku اندازه گیری شد، مقدارحداقل افت بازتاب برای نمونه (a) ، dB ۳۳ – در فرکانس ۱۷٫۲۱ گیگاهرتز با ضخامت۱٫۳ میلیمتر و پهنای نوار ۴ گیگاهرتز در ضخامت ۲٫۱ میلی متر بدست آمد و برای نمونه (b)افت بازتاب ۴۱- دسیبل در فرکانس ۸٫۱۳ گیگاهرتز با پهنای نوار ۱۰ گیگاهرتز در ضخامت ۱٫۷میلی‌متر بدست آمد ، از آنجا که افت بازتاب زیر dB ۱۰- نشان دهنده ۹۰ درصد جذب است این آئروژل در فرکانس های انتخابی نوار x و ku بالای ۹۰ درصد موج الکترومغناطیسی را در پهنای نوار وسیع جذب کرده است در نمونه فاقدMWCNT ، جذب امواج عمدتاً ناشی از تلفات دی‌الکتریک و پراکندگی چندگانه در ساختار متخلخل است، در حالی‌که افزودن MWCNTبا ایجاد شبکه رسانا، اتلاف رسانشی و اثر هم‌افزایی را تقویت کرده و عملکرد جذب را به‌طور قابل‌توجهی بهبود می‌بخشد [۹].



شکل۳: نمودار افت بازتاب برحسب فرکانس آئروژل MoSe2/MMT/- Chitosan و MoSe2/MMT/MWCNT-Chitosan

نتیجه گیری

در این پژوهش، یک آئروژل فوق‌سبک مبتنی بر کیتوسان و نانوکامپوزیت MoSe2/MMT/MWCNT به روش خشک‌کردن انجمادی سنتز شد. نمونه بهینه افت بازتاب ۴۱- دسی‌بل را در ضخامت ۱٫۷ میلی‌متر و پهنای باند جذب مؤثر پوشش‌دهنده کل باندهای X و Ku نشان داد. این عملکرد به هم‌افزایی اتلاف رسانشی، قطبش و ساختار متخلخل آئروژل نسبت داده شد و بیانگر پتانسیل بالای آن برای کاربرد در جاذب‌های مایکروویو و محافظت الکترومغناطیسی است.

مرجع‌ها

[۱] M.Guo, M.Lin, J.Xu, Y.Pan, C.Ma and G.Chen; "Reduced Graphene Oxide Modified Nitrogen-Doped Chitosan Carbon Fiber with Excellent Electromagnetic Wave Absorbing Performance"; *Nanomaterials* **14**, (2024) 587.

[۲] X. Y. Fu, Q.Zheng, L.Li, and M. S. Cao; "Vertically implanting $MoSe_2$ nanosheets on the RGO sheets towards excellent multi-band microwave absorption"; *Carbon* **197**, (2024) 324-333.

[۳] X. Zhang, H.Yi, H.Bai, Y.Zhao, F.Min and S.Song ; "Correlation of montmorillonite exfoliation with interlayer cations in the preparation of two-dimensional nanosheets"; *Rsc Advances* **66**, (2017) 41471-41478.

[۴] Y.Tian, D.Estevez, H.Wei, M.Peng, L.Zhou, P.Xu and F.Qin ; "Chitosan-derived carbon aerogels with multiscale features for efficient microwave absorption"; *Chemical Engineering Journal* **421**, (2021) 129781.

[۵] M. Hasanpour, A.Pardakhty and S.Tajik ; "The development of disposable electrochemical sensor based on $MoSe_2$-RGO nanocomposite modified screen printed carbon electrode for amitriptyline determination in the presence of carbamazepine, application in biological and water samples"; *Chemosphere*, **308** (2022)136336.

[۶] S. F.Almojil and A. I. Almohana ; "Montmorillonite clay decorated with Al-Mg LDH as a strong and retrievable nanocomposite for decontamination of wastewater containing chromium (VI) and arsenic (III) toxic ions"; *Biomass Conversion and Biorefinery*, **23** (2024) 30029-30045.

[۷] C.Rigo, E. D. C.Severo, M. A.Mazutti, G. L.Dotto, S. L.Jahn, A.Gündel and E. L. Foletto ; "Preparation of nickel ferrite/carbon nanotubes composite by microwave irradiation technique for use as catalyst in photo-fenton reaction"; *Materials Research*, **20** (2017) 311-316 .

[۸] M.Dehghani-Dashtabi, H.Hekmatara, M.Mohebbi; "Tuned decoration of sodium montmorillonite (Na-MMT) nanoclay with $MoSe_2$/RGO for enhancing microwave absorption"; Scientific Reports, **15** (2025) 28731.

[۸]] M.Dehghani-Dashtabi, H.Hekmatara, M.Mohebbi; "Ultralight microwave absorber with an enhanced absorption performance based on chitosan aerogel; " Scientific Reports,**16** (2026) 9475.

ساخت و مشخصه‌یابی نانوحباب‌های مونتاژ شده با نانوذرات سولفید مس دوپ شده با نقره

محمودیان ، زهرا[۱] ؛ احدیان، محمد مهدی[۱*] ؛ مداح حسینی ، سید حمیدرضا[۱،۲]

[۱] مرکز علوم و فناوری نانو پژوهشکده علوم و فناوری‌های همگرا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

[۲] دانشکده مهندسی و علم مواد، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

چکیده

نانوحباب‌ها به دلیل اندازه بسیار کوچک و پایداری مناسب، در سال‌های اخیر مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته‌اند. این ساختارها می‌توانند به‌عنوان حامل گاز عمل کرده و در کنار نانوذرات، موجب بهبود برخی ویژگی‌های فیزیکی و عملکردی سامانه شوند. در این پژوهش، نانوذرات سولفید مس دوپ‌شده با نقره به روش هم‌رسوبی سنتز شدند. برای بررسی مورفولوژی و ریزساختار نانوذرات سنتز شده از میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) و میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM) استفاده شد. همچنین به‌منظور تعیین ترکیب عنصری نمونه‌ها، آنالیز طیف‌سنجی پراکندگی انرژی پرتو ایکس (EDX) انجام گرفت. سپس نانوحباب‌های اکسیژن به روش فشرده‌سازی مکرر و بر پایه خودآرایی در فصل مشترک گاز–مایع تهیه و با نانوذرات مونتاژ شدند. برای تأیید تشکیل نانوحباب‌ها و بررسی اندازه آن‌ها از مشاهده پدیده تیندال و آزمون پراکندگی دینامیکی نور (DLS) استفاده شد.

واژه های کلیدی: *نانوحباب، نانوذرات سولفید مس، روش هم رسوبی، پدیده تیندال.*

Synthesis and Characterization of Nanobubbles Assembled with Silver-Doped Copper Sulfide Nanoparticles

Mahmoodian, Zahra[1]; Ahadian, Mohammad Mahdi [1] ; Madaah Hosseini, Hamid Reza [1,2]

[1] *Center for Nanoscience and Nanotechnology, Institute for Convergence Science & Technology (ICST), Sharif University of Technology, Tehran, Iran*

[2] *Department of Materials Science and Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran*

Abstract

Nanobubbles have attracted increasing attention in recent years due to their extremely small size and high stability. These structures can act as gas carriers and, when combined with nanoparticles, may improve certain physical and functional properties of the system. In this study, silver-doped copper sulfide (CuS:Ag) nanoparticles were synthesized using a co-precipitation method. The morphology and microstructure of the synthesized nanoparticles were investigated using scanning electron microscopy (SEM) and transmission electron microscopy (TEM). In addition, energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDX) analysis was performed to determine the elemental composition of the samples. Subsequently, oxygen nanobubbles were prepared using a repeated compression method based on gas–liquid interfacial self-assembly and assembled with the nanoparticles. The formation of nanobubbles and their size distribution were confirmed by observing the Tyndall effect and by dynamic light scattering (DLS) measurements.

***Keywords**: Nanobubbles, Copper Sulfide Nanoparticles, Co-precipitation Method, Tyndall Effect*

PACS No: 61, 68, 81

مقدمه

در سال‌های اخیر، نانوساختارها به دلیل ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی منحصربه‌فرد خود توجه زیادی را در حوزه‌های مختلف علمی به خود جلب کرده‌اند. در میان آن‌ها، نانوذرات سولفید مس (CuS) به دلیل خواص نوری و الکترونی مناسب و پایداری مطلوب، به‌عنوان یکی از نانومواد مهم مورد مطالعه قرار گرفته‌اند [1–6]. دوپینگ این نانوذرات با فلزاتی مانند نقره می‌تواند با ایجاد تغییر در ساختار الکترونی، برخی ویژگی‌های فیزیکی و عملکردی آن‌ها را بهبود بخشد [7]. از سوی دیگر، نانوحباب‌ها به دلیل اندازه بسیار کوچک، سطح ویژه بالا و پایداری قابل توجه در محیط‌های مایع، به‌عنوان سامانه‌هایی مناسب برای انتقال گاز و افزایش برهم‌کنش‌های بین‌سطحی شناخته می‌شوند [8]. ترکیب نانوذرات با نانوحباب‌ها می‌تواند منجر به ایجاد ساختارهایی با کارایی بهبود یافته شود، زیرا حضور نانوحباب‌ها امکان افزایش سطح تماس و فراهم شدن بستر مناسب برای مونتاژ نانوذرات را فراهم می‌کند [9]. در این میان، روش‌های مبتنی بر خودآرایی در فصل مشترک گاز–مایع به‌عنوان رویکردی ساده و مؤثر برای تولید نانوحباب‌ها مطرح شده‌اند [10]. یکی از این روش‌ها، روش فشرده‌سازی مکرر است که در آن با ایجاد چرخه‌های متوالی فشار، شرایط لازم برای تشکیل و پایداری نانوحباب‌ها فراهم می‌شود. در این پژوهش، نانوذرات سولفید مس دوپ‌شده با نقره (CuS:Ag) به روش هم‌رسوبی سنتز شدند و نانوحباب‌های اکسیژن به روش فشرده‌سازی مکرر تهیه و با نانوذرات مونتاژ گردیدند. به‌منظور بررسی ویژگی‌های ساختاری و مورفولوژیکی نمونه‌ها از آزمون‌های XRD، FESEM-EDS، TEM و DLS استفاده شد.

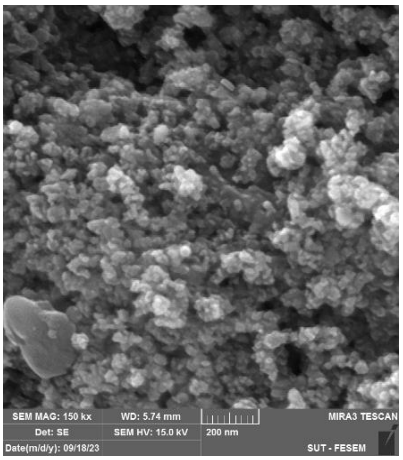
بخش تجربی

مس کلراید دو آبه ($CuCl_2.2H_2O$) و نیترات نقره ($AgNO_3$) از شرکت مرک (Merck) و سدیم سولفید (Na_2S) از شرکت سیگما آلدریچ (Sigma-Aldrich) تهیه و بدون خالص‌سازی اضافی استفاده شدند. تمامی محلول‌ها با استفاده از آب دی‌یونیزه (DI) تهیه گردیدند. ابتدا ۰,۲۵۲ میلی مول $CuCl_2.2H_2O$ و ۰,۱۵٤ میلی مول سیترات سدیم در ۲۰۰ میلی لیتر آب (DI) حل شده و مخلوط به مدت ۳۰ دقیقه در دمای اتاق هم زده شد. در ادامه، مقدار مشخصی از پیش‌ماده نقره به محلول افزوده شد تا فرآیند دوپینگ نقره در ساختار نانوذرات انجام شود. سپس ۲۰۰ میکرولیتر از محلول آبی $Na_2S{\cdot}9H_2O$ با هم زدن به مدت ۵ دقیقه اضافه شد. . پس از آن، مخلوط واکنش به مدت ۱۵ دقیقه در دمای ۹۰ درجه سانتی‌گراد نگهداری شد. در نهایت، یک محلول آبی سبز تیره حاوی نانوذرات CuS:Ag به دست آمد. نانوحباب‌های مونتاژ شده با روش فشرده‌سازی مکرر تهیه شدند. به طور خلاصه، ۲ میلی‌لیتر آب دیونیزه (DI) و نانوذرات CuS:Ag با غلظت های مختلف به ویال های شیشه ای ٤ میلی‌لیتری اضافه شدند. سپس ویال مهر و موم شد. پس از آن، یک سرنگ ۵ میلی لیتری حاوی ۳ میلی لیتر هوا همراه با سوزن داخل ویال قرار داده شد. نوک سوزن در طول فرآیند همیشه زیر سطح آب نگه داشته می‌شود. کل فرآیند حرکات بالا و پایین پیستون به عنوان یک سیکل فشرده سازی ثبت شد.

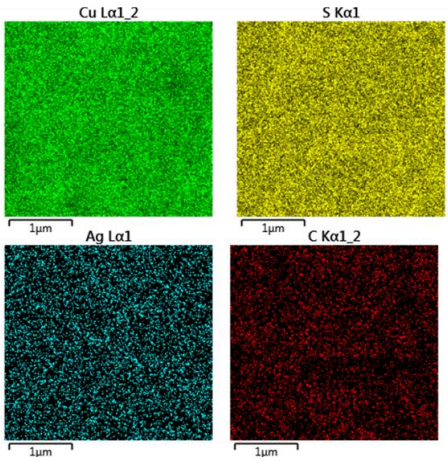
نتایج و بحث

مورفولوژی سطحی و ترکیب عنصری نانوذرات CuS:Ag با استفاده از FESEM-EDS مورد بررسی قرار گرفت. تصویر FESEM و طیف EDS به‌ترتیب در شکل‌های ۱ و ۲ ارائه شده‌اند. بر اساس تصویر FESEM (شکل ۱)، نانوذرات دارای مورفولوژی تقریباً کروی با توزیع نسبتاً یکنواخت در سطح نمونه هستند. اندازه ذرات در محدوده نانومتری قرار داشته و تجمع قابل‌توجهی مشاهده نمی‌شود که این امر نشان‌دهنده کنترل مناسب فرآیند سنتز به روش هم‌رسوبی است. یکنواختی مورفولوژی و توزیع ذرات می‌تواند نقش مؤثری در بهبود خواص فیزیکی و عملکردی نمونه داشته باشد. توزیع فضایی عناصر در نانوساختار سنتز شده با استفاده از نقشه‌برداری عنصری (EDS Mapping) مورد بررسی قرار گرفت که نتایج آن در شکل ۲ نشان داده شده است. نقشه‌های عنصری مربوط به مس (Cu)، گوگرد (S) و نقره (Ag) بیانگر توزیع نسبتاً یکنواخت این عناصر در سراسر نانوذرات هستند. حضور سیگنال‌های مربوط به نقره در کنار مس و گوگرد نشان‌دهنده موفقیت‌آمیز بودن فرآیند دوپینگ و توزیع مناسب نقره

در ساختار نانوذرات CuS است. همچنین حضور عنصر کربن (C) در نقشه‌ها به عامل پایدارکننده سیترات نسبت داده می‌شود که سطح نانوذرات را پوشش داده است. همپوشانی نقشه‌های عنصری بیانگر عدم مشاهده تجمع قابل توجه عناصر در نمونه سنتز شده است.

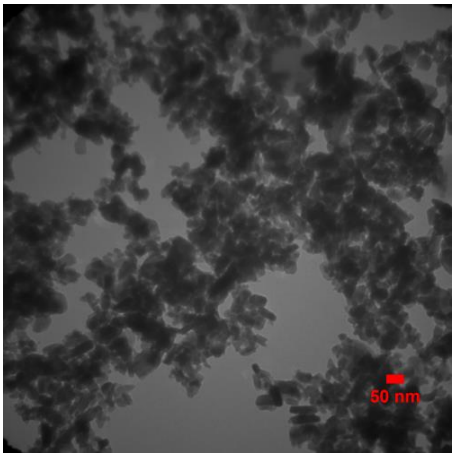


شکل ۱: تصویر FESEM نانوذرات CuS:Ag.



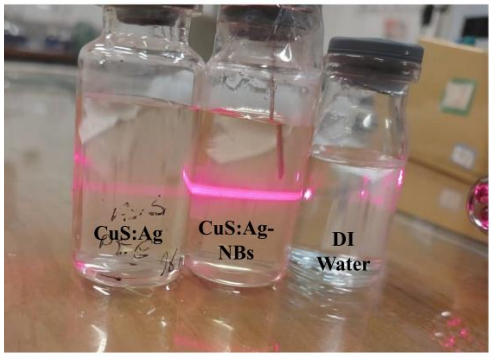
شکل ۲: نقشه‌برداری عنصری نانوذرات CuS:Ag از عناصر Cu, S, C و Ag

به منظور بررسی دقیق‌تر اندازه، شکل و ساختار داخلی نانوذرات، آنالیز TEM انجام شد. تصویر TEM در شکل (۳) نشان‌دهنده نانوذراتی با مورفولوژی عمدتاً کروی و نیمه‌کره‌ای است که دارای توزیع اندازه باریکی هستند.



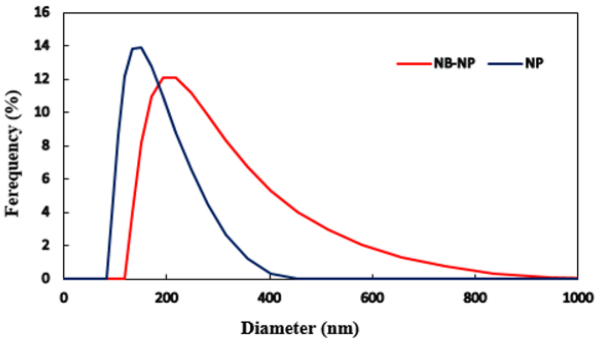
شکل ۳: تصویر میکروسکوپ الکترونی عبوری نانوذرات CuS:Ag

جهت تایید اولیه بر تشکیل نانوحباب‌های اکسیژن در محیط آبی، از آزمون انتشار نور تیندال (Tyndall effect) بهره گرفته شد. بر اساس مشاهدات ارائه شده در شکل ٤، عبور پرتو لیزر از میان سوسپانسیون نانوحباب‌های (NBs) مونتاژ شده با نانوذرات منجر به ظهور یک مسیر نوری درخشان و مشخص گردید، در حالی که آب دی‌یونیزه به دلیل فقدان مراکز پراکنده کننده نور، کاملاً شفاف باقی ماند و هیچ مسیر نوری در آن رویت نشد. پایداری و وضوح این اثر فیزیکی در محلول نانوحباب، گواهی بر حضور و توزیع یکنواخت حباب‌هایی در مقیاس نانو است که به عنوان مراکز پراکندگی نور عمل می‌کنند. این مشاهده کیفی، تشکیل موفقیت‌آمیز نانوحباب‌های پایدار را پیش از انجام آنالیزهای کمی تأیید می‌نماید.



شکل ۴: پدیده تیندال در نانوحباب‌های مونتاژ شده با نانوذرات CuS:Ag.

توزیع اندازه هیدرودینامیکی نانوذرات (NP) و سامانه جفت‌شده نانوحباب–نانوذره (NB-NP) با استفاده از DLS مورد ارزیابی قرار گرفت که نتایج آن در شکل ۵ ارائه شده است. طبق نمودار، نانوذرات CuS:Ag توزیع باریکی را نشان می‌دهند که پیک اصلی آن در حدود ۱۴۰ نانومتر قرار دارد. با اتصال این نانوذرات به نانوحباب‌های اکسیژن، جابجایی مشخصی در پیک توزیع به سمت اندازه‌های بزرگتر مشاهده می‌شود، به‌طوری که میانگین اندازه در حالت NB-NP به حدود ۲۲۰ نانومتر افزایش یافته است. این افزایش قطر هیدرودینامیکی، گواهی بر تشکیل موفقیت‌آمیز مجتمع‌های نانوحباب–نانوذره و استقرار ذرات بر روی فصل مشترک گاز–مایع نانوحباب‌هاست.



شکل ۵: توزیع سایز نانوذرات قبل و بعد از اتصال به نانوحباب‌ها

نتیجه‌گیری

نتایج حاصل از مشخصه‌یابی‌ها تأیید کرد که نانوذرات CuS:Ag با مورفولوژی کروی و اندازه یکنواخت به‌طور موفقیت‌آمیز بر روی نانوحباب‌های اکسیژن مونتاژ شده‌اند. این سامانه جفت‌شده (NB-NP) با توزیع اندازه پایدار، بستری ایده‌آل برای کاربردهای زیستی فراهم می‌کند که هم‌زمان محدودیت‌های هیپوکسی را از طریق نانوحباب‌ها و کارایی فوتوترمال را از طریق نانوذرات بهبود می‌بخشد. برای اندازه‌گیری غلظت اکسیژن محلول روش‌های مختلفی از جمله روش‌های الکتروشیمیایی، روش‌های شیمیایی (مانند روش وینکلر) و روش‌های نوری مبتنی بر فلورسانس مورد استفاده قرار می‌گیرند. در این پژوهش، اندازه‌گیری مستقیم اکسیژن محلول انجام نشد و به‌جای آن، غلظت گونه‌های فعال اکسیژن با استفاده از روش فلورسانس مورد ارزیابی قرار گرفت. در پژوهش‌های آتی، می‌توان با بهره‌گیری از حسگرهای گازی فوق‌حساس، کمّی‌سازی دقیق غلظت اکسیژن آزاد شده از نانوحباب‌های مونتاژ شده با نانوذرات CuS:Ag را مورد بررسی قرار داد. این رویکرد می‌تواند پتانسیل کاربردی نانوحباب‌ها را در زمینه‌هایی نظیر دارورسانی هدفمند، تصویربرداری تشخیصی، یا بهبود فرآیندهای کاتالیزوری به طور قابل توجهی روشن سازد.

سپاسگزاری

بدینوسیله از حمایتهای معاونت پژوهش و فناوری دانشگاه صنعتی شریف در رابطه با این پژوهش سپاسگزاری می نماید.

مرجع‌ها

[1] J. Ma, N. Li, J. Wang, Z. Liu, Y. Han, Y. Zeng, In vivo synergistic tumor therapies based on copper sulfide photothermal therapeutic nanoplatforms, *Exploration* 3 (2023).
[2] X. Wu, K. Liu, Q. Huang, Q. Zhang, X. Yang, X. Liu, R. Wang, Photothermal therapy based on cus nanoparticles for alleviating arterial restenosis induced by mechanical injury of endovascular treatment, *Front. Mater* 7 (2021) 1–10.
[3] A.N. Nikam, A. Pandey, G. Fernandes, S. Kulkarni, S.P. Mutalik, B.S. Padya, S.D. George, S. Mutalik, Copper sulphide based heterogeneous nanoplatforms for multimodal therapy and imaging of cancer: Recent advances and toxicological perspectives, *Coord. Chem. Rev* 419 (2020) 213356.
[4] K. Poudel, M. Gautam, S.G. Jin, H.G. Choi, C.S. Yong, J.O. Kim, Copper sulfide: An emerging adaptable nanoplatform in cancer theranostics, *Int. J. Pharm* 562 (2019) 135–150.
[5] S. Goel, F. Chen, W. Cai, Synthesis and biomedical applications of copper sulfide nanoparticles: From sensors to theranostics, *Small* 10 (2014) 631–645.
[6] H. Kurt, İ.A. Çekceoğlu, E.G. Acar, E. Aslan, S.S. Ozel, A. Sarilmaz, İ.H. Patir, Investigation of antibacterial activities of copper based multinary sulfide alloys, *J. Environ. Chem. Eng.* 12 (2024).
[7] R. Wang, G. Shan, T. Wang, D. Yin, Y. Chen, Photothermal enhanced photocatalytic activity based on Ag-doped CuS nanocomposites, *Journal of Alloys and Compounds* 864 (2021) 158591.
[8] Y. Zhou, Z. Han, C. He, Q. Feng, K. Wang, Y. Wang, N. Luo, G. Dodbiba, Y. Wei, A. Otsuki, T. Fujita, Long-term stability of different kinds of gas nanobubbles in deionized and salt water, Materials 14 (2021).
[9] Z. Mahmoodian, M. Mahdi, H. Reza, M. Hosseini, A. Toutounchi, O. Saremi, M. Jannesari, Synergetic photothermal and photodynamic antibacterial effects of O_2 nanobubble-conjugated CuS nanoparticles, *J. Environ. Chem. Eng.* 14 (2026).
[10] J. Li, Z. Feng, N. Gu, F. Yang, Superparamagnetic iron oxide nanoparticles assembled magnetic nanobubbles and their application for neural stem cells labeling, *J. Mater. Sci. Technol* 63 (2021) 124–132.

مطالعه خاصیت نوری و فوتوکاتالیستی کربن نیترید گرافیتی آلایش‌شده با دیسپروزیوم، سنتزشده به کمک عصاره شکرتیغال

برادران هزاوه عطیه، قلی پور شهرکی مهران ، زارعی مقدم رضا

گروه فیزیک دانشکده علوم، دانشگاه اراک، اراک، ۳۸۱۵۶-۸۸۳۴۹ ایران

چکیده

در این پژوهش، فوتوکاتالیست کربن نیترید گرافیتی خالص و همچنین آلایش‌یافته با ۱٪ یون دیسپروزیوم (Dy^{3+}) (($g\text{-}C_3N_4/Dy(\%1)$)) به روش سنتز سبز و با استفاده از عصاره گیاهی شکرتیغال تهیه شد. استفاده از ترکیبات زیستی این عصاره به‌عنوان عامل کمکی در فرآیند سنتز، رویکردی سازگار با محیط‌زیست برای بهبود ویژگی‌های ساختاری و نوری این نیمه‌رسانا فراهم می‌آورد. به‌منظور بررسی ساختار و رفتار نوری نمونه تهیه‌شده، آنالیزهای XRD، PL و UV–Vis انجام گرفت. نتایج پراش پرتو ایکس نشان داد که پس از آلایش با یون‌های Dy^{3+} ، فاز بلوری شاخص کربن نیترید گرافیتی حفظ شده و ساختار لایه‌ای آن پایدار باقی مانده است. طیف فوتولومینسانس کاهش شدت نشر را نشان داد که بیانگر کاهش احتمال بازترکیب الکترون–حفره و بهبود جدایش حامل‌های بار در ساختار آلایش‌یافته است. عملکرد فوتوکاتالیستی نمونه در تخریب رنگ متیل اورنج تحت تابش نور بررسی شد و نتایج نشان داد که نسبت C/C_0 پس از ۸۰ دقیقه به حدود ۰,۴۶ کاهش می‌یابد. این رفتار نشان می‌دهد که حضور یون‌های Dy^{3+} با ایجاد مراکز تله الکترونی می‌تواند انتقال و جدایش حامل‌های بار را تسهیل کرده و در نتیجه فعالیت فوتوکاتالیستی کربن نیترید گرافیتی را بهبود دهد.

واژه های کلیدی: *کربن نیترید گرافیتی ($g\text{-}C_3N_4$)، دیسپروزیوم (Dy)، سنتز سبز، عصاره شکر تیغال(Trehala Manna)، فوتوکاتالیز*

Study of the optical and photocatalytic properties of dysprosium-doped g-C_3N_4 synthesized using Trehala Manna extract

Baradaran Hezaveh, Atiye; Gholipour Shahraki Mehran; Zarei Moghadam Reza

Department of Physics, Faculty of Science, Arak University, Arak, 38156-88349 Iran

Abstract

In this study, pure $g\text{-}C_3N_4$ photocatalyst as well as doped with 1% dysprosium ions (Dy^{3+})((%۱)g-C_3N_4/Dy) were prepared by green synthesis using Trehala manna plant extract. The use of bioactive compounds of this extract as a cofactor in the synthesis process provides an environmentally friendly approach to improve the structural and optical properties of this semiconductor. In order to investigate the structure and optical behavior of the prepared sample, XRD, PL and UV–Vis analyses were performed. X-ray diffraction results showed that after doping with Dy^{3+} ions, the crystalline phase of $g\text{-}C_3N_4$ was preserved and its layered structure remained stable. The photoluminescence spectrum showed a decrease in emission intensity, which indicates a decrease in the probability of electron-hole recombination and improved separation of charge carriers in the doped structure. The photocatalytic performance of the sample in the degradation of methyl orange dye under light irradiation was investigated and the results showed that the C/C_0 ratio decreased to about 0.46 after 80 minutes. This behavior indicates that the presence of Dy^{3+} ions, by creating electron trap centers, can facilitate the transfer and separation of charge carriers and consequently improve the photocatalytic activity of g C_3N_4.

***Keywords**: Graphitic carbon nitride ($g\text{-}C_3N_4$), Dysprosium doping, Green synthesis, Trehala manna, Photocatalysis.*

PACS No. 81

مقدمه

افزایش روزافزون آلاینده‌های آلی در آب، نیاز به فناوری‌های کارآمد تصفیه را جدی‌تر کرده است. فوتوکاتالیز ناهمگن به‌دلیل توانایی اکسیداسیون آلاینده‌ها تحت تابش نور، یکی از مسیرهای مؤثر برای حذف این ترکیبات محسوب می‌شود [۱].

در این میان، نیترید کربن گرافیتی ($g\text{-}C_3N_4$) به‌عنوان یک فوتوکاتالیست غیرفلزی، به دلیل گاف نواری حدود ۲٫۷ eV، پایداری شیمیایی و سنتز آسان، توجه زیادی را جلب کرده است [۲و۳]. با این حال، بازترکیب سریع الکترون–حفره همچنان مانع دستیابی به راندمان بالا می‌شود [٤]. یکی از راهکارهای مؤثر برای غلبه بر این محدودیت، آلایش عنصری است. آلایش با عناصر لانتانیدی به علت ایجاد ترازهای انرژی میانی، قابلیت کاهش بازترکیب و بهبود جداسازی حامل‌ها را ایجاد می کند [٥]. در این بین، دیسپروزیوم (Dy^{3+}) به‌دلیل شعاع یونی مناسب و توانایی ایجاد تله‌های الکترونی پایدار، عملکرد فوتوکاتالیستی $g\text{-}C_3N_4$ را به‌طور قابل‌توجهی ارتقا می‌دهد [٦]. در کنار اصلاح‌های ساختاری، سنتز سبز نیز به‌عنوان رویکردی سازگار با محیط‌زیست مطرح شده و استفاده از عصاره‌های گیاهی می‌تواند بر مورفولوژی و ویژگی‌های سطحی مواد اثر بگذارد [۷و۸].

در این پژوهش، $Dy/g\text{-}C_3N_4$ از طریق سنتز سبز و با عصاره شیکرتیغال[۱] تهیه شد. تمرکز این پژوهش بر بررسی عملکرد فوتوکاتالیستی و خواص نوری $g\text{-}C_3N_4/Dy(\%۱)$ است. مجموعه‌ای از آنالیزهای ساختاری و اپتیکی را برای بررسی ویژگی‌های نمونه انجام شد. آنالیز XRD (Philips PANalytical, model X'pert) جهت تعیین ساختار بلوری و ارزیابی میزان نظم لایه‌ای نمونه‌ها به‌کار گرفته شد. جهت مطالعه رفتار نشر نوری و بررسی فرآیند جدایش حامل‌ها، آزمون Photoluminescence (PL) (Aventes (Star Line)) انجام شد. میزان تخریب رنگ (آلاینده) با دستگاه Nano Mabna Iranian NM (BCLSPR920225) بررسی شد.

مواد و روش‌ها

برای تهیه عصاره شیکر تیغال، نمونه خام پس از خشک شدن در دمای محیط آسیاب شد و پودر حاصل در نسبت وزنی ۱:۱۰ در آب مقطر جوشانده شد. پس از یک ساعت استخراج، محلول سانتریفیوژ گردید تا عصاره‌ای یکنواخت به‌دست آید.

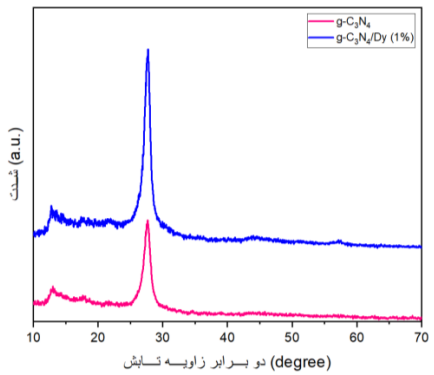
برای سنتز $g\text{-}C_3N_4$، ملامین ابتدا در دمای ۷۰ درجه سانتی‌گراد خشک شد. سپس ماده در بوته چینی درب‌دار در کوره به مدت ۴ ساعت با افزایش دمای تدریجی تا ۵۵۰ درجه سانتی‌گراد حرارت داده شد تا پودر زردرنگ $g\text{-}C_3N_4$ تشکیل شود.

در ادامه، مقدار معینی از $g\text{-}C_3N_4$ در آب مقطر پراکنده و تحت هم‌زدن مغناطیسی و اولتراسونیک قرار گرفت. محلول $Dy(NO_3)_3{\cdot}6H_2O$ نیز در آب مقطر تهیه شد و مقدار مشخصی از عصاره را به آن افزوده گردید. سپس این محلول به‌تدریج به سوسپانسیون $g\text{-}C_3N_4$ اضافه شد و مخلوط حاصل حدود ۲–۱ ساعت همزده شد. در پایان، محصول سانتریفیوژ شده، با آب مقطر و اتانول شستشو داده شد. پس از خشک شدن در دمای ۹۰–۸۰ درجه سانتی‌گراد، در کوره تا دمای ۴۵۰ درجه سانتی‌گراد به مدت دو ساعت حرارت داده شد.

آنالیزها

در شکل ۱،نمودار پراش پرتو X نمونه $g\text{-}C_3N_4/Dy(۱\%)$ توزیع پیک‌ها در زوایای مختلف 2θ بیانگر حضور نواحی بلوری منظم در ساختار لایه‌ای این ماده است. پیک اصلی در حدود$2\theta\approx۲۷^{\circ}$، که به صفحه‌ی (۰۰۲) مربوط می‌شود، نمایانگر فاصله‌ی منظم بین‌لایه‌ای و چیدمان متناوب صفحات گرافیتی در شبکه‌ی $g\text{-}C_3N_4$ است. این ویژگی به عنوان شاخصی از پایداری فاز بلوری و انسجام ساختار شناخته می‌شود.

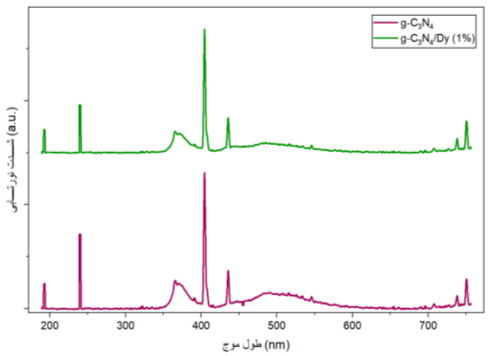
[۱] Trehala manna



شکل ۱. الگوی آنالیز پراش پرتو X از g-C_3N_4 و g-C_3N_4/Dy(۱%)

علاوه بر آن، بازتاب ضعیف‌تری در محدوده‌ی ۱۴۰–۱۳۰≈2θ وجود دارد که ناشی از آرایش واحدهای تری‌آزین شبکه است. وضوح و تقارن پیک‌ها در کل طیف نشان‌دهنده‌ی نظم پیوسته‌ی لایه‌ها و شکل‌گیری یکنواخت ذرات در فرآیند سنتز سبز است که بیانگر موفقیت روش سنتز در ایجاد ساختار منسجم است.

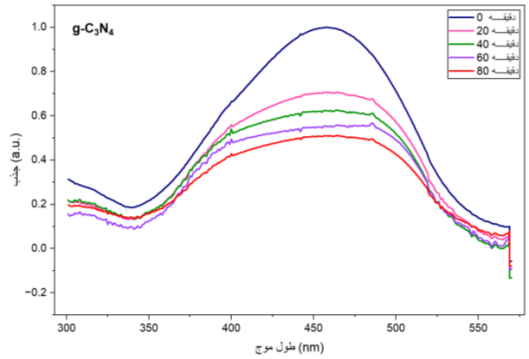
عدم مشاهده هرگونه پیک اضافی بیانگر آن است که یون‌های Dy^{3+} بدون ایجاد فاز ناخواسته و بدون تخریب ساختار بلوری g-C_3N_4 در شبکه جای‌گیری کرده‌اند. این رفتار با الگوی گزارش‌شده برای g-C_3N_4 خالص در نمونه سنتز شده و منابع علمی هم‌خوانی دارد و بیانگر حفظ ساختار لایه‌ای ماده پس از فرآیند آلایش است [۹].



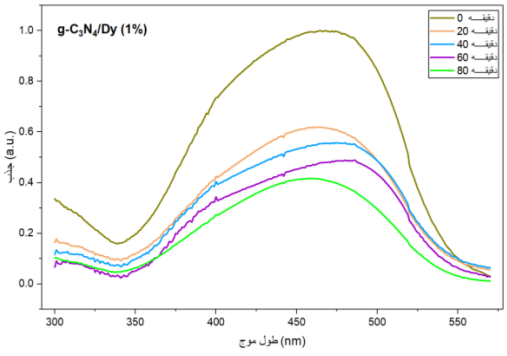
شکل ۲. طیف آنالیز فوتولومینسانس (PL) از g-C_3N_4 و g-C_3N_4/Dy (۱٪)

طیف فوتولومینسانس تصویری از رفتار دینامیکی حامل‌های بار درون شبکه ماده ارائه می‌دهد. در طیف فوتولومینسانس نشان داده شده در شکل ۲، برای نمونه‌ی g-C_3N_4 یک باند نشر نسبتاً پهن مشاهده می‌شود که به بازترکیب تابشی جفت‌های الکترون–حفره در ساختار نیمه‌رسانای g-C_3N_4 نسبت داده می‌شود. با دوپینگ دیسپروزیم، شدت این نشر در مقایسه با طیف گزارش‌شده و سنتز شده برای g-C_3N_4 خالص به‌طور محسوسی کاهش می‌یابد [۹]. این کاهش شدت PL می‌تواند به ایجاد ترازهای انرژی موضعی ناشی از حضور یون‌های Dy^{3+} نسبت داده شود که احتمال بازترکیب الکترون–حفره را کاهش داده و جدایش حامل‌های بار را تسهیل می‌کنند.

آزمون فوتوکاتالیستی تحت تابش لامپ زنون ۵۰ وات انجام شد. مقدار ۳ میلی‌گرم کاتالیست در ۱۰۰ میلی‌لیتر محلول متیل اورنج با غلظت اولیه ۱۵ ppm حل شد. پیش از تابش، سوسپانسیون به مدت ۳۰ دقیقه در تاریکی هم‌زده شد تا تعادل جذب برقرار شود.



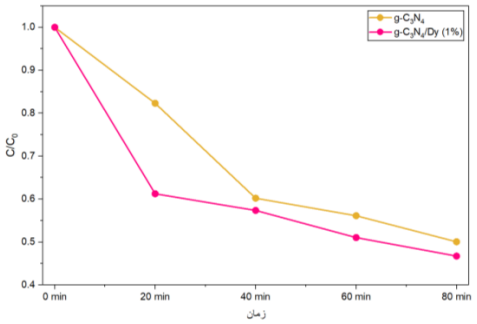
شکل ۳. طیف آنالیز UV–Vis از متیل‌اورنج در حضور فوتوکاتالیست g-C_3N_4 در زمان‌های متفاوت.



شکل ۴. طیف آنالیز UV–Vis از متیل‌اورنج در حضور فوتوکاتالیست g-C_3N_4/Dy (۱%) در زمان‌های متفاوت.

تغییرات طیف جذب متیل‌اورنج مشاهده شده در شکل ۳ در حضور نمونه‌ی g-C_3N_4، به عنوان نمونه‌ی مرجع تصویری از روند تخریب فوتوکاتالیستی این آلاینده در زمان‌های مختلف تابش ارائه می‌دهد. تغییرات طیف جذب در بازه‌ی زمانی ۸۰–۰ دقیقه

نشان می‌دهد که به دلیل کاهش جذب این نمونه، بازده فوتوکاتالیستی کمی گزارش شد. در نتیجه برای افزایش کارایی فوتوکاتالیستی نیاز به اصلاح ساختاری دارد. با دوپینگ ۱٪ Dy، مطابق شکل ۴ کاهش جذب متیل‌اورنج در طول زمان به‌طور محسوسی تشدید می‌شود؛ که بیانگر بهبود فرآیند تخریب فوتوکاتالیستی است. این موضوع را می‌توان ناشی از تله‌های الکترونی توسط یون‌های Dy^{3+} و در نتیجه بهبود جدایش زوج‌های الکترون–حفره، کاهش نرخ بازترکیب و افزایش احتمال مشارکت آن‌ها در واکنش‌های ردوکس سطحی نسبت داد. این نظم و تداوم در رفتار طیفی، ماهیت یک فوتوکاتالیست کارآمد با حفظ یکپارچگی ساختار بلوری را منعکس می‌کند.



شکل ۵. تخریب متیل اورنج به صورت تابعی از زمان تابش به وسیله $g\text{-}C_3N_4$ و $g\text{-}C_3N_4/Dy(1\%)$

در شکل ۵، نمودار تغییرات نسبت C/C_0 در طول زمان، نشان دهنده دینامیک فرآیند تخریب فوتوکاتالیستی است. مشاهده شد که با گذشت زمان و تحت تابش نور، غلظت متیل اورنج در محلول به‌طور مداوم کاهش می‌یابد. در نقطه‌ی پایانی آزمایش، یعنی پس از ۸۰ دقیقه، مقدار C/C_0 برای g-c3n4 خالص حدود ۰٫۵ و برای نمونه دوپ شده به ۰٫۴۶ می‌رسد که گویای تخریب تقریبی ۵۴٪ از آلاینده‌ی اولیه است و درصد تخریب بالاتری نسبت به نمونه خالص دارد. افت نسبتاً سریع در دقایق ابتدایی واکنش، می تواند ناشی ازجذب سریع مولکول‌های آلاینده بر روی سطوح فعال کاتالیست باشد. در ادامه نیز تداوم روند نزولی نشان دهنده پایداری عملکرد فوتوکاتالیست است.

نتیجه گیری

بررسی‌های انجام‌شده بر نمونه $g\text{-}C_3N_4$ خالص و آلایش‌یافته با ۱٪ دیسپروزیوم نشان داد که این مقدار محدود از یون‌های Dy^{3+} قادر است رفتار نوری و عملکرد فوتوکاتالیستی ماده را بهبود دهد. کاهش تدریجی شدت جذب متیل‌اورنج در طول تابش، بیانگر تخریب پیوسته‌ی مولکول‌های رنگ و فعال‌بودن مراکز واکنشی سطحی است. تحلیل طیفی PL نیز آشکار می‌کند که حضور یون‌های لانتانیدی با ایجاد تله‌های الکترونی، احتمال بازترکیب حامل‌های بار را کاهش داده و مسیرهای انتقال بار را کارآمدتر می‌سازد؛ عاملی که مستقیماً به افزایش سرعت واکنش‌های اکسایشی و تولید گونه‌های فعال اکسیژن منجر می‌شود.

در مجموع، نشان داده شد که ترکیب سبز $g\text{-}C_3N_4/Dy(1\%)$، راهکاری مؤثر برای ارتقای عملکرد فوتوکاتالیست‌های $g\text{-}C_3N_4$ در تخریب آلاینده‌های آلی تحت تابش نور مرئی فراهم می‌آورد. این نانوکامپوزیت به عنوان گزینه‌ای مناسب برای تصفیه منابع آبی معرفی شد.

مرجع‌ها

[۱] طرق، ل.، و محمودی، ج. (۱۳۹۶). سنتز، شناسایی و بررسی فعالیت فوتوکاتالیزوری ریزذرات TiO_2 و TiO_2 اصلاح‌شده با Cu در حذف آلاینده‌های آلی تحت تابش نور مرئی. *هفتمین همایش ملی و دومین همایش بین‌المللی کاربردهای شیمی در فناوری‌های نوین، تهران.*

[2] Li, Y., Li, X., Zhang, H., Fan, J., & Xiang, Q. (2020). Design and application of active sites in g-C_3N_4-based photocatalysts. *Journal of Materials Science & Technology.*

[۳] فتوحی، س. (۱۴۰۲). مطالعه نظری ویژگی‌های الکترونیکی و نوری تأثیر جذب اتم‌های فلزی بر نانونوار کربن نیترید گرافیتی. *ششمین همایش ملی فناوری‌های نوین در مهندسی برق، کامپیوتر و مکانیک ایران، تهران.*

[۴] اجاق، س. ا. ر.، پورصالحی، ر.، و یوردخانی، ا. (۱۴۰۳). فعالیت فوتوکاتالیست نانوساختار اتصال ناهمگون کربن نیترید گرافیتی/اکسید مس در تخریب رنگ رودامین بی تحت تابش نور مرئی. *دومین کنفرانس ملی و اولین کنفرانس بین‌المللی چالش‌های محیط زیست: صنعت و معدن سبز، تهران.*

[5] Yu, X., Song, Z., Dong, X., Li, H., Liu, H., Zhao, B., Ye, T., Jiang, Y., Li, X., Duan, L., Fan, J., & Zhao, P. (2022). Enhanced photocatalytic activity of rare-earth (Yb, Nd, Ce)-doped g-C_3N_4 nanosheets for degradation of organic dyes under visible light. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 33*, 13271–13289.

[6] Kalita, J. M., & Chithambo, M. L. (2023). Probing the electron trap-depth distribution in $Sr_4Al_{14}O_{25}:Eu^{2+},Dy^{3+}$. *Journal of Luminescence.*

[7] Ying, S., Guan, Z., Ofoegbu, P. C., Clubb, P., Rico, C., He, F., & Hong, J. (2022). Green synthesis of nanoparticles: Current developments and limitations. *Environmental Technology & Innovation.*

[8] Gour, A., & Jain, N. K. (2019). Advances in green synthesis of nanoparticles. *Artificial Cells, Nanomedicine, and Biotechnology, 47*(1), 844–851.

[9] Fang, S., et al., *Effect of carbon-dots modification on the structure and photocatalytic activity of g-C3N4*. Applied Catalysis B: Environmental, 2016. 185: p. 225-232.

تأثیر گروه عاملی فلوئور در تصفیه فلزات سنگین آب (سرب) به‌وسیله نانولوله‌های کربنی

ابوالقاسمی، زهرا[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه علم و صنعت تهران

چکیده

*آلودگی منابع آبی به فلزات سنگین، به‌ویژه یون‌های سرب (Pb^{+2})، یکی از مهم‌ترین چالش‌های زیست‌محیطی و بهداشتی به شمار می‌رود. در این پژوهش، عملکرد نانولوله‌های کربنی خالص و عامل‌دار شده با فلوئور در حذف یون‌های سرب از آب با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی شد. برای این منظور، سیستم‌هایی شامل نانولوله‌های کربنی از نوع صندلی با کایرالیته‌های مختلف در حضور محلول آبی $PbCl_2$ مدل‌سازی شدند و اثر اعمال میدان الکتریکی خارجی در راستای **z** – بر نفوذ یون‌های سرب مطالعه گردید. نتایج نشان داد که عامل‌دار سازی نانولوله‌ها با گروه فلوئور به طور قابل‌توجهی مانع نفوذ کاتیون‌های سرب شده و موجب تجمع آن‌ها در دو سر نانولوله می‌شود. همچنین، نانولوله‌های عامل‌دار شده، به‌ویژه در قطرهای کمتر، عملکرد بهتری در جلوگیری از عبور یون‌های سرب از خود نشان دادند.*

واژه‌های کلیدی: *نانولوله کربنی(CNT) ، نانولوله کربنی عامل‌دار شده با فلوئور(FCNT) ، یون سرب، دینامیک مولکولی*

The Effect of Fluorine Functional Groups on the Removal of Heavy Metals from Water (Lead) Using Carbon Nanotubes

Abolghasemi, Zahra[1]

[1] *Department of Physics, Iran University of Science and Technology, Tehran*

Abstract

Contamination of water resources with heavy metals, particularly lead ions Pb^{+2}, is considered one of the most important environmental and health challenges. In this study, the performance of pristine and fluorine-functionalized carbon nanotubes in removal of lead ions from water was investigated using molecular dynamics simulation. For this purpose, systems containing armchair carbon nanotubes with different chiralities in the presence of an aqueous $PbCl_2$ solution were modeled, and the effect of applying an external electric field in the negative - z direction on the permeation of lead ions was studied. The results showed that functionalization of the nanotubes with fluorine groups significantly prevented the permeation of lead cations and caused their accumulation at both ends of the nanotube. Moreover, the functionalized nanotubes, especially those with smaller diameters, exhibited better performance in preventing the passage of lead ions.

***Keywords**: Carbon nanotube (CNT), fluorine-functionalized carbon nanotube (FCNT), lead ion, molecular dynamics*

PACS No. 87

مقدمه

فلزات سنگین با چگالی بیشتر از $5\ g/cm^3$ به دلیل سمیت و سرطان‌زایی خود، به طور مکرر برای اکوسیستم‌های محیط‌زیستی خطر ایجاد می‌کنند. یون‌های فلزات سنگین موادی غیرقابل‌تجزیه زیستی هستند که مدت‌زمان زیادی در محیط باقی می‌مانند و تمایل دارند از طریق زنجیره غذایی تجمع پیدا کنند؛ این امر مشکلات جدی برای سلامت انسان، رشد گیاهان و زیستگاه جانوران به وجود می‌آورد. در میان فلزات سنگین مختلف، سرب (Pb)

باتوجه‌به قرارگرفتن در بالای فهرست سمیت، مهم‌ترین مورد محسوب می‌شود. آلودگی سرب عمدتاً از صنایع گوناگونی مانند تولید مهمات، ساخت باتری، فرایند تولید رنگ‌دانه و آبکاری ناشی می‌شود. فاضلاب آلوده در نهایت وارد منابع آبی محلی می‌شود و آثار مخربی بر محیط‌زیست و موجودات آبزی بر جای می‌گذارد. مسیر اصلی ورود یون‌های Pb (II) به زنجیره غذایی از طریق آب آشامیدنی است؛ ازاین‌رو سازمان جهانی بهداشت حداکثر مقدار مجاز یون‌های Pb (II) در آب آشامیدنی را ٤٨ nmol/L اعلام کرده است. مقدار خارج از محدوده یون‌های سرب در آب آشامیدنی می‌تواند باعث مشکلات مختلف سلامتی مانند آسیب مغزی، بیماری کلیه، کم‌خونی، کسالت و بی‌اشتهایی شود . [۱]

نانولوله‌های کربنی

نانولوله‌های کربنی یکی از مهم‌ترین نانوساختارهای کربنی هستند که به دلیل ویژگی‌های منحصربه‌فرد ساختاری، فیزیکی و شیمیایی، در سال‌های اخیر توجه گسترده‌ای را در حوزه‌های مختلف علمی و صنعتی به خود جلب کرده‌اند. نانولوله‌های کربنی بر اساس تعداد دیواره‌ها به انواع تک‌جداره، دوجداره و چند جداره تقسیم می‌شوند. همچنین، باتوجه‌به بردار کایرالیته، این نانولوله‌ها در سه ساختار اصلی صندلی، زیگزاگ و کایرال طبقه‌بندی می‌شوند که این ویژگی‌ها نقش مهمی در تعیین خواص الکترونیکی و رسانایی آن‌هادارند.

در حوزه تصفیه آب نیز نانولوله‌های کربنی اهمیت ویژه‌ای یافته‌اند؛ زیرا ساختار کانالی و نانومقیاس آن‌ها امکان عبور سریع و پیوسته مولکول‌های آب را فراهم می‌کند، درحالی‌که می‌توانند مانع عبور نمک‌ها، یون‌ها و بسیاری از آلاینده‌های نانومقیاس شوند. ازاین‌رو، غشاهای مبتنی بر نانولوله‌های کربنی به دلیل مصرف انرژی پایین، عملکرد خودتمیزشوندگی و بازده مناسب در نمک‌زدایی و حذف آلاینده‌ها، گزینه‌ای امیدبخش برای توسعه فناوری‌های نوین تصفیه آب محسوب می‌شوند. [۲]

گروه عاملی فلوئور

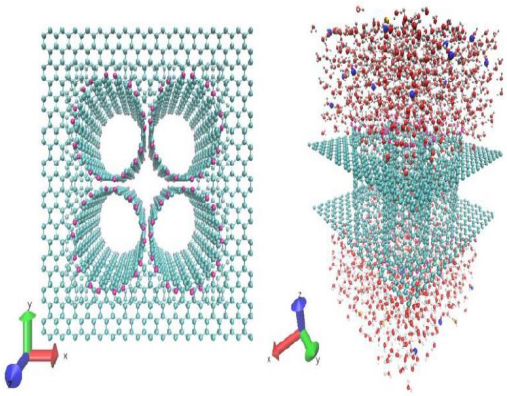
گروه عاملی فلوئور (F −) یکی از گروه‌های مهم در عامل‌دار سازی منافذ و شکاف‌های غشاهاست. در این گروه، اتم فلوئور از طریق پیوند کووالانسی به اتم کربن متصل می‌شود. باوجود کووالانسی بودن این پیوند، به دلیل الکترونگاتیوی بسیار بالای فلوئور، پیوند کربن ـ فلوئور ماهیتی قطبی دارد؛ به‌طوری که اتم فلوئور دارای بار جزئی منفی و اتم کربن دارای بار جزئی مثبت می‌شود. این قطبیت می‌تواند بر رفتار سطح، برهم‌کنش با مولکول‌های آب و عملکرد غشا در فرایندهای جداسازی اثرگذار باشد.

بر اساس مطالعات انجام‌شده، گروه عاملی فلوئور در مقایسه با برخی گروه‌ها مانند هیدروکسیل، می‌تواند خاصیت آب‌دوستی بیشتری ایجاد کند. افزایش آب‌دوستی منافذ یا سطح غشا موجب افزایش تراوایی آب و بهبود عملکرد غشا در فرایندهای تصفیه و نمک‌زدایی می‌شود. از نظر ابعادی نیز شعاع واندروالس اتم فلوئور حدود ۰.۱٤۷ نانومتر و طول پیوند آن با مولکول‌های آلی حدود ۰.۱۳٤ نانومتر گزارش شده است. این ویژگی‌ها نشان می‌دهد که فلوئور، علاوه بر اثرات شیمیایی و قطبی، از نظر اندازه و ساختار نیز می‌تواند در تنظیم رفتار عبور آب و جداسازی آلاینده‌ها نقش مؤثری داشته باشد. [۳] در مجموع، عامل‌دار سازی نانولوله‌های کربنی با گروه فلوئور می‌تواند راهکاری مؤثر برای بهبود عملکرد غشاهای نانوساختار در تصفیه آب باشد. این گروه با افزایش قطبیت و آب‌دوستی سطح، می‌تواند نفوذپذیری آب را افزایش بدهد.

جزئیات سیستم شبیه‌سازی

در این پژوهش، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به‌عنوان ابزار اصلی مطالعه انتخاب شده و اعمال میدان الکتریکی به‌عنوان نیروی محرک حرکت مولکول‌ها و یون‌ها در سامانه مورداستفاده قرار گرفته است. تمامی شبیه‌سازی‌ها با نرم‌افزار شبیه‌سازی دینامیک مولکولی NAMD انجام شده است. فایل‌های ورودی با استفاده

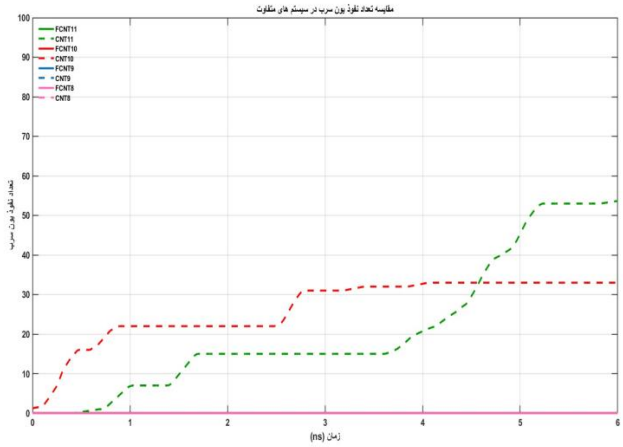
از نرم‌افزار VMD ساخته شدند. در این مطالعه، سیستم‌های تصفیه آب برای حذف فلز سنگین سرب (Pb^{+2}) در هشت نوع سیستم متفاوت طراحی شدند. این سیستم‌ها شامل دو مدل مختلف هستند که هر کدام دارای چهار نانولوله کربنی از نوع صندلی با کایرالیته‌های (۸,۸)، (۹,۹)، (۱۰,۱۰) و (۱۱,۱۱) هستند قطر این نانولوله‌ها به ترتیب ۱.۰۸، ۱.۲۱، ۱.۳٤ و ۱.٤۸ نانومتر و طول آن‌ها ۲.۳ نانومتر در نظر گرفته شده است. برای هر یک از این چهار قطر، دو نوع نانولوله بررسی شد: (نانولوله خالص CNT - نانولوله عامل‌دار شده با فلوئور FCNT) هدف از این کار بررسی اثر عامل‌دار کردن در کارایی سیستم برای هر قطر نانولوله بود. تمامی سیستم‌ها دارای دو ورقه گرافن سوراخ‌دار در ابتدا و انتهای نانولوله‌ها هستند که به‌عنوان غشا عمل کرده و از عبور محلول از اطراف نانولوله‌های کربنی جلوگیری می‌کنند. همچنین تمامی سیستم‌ها شامل محلول آب و نمک $PbCl_2$ با غلظت ۰.۳۵ مولار هستند. اتم‌های گروه عاملی فلوئور دارای بار ۰.۱۹− الکترون‌ولت و اتم‌های کربن متصل به آن‌ها دارای بار ۰.۱۹+ الکترون‌ولت در نظر گرفته شدند. میدان الکتریکی در راستای z- و با مقادیر مختلف، متناظر با ولتاژهای ۳،٤،٦ و ۸ ولت بررسی شد. شکل ۱، نمایشی از محیط شبیه‌سازی را نشان می‌دهد.



شکل ۱: سیستم FCNT با کایرالیته ی ۱۰ و ۱۰ بامحلول و بدون محلول

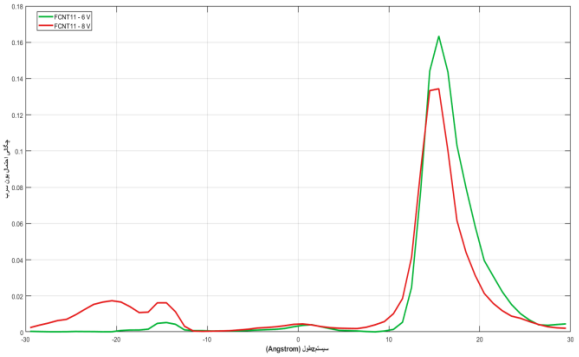
بررسی تعداد کاتیون‌های سرب نفوذی

همان‌طور که انتظار می‌رود، با اعمال میدان الکتریکی خارجی به سیستم حاوی محلول آب و نمک سرب کلرید، یون‌های سرب در جهت میدان الکتریکی و یون‌های کلر در خلاف جهت میدان الکتریکی حرکت می‌کنند. شکل۲ نمودارهای مربوط به تعداد کاتیون‌های سرب نفوذکرده تحت ولتاژهای مختلف، در کایرالیته‌های متفاوت و طی مدت ٦ نانوثانیه شبیه‌سازی را نشان می‌دهند.با توجه به این نمودارها مشاهده می‌شود که، نانولوله‌های کربنی خالص CNT با کایرالیته‌های (۱۰,۱۰) و (۱۱,۱۱) برای یون‌های Pb^{+2} جریان یونی داشته‌اند. در مقابل، نانولوله کربنی خالص CNT(۸.۸) و CNT(۹.۹) هیچ یونی از خود عبور نداده است.. این مسئله به قطر کمتر CNT(۸.۸) و CNT(۹.۹) نسبت به دو نانولوله دیگر مربوط می‌شود؛ زیرا قطر کمتر، عبور یون‌ها را دشوارتر می‌کند.نکته مهم‌تر آن است که نتایج ارائه‌شده در شکل ۲ نشان‌دهنده عملکرد مناسب نانولوله‌های کربنی عامل‌دارشده با فلوئور در تصفیه آب از یون‌های فلزی سنگین سرب هستند. به‌طور خاص، نانولوله‌های FCNT(۸.۸) ، FCNT(۹.۹) FCNT (۱۰.۱۰)، FCNT(۱۱.۱۱) و،تعداد نفوذ صفر را برای کاتیون‌های سرب نشان داده‌اند. این نتیجه بیانگر جذب مناسب کاتیون‌های سرب توسط گروه‌های عاملی فلوئور متصل به دو سر نانولوله‌ها است.

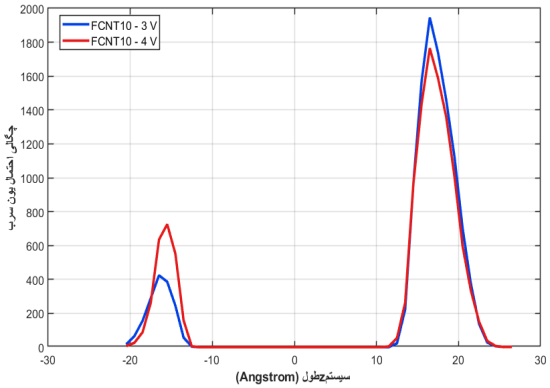


شکل ۲ : نمودارهای تعداد کاتیونهای سرب نفوذی برحسب زمان در ٤ولت

همان‌طور که پیش‌تر بیان شد، خطوط مربوط به سیستم‌های FCNT(۸،۸) ، FCNT(۹،۹) ، FCNT(۱۰،۱۰) و FCNT(۱۱،۱۱) در تمامی ولتاژها روی محور صفر قرار دارند؛ بنابراین، مشاهده‌نشدن خط مربوط به FCNT (۹،۹) ، FCNT(۱۰،۱۰) و FCNT(۱۱،۱۱) به دلیل هم‌پوشانی آن با سایر خطوط مربوط به سیستم‌ها است .برای بررسی بیشتر، چگالی احتمال کاتیون‌های سرب در راستای محور z سیستم نیز محاسبه شد. نتایج به‌صورت نمودارهای شکل ۳ برای نانولوله‌های با کایرالیته (۱۱،۱۱) در ولتاژهای ٦ و ۸ ولت و شکل ٤ برای نانولوله‌های با کایرالیته (۱۰،۱۰) در ولتاژهای ۳ و ٤ ولت، برای نانولوله‌های کربنی عامل‌دار شده ارائه شده است. باتوجه‌به اینکه طول نانولوله‌ها در راستای محور z در بازه ۱۰- تا ۱۰ آنگستروم در نظر گرفته شده است، نتایج نشان می‌دهند که دو انتهای نانولوله‌ها بیشترین چگالی احتمال را دارند، درحالی‌که بخش داخلی نانولوله‌ها کمترین مقدار چگالی احتمال را نشان می‌دهد. پس از اعمال میدان الکتریکی خارجی در راستای z- ، کاتیون‌های روی نیز در همین جهت حرکت می‌کنند. باتوجه‌به تعریف مرزی دوره‌ای در شبیه‌سازی‌ها، در نانولوله‌های عامل‌دار شده، کاتیون‌ها از جعبه پایینی به جعبه بالایی (نواحی با مقادیر مثبت‌تر محور z) منتقل می‌شوند و پشت غشای تشکیل‌شده از نانولوله‌های عامل‌دار و گرافن باقی می‌مانند؛ زیرا گروه عاملی فلوئور مانع از عبور آن‌ها می‌شود. تأثیر تغییر مقدار ولتاژ در نمودارها نیز به‌وضوح مشاهده می‌شود. با افزایش ولتاژ، چگالی احتمال کاتیون‌های روی در جعبه پایینی سیستم کاهش‌یافته است. این نتیجه ناشی از افزایش سرعت جریان یونی در ولتاژهای بالاتر است.



شکل ۳ : نمودار چگالی احتمال کاتیون سرب در طول z سیستم در٦و۸ ولت



شکل ٤ : نمودار چگالی احتمال کاتیون سرب در طول z سیستم در۳و٤ ولت

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، عملکرد نانولوله‌های کربنی خالص و عامل‌دار شده با فلوئور در حذف یون‌های سرب از آب با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی شد. نتایج نشان داد که نانولوله‌های خالص، به‌ویژه در قطرهای بزرگ‌تر، امکان عبور بخشی از یون‌های سرب را فراهم می‌کنند؛ اما عامل‌دار سازی با فلوئور به طور مؤثری نفوذ این یون‌ها را کاهش می‌دهد. بررسی تعداد یون‌های نفوذی و چگالی احتمال نشان داد که گروه‌های فلوئور با ایجاد برهم‌کنش‌های مناسب با کاتیون‌های سرب، موجب تجمع آن‌ها در اطراف دهانه نانولوله و جلوگیری از عبورشان می‌شوند. همچنین مشخص شد که قطر نانولوله نقش مهمی در کارایی جداسازی دارد و نانولوله‌های با قطر کمتر عملکرد بهتری در حذف یون‌های سرب نشان می‌دهند.

مرجع‌ها

[۱] Masoud Vesali-Naseh Mohammad Reza Vesali Naseh; "*Adsorption of Pb (II) ions from aqueous solutions using carbon nanotubes*"; Journal of Cleaner Production 291 (2021)
[۲] Aris Chatzichristos and Jamal Hassan; "*Current Understanding ofWater Properties insideCarbon Nanotubes*"; MDPI (2022)
[۳] محسنی، مهسا ؛ «*شبیه سازی دینامیک مولکولی تصفیه ی آب با کمک عاملدار کردن نانولوله های کربنی*»؛ ۱٤۰۳

بررسی تأثیر زمان سنتز هیدروترمال بر ویژگی‌های نوری نقاط کوانتومی کربنی آلاییده با نیتروژن

نادری موحد، فاطمه[۱]؛ رحیمی، کوروش[۱]

[۱] گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا، تهران، ایران

چکیده

نقاط کوانتومی کربنی آلاییده با نیتروژن (N-CQDs) به روش هیدروترمال تک‌مرحله‌ای و با استفاده از پیش‌سازهای اسید سیتریک و اوره سنتز شدند و اثر زمان سنتز (۳، ٦ و ۹ ساعت) بر ویژگی‌های نوری آن‌ها مورد بررسی قرار گرفت. بررسی طیف‌های جذب UV-Vis نشان داد که قله‌ی جذب اصلی برای نمونه‌های 3h، 6h و 9h به ترتیب در ۳۲۳ nm، ۳۰۰ و ۴۰۷ و مقادیر انرژی شکاف نواری مستقیم آن‌ها به ترتیب ۳/۲٤ eV، ۳/٦٦ و ۳/۱۷ است. بررسی طیف‌های PL نشان داد که هر سه نمونه رفتار گسیل وابسته به طول‌موج برانگیختگی دارند. در این میان، نمونه‌ی 6h بیشینه‌ی گسیل خود را تحت طول موج برانگیختگی ۳۰۰ nm در طول موج ٤۱۲ nm نشان داد، در حالی‌که نمونه‌های 9h و 3h بیشینه گسیل خود را تحت طول موج برانگیختگی ٤۰۰ nm و به‌ترتیب در حدود ٤۵۰ nm و ٤٦۰ nm نشان دادند. نتایج حاصل نشان داد که افزایش زمان هیدروترمال از ۳ به ٦ ساعت با جابه‌جایی آبی و افزایش بیشتر تا ۹ ساعت با جابه‌جایی قرمز در طیف گسیل همراه است. این رفتار غیرتک‌سویه را می‌توان ناشی از اثر رقابتی فرایندهای هسته‌زایی، رشد ساختار کربنی، درجه‌ی کربنی‌شدن و تغییر حالت‌های سطحی دانست.

واژه های کلیدی: *نقاط کوانتومی کربنی، روش هیدروترمال، ویژگی‌های نوری، فوتولومینسانس*

Investigation of the effect of hydrothermal synthesis time on the optical properties of nitrogen-doped carbon quantum dots

Naderi Movahed, Fatemeh[1]; Rahimi, Kourosh[1]

[1] *Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Physics, Alzahra University, Tehran, 19938-93973, Iran*

Abstract

In this study, nitrogen-doped carbon quantum dots (N-CQDs) were synthesized via a one-step hydrothermal method using citric acid and urea as precursors, and the effect of synthesis time (3, 6, and 9 hours) on their optical properties was investigated. The UV-Vis absorption spectra revealed that the primary absorption peaks for the samples 3h, 6h, and 9h were located at 323, 300, and 407 nm, and their direct bandgap energies were estimated 3.24, 3.66, and 3.17 eV, respectively. Photoluminescence (PL) analysis demonstrated that all three samples exhibited excitation-wavelength-dependent emission behavior. Notably, the 6h sample displayed its maximum emission at 412 nm under an excitation wavelength of 300 nm, whereas the 9h and 3h samples exhibited their maximum emission intensities at approximately 450 and 460 nm, respectively, under 400 nm excitation. The results indicated that increasing the hydrothermal reaction time from 3h to 6h leads to a blue shift in the emission spectra, while a further increase to 9 hours results in a red shift. This non-monotonic behavior can be attributed to the competitive effects of nucleation processes, the growth of the carbon structure, the degree of carbonization, and modifications in surface states.

***Keywords**: Carbon Quantum Dots, Hydrothermal Method, Optical Properties, Photoluminescence*

PACS No. 81

مقدمه

نقاط کوانتومی کربنی (CQDs) به‌عنوان نسل جدیدی از نانومواد کربنی فلورسنت، به‌دلیل خواص نوری نظیر قابلیت تنظیم‌پذیری طول موج گسیل، پایداری نوری و زیست‌سازگاری بالا، و سمیت پایین توجه گسترده‌ای را در حوزه‌های اپتوالکترونیک، حسگری، و تصویربرداری زیستی جذب کرده‌اند [۱ و ۲]. روش سنتز

هیدروترمال یکی از رایج‌ترین رویکردهای پایین‌به‌بالا برای تولید CQDs به شمار می‌رود [۳]. در این‌میان اسید سیتریک به‌عنوان منبع کربن و اوره به‌عنوان منبع نیتروژن، به دلیل ویژگی‌های شیمیایی مکمل و هزینه‌ی کم، پرکاربردترین زوج پیش‌ساز برای سنتز نقاط کوانتومی کربنی آلاییده با نیتروژن (N-CQDs) شناخته می‌شوند [٤ و ٥]. در سامانه‌های شامل پیش‌سازهای اسید سیتریک/اوره (CA/U) متغیرهایی نظیر دما، زمان گرمایش و نسبت مولی منابع کربن و نیتروژن، به‌عنوان متغیرهای کلیدی و به‌هم‌وابسته معرفی شده‌اند، که می‌توانند مسیرهای واکنش، درجه‌ی کربنی‌شدن، غیرفعال‌سازی شیمیایی سطح و ترکیب نهایی گونه‌های تابشی را تحت تأثیر قرار دهند [٥]. در این پژوهش اثر زمان سنتز هیدروترمال بر ویژگی‌های نوری N-CQDs بررسی می‌شود.

روش سنتز نقاط کربنی آلاییده با نیتروژن

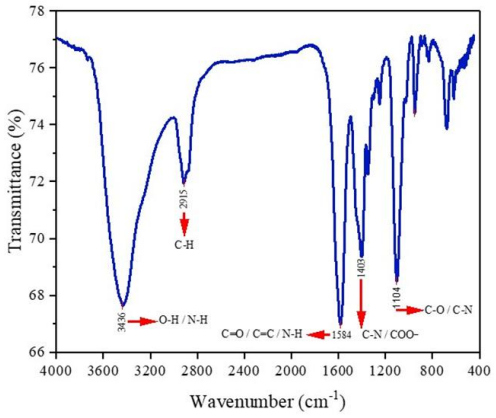
برای تهیه نقاط کربنی به روش هیدروترمال، مقدار g ۱ اسید سیتریک و g ۰/۵ اوره (نسبت مولی CA:U = ۱:۱/٦) در ml ۱۵ آب یون‌زدایی‌شده حل شد. سپس به‌مدت ۱۵ دقیقه تحت همزدن مغناطیسی در دمای اتاق قرار گرفت تا محلولی شفاف و بی‌رنگ حاصل آید. مخلوط حاصل به یک اتوکلاو استیل با پوشش داخلی تفلون به حجم ۲۰ میلی‌لیتر منتقل گردید و در آون با دمای °C ۱۸۰ قرار داده شد. سه نمونه با زمان‌های رشد هیدروترمال متفاوت (۳، ٦، و ۹ ساعت) تهیه گردید. پس از پایان زمان تعیین‌شده، اتوکلاو به‌طور طبیعی تا دمای اتاق خنک شد. محلول قهوه‌ای/زرد رنگ به‌دست‌آمده ابتدا در دور rpm ٤۰۰۰ به‌مدت ۲۰ دقیقه سانتریفیوژ گردید تا ذرات درشت حذف شوند. قسمت رویی محلول، جهت اطمینان از حذف کامل ذرات میکرونی، از فیلتر سر سرنگی با اندازه‌ی منافذ µm ۰/۲۲ عبور داده شد.

روش‌های مشخصه‌یابی

طیف FTIR با دستگاه Perkin Elmer RX، طیف‌های UV-Vis با دستگاه Shimadzu UV-3600i Plus و طیف‌های PL دستگاه Shimadzu RF-6000 تحت طول موج‌های برانگیختگی nm ۳۰۰، ٤۰۰ و ۵۰۰ ثبت شدند.

نتایج و تحلیل‌ها

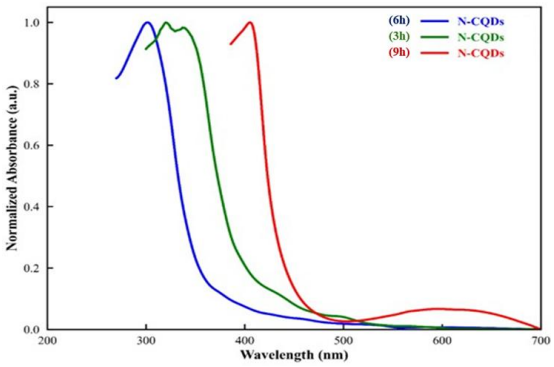
برای بررسی گروه‌های عاملی سطحی، طیف‌سنجی FTIR بر روی نمونه‌ی ٦ ساعت انجام شد و نوارها و دره‌های مهم بر روی آن مشخص شدند (شکل ۱). مطابق شکل نوار جذب پهن و قوی در cm^{-1} ۳٤۳٦ به ارتعاشات کششی O–H و N–H نسبت داده می‌شود. پهن بودن این قله، نشان‌دهنده‌ی وجود پیوند هیدروژنی گسترده در سطح نانوذرات و ماهیت آب‌دوستی بالای آن‌ها است. قله قوی در cm^{-1} ۱۵۸٤ به ارتعاشات کششی C=N یا خمشی N-H نسبت داده می‌شود. هم‌چنین قله‌ی cm^{-1} ۱٤۰۳، بیانگر ارتعاشات کششی متقارن COO^- است و می‌تواند سهمی از ارتعاشات کششی C–N نیز داشته باشد. قله‌ی cm^{-1} ۱۱۰٤ نیز به ارتعاشات کششی C–O (گروه‌های اتری/هیدروکسیلی) و هم‌چنین ارتعاشات کششی C–N مربوط است. این هم‌پوشانی ارتعاشی، حضور هم‌زمان گروه‌های اکسیژن‌دار و ورود موفقیت‌آمیز نیتروژن به شبکه‌ی کربنی (آلایش نیتروژنی) را تأیید می‌کند [٦].



شکل ۱: طیف FTIR مربوط به N-CQDs در نمونه ٦ ساعت

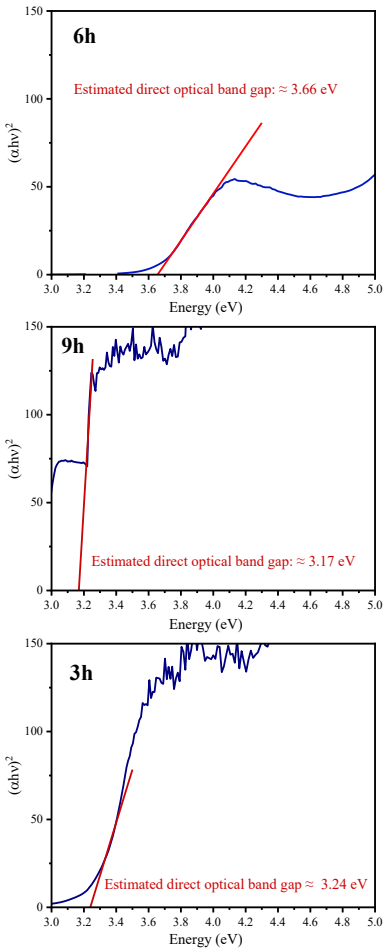
شکل ۲ طیف‌های جذب UV-Vis بهنجار شده نمونه N-CQDs سنتز شده در زمان‌های هیدروترمال مختلف را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود نمونه‌ی 3h قله‌ای در nm ۳۲۳ از خود نشان می‌دهد که به گذار $\pi \rightarrow \pi^*$ در هسته‌ی آروماتیک گرافیتی نسبت داده می‌شود [۷]. با افزایش زمان سنتز در نمونه‌ی 6h این قله به nm ۳۰۰ جابه‌جا می‌شود؛ این جابه‌جایی به آبی نشان‌دهنده‌ی بهبود نظم ساختاری هسته‌ی گرافیتی و تشکیل

ذرات کوچک‌تر و یکنواخت‌تر در مرحله‌ی هسته‌زایی است [۸]. با این حال، ادامه‌ی سنتز تا مدت زمان طولانی‌تر در نمونه‌ی 9h، موجب ظهور یک نوار جذبی در ۴۰۷ nm می‌شود که معمولا به گذار $n\rightarrow\pi^*$ مربوط به جفت‌الکترون‌های غیرپیوندی اتم‌های نیتروژن در گروه‌های عاملی سطحی نسبت داده می‌شود [۷]. ظهور یک نوار جذب پهن و ضعیف در ناحیه‌ی ۵۰۰ nm تا ۷۰۰ برای نمونه‌ی 9h، شواهد بیشتری برای تسلط حالت تله‌های سطحی و احتمال تجمع ذرات پس از ۶ ساعت فراهم می‌کند.



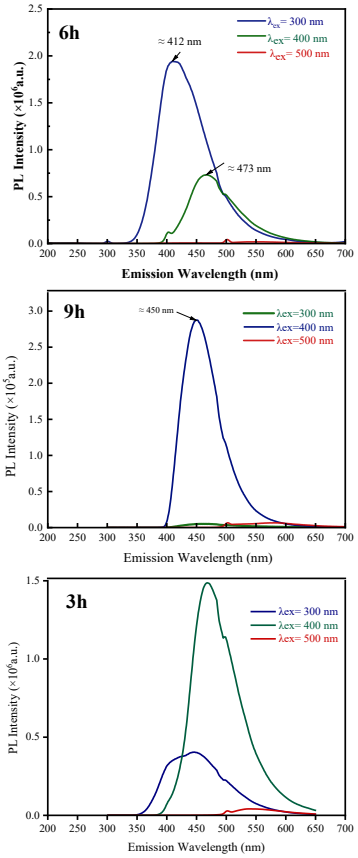
شکل ۲: طیف‌های جذب UV-Vis بهنجار نمونه‌های مختلف

برای تعیین شکاف نواری اپتیکی نمونه‌های سنتزشده از روش نمودار Tauc استفاده شد (شکل ۳). با رسم $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب $h\nu$ و یافتن تلاقی خط مماس بر منحنی به محور انرژی، مقادیر شکاف نواری اپتیکی نمونه‌ها برای گذار مستقیم به‌دست آمد. نتایج نشان داد که نمونه‌ی 6h بیشترین مقدارشکاف نواری اپتیکی برآوردی را با مقدار ۳/۶۶ eV دارد، در حالی که این مقدار برای نمونه‌های 3h و 9h به ترتیب برابر ۳/۲۴ eV و ۳/۱۷ eV است. بر اساس اثر محصور شدگی کوانتومی، مقدار بزرگ‌تر شکاف نواری در نمونه‌ی 6h می‌تواند نشان‌دهنده‌ی کوچک‌تر بودن ذرات در این نمونه نسبت به سایر نمونه‌ها باشد [۳ و۶]. هم‌چنین کاهش شکاف نواری در نمونه‌ی 9h به پدیده‌ی تجمع ذرات نسبت داده می‌شود که موجب کاهش محصور شدگی کوانتومی و تغییر ساختار الکترونیکی می‌گردد [۱و۶].



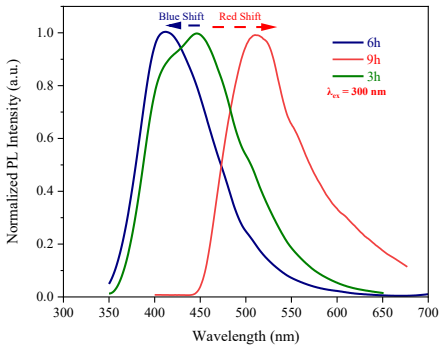
شکل ۳: نمودارهای Tauc نمونه‌های مختلف

طیف‌های فوتولومینسانس (PL) نمونه‌های 3h، 6h و 9h تحت برانگیختگی nm ۳۰۰، ۴۰۰ و ۵۰۰ ثبت شد (شکل ٤) مطابق شکل، هر سه نمونه، گسیل وابسته به طول‌موج برانگیختگی نشان دادند که ناشی از توزیع اندازه‌ی ذرات و تنوع حالت‌های سطحی است[۸و۹]. نمونه‌ی 6h بیشینه‌ی گسیل را تحت طول‌موج برانگیختگی nm ۳۰۰ و در nm ٤١٢ نشان داد. با افزایش طول‌موج برانگیختگی به nm ٤٠٠ قله‌ی گسیل به nm ٤٧٣ جابه‌جا شد. نمونه‌های 3h و 9h هر دو در طول‌موج برانگیختگی nm ٤٠٠ بیشینه‌ی گسیلی به‌ترتیب در حدود nm ٤٥٠ و ٤٦٠ داشتند. این نتایج با مقادیر شکاف نواری به‌دست‌آمده هم‌خوانی دارند. لازم به ذکر است در هر سه نمونه، با افزایش طول‌موج برانگیختگی به nm ۵۰۰ کاهش محسوس شدت مشاهده شد.



شکل ٤: طیف‌های PL نمونه‌های مختلف

بررسی طیف‌های PL بهنجار شده نمونه‌های 3h، 6h و 9h تحت طول‌موج برانگیختگی ۳۰۰nm (شکل ٥) وابستگی غیرخطی خواص نوری به زمان سنتز هیدروترمال را نشان می‌دهد. با افزایش زمان واکنش از ۳ به ٦ ساعت، یک جابه‌جایی به آبی از محدوده‌ی ٤٥٠ nm به ٤١٠ nm مشاهده می‌شود؛ این پدیده به بازتنظیم ساختاری هسته‌ی sp^2 و افزایش اثر محصور شدگی کوانتومی در مراحل اولیه‌ی سنتز نسبت داده می‌شود. در مقابل، ادامه‌ی زمان سنتز تا ۹ ساعت منجر به گسترش دامنه‌های sp^2، افزایش چگالی حالت‌های سطحی و در نتیجه بروز یک جابه‌جایی قرمز به nm ٤٦٠ می‌گردد. هم‌چنین، باریک‌ترین پهنای طیف دراین طول‌موج برانگیختگی در نمونه‌ی 6h مشاهده شد که نشان‌دهنده‌ی توزیع همگن‌ترِ اندازه است؛ درحالی‌که طیف پهن‌تر در نمونه‌های 3h و 9hنشان‌دهنده‌ی ناهمگونی در اندازه و تنوع نقص‌های ساختاری و حالت‌های سطحی می‌باشد [٥ و ٧].



شکل ٥: طیف‌های PL بهنجار شده نمونه‌ها تحت برانگیختگی ۳۰۰nm

نتیجه‌گیری

در این پژوهش نقاط کوانتومی کربنی آلاییده با نیتروژن (N-CQDs) به روش هیدروترمال سنتز شد و تأثیر زمان واکنش هیدروترمال بر ویژگی‌های آن‌ها ارزیابی شد. نتایج تحلیل‌های نوری، وابستگی شدید خواص جذب و گسیل نوری به مدت زمان سنتز هیدروترمال و وجود یک زمان بهینه (٦ ساعت) برای دستیابی به بیشینه‌ی فلورسانس را نشان می‌دهند.

مرجع‌ها

[1] F. Yan, J. Li, X. Zhao and X. Gong; "Unveiling Unconventional Luminescence Behavior of Multicolor Carbon Dots Derived from Phenylenediamine"; *Physical Chemistry Letters* **14**, No. 26 (2023) 5975–5984.
[2] M. Zhang, X. Zhai, M. Sun, T. Ma, Y. Huang, B. Huang, ... and C. Yan; "When Rare Earth Meets Carbon Nanodots: Mechanisms, Applications and Outlook"; *Chemical Society Reviews* **49,** No. 24 (2020) 9220–9248.
[3] M. Jorns and D. Pappas; "A Review of Fluorescent Carbon Dots, Their Synthesis, Physical and Chemical Characteristics, and Applications"; *Nanomaterials* **11**, No. 6 (2021) 1448.
[4] S. J. Lee, Y. Y. Zheng, W. M. Chen and Y. H. Hsueh; "Nitrogen-Doped Carbon Dots: A New Powerful Fluorescent Dye with Substantial Effect on Bacterial Cell Labeling"; *ACS Omega* **9**, No. 34 (2024) 36453–36463.
[5] V. Strauss, H. Wang, S. Delacroix, M. Ledendecker and P. Wessig; "Carbon Nanodots Revised: The Thermal Citric Acid/Urea Reaction"; *Chemical Science* **11**, No. 31 (2020) 8256–8266.
[6] Rooj, B.; Mandal, U.; "A review on characterization of carbon quantum dots"; *Vietnam Journal of Chemistry* **61,** No. 6 (2023) 693–718.
[7] i, H.; Qiu, L.; Zhang, X.; Yi, T.; Jing, J.; Sami, R.; Rahman, M. M.; "Novel N-doped carbon dots derived from citric acid and urea: fluorescent sensing for determination of metronidazole and cytotoxicity studies"; *RSC Advances*, **13**, No. 4 (2023) 2663–2671.
[8] Yi, H.; Liu, J.; Yao, J.; Wang, R.; Shi, W.; Lu, C.; "Photoluminescence Mechanism of Carbon Dots: Triggering Multiple Color Emissions through Controlling the Degree of Protonation"; *Molecules*, **27**, No. 19 (2022) 6517.
[9] A. Sciortino, A. Cannizzo and F. Messina; "Carbon Nanodots: A Review—From the Current Understanding of the Fundamental Photophysics to the Full Control of the Optical Response"; *Carbon Research* **5**, No. 4 (2018) 67.

اثر دمای الکترولیت برخواص نانوساختاری اکسید روی تهیه شده به روش الکتروکریستالیزاسیون

سیمین میردریکوندی[۱]، صبا موسیوند[۲،*]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم‌آباد، ایران

[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم آباد، ایران

Corresponding author E-mail:Mosivand.S@lu.ac.ir

چکیده

در این مقاله اکسید روی (ZnO) به روش الکتروکریستالیزاسیون در غلظت و ولتاژ ثابت و در دماهای مختلف ساخته شد. فرآیند رشد با استفاده از الکترودهای روی و در یک سلول الکتروشیمایی ساده انجام گرفت. محلول الکترولیت شامل ۲۰۰ میلی لیتر آب مقطر و تترا متیل آمونیوم کلراید با غلظت ثابت ۰/۲ مولار در دمای‌های ۰، ۲۵، ۴۰ و۶۰ درجه سانتیگراد بود. نمونه‌های حاصل پس از ته‌نشینی کامل، شست و شوی چند مرحله‌ای با آب مقطر و خشک شدن در دمای اتاق، به وسیله پراش پرتو ایکس(XRD) و میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) مورد بررسی قرار گرفتند. نتایج XRD نشان داد که دمای الکترولیت بر خواص نانوساختاری تاثیر مستقیم دارد به طوری که نمونه تهیه شده در دمای اتاق در مقایسه با دیگر نمونه‌های تولید شده، خالص‌ترین ساختار اکسیدروی را با ساختار کریستالی هگزاگونال از خود نشان می‌دهد. تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی نشان داد نانوساختارها به شکل میله‌های درهم فرو رفته با سطح مقطع در حدود ۲۰۰ نانومتر و طول متغیر از چند صد نانومتر تا حدود یک میکرومتر رشد کرده‌اند. نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که کنترل دمای الکترولیت نقش کلیدی در ساخت ZnO با کیفیت ساختاری مطلوب دارد.

واژه های کلیدی: *نانوذرات اکسید روی؛ الکتروکریستالیزاسیون؛ دمای الکترولیت*

The Effect of Electrolyte Temperature on Zinc Oxide Nanostructures Prepared by Electrocrystallization

Simin Mirderikondi [1], Saba Mosivand[2]*

[1]Physics Department, Faculty of Basic Sciences, Lorestan University, Lorestan, Iran
[21]Physics Department, Faculty of Basic Sciences, Lorestan University, Lorestan, Iran
Corresponding author E-mail:Mosivand.S@lu.ac.ir

Abstract

In this paper, zinc oxide (ZnO) was prepared by electrocrystallization at constant concentration and voltage and at different temperatures. The growth process was carried out using zinc electrodes and in a simple electrochemical cell. The electrolyte solution consisted of 200 ml of distilled water and tetramethylammonium chloride with a constant concentration of 0.2 M at temperatures of 0°C, 25°C, 40°C and 60°C. The samples were examined after complete sedimentation, multi-step washing with distilled water and drying at room temperature by X-ray diffraction (XRD) and scanning electron microscopy (SEM). The XRD results showed that the electrolyte temperature has a direct effect on the nanostructural properties, so that the sample prepared at room temperature, compared to other samples, shows the purest zinc oxide structure with a hexagonal crystal structure. Scanning electron microscope images showed that the nanostructures grew in the form of entangled rods with a cross-sectional area of about 200 nm and a length varying from a few hundred nanometers to about one micrometer. The results of this study indicate that controlling the electrolyte temperature plays a key role in the synthesis of ZnO with desirable structural quality.

Keywords*: Zinc oxide nanoparticles; Electrocrystallization; Electrolyte temperature*
PACS No. 61

مقدمه

به‌دلیل جذابیت و اهمیت کاربردی فراوان نانوساختارهای اکسید روی، تاکنون پژوهشگران زیادی تلاش خود را بر روی تحقیقات گسترده، به‌منظور دستیابی به شیوه‌های مناسب‌تر ساخت این نانوذرات و بررسی ویژگی‌های گوناگون آن‌ها متمرکز نموده‌اند. توسعه و گسترش هرچه بیشتر روش‌های ساخت این نانوذرات با هدف تولید ذراتی با ساختار، اندازه و شکل معین و توزیع مناسب از محورهای مورد بحث محققین در سالیان اخیر به شمار می‌آید.

اکسید روی (ZnO) یکی از نیمه رساناهای پهن باند با گاف انرژی مستقیم است که به دلیل خواص الکتریکی، اپتیکی و شیمیایی منحصر به فرد، کاربردهای گسترده‌ای در حسگرهای گازی، فوتوکاتالیست‌ها، ادوات اپتوالکترونیکی و سلول‌های خورشیدی پیدا کرده است. عملکرد این ماده به شدت به ساختار بلوری، مورفولوژی و خلوص فازی آن وابسته است، از این رو توسعه روش های سنتزی ساده و قابل کنترل برای تولید ZnO با کیفیت بالا همواره مورد توجه بوده است.

تاکنون روش‌های متعددی برای سنتز ZnO گزارش شده است، اما بسیاری از این روش‌ها نیازمند دماهای بالا، تجهیزات پیچیده یا هزینه‌های زیاد هستند. از بین روش‌های مختلف ارائه شده برای ساخت نانوذرات اکسید روی، روش الکتروشیمیایی مبتنی بر فرآیند الکترواکسیداسیون روی، به عنوان یک گزینه‌ی مناسب مطرح می‌باشد که تاکنون گزارشاتی در مورد آن ارائه شده است. روش الکتروکریستالیزاسیون به عنوان روشی کم هزینه، ساده و قابل انجام در دمای اتاق امکان کنترل پارامترهای رشد نظیر ولتاژ، زمان، دما و غلظت الکترولیت را فراهم می‌کند. مطالعات پیشین نشان داده‌اند که در این روش، رشد ZnO می‌تواند به صورت مستقیم از محلول‌های آبی و در شرایط متعارفی انجام شود [۱-۳].

در میان پارامترهای موثر بر فرایند الکتروکریستالیزاسیون، دمای الکترولیت نقش تعیین کننده‌ای در نرخ رشد، بلورینگی و تشکیل فاز نهایی دارد. طبق جستجوها و بررسی‌های به عمل آمده، بررسی سیستماتیک اثر دمای الکترولیت در شرایط غلظت و ولتاژ تابت در سیستم آزمایشگاهی به کار رفته در این پژوهش همچنان با اهمیت است و تاکنون گزارشی در مورد آن ارائه نشده است [۴-۷].

هدف این پژوهش، بررسی اثر دمای محلول ترامتیل آمونیوم کلراید بر ساختار و کیفیت ZnO سنتز شده به روش الکتروکریستالیزاسیون می‌باشد.

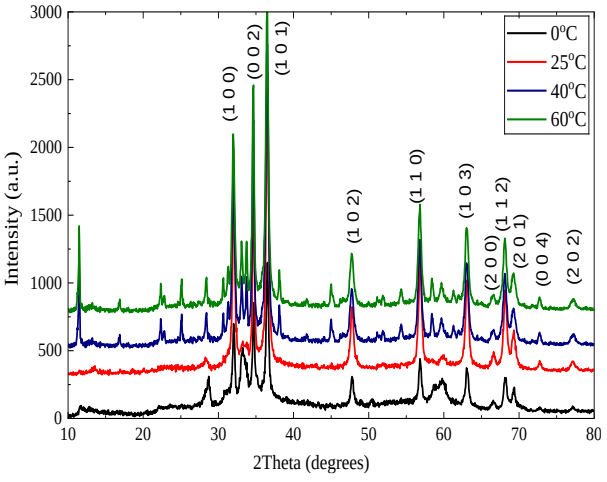
کارهای تجربی

در این پژوهش از ورقه‌های روی با خلوص بالا به عنوان آند و کاتد استفاده شد. آب مقطر به عنوان حلال و ترامتیل آمونیوم کلراید به عنوان الکترولیت مورد استفاده قرار گرفت. در این کار، برای تهیه نانو ذرات ZnO، دو صفحه فلزی روی با ابعاد ۱×۲ سانتی متر و ۱×۴ سانتی متر به ترتیب به عنوان آند و کاتد فداشونده استفاده شدند. ابتدا، الکترودها به کمک سمباده و سپس با کمک اولتراسونیک در حمام اتانول و آب مقطر پاک شدند. الکترودهای تمیز در فاصله ۲ سانتی‌متر از یک دیگر قرار گرفتند. محلول الکترولیت با حل کردن تترا متیل آمونیوم کلراید در ۲۰۰cc آب مقطر و در غلظت ۰/۲ مولار تهیه شد. فرایند رشد در ولتاژ تابت ۲۰ ولت و در دماهای ۰، ۲۵، ۴۰ و ۶۰ درجه سلیسوس و به مدت دقیقه ۳۰ دقیقه انجام گرفت. پس از پایان فرایند، نمونه ها برای چند روز در محیط باقی ماندند تا رسوب به طور کامل ته نشین شود. سپس محلول با استفاده از سرنگ خارج شد و رسوب باقی مانده سه بار در فواصل زمانی یکسان با آب مقطر شست و شو داده شد. این فرایند به منظورحذف یون‌ها و ناخالصی‌های احتمالی تکرار گردید. در نهایت نمونه‌ها در دمای اتاق خشک شدند.

ساختار بلوری نمونه‌ها با استفاده از پراش پرتو ایکس (XRD) بررسی شد. مورفولوژی و اندازه ذرات به وسیله میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) مورد مطالعه قرار گرفت.

نتایج XRD

به‌منظور مطالعه‌ی ماهیت و نوع ساختار بلوری نانوذرات تولید شده از دستگاه XRD استفاده شد. الگوی XRD نمونه‌های ساخته شده در دماهای مختلف الکترولیت در شکل ۱ نشان داده شده است. به وضوح دیده می شود که همه نمونه‌ها دارای ساختار بس‌بلوری می‌باشند. مقایسه این الگوها با الگوی موجود در کارت استاندارد شماره (JCPDS 01-080-0075) نشان می‌دهد که تمام پیک‌هایی که با اندیس‌های میلر مشخص شده‌اند با ساختار هگزاگونال ZnO تطابق کامل دارند. با افزایش دمای الکترولیت، شدت پیک‌ها افزایش یافته و پهنای آن‌ها کاهش می‌یابد که نشان دهنده بهبود بلورینگی نمونه‌ها به دنبال افزایش دماست. نمونه ساخته شده در دمای ۲۵ درجه سلیسوس، بیشترین هماهنگی را با کارت استاندارد ذکر شده نشان می دهد و در مقایسه با دیگر نمونه‌های تولید شده، ماهیت خالص‌تری از خود نشان می‌دهد. در الگوی سایر نمونه‌ها پیک‌های دیگری نیز دیده می‌شود که از حضور فازهای ثانویه در نمونه‌ها حکایت دارد.



شکل ۱: الگوهای XRD نمونه‌های ساخته شده در دماهای مختلف.

نتایج تصویربرداری SEM

به منظور بررسی مورفولوژی و ریزساختار نانوذرات از دستگاه میکروسکوپ الکترونی SEM استفاده شد. در شکل ۲ تصاویر SEM مربوط به نمونه‌ی نوعی ساخته شده در دمای اتاق با دو مقیاس متفاوت آورده شده است. همان‌طور که دیده می‌شود نمونه عمدتا دارای ساختار میله‌ای شکل بوده که درهم فرو رفته‌اند. سطح مقطع میله ها در حدود ۲۰۰ نانومتر و طول آنها نیز از حدود ۶۰۰ نانومتر تا حدود یک میکرون متغیر است.

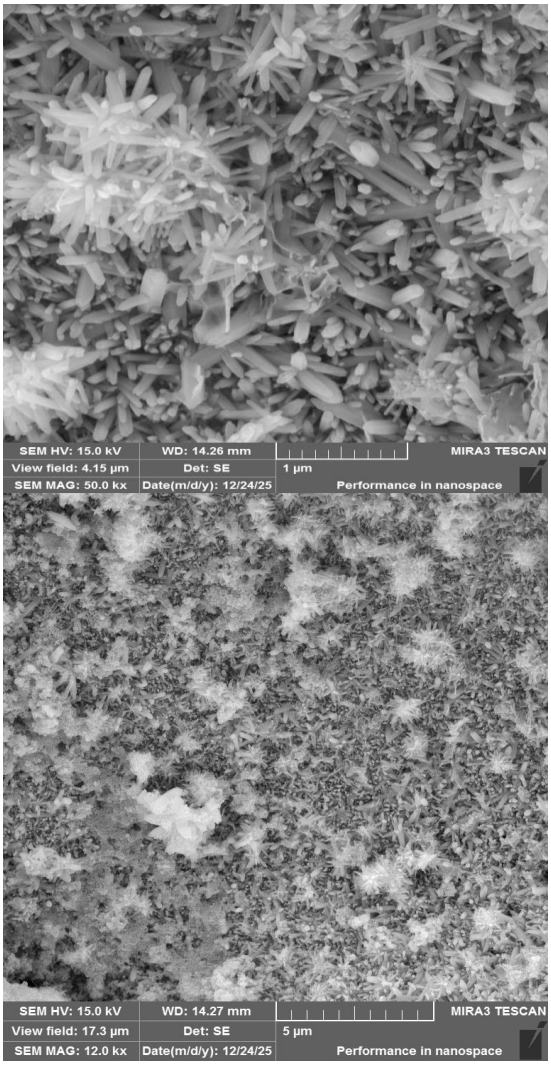
دمای الکترولیت نیز یکی از فاکتورهای مهم و مؤثر بر ویژگی-های نانوذرات تهیه شده به‌روش الکترواکسیداسیون است. با تغییر دمای محلول الکترولیت جنب‌وجوش و ضریب پخش یون‌ها در محلول تحت تأثیر قرار گرفته و با تغییر سرعت انتقال و جابه‌جایی جرم و ماده در الکترولیت، سینتیک و پیشرفت واکنش‌های الکترودی، رسانندگی محلول الکترولیت و نیز بازده فرآیندهای الکترواکسیداسیون دستخوش تغییر می‌گردد.

پرواضح است که با افزایش دما، تحرک یون‌ها و ذرات در محلول نیز افزایش یافته و این عامل موجب افزایش تعداد برخوردها بین ذرات موجود در محلول می‌گردد. در نتیجه در این شرایط احتمال به‌هم‌پیوستگی و کلوخه‌ای شدن ذرات بیشتر می-شود. البته به این نکته نیز باید توجه داشت که افزایش دما منجر به افزایش جنب‌وجوش مولکول‌های پایدارساز موجود در محلول نیز می‌گردد و انتظار می‌رود که با وقوع این پدیده احتمال برخورد آن-ها با سطح ذرات افزایش یافته و ذرات به‌گونه‌ایی مطلوب‌تر توسط مولکول‌های پایدارساز پوشش داده شوند. در این میان ماهیت عامل پایدارساز بسیار حائز اهمیت است و این‌گونه به‌نظر می‌رسد که حالتی بحرانی وجود دارد که در آن اثر افزایش تحرک مولکول‌های پایدارساز و احتمال برخورد آن‌ها با ذرات، بر افزایش سرعت برخورد ذرات پیش از پوشش‌دهی سطح آن‌ها با مولکول‌های پایدارساز، غلبه کرده و منجر به کاهش اندازه‌ی ذرات می‌گردد.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، اکسید روی با استفاده از روش الکترواکسیداسیون در غلظت و ولتاژ ثابت و در دماهای ۰، ۲۵،

۴۰ و۶۰ درجه سلیسوس تهیه شد. نتایج نشان داد که دمای الکترولیت تاثیر مستقیمی بر بلورینگی و خلوص فازی ZnO دارد. بر اساس نتایج XRD نمونه تهیه شده در دمای ۲۵ درجه سانتیگراد دارای خالص‌ترین ساختار است. تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی نشان داد ذرات به شکل میله‌های درهم فرو رفته با سطح مقطع در حدود ۲۰۰ نانومتر رشد کرده‌اند. این مطالعه نشان می‌دهد که روش الکترواکسیداسیون می‌تواند به عنوان روشی ساده، کم هزینه و موثر برای تولید ZnO با کیفیت بالا مورد استفاده قرار گیرد.



شکل۲: تصاویر نوعی SEM نانوذرات ساخته شده در این تحقیق در دمای اتاق.

:

مرجع‌ها

[1] S. Rahman Salari, M. Khavarpour, M. Masoumi, S. Mosivand, "Preparation of cobalt oxide and tin dioxide nanofluids and investigation of their thermophysical properties"; *Microfluidics and Nanofluidics*, **26** (2022) 79.
[2] S. Iranshahi, S. Mosivand, "Cobalt/graphene oxide nanocomposites: Electro-synthesis, structural, magnetic, and electrical properties"; *Ceramics International*, 48 (2022) 12240-12254.
[3] S. Farzin Sadr, S. Mosivand, "Shape-controlled electro-synthesis of pyrrhotite, *Ceramics International*, **50** (2024) 33123–33130.
[4] F. Bagheri, S. Mosivand, "Ball-like Nickel Hydroxide Nanoparticles: Electro-synthesis, Characterization, and Application"; *Materials Today Communications*, **26** (2021) 101714.
[5] K. Garavand, Saba Mosivand, "Electro‑crystallized NiO nanoparticles for river‑water treatment applications"; *Applied Physics A* (2021) 127:73.
[6] S.Z. Shahanshahi, S. Mosivand, "Electro-crystallized SnO2 nanoparticles for river-water heavy-metal ion pollutant removal process"; *Applied Physics A* **125** (2019) 1-11.
[7] S. Piri Fathabad, S. Mosivand, I. Kazeminezhad, "Synthesis and Characterization of Electro-Crystallized Alumina Nanoparticles and Investigation of Their Application in Removal of Cobalt and Cadmium from Seimareh and Karoon Rivers in Iran"; *Journal of Elec. Materi.* **47** (2018) 7034-7052.
[8] S. Mosivand, "Effect of mineral additives on magnetite nanoparticles prepared in an electrolytic cell"; *Advanced Powder Technology*, 32 (2021) 432-444.

بررسی اثر آلایش منیزیم بر خواص الکترونیکی نانوورقه‌های SnS_2 با استفاده از اندازه‌گیری و تحلیل مات–شاتکی

ستایش مهر[۱]، محبوبه ؛ مشفق، علیرضا[۱،۲]

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

[۲] مرکز علوم و فناوری نانو–پژوهشکده جامع علوم همگرا–دانشگاه صنعتی شریف، خیابان آزادی، تهران

چکیده

در این پژوهش، اثر آلایش بین‌نشینی منیزیم بر خواص الکترونیکی نیمه‌رسانای لایه‌ای دی‌سولفید قلع (SnS_2) با استفاده از اندازه‌گیری و تحلیل نتایج مات–شاتکی (Mott-Schottky) بررسی شد. با توجه به ناسازگاری ظرفیتی بین یون‌های Mg^{2+} و Sn^{4+} ، حضور منیزیم در موقعیت‌های بین‌نشینی به‌عنوان سازوکار غالب آلایش در نظر گرفته می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که با افزودن منیزیم به SnS_2 از صفر درصد (خالص) به ۳ درصد، چگالی دهنده (N_D) از $۱/۷\times۱۰^{۱۹}$ به $۳/۹\times۱۰^{۱۹}cm^{-3}$ افزایش می‌یابد که بیانگر بالا رفتن غلظت حامل‌های الکترونی در ساختارمی‌باشد. همچنین افزایش N_D موجب کاهش عرض ناحیه تهی w ، بهبود انتقال بار و اصلاح خمیدگی باندها می‌شود. این تغییر پتانسیل باند تخت نشان‌دهنده جابه‌جایی تراز فرمی به سمت باند رسانش و تقویت رفتار n-type نمونه‌های آلایش‌یافته است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که آلایش بین‌نشینی منیزیم روشی مؤثر برای تنظیم ساختار الکترونیکی و بهبود ویژگی‌های انتقال بار در نانوورقه های SnS_2 بوده و می‌تواند عملکرد این ماده را در کاربردهای الکترونیکی والکتروشیمیایی ارتقا دهد.

واژه های کلیدی: *دی‌سولفید قلع (SnS_2) ، آلایش منیزیم، آلایش بین‌نشینی، تحلیل مات–شاتکی، چگالی حامل‌های دهنده، پتانسیل باند تخت .*

The Influence of Magnesium Doping on Electronic Properties of SnS_2 nanosheets Via Mott–Schottky Measurement and Analysis

Setayeshmehr, Mahboobeh[1]; Moshfegh, Alireza[1,2]

[1]Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran,
[2]Nanoscience and Nanotechnology Center, Institute for Convergent Sciences & Technology – Sharif University of Technology, Azadi Avenue, Tehran,11155-9161, Iran

Abstract

In this study, the effect of interstitial magnesium doping on the electronic properties of layered tin disulfide (SnS_2) nanosheets is investigated using Mott–Schottky measurement and analysis. Owing to the valence mismatch between Mg^{2+} and Sn^{4+} ions, magnesium incorporation at interstitial sites considered the dominant doping mechanism. The results revealed that increasing the Mg concentration from zero% (pure) to 3% led to a gradual increase in donor density (N_D) from 1.7×10^{19} to $3.9\times10^{19}cm^{-3}$, indicating a significant enhancement in electron carrier concentration. The increase in N_D resulted in a reduction of the depletion layer width, facilitating charge transport and modifying the band bending behavior. In addition, the variation in flat-band potential suggested a shift of the Fermi level toward the conduction band minimum, confirming the enhancement of n-type conductivity in the doped samples. These findings demonstrate that interstitial Mg doping is an effective approach for tuning the electronic structure and improving charge transport characteristics in SnS_2 nanosheets, making it a promising candidate for electronic and electrochemical applications.

Keywords*: Tin disulfide (SnS_2), Magnesium doping, Interstitial doping, Mott–Schottky analysis, Donor density, Flat-band potential.*
PACS No.73, 68

مقدمه

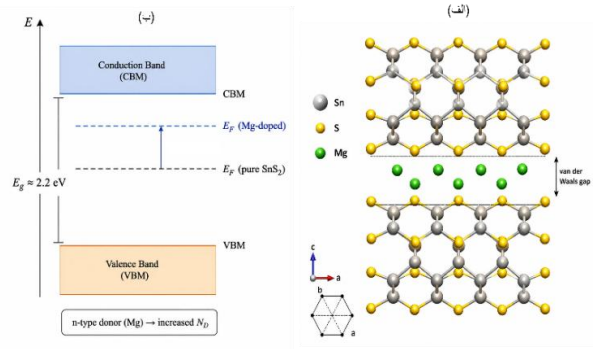
نیمه‌رساناهای کالکوژنیدی لایه‌ای، به‌ویژه SnS_2، به‌دلیل انرژی گاف مناسب حدود ۲/۲ eV، پایداری شیمیایی بالا و قابلیت تنظیم تراز فرمی از طریق آلایش، به‌عنوان مواد راهبردی در فوتوکاتالیست‌ها، حسگرهای نوری و سلول‌های فوتوالکتروشیمیایی (PEC) شناخته می‌شوند. در حالت ذاتی، SnS_2 یک نیمه‌رسانای نوع n محسوب

می‌شود که رفتار الکترونی آن به‌طور قابل‌توجهی تحت تأثیر نقص‌های ذاتی شبکه و انحراف از استوکیومتری قرار دارد. ایجاد نقص‌هایی نظیر جای‌خالی گوگرد و سایر مراکز دهنده می‌تواند موجب افزایش غلظت الکترون‌های آزاد و جابه‌جایی تراز فرمی به سمت باند رسانش شود(شکل ۱). علاوه بر این، آلایش با یون‌های فلزی به‌عنوان یک راهکار مؤثر برای مهندسی ساختار نواری، تنظیم چگالی حامل‌ها و بهبود جدایش و انتقال بار شناخته می‌شود که در نهایت عملکرد فوتوکاتالیستی و فوتوالکتروشیمیایی SnS_2 را ارتقا می‌دهد[۱].در فرایند آلایش با عناصر فلزی، یون‌های واردشده عمدتاً به‌جای جانشینی در سایت قلع، در موقعیت‌های بین‌نشینی در فواصل بین‌لایه‌ای جای می‌گیرند[۲]. آلایش در نیمه‌رساناهای نوع n معمولاً با ایجاد ترازهای دهنده در نزدیکی باند رسانش، غلظت حامل‌های آزاد را افزایش داده و انتقال بار را تسهیل می‌کند. این تغییرات می‌توانند به‌طور مستقیم بر خواص الکتروشیمیایی و فوتوالکتروشیمیایی ماده اثر گذاشته و از طریق روش‌هایی نظیر طیف‌سنجی امپدانس الکتروشیمیایی (EIS) و تحلیل مات–شاتکی مورد ارزیابی قرار گیرند. به‌ویژه، تغییر در چگالی دهنده‌ها (Donor Density) و پتانسیل باند تخت (Flat-Band Potential) با اصلاح ظرفیت لایه تهی و ویژگی‌های ناحیه بار فضایی همراه بوده و به‌صورت تغییر در شیب و محل تقاطع نمودارهای مات–شاتکی ظاهر می‌شود. ازاین‌رو، تحلیل مات–شاتکی به‌عنوان یکی از ابزارهای کلیدی برای بررسی اثر آلایش بر ساختار الکترونیکی و عملکرد فوتوالکتروشیمیایی نیمه‌رساناها شناخته می‌شود[۳]. باتوجه به حساسیت بالای تحلیل مات–شاتکی به ویژگی‌های الکترونیکی و شیمیِ نقص‌ها، تعیین دقیق پارامترهایی نظیر پتانسیل نوار تخت و چگالی دهنده‌ها برای درک و شناخت دقیق رفتار فصل‌مشترک نیمه‌رسانا/الکترولیت ضروری است.

در پژوهش حاضر، اثر آلایش با عنصر منیزیم بر پارامترهای الکترونیکی نانوورقه‌های SnS_2 با بهره‌گیری از طیف‌سنجی امپدانس الکتروشیمیایی و تحلیل مات–شاتکی مورد ارزیابی قرار گرفته است تا چگونگی تأثیر این ناخالصی بر بهبود انتقال بار و بهینه‌سازی ترازهای انرژی در این نانوورقه‌ها تبیین گردد.

مبانی نظری آلایش Mg و تحلیل مات–شاتکی در SnS_2

دی‌سولفید قلع (SnS_2) یک نیمه‌رسانای لایه‌ای است که از لایه‌های S–Sn–S تشکیل شده و این لایه‌ها توسط نیروهای ضعیف واندروالسی به یکدیگر متصل می‌شوند. همان‌گونه که در شکل ۱(الف) نشان داده شده است، وجود فاصله بین‌لایه‌ای در این ساختار امکان ورود اتم‌های خارجی را فراهم می‌کند و SnS_2 را به بستری مناسب برای آلایش بین‌نشینی تبدیل می‌سازد. در آلایش با منیزیم، به دلیل اختلاف ظرفیت یون‌های Mg^{2+} و Sn^{4+} ، جانشینی مستقیم منیزیم در جایگاه قلع از نظر انرژی تشکیل کمتر مطلوب است؛ ازاین‌رو، حضور Mg در موقعیت‌های بین‌نشینی محتمل‌تر در نظر گرفته می‌شود[۲]. این نوع آلایش می‌تواند توزیع بار الکترونی، موقعیت سطح فرمی و ساختار نواری نیمه‌رسانا را تغییر دهد .شکل ۱(ب) به‌صورت شماتیک اثر آلایش Mg بر ساختار نواری SnS_2 و جابه‌جایی سطح فرمی به سمت باند رسانش را نشان می‌دهد.



شکل ۱: (الف) ساختار بلوری لایه‌ای SnS_2 و جایگاه احتمالی اتم‌های Mg در موقعیت‌های بین‌نشینی؛ (ب) نمایش شماتیک ساختار نواری SnS_2 خالص و آلایش‌شده با Mg و جابه‌جایی سطح فرمی به سمت باند رسانش.

افزایش چگالی دهنده‌ها (N_D) بر ویژگی‌های ناحیه بار فضایی در فصل مشترک نیمه‌رسانا–الکترولیت تأثیر می‌گذارد. پهنای ناحیه تخلیه (W) از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0}{eN_D}\left(V - V_{fb} - \frac{kT}{e}\right)} \qquad (۱)$$

که در آن ε ثابت دی‌الکتریک نسبی نیمه‌رسانا، ε_0گذردهی درخلأ، Vپتانسیل اعمالی، V_{fb}پتانسیل باند تخت، e بار الکترون، k ثابت

بولتزمن و T دمای مطلق است. بر اساس این رابطه، افزایش N_D موجب کاهش پهنای ناحیه تخلیه و تغییر خمیدگی باندها در سطح نیمه‌رسانا می‌شود.

برای بررسی تجربی این تغییرات، از اندازه‌گیری و تحلیل نتایج آزمون مات–شاتکی (Mott–Schottky) استفاده می‌شود[٤]. برای یک نیمه‌رسانای نوع n ، مانند SnS_2 رابطه مات–شاتکی به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\frac{1}{C^2}=\frac{2}{\varepsilon\varepsilon_0 eN_D}\left(V-V_{fb}-\frac{kT}{e}\right) \qquad (۲)$$

که در آن C ظرفیت ناحیه بار فضایی است. در نمودار $1/C^2$ بر حسب پتانسیل، شیب بخش خطی با چگالی دهنده‌ها مرتبط بوده و از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$N_D=\frac{2}{e\varepsilon\varepsilon_0\left(\frac{d(1/C^2)}{dV}\right)} \qquad (۳)$$

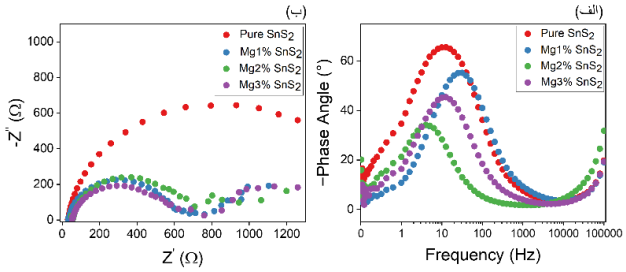
همچنین پتانسیل باند تخت از محل تقاطع امتداد بخش خطی نمودار با محور پتانسیل تعیین می‌شود:

$$V_{fb}=V_{\text{intercept}}-\frac{kT}{e} \qquad (٤)$$

بنابراین، تحلیل مات–شاتکی روشی مؤثر برای تعیین چگالی دهنده‌ها، پتانسیل باند تخت و بررسی تأثیر آلایش بر خواص الکترونیکی SnS_2 محسوب می‌شود.

نتایج و بحث

پیش از انجام اندازه‌گیری‌های مات–شاتکی، آزمون امپدانس الکتروشیمیایی(EIS) برای بررسی پاسخ فرکانسی فصل مشترک نیمه‌رسانا–الکترولیت برای تمام نمونه‌های SnS_2 خالص و آلایش شده با منیزیم با مقادیر ۲،۱و۳ درصد با استفاده از دستگاه پتانسیواستات/گالوانواستات مدل AUTOLAB PGSTAT302 انجام شد. همان‌گونه که در شکل ۲ الف مشاهده می‌شود، در محدوده فرکانس‌های پایین تا میانی، مقادیر بالاتر زاویه فاز نشان‌دهنده غالب بودن رفتار خازنی سیستم و سهم قابل‌توجه ظرفیت ناحیه بار فضایی (Space-Charge Capacitance, Csc) در پاسخ امپدانسی است. با افزایش فرکانس، کاهش تدریجی زاویه فاز بیانگر کاهش سهم مؤلفه‌های خازنی و افزایش غلبه رفتار مقاومتی در سامانه است. علاوه بر این، کاهش شعاع نیم‌دایره در نمودارهای نایکوییست (شکل ۲ب) برای نمونه‌های آلایش‌شده در مقایسه با نمونه خالص، نشان‌دهنده کاهش مقاومت انتقال بار (R_{ct}) و تسهیل انتقال حامل‌های بار در فصل مشترک الکترود–الکترولیت است که به بهبود جدایش و انتقال بار منجر می‌شود[٥]. نتایج مات–شاتکی نیز نشان داد که در فرکانس‌های بالاتر از ۱ کیلوهرتز، نمودارهای $1/C^2$-V از رفتار خطی ایده‌آل فاصله گرفته و پراکندگی داده‌ها ظاهر می‌شود. ازاین‌رو، فرکانس ۱۰۰ Hz که در آن سهم ظرفیت ناحیه بار فضایی همچنان غالب بوده و بهترین خطی بودن نمودارهای مات–شاتکی حاصل شد، به‌عنوان فرکانس مناسب برای استخراج پتانسیل باند تخت (V_{fb}) و چگالی دهنده‌ها (N_D) انتخاب گردید.



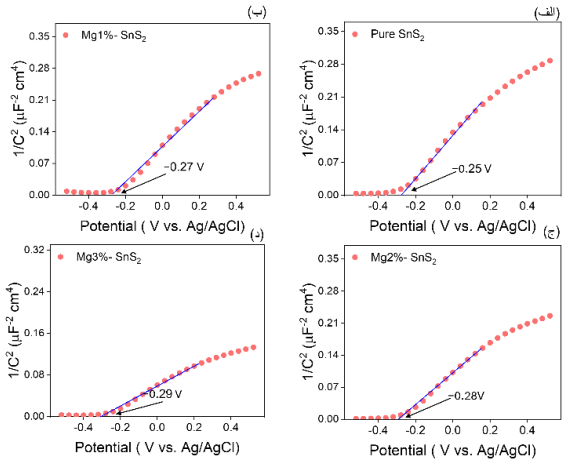
شکل۲: نتایج EIS نمونه‌های SnS_2 خالص و آلایش‌شده با منیزیم: (الف) نمودار بود–فاز و (ب) نمودار نایکوییست. کاهش شعاع نیم‌دایره پس از آلایش بیانگر کاهش مقاومت انتقال بار و بهبود فرآیند انتقال حامل‌ها است.

شکل ۳ (الف–د) نمودارهای مات–شاتکی مربوط به نمونه‌های SnS_2 خالص و آلایش‌شده با مقادیر مختلف منیزیم را نشان می‌دهد. شیب مثبت خطوط در تمامی نمونه‌ها بیانگر رفتار نیمه‌رسانای نوع n و غالب بودن الکترون‌ها به‌عنوان حامل‌های اکثریت است. از بخش خطی نمودارها، مقادیر پتانسیل باند تخت(V_{fb}) ، چگالی دهنده‌ها (N_D) و عرض ناحیه تهی (W) محاسبه شد که نتایج آن در جدول ۱ ارائه شده است.

بر اساس تحلیل نتایج بدست آمده با افزایش غلظت منیزیم، چگالی دهنده‌ها از $۱/۷\times۱۰^{۱۹}cm^{-3}$ درنمونه خالص به $۱/۹\times۱۰^{۱۹}$، $۲/۳\times۱۰^{۱۹}$و $۳/۹\times۱۰^{۱۹}\ cm^{-3}$ به ترتیب در نمونه‌های ۱و۲و۳ درصد عنصر آلایشی منیزیم افزایش می‌یابد. کاهش تدریجی شیب نمودارهای مات–شاتکی با این روند سازگار بوده و بیانگر افزایش

غلظت حامل‌های الکترونی در اثر آلایش منیزیم است. این رفتار را می‌توان به حضورMg در موقعیت‌های بین‌نشینی و نقش دهنده آن در ساختار SnS_2 نسبت داد[۲].

همزمان با افزایش N_D ، عرض ناحیه تهی از ۵۵/٦ نانومتر در نمونه خالص به ۵٤/۸، ۵۲/۱ و ٤۰/۱ نانومتر کاهش یافته است. کاهش عرض ناحیه تهی انتقال حامل‌ها را در ناحیه بار فضایی تسهیل کرده و می‌تواند جدایش و انتقال بار را در فصل مشترک نیمه‌رسانا–الکترولیت بهبود بخشد. همچنین پتانسیل باند تخت از۰/۲۷- ولت در نمونه خالص به ۰/۲۹-، ۰/۳۰- و ۰/۳۲- در نمونه‌های آلایش‌شده جابه‌جا شده است. این جابه‌جایی به سمت پتانسیل‌های منفی‌تر نشان‌دهنده نزدیک‌تر شدن تراز فرمی به باند رسانش و افزایش چگالی الکترون‌ها در ساختار است. تطابق نتایج حاصل از تحلیل مات–شاتکی و طیف‌سنجی امپدانس الکتروشیمیایی (EIS) نشان‌دهنده همبستگی میان پارامترهای الکترونیکی و پاسخ الکتروشیمیایی در نمونه‌های آلایش‌شده است. کاهش مقاومت انتقال بار (Rct) در حضور عنصر آلایشی Mg با افزایش چگالی دهنده‌ها (N_D) و غلظت حامل‌های آزاد ارتباط مستقیم دارد. بنابراین این تغییرات، انتقال بار در فصل مشترک نیمه‌رسانا–الکترولیت را افزایش داده و با تسهیل فرآیند انتقال الکترون، سینتیک جابه‌جایی حامل‌ها را بهبود می‌بخشد.



شکل۳: نمودار مات–شاتکی برای نانوورقه‌های SnS_2 در غلظت‌های مختلف عنصر آلایشی منیزیم(الف) صفر درصد ،(ب) ۱ درصد،(ج) ۲ درصد و (د) ۳ درصد

جدول۱: پارامترهای فیزیکی پتانسیل فلت‌بند (V_{fb})، ، چگالی حامل‌ها (N_D) و عرض ناحیه تخلیه (W) حاصل از تحلیل نمودارهای مات–شاتکی برای نمونه‌های SnS_2 خالص و آلایش شده با منیزیم در مقادیر ۱٪، ۲٪ و ۳٪ .

نمونه	V_{fb} (V)	N_D (cm^{-3})	W (nm)
Pure SnS_2	۰/۲۷-	۱/۷×۱۰^{۱۹}	۵۵/۶
Mg1%- SnS_2	۰/۲۹-	۱/۹×۱۰^{۱۹}	۵۴/۸
Mg2%- SnS_2	۰/۳۰-	۲/۳×۱۰^{۱۹}	۵۲/۱
Mg3%- SnS_2	۰/۳۲-	۳/۹×۱۰^{۱۹}	۴۰/۱

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، اثر آلایش منیزیم بر خواص الکترونیکی نانوورقه‌های SnS_2 با استفاده از تحلیل مات–شاتکی و طیف‌سنجی امپدانس الکتروشیمیایی بررسی شد. نتایج نشان داد که آلایش Mg ضمن حفظ رفتار نیمه‌رسانایی نوع n، موجب افزایش چگالی دهنده‌ها و تغییر پتانسیل باند تخت شده است که بیانگر اصلاح ویژگی‌های الکترونیکی ماده است. همچنین کاهش شعاع نیم‌دایره در نمودارهای نایکوییست نشان‌دهنده کاهش مقاومت انتقال بار و تسهیل انتقال حامل‌ها در فصل مشترک الکترود–الکترولیت می باشد. در مجموع، آلایش Mg با بهبود انتقال بار و افزایش غلظت حامل‌های آزاد، راهکاری مؤثر برای بهبود خواص الکترونیکی SnS_2 محسوب می‌شود که می‌تواند در زمینه‌های الکترونیکی و الکتروشیمیایی مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع‌ها

[1] A. Taufik, R. Saleh, and G. Seong, “Enhanced photocatalytic performance of SnS_2 under visible light irradiation: strategies and future perspectives,” *Nanoscale*, **vol. 16**, no. 20, pp. 9680–9709, 2024, doi: 10.1039/d4nr00706a.

[2] M. Setayeshmehr, Z. Torkashvand, H. Faraji, M. Haghighi, and K. Mirabbaszadeh, “Synergistic tuning of ionic and electronic transport in alkaline-earth-doped SnS_2 nanoflowers for high-performance supercapacitors,” *J. Power Sources*, **vol. 687**, no. April, p. 240496, 2026, doi: 10.1016/j.jpowsour.2026.240496.

[3] H. Zhang, B. Zhang, X. Wang, L. Zou, J. You, and S. Lin, “Effective charge separation in photoelectrochemical water splitting: a review from advanced evaluation methods to materials design,” *Sustain. Energy Fuels*, **vol. 8**, no. 11, pp. 2357–2382, 2024, doi: 10.1039/D4SE00390J.

[4] P. Xu, T. J. Milstein, and T. E. Mallouk, “Flat-Band Potentials of Molecularly Thin Metal Oxide Nanosheets,” *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **vol. 8**, no. 18, pp. 11539–11547, 2016, doi: 10.1021/acsami.6b02901.

[5] I.-H. Choi, J. Lee, Y. Choi, and J.-Y. Kim, “Characterization of photoelectrochemical energy devices by electrochemical impedance analysis: a mini review,” *Adv. Ind. Eng. Chem.*, **vol. 1**, no. 1, p. 34, 2025, doi: 10.1007/s44405-025-00036-7.

مطالعه تکامل بافت و مکانیزم گذار از زیرلایه در لایه‌نشانی الکتروشیمیایی نیکل روی مس

فراهانی ،صدف[1] ؛ قاسمی، جواد[2]
[1,2] دانشکده علوم دانشگاه اراک ، گروه فیزیک، اراک

چکیده

آلیاژها و پوشش‌های پایه‌ی نیکل به دلیل خواص مغناطیسی منحصربه‌فرد، مقاومت به خوردگی و سایش بالا، اهمیت ویژه‌ای در صنایع پیشرفته الکترونیکی و مغناطیسی دارند. از آنجا که خواص نهایی این لایه‌های نازک مستقیماً تحت تأثیر بافت کریستالی (کریستالوگرافی) آن‌ها قرار دارد، کنترل و درک مکانیزم تکامل بافت در حین لایه‌نشانی امری حیاتی است. در این پژوهش، لایه‌های نازک نیکل به روش الکتروپوشش (الکتروشیمیایی) بر روی زیرلایه مس در دو ضخامت مختلف رسوب‌دهی شدند. به‌منظور بررسی‌های ساختاری، تحلیل فازی و شناسایی پیک‌ها از پراش پرتو ایکس (XRD) و نرم‌افزار HighScore Plus (X'Pert)استفاده شد. سپس جهت‌گیری بافت ترجیحی و مؤلفه‌های آن با استفاده از تحلیل تابع توزیع جهت‌گیری (ODF) به‌دقت مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج نشان داد که در ضخامت کمتر، بافت لایه نازک نیکل شباهت بسیار زیادی به زیرلایه مس دارد؛ چرا که به دلیل اثر حجم عمده (Bulk) مس، اتم‌های نیکل در ابتدا تحت تأثیر شدید انرژی صفحات زیرلایه رشد می‌کنند. با این حال، با افزایش ضخامت، بافت لایه نیکل تمایل آشکاری به گذار و تغییر جهت‌گیری نشان داد، هرچند که اثرات پایداری نسبی بافت اولیه همچنان تا حدی حفظ گردید [5]. این یافته‌ها درک عمیق‌تری از مکانیزم رقابت بین انرژی‌های سطحی و کرنش پیوندی در سیستم‌های ناهمگن Ni/Cu ارائه می‌دهد.

واژه های کلیدی: *تکامل بافت، لایه‌نشانی الکتروشیمیایی، لایه نازک نیکل/مس، تابع توزیع جهت‌گیری(ODF) ، پراش پرتو ایکس*

Study of Texture Evolution and Substrate Transition Mechanism in Electrochemical Deposition of Nickel on Copper

Farahani, Sadaf[1]; Ghasemi, Javad[2]

[1,2] *Department of Science, University of Arak, Arak*

Abstract

Nickel-based alloys and coatings are of paramount importance in advanced electronic and magnetic industries due to their exceptional magnetic properties, wear, and corrosion resistance. Since the final performance of these thin films is directly dictated by their crystallographic texture, understanding the mechanisms of texture evolution during deposition is crucial. In this study, nickel thin films were electrochemically deposited onto copper substrates at two distinct thicknesses. Phase analysis, peak identification, and structural characterizations were conducted using X-ray diffraction (XRD) combined with HighScore Plus (X'Pert) software. Subsequently, the preferred crystallographic orientation and texture components were quantitatively analyzed via the Orientation Distribution Function (ODF). The results revealed that at the lower thickness, the texture of the nickel thin film closely mirrored that of the copper substrate. This behavior is attributed to the bulk effect of the copper substrate, where the initial growth of nickel atoms is strongly governed by template energy of the substrate. However, with increasing film thickness, the nickel texture exhibited a clear transition and a tendency to deviate from the initial orientation, although a minor degree of the inherited texture stability persisted[5]. These findings provide profound insights into the competitive mechanisms between surface energy and misfit strain energy in heterogeneous Ni/Cu systems.

***Keywords**: Texture evolution, Electrochemical deposition, Ni/Cu thin films, Orientation Distribution Function (ODF), X-ray diffraction (XRD)*

مقدمه

آلیاژها و پوشش‌های پایه نیکل به دلیل ترکیب بی‌نظیری از خواص مکانیکی، فیزیکی و شیمیایی، جایگاه ویژه‌ای در صنایع پیشرفته دارند. این سیستم‌های آلیاژی علاوه بر دارا بودن استحکام ومقاومت فوق‌العاده در کاربردهای ساختاری، رفتارهای سطحی ازجمله مقاومت عالی در برابر سایش، سختی بالا و مقاومت به خوردگی در محیطهای مهاجم از خود نشان می‌دهند. افزون بر این، لایه‌های نازک پایه نیکل به دلیل رسانایی الکتریکی و مغناطش مطلوب نقشی حیاتی در پایداری اتصالات الکترونیکی ایفا می‌کنند[5-1]. با توجه به چشم انداز کاربردی این فلز به طور گسترده تاثیر بافت کریستالی نهایی بر روی خواص پایه به عنوان یک مولفه ی مهم برسی می شود که همچنان تحت تاثیرتاریخچه ی فرآیند ساخت ورشد بلور در حین تولید می باشد[1].

درمطالعات پیشین بدست آمد که در آلیاژهای مس، بافت حین تغییر شکل گرم به‌شدت تحت تأثیر رسوبات نانومقیاس و شرایط فرایند است، و این موضوع مستقیماً روی خواص نهایی مانند استحکام و رسانایی اثر می‌گذارد[6,2].چگالی جریان رسوب‌دهی عامل تعیین‌کننده در شکل‌گیری مورفولوژی سطح است.این مورفولوژی سپس باعث می‌شود:سطح آبگریزتر شود ومقاومت به خوردگی افزایش یابد [5] مطالعه ی دیگرنشان می‌دهد که تکامل بافت در این آلیاژ به شدت تحت تأثیر حضور رسوبات نانومقیاس است که با قفل کردن مرزدانه‌ها، از رشد بیش از حد دانه‌ها جلوگیری کرده و باعث حفظ پایداری ساختار در حین عملیات حرارتی میشود[1]. در نمونه‌های با دانه بندی درشت، به دلیل بزرگ بودن دانه‌های اولیه، ساختار پس از تغییر شکل پراکنده‌تر و خردشده‌تر شده و این موضوع الگوی بافت را تغییر داده است. همچنین اشاره شده که در فلزات مانند Niو Cu، معمولاً copper-type textureشامل مؤلفه‌های Cu، S و Brass مشاهده می‌شود[3].

چنانچه در بیشتر مطالعات قبلی، فرآیند های ثانویه یا انرژی های خارجی به عنوان عامل تغییر بافت شناخته شده اند در فرآیند الکترونباشت، آرایش بلوری صرفاً تحت تأثیر پتانسیل الکتروشیمیایی و رقابت‌های ذاتی بین دانه‌ها شکل می‌گیرد. با وجود اهمیت این موضوع، تکامل خودبه‌خودی مؤلفه‌های بافت در مراحل اولیه رشد لایه، به‌ویژه در بازه بحرانی ۷۰۰ تا ۱۰۰۰ نانومتر، هنوز به‌طور جامع تحلیل نشده است.

در این پژوهش آنالیز کمی ODF برای روشن‌سازی مسیر تحول این مؤلفه‌ها در غیاب محرک‌های خارجی به کار گرفته شد ؛ رویکردی که امکان شناسایی «ترجیحات ذاتی» اتم‌های نیکل در تشکیل مؤلفه‌هایی مانند S و Copper را در یک سیستم کاملاً ترمودینامیکی فراهم می‌سازد و نحوه گذار لایه از مرحله اولیه به سمت یک بافت ستونی پایدار را آشکار می‌کند.

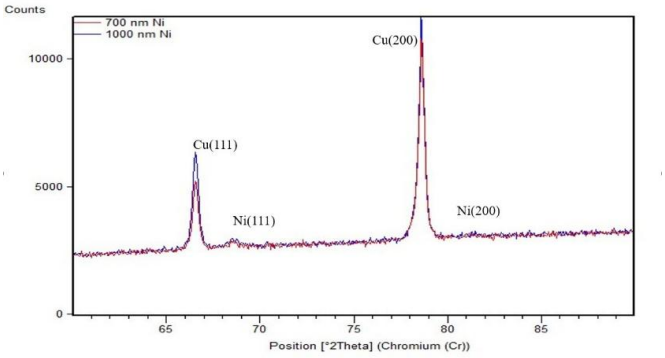
این انتخاب از یک سو شرایطی را فراهم می‌کند که داده‌های بافت برای بازسازی ODF دارای پایداری و قابلیت اتکای آماری کافی باشند و از سوی دیگر، بازه‌ای را پوشش می‌دهد که در آن گذار ریزساختاری از مراحل اولیه تشکیل لایه به سمت رشد رقابتی و شکل‌گیری دانه‌های ستونی (columnar growth) رخ می‌دهد. بنابراین، مقایسه ODF در این دو ضخامت امکان تبیین ارتباط میان مکانیسم رشد پوشش و جهت‌گیری‌های ترجیحی را در یک بازه گذار معنادار فراهم می‌سازد.

مراحل و روش کار

برای الکترورسوب‌دهی نیکل روی زیرلایه مس، حمام سولفات نیکل شامل 10 گرم $NiSO_4 \cdot 6H_2O$، 3 گرم H_3BO_3 و 20 میلی‌لیتر آب DI با pH حدود 3–3.5 تهیه شد. فرایند در سل سه‌الکترونده (مس به‌عنوان کاتد، SCE مرجع و پلاتین آند) با فاصله 5 سانتی‌متر بین آند و کاتد انجام شد. زیرلایه‌های مسی (ضخامت 0.3 میلی‌متر، قطر 19 میلی‌متر) پس از پولیش با سنباده‌های #800 تا #2000 و شست‌وشو، به‌مدت 10 ثانیه در محلول‌های 25% و 10% اسید فسفریک و 10% اسید سولفوریک غوطه‌ور شدند.

رسوب‌دهی با دستگاه SAMA500 در مد CHC و در ولتاژ 1.4 V− انجام شد و دو ضخامت 700 و 1000 نانومتر حاصل گردید. ساختار و بافت پوشش‌ها با آزمون XRD (دستگاه Panalytical X'Pert، لوله Cr، 35 kV و 45 mA) بررسی شد. نگاره‌های قطبی صفحات (111) و (200) برای بازسازی ODF تحلیل و داده‌ها با نرم‌افزارهای X'Pert، HUALONG-deformation و TexTools مقایسه شدند تا تکامل بافت در دو ضخامت ارزیابی شود.

نتایج

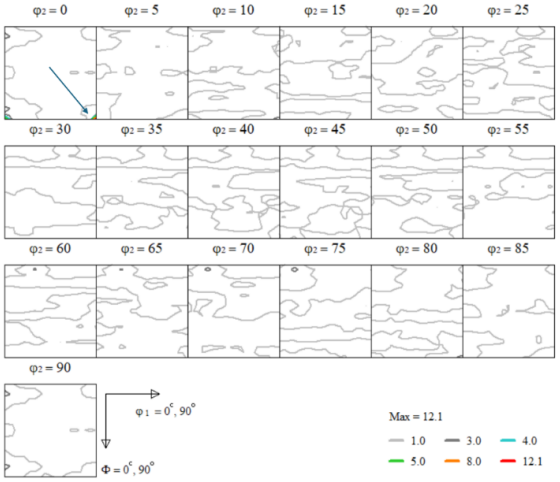


شکل 1.الگوی پراش پرتو X پوشش‌های نیکل الکترورسوب‌دادهشده روی مس در ضخامت‌های 700 و 1000 نانومتر و شناسایی بازتاب‌های Cu,Ni

مقایسه‌ی کیفی الگوهای دو ضخامت (ضخامت 700نانومتربا رنگ قرمز و 1000نانومتر با رنگ آبی)نشان می‌دهد موقعیت پیک‌ها در هر دو نمونه مشابه است که حاکی از عدم تشکیل فاز ثانویه‌ی قابل تشخیص در بازه‌ی اندازه‌گیری و نیز یکسان بودن فاز غالب است. همچنین، تغییرات نسبی شدت بازتاب‌های نیکل با افزایش ضخامت می‌تواند به افزایش سهم حجمی پوشش نسبت به زیرلایه ویا تغییر در جهت‌گیری ترجیحی (بافت) مرتبط باشد؛ موضوعی که در ادامه با تحلیل نگاره‌های قطبی و بازسازی ODF به‌صورت کمی بررسی می‌شود.

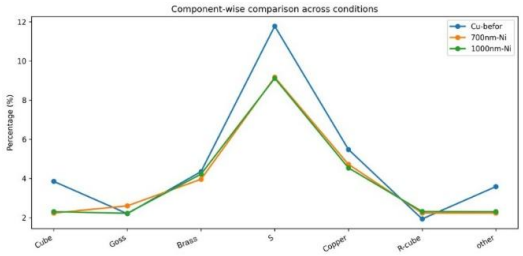
در شکل 2، کل ODF زیرلایه مس در برش‌های متوالی φ_2 از°0 تا °90 نشان داده شده است. این ODF بر مبنای زوایای اویلری φ_1، Φ و φ_2 و مطابق قرارداد Bunge بازسازی شده و به‌صورت مجموعه‌ای از بخش های برش خورده ی دوبعدی در صفحه $\Phi-\varphi_1$ارائه گردیده است. مقدار بیشینه شدت در این نقشه برابر12.1 است که بیانگر وجود بافت نسبتاً قوی در زیرلایه می‌باشد. توزیع نواحی پُرشدت در برش های مختلف φ_2 نشان می‌دهد که زیرلایه مس دارای آرایش جهت‌گیری منظم بوده و این ساختار می‌تواند به‌عنوان بستر مؤثر در هدایت تکامل بافت پوشش نیکل عمل کند. در شکل 3، برش‌های ODF برای سه نمونه شامل زیرلایه مس، پوشش نیکل با ضخامت 700 نانومتر و پوشش نیکل با ضخامت 1000 نانومتر ارائه شده‌اند. در این شکل، برش‌های °φ_2=0، °45 و °90 به‌منظور مقایسه الگوی توزیع جهت‌گیری‌ها در نمونه‌های مختلف انتخاب شده‌اند.

بررسی برش‌های ODF نشان می‌دهد که الگوی توزیع جهت‌گیری‌ها در پوشش‌های نیکل، به‌ویژه در برخی نواحی از برش‌های φ_2 ، با زیرلایه مس هم‌پوشانی نسبی دارد. این مشاهده بیانگر آن است که در طی رشد الکترولیتی، جهت‌گیری‌های بلوری زیرلایه می‌توانند بر نحوه آرایش بلورک‌های نیکل در مراحل اولیه رسوب‌گذاری اثرگذار باشند. در نمونه 700 نانومتر، الگوی بافتی نسبتاً پراکنده‌تر و کمتر تثبیت‌شده به نظر می‌رسد، در حالی‌که در نمونه 1000 نانومتر، برخی نواحی ترجیحی با نظم بیشتری ظاهر شده‌اند و شباهت نسبی بیشتری با الگوی زیرلایه نشان می‌دهند. این موضوع را می‌توان نشانه‌ای از تداوم رشد جهت‌دار و تقویت انتخاب بلوری در حین افزایش ضخامت پوشش دانست.



شکل 2.نقشه کامل ODF زیرلایه مس در برش‌های φ_2 از°0 تا °90

کسر حجمی مؤلفه‌های بافت با استفاده از انتگرال‌گیری از شدت تابع توزیع جهت‌گیری (ODF) در یک محدوده انحراف °15 از زوایای اویلر ایده‌آل استخراج شده است. نرم‌افزار HUALONG-deformationاز روش استاندارد گسسته‌سازی برای محاسبه سطح زیر پیک‌های ODF استفاده می‌کند واین شدت های پراکندگی در مولفه های شاخص به صورت خلاصه در جدول1 آمده است. روند تغییرات با توجه به جدول 1،نشان می‌دهد که مولفه ی S در هر سه حالت بیشترین سهم را دارد و با افزایش ضخامت پوشش، تغییرات سهم مولفه ها نسبت به زیرلایه محدود بوده و بیانگر اثرپذیری بافت پوشش از جهت‌گیری‌های زیرلایه است.



شکل 3. مقایسه نموداری درصد مولفه‌های بافت برای زیرلایه مس قبل از رسوب‌دهی و پوشش‌های نیکل با ضخامت‌های 700 و 1000 نانومتر.

جدول 1. درصد سهم مولفه های اصلی بافت برای زیرلایه مس قبل از رسوب‌دهی (Cu-before)و پوشش‌های نیکل با ضخامت‌های 700 و 1000 نانومتر(بر حسب درصد شدت پراکندگی)

Component	Cu-before (%)	700nm-Ni (%)	1000nm-Ni (%)
Cube {001}<100>	3.85 ± 0.12	2.23 ± 0.08	2.30 ± 0.09
Goss {011}<100>	2.20 ± 0.10	2.60 ± 0.11	2.22 ± 0.08
Brass {110}<112>	4.35 ± 0.15	3.96 ± 0.14	4.22 ± 0.15
S {123}<634>	11.78 ± 0.22	9.17 ± 0.19	9.12 ± 0.18
Copper {112}<111>	5.48 ± 0.18	4.72 ± 0.16	4.54 ± 0.16
R-cube {001}<110>	1.93 ± 0.09	2.23 ± 0.10	2.31 ± 0.11
Other	3.58 ± 0.11	2.23 ± 0.09	2.30 ± 0.10
Random Texture	66.83	72.86	72.99

^ The volume fractions were calculated by integration of ODF intensity with a 15° deviation angle.
* Error bars represent the standard deviation of multiple ODF fit iterations.

تحلیل نتایج

1) تأمین انرژی رسوب‌دهی و نقش آن در حرکت‌های اتمی

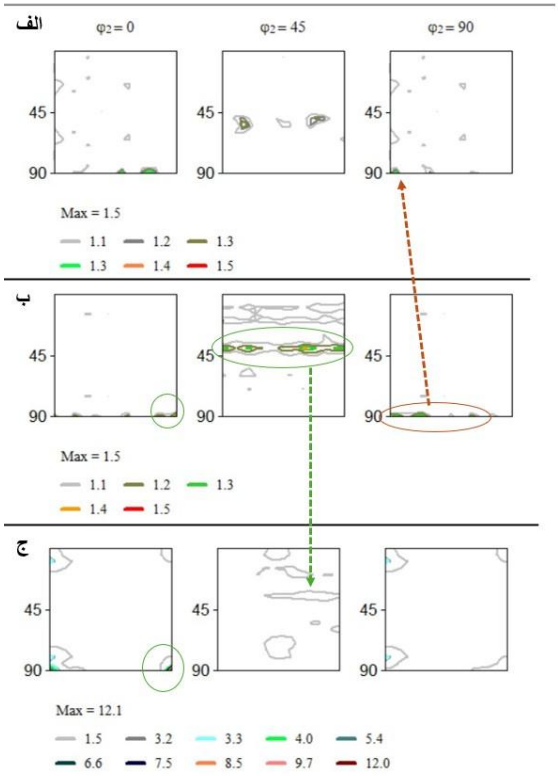
در رسوب‌دهی الکتروشیمیایی نیکل روی مس، یون‌ها یا اتم‌های نیکل هنگام رسیدن به سطح کاتد انرژی لازم برای جابه‌جایی‌های سطحی و یافتن مکان‌های پایدارتر را فراهم می‌کنند. در مراحل اولیه ضخامت، هسته‌زایی و رشد اولیه تا حدی تحت تأثیر انرژی و هندسه اتمی زیرلایه انجام می‌شود [11]. با این حال، داده‌های شکل‌های 3 و 4 و جدول 1 نشان می‌دهد که پس از تشکیل پوشش، سیستم سریعاً به یک الگوی بافتی نسبتاً پایدار می‌رسد؛ موضوعی که از تفاوت رفتار مولفه‌ها بین حالت زیرلایه (Cu-before) و پوشش نیکل (Ni) قابل مشاهده است.

2) گذار از بافت زیرلایه به بافت لایه و رشد رقابتی

در نزدیکی سطح مشترک، زیرلایه مس در تعیین جهت‌گیری هسته‌های اولیه مؤثر است؛ اما با افزایش ضخامت، مکانیسم رشد رقابتی فعال می‌شود و دانه‌هایی با جهت‌گیری مناسب‌تر یا انرژی سطحی کمتر سهم بیشتری از پوشش می‌گیرند [3,7]. این روند با کاهش مولفه **S** از 11.78% در Cu-before به 9.17% در Ni700 و 9.12% در Ni1000 و همچنین کاهش **Copper** از 5.48% به 4.72% و 4.54% نشان داده می‌شود. این کاهش بیانگر آن است که با فاصله گرفتن از مرز مشترک، پوشش نیکل الزاماً از بافت زیرلایه پیروی نمی‌کند. در مقابل، برخی مؤلفه‌ها مانند **Cube** و **R-cube** نزدیک به 2.3% باقی می‌مانند که نشان‌دهنده رسیدن بخشی از بافت پوشش به تعادل نسبی است.

مطالعات نشان می‌دهند بافت بلوری در مواد مهندسی معمولاً از طریق انجماد و رشد اپیتکسیال، تغییر شکل مکانیکی، استحاله فازی و TRIP، یا اثر انرژی نقص چیدمان (SFE)

شـــکل می‌گیرد یا تغییر می‌کند [6,8–14]. با این حال، در این پژوهش به دلیل تمرکز بر مراحل اولیه رشد لایه و نبود انرژی ثانویه، نتیجه‌گیری می‌شود که حرکت یون‌ها با انرژی تعیین‌شده توســـط حمام الکترولیت می‌تواند در ابتدا تحت تأثیر زیرلایه باشـــد و به شـــکل‌گیری بافت لایه نازک در راســـتای آن منجر شـــود، هرچند با افزایش ضـــخامت لایه این شـــرایط ممکن اســـت تغییر کند.



شـکل 4. مقایسـه بخش‌های φ_2=0°، 45° و 90° تابع توزیع جهت‌گیری (ODF)در نمونه‌های نیکل با ضـــخامت‌های مختلف(الف)100نانومتر،(ب)700نانومتر و(ج) زیرلایه مس.

نتیجه گیری

پوشش‌های نیکل به روش الکتروشیمیایی روی مس با ساختارFCC تشکیل شدند. نتایج ODF و درصد مولفه‌ها نشان دادند در مراحل اولیه، بافت تا حدی از زیرلایه اثر می‌گیرد، اما با افزایش ضخامت، سهم مؤلفه‌های شاخص بافت مس مانند S و Copper کاهش یافته و رفتار بافتی بیشتر تحت کنترل رشد خودِ پوشش قرار می‌گیرد (رشد رقابتی). شباهت نتایج در 700 و1000 نانومتر بیانگر رسیدن پوشش به یک حالت بافتی نسبتاً پایدار یا نزدیک به اشباع در شرایط این آزمایش است.

مرجع‌ها

[1] Hu, Y., Yang, L., Shi, C., & Tang, W. (2013). Microstructural evolution and phase transformation kinetics of pulse-electroplated Ni-Cu-P alloy film during annealing. *Materials Chemistry and Physics*, *141*(2–3), 944–950.

[2] Geng, Y., Ban, Y., Wang, B., Li, X., Song, K., Zhang, Y., Jia, Y., Tian, B., Liu, Y., & Volinsky, A. A. (2020). A review of microstructure and texture evolution with nanoscale precipitates for copper alloys. In *Journal of Materials Research and Technology* (Vol. 9, Issue 5, pp. 11918–11934). Elsevier Editora Ltda.

[3] Bhattacharjee, P. P., Joshi, M., Chaudhary, V. P., & Zaid, M. (2013). The effect of starting grain size on the evolution of microstructure and texture in nickel during processing by cross-rolling. *Materials Characterization*, *76*, 21–27.

[4] Maharana, H. S., Bishoyi, B., & Basu, A. (2019). Current density dependent microstructure and texture evolution and related effects on properties of electrodeposited Ni-Al coating. *Journal of Alloys and Compounds*, *787*, 483–494. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.02.096

[5] Esmailzadeh, S., Khorsand, S., Raeissi, K., & Ashrafizadeh, F. (2015). Microstructural evolution and corrosion resistance of super-hydrophobic electrodeposited nickel films. *Surface and Coatings Technology*, *283*, 337–346.

[6] Zhang, F., Peng, C., Zhu, T., Xie, X., Zhou, L., Li, Y., Chao, Q., & Fan, G. (2026). Tailoring single-crystal-like textures in a non-weldable Ni-based superalloy by controlling overlap behavior in laser powder bed fusion. *Journal of Materials Processing Technology*, *347*.3

[7] Tian, H., Wang, Y., Wang, P., Liang, Y. R., Ma, L., Meng, Y. C., & Suo, H. L. (2015). Evolution of Cube Texture in Cu-45at.%Ni Alloy Substrates for YBCO Coated Conductors. *Applied Mechanics and Materials*, *778*, 105–109.

[8] Parent, P. N., Paris, J. Y., Alexis, J., & Boher, C. (2025). Role of crystallographic and morphological textures on wear resistance of an additive-manufactured Ni-based superalloy. *Wear*, *570*.

[9] Wójcik, A., Chulist, R., Szewczyk, A., Morończyk, B., Żrodowski, Ł., Wróblewski, R., Kowalczyk, M., Kolano-Burian, A., Zackiewicz, P., Schell, N., & Maziarz, W. (2024). Microstructure and texture control of Ni-Mn-Ga magnetic shape memory alloys manufactured by laser powder bed fusion. *Additive Manufacturing*, *86*.

[10] Zhang, F., Zhou, L., Xie, X., Zhang, Z., Chao, Q., & Fan, G. (2024). Crack inhibition and crystallographic texture control in an additively manufactured IN738LC Ni-based superalloy. *Journal of Materials Research and Technology*, *33*, 652–666.

[11] Daram, P., Briffod, F., Kitashima, T., Kusano, M., & Watanabe, M. (2026). Effects of substrate preheating and processing parameters on the crystallographic texture of Hastelloy X on SX-like Ni fabricated by L-PBF process with flat-top laser beam. *Journal of Materials Research and Technology*, *41*, 1974–1985.

[12] Matallana Guerrero, J. D., Sethi, S. S., Kundu, T. K., Das, S., & Das, K. (2026). Theoretical and experimental study of electroplated γ-Ni_2Zn_{11} coatings from a non-aqueous electrolyte: effect of additives on the coating's microstructure, texture characteristics and mechanical properties. *Surface and Coatings Technology*, *522*.

[13] Min, K. M., Shim, S. H., Lee, S. J., Choi, E. A., Han, S. Z., Bong, H. J., Lee, M. G., Ahn, J. H., & Han, H. N. (2025). Particle-assisted texture engineering for achieving exceptional bendability of Cu–Ni–Si alloy. *International Journal of Mechanical Sciences*, *305*.

[14] Ghosh, D., Kumar, S., Jayabalan, B., Mukherjee, S., & Mandal, S. (2025). Deformation behavior and the extent of crack propagation in a hot-rolled Ni added multiphase lightweight steel: A microstructure and micro-texture perspective. *Materials Science and Engineering: A*, *948*.

طراحی و ساخت ممریستور بر پایه مواد آلی (پلیمری)

فهندژ، مارال[۱]؛ عباس زاده، داود[۱]

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

چکیده

ممریستورها به‌عنوان عناصر الکترونیکی غیرفعال با قابلیت حافظه، امکان تنظیم مقاومت الکتریکی را بر اساس تاریخچه جریان عبوری فراهم می‌کنند. این ویژگی منحصربه‌فرد، آن‌ها را به گزینه‌ای مناسب برای حافظه‌های غیرفرار، سامانه‌های محاسبات عصبی و مدارهای منطقی تطبیقی تبدیل کرده است. در این پژوهش، یک ممریستور با ساختار دولایه‌ای پلیمری متشکل از پلی (۳،٤-اتیلن‌دی‌اکسی‌تیوفن):پلی (استایرن‌سولفونات) (PEDOT:PSS) و پلی‌وینیل کاربازول (PVK) طراحی و ساخته شده است. انتخاب این دو ماده به دلیل ویژگی‌هایی نظیر هدایت مناسب حفره‌ای، قابلیت تشکیل فیلم‌های یکنواخت، پایداری شیمیایی و امکان تنظیم خواص الکترونیکی در لایه‌های نازک صورت گرفته است. نتایج اندازه‌گیری‌های الکتریکی نشان می‌دهند که این ساختار از پایداری عملکردی مناسب، رفتار سوییچینگ مقاومتی تکرارپذیر و قابلیت استفاده در حافظه‌های آلی برخوردار است. این یافته‌ها می‌توانند مسیری امیدبخش برای توسعه نسل جدیدی از دستگاه‌های حافظه‌ای انعطاف‌پذیر فراهم سازند.

کلیدواژه‌ها: *ممریستور، سوئیچینگ مقاومتی، مواد آلی، ممریستور پلیمری، ساختار دولایه*

Design and fabrication of a memristor based on organic (polymeric) materials

Fahandezh, Maral [1]; Abbaszadeh, Davood[1]

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

Abstract

Memristors, as passive electronic elements with memory capabilities, allow the adjustment of electrical resistance based on the history of the passing current. This unique feature makes them suitable for non-volatile memories, neuromorphic systems, and adaptive logic circuits. In this research, a memristor with a bilayer sulfonate) (PEDOT:PSS) and polymer structure composed of Poly(3,4-ethylenedioxythiophene):Poly(styrene carbazole (PVK) has been designed and fabricated. The selection of these two materials is based on vinyl Poly their properties such as suitable hole conductivity, the ability to form uniform films, chemical stability, and the possibility of tuning electronic properties in thin layers. Electrical measurements indicate that this structure exhibits good functional stability, repeatable resistive switching behavior, and suitability for use in organic memory devices. These findings could pave the way for the development of a new generation of flexible memory devices.

***Keywords**: Memristor, resistive switching, organic materials, polymeric memristor, bilayer structure.*
PACS No.85

مقدمه

ممریستور[۱] به‌عنوان چهارمین عنصر اساسی مدارهای الکتریکی، در کنار مقاومت، خازن و سلف، برای اولین بار در سال ۱۹۷۱ توسط لئون چوا[۲] به‌صورت نظری معرفی شد[1]. این عنصر الکترونیکی رابطه‌ای مستقیم بین بار الکتریکی و شار مغناطیسی برقرار می‌کند و رفتار آن را می‌توان به‌صورت یک مقاومت متغیر وابسته به تاریخچه جریان و ولتاژ اعمالی توصیف کرد؛ به‌عبارت دیگر، ممریستور دارای حافظه داخلی است که امکان ذخیره و بازیابی

[1] Memristor

[2] Leon Chua

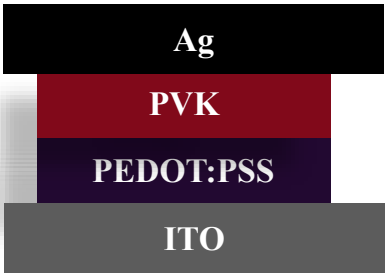
اطلاعات را بدون نیاز به انرژی خارجی فراهم می‌کند. این ویژگی منحصربه‌فرد، ممریستورها را به گزینه‌ای مناسب برای حافظه‌های غیر فرار، مدارهای محاسبات عصبی و سیستم‌های منطقی قابل تطبیق تبدیل کرده است[2].

ممریستور با سوئیچینگ بین دو حالت مقاومت بالا (OFF) و پایین (ON) تحت تأثیر ولتاژ آستانه عمل می‌کند. این تغییر وضعیت وابسته به فرآیندهای لایه فعال، امکان ذخیره‌سازی داده‌ها را به‌صورت یک حافظه غیرفرار فراهم می‌سازد[3].

در سال‌های اخیر، ممریستورهای مبتنی بر مواد آلی به‌عنوان گزینه‌ای نوظهور و امیدوارکننده در حوزه الکترونیک انعطاف‌پذیر مطرح شده‌اند. این دسته از ممریستورها به‌دلیل ویژگی‌هایی همچون فرآیند ساخت ساده و کم‌هزینه، امکان تولید در دمای پایین، سازگاری بالا با بسترهای نرم و قابل انعطاف و قابلیت ادغام آسان در فناوری‌های الکترونیکی نوین، از توجه قابل توجهی در میان پژوهشگران برخوردار شده‌اند[4].

استفاده از ترکیب‌های PEDOT:PSS و PVK به‌عنوان یک راهکار نویدبخش مطرح شده است. PVK (پلی‌وینیل‌کاربازول) به دلیل خواص الکترونیکی برجسته‌ای چون هدایت حفره‌ای خوب، پایداری شیمیایی بالا و قابلیت تشکیل لایه‌های نازک یکنواخت، به عنوان یک ماده مناسب در ممریستورها شناخته شده است. این ویژگی‌ها امکان مهندسی دقیق لایه‌های نازک و بهبود پایداری عملکرد حافظه‌ای را فراهم می‌آورد[5].

در این تحقیق، یک ممریستور دولایه با ساختار ساده و مبتنی بر مواد پلیمری مطابق شکل ۱ طراحی و ساخته شد. ساختار دستگاه شامل یک لایه زیرین از شیشه پوشش داده‌شده با ایندیم‌تاین اکسید (ITO) به‌عنوان الکترود پایینی و لایه نازکی از نقره (Ag) به‌عنوان الکترود بالایی است. میان این دو الکترود، دو لایه‌ی مجزا از مواد آلی به‌کار گرفته شده است: ابتدا لایه‌ای از PEDOT:PSS و سپس لایه‌ای از PVK به‌صورت متوالی و جداگانه بر روی بستر ITO لایه‌نشانی شدند.



شکل ۱:طرح شماتیک ممریستور ساخته شده ITO/PEDOT:PSS/PVK/Ag

بخش تجربی

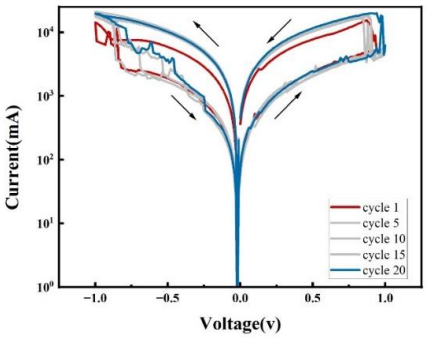
در این آزمایش ابتدا، ۱۳۰ میلی‌گرم ازپودر ماده PEDOT:PSS در ۱۰ میلی‌لیتر آب دیونیزه حل گردید. سپس، محلول به‌دست‌آمده بر روی سطح ITO به روش لایه نشانی چرخه ای لایه‌نشانی شده و در کوره به مدت ۱۰ دقیقه در دمای ۱۴۰ درجه سانتیگراد پخت گردید. در مرحله بعد، PVK در سه غلظت ۵، ۱۰ و ۲۰ میلی‌گرم بر میلی‌لیتر در کلروبنزن حل شد. هر محلول پس از همزدن مغناطیسی به مدت ۲۰ دقیقه و فیلتراسیون با فیلتر ۰/۴۵ میکرون، با روش لایه‌نشانی چرخشی[3] روی لایه PEDOT:PSS اعمال شد. نمونه‌ها سپس در دمای ۱۵۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۱۵ دقیقه در آون قرار گرفتند تا حلال تبخیر و لایه تثبیت گردد. الکترود Ag به ضخامت ۸۰ نانومتر با روش رسوب‌دهی بخار فیزیکی[4] (PVD) روی ساختار دولایه اعمال گردید. در حین فرآیند، شرایط خلأ و نرخ رسوب‌دهی به‌دقت کنترل شد تا لایه‌ای یکنواخت و با چسبندگی مطلوب حاصل شود.

نتایج و تحلیل

منحنی‌های جریان–ولتاژ نمونه‌های ساخته شده از محلول PVK با غلظت‌های ۵، ۱۰ و ۲۰ میلی‌گرم بر میلی‌لیتر اندازه‌گیری شد. بررسی مشخصه جریان–ولتاژ نمونه $5\ \frac{mg}{ml}$ (شکل ۲) نشان‌دهنده شکل‌گیری رفتار حافظه مقاومتی پس از اعمال چرخه‌ها است. با این حال، به علت ضخامت ناکافی لایه و چگالی پایین تله‌های بار، این نمونه با حلقه هیسترزیس محدود و نوسانات عملکردی همراه است.

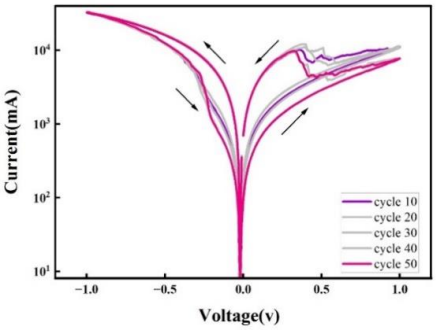
[3] Spin Coating

[4] Physical Vapor Deposition

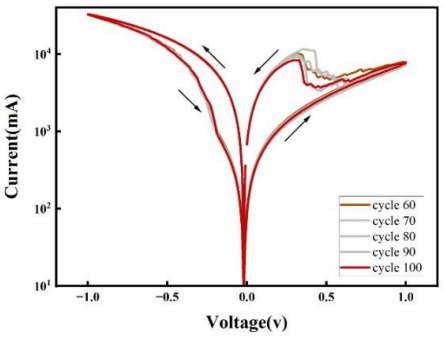


شکل ۲: منحنی جریان–ولتاژ ممریستور با غلظت PVK برابر $\frac{mg}{ml}$ ۵

شکل‌های ۳ و ٤ مشخصه جریان–ولتاژ نمونه PVK با غلظت $\frac{mg}{ml}$ ۱۰ را در ۵۰ سیکل اول و دوم نشان می‌دهند. با افزایش چرخه‌ها، رفتار حافظه مقاومتی پایدارتر شده و اختلاف مشخصی بین حالت‌های ON و OFF ایجاد می‌شود که ناشی از پر شدن تدریجی تله‌های بار و تثبیت مسیرهای رسانش در لایه PVK است.

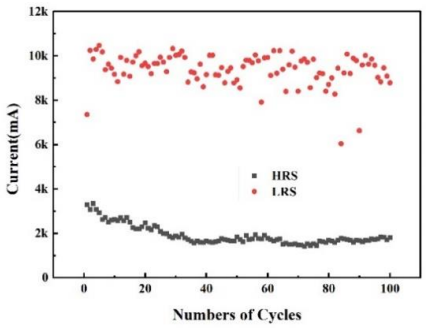


شکل ۳: منحنی جریان–ولتاژ ممریستور با غلظت PVK برابر $\frac{mg}{ml}$ ۱۰ (۵۰ سیکل اول)



شکل ٤: منحنی جریان–ولتاژ ممریستور با غلظت PVK برابر $\frac{mg}{ml}$ ۱۰ (۵۰ سیکل دوم)

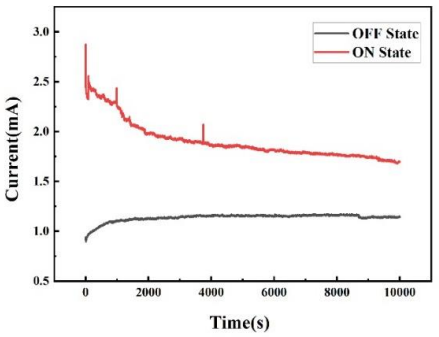
به‌منظور ارزیابی دوام چرخه ای[5]، آزمون مربوطه برای نمونه PVK با غلظت $\frac{mg}{ml}$ ۱۰ در ۱۰۰ سیکل سوئیچینگ متوالی انجام شد. همان‌طور که در شکل ۵ مشاهده می‌شود، جریان در حالت‌های مقاومت بالا[6] (HRS) و مقاومت پایین[7] (LRS) طی تمام چرخه‌ها تقریباً ثابت باقی مانده و تغییر محسوسی ندارد. این نتایج بیانگر پایداری مناسب ساختار و تکرارپذیری قابل‌اعتماد سوئیچینگ است.



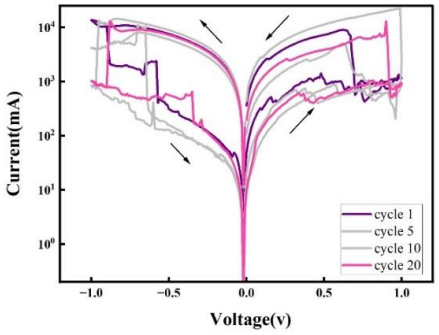
شکل ۵: منحنی endurance نمونه‌های در طی ۱۰۰ سیکل

آزمون retention برای نمونه PVK با غلظت $\frac{mg}{ml}$ ۱۰ در مدت ۱۰۰۰۰ ثانیه انجام شد. همان‌طور که در شکل ٦ دیده می‌شود، هر دو حالت مقاومتی HRS و LRS در این مدت پایدار باقی ماندند و فاصله مشخص بین آن‌ها حفظ شد که نشان‌دهنده قابلیت نگه‌داری بلندمدت اطلاعات در این ساختار است.

[5] Endurance
[6] High Resistance State
[7] Low Resistance State



شکل ٦: منحنی retention نمونه ها در طی ۱۰۰۰۰ ثانیه



شکل ۷: منحنی جریان–ولتاژ ممریستور با غلظت PVK برابر $۲۰\frac{mg}{ml}$

شکل ۷ منحنی جریان–ولتاژ نمونه PVK با غلظت $۲۰\frac{mg}{ml}$ را نشان می‌دهد. در این غلظت، پنجره هیسترزیس بزرگ‌تر شده، اما نوسانات بیشتر دیده می‌شود. این رفتار نمونه می‌تواند به دلیل بالا بودن ضخامت و نیز ایجاد حفره‌ها و نقص‌ها در پیکره لایه نازک PVK هنگام خشک شدن نمونه باشد. بنابراین برای داشتن یک ممریستور با عملکرد مناسب و تکرار پذیر نیاز به بهینه سازی ضخامت لایه فعال هست که دراین آزمایش ضخامت لایه ساخته شده از محلول ۵ میلی گرم حدود ۱۰ نانومتر از محلول ۱۰ میلی گرم حدود ۲۰ تا ۳۰ نانومتر و از محلول ۲۰ میلی گرم بر لیتر حدود ۵۰ نانومتر می‌باشد.

اغلب در موادی که نقره به عنوان الکترود بالا استفاده می‌شود، مکانیسم تشکیل حافظه فیلامنتری است. یعنی یون های نقره در داخل ماده با اعمال ولتاژ حرکت کرده و فیلامان تشکیل می‌دهد و رسانش داخل ماده را مدوله می‌کند. ولی در اینجا ما علاوه بر نقش فیلامنتری، نقش تله فصل مشترک و تونل زنی را داریم که باعث بهبود عملکرد نمونه ها می‌شود.

نتیجه گیری

بررسی های الکتریکی نشان داد که تغییر غلظت PVK تأثیر مستقیم بر تراکم تله‌ها، میزان تشکیل و شکستن رشته های رسانا و در نتیجه پایداری سوئیچینگ دارد. مقایسه سه نمونه نشان داد که نمونه با غلظت $۵\frac{mg}{ml}$ حلقه هیسترزیس کوچک و همراه با نوسانات قابل‌توجه داشت. نمونه با غلظت $۲۰\frac{mg}{ml}$ پنجره هیسترزیس بزرگ‌تری نشان داد اما پایداری سیکلی آن کاهش یافت. نمونه با غلظت $۱۰\frac{mg}{ml}$ بهترین عملکرد را از نظر وضوح حلقه هیسترزیس، پایداری و تکرارپذیری ارائه داد. همینطور قابل ذکر است که در کنار مکانیزم فیلامنتری مکانیزم تله بار در فصل مشترک نیز نقش بازی می‌کند.

سپاسگزاری

با نهایت قدردانی، از خانواده محترم غضنفریان، بابت فراهم‌سازی شرایط آزمایشگاهی در گروه مواد الکترونیک که نقش مهمی در پیشبرد این پژوهش داشت، صمیمانه تشکر می‌کنیم.

مرجع‌ها

(1) Chua, L. Memristor-The Missing Circuit Element. *IEEE Transactions on Circuit Theory* 1971, 18 (**5**), 507–519..
(2) Strukov, D. B.; Snider, G. S.; Stewart, D. R.; Williams, R. S. The Missing Memristor Found. *Nature* 2008, 453 (**7191**), 80–83.
(3) Marani, R.; Gelao, G.; Perri, A. G. A Review on Memristor Applications. I*nternational Journal of Advances in Engineering & Technology* 2015, 8(**3**), 294–305..
(4) Lanza, M.; Tian, H. Materials for Memristors. *Adv Funct Materials* 2024, 34 (**15**), 2314512.
(5) Jamali, R.; Sajjadi, M.; Taherkhani, M. A.; Abbaszadeh, A.; Moradi, M. J. Speckle Pattern Analysis of PVK:rGO Composite Based Memristor Device. *Macromolecular Materials and Engineering* 2024, 309(**12**), 2400213.

مطالعه اثر غلظت الکترولیت بر ویژگی‌های بلورینگی و مورفولوژی نانوکامپوزیت‌های $GO/Al(OH)_3$

پیری فتح‌آباد، شیرین[۱]؛ موسیوند، صبا[۱،*]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم‌آباد، لرستان، ایران

Corresponding author E-mail:Mosivand.S@lu.ac.ir

چکیده

در این مطالعه، نانوکامپوزیت‌های اکسید گرافن/ هیدروکسید آلومینیوم [$GO/Al(OH)_3$] با استفاده از روش الکتروکریستالیزاسیون سنتز شدند. هدف اصلی از این پژوهش، بررسی اثر غلظت الکترولیت بر ویژگی‌های ساختاری، مورفولوژی و عنصری نانوکامپوزیت حاصل است. برای این منظور، غلظت‌های مختلفی از ۰/۰۱ مولار تا ۰/۱ مولار مورد استفاده قرار گرفت. محصولات سنتز شده با استفاده از تکنیک‌های XRD ، SEM و آنالیز EDX مورد ارزیابی قرار گرفتند. نتایج حاصل از آنالیز XRD نشان داد که با افزایش غلظت الکترولیت، شدت پیک‌های مربوط به هیدروکسید به طور قابل توجهی افزایش یافته که نشان‌دهنده بهبود میزان بلورینگی و رشد کریستال‌ها است. همچنین، وجود پیک‌های مربوط به اکسید گرافن در زوایای پایین، تاییدکننده تشکیل ساختار نانوکامپوزیتی است. تصاویر SEM توزیع ذرات و مورفولوژی نانوکامپوزیت را نشان داد که بیانگر این است که با تغییر غلظت توزیع ذرات روی صفحات گرافن تغییر کرده و همچنین اندازه میانگین ذرات تا حدودی به غلظت الکترولیت بستگی دارد. با توجه به این تصاویر ذرات ساخته شده تحت غلظت۰/۰۱ مولار با اندازه میانگین در حدود۸ نانومتر در مقایسه با ذرات سایر نمونه‌ها کوچکترین اندازه را دارند. همچنین طیف‌سنجی EDX حضور عناصر اصلی شامل آلومینیوم، اکسیژن و کربن را در ساختار نهایی تایید کرد که نشان دهنده تشکیل موفقیت‌آمیز نانوکامپوزیت است.

واژه های کلیدی: *.نانوکامپوزیت، اکسید گرافن، هیدروکسید آلومینیوم، الکتروکریستالیزیسیون، غلظت الکترولیت*

Study of the effect of electrolyte concentration on the crystallinity and morphology properties of $GO/Al(OH)_3$ nanocomposites

Piri Fathabad, Shirin[1]; Mosivand, Saba[1,*]

[1]*Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Lorestan University, Khorram-Abad, Lorestan, Iran*
Corresponding author E-mail: Mosivand.S@lu.ac.ir

Abstract

In this study, graphene oxide/aluminum hydroxide [$GO/Al(OH)_3$] nanocomposites were synthesized by the electrocrystallization method, and the effect of precursor concentration on their structural, morphological, and elemental properties was investigated. Various concentrations ranging from 0.01M to 0.1M were employed. The products were characterized using XRD, SEM and EDX. XRD analysis revealed that increasing the concentration enhanced the intensity of aluminum hydroxide peaks, indicating improved crystallinity and crystal growth. SEM images showed the particle distribution and morphology of the nanocomposite, which indicated that the particle distribution on the graphene sheets changed with the concentration and also the average particle size was somewhat dependent on the electrolyte concentration. According to these images, the particles made under a concentration of 0.01 M with an average size of about 8 nm were the smallest compared to the particles of the other samples. Furthermore, EDX confirmed the presence of key elements, including Al, O, and C, verifying the successful formation of the nanocomposite structure.

***Keywords**: Nanocomposite, Graphene oxide, Aluminum hydroxide, Electrocrystallization, Electrolyte concentration*
PACS No. 61

مقدمه

امروزه نانو مواد کربنی مانند گرافن به عنوان یک فاز مورد استفاده و موثر برای ساخت مواد کامپوزیتی معرفی شده است. کامپوزیت ترکیب دو یا چند ماده است که دارای خواص فیزیکی و شیمیایی متفاوت هستند و برای منظور خاص و بهره‌مندی از خصوصیت برگزیده هر تشکیل دهنده تولید می‌شوند. از آنجایی که موضوع اصلی نانو فناوری تولید ماده یا دستگاهی در ابعاد نانو است، اگر کامپوزیت ساخته شده در یک فاز مورفولوژی نانو مقیاس داشته باشد یعنی ابعاد فازها حدود ۱تا۱۰۰ نانومتر باشد، به آن نانو کامپوزیت گفته می‌شود که به واسطه‌ی افزایش سطح نسبت به حجم، ویژگی‌های منحصر بفردی از خود بروز می‌دهند. با توجه به ویژگی‌های جذاب گرافن، این ماده برای ساخت نانو کامپوزیت-ها مورد مناسبی است[۱].

در این پژوهش روش ساخت نانوکامپوزیت اکسید گرافن/هیدروکسید آلومینیوم بر اساس الکتروکریستالیزاسیون در یک محیط آبی–آلی، مبتنی می‌باشد که از مزیت‌هایی آن می‌توان مقرون به صرفه بودن، تمیزی سازوکار و کنترل مناسب اندازه ذرات با تنظیم عوامل مؤثر بر سیستم آزمایشگاهی و نیز انعطاف-پذیری بالا در شرایط متعارفی را نام برد. در اینجا از یک سلول الکتروشیمیایی حاوی الکترود گرافیتی به عنوان آند و الکترود آلومینیومی به عنوان کاتد و محلول الکترولیت برای ساخت نانو کامپوزیت استفاده می‌شود. با اعمال ولتاژ و گذشت زمان آند گرافیتی اکسید می شود و آب در کاتد به هیدروژن و هیدروکسیل تبدیل می‌شود و گونه‌های یونی در محلول به هم می‌رسند تا نانوکامپوزیت اکسید گرافن/هیدروکسید آلومینیوم را تشکیل دهند[۲و۳].

روش‌های تجربی

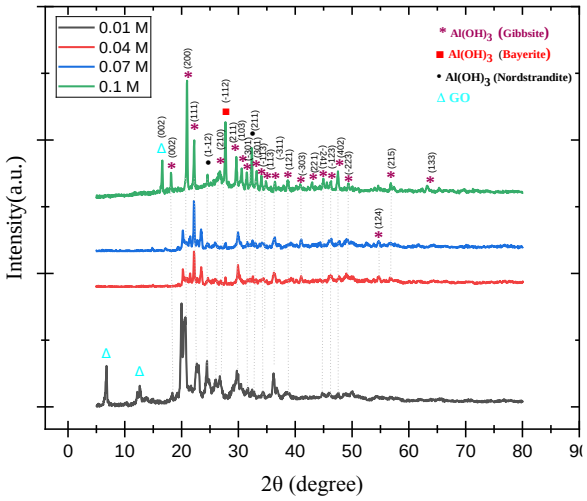
در تحقیق حاضر، نانوکامپوزیت‌های اکسید گرافن/هیدروکسید آلومینیوم به روش الکتروکریستالیزاسیون سنتز شدند. از دو الکترود با خلوص بالا با ابعاد تقریبی ۱۰ سانتیمترمربع به عنوان آند(گرافیت) و کاتد(آلومینیوم) استفاده شد و محلول الکترولیت با سولفات آلومینیوم هفت آبه ساخته شد. پس از اعمال ولتاژ مناسب به سلول، در سطح آند واکنش‌های اکسیدی انجام می‌شود و گرافیت لایه لایه شده و در محلول الکترولیت پخش می‌شوند. همزمان با این فرآیند در سطح کاتد فرآیند احیاء آب و تولید یون-های هیدروکسید رخ می‌دهد. یون‌ها در محلول الکترولیت با هم وارد واکنش شده و نانوکامپوزیت اکسید گرافن/هیدروکسید آلومینیوم شکل می‌گیرند. به‌منظور یافتن شرایط رشد بهتر و بررسی اثر غلظت بر ساختار،اندازه و مورفولوژی ماده سنتز شده ، چندین نمونه با غلظت‌های متفاوت الکترولیت در بازه ۰/۰۱مولار تا ۰/۱مولار در شرایط مشابه آزمایشگاهی رشد داده شد. در تمامی این نمونه‌ها ولتاژ اعمال شده ۲۰ولت بوده و بعد از گذشت مدت زمان ۳۰ دقیقه از آغاز فرآیند، جریان الکتریکی قطع و رسوب تشکیل شده جمع‌آوری شد و پس ازآن خشک گردید. در نهایت مطالعه و مشخصه‌یابی نانوکامپوزیت حاصل توسط دستگاه-های XRD، SEM و EDX صورت گرفت[۵-۳].

نتایج و بحث

نتایج XRD

شکل ۱ الگوهای پراش نمونه‌های تهیه شده با اعمال ولتاژ ثابت ۲۰ولت تحت غلظت‌های مختلف از ۰/۰۱ تا ۰/۱ مولار را نشان می‌دهد. با مقایسه الگوهای XRD با کارت‌های مرجع به شماره-های (JCPDS 01-074-1775)، (JCPDS 01-083-2256)، (JCPDS 01-085-1049)مشخص شد که ساختار Monoclinic گیبسیت، ساختار Monoclinic بایریت و ساختار Anorthic نوردسترندیت در نمونه‌های سنتز شده بسته به شرایط آزمایشی تشکیل می‌شوند. به عبارتی نمونه‌ها ترکیبی از فازهای هیدروکسید آلومینیوم با فرمول شیمیایی $Al(OH)_3$ در حالت نانویی و با کریستالیت کم است که البته از میان این فازها، فاز گیبسیت غالب است. در نمونه ۰/۰۱مولار وجود یک پیک در زاویه $\theta 2 \approx 6/8^o$ مشاهده می‌شود که به بازتاب صفحه (۰۰۱) اکسید گرافن نسبت داده می‌شود. جابجایی این پیک به زوایای پایین‌تر نسبت به GOاولیه، بیانگر افزایش فاصله بین لایه‌ای و نفوذ گونه‌های آلومینیومی به فضای بین صفحات گرافنی است. همچنین حضور یک پیک ضعیف در حدود $12/3^o$ می‌تواند نشان‌دهنده نواحی

لایه‌ای با نظم متفاوت در GO یا هم‌پوشانی با بازتاب‌های ضعیف فازهای هیدروکسید آلومینیوم باشد. با افزایش غلظت به ۰/۱مولار

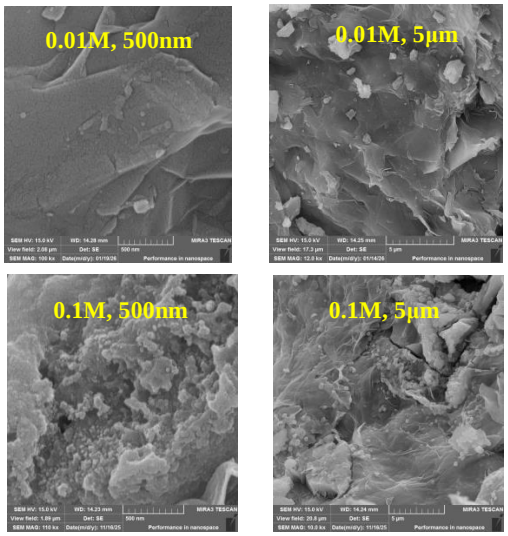


شکل۱: الگوی پراش اشعه ایکس مربوط به نمونه‌های نوعی ساخته شده تحت غلظت‌های نختلف.

تغییرات ساختاری عمده‌ای مشاهده می‌شود. در این غلظت پیک‌های مربوط به بستر گرافنی تضعیف شده و پیک‌های تیز و شدیدی ظاهر می‌شوند که نشان‌دهنده تشکیل فازهای بلوری هیدروکسید آلومینیوم و بعبارتی نشان‌دهنده بهبود قابل توجه بلورینگی نانوکامپوزیت است[۶-۴].

نتایج SEM

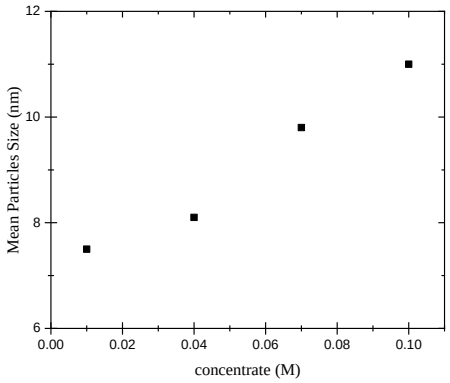
به منظور بررسی مورفولوژی و اندازه‌ی میانگین نانوذرات هیدروکسید آلومینیوم در نانوکامپوزیت سنتز شده از دستگاه میکروسکوپ الکترونی SEM استفاده شد. در شکل ۲ تصاویر مربوط به نمونه‌های ساخته شده تحت غلظت‌های مختلف از ۰/۰۱ تا ۰/۱ مولار آورده شده است. با توجه به تصاویر تغییر غلظت الکترولیت به طور مستقیم بر نحوه آرایش فضایی ذرات روی صفحات گرافن اثر گذاشته است.بطوری که در غلظت‌های پایین نانوذرات هیدروکسید آلومینیوم بصورت نقاط مجزا روی بستر گرافنی نشسته‌اند و مورفولوژی غالب همان صفحات صاف و لایه‌ای گرافن است که نقاط ریزی روی آن دیده می‌شود. اما در غلظت‌های بالاتر مورفولوژی به سمت خوشه ای شدن تغییر یافته و نانوذرات آنقدر زیاد و متراکم شده‌اند که این امر منجر به ایجاد یک ساختار متخلخل با سطح ویژه بالا نی‌شود. به عبارتی در غلظت های پایین توزیع بسیار یکنواخت و پراکنده بوده و صفحات گرافن لخت و مشخص هستند. با افزایش غلظت، جوانه زنی روی سطح افزایش یافته و به مرور پوشش‌دهی گسترده سطح اتفاق می افتد. در نهایت در بالاترین غلظت پوشش کامل و ضخیمی از نانوذرات هیدروکسید آلومینیوم روی بستر گرافنی تشکیل شده است که این نتایج با نتایج حاصل از XRD در تطابق کامل است. اندازه میانگین ذرات بانرم‌افزار Microstructure Measurement برآورد شد و نمودار اندازه میانگین ذرات بر حسب غلظت الکترولیت ترسیم شد (شکل ۳). مشاهده می‌شود که با افزایش غلظت اندازه میانگین نانوذرات سیر صعودی دارد . اندازه میانگین ذرات با افزایش غلظت از حدود ۸nm تا ۱۲nm می‌باشد.



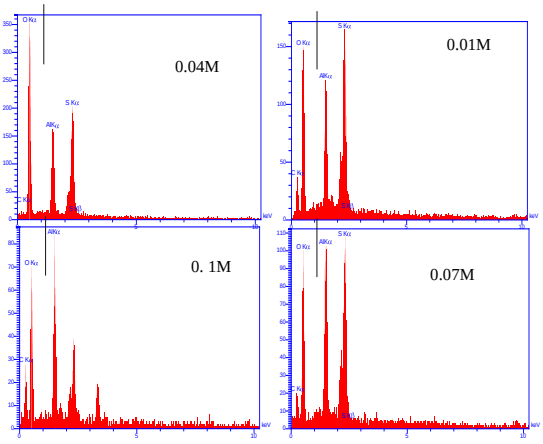
شکل۲: تصاویر نوعی SEM برای نمونه‌های ساخته شده تحت غلظت‌های ۰/۰۱مولار و ۰/۱ مولار در دو مقیاس مختلف.

نتایج EDX

به منظور بررسی ترکیب عناصر موجود در نانوکامپوزیت، آنالیز EDX انجام شد. نتایج حاصل(شکل۴) حضور عناصر اصلی شامل Al، C و O را به وضوح نشان می‌دهد. علاوه بر آن، در طیف‌های مربوط به غلظت‌های ۰/۰۱، ۰/۰۴ و ۰/۰۷ مولار عنصر S



شکل۳: نمودار اندازه میانگین نانوذرات تولیدی بر حسب تغییر غلظت.



شکل۴: طیف EDXمربوط به نمونه‌های سنتز شده بر حسب تغییر غلظت.

هم مشاهده می‌شود که ناشی از نمک سولفات آلومینیوم استفاده شده در محلول الکترولیت است. در نمونه ۰/۰۱مولار پیک C شدت نسبی بالاتری نسبت به نمونه‌ها غلیظ‌تر دارد که بیانگر حضور غالب صفحات اکسید گرافن و پوشش‌دهی جزئی سطح توسط نانوذرات است. با افزایش غلظت، شدت پیک Al افزایش یافته که بیانگر افزایش نرخ رسوب‌دهی نانوذرات هیدروکسید آلومینیوم روی بستر اکسید گرافن است. همزمان با آن، پیک C کاهش قابل توجهی پیدا کرده که به علت اثر پوششی لایه‌های در حال رشد بر روی صفحات بستر است. در نهایت در غلظت ۰/۱مولار، شدت بالای پیکAl در مقایسه با C نشان‌دهنده بارگذاری موفق و گسترده نانوذرات هیدروکسید آلومینیوم بر روی بستر اکسید گرافن است. این نتایج با مشاهدات حاصل از SEM و XRD که در آن پیک‌های مربوط به فاز بلوری گیبسیت غالب بودند، انطباق کامل دارد. همچنین نسبت بالای اکسیژن در طیف، حضور فراوان گروه‌های هیدروکسیل را در ساختار تایید می‌کند. عدم وجود پیک‌های مربوط به عناصر بیگانه در طیف ۰/۱مولار گویای خلوص بالای محصول نهایی می‌باشد.

نتیجه‌گیری

براساس نتایج حاصل از XRD، SEM و EDX افزایش غلظت الکترولیت از ۰/۰۱به۰/۱ مولار منجر به گذار ساختاری از یک بستر گرافنی لایه‌ای به یک نانوکامپوزیت کاملا بلوری می‌شود. انطباق کامل داده‌های XRD و EDX نشان داد که در غلظت‌های بالاتر، نانوذرات هیدروکسید آلومینیوم با توزیع همگن، بستر گرافنی را به طور کامل پوشانده است.

مراجع

[1] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, J. Hone, "Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene"; *Science* **321**(5887) (2008) 385-388.

[2] S. Mosivand; L. M. A. Monzon; K. Ackland; I. Kazeminezhad; J. M. D. Coey; "The effect of organics on the structure and magnetization of electro-synthesised magnetite nanoparticle"; *J Nano Res* **15** (2013) 1-11.

[3] S. Iranshahi, S. Mosivand, "Cobalt/graphene oxide nanocomposites: Electro-synthesis, structural, magnetic, and electrical properties"; *Ceramics International* **48(9)** (2022) 12240-12254.

[۴] پیری فتح آباد، شیرین؛ موسیوند، صبا؛ «بلورینگی کنترل شده با ولتاژ در نانوکامپوزیت‌های اکسید گرافن/هیدروکسید آلومینیوم» *سی و سومین همایش ملی بلورشناسی و کانی شناسی ایران*؛ بهمن ماه ۱۴۰۴، صفحه ۶۰۴ تا ۶۰۹.

[۵] پیری فتح آباد، شیرین؛ موسیوند، صبا؛ «مطالعه ریخت شناسی در نانوکامپوزیت های $GO/Al(OH)_3$» *سی و سومین همایش ملی بلورشناسی و کانی شناسی ایران*؛ بهمن ماه ۱۴۰۴، صفحه ۵۹۸ تا ۶۰۳.

[6] S. Park, R. S. Ruoff, "Chemical methods for the production of graphenes"; *Nature Nanotechnology*, 4(4) (2009) 217-224.

ساخت آلیاژ بین فلزی و غیر استوکیومتری $La_2Mg_{0.62}Y_{0.38}Ni_{10}Mn_{0.5}$ به روش قوس الکتریکی تحت خلا و بررسی خواص ساختاری و هیدرژنی آن

سلیقه، زهره[۱،۲]؛ عربی، هادی[۱،۲]؛ قربانی، شعبان‌رضا[۲]؛ کمیلی، مجتبی[۱،۲]

[۱] آزمایشگاه تحقیقاتی انرژی‌های تجدیدپذیر، مغناطیس و نانوتکنولوژی، گروه فیزیک دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

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

چکیده

در این پژوهش، آلیاژ بین فلزی $La_2Mg_{0.62}Y_{0.38}Ni_{10}Mn_{0.5}$ با ساختار پایه A_2B_7 به روش ذوب قوس الکتریکی تحت خلا (VAR) تولید شد و خواص ساختاری آن، با استفاده از آنالیز XRD مورد بررسی قرار گرفت و مشخص شد که در این آلیاژ، دو فاز $LaNi_5$ و La_2Ni_7 به طور همزمان وجود دارد. همچنین خواص هیدروژنی آلیاژ، به روش حجم‌سنجی اندازه‌گیری شد و نتایج نشان داد که این آلیاژ دارای سینتیک جذب و واجذب بالای هیدروژن است و ماکزیمم هیدروژن ذخیره شده در آن در فشار ۵ بار، حدود ۲ wt% است. بر اساس نتایج، این آلیاژ، دارای سینتیک بالا و مقدار جذب هیدروژن خوبی است و با توجه به اینکه چرخه‌پذیری خوبی هم دارد، بنابراین می‌تواند گزینه مناسبی جهت ذخیره‌سازی هیدروژن و احتمالا کاربرد در باتری‌های نیکل هیدرید فلز باشد.

واژه‌های کلیدی: *آلیاژ ذخیره‌ساز هیدروژن، قوس الکتریکی تحت خلا، سینتیک، هیدرید بین فلزی.*

Fabrication of intermetallic and non-stoichiometric $La_2Mg_{0.62}Y_{0.38}Ni_{10}Mn_{0.5}$ alloy by vacuum arc remelting method and investigation of its structural and hydrogen properties

Salighe, Zohre[1,2]; Arabi, Hadi[1,2]; Ghorbani, Shaban Reza[2]; Komeili, Mojtaba[1,2]

[1] *Renewable energies, magnetism and nanotechnology research laboratory, Faculty of science, Ferdowsi university of Mashhad, Mashhad*

[2] *Department of Physics Faculty of science, Ferdowsi university of Mashhad, Mashhad*

Abstract

In this research, intermetallic alloy $La_2Mg_{0.62}Y_{0.38}Ni_{10}Mn_{0.5}$ with the basic structure of A_2B_7 was produced by electric arc melting under vacuum (VAR) and its structural properties were investigated using XRD analysis and it was found that in this alloy has two phases $LaNi_5$ and La_2Ni_7 at the same time. Also, the hydrogen properties of the alloy were measured by volumetric method and the results showed that this alloy has high hydrogen absorption and desorption kinetics and the maximum hydrogen stored in it at 5 bar pressure is about 2 wt%. Based on the results, this alloy has high kinetics and a good amount of hydrogen absorption, and considering that it has good cyclability, it can be a suitable option for hydrogen storage and possibly for use in nickel metal hydride batteries.

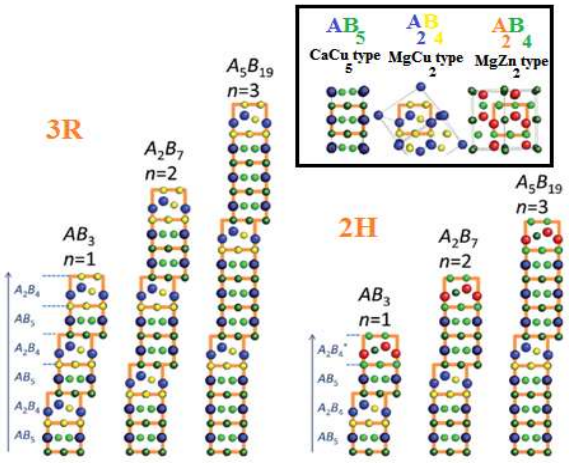
***Keywords**: Hydrogen storage alloy, vacuum arc melting, Kinetics, Intermetallic hydride.*

PACS No. 61

مقدمه

امروزه از هیدروژن به عنوان یک منبع انرژی پاک با بازده بالا یاد شده و سهم زیادی برای آن در ذخیره‌سازی انرژی و حمل و نقل در نظر گرفته می‌شود [۱]. در میان روش‌های متداول ذخیره‌سازی هیدروژن، ذخیره‌سازی در فاز جامد و در هیدریدهای فلزی، مورد توجه محققین قرار گرفته است. هیدریدهای فلزی، به

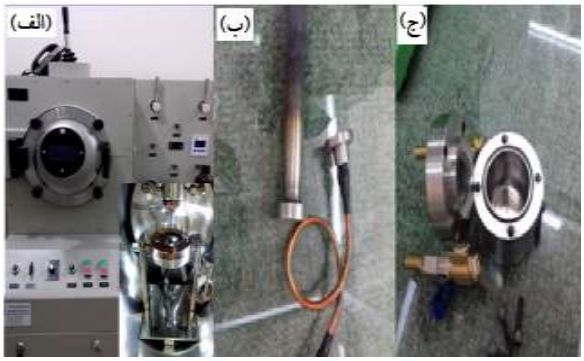
عنوان الکترود در باتری‌های نیکل هیدرید فلز، کاربرد گسترده‌ای دارند [۲]. بررسی‌های زیادی به منظور تولید آلیاژهای جاذب هیدروژن، و استفاده از آن به عنوان آند در این باتری‌ها انجام شده است که بیش‌ترین آن مربوط به آلیاژهای با ساختار AB_5 و AB_2 بوده است. اما آلیاژهای سه‌تایی بر پایه (La-Mg-Ni) به دلیل ظرفیت الکتروشیمیایی بالاتر، بهبود خواص خوردگی و پایداری نسبتا بهتر، جایگزین آلیاژهای $LaNi_5$ شده است. این آلیاژها، دارای ساختارهای لایه‌ای بوده و از زیر واحدهای $[LaMgNi_4]$ و $[LaNi_5]$ تشکیل شدند که در امتداد محور c به طور متناوب روی هم چیده شده‌اند. برای این ساختارها، مدل AB_y، توسط خان و همکارانش مطرح شد [۳]، که در آن $y=(5n+4)/(n+2)$، n یک عدد صحیح، A=La, Mg و B=Ni است. ساختارهای ایجاد شده می‌توانند شامل دو نوع باشند: ۱) تقارن رومبوهدرال (3R)، که شامل انباشته شدن زیر واحدها به صورت $3(n[AB_5]+[A_2B_4])$ و ۲) تقارن هگزاگونال (2H)، به صورت $2(n[AB_5]+[A_2B_4])$ هستند [۳و٤]. در شکل ۱، ساختارهای کریستالی با n=1,2,3 برای هر دو پیکربندی نشان داده شده است. یکی از بهترین روش‌ها در تولید آزمایشگاهی این آلیاژ، روش ذوب مجدد قوس الکتریکی تحت خلا (VAR) است. در این روش، عملیات ذوب، در بوته‌ای آبگرد از جنس آلیاژ مس، صورت می‌گیرد. با توجه به تحقیقات گسترده‌ای که در زمینه آلیاژهای سه‌تایی انجام شده است، هنوز چالش‌های اساسی برای کاربرد این آلیاژها مخصوصا در باتری وجود دارد. در تمامی پژوهش‌های انجام شده در زمینه رفع چالش تبخیر سریع منیزیم در حین ساخت، به دلیل حذف کامل منیزیم و جایگزینی آن با ایتریوم، ظرفیت بالایی در جذب هیدروژن حاصل نشده است. بنابراین یکی از مهم‌ترین دلایل طراحی آلیاژ مورد بررسی، غلبه بر مسئله فراریت منیزیم در حین آماده‌سازی آلیاژ و افزایش همزمان ظرفیت جذب هیدروژن، بوده است. علاوه بر این موضوع، بیش‌تر مطالعات مربوط به عملکرد هیدروژنی در این آلیاژها، بر ساختارهای پایه AB_5 و AB_3 تمرکز دارند [٦و٥]. با توجه به ویژگی‌های بارز فاز A_2B_7 در خصوصیات جذب و واجذب هیدروژن، دلیل دیگر برای طراحی این آلیاژ، دستیابی به ساختار A_2B_7 است.



شکل ۱: ساختار کریستالی فاز ABy با $y=(5n+4)/(n+2)$، برای n=1,2,3 در هر دو تقارن ۳R و۲H.

روش آزمایش

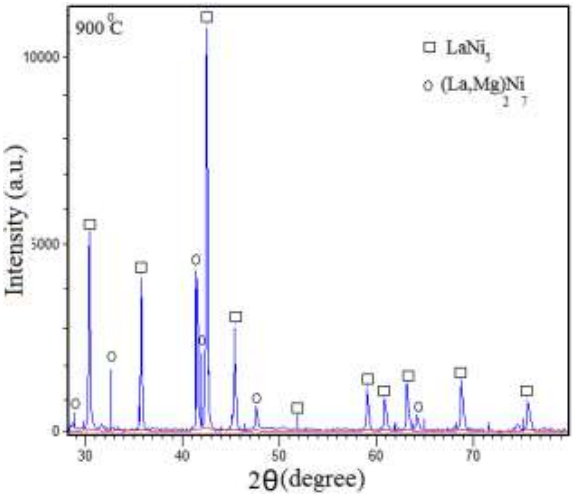
به منظور ساخت آلیاژ $La_2Mg_{0.62}Y_{0.38}Ni_{10}Mn_{0.5}$، از کوره قوس الکتریکی تحت خلا با قالب مسی و الکترود تنگستن که هر دو آبگرد هستند، استفاده شد. مواد اولیه با خلوص بالاتر از ۹۹ درصد، داخل بوته مسی در کنار هم قرار می‌گیرند و پلاسمای بین الکترود تنگستن و بوته مسی، در قسمت‌های مرکزی قوس، دمای بالا ایجاد می‌کند. این دمای بالا باعث شده که قابلیت انحلال پیش مواد فلزی اولیه افزایش و فاز آلیاژی تشکیل شود. آلیاژ مورد بررسی، به اکسیژن حساس است، بنابراین پیش آلیاژ $La_2Y_{0.38}Ni_{10}Mn_{0.5}$، بعد از ساخت به محیط گلاوباکس انتقال یافته و توسط هاون عقیق پودر می‌شود. سپس با مقدار مشخص منیزیم ترکیب و جهت همگن‌سازی بیش‌تر، به مدت دو ساعت داخل دستگاه آسیای گلوله‌ای، قرار می‌گیرد. بعد از این مدت، پودر آلیاژ به داخل اتوکلاو از جنس استنلس استیل انتقال داده شده و به مدت ٤ ساعت تحت دمای ۹۰۰ درجه سانتیگراد، حرارت می‌بینند. جهت انجام فرایند آسیاکاری و حرارت‌دهی آلیاژ، محفظه آسیای گلوله‌ای و اتوکلاو از جنس استنلس استیل، در آزمایشگاه انرژی‌های تجدیدپذیر، مغناطیس و نانوتکنولوژی دانشگاه فردوسی مشهد، طراحی و ساخته شد. شکل ۲، نمایی از کوره VAR مورد استفاده در ساخت آلیاژ، اتوکلاو و جار آسیای گلوله‌ای ساخته شده را نشان می‌دهد.



شکل۲: نمایی از (الف) کوره قوس الکتریکی تحت خلا، (ب) اتوکلاو و (ج) محفظه آسیای گلوله‌ای.

نتایج و بحث

طیف اشعه ایکس آلیاژ $La_2Mg_{0.62}Y_{0.38}Ni_{10}Mn_{0.5}$، در شکل ۳، نشان داده شده است. برای این آلیاژ، علاوه بر فاز $LaNi_5$ با ساختار هگزاگونال، مقداری از فاز ابرساختار $(La,Mg)_2Ni_7$ نیز وجود دارد که در بخش مقدمه، راجع به این ساختار توضیح داده شد.



شکل۳: طیف اشعه ایکس آلیاژ $La_2Mg_{0.62}Y_{0.38}Ni_{10}Mn_{0.5}$ تهیه شده به روش ذوب مجدد قوس الکتریکی.

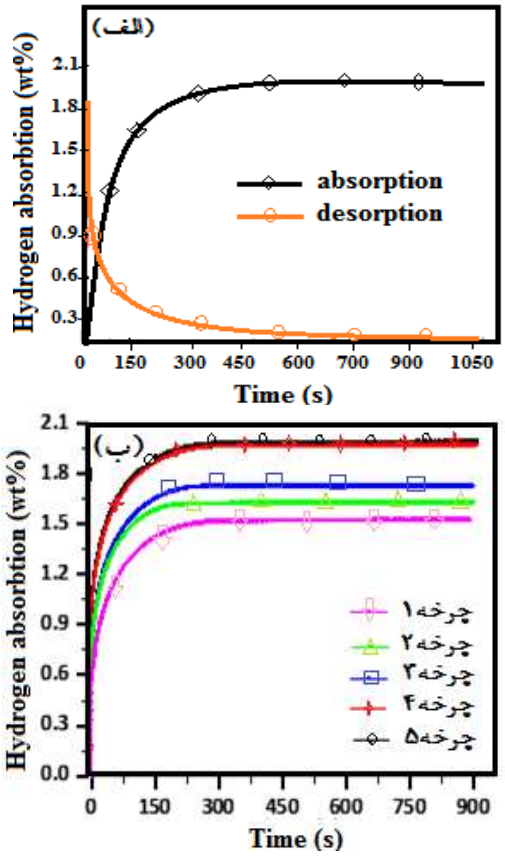
مشخصه‌های هیدروژنی آلیاژ $La_2Mg_{0.62}Y_{0.38}Ni_{10}Mn_{0.5}$، با استفاده از دستگاه سیورت ساخته شده در دانشگاه فردوسی مشهد (آزمایشگاه انرژی‌های تجدیدپذیر، مغناطیس و نانوتکنولوژی)، اندازه‌گیری شد. این دستگاه مبتنی بر اندازه‌گیری به روش حجم‌سنجی است و خواص هیدروژنی نمونه را از طریق دو روش متمایز مورد ارزیابی قرار می‌دهد:

ثبت تغییرات فشار در دمای ثابت: در این روش، میزان جذب و واجذب هیدروژن توسط نمونه در طول زمان اندازه گیری شده و از این داده‌ها برای ترسیم منحنی‌های سینتیکی استفاده می‌گردد.

اعمال تدریجی فشار هیدروژن: در این روش، فشار هیدروژن به صورت گام به گام بر روی نمونه اعمال شده و واکنش نمونه مورد بررسی قرار می‌گیرد. در هر نقطه برای رسیدن به تعادل فشار، زمان کافی در نظر گرفته شده و سپس فشار هیدروژن برای اندازه‌گیری نقطه بعدی کمی افزایش می‌یابد. این فرآیند تا رسیدن به مرحله اشباع ادامه پیدا می‌کند. این روش برای رسم منحنی‌های فشار–ترکیب–دما کاربرد دارد.

جهت فعال‌سازی نمونه، قرص آلیاژ به قطر ۱۰ میلی متر با دقت داخل راکتو انتقال داده شد و تحت شرایط خلا 10^{-3} میلی بار به مدت زمان ۲ ساعت، در دمای ۲۰۰ درجه سانتیگراد تحت حرارت قرار گرفت. برای انجام آزمایش‌های سینتیک جذب و واجذب، در ابتدا سیستم سه مرتبه با پمپ خلا روتاری و هلیوم، شستشو داده شد. در مرحله نهایی، راکتور تحت فشار خلا معینی بسته شده و بخش حجم مرجع دستگاه نیز به فشار مشخص می‌رسد. با باز کردن شیر اتصال بین راکتور و حجم مرجع، هیدروژن به آرامی در نمونه جذب می‌شود که می‌توان آن را با کمک قانون گازهای کامل و در نظر گرفتن برخی تصحیحات با دقت بالا اندازه گیری نمود. فشار مرجع در این اندازه‌گیری‌ها پنج بار در نظر گرفته شد. جهت بررسی چرخه‌پذیری آلیاژ که یک پارامتر بسیار مهم در ذخیره‌سازی هیدروژن و کاربرد در باتری نیکل هیدرید فلز است، تعداد پنج چرخه جذب و واجذب برای این آلیاژ انجام شد. شکل ٤ (الف)، منحنی جذب و واجذب نمونه، برای چرخه پنجم را نشان می‌دهد. بیشینه ظرفیت جذب هیدروژن در این نمونه در حدود (۲wt%) است که بیش‌تر از مقدار مربوط به سایر آلیاژهای این خانواده مانند $LaNi_5$ (۱/٤wt%) است [٦]. مقدار بالاتر ظرفیت جذب هیدروژن احتمالا به دلیل وجود منیزیم و ایتریوم در ساختار آلیاژ و همچنین حجم سلول بزرگتر فاز

آلیاژی La_2Ni_7 نسبت به فاز $LaNi_5$ است. بر طبق منحنی جذب، مشاهده می‌شود که بعد از حدود ۳۰۰ ثانیه، جذب هیدروژن در نمونه به اشباع رسیده و بنابراین سینتیک جذب هیدروژن، بسیار خوب است. در مرحله واجذب، تقریبا تمام هیدروژن جذب شده، از نمونه خارج شد که نمایانگر این مطلب است که هیچ فاز هیدرید پایداری، در سیستم شکل نگرفته، لذا برای واجذب نیاز به حرارت‌دهی همراه با خلا نیست و تنها خلا با پمپ روتاری می‌تواند واجذب نمونه را کامل کند. برای سایر چرخه‌ها نیز روند جذب و واجذب نمونه، به همین صورت مشاهده شد. بنابراین این آلیاژ چرخه‌پذیری خوبی جهت استفاده در باتری نیکل هیدرید فلز دارد. در شکل ٤ (ب)، منحنی‌های سینتیک جذب نمونه در دمای اتاق، برای پنج چرخه اول نشان داده شده است.



شکل٤: (الف) منحنی جذب و واجذب چرخه پنجم و (ب) منحنی‌های سنتیک جذب آلیاژ $La_2Mg_{0.62}Y_{0.38}Ni_{10}Mn_{0.5}$ در دمای اتاق.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، تولید آلیاژ میان فلزی $La_2Mg_{0.62}Y_{0.38}Ni_{10}Mn_{0.5}$ از خانواده ترکیبات سه‌تایی (La-Mg-Ni)، به روش ذوب مجدد قوس الکتریکی تحت خلا و ذخیره‌سازی هیدروژن در آن با موفقیت انجام شد و مشخصات هیدروژنی مناسب، از جمله، فعال‌سازی آسان به کمک چندین چرخه جذب و واجذب و همچنین سینتیک مناسب جذب و واجذب، حاصل گردید. درصد وزنی جذب هیدروژن برای این آلیاژ در دمای اتاق، حدود ۲wt% محاسبه شد که بیش‌تر از مقدار مربوطه برای آلیاژهای خانواده $LaNi_5$ بود. همچنین نتایج حاصل از این پژوهش، نشان می‌دهد که این آلیاژ، گزینه‌ای مطلوب جهت ذخیره‌سازی هیدروژن و استفاده به عنوان آند در باتری‌های نیکل هیدرید فلز، می‌باشد.

مرجع‌ها

[1] F. Yaung, Z. Bao, Y. Wng and Z. X. Zhang, "Microstructure and improved hydrogen storage properties of Mg based alloy powders prepared by modified milling", *J. Institute of materials* **57**, (2014) 45-53.

[2] *Z. Salighe, H. Arabi, Sh. R. Ghorbani and M. Komeili*, "Microstructural, hydrogenation and electrochemical properties of $La_2Mg_{1-x}Y_xNi_{10}Mn_{0.5}$ (x= 0.1, 0.38) alloys for Ni-MH battery anode", J. Solid State Chemistry **340,** (2025) 125340.

[3] J. C. Crivello, J. Zhang and M. Latroche, "Structural Stability of ABy Phases in the (La, Mg) Ni System Obtained by Density Functional Theory Calculations ", J. Phys. Chem. **115,** (2011) 25470–25478.

[4] M. Komeili, H. Arabi, R. V. Yusupov, Sh. R. Ghorbani, F. G. Vagizov and F. Pourarian, "Structural and hydrogen absorption/desorption properties of $Zr_2(Co_{0.5}Fe_{0.2}Ni_{0.2}V_{0.1})$ intermetallic alloy", *Int J Hydrogen Energy* **46**, (2021) 19060-19073.

[5] Y. Du, W. Li and J. Environ, "Structural and electrochemical properties of annealed $La_{1-x}Y_xNi_{3.55}Mn_{0.4}Al_{0.3}Co_{0.75}$ hydrogen storage alloys", *Sci.-China* **23**, (2011) 59–62.

[6] H. Zhang, F. Li and Q. Jianbo, "Effects of yttrium substitution for magnesium on the electrochemical performances of $La_2Mg_{1-x}Y_xNi_{8.8}Co_{0.2}$ hydrogen storage alloys", *J. Materials Research and Technology* **8**, (2019) 3382-3387.

اندازه‌گیری دینامیک تبخیر مایعات با استفاده از تداخل‌سنج فیبر نوری

شریف شاد ، نرگس[۱] ؛ آذریان[۱]، عباس ؛ عارف[۱]، سید هاشم

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم، بلوار الغدیر، قم

چکیده

اندازه‌گیری دقیق دینامیک تبخیر مایعات در بسیاری از کاربردهای صنعتی، شیمیایی و زیستی اهمیت دارد. در این پژوهش، روشی مبتنی بر تداخل‌سنجی فیبر نوری از نوع فابری–پرو برای اندازه‌گیری نرخ تبخیر ارائه شده است. همچنین در این روش اثر شرایط محیطی (دما و رطوبت) و نوع مایع (آب، اتانول و مخلوط‌های آن‌ها) مورد بررسی قرار گرفت. قطره قرارگرفته در نوک فیبر نوری نقش یک کاواک تداخلی را ایفا کرد و تغییر ضخامت آن در طول تبخیر منجر به ایجاد فریزهای تداخلی شد. با استفاده از پردازش سیگنال (تبدیل فوریه سریع)، نرخ تبخیر محاسبه شد. نتایج نشان می‌دهد که (۱) افزایش دما موجب افزایش نرخ تبخیر می‌شود، (۲) افزایش رطوبت موجب کاهش نرخ تبخیر می‌شود، (۳) اتانول تقریباً چهار برابر سریع‌تر از آب تبخیر می‌شود و (٤) مخلوط‌های آب–اتانول رفتار تبخیری دوفازی دارند. این نتایج نشان می‌دهد که تداخل‌سنجی فیبر نوری یک روش حساس و کم‌هزینه برای سنجش تبخیر مایعات می باشد.

واژه های کلیدی: *تداخل سنجی، فیبر نوری، فابری–پرو، آب دیونیزه، اتانول، نرخ تبخیر، الگوی تداخلی، شناسایی مواد .*

Measurement of Liquid Evaporation Dynamics Using a Fiber-Optic Interferometer

Sharif Shad[1], Narges; Azarian[1], Abbas; Aref[1], Seyed Hashem

[1]Department of Physics, Faculty of basice sciences, University of Qom, Qom

Abstract

Measurement of liquid evaporation dynamics is important in many industrial, chemical, and biological applications. In this study, a method based on a fiber-optic Fabry–Perot interferometer is proposed for measuring the evaporation rate. The effects of environmental conditions (temperature and humidity) as well as the type of liquid (water, ethanol, and their mixtures) are also investigated. A droplet formed at the tip of the optical fiber acts as an interferometric cavity, and the change in its thickness during evaporation leads to the formation of interference fringes. By applying signal-processing techniques, including the Fast Fourier Transform (FFT), the evaporation rate is calculated. The results show that (1) increasing temperature leads to an increase in the evaporation rate, (2) increasing humidity results in a decrease in the evaporation rate, (3) ethanol evaporates approximately four times faster than water, and (4) water–ethanol mixtures exhibit two-phase evaporation behavior. These results demonstrate that fiber-optic interferometry is a sensitive and low-cost method for monitoring liquid evaporation.

Keywords*: interferometry, optical fiber, Fabry–Perot, deionized water, ethanol, evaporation rate, interference pattern, Substance Identification.*
PACS No.

مقدمه

پدیده تبخیر مایعات نقش کلیدی در فرآیندهای متنوعی همچون چاپ جوهرافشان، احتراق سوخت، خنک‌سازی مدارهای الکترونیکی و تحلیل مایعات زیستی دارد. روش‌های مرسوم برای اندازه‌گیری نرخ تبخیر شامل روش‌های وزنی [۱]، طیف‌سنجی [۲] و حسگرهای MEMS[۱] هستند [۳] که اغلب نیازمند تجهیزات بزرگ و پرهزینه بوده و از نظر تفکیک زمانی محدودیت دارند.

حسگرهای فیبر نوری به دلیل ابعاد کوچک، حساسیت بالا، ایمنی در برابر تداخل الکترومغناطیسی و توانایی کار با حجم‌های بسیار کم مایع (نانو لیتر)، جایگزین مناسبی محسوب می‌شوند. در [٤]، با استفاده از تداخل‌سنجی فیبر نوری و پردازش سیگنال و استفاده از تبدیل فوریه (FFT) و تبدیل هیلبرت (Hilbert Transform)، نرخ تبخیر آب و اتانول با دقت بالا به دست آورده شده است.

در این تحقیق، علاوه بر اندازه گیری نرخ تبخیر مایعات، روش تداخل‌سنجی فیبر نوری برای بررسی اثرات دما، رطوبت بر اساس نوع مایع نیز توسعه داده شده است.

اصول کار و ارائه نتایج

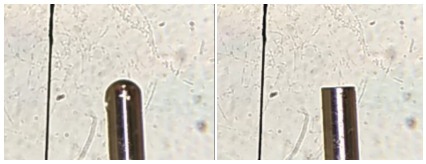
یک قطره مایع در نوک انتهایی فیبر نوری تک‌مد با برش کاملا عمودی قرار داده می شود، بطوریکه بواسطه سطوح بازتابی یک کاواک فابری–پرو (از نوع دو پرتویی) شکل می گیرد. نور لیزر با طول‌موج حدود ۱۵۵۰ نانومتر به فیبر تزریق شده و پرتو بازتابی توسط آشکارساز نوری و اسیلوسکوپ ثبت می گردد. تغییر ضخامت قطره مایع در حین تبخیر باعث ایجاد نوسانات شدت بازتابی می شود. لازم به ذکر است پرتو های بازتاب شده به سبب ایجاد اختلاف فاز ناشی از اختلاف راه نوری، فریز های تداخلی ایجاد نموده و نرخ تبخیر با بسامد این فریزها طبق روابط زیر قابل محاسبه خواهد بود:

$$\Delta d = \frac{\lambda}{2n_2} \qquad (۱)$$

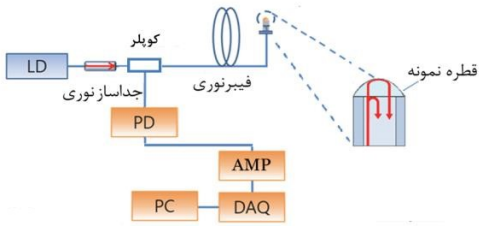
$$\gamma = -\frac{\Delta d}{\Delta t} = -\Delta d \times f \qquad (۲)$$

که در اینجا Δd تغییر طول کاواک به ازای تغییر فاز معادل 2π ، n_2 ضریب شکست مایع، λ طول موج نور لیزر، f بسامد فریزهای تداخلی، Δt مدت زمان متناظر با تغییرات Δd و γ نرخ تبخیر است.

شکل ۱ تصویر فیبر نوری برش داده شده زیر میکروسکوپ به تنهایی و در حضور قطره قرار گرفته است. همچنین ظرف مایع در فضای بسته ای با قابلیت کنترل و پایش دما و رطوبت قرار گرفته است.



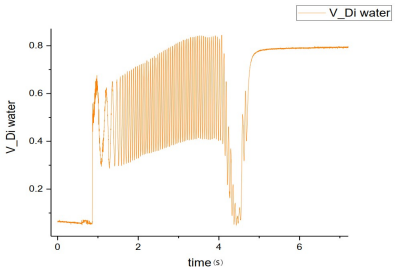
شکل۱ : تصویر فیبر نوری برش دادهشده زیر میکروسکوپ بهتنهایی و در حضور قطره.



شکل۲: طرح شماتیک از چیدمان آزمایشگاهی. در این تصویر LD دیود لیزری، PD آشکارساز، DAQ مبدل آنالوگ به دیجیتال، PC کامپیوتر و AMP مدار تقویت کننده می باشد.

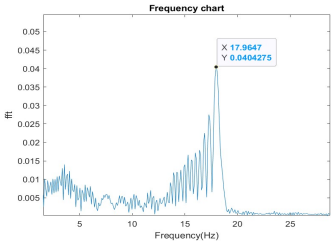
شکل ۳ سیگنال ثبت شده توسط آشکارساز نوری پس از تقویت و نویزگیری نشان داده شده است. مطابق نمودار، سیگنال بازگشتی حاوی اطلاعات تداخل نور در کاواک فابری–پرو و تغییرات فاز در آن بر حسب زمان است. فریز های تداخلی ثبت شده در این نمودار ناشی از تبخیر قطره آب مقطر در دما و رطوبت مشخص می باشد. پس از برازش منحنی توسط برنامه ی متلب از فریز مورد نظر فوریه گرفته شده و با استفاده از معادلات ذکر شده می توان رفتار دینامیکی قطره، نرخ تبخیر و ضریب شکست را تخمین زد.

[۱] Micro-Electro-Mechanical Systems



شکل۳ : نمودار ولتاژ – زمان و فریز تداخلی آب دیونیزه ی یک نمونه از داده های ثبت شده.

در شکل ٤ تبدیل فوریه ی حاصل از سیگنال تداخلی ناشی از تبخیر آب مقطر دوباریونیزه در دما و رطوبت خاص ارائه شده است. قله حاصل از تبدیل فوریه در این شکل نشان می دهد که بیشتر بخش های این فریز تداخلی با دوره تناوب مشخص معادل با بسامد ۱۷.۹٦٤۷ Hz نوسان می کند. البته با توجه به نرخ نمونه برداری ۱۰۰ S/s و تعداد ۱۰۰۰ داده ثبت شده، دقت خوانش بسامد FFT سیگنال در حد ۱۷.۹٦ است و دقت بالاتر گزارش شده ناشی از درون‌یابی سیگنال در تحلیل FFT است.



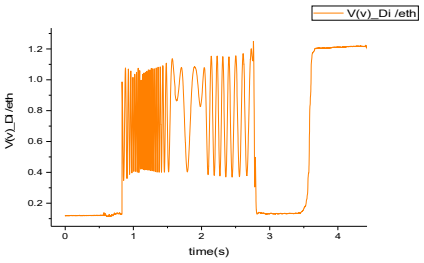
شکل٤ : تبدیل فوریه ی حاصل از فریز تداخلی تبخیر آب مقطر دیونیزه.

در جدول ۱ بسامد سیگنال تداخلی و نرخ تبخیر بدست آمده برای آب مقطر و اتانول در دما و رطوبت مشخص ارائه شده است. تفاوت در بسامد و نرخ تبخیر نسبت به داده های قبلی ناشی از تغییر شرایط رطوبت و دمای محیط می باشد.

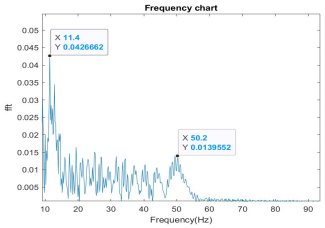
جدول۱ : نرخ تبخیر محاسبه شده برای آب مقطر و اتانول در دما و رطوبت مشخص.

نوع ماده	T(°C)	H (%)	F(Hz)	Γ(μm/s)
آب مقطر	۲۰/٦	۳۱	۱٤/۷۸	۸/۸۱
اتانول	۱۹	۱۲	۸٤	۳۷/۱۵

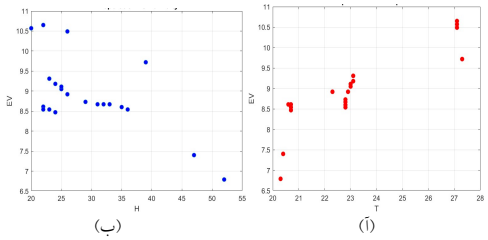
لازم به ذکر است اینکه یک قله فوریه با ارتفاع بیشینه در تصویر مشاهده می شود بیانگر بالا بودن درصد خلوص ماده ی مورد نظر می باشد. درصورتی که ناخالصی وارد نمونه مورد نظر شود ارتفاع قله های دیگر نیز تا حد زیادی بالا می رود که بیانگر تبخیر آن مواد می باشد. این اثر در ترکیب آب و اتانول تا حد زیادی مشهود است. شکل ۵ سیگنال تداخلی وشکل ٦ تبدیل فوریه حاصل از تبخیر ترکیب آب مقطر دیونیزه و اتانول می باشد. نمودار نشان می دهد که تبخیر متاثر از ترکیب یکنواخت آب و اتانول می باشد بطوری که نرخ تبخیر این ترکیب را اندکی از نمونه های خالص متمایز می کند. لازم به ذکر است بسامد فریز تداخلی ثبت شده در ابتدای این شکل بیشتراست که نشان دهنده تبخیر سریعتر اتانول نسبت به آب می باشد.



شکل۵ : فریز تداخلی حاصل از تبخیر ترکیب آب مقطر دیونیزه و اتانول.



شکل٦ : تبدیل فوریه سیگنال حاصل از تبخیر ترکیب آب مقطر دیونیزه و اتانول.

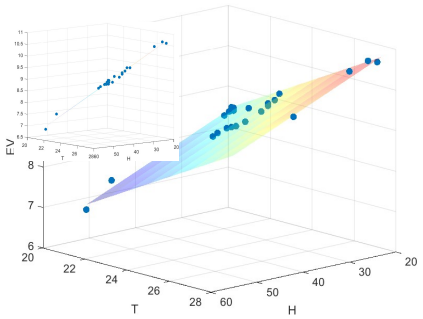


(ب) (آ)

شکل۷ : نمودار تغییرات نرخ تبخیر بر اساس میزان دما (آ) و رطوبت محیط(ب) که به صورت همزمان ثبت شده است.

در ادامه جهت مطالعه تاثیر دما و رطوبت محیط اطراف بر نرخ تبخیر آب مقطر دیونیزه، در شرایط کنترل شده و بصورت پیوسته نمودار سیگنال تداخلی ثبت و نرخ تبخیر محاسبه شد. شکل ۷،

نمودار دما–نرخ تبخیر(آ)و رطوبت–نرخ تبخیر(ب) برای آب مقطر و شکل ۸ نمودار رسم سه بعدی این داده ها را نشان می‌دهد.



شکل۸ : نمودار سه بعدی تغییرات دما– رطوبت–نرخ تبخیر .

با توجه به نمودارها، بطور کلی نرخ تبخیر با تغییر دما و رطوبت با تقریب خوبی به صورت خطی تغییر می کند و بی نظمی های ظاهری در شکل ۷ ناشی از تغییرات همزمان شرایط محیطی می باشد و این موضوع در نمایش سه بعدی قابل درک است.

برای توصیف این رفتار دینامیک تبخیر، یک مدل رگرسیون خطی چندگانه برداده‌های تجربی برازش داده شد. رابطه نرخ تبخیر (EV) بر حسب رطوبت نسبی (RH) و دما (T) به صورت معادله زیراستخراج گردید:

$$EV = aRH + bT + c \qquad (۳)$$

که در اینجا ضرایب $a = -۰/۰۵۱۱$ ، $b = ۰/۳۱۰۵$ و $c = ۳/۲۶۹$ به دست آمد. در این معادله، ضرایب عددی نشان‌دهنده میزان تأثیر هر پارامتر بر نرخ تبخیر هستند.

لازم به ذکر است تحلیل آماری این مدل، نشان‌دهنده انطباق بسیار بالای آن با داده‌های آزمایشگاهی است. ضریب تعیین این مدل $R^2 = ۰/۹۹۰۵$ به دست آمد که تایید می‌کند ۹۹ درصد از تغییرات نرخ تبخیر توسط این دو پارامتر (دما و رطوبت) قابل پیش‌بینی است. همچنین، تمامی ضرایب مدل دارای مقدار p-Value بسیار کوچک (کمتر از 10^{-13}) هستند که نشان‌دهنده معناداری بالای آماری و اعتبار نتایج در سطح اطمینان ۹۵ درصد است.

بررسی ضرایب مدل نشان می‌دهد که دما تأثیر مثبت و رطوبت تأثیر منفی بر نرخ تبخیر دارد. همچنین مقایسه ها نشان می‌دهد که در محدوده آزمایش شده، اثر تغییرات دما بر نرخ تبخیر غالب‌تر از تغییرات رطوبت بوده است.

جدول۲ : مشخصات آماری مدل رگرسیون نرخ تبخیر.

پارامتر	مقدار تخمینی	خطای استاندارد	p - Value
عرض از مبدأ	۳/۲۶۹	۰/۱۹۳۷	۱/۸×۱۰−۱۴
رطوبت (RH)	−۰/۰۵۱۱۵۶	۰/۰۰۲۱۰۷۸	۶/۸۵×۱۰−۱۸
دما (T)	۰/۳۱۰۴۹	۰/۰۰۷۸۰۳۳	۱/۰۲×۱۰−۲۲

بحث و نتیجه گیری

در این پژوهش یک روش نوری مبتنی بر تداخل‌سنج فیبر نوری مبتنی بر فابری–پرو برای بررسی دینامیک تبخیر مایعات ارائه شد. در این روش قطره مایع تشکیل‌شده در نوک فیبر نوری به‌عنوان یک کاواک فابری–پرو تداخلی عمل کرده و با کاهش تدریجی ضخامت قطره در اثر تبخیر، الگوی تداخلی بازتابی دچار تغییر می‌شود. با ثبت سیگنال تداخلی و پردازش آن تغییرات فاز سیگنال استخراج شده و از طریق آن روند تبخیر مایع مورد بررسی قرار گرفت. نتایج آزمایش‌ها نشان داد که عوامل محیطی نقش مهمی در فرآیند تبخیر دارند؛ همچنین مقایسه رفتار تبخیر در مایعات مختلف نشان داد که در دمای مشخص، اتانول نسبت به آب با سرعت تقریبا چهار برابر بیشتر تبخیر می‌شود و در مخلوط‌های آب–اتانول نیز رفتار تبخیر به‌صورت مرحله‌ای مشاهده می‌گردد که ناشی از تفاوت در خواص فیزیکی اجزای مخلوط است. بر اساس نتایج به‌دست‌آمده، روش پیشنهادی مبتنی بر فیبر نوری از حساسیت مناسب، ساختاری ساده و هزینه نسبتاً پایین برخوردار بوده و می‌تواند به‌عنوان ابزاری کارآمد برای پایش و اندازه‌گیری فرآیند تبخیر مایعات مورد استفاده قرار گیرد. این روش علاوه بر مطالعه فرآیندهای تبخیری، پتانسیل توسعه در سامانه‌های حسگری نوری و کاربردهای مرتبط با شناسایی مایعات را نیز دارا است.

مرجع‌ها

[۱] K. Birdi, D. Vu, and A. Winter, “A study of the evaporation rates of small water drops placed on a solid surface,” J. Phys. Chem. 93(9), 3702–3703 (1989).

[۲] Innocenzi, P., Malfatti, L., Costacurta, S., Kidchob, T., Piccinini, M., & Marcelli, A. (2008). Evaporation of ethanol and Ethanol–Water mixtures studied by Time-Resolved Infrared Spectroscopy. Journal of Physical Chemistry A, 112(29), 6512–6516.

[۳] Liu, C., & Bonaccurso, E. (2010). Microcantilever sensors for monitoring the evaporation of microdrops of pure liquids and mixtures. Review of Scientific Instruments, 81(1).

[٤] Lim, O., & Ahn, T. (2019). Fiber-Optic measurement of liquid evaporation dynamics using signal processing. Journal of Lightwave Technology, 37(19), 4967–4975.

بررسی خواص مغناطیسی و مورفولوژی نانوکامپوزیت سبز $NiFe_2O_4$ سنتز شده با عصاره بادرنجبویه

علی بخشی سمن ، زارعی مقدم رضا

گروه فیزیک دانشکده علوم، دانشگاه اراک، اراک، 38156- 88349، ایران

چکیده

در این پژوهش، سنتز سبز نانوکامپوزیت مغناطیسی *نیکل فریت* ***($NiFe_2O_4$) به روش هم‌رسوبی و با استفاده از عصاره بادرنجبویه به‌عنوان عامل کاهنده و پایدارکننده انجام شد. ترکیبات زیستی موجود در عصاره، علاوه بر احیای کاتیون از تجمع نانوذرات جلوگیری کرده و موجب تشکیل ساختاری پایدار می‌شوند. هدف از این مطالعه، ارائه روشی ساده، کم‌هزینه و سازگار با محیط زیست برای تولید نانوذرا ت مغناطیسی با ویژگی‌های ساختاری ومغناطیسی مطلوب بود. به‌منظور شناسایی و مشخصه‌یابی نمونه‌های سنتزشده، از تکنیک‌های*** *XRD ، FT-IR,VSM و UV-Vis* ***استفاده شد. نتایج حاصل از آزمون*** *XRD* ***تشکیل ساختار*** *فاز اسپینلی خالص* ***با خلوص فازی بالا را تأیید کرد و اندازه متوسط بلورک‌ها حدود 55 نانومتر محاسبه شد. بررسی‌های*** VSM ***نیز رفتار فری مغناطیسی نرم نانوذرات و مغناطش اشباعی در حدود 18.5*** *emu/g* ***را نشان داد. طیف*** *FT-IR* ***حضور پیوند د و همچنین گروه‌های عاملی مختلف منشأ گرفته از عصاره گل ختمی را آشکار ساخت که نقش آن‌ها در کنترل رشد و پایدارسازی نانوذرات را تأیید می‌کند. علاوه بر این، طیف*** *UV-Vis* ***جذب قابل‌توجهی را در ناحیه فرابنفش و ابتدای ناحیه مرئی نشان داد. گاف نواری 1.8 الکترون ولت (با استفاده از رابطه تائوک) بدست آمد.***

واژه های کلیدی: *سنتز سبز، نانو کامپوزیت، نیکل فریت، عصاره گیاهی، نانوکامپوزیت مغناطیسی*

Investigation of magnetic and morphology properties $NiFe_2O_4$

ALIBAKHSHI SAMAN, ZAREI MOGHADAM REZA

Department of Physics, Faculty of Science, Arak University, Arak, 38156-88349, Iran

Abstract

In this study, a green synthesis of magnetic nickel ferrite ($NiFe_2O_4$) nanocomposites was carried out via the co-precipitation method using lemon balm (Melissa officinalis) extract as a reducing and stabilizing agent. The bioactive compounds present in the extract not only facilitate the reduction of metal cations but also prevent nanoparticle agglomeration, leading to the formation of a stable nanostructure. The main objective of this work was to develop a simple, cost-effective, and environmentally friendly approach for producing magnetic nanoparticles with desirable structural and magnetic properties. The synthesized samples were characterized using X-ray diffraction (XRD), Fourier-transform infrared spectroscopy (FT-IR), vibrating sample magnetometry (VSM), and UV–Visible spectroscopy (UV–Vis). The XRD results confirmed the formation of a pure spinel-phase structure with high phase purity, and the average crystallite size was estimated to be approximately 55 nm. VSM analysis revealed the Soft ferrimagnetic behavior of the nanoparticles, with a saturation magnetization value of about 18.5 emu/g. The FT-IR spectra indicated the presence of metal–oxygen bonds as well as various functional groups originating from the plant extract, confirming their role in controlling nanoparticle growth and stabilization. Furthermore, the UV–Vis spectrum exhibited significant absorption in the ultraviolet region and the onset of the visible region.The band gap energy is determined about 1.8 eV according to Tauc relation.

***Keywords**: green synthesis, nanocomposites, magnetic nanocomposites, botanical extract, Nickl ferite*

PACS No. 80

مقدمه

نانوذرات فریت‌های اسپینلی با فرمول عمومی(MFe_2o_4 که در آن M یک یون فلزی دوظرفیتی مانند Ni 2 +است)[1]، به دلیل خواص منحصربه‌فرد مغناطیسی، الکتریکی و کاتالیستی، توجه گسترده‌ای را در دهه‌های اخیر به خود جلب کرده‌اند در میان این ترکیبات، نیکل فریت ($NiFe_2O_4$) به عنوان یک نیمه‌رسانای نوع nبا گاف انرژی متوسط، به دلیل پایداری شیمیایی بالا، ویژگی‌های سوپرپارامغناطیسی و سمیت پایین، کاندیدای ممتازی برای کاربردهای فتوکاتالیستی در تخریب آلاینده‌های آلی و تصفیه محیط‌زیست محسوب می‌شود[2] .روش‌های متداول سنتز نانوذرات، مانند هم‌رسوبی، سل-ژل و هیدروترمال، علی‌رغم کارایی بالا، غالباً نیازمند استفاده از مواد شیمیایی سمی، حلال‌های آلی گران‌قیمت و شرایط دمایی سخت هستند که اثرات زیست‌محیطی نامطلوبی به همراه دارند [3]. در راستای تحقق اهداف "شیمی سبز"، رویکردهای سنتز زیستی یا "سنتز سبز" به عنوان جایگزینی پایدار، کم‌هزینه و دوست‌دار محیط‌زیست ظهور کرده‌اند [4]. در این روش، عصاره‌های گیاهی به عنوان عوامل کاهنده و پایدارکننده عمل کرده و نقش مهمی در کنترل مورفولوژی، اندازه و توزیع ابعادی نانوذرات ایفا می‌کنند [5, 6]. گیاه بادرنجبویه [1] به دلیل دارا بودن ترکیبات فیتوشیمیایی متنوع از جمله ترکیبات فنولی، فلاونوئیدها و اسیدهای آلی، پتانسیل بالایی به عنوان یک عامل زیستی در سنتز نانوذرات دارد [6]. در این پژوهش، سنتز سبز نانوذرات نیکل فریت با استفاده از عصاره آبی بادرنجبویه مورد بررسی قرار گرفته است. هدف اصلی، تحلیل تأثیر این عصاره بر مورفولوژی ذرات، خواص مغناطیسی و بهبود عملکرد فتوکاتالیستی آن‌ها در مقایسه با روش‌های سنتی است. نتایج این تحقیق می‌تواند گامی مؤثر در جهت تولید نانومواد پیشرفته با رویکرد توسعه پایدار باشد.

مواد و روش

در این پژوهش، نانوذرات ($NiFe_2O_4$) به روش سنتز سبز با بهره‌گیری از عصاره بادرنجبویه سنتز شدند. در ابتدا ۵ گرم نیترات آهن (شش‌آبه) و ۱.۴۷ گرم کلرید نیکل (شش‌آبه) به عنوان پیش‌ماده‌های فلزی در ۱۴۰ میلی‌لیتر آب دی‌یونیزه حل شدند. به منظور حذف اکسیژن محلول و جلوگیری از اکسیداسیون ناخواسته، محلول پیش‌ماده به مدت یک ساعت تحت جریان گاز نیتروژن (N_2) به‌شدت هم‌زده شد .در ظرفی مجزا، عصاره آبی بادرنجبویه آماده‌سازی شد. پس از افزودن این عصاره به محلول حاوی پیش‌ماده‌های فلزی، عملیات هم‌زدن به مدت ۳۰ دقیقه در دمای محیط ادامه یافت تا یون‌های فلزی با ترکیبات فیتوشیمیایی موجود در عصاره به پایداری برسند. سپس با افزودن قطره‌قطره محلول هیدروکسید سدیم($NaOH$) ، PH محیط واکنش به ۱۲ رسانده شد تا فرایند رسوب‌دهی آغاز گردد .سوسپانسیون حاصل به مدت ۲ ساعت تحت هم‌زدن مکانیکی و گرمایش ملایم قرار گرفت. رسوبات به‌دست‌آمده طی سه مرحله سانتریفیوژ و شست‌وشو با آب دی‌یونیزه از ناخالصی‌های احتمالی پاک‌سازی شدند. نمونه‌های خالص‌سازی‌شده ابتدا به مدت ۷۲۰ دقیقه در آون با دمای ۶۰ درجه سانتی‌گراد خشک شدند. در مرحله نهایی، جهت دستیابی به فاز اسپینلی خالص، پودر حاصل درون کوره با نرخ گرمایش ۳ درجه بر دقیقه تا دمای ۶۰۰ درجه سانتی‌گراد کلسینه شد.

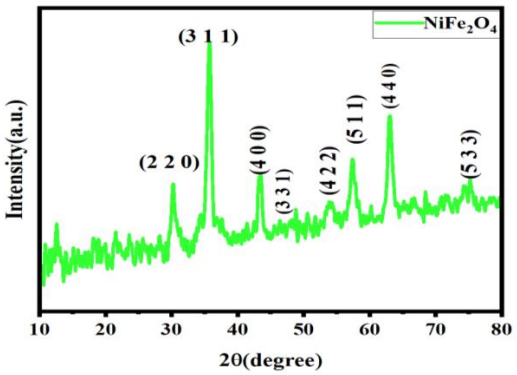
نتایج و مباحث

آنالیز پراش پرتو ایکس

الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) سنتز شده به روش سبز، ساختار بلوری نمونه را به وضوح تأیید می‌کند. پیک‌های پراش مشاهده‌شده در زوایای 2θ برابر با ۱۸.۴۵، ۳۰.۲۲، ۳۵.۶۷، ۳۷.۲۳، ۴۳.۳۳، ۵۷.۳۷ و ۶۲.۹۹ به‌ترتیب مربوط به صفحات بلوری (۱۱۱)، (۲۲۰)، (۳۱۱)، (۲۲۲)، (۴۰۰)، (۵۱۱) و (۴۴۰) از ساختار اسپینلی مکعبی نیکل فریت ($NiFe_2O_4$) است (مطابق با استاندارد JCPDS شماره ۰۰-۰۱۰-۰۳۲۵). عدم مشاهده پیک شاخص مربوط به فازهای ثانویه در الگوی پراش، مؤید غلبه فاز اسپینلی نیکل فریت و نبود ناخالصی‌های فازی نظیر اکسیدهای آهن یا نیکل در دمای کلسیناسیون ۶۰۰ درجه سانتی‌گراد می‌باشد. پهن بودن نسبی پیک‌ها و شدت آن‌ها نشان‌دهنده ماهیت نانوبلوری

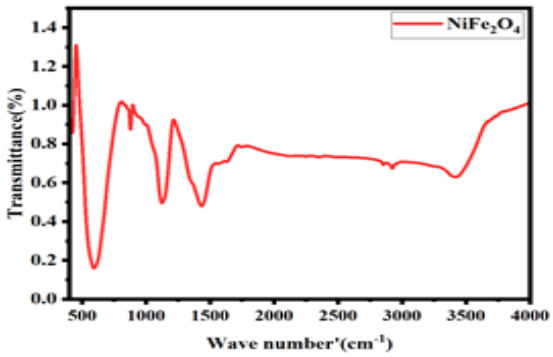
[1] Melissa officinalis

نمونه بوده که احتمالاً ناشی از نقش ترکیبات زیست‌فعال عصاره در محدود کردن رشد بلورک‌ها در طی فرآیند سنتز است[7]. متوسط اندازه بلورک ها طبق رابطه شرر 55 نانومتر بدست آمد.



شکل 1 : آنالیز XRD نمونه $NiFe_2O_4$ سنتز شده با عصاره بادرنجبویه.

آنالیز طیف‌سنجی مادون قرمز با تبدیل فوریه

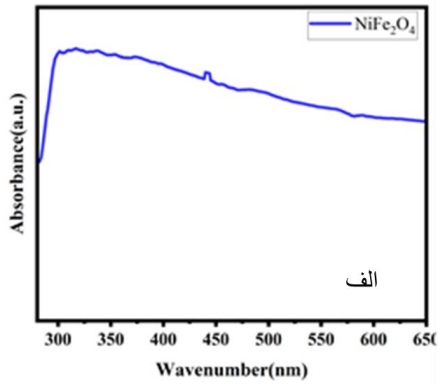


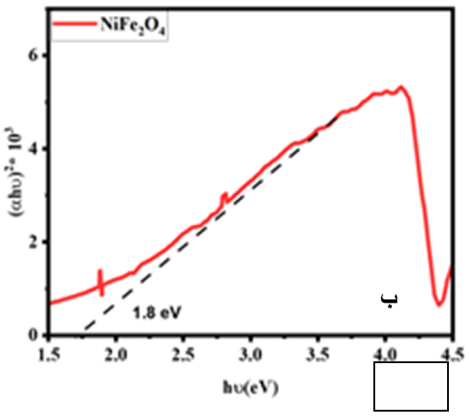
شکل2 : آنالیز FTIR نمونه $NiFe_2O_4$ سنتز شده با عصاره بادرنجبویه.

پیک در محدوده cm^{-1}(۶۰۰-۵۸۰) مهم‌ترین پیک برای تایید فاز فریت است. این جذب قوی مربوط به ارتعاش کششی پیوند فلز–اکسیژن (M–O) است. در نیکل فریت، این پیک نشان‌دهنده ارتعاشات آهن–اکسیژن (Fe-O) در این موقعیت‌هاست . پیک در محدوده cm^{-1}(۴۵۰-۴۰۰) مربوط به ارتعاشات فلز–اکسیژن در است [8] . پیک پهن در $3400cm^{-1}$ و پیک کوچک ۱۶۳۰ cm^{-1}این پیک‌ها مربوط به ارتعاشات کششی و خمشی گروه‌های هیدروکسیل (O-H) هستند که نشان‌دهنده وجود آب جذب شده روی سطح نانوذرات نیکل فریت است .

طیف‌سنجی فرابنفش–مرئی (UV)

خواص جذبی نوری نانوذرات $NiFe_2O_4$ سنتز شده با استفاده از طیف‌سنجی UV-Vis در محدوده ۲۰۰ تا ۸۰۰ نانومتر مورد بررسی قرار گرفت (شکل سمت چپ). طیف جذبی یک لبه جذب قوی در ناحیه نور مرئی نشان می‌دهد که می‌تواند به انتقال بار از ترازهای $2p$اکسیژن به ترازهای $3d$آهن (Fe^{3+}) نسبت داده شود. برای تعیین شکاف انرژی نوری (E_g)، از رابطه تاوک و رسم نمودار $(\alpha h\nu)^2$برحسب انرژی فوتون ($h\nu$) استفاده شد (شکل سمت راست). با امتداد بخش خطی نمودار تا محور انرژی، مقدار شکاف انرژی مستقیم برای نانوذرات نیکل فریت 1.8 eV تخمین زده شد. این شکاف انرژی باریک نشان‌دهنده فعال بودن این ماده در ناحیه نور مرئی است که آن را برای کاربردهایی نظیر فوتوکاتالیست و افزونه‌های اپتوالکترونیک بسیار مناسب می‌سازد. مقدار به‌دست آمده تطابق خوبی با گزارش‌های قبلی برای ساختارهای اسپینل فریت دارد[9].

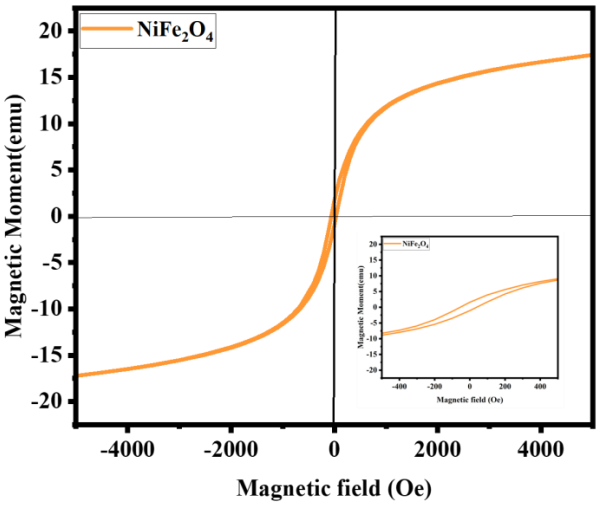




شکل 3: بررسی خواص نوری نانوذرات $NiFe_2O_4$، الف) طیف جذب نوری در محدوده فرابنفش–مرئی، ب) نمودار $(\alpha h\nu)^2$برحسب انرژیص فوتون $(h\nu)$جهت استخراج مقدار شکاف انرژی مستقیم.

مغناطیس‌سنج نمونه مرتعش(VSM)

به‌منظور بررسی خواص مغناطیسی نانوذرات$NiFe_2O_4$ ، آزمون VSMدر دمای اتاق انجام شد که نتایج آن در شکل 4 ارائه شده است. منحنی M–H بیانگر رفتار فری‌مغناطیسی نرم نمونه است. مقدار مغناطش اشباع (Ms) حدود 18.5 emu/g به‌دست آمد که نشان‌دهنده پاسخ مناسب نمونه به میدان مغناطیسی است. همچنین، بزرگنمایی ناحیه مرکزی منحنی، وجود یک حلقه هیسترزیس باریک همراه با مقادیر غیرصفر نیروی وادارندگی (Hc) و مغناطش پسماند (Mr) را نشان می‌دهد که مؤید رفتار فری‌مغناطیسی نرم نمونه در دمای اتاق است[10].



شکل 4: آنالیز VSM مربوط به نمونه $NiFe_2O_4$ سنتز شده با عصاره بادرنجبویه.

نتیجه گیری

در این مطالعه، نانوکامپوزیت مغناطیسی $NiFe_2O_4$ به روش سنتز سبز و با بهره‌گیری از عصاره بادرنجبویه تولید شدند. ترکیبات زیست‌فعال موجود در عصاره گیاهی به‌عنوان عوامل کاهنده و پایدارکننده عمل کرده و در تشکیل و تثبیت نانوذرات نقش مؤثری ایفا نمودند. نتایج آنالیز XRD تشکیل موفق ساختار اسپینلی مکعبی $NiFe_2O_4$ را تأیید کرد و اندازه متوسط بلورک‌ها حدود 55 نانومتر برآورد شد. بررسی طیف FT-IR نیز وجود گروه‌های عاملی منشأ گرفته از عصاره گیاهی بر سطح **نانوذرات را نشان داد که بیانگر نقش آن‌ها در فرآیند سنتز** و پایدارسازی ذرات است. علاوه بر این، طیف UV-Vis جذب قابل‌توجهی را در ناحیه فرابنفش آشکار ساخت. همچنین مقدار شکاف انرژی از رابطه تائوک 1.8 الکترون ولت بدست آمد. نتایج حاصل از آنالیز VSM رفتار **فری‌مغناطیسی نرم** نانوکامپوزیت را با مقدار مغناطش اشباع حدود 18.5 emu/g نشان داد. در مجموع، نانوکامپوزیت نیکل فریت ($NiFe_2O_4$) به دلیل خواص مغناطیسی و سطح ویژه بالا، در حذف آلاینده‌های آب، کاتالیزورها، حسگرها و ذخیره‌سازی انرژی (باتری‌ها و ابرخازن‌ها) کاربرد دارد.

مرجع‌ها

1. Pham, T.N., T.Q. Huy, and A.-T. Le, *Spinel ferrite (AFe 2 O 4)-based heterostructured designs for lithium-ion battery, environmental monitoring, and biomedical applications.* RSC advances, 2020. 10(52): p. 31622-31661.
2. Askari, M.B., P. Salarizadeh, and M.T.T. Moghadam, *NiFe2O4 as a promising electrode material: A comprehensive review on supercapacitor applications.* Fuel, 2026. 403: p. 136104.
3. Shevchuk, O.I., et al., *Application of decellularization methods for scaffold production: Advantages, disadvantages, biosafety and modifications.* Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, 2025. 13: p. 1621641.
4. Kirubakaran, D., et al., *A comprehensive review on the green synthesis of nanoparticles: advancements in biomedical and environmental applications.* Biomedical Materials & Devices, 2026. 4(1): p. 388-413.
5. Ramatsitsi, N., et al., *Towards green nematicides: a systematic review of botanical extracts in the biological control of plant-parasitic nematodes.* Journal of Pest Science, 2026. 99(1): p. 1.
6. Awlqadr, F.H., et al., *Bioactive Compounds, Medicinal Benefits, and Contemporary Extraction Methods for Lemon Balm (Melissa officinalis).* Food Science & Nutrition, 2025. 13(9): p. e70864.
7. Koca, F.D. and B. Şahin, *Green synthesis of NiFe2O4 nanoparticles and evaluation of their photocatalytic activities.* Inorganic and Nano-Metal Chemistry, 2025. 55(8): p. 977-983.
8. Kulkarni, G., et al. *Green synthesis of NiFe2O4 nanoparticles using different fuels and their structural characterization*. in *Journal of Physics: Conference Series*. 2020. IOP Publishing.
9. Udhaya, P.A. and M. Meena, *Albumen assisted green synthesis of NiFe2O4 nanoparticles and their physico-chemical properties.* Materials Today: Proceedings, 2019. 9: p. 528-534.
10. Patel, S., M. Saleem, and D. Varshney. *Structural and optical properties of NiFe2O4 synthesized via green technology*. in *AIP Conference Proceedings*. 2018. AIP Publishing LLC.

کنفرانس فیزیک ایران

دانشگاه قم – ۲ الی ۵ شهریور ۱۴۰۵

مجموعه مقالات شاخه

اپتیک و فوتونیک

www.psi.ir/f/physics1405

مهندسی تقارن در دولایه‌های دی‌کلکوژنیدهای فلزات واسطه: مطالعه پایداری و ساختار نواری MoS_2 و TaX_2 (X=S, Se)

منصوری ، معصومه [۱] ؛ قلمبر دزفولی، عبدالمحمد [۱و۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز،ایران

[۲] مرکزتحقیقات لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

چکیده

مهندسی تقارن از طریق کنترل انباشتگی در دولایه‌های دی‌کلکوژنیدهای فلزات واسطه، رویکردی مؤثر برای تنظیم خواص الکترونی و نوری این مواد است. در این پژوهش، پایداری ساختاری و خواص الکترونی پنج انباشتگی با تقارن بالا در دولایه‌های همگون MoS_2 ، TaS_2و $TaSe_2$ بررسی شد. نتایج انرژی بستگی نشان می‌دهد که درMoS_2 انباشتگی AA' و در TaS_2 و$TaSe_2$، انباشتگی AB پایدارترین ساختارها هستند. بررسی ساختار نواری، ماهیت نیم‌رسانای غیرمستقیم را برای انباشتگی‌های پایدار MoS_2 تأیید می‌کند. همچنین، جایگزینی گوگرد با سلنیوم در TaX_2 ، به دلیل شعاع اتمی بزرگ‌تر و الکترونگاتیویته کمترSe ، موجب کاهش پتانسیل کولنی مؤثر و جابه‌جایی نوار رسانش به انرژی‌های پایین‌تر می‌شود. افزون بر این، جرم بیشتر سلنیوم باعث کاهش پهنای نوارها در سطح فرمی و محدود شدن تحرک الکترون‌ها در $TaSe_2$ می‌گردد. این یافته‌ها راهگشای طراحی ادوات اپتوالکترونیک مبتنی بر این مواد دوبعدی است.

واژه های کلیدی: *دی‌کلکوژنیدهای فلزات واسطه، انباشتگی دولا یه، ساختار نواری، انرژی بستگی بین‌لا یه‌ای، مهندسی تقارن.*

Symmetry Engineering in Transition Metal Dichalcogenide Bilayers: A Study of Stability and Band Structure of MoS_2 and TaX_2 (X = S, Se)

Mansouri, Masoume[1]; Ghalambor Dezfuli, Abdol-Mohammad[1,2]

[1] *Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran*
[2] *Center for Research on Laser and Plasma, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran*

Abstract

Symmetry engineering via stacking control in transition metal dichalcogenide (TMDC) bilayers is an effective approach for tuning their electronic and optical properties. In this study, the structural stability and electronic properties of five high-symmetry stacking configurations in homogenous MoS_2, TaS_2, and $TaSe_2$ bilayers were investigated. Binding energy calculations reveal that the AA stacking is the most stable configuration in MoS_2, whereas the AB stacking exhibits the highest stability in both TaS_2 and $TaSe_2$. Band structure analysis confirms the indirect semiconducting nature of the stable MoS_2 stackings. Furthermore, substituting sulfur with selenium in TaX_2, due to the larger atomic radius and lower electronegativity of Se, reduces the effective Coulomb potential and shifts the conduction band to lower energies. Additionally, the higher atomic mass of selenium narrows the band width around the Fermi level, thereby restricting electron mobility in $TaSe_2$. These findings pave the way for the design of optoelectronic devices based on these two-dimensional materials.

Keywords*: Transition Metal Dichalcogenides (TMDCs), Bilayer Stacking, Band Structure, Interlayer Binding Energy, Symmetry Engineering.*

PACS No.81

مقدمه

تقارن ساختاری در مواد دوبعدی، به‌ویژه دی‌کلکوژنیدهای فلزات واسطه(TMDCs) ، نقش تعیین‌کننده‌ای در خواص الکترونی و نوری آن‌ها دارد [۱]. تک‌لایه‌های این مواد به دلیل نبود تقارن وارون، می‌توانند پدیده‌های نوری غیرخطی مانند تولید هماهنگ دوم (SHG) را نشان دهند[۲]. با این حال، پاسخ غیرخطی تک‌لایه‌ها معمولاً به علت محدودیت ضخامت و تضعیف برهم‌کنش‌های الکترون–حفره، ضعیف باقی می‌ماند[۵–۳]. از سوی دیگر، در برخی آرایش‌های دولایه، بسته به نوع انباشتگی، امکان حذف تقارن وارون نیز فراهم می‌شود [۲]. از این رو، مهندسی تقارن از طریق انتخاب نوع انباشتگی در ساختارهای دولایه، به‌ویژه در ساختارهای همگون و ناهمگون، رویکردی مؤثر برای کنترل خواص نوری و الکترونی این مواد به شمار می‌رود. این راهکار نه‌تنها امکان تنظیم‌پذیری دقیق شکاف نواری را فراهم می‌سازد، بلکه بستری مناسب برای طراحی ادوات اپتوالکترونیک با پاسخ‌دهی بهینه‌شده ایجاد می‌کند[۸–۶]. در این مقاله، پایدارترین انباشتگی در دولایه‌های همگون $BLMoS_2$ و $BLTaX_2(X=S,Se)$ تعیین شده و اثر انباشتگی‌های مختلف بر ساختار نواری و تقارن بررسی می‌شود.

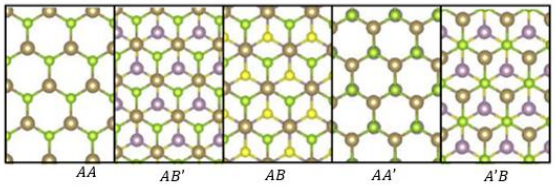
نتایج

در این پژوهش، ساختارهای دولایه همگون MX_2 با قرارگیری دو تک‌لایه یکسان بر روی یکدیگر شبیه‌سازی شدند. پارامترهای شبکه مطابق با مقادیر بهینه‌شده در جدول۱ در نظر گرفته شدند و با فرض عدم وابستگی محسوس ثابت شبکه به نوع توالی انباشتگی، این ثابت برای تمامی آرایش‌ها یکسان اعمال شد.

جدول۱: ثابت شبکه بهینه شده برای تک لایهٔ MX_2.

	1L-MoS_2	1L-TaS_2	1L-$TaSe_2$
a(Å)	۳٫۱۵۱	۳٫۳۴۰	۳٫۴۹۱

جهت بررسی اثرات تقارن، پنج پیکربندی انباشتگی با تقارن بالا، همان‌گونه که در شکل ۱ نشان داده شده است، مورد بررسی قرار گرفتند.

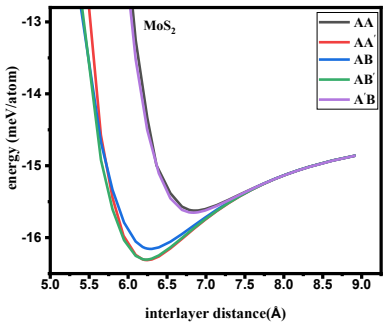


شکل۱: پنج انباشتگی با تقارن بالا برای دولایه‌های MX_2.

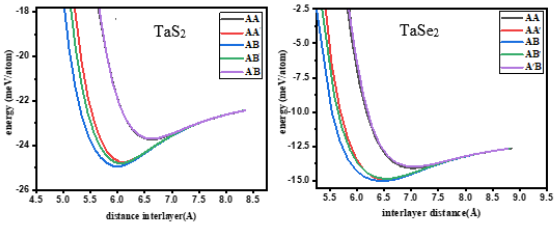
برای تعیین فاصله تعادل بین‌لایه‌ای، انرژی کل سامانه در بازه فاصله ۵ تا ۹ آنگستروم محاسبه شد و انرژی بستگی بین‌لایه‌ای (E_{bi}) مطابق رابطه زیر به‌دست آمد [۶]:

$$E_{bi} = \frac{E_{BL} - 2E_{1L}}{n}$$

در این رابطه، E_{BL} و E_L به‌ترتیب بیانگر انرژی کل دولایه و تک‌لایه، و n نشان‌دهنده تعداد اتم‌های سلول واحد دولایه است. ضریب ۲ در این رابطه ناشی از همگون بودن دو تک‌لایه تشکیل‌دهنده سامانه است. در نهایت، با رسم منحنی انرژی بستگی بر حسب فاصله بین‌لایه‌ای، کمینه انرژی به‌عنوان فاصله تعادل بهینه برای هر پیکربندی تعیین شد. در شکل ۲ انرژی بستگی بین لایه‌ای برای MoS_2 رسم شده است.



شکل۲: منحنی انرژی بستگی بین لایه‌ای بر حسب فاصله بین دولایه برای هر پنج انباشتگی MoS_2.

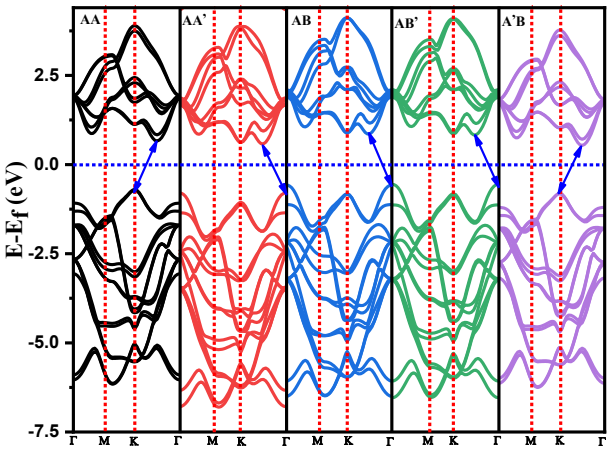


شکل۳: منحنی انرژی بستگی بین لایه‌ای بر حسب فاصله بین دولایه برای هر پنج انباشتگی $TaX_2(X=S,Se)$.

از منحنی انرژی بستگی بین لایه‌ای (شکل۲و۳) مشهود است که علی‌رغم وجود کمینه‌های مختلف هر پنج انباشتگی دارای رفتار مشابهی نسبت به تغییر فاصله می‌باشند.

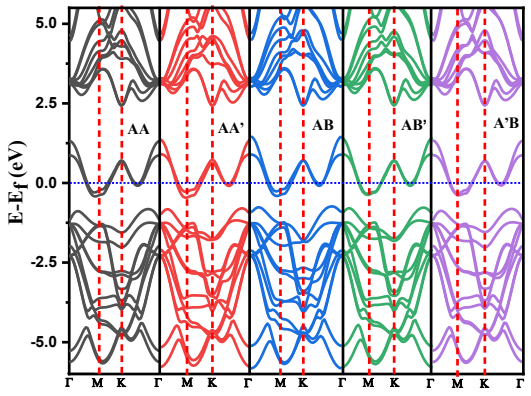
بررسی پایداری انباشتگی‌ها نشان می‌دهد که در تمامی سامانه‌های همگون، انباشتگی‌های AA′ ، AB و AB′ دارای انرژی بستگی کمتری نسبت به سایر آرایش‌ها بوده و به‌عنوان انباشتگی‌های پایدار شناخته می‌شوند، در حالی‌که انباشتگی AA و A′B پایداری کمتری از خود نشان می‌دهند. در دولایه MoS_2، انباشتگی‌های AA′ و AB انرژی بستگی بسیار نزدیکی دارند و هر دو از AB′ پایدارترند؛ به‌طوری‌که اختلاف انرژی آن‌ها با AB′ حدود ۰٫۱۶ الکترون ولت است. همچنین، اختلاف انرژی میان AA′ و AB تنها در حدود 10^{-3} می‌باشد؛ بنابراین، AA′ به‌عنوان پایدارترین پیکربندی در دولایه‌های $BLMoS_2$ در نظر گرفته می‌شود. در مقابل، برای دولایه‌های TaS_2 و $TaSe_2$ (یعنی TaX_2)، پیکربندی AB با انرژی بستگی حدود ۰٫۲ الکترون ولت کمتر از AA′ و AB′، پایدارترین ساختار به شمار می‌آید.

در این مرحله به منظور بررسی خواص الکترونی، ساختار نواری دولایه‌های همگون MoS_2 در امتداد نقاط پرتقارن (Γ-M-K-Γ) محاسبه و در محدودهٔ انرژی ۷٫۵- تا ۴٫۸ الکترون ولت در شکل ٤ رسم شده است.

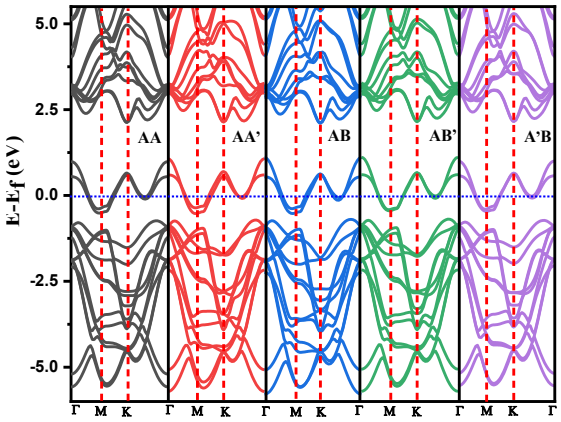


شکل٤: ساختار نواری پنج انباشتگی دولایه‌های همگون MoS_2.

همانطور که در شکل ٤ مشخص می‌باشد برای انباشتگی‌های پایدار بالاترین نوار ظرفیت در نقطهٔ Γ و پایین‌ترین نوار رسانش در مسیر Γ-K می‌باشد، در صورتی که برای انباشتگی‌های کمتر پایدار بالاترین نوار ظرفیت در نقطهٔ K و همچنان پایین‌ترین نوار رسانش در مسیر Γ-K می‌باشد. این دولایه‌ها نیمرسانای غیرمستقیم هستند. با توجه به تطبیق خوب بین نتایج ما و گزارش‌های ارائه شده برای دولایه‌های MoS_2، محاسبات مربوط به انباشتگی‌های مختلف دولایه‌های TaX_2 انجام شد. لازم به ذکر است که پنج انباشتگی مختلف این دولایه‌ها تاکنون مقایسه و بررسی نشده‌اند. ساختار نواری دولایه‌های همگون $TaX_2(X=S, Se)$ در امتداد نقاط پرتقارن (Γ-M-K-Γ) محاسبه و در محدودهٔ انرژی ۵- تا ۵ الکترون ولت در شکل‌های ۵ و ٦ رسم شده است.



شکل۵: ساختار نواری پنج انباشتگی دولایه‌های همگون TaS_2.



شکل۶: ساختار نواری پنج انباشتگی دولایه‌های همگون $TaSe_2$.

بر اساس نتایج محاسبات ساختار نواری برای ترکیبات TaX2، جایگزینی اتم گوگرد با سلنیوم (مقایسه TaS_2 و $TaSe_2$) منجر به دو تغییر بنیادین در خواص الکترونی این مواد می‌شود. نخست آنکه به دلیل شعاع اتمی بزرگ‌تر و الکترونگاتیویته کمتر سلنیوم، پوشش الکتروستاتیکی قوی‌تری روی بارهای مثبت هسته‌های تانتالوم ایجاد می‌شود؛ این پوششِ بهتر، پتانسیل کولنیِ موثرِ بین الکترون‌ها و هسته را کاهش داده و باعث جابه‌جایی نوار رسانش به سمت انرژی‌های پایین‌تر (کاهش CBM) می‌گردد که در نتیجه آن، الکترون‌ها برای تحریک به انرژی کمتری نیاز خواهند داشت. دوم آنکه به واسطه جرم اتمی بیشتر سلنیوم، دینامیک و تحرک الکترون‌ها در شبکه محدود می‌شود که این امر خود را به صورت کاهش پهنای نوارها در اطراف سطح فرمی در $TaSe_2$ نسبت به TaS_2 نشان می‌دهد.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، اثرات تقارن انباشتگی بر پایداری ساختاری و خواص الکترونی دولایه‌های همگون MoS_2 و TaX_2 به‌صورت محاسباتی مورد بررسی قرار گرفت .بررسی ساختار نواری ماهیت نیم‌رسانای غیرمستقیم را برای انباشتگی‌های پایدار MoS_2 تأیید کرد. یافته‌های کلیدی این مطالعه در مقایسه خانواده TaX_2 آشکار ساخت که جایگزینی اتم گوگرد با سلنیوم، به واسطه شعاع اتمی بزرگ‌تر و الکترونگاتیویته کمتر، موجب تقویت پوشش الکتروستاتیکی هسته تانتالوم، کاهش پتانسیل کولنی مؤثر و در نتیجه جابه‌جایی نوار رسانش به سمت انرژی‌های پایین‌تر می‌گردد. همچنین، افزایش جرم اتمی سلنیوم با کاهش پهنای نوارها در اطراف سطح فرمی، تحرک‌پذیری الکترون‌ها را در $TaSe_2$ محدود می‌کند. این نتایج نشان می‌دهد که مهندسی همزمان «نوع انباشتگی» و «ترکیب شیمیایی کالکوژن»، ابزاری قدرتمند برای تنظیم تقارن، شکاف نواری و خواص انتقالی در مواد دوبعدی است و می‌تواند راهگشای طراحی ادوات اپتوالکترونیک و نانوفتونیک نسل جدید مبتنی بر این خانواده از مواد باشد.

قدردانی و تشکر

بدین‌وسیله از دانشگاه شهید چمران اهواز به خاطر حمایت از تمامی مراحل تحقیق انجام شده، تشکر و قدردانی می‌شود.

مرجع‌ها

[۱] X. Guo, W. Lyu, T. Chen, Y. Luo, C. Wu, B. Yang, Q. Dai, et al.; "Polaritons in van der Waals heterostructures"; Adv. Mater. **35**, No. 17 (2023) 2201856.
[۲] S. H. Oh, H. Altug, X. Jin, T. Low, S. J. Koester, A. P. Ivanov, M. S. Strano, et al.; "Nanophotonic biosensors harnessing van der Waals materials"; Nat. Commun. **12**, No. 1 (2021) 3824.
[۳] H. Hong, C. Wu, Z. Zhao, Y. Zuo, J. Wang, C. Liu, J. Xiong, et al.; "Giant enhancement of optical nonlinearity in two-dimensional materials by multiphoton-excitation resonance energy transfer from quantum dots"; Nat. Photonics **15**, No. 7 (2021) 510-515.
[۴] J. Zeng, J. Li, H. Li, Q. Dai, S. Tie, and S. Lan; "Effects of substrates on the nonlinear optical responses of two-dimensional materials"; Opt. Express **23**, No. 25 (2015) 31817-31827.
[۵] J. Yin, C. Tan, D. Barcons-Ruiz, I. Torre, K. Watanabe, T. Taniguchi, F. H. Koppens, et al.; "Tunable and giant valley-selective Hall effect in gapped bilayer graphene"; Science **375**, No. 6587 (2022) 1398-1402.
[۶] X. Zou, C. W. Huang, L. Wang, L. J. Yin, W. Li, J. Wang, L. Liao, et al.; "Dielectric engineering of a boron nitride/hafnium oxide heterostructure for high performance 2D field effect transistors"; Adv. Mater. **28**, No. 10 (2016) 2062-2069.
[۷] Y. Li, J. Sun, Y. Zhang, Y. Wang, Q. You, L. Kong, and T. Deng; "High-Performance Photodetectors Based on Graphene/MoS_2 Heterojunction FETs"; IEEE Sens. J. **23**, No. 1 (2023) 293-299.
[۸] I. C. Gerber, E. Courtade, S. Shree, C. Robert, T. Taniguchi, K. Watanabe, B. Urbaszek, et al.; "Interlayer excitons in bilayer MoS2 with strong oscillator strength up to room temperature"; Phys. Rev. B **99**, No. 3 (2019) 035443.

تنظیم‌پذیری پاشندگی سرعت گروه در دی‌کالکوژنیدهای $TaX_2(X=S,Se)$: نقش مهندسی ضخامت و کالکوژن

منصوری ، معصومه [۱] ؛ قلمبر دزفولی، عبدالمحمد[۱و۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز،ایران
[۲] مرکزتحقیقات لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

چکیده

در این پژوهش، خواص پاشندگی نوری ترکیبات $TaX_2(X=S,Se)$ درفاز $2H_a$ با استفاده از محاسبات اصول اولیه بررسی شد. مولفهٔ درون صفحه ضریب شکست $n(\lambda)$ شاخص گروه $n_g(\lambda)$ و مشتق دوم ضریب شکست $d^2n/d\lambda^2$ برای ساختارهای انبوهه، دولایه و تک‌لایه محاسبه گردید. نتایج نشان می‌دهد کاهش ضخامت به تک‌لایه دامنه نوسانات n_g را در ناحیه فرابنفش ملایم‌تر و منظم‌تر کرده و موقعیت طیفی نقاط پاشندگی صفر (ZDW) موجود را جابه‌جا می‌کند. همچنین، جایگزینی S با Se به دلیل قطبش‌پذیری بالاتر، موجب جابه‌جایی موقعیت ZDW ها به سمت طول موج بلندتر می‌شود. این نتایج قابلیت تنظیم همزمان پاشندگی از طریق مهندسی ضخامت و انتخاب کالکوژن را تایید کرده و شرایط لازم برای تحقق تطابق فاز در فرایندهایی نظیر اختلاط چهار موج و تولید پیوستار فوق‌عریض را فراهم می‌کند.

واژه های کلیدی: *TaS_2، $TaSe_2$، پاشندگی نوری، نقطه پاشندگی صفر، شاخص گروه، نانوساختار، دی‌کالکوژنید فلزات واسطه.*

Tunability of Group Velocity Dispersion in TaX_2 (X=S,Se) Transition Metal Dichalcogenides: The Role of Thickness and Chalcogen Engineering

Mansouri, Masoume[1]; Ghalambor Dezfuli, Abdol-Mohammad[1,2]

[1] Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran
[2] Center for Research on Laser and Plasma, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran

Abstract

In this study, the optical dispersion properties of TaX_2 (X = S, Se) compounds in the 2H phase were investigated using first-principles calculations. The in-plane components of the refractive index $n(\lambda)$, group index $n_g(\lambda)$, and the second derivative of the refractive index $d^2n/d\lambda^2$ were calculated for bulk, bilayer, and monolayer structures. The results indicate that reducing the thickness to a monolayer makes the amplitude of n_g oscillations in the ultraviolet region smoother and more regular, and shifts the spectral position of the existing zero-dispersion wavelengths (ZDWs). Furthermore, the substitution of S with Se, due to its higher polarizability, causes the spectral position of the ZDWs to shift toward longer wavelengths. These results confirm the simultaneous tunability of dispersion through thickness engineering and chalcogen selection, providing the necessary conditions for achieving phase matching in processes such as four-wave mixing and supercontinuum generation.

Keywords*: TaS_2, $TaSe_2$, Optical Dispersion, Zero Dispersion Wavelength (ZDW), Group Index, Nanostructure, Transition Metal Dichalcogenide (TMD).*

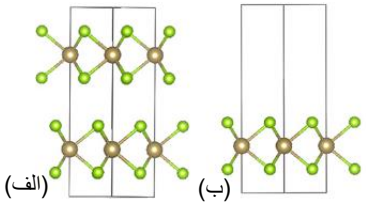
PACS No.81

مقدمه

دی‌کالکوژنیدهای فلزات واسطه (TMDs) به‌دلیل پیوندهای کووالانسی قوی درون‌لایه‌ای و واندروالسی ضعیف بین‌لایه‌ای، قابلیت لایه‌برداری تا حد تک‌لایه را داشته و خواص الکترونی-نوری آن‌ها به‌شدت وابسته به تعداد لایه‌هاست [۱]. در میان آن‌ها، فاز $2H_a$ ترکیبات $TaX_2(X=S,Se)$ به‌دلیل پرشدگی ناقص اوربیتال d_{z^2} تانتالوم (برخلاف MoS_2)، فاقد شکاف نواری بوده و رفتار فلزی از خود نشان می‌دهند. این ساختار، گذارهای بین‌نواری مشخصی در ناحیه فرابنفش-مرئی (UV-Vis) ایجاد می‌کند [۲-٤]. همچنین، جایگزینی S با Se به‌دلیل شعاع اتمی بزرگ‌تر و قطبش‌پذیری بالاتر، تابع دی‌الکتریک را تقویت کرده و موجب جابجایی به سمت طول موج‌های بلندتر در پاسخ پاشندگی می‌شود [۳]. پاشندگی سرعت گروه (GVD) از پارامترهای کلیدی در طراحی موج‌برهای غیرخطی و تولید سالیتون‌های نوری است. در این میان، نقاط پاشندگی صفر (ZDW) که مرز میان رژیم‌های پاشندگی عادی و غیرعادی را تعیین می‌کنند، از اهمیت ویژه‌ای برخوردارند [۵]. در این پژوهش، پاشندگی نوری ساختارهای انبوهه، دولایه و تک‌لایهٔ $TaX_2(X=S,Se)$ با محاسبات اصول اولیه (DFT) بررسی شد. اگرچه تنظیم‌پذیری پاشندگی با ضخامت در TMDها (مانند MoS_2 و WS_2) پیش‌تر بررسی شده است [٦و۱]، اما رفتار پاشندگی TMDهای فلزی مانند TaX_2 به دلیل ساختار نواری متفاوت (فاقد شکاف نواری) تاکنون گزارش نشده است. این پژوهش با تمرکز بر $2H\text{-}TaX_2$، شکاف تحقیقاتی موجود در مطالعات پیشین را پر می‌کند. سه ویژگی متمایزکننده این کار عبارتند از: (۱) شناسایی چندین نقطه پاشندگی صفر (ZDW) در ناحیه فرابنفش برای TaX_2، (۲) کمی‌سازی اثر جایگزینی کالکوژن (S→Se) بر جابه‌جایی ZDWها و (۳) نشان دادن قابلیت تنظیم همزمان GVD از طریق مهندسی «ضخامت» و «انتخاب کالکوژن» برای کاربردهای فوتونیک نانومقیاس، با محاسبهٔ شاخص گروه $n_g(\lambda)$ و مشتق دوم ضریب شکست $d^2n/d\lambda^2$ است.

نتایج

$TaX_2(X=S,Se)$ متشکل از لایه‌های X-Ta-X، در حالت انبوهه با ساختار $2H_a$ مورد مطالعه قرار می‌گیرد. در این ساختار اتم‌های Ta از یک لایه مستقیما بالای اتم‌های Ta در لایه دیگر قرار دارند [٤]. ساختار هندسی مربوط به انبوهه و تک‌لایه $TaX_2(X=S,Se)$ در شکل ۱ نمایش داده شده است.



شکل ۱: (الف) انبوهه و (ب) تک‌لایه‌ای از $TaX_2(X=S,Se)$.

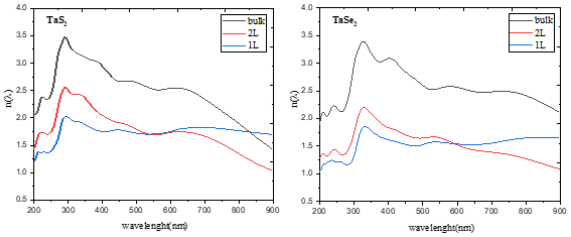
در این بخش، نتایج حاصل از محاسبات برای ضریب شکست $n(\lambda)$، شاخص گروه $n_g(\lambda)$ و پاشندگی سرعت گروه (GVD) برای ساختارهای انبوهه، دولایه (2L) و تک‌لایه (1L) برای $TaX_2(X=S,Se)$ ارائه می‌شود. شاخص گروه، که نسبت سرعت نور در خلأ به سرعت گروه بستهٔ موج را توصیف می‌کند، از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید [۷]:

$$n_g(\lambda) = n(\lambda) - \lambda \frac{dn}{d\lambda} \qquad (۱)$$

جمله دوم این رابطه سهم پاشندگی مادی را نشان می‌دهد؛ به طوری که در نواحی طیفی که $dn/d\lambda>0$ (پاشندگی غیرعادی)، شاخص گروه از ضریب شکست کمتر می‌شود و بالعکس. همچنین، پاشندگی سرعت گروه (GVD) از مشتق دوم ضریب شکست نسبت به طول موج مطابق رابطهٔ زیر محاسبه می‌شود [۵]:

$$GVD \propto \frac{d^2n}{d\lambda^2} \qquad (۲)$$

نقاط صفر این کمیت (ZDW)، مرز میان رژیم‌های پاشندگی عادی و غیرعادی را مشخص می‌کنند. در شکل ۲ ضریب شکست برای ساختارهای انبوهه، دولایه و تک‌لایه $TaX_2(X=S,Se)$ نمایش داده شده است.



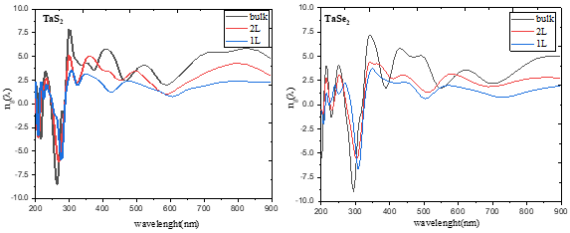
شکل۲: ضریب شکست برای ساختارهای انبوهه، دولایه و تک‌لایهٔ $TaX_2(X=S,Se)$.

نمودارهای ضریب شکست درون‌صفحه (شکل۲) نشان می‌دهند که با کاهش ضخامت از انبوهه به تک‌لایه، دامنه پیک‌های تشدیدی ناحیه UV به دلیل محدودیت کوانتومی و کاهش چگالی حالت‌های الکترونی به‌طور محسوسی افت می‌کند. بزرگترین پیک در ناحیهٔ UV برای $TaX_2(X=S,Se)$ در سه ساختار انبوهه، دولایه و تک‌لایه در جدول ۱ نمایش داده شده است.

جدول۱: مقدار ضریب شکست در در طول موج ۶۰۰nm برای $TaX_2(X=S,Se)$.

	bulk	2L	1L
TaS_2	۲٫۵۴	۱٫۷۹	۱٫۶۵
Exp.[۸]	۲٫۹۸	۲٫۱۱	-
$TaSe_2$	۲٫۲۳	۱٫۵۱	۱٫۴۱
Exp.[۹]	۲٫۷۶	۱٫۶۹	-

در مقابل، جایگزینی S با Se به دلیل شعاع اتمی بزرگ‌تر و قطبش‌پذیری بالاتر، موجب جابه‌جایی پیک‌ها به سمت طول موج‌های بلندتر (~۳۰ نانومتر)، کاهش دامنه و نرم‌شدن پاسخ دی‌الکتریک می‌گردد. این نتایج، قابلیت تنظیم همزمان ضریب شکست و موقعیت رزونانس‌ها را از طریق مهندسی ضخامت و ترکیب کالکوژنی برای ادوات فوتونیک تأیید می‌کند. شکل۳، شاخص گروه درون‌صفحه را برای ساختارهای انبوهه، دولایه و تک‌لایه $TaX_2(X=S,Se)$ نشان می‌دهند.



شکل ۳: شاخص گروه برای ساختارهای انبوهه، دولایه و تک‌لایهٔ $TaX_2(X=S,Se)$.

در هر دو ماده، با کاهش ضخامت از انبوهه به تک‌لایه، دامنه نوسانات n_g در ناحیه فرابنفش ($\lambda<400$ nm) به‌طور محسوسی کاهش می‌یابد (از حدود ±۷٫۵ در انبوهه به ± ٤ در تک‌لایه) که ناشی از محدودیت کوانتومی و گسسته‌شدن ترازهای انرژی است. در ساختار انبوهه، چگالی بالای حالت‌های الکترونی و گذارهای بین‌نواری متعدد باعث نوسانات شدید و تیز n_g می‌شود، اما در تک‌لایه این نوسانات ملایم‌تر، پهن‌تر و منظم‌تر می‌گردند .نکته قابل‌توجه، وجود چندین نقطه عبور از صفر (ZDW) در ناحیه UV است که نشان‌دهنده تناوب بین رژیم‌های پاشندگی عادی ($n_g>0$) و غیرعادی ($n_g<0$) می‌باشد. اگرچه تعدادZDWها در هر سه ساختار تقریباً ثابت است، اما موقعیت طیفی آن‌ها با کاهش ضخامت جابجا می‌شود که امکان تنظیم رژیم پاشندگی را فراهم می‌آورد. در جدول ۲ و ۳ تعداد ZDW در طول موج‌های مربوطه برای سه ساختار انبوهه، دولایه و تک‌لایهٔ $TaX_2(X=S,Se)$ نمایش داده شده است.

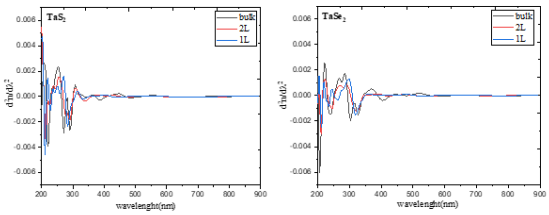
جدول۲: ZDWها در سه ساختار انبوهه، دولایه و تک‌لایهٔ TaS_2.

bulk	2L	1L
۲۰۸nm	۲۰۱nm	۲۰۳nm
۲۲۱nm	۲۱۵nm	۲۱۲nm
۲۴۶nm	۲۴۹nm	۲۵۰nm
۲۸۶nm	۲۸۶nm	۲۸۸nm

جدول۳: ZDWها در سه ساختار انبوهه، دولایه و تک‌لایهٔ $TaSe_2$.

bulk	2L	1L
۲۰۸nm	۲۰۹nm	۲۱۲nm
۲۲۵nm	۲۲۷nm	۲۲۲nm
۲۳۵nm	۲۳۶nm	۲۲۶nm
۲۶۹nm	۲۷۲nm	۲۸۷nm
۳۲۰nm	۳۲۴nm	۳۲۶nm

همچنین، با کاهش ضخامت از انبوهه به تک‌لایه، شکل و دامنه نوسانات n_g تغییر می‌کند که بازتاب تأثیر محدودیت کوانتومی بر گذارهای بین‌نواری است.در مقایسه $TaSe_2$ با TaS_2، موجب جابه‌جایی به سمت طول موج‌های بلندتر ۲۰ تا ۳۰ نانومتری ویژگی‌های طیفی مشاهده می‌شود که هم‌راستا با رفتار ضریب شکست و ناشی از قطبش‌پذیری بالاتر Se است. همچنین، در ناحیه مرئی–فروسرخ ($\lambda>500$ nm)، نوسانات n_g به‌تدریج میرا شده و به مقادیر مثبت و نسبتاً پایدار (حدود ۱٫۵ تا ۳) همگرا می‌شوند که نشان‌دهنده پاشندگی ضعیف و نزدیک‌شدن رفتار ماده به رژیم غیرپاشنده در این ناحیه است. این رفتارهای پاشندگی قابل‌تنظیم، همراه با وجود نواحی گسترده پاشندگی غیرعادی ($n_g<0$)در تک‌لایه، شرایط ایده‌آلی برای تحقق تطابق فاز در فرایندهای غیرخطی مانند اختلاط چهارموج و تولید سالیتون‌های اپتیکی فراهم می‌آورند. شکل ٤ مشتق دوم ضریب شکست درون‌صفحه $d^2n/d\lambda^2$ را برای ساختارهای انبوهه، دولایه و تک‌لایه $TaX_2(X=S,Se)$ نشان می‌دهند.



شکل ٤ : پاشندگی سرعت گروه (GVD) برای ساختارهای انبوهه، دولایه و تک‌لایه $TaX_2(X=S,Se)$.

در هر دو ماده، نوسانات شدید این کمیت صرفاً در ناحیه فرابنفش ($\lambda<400$ nm) متمرکز است و در طول‌موج‌های مرئی و فروسرخ نزدیک ($\lambda>500$ nm) به سرعت به سمت صفر میل می‌کند که نشان‌دهنده پاشندگی ضعیف در این ناحیه است. این رفتار بیانگر وجود چندین نقطه پاشندگی صفر (ZDW) در ناحیه UV است که مرز بین رژیم‌های پاشندگی عادی ($d^2n/d\lambda^2>0$) و غیرعادی ($d^2n/d\lambda^2<0$)را مشخص می‌کنند. با کاهش ضخامت از انبوهه به تک‌لایه، موقعیت این ZDWها جابجایی محسوسی دارد که امکان تنظیم رژیم پاشندگی را فراهم می‌آورد. نکته قابل‌توجه این است که دامنه نوسانات در هر دو ماده تقریباً یکسان (حدود ۰٫۰۰۶ ±) است، اما توزیع نوسانات متفاوت است: در TaS_2 نوسانات مثبت غالب‌ترند (قله‌های مثبت تا~ ۰٫۰۰۶)، در حالی که در $TaSe_2$ نوسانات منفی غالب‌ترند (دره‌های منفی تا ~۰٫۰۰۶-) این جابجایی تقارن ناشی از قطبش‌پذیری بالاتر Se و نرم‌شدن پاسخ دی‌الکتریک است که توزیع قدرت اپتیکی را به سمت طول‌موج‌های بلندتر منتقل می‌کند. این نتایج نشان می‌دهند که مهندسی همزمان ضخامت و ترکیب کالکوژنی، ابزار مؤثری برای تنظیم GVD و موقعیت ZDW ها در این نانوساختارها فراهم می‌آورد.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، پاشندگی نوری مؤلفهٔ درون‌صفحهٔ نانوساختارهای $TaX_2(X=S,Se)$ در بازهٔ ۲۰۰ تا ۹۰۰ نانومتر، با محاسبات اصول اولیه (DFT) بررسی شد. نتایج نشان داد که کاهش ضخامت از انبوهه به تک‌لایه، به دلیل تقویت محدودیت کوانتومی، منجر به کاهش دامنه پیک‌های تشدیدی ضریب شکست، باریک‌شدن آن‌ها و جابجایی آبی در ناحیهٔ فرابنفش می‌شود. همزمان، دامنهٔ نوسانات شاخص گروه (n_g) در این ناحیه تغییر یافته و نقاط پاشندگی صفر (ZDW) متعدد و قابل‌تنظیمی پدید می‌آیند. جایگزینی گوگرد با سلنیوم، به دلیل شعاع اتمی بزرگ‌تر و قطبش‌پذیری بالاتر Se، موجب موجب جابه‌جایی به سمت طول موج‌های بلندتر پیک‌های طیفی (به میزان ۲۰ تا ۳۰ نانومتر)، کاهش دامنهٔ نوسانات GVD و نرم‌شدن پاسخ دی‌الکتریک می‌گردد. وجود نواحی گستردهٔ پاشندگی غیرعادی (GVD<0) در بازهٔ UV-Vis، همراه با قابلیت تنظیم دقیق موقعیت ZDWها، این نانوساختارها را به کاندیداهای مناسبی برای طراحی موج‌برهای فوتونیک غیرخطی، تولید سالیتون‌های اپتیکی و اختلاط چهارموج تبدیل می‌کند. در مجموع، مهندسی همزمان ضخامت و نوع کالکوژن، ابزار قدرتمندی برای کنترل رژیم پاشندگی در ادوات نانوفتونیک فراهم می‌آورد.

قدردانی و تشکر

بدین‌وسیله از دانشگاه شهید چمران اهواز به خاطر حمایت از تمامی مراحل تحقیق انجام شده، تشکر و قدردانی می‌شود.

مرجع‌ها

[1] M. F. Hossen, S. Shendokar, and S. Aravamudhan; "Defects and defectengineering of two-dimensional transition metal dichalcogenide (2DTMDC) materials"; Nanomaterials **14**, No. 5 (2024) 410..
[2] U. Haq, Mustaqeem, B. Ali, M. U. Ashraf, U. Khan, M. Idrees, and B. Amin; "Layer-dependent Schottky contact at TaX_2–BY (X= S, Se, Te; Y= P, As, Sb) van der Waals interfaces"; Nanoscale Advances 7, No. **3** (2025) 808-818.
[3] Islam, S. M. Mominuzzaman, and A. Zubair; "Tunable valley polarization and anomalous hall effect in ferrovalley NbX_2 and TaX_2 (X= S, Se, Te): A first-principles study"; Applied Surface Science (2025) 165094.
[4] M. Mansouri and A. M. Ghalambor Dezfuli; "DFT and DFT-D based investigations of bulk and monolayer TaX_2 (X= S, Se) structural, electrical, and mechanical properties"; Computational Materials Science **245**, No. 2 (2025) 115432.
[5] W. Liang, A. A. Savchenkov, V. S. Ilchenko, D. Eliyahu, D. Seidel, A. B. Matsko, and L. Maleki; "Generation of a coherent near-infrared Kerr frequency comb in a monolithic microresonator with normal GVD"; Optics Letters **39**, No. 10 (2014) 2920-2923.
[6] G. A. Ermolaev, Y. V. Stebunov, A. A. Vyshnevyy, D. E. Tatarkin, D. I. Yakubovsky, S. M. Novikov, and V. S. Volkov; "Broadband optical properties of monolayer and bulk MoS2"; npj 2D Materials and Applications **4**, No. 1 (2020) 21.
[7] A. Autere, H. Jussila, Y. Dai, Y. Wang, H. Lipsanen, and Z. Sun; "Nonlinear Optics with 2D Layered Materials"; Advanced Materials **30**, No. 24 (2018) 1705963.
[8] P. Lazar, J. Martincová, and M. Otyepka; "Structure, dynamical stability, and electronic properties of phases in TaS_2 from a high-level quantum mechanical calculation"; Physical Review B **92**, No. 22 (2015) 224104.
[9] S. Chowdhury, J. R. Simpson, T. L. Einstein, and A. R. Hight Walker; "Strain-controlled magnetic and optical properties of monolayer 2H-$TaSe_2$"; Physical Review Materials **3**, No. 8 (2019) 084004.

برآورد تضعیف انرژی خورشیدی توسط ابرها و هواویزها در ایران با استفاده از داده‌های بازتحلیل

قمری، خبات[۱]؛ علی اکبری بیدختی، عباسعلی[۱]؛ ثابت‌قدم، سمانه[۱]؛ سیدزاهدی، سیده ئەسرین[۲]

[۱] *موسسه ژئوفیزیک دانشگاه تهران ،*

[۲] *گروه فیزیک، دانشگاه کردستان.*

چکیده

در این مطالعه، میانگین ۲۰ ساله (۲۰۲۳-۲۰۰٤) تابش خورشیدی سطحی (SSRD) و سهم جداگانه ابرها و ذرات معلق (هواویزها) در تضعیف آن برای کل کشور. با استفاده از داده‌های بازتحلیل ERA5 محاسبه و چهار نقشه اصلی شامل تابش دریافتی سطح، تضعیف کل، تضعیف ناشی از ابرها و تضعیف ناشی از هواویزها و گازهای جوی تهیه شده است. نتایج نشان می‌دهد که مناطق خشک مرکزی و جنوب شرقی بیشترین تابش سالانه (بیش ازKWh/m^2day ۵.۵) و کمترین تضعیف کل (حدود ۳۰ درصد) را دارا هستند. در مقابل، نوار ساحلی دریای کاسپین با تابش کمتر از KWh/m^2day ٤.۵ ، بیشترین تضعیف را تجربه می‌کند (٤۳ درصد) که سهم ابرها در آن حدود سه برابر مناطق جنوبی است. همچنین برای ۱۳ شهر برگزیده ، مقادیر تضعیف و تغییرات ماهانه تابش استخراج شده است. این یافته‌ها می‌تواند مبنایی علمی برای اولویت‌بندی مناطق مستعد ساخت نیروگاه‌های خورشیدی را فراهم کند.

.واژه های کلیدی: *تابش خورشیدی سطحی، پوشش ابر، هواویزهای جوی ، داده‌های بازتحلیل ERA5، انرژی خورشیدی*

Estimating solar energy attenuation by clouds and aerosols in Iran using reanalysis data

Ghamari, Khabat[1]; Aliakbari Bidokhti, Abbas-Ali[1]; Sabetghadam, Sameneh[1]; Seyedzahedi, Asrin[2]

[1]Geophysics Institute, University of Tehran

[2] Department of Physics, University of Kurdistan

Abstract

In this study, the 20-year mean (2004–2023) of Surface Solar Radiation (SSRD) and the separate contributions of clouds and aerosols to its attenuation over Iran are calculated using ERA5 reanalysis data. Four main maps are generated: surface incoming radiation, total attenuation, cloud-induced attenuation, and aerosol+gas attenuation. The results show that the central arid and southeastern regions receive the highest annual radiation (>5.5 kWh/m²/day) and the lowest total attenuation (~30%). In contrast, the Caspian Sea coastal strip experiences less than 4.5 kWh/m²/day and the highest attenuation (43%), where the cloud contribution is about three times higher than in the southern regions. For 13 selected cities, attenuation values and monthly radiation variability are extracted. These findings can provide a scientific basis for prioritizing suitable areas for solar power plant construction.

***Keywords**: Surface Solar Radiation, Cloud cover, Atmospheric aerosols, ERA5 reanalysis, Solar energy*

PACS No.

مقدمه

افزایش تقاضای انرژی و تغییرات اقلیمی، گذار به انرژی‌های پایدار را به اولویتی جهانی تبدیل کرده است [۱]. انرژی خورشیدی به دلیل پتانسیل بالا و مزایای زیست‌محیطی، یکی از ارکان اصلی تأمین انرژی آینده است[۲]. با این حال، تغییرپذیری تابش خورشیدی سطحی تحت تأثیر ابرها و ذرات معلق، برنامه‌ریزی بلندمدت نیروگاه‌های خورشیدی را با عدم قطعیت روبه‌رو می‌سازد.

مطالعات پیشین در ایران یا به برآورد ایستای پتانسیل خورشیدی پرداخته‌اند [۷-۳] و یا اثرات گردوغبار را بررسی کرده‌اند [۸]، اما

هیچ مطالعه‌ای سهم جداگانه ابرها و هواویزها را در میانگین بلندمدت تابش سطحی ایران جدا نکرده است. پر کردن این خلأ برای کشوری که هم در کمربند پرتابش خورشیدی قرار دارد و هم با چالش‌های تغییر اقلیم، آلودگی هوا و گردوغبار مواجه است [۹]، ضروری می‌باشد. سهم کمتر از ۱ درصدی انرژی‌های تجدیدپذیر در سبد برق ایران [۷]، لزوم برنامه‌ریزی علمی برای توسعه انرژی خورشیدی را دوچندان می‌کند.

هدف این مطالعه، ارائه اطلس میانگین ۲۰ ساله تابش سطحی و تضعیف ناشی از ابرها و هواویزها در ایران است. بدین منظور، با استفاده از داده‌های ERA5، سه مؤلفه تابش در بالای جو، تابش در آسمان صاف و تابش واقعی استخراج و نقشه‌های تضعیف ترسیم شده است. این پژوهش به دنبال پاسخ به این پرسش‌هاست: الگوی مکانی تابش سطحی در کدام مناطق بیشینه و کمینه است؟ سهم نسبی ابرها و هواویزها در تضعیف تابش در مناطق مختلف چقدر است و کدام عامل غالب می‌باشد؟ مقادیر تضعیف در شهرهای برگزیده چگونه است؟ و در نهایت، این یافته‌ها چه پیامدهایی برای اولویت‌بندی مناطق مستعد ساخت نیروگاه‌های خورشیدی دارد؟

داده ها و روش تحقیق

داده‌های این پژوهش از بانک بازتحلیل ERA5 مرکز اروپایی پیش‌بینی میان‌مدت جوّی (ECMWF) با وضوح مکانی ۰٫۲۵° و گام زمانی ساعتی استخراج شده است. دسترسی به داده‌ها از طریق پایگاه داده اقلیمی کوپرنیک به آدرس زیر امکان‌پذیر است[۱۰]:

https://cds.climate.copernicus.eu

بازتحلیل روشی است که داده‌های مشاهداتی (ایستگاهی، ماهواره‌ای و...) را با خروجی مدل‌های عددی جوّ ترکیب می‌کند. به این دلیل بازتحلیل نامیده می‌شود که داده‌های پراکنده و ناهمگون مشاهداتی، با استفاده از قوانین فیزیک جوّ، دوباره تحلیل و بازسازی می‌شوند تا مجموعه‌ای منسجم،و بدون شکاف مکانی–زمانی ایجاد گرد ERA5یکی از معتبرترین این مجموعه‌ها است.

سه متغیر کلیدی شامل: تابش در بالای جو[1] (TISR)، تابش سطحی در شرایط آسمان صاف[2] (SSRDc) و تابش سطحی در شرایط واقعی (SSRD) معادل GHI می‌باشند.

پس از استخراج، داده‌های ساعتی به میانگین روزانه (کیلووات ساعت بر مترمربع در روز) تبدیل و سپس میانگین ۲۰ ساله (۲۰۰٤–۲۰۲۳) برای هر سلول شبکه محاسبه شد. کلیه پردازش‌ها با استفاده از پایتون و کتابخانه‌های NumPy، Matplotlib، netCDF4 و Basemap انجام شده است.

برای جدا کردن سهم ابرها و هواویزها در تضعیف تابش، سه شاخص درصدی به صورت زیر محاسبه گردید [۵]:

- **درصد تضعیف کل**(تضعیف توسط کل جو شامل گازها، هواویزها و ابر) = $\frac{(TISR - SSRD)}{TISR} \times ۱۰۰$
- **درصد تضعیف توسط ابر** (تفاوت بین شرایط بدون ابر و شرایط واقعی) = $\frac{(SSRDc - SSRD)}{TISR} \times ۱۰۰$
- **درصد تضعیف توسط گازها و هواویزها** (تضعیف در شرایط بدون ابر) = $\frac{(TISR - SSRDc)}{TISR} \times ۱۰۰$

گفتنی است که به دلیل همبستگی بالقوه میان پوشش ابر و غلظت هواویزها (برای نمونه، هواویزها می‌توانند به عنوان هسته‌های تراکم ابر عمل کرده و ویژگی‌های ابر را تغییر دهند)، مقادیر به‌دست‌آمده به عنوان تخمین نسبی در نظر گرفته می‌شوند. با این حال، این روش برای مقایسه منطقه‌ای و شناسایی عامل غالب در هر ناحیه از اعتبار کافی برخوردار است.

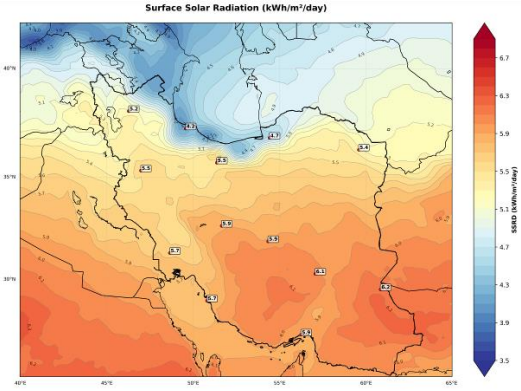
برای تحلیل منطقه‌ای، ۱۳ شهر برگزیده (تهران، اصفهان، اهواز، بندرعباس، بوشهر، زاهدان، سنندج، تبریز، رشت، گرگان، مشهد، یزد، کرمان) در نظر گرفته شد. برای هر شهر، نزدیک‌ترین سلول شبکه به مختصات جغرافیایی آن یافت شد و مقادیر میانگین سالانه تابش و تضعیف استخراج گردید. همچنین تغییرات فصلی تابش با محاسبه میانگین ماهانه ۲۰ ساله برای هر شهر به دست آمد.

نتایج

شکل ۱ الگوی مکانی میانگین بلندمدت تابش خورشیدی سطحی (SSRD) را در بازه زمانی۲۰۰٤ تا ۲۰۲۳ نشان می‌دهد. نواحی جنوب و جنوب‌شرقی ایران (استان‌های سیستان و بلوچستان، کرمان، هرمزگان، بوشهر، جنوب اصفهان و شرق فارس) با بیشینه تابش روزانه بالای ۵.۵ کیلووات‌ساعت بر مترمربع، بیشترین پتانسیل خورشیدی را دارند که ناشی از روزهای آفتابی فراوان،

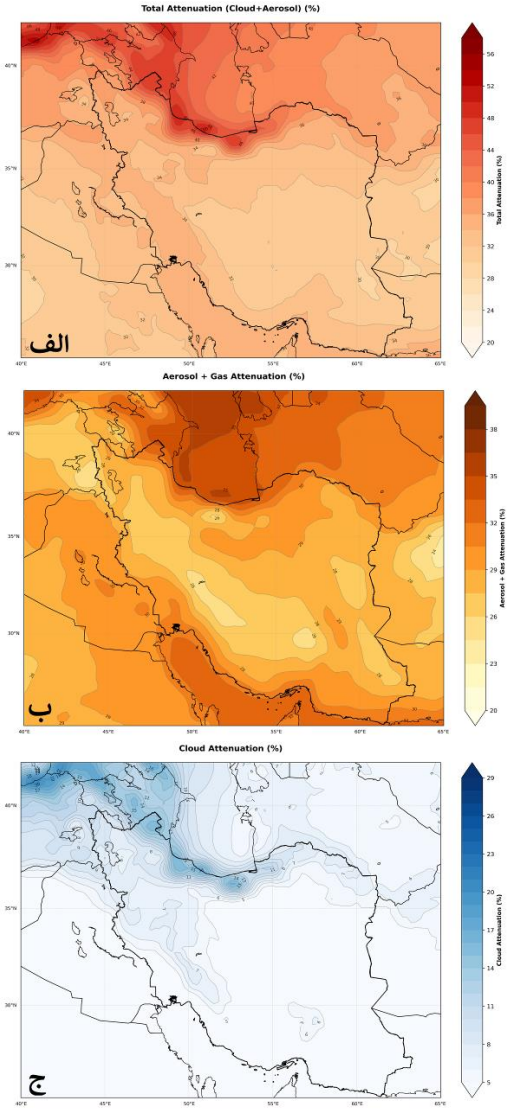
[1] Top of Atmosphere Solar Radiation
[2] Clear Sky Surface Solar Radiation Downward

پوشش ابری کم و غلظت پایین هواویزهاست. در مقابل، نوار ساحلی کاسپین با تابش کمتر از ٤.٥ کیلووات‌ساعت، کمترین میزان را داشته که ناشی از پوشش ابری و رطوبت بالاست. این یافته‌ها مناطق جنوبی و مرکزی را برای ساخت نیروگاه‌های خورشیدی بزرگ‌مقیاس بهینه معرفی می‌کند. همچنین همجواری این مناطق با دریا، فرصتی استراتژیک برای ایجاد مجتمع‌های ترکیبی نیروگاه خورشیدی و شیرین‌سازی آب (به ویژه در استان‌های هرمزگان، بوشهر و سیستان و بلوچستان) فراهم می‌آورد که می‌تواند به امنیت انرژی و آب به طور همزمان کمک کند.



شکل ۱: الگوی مکانی میانگین بلندمدت تابش خورشیدی سطحی (SSRD) را در بازه زمانی ۲۰۰٤ تا ۲۰۲۳. میزان تابش دریافتی در چند شهر کشور در نقشه نمایش داده شده است.

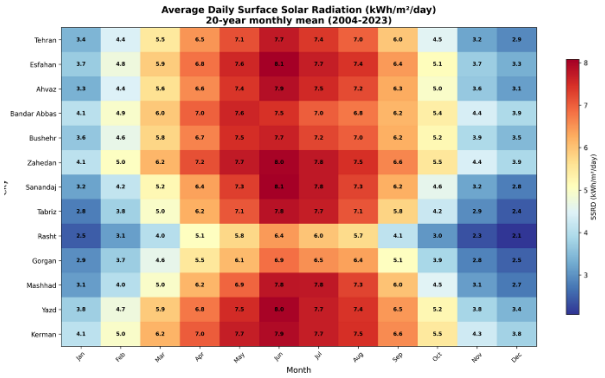
شکل ۲ توزیع مکانی درصد تضعیف تابش را شامل (الف) تضعیف کل، (ب) سهم هواویزها و گازها، و (ج) سهم ابرها نشان می‌دهد. الگوی تضعیف کل (الف) همبستگی معکوس با نقشه تابش دارد؛ بیشینه آن در سواحل کاسپین (٤٨ درصد) و کمینه در مناطق مرکزی و جنوب شرقی (۳۰ درصد) است. در بخش (ب)، بیشترین تضعیف ناشی از هواویزها و گازها در دو منطقه دیده می‌شود: سواحل کاسپین به دلیل بخار آب و ذرات نمکی آب دریا و نواحی جنوبی نیز به دلیل گردوغبار و ذرات معلق. مناطق مرکزی محصور در رشته کوه‌های زاگرس و البرز، هوای پاک‌تری دارند. در بخش (ج)، سهم ابرها در سواحل کاسپین بیش از ۱۰ درصد بیشترین در کشور است. رشته کوه‌ها نیز به دلیل رطوبت بالاتر، تضعیف ابری بیشتری نسبت به نواحی مرکزی و جنوبی دارند، در حالی که مناطق مرکزی و جنوب شرقی با کمترین تضعیف ابر (زیر ٤ درصد) همراه هستند.



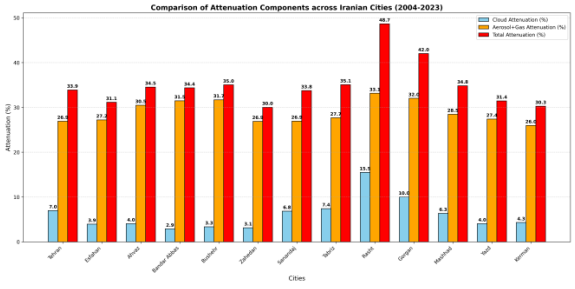
شکل ۲: توزیع مکانی درصد تضعیف تابش شامل (الف) تضعیف کل، (ب) سهم هواویزها و گازها، و (ج) سهم ابرها در بازه زمانی ۲۰۰٤ تا ۲۰۲۳.

در ادامه، میانگین ماهانه تابش خورشیدی طی دوره ۲۰ ساله (۲۰۰٤–۲۰۲۳) برای شهرهای برگزیده کشور در قالب نمودار منسجمی در شکل ۳ ارائه شده است. این نمودار بینش مهمی برای تصمیم‌گیرندگان و برنامه‌ریزان ساخت نیروگاه‌های خورشیدی فراهم می‌آورد. به طور مشخص، این نمودار میزان انرژی قابل دریافت توسط یک پنل خورشیدی با مساحت یک متر مربع را در شهرها و ماه‌های مختلف سال نشان می‌دهد.

نتایج مربوط به تضعیف در شهرهای برگزیده کشور در نمودار شکل ٤ آورده شده است، این نمودار نشان می‌دهد که شهر رشت با حدود ٤٩ درصد، بیشترین تضعیف کل را دارا بوده و در مقابل، شهرهای زاهدان و کرمان با حدود ۳۰ درصد کمترین تضعیف را تجربه می‌کنند. به طور کلی، شهرهای شمالی (به ویژه سواحل کاسپین) تضعیف بسیار بیشتری نسبت به شهرهای مرکزی و جنوبی دارند. از نظر سهم ابرها، بندرعباس و زاهدان با کمتر از ٤ درصد، کمترین تضعیف ابرناکی را در کشور دارا هستند، در حالی که رشت و گرگان بیشترین تضعیف ابر (بیش از ۱۰ درصد) را نشان می‌دهند. همچنین، شهرهای جنوبی مانند اهواز و بوشهر، به رغم تابش بالای خورشیدی، به دلیل غلظت بالای هواویزها و ذرات معلق، تضعیف ناشی از این عامل در آنها قابل توجه است.



شکل ۳: میانگین ماهانه تابش خورشیدی طی دوره ۲۰ ساله (۲۰۲۳–۲۰۰٤) برای شهرهای برگزیده کشور



شکل ٤: نمودار مربوط به تضعیف کل و سهم عوامل جوی در این تضعیف برای شهرهای برگزیده کشور

نتیجه گیری

نتایج این مطالعه نشان داد که مناطق جنوب شرقی و مرکزی ایران با بیشینه تابش روزانه بالای **۵.۵ KWh/m²day** و کمینه تضعیف کل (حدود ۳۰ درصد)، بهترین پتانسیل را برای ساخت نیروگاه‌های خورشیدی دارند. در مقابل، نوار ساحلی دریای کاسپین با تابش کمتر از **٤.۵ KWh/m²day** و تضعیف ٤٨ درصد (با سهم غالب ابرها) کمترین پتانسیل را نشان می‌دهد. شهر رشت بیشترین تضعیف (٤٩ درصد) و شهرهای زاهدان و کرمان کمترین تضعیف (حدود ۳۰ درصد) را دارند. شهرهای جنوبی مانند اهواز و بوشهر نیز به‌رغم تابش مناسب، به دلیل غلظت بالای هواویزها با تضعیف قابل توجهی مواجه هستند. به طور کلی، اولویت‌بندی مناطق برای سرمایه‌گذاری در انرژی خورشیدی باید با توجه به عامل غالب تضعیف (ابر در شمال، هواویزها در جنوب) انجام شود.

مرجع‌ها

[۱] Bogdanov, D., Ram, M., Aghahosseini, A., Gulagi, A., Oyewo, A. S., Child, M., ... & Breyer, C. (2021). Low-cost renewable electricity as the key driver of the global energy transition towards sustainability. Energy, 227, 120467.

[۲] Algarni, S., Tirth, V., Alqahtani, T., Alshehery, S., & Kshirsagar, P. (2023). Contribution of renewable energy sources to the environmental impacts and economic benefits for sustainable development. Sustainable energy technologies and assessments, 56, 103098.

[۳] Nematollahi, O., Hoghooghi, H., Rasti, M., & Sedaghat, A. (2016). Energy demands and renewable energy resources in the Middle East. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 54, 1172-1181.

[٤] Zell, E., Gasim, S., Wilcox, S., Katamoura, S., Stoffel, T., Shibli, H., ... & Al Subie, M. (2015). Assessment of solar radiation resources in Saudi Arabia. Solar Energy, 119, 422-438.

[٥] Besarati, S. M., Padilla, R. V., Goswami, D. Y., & Stefanakos, E. (2013). The potential of harnessing solar radiation in Iran: Generating solar maps and viability study of PV power plants. Renewable energy, 53, 193-199.

[٦] Alamdari, P., Nematollahi, O., & Alemrajabi, A. A. (2013). Solar energy potentials in Iran: A review. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 21, 778-788.

[۷] Besarati, S. M., Padilla, R. V., Goswami, D. Y., & Stefanakos, E. (2013). The potential of harnessing solar radiation in Iran: Generating solar maps and viability study of PV power plants. Renewable energy, 53, 193-199.

[۸] Gholami, A., Ameri, M., Zandi, M., Ghoachani, R. G., Eslami, S., & Pierfederici, S. (2020). Photovoltaic potential assessment and dust impacts on photovoltaic systems in Iran. IEEE Journal of Photovoltaics, 10(3), 824-837.

[۹] Sadat, S. A., Faraji, J., Nazififard, M., & Ketabi, A. (2021). The experimental analysis of dust deposition effect on solar photovoltaic panels in Iran's desert environment. Sustainable Energy Technologies and Assessments, 47, 101542.

[۱۰] Hersbach, H., Bell, B., Berrisford, P., Hirahara, S., Horányi, A., Muñoz-Sabater, J. & Thépaut, J. N. (2020). The ERA5 global reanalysis. Quarterly journal of the royal meteorological society, 146(730), 1999-2049.

مطالعه خواص الکترونی وابسته به تونل‌زنی کوانتومی القا شده توسط سد میانی و میدان الکتریکی در یک چاه کوانتومی دوگانه سهموی تحت تابش لیزر

حقیقی ، سهیلا[۱] ؛ حقیقت‌زاده، آزاده [۲] ؛ عطارزاده، امین[۳]

[۱] گروه فیزیک، واحد اهواز، دانشگاه آزاد اسلامی، اهواز

[۲] مرکز تحقیقات مهندسی سطح پیشرفته و نانومواد، گروه فیزیک، واحد اهواز، دانشگاه آزاد اسلامی، اهواز

[۳] گروه علوم پایه، موسسه آموزش عالی جهاد دانشگاهی خوزستان

چکیده

در این پژوهش، خواص الکترونی یک چاه کوانتومی دوگانه سهموی GaAsSb/GaAs تحت تأثیر هم زمانی میدان الکتریکی قوی و تابش لیزر بررسی شده است. تابش لیزر به تنهایی با تبدیل ساختار به یک چاه سه‌گانه، تبهگنی ناشی از تونل زنی سد میانی را حذف و تعداد حالت‌های مقید را افزایش می‌دهد. میدان الکتریکی قوی تبهگنی را شکسته و با ایجاد حالت‌های شبه‌مقید دارای ویژه مقادیر مختلط، کاهش طول عمر حامل‌ها را القا می‌کند. در حضور همزمان هر دو میدان، سد میانی به طور محسوسی تضعیف می‌شود؛ به طوری که تنها حالت پایه رفتار تونل‌زنی ترکیبی را نشان می‌دهد.

واژه‌های کلیدی: *چاه کوانتومی دوگانه، تونل زنی کوانتومی، حالت‌های شبه مقید، میدان الکتریکی شدید، میدان لیزری.*

Study of electronic properties dependent on quantum tunneling induced by intermediate barrier and electric field in a laser-irradiated double parabolic quantum well

Haghighi, Soheila[1]; Haghighatzadeh; Azadeh[2] ; Attarzadeh, Amin[3]

[1] Department of Physics, Ahv.C., Islamic Azad University, Ahvaz
[2] Advanced Surface Engineering and Nano Materials Research Center, Department of Physics, Ahv.C., Islamic Azad University, Ahvaz
[3] Department of Science, Institute for Higher Education, ACECR, Ahvaz, Khouzestan

Abstract

In this research, the electronic properties of a parabolic double quantum well GaAsSb/GaAs under the simultaneous influence of a strong electric field and laser radiation have been investigated. Laser radiation alone, by transforming the structure into a triple well, removes the degeneracy arising from tunneling through the central barrier and increases the number of bound states. The strong electric field breaks the degeneracy and, by creating quasi-bound states with complex eigenvalues, induces a reduction in carrier lifetime. In the simultaneous presence of both fields, the central barrier is significantly weakened; such that only the ground state exhibits combined tunneling behavior.

***Keywords**: Double quantum well, Quantum tunneling, Quasi-bound states, Intense electric field, Laser field.*

PACS No. 30

مقدمه

چاه‌های کوانتومی دوگانه به دلیل پدیده‌های جفت‌شدگی کوانتومی و تونل‌زنی، کاربردهای گسترده‌ای در ادوات نانوالکترونیک و فوتونیک دارند [۱]. تأثیر جداگانه‌ی سد میانی و میدان الکتریکی قوی بر تونل‌زنی در این ساختارها پیشتر مطالعه شده است [۳و۲]. با این حال، بررسی رقابت هم‌زمان این دو

مکانیسم تحت تابش لیزر در یک چاه کوانتومی دوگانه‌ی سهموی (GaAsSb/GaAs)، تاکنون گزارش نشده است. برای دستیابی به این هدف، معادله‌ی شرودینگر در تقریب جرم مؤثر به روش عددی حل شده و ویژگی‌های الکترونی در چهار حالت شاخص مقایسه شده‌اند.

مبانی نظری

در این پژوهش، خواص الکترونی چاه کوانتومی دوگانه سهموی $Ga_{1-x}AsSb_x/GaAs$ در باند ظرفیتی، تحت تابش همزمان میدان‌های لیزری و الکتریکی قوی بررسی شده‌است. پتانسیل محدودکننده به صورت سهموی دوگانه در امتداد محور z به صورت زیر تعریف می‌شود [۵و۴]:

$$V(z)=\begin{cases} V_0 & |z|\geq a \\ V_0\left(\frac{|z|}{a}-1\right)^2 & |z|<a \end{cases} \qquad (1)$$

در اینجا، α نیم‌پهنای هر تک‌چاه و $V_0 = 1/97\,x_{Sb} - 1/69\,x_{Sb}^2$ ارتفاع چاه است که x_{Sb} غلظت آنتیموان را نشان می‌دهد. جرم مؤثر حفره‌ی سنگین وابسته به موقعیت از رابطه زیر محاسبه شده است [۶]:

$$m^*_{GaAsSb}(z) = (0/51\text{-}0/11[0/58284\text{-} - \sqrt{0/3397 - 0/5917\left(1-\left(\frac{|z|}{a}-1\right)^2\right)}\{V_0\}]m_0 \qquad (2)$$

با اعمال میدان لیزری قوی و استفاده از تبدیل کرامرز–هنبرگر و بسط فلوکت در حد فرکانس بالا ($\omega\tau \gg 1$، به طوری که دوره تناوب میدان لیزری بسیار کوتاه تر از زمان مشخصه حرکت حفره باشد)، معادله شرودینگر مؤثر مستقل از زمان در حضور میدان الکتریکی به صورت زیر حاصل می‌شود [۶]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial z}\left[\frac{1}{m^*(z)}\frac{\partial}{\partial z}\right]+V_d(z,\alpha_0)+qF_z z\right]\psi(z)=E\psi(z) \qquad (3)$$

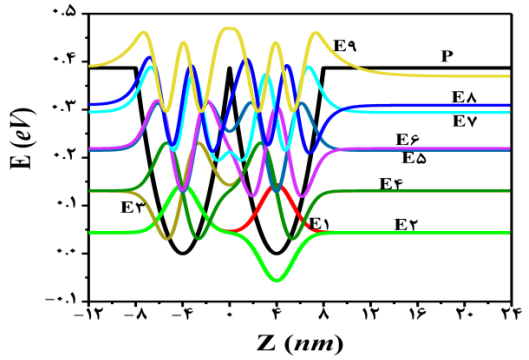
که در آن α_0 پارامتر پوشش لیزری (برحسب آنگستروم) و V_d پتانسیل مؤثر پوشش داده شده با لیزر است و از رابطه زیر محاسبه می شود [۶]:

$$V_d(z,\alpha_0)=\frac{\omega}{2\pi}\int_0^{2\pi/\omega} V\left(z+\alpha_0\sin(\omega t)\right)dt \qquad (4)$$

معادله (۳) با روش اجزای محدود در نرم‌افزار کامسول و با اعمال شرط مرزی باز برای مدل سازی تونل‌زنی در چهار حالت شاخص حل شد. مقادیر عددی ثابت ها به کار رفته در این شبیه سازی عبارتند از: جرم آزاد الکترون $m_0=9/11\times10^{-31}\,kg$ بار الکترون $q=1/602\times10^{-19}\,C$، پهنای چاه $\alpha=4\,nm$، بیشینه غلظت آنتیموان $x_{max}=0/25$، پارامتر پوشش لیزری $\alpha_0=3/5$ nm، ثابت پلانک کاهش‌یافته $\hbar=1/056\times10^{-34}\,J.s$ و شدت میدان الکتریکی $F_z=25\,\frac{kV}{cm}$

بحث و نتایج

شکل ۱، پتانسیل محدودکننده و توابع موج حالت های مقید را در غیاب میدان الکتریکی و تابش لیزر نشان می‌دهد. هشت حالت مقید تشکیل شده که به صورت چهار جفت حالت تبهگن (متقارن و پادمتقارن) آرایش یافته‌اند؛ که نتیجه مستقیم جفت‌شدگی حالت‌ها از طریق تونل‌زنی کوانتومی در عرض سد میانی است. با افزایش انرژی، شکاف انرژی بین هر جفت حالت تبهگن به طور سیستماتیک افزایش می‌یابد (جدول ۱)؛ که نشان‌دهنده کاهش درجه تبهگنی در ترازهای بالاتر است. توجیه فیزیکی این پدیده به وابستگی تونل‌زنی به ضخامت مؤثر سد برمی‌گردد. در ترازهای پایین، سد مؤثر ضخیم‌تر است که به جفت‌شدگی ضعیف‌تر (شکاف کوچک‌تر و تبهگنی بیشتر) منجر می‌شود. با افزایش انرژی، نفوذ تابع موج به سد افزایش یافته و جفت شدگی تقویت می‌شود که نتیجه آن شکاف انرژی بزرگ‌تر (و تبهگنی کمتر) بین حالت‌های متقارن و پادمتقارن است.

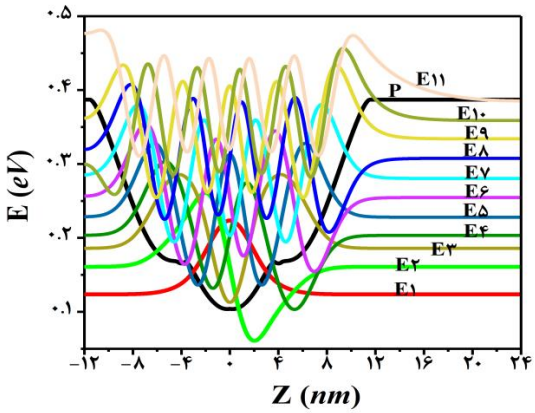


شکل ۱: پتانسیل محدودکننده و حالت‌های مقید الکترونی در غیاب میدان‌های خارجی

جدول۱: مقایسه کمی انرژی حالت‌های مقید: اثر تابش لیزر در حذف تبهگنی و کاهش شکاف انرژی.

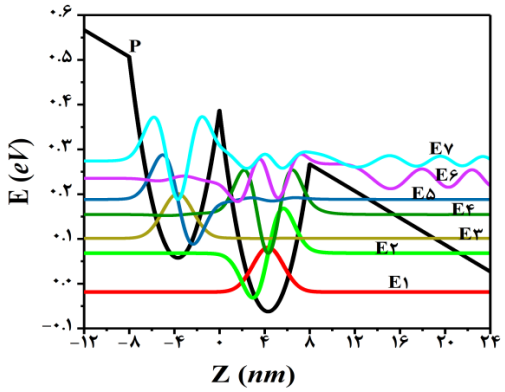
حالت‌های مقید	ویژه مقادیر انرژی (eV)	
	α_0=۰	α_0= ۳/۵ nm
تراز اول	۰/۰۴۳۴۲	۰/۱۲۳۵۳
تراز دوم	۰/۰۴۳۴۵	۰/۱۶۰۸۲
تراز سوم	۰/۱۳۰۱۹	۰/۱۸۵۷۶
تراز چهارم	۰/۱۳۰۷۹	۰/۲۰۳۲۵
تراز پنجم	۰/۲۱۴۷۵	۰/۲۲۷۸۶
تراز ششم	۰/۲۱۸۹۱	۰/۲۵۴۴۷
تراز هفتم	۰/۲۹۴۱۳	۰/۲۸۰۳۱
تراز هشتم	۰/۳۰۹۰۸	۰/۳۰۷۵۲
تراز نهم	_____	۰/۳۳۳۹۳
تراز دهم	_____	۰/۳۵۸۶۸
تراز یازدهم	_____	۰/۳۸۱۰۲

شکل ۲، پتانسیل محدودکننده و توابع موج حالت‌های مقید را در حضور تابش لیزر و غیاب میدان الکتریکی نشان می‌دهد. تابش لیزر ساختار پتانسیل را به طور چشمگیری تغییر می‌دهد و آن را از یک پیکربندی دوچاهه به یک ساختار سه‌چاهه تبدیل می‌کند؛ که ناشی از برهم‌کنش لیزر با سد میانی است. در این پیکربندی جدید، تبهگنی به کلی برداشته شده و یازده حالت مقید غیرتبهگن شکل گرفته‌اند. افزایش تعداد حالت‌ها و کاهش فاصله انرژی بین ترازها نسبت به حالت بدون لیزر (شکل ۱)، همگی نشان دهنده کاهش عمق مؤثر چاه تحت تاثیر میدان لیزری هستند. این نتایج به وضوح نقش مؤثر لیزر در باز طراحی هندسه پتانسیل، اصلاح ساختار انرژی و حذف تبهگنی ناشی از جفت‌شدگی تونل را تایید می‌کنند.



شکل ۲: پتانسیل محدودکننده و حالت‌های مقید الکترونی تحت تابش لیزر.

شکل ۳، پتانسیل محدودکننده و توابع موج حالت‌های شبه‌مقید را در حضور میدان الکتریکی قوی و غیاب تابش لیزر نشان می دهد. اعمال میدان الکتریکی پتانسیل را به طور نامتقارن شیب‌دار کرده و تبهگنی را به کلی از بین برده است (شکل ۱). در این حالت، هفت حالت شبه‌مقید با ویژه‌مقادیر مختلط شکل می‌گیرند. بخش موهومی این ویژه‌مقادیر، نشان‌دهنده کاهش طول عمر حامل‌ها به دلیل تونل‌زنی القا شده توسط میدان الکتریکی است. توزیع فضایی توابع موج آشکار می کند که پتانسیل شیب‌دار، سیستم را عملا به دو چاه منفرد غیر جفت شده تبدیل کرده است. حالت‌های ۱، ۲، ٤ و ٦ در چاه سمت راست، و حالت‌های ۳، ۵ و ۷ در چاه سمت چپ متمرکز شده‌اند. این جدایی کامل فضایی و انرژی، نتیجه مستقیم جابجایی اشتارک و سرکوب کامل جفت شدگی تونلی توسط میدان الکتریکی قوی است. مقادیر عددی ویژه‌مقادیر در جدول ۲ ارائه شده‌اند.

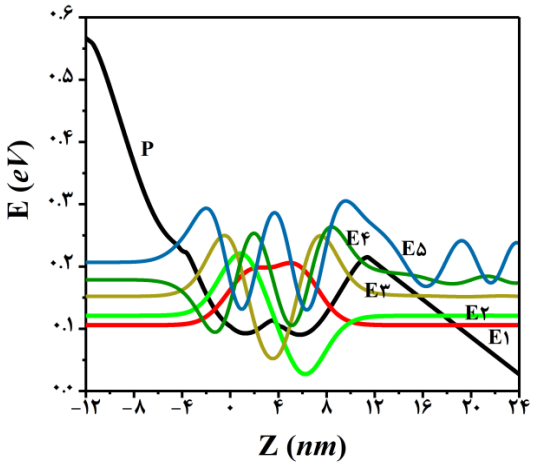


شکل ۳: پتانسیل محدودکننده و حالت‌های شبه مقید الکترونی در حضور میدان الکتریکی قوی.

جدول۲: مقایسه ویژه مقادیر مختلط حالت‌های شبه مقید: اثر افزایشی تابش لیزر در حضور میدان الکتریکی قوی.

حالت های مقید	ویژه مقادیر انرژی (eV)	
	α_0=۰	α_0= ۳/۵ nm
تراز اول	$-۰/۰۱۸۸۹ +۵/٦\times۱۰^{-۱۸}$	$۰/۱۰۵۵۹ +۱/۲\times۱۰^{-۱۱}$
تراز دوم	$۰/۰٦۸۱۲ +۱/۵\times۱۰^{-۱٦}$	$۰/۱۲۰۸٦ +۵/۹\times۱۰^{-۱۰}$
تراز سوم	$۰/۱۰۱۱ +۱/۱\times۱۰^{-۸}$	$۰/۱۵۲۰۳ +٤/۲\times۱۰^{-۷}$
تراز چهارم	$۰/۱۵٤۲۷ +۱/۱\times۱۰^{-۸}$	$۰/۱۷۸۵۷ +٤/۳\times۱۰^{-۵}$
تراز پنجم	$۰/۱۸۸۰۵ +٦/۰\times۱۰^{-۹}$	_____
تراز ششم	$۰/۲۳۵۲۲ +۸/۰\times۱۰^{-٤}$	_____
تراز هفتم	$۰/۲۷۳۸۱ +٤/۰\times۱۰^{-٤}$	_____

شکل ٤ نشان می‌دهد که چهار حالت شبه‌مقید با ویژه‌مقادیر مختلط در حضور هر دو میدان‌های خارجی شکل می‌گیرند. اثر ترکیبی این دو میدان خارجی، هندسه سد میانی را به طور چشمگیر تغییر داده و ارتفاع مؤثر آن را به شدت کاهش می‌دهد. توزیع توابع موج به وضوح دگرگونی مکانیسم‌های تونل‌زنی را آشکار می‌سازد. حالت پایه توزیع فضایی قابل‌توجهی در هر دو چاه دارد که نشان دهنده ترکیب و رقابت هر دو مکانیسم تونل‌زنی است. حالت‌های بالاتر عمدتاً در یک چاه متمرکز شده‌اند و رفتاری شبیه به یک چاه منفرد از خود نشان می‌دهند. این موضوع حاکی از غالب شدن تونل‌زنی القا شده توسط میدان الکتریکی و خنثی شدن عملی نقش سد میانی در ترازهای بالاتر است.



شکل ٤: پتانسیل محدودکننده و حالت‌های شبه مقید الکترونی در حضور هر دو میدان الکتریکی قوی و تابش لیزری.

نتیجه گیری

در این پژوهش، خواص الکترونی وابسته به تونل‌زنی کوانتومی در یک چاه کوانتومی دوگانه سهموی GaAsSb/GaAs تحت تأثیر همزمان میدان الکتریکی قوی و تابش لیزر بررسی شد. در غیاب میدان‌های خارجی، سیستم هشت حالت مقید (چهار جفت تبهگن) را نشان می‌دهد. تابش لیزر به تنهایی با تبدیل ساختار پتانسیل به یک چاه سه‌گانه، تبهگنی را کاملاً حذف کرده و تعداد حالت‌های مقید را افزایش می‌دهد. میدان الکتریکی شدید به تنهایی با ایجاد شیب در پتانسیل، تبهگنی را شکسته و با ایجاد حالت‌های شبه‌مقید دارای انرژی مختلط، کاهش طول عمر حامل‌ها را در پی دارد. در حالت ترکیبی، سد میانی به‌طور چشمگیری تضعیف می‌شود. در این حالت، تنها تراز پایه رفتار تونل‌زنی ترکیبی را نشان می‌دهد، در حالی که ترازهای بالاتر عمدتا تحت سلطه تونل‌زنی القا شده توسط میدان الکتریکی هستند. این یافته‌ها به وضوح قابلیت کنترل پیکربندی انرژی، درجه تبهگنی و نرخ تونل‌زنی را در این نانوساختارها از طریق تنظیم میدان‌های خارجی تایید می‌کنند.

سپاسگزاری

نویسندگان این مقاله مراتب سپاس و قدردانی خود را از دانشگاه آزاد اسلامی واحد اهواز بواسطه حمایت از این پژوهش اعلام می کنند.

مرجع‌ها

[1] E. Kasapoglu, M.B. Yücel, C.A. Duque, “Parabolic-Gaussian quantum wells under a nonresonant intense laser field”, Nanomaterials **13**, (2023) 1360 .

[2] M. Indjin, J. Griffths, “Coherent electron quantum transport in In0.53Ga0.47As/GaAs0.51Sb0.49 double barrier resonant tunneling structures”, Optical and Quantum Electronics, **52** (2020) 1-9.

[3] A. Attarzadeh, A. Haghighatzadeh, F. Ungan, “Computational analysis of the intra/valence-band linear and nonlinear optoelectronic responses of a GaAs0.75Sb0.25/GaAs semi-V-shaped quantum well under simultaneous applications of a non-resonant-intense laser field and a high-intensity regime electric field”, Optical and Quantum Electronics **57**, NO.6 (2025) 367.

[4] T. Sahu, A.K. Panda, S. Palo, “Parabolic double quantum well structures: Study of multisubband electron mobility”, in: 2012 Int. Conf. Emerg. Electron., IEEE, (2012) 1–4.

[5] Z. Najafi Chaleshtari, A. Haghighatzadeh, A. Attarzadeh, “Investigating the effect of position-dependent effective mass on the valence-band electronic states of GaAs/GaAsSb/GaAs parabolic quantum wells modulated by intense laser fields”, Solid State Communications, **353** (2022) 114870.

[6] S. Haghighi, A. Haghighatzadeh, A. Attarzadeh, “Modeling of electronic spectra and optical responses of a laser-affected double GaAsSb/GaAs parabolic quantum well using COMSOL Multiphysics: the role of position-dependent effective mass and the static electric field”, *Optical and Quantum Electronics*, **55**, *No. 12 (2023) 1052.*

تأثیر میدان مغناطیسی بر خواص الکترونی و تونل‌زنی کوانتومی القا شدهٔ الکتریکی در یک چاه کوانتومی سهموی گالیم آرسنایدآنتیموان

نجفی چالشتری ، زهرا[۱] ؛ حقیقت‌زاده، آزاده[۲] ؛ عطارزاده، امین[۳]

[۱] گروه فیزیک، واحد اهواز، دانشگاه آزاد اسلامی، اهواز

[۲] مرکز تحقیقات مهندسی سطح پیشرفته و نانومواد، گروه فیزیک، واحد اهواز، دانشگاه آزاد اسلامی، اهواز

[۳] گروه علوم پایه، موسسه آموزش عالی جهاد دانشگاهی خوزستان، اهواز

چکیده

در این مقاله، رفتار الکترونی یک چاه کوانتومی سهموی GaAsSb/GaAs در حضور میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی قوی با استفاده از حل عددی معادله شرودینگر بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهند که میدان الکتریکی به تنهایی با ایجاد پتانسیل شیب‌دار، حالت‌های شبه مقید با ویژه‌مقادیر مختلط ایجاد می‌کند که این امر به القای تونل‌زنی و کاهش عمر کوانتومی منجر می شود. در مقابل، میدان مغناطیسی با فشرده‌سازی پتانسیل و تقویت حصر کوانتومی، اثر تثبیت کننده دارد. در شرایط اعمال همزمان دو میدان، سیستم به حالت‌های مقید با ویژه‌مقادیر حقیقی بازمی‌گردد که نشان دهنده غلبه اثر میدان مغناطیسی و سرکوب تونل‌زنی است. علاوه براین، شکل‌گیری جفت حالت تبهگن متقارن-پادمتقارن در ترازهای بالایی، تشکیل ساختار دو چاهی مؤثر را در اثر برهم‌کنش این میدان‌ها تایید می‌کند. این نتایج راهکارهایی برای کنترل پویای انتقال بار در افزاره‌های نانوالکترونیکی و اپتوالکترونیکی کوانتومی مبتنی بر چاه‌های سهموی ارائه می‌دهند.

واژه های کلیدی: *چاه کوانتومی، تونل زنی کوانتومی، حالت های شبه مقید، میدان الکتریکی شدید، میدان مغناطیسی* .

The influence of a magnetic field on the electronic properties and electrically-induced quantum tunneling in a parabolic gallium arsenide antimonide quantum well

Najafi Chaleshtari , Zahra [1]; Haghighatzadeh; Azadeh[2]; Attarzadeh, Amin[3]

[1] *Department of Physics, Ahv.C., Islamic Azad University, Ahvaz*

[2] *Advanced Surface Engineering and Nano Materials Research Center, Department of Physics, Ahv.C., Islamic Azad University, Ahvaz*

[3] *Department of Science, Institute for Higher Education, ACECR, Ahvaz, Khouzestan*

Abstract

In this paper, the electronic behavior of a GaAsSb/GaAs parabolic quantum well under strong electric and magnetic fields is investigated using a numerical solution of the Schrödinger equation. The results show that the electric field alone creates a tilted potential, leading to quasi-bound states with complex eigenvalues, which indicates the induction of quantum tunneling and a reduction in quantum lifetime. In contrast, the magnetic field alone, by compressing the potential, has a stabilizing effect and enhances quantum confinement. When both fields are applied simultaneously, the system returns to bound states with real eigenvalues, which indicates the dominance of the magnetic field effect and suppression of tunneling. Additionally, the formation of a pair of degenerate symmetric-antysymmetric states at higher levels confirms the formation of an effective double-well structure due to the interaction of the fields. These findings provide strategies for dynamic control of charge transport in quantum-based nanoelectronics and optoelectronics devices based on parabolic quantum wells.

***Keywords**: Quantum well, Quantum tunneling, Quasi-bound states, Intense electric field, Magnetic field.*
PACS No. 30

مقدمه

چاه‌های کوانتومی سهموی به دلیل ایجاد ترازهای انرژی گسسته و فاصله‌گذاری قابل تنظیم، جایگاه ویژه‌ای در فناوری نانو افزاره‌ها دارند [۱]. کنترل پویا بر حصر کوانتومی و نرخ تونل‌زنی، به عنوان چالشی کلیدی، عملکرد قطعاتی مانند آشکارسازها، مدولاتورها و سلول‌های حافظه کوانتومی را تعیین می‌کند. در این میان، میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی خارجی ابزارهایی مؤثر برای مهندسی پتانسیل درون چاه شناخته می‌شوند [۳و۲]. با این حال، تأثیر همزمان این دو میدان بر خواص الکترونی و تونل‌زنی در چاه‌های سهموی GaAsSb کمتر مطالعه شده است. در این مقاله، اثرات جداگانه و ترکیبی میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی قوی بر ترازهای انرژی، چگالی احتمال و مکانیسم تونل‌زنی در یک چاه کوانتومی سهموی GaAsSb/GaAs بررسی می‌شود.

مبانی نظری

در این پژوهش، خواص الکترونی چاه کوانتومی سهموی $Ga_{1-x}AsSb_x/GaAs$ در باند ظرفیتی، تحت تأثیر همزمان میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی قوی بررسی شده است. پتانسیل محدودکننده در راستای محور رشد (z) به صورت سهموی و مطابق رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود [۵و۴]:

$$V(z)=\begin{cases} V_0 & |z|\geq a \\ V_0\left(\frac{|z|}{a}-1\right)^2 & |z|<a \end{cases} \qquad (۱)$$

که در آن، α نیم‌پهنای چاه و $V_0 = 1/97\,x_{Sb} - 1/69\,x_{Sb}^2$ ارتفاع چاه بر حسب الکترون ولت است. x_{sb} غلظت آنتیموان در ناحیه چاه را نشان می دهد. جرم مؤثر حفره‌ی سنگین، که وابسته به موقعیت مکانی است، از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۶]:

$$m^*_{GaAsSb}(z) = (0/51-0/11[0/58284- \\ -\sqrt{0/3397 - 0/5917\left(1-\left(\frac{|z|}{a}\right)^2\right)\{V_0\}}]m_0 \qquad (۲)$$

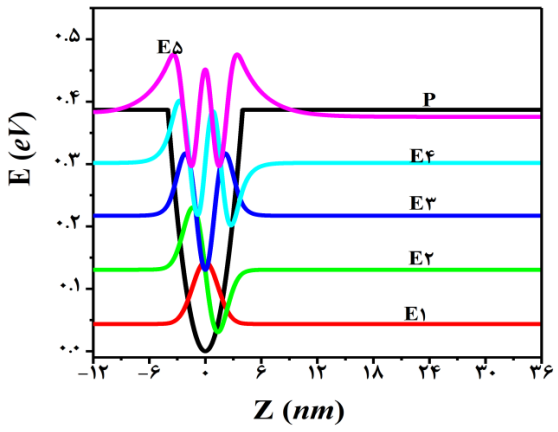
با اعمال میدان‌های الکتریکی F_z و میدان مغناطیسی B_z، معادله شرودینگر مؤثر مستقل از زمان به فرم زیر نوشته می شود [۷]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial z}\left[\frac{1}{m^*(z)}\frac{\partial}{\partial z}\right]+\frac{e^2B_z^2z^2}{2m^*(z)}+qF_zz\right]\psi(z)=E\psi(z) \qquad (۳)$$

معادله (۳) با روش اجزای محدود در نرم‌افزار کامسول و با اعمال شرط مرزی باز برای مدل سازی تونل‌زنی در چهار حالت شاخص حل شد. مقادیر عددی ثابت ها به کار رفته در این شبیه سازی عبارتند از: جرم آزاد الکترون $m_0=9/11\times10^{-31}\,kg$ بار الکترون $q=1/602\times10^{-19}\,C$، ثابت پلانک کاهش‌یافته $\hbar=1/056\times10^{-34}\,J.s$، پهنای چاه $\alpha=4\,nm$، شدت مغناطیسی $B=25\,T$ و شدت میدان الکتریکی $F_z=100\,\frac{kV}{cm}$

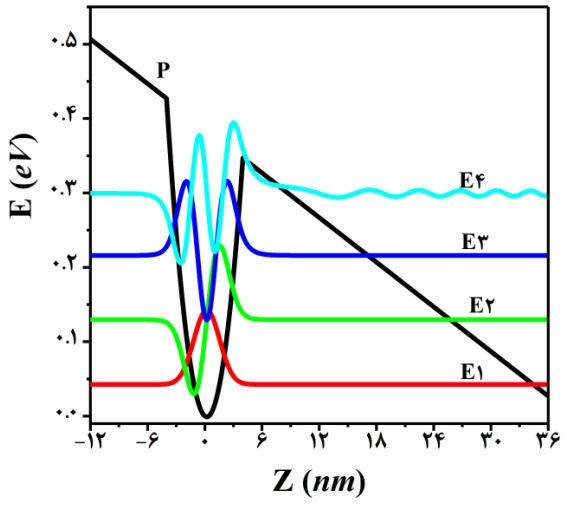
بحث و نتایج

شکل ۱، پتانسیل محدودکننده چاه سهموی و توابع موج حالت‌های مقید الکترونی را در غیاب میدان‌های خارجی نشان می‌دهد. پنج حالت مقید تشکیل می‌شوند که با افزایش انرژی، در ناحیه گسترده‌تری از چاه گسترش می‌یابند. این گسترش نشان دهنده کاهش چگالی احتمال در مرکز چاه و افزایش احتمال یافتن حفره سنگین در نواحی نزدیک به دیواره‌های پتانسیل است. ویژه مقادیر انرژی و چگالی احتمال مربوط به هر حالت در جدول ۱ آورده شده است. این رفتار مطابق با پیش‌بینی تئوری برای چاه سهموی است و نشان دهنده این است که حصر کوانتومی حفره سنگین در ترازهای پرانرژی ضعیف‌تر است.



شکل ۱: پتانسیل محدودکننده و حالت‌های مقید الکترونی در غیاب میدان‌های خارجی.

شکل ۲، پتانسیل محدودکننده سهموی و توابع موج حالت‌های شبه مقید را در حضور میدان الکتریکی قوی نشان می‌دهد. همانطور که در شکل مشاهده می شود، اعمال میدان الکتریکی قوی موجب تغییرات در ساختار چاه کوانتومی شده و پتانسیل را به طور نامتقارن شیب‌دار می‌کند. چهار حالت شبه مقید با ویژه مقادیر مختلط در چاه تشکیل می‌شوند. وجود بخش موهومی غیر صفر در ویژه مقادیر (جدول ۱) نشان دهنده ماهیت ناپایدار این حالت ها و امکان تونل زنی کوانتومی است. بخش موهومی هر ویژه مقدار معکوس عمر کوانتومی مربوطه را نشان داده و نمایانگر نرخ تونل زنی از چاه است. همچنین، همان‌طور که در شکل مشهود است، با افزایش انرژی، تابع موج به‌طور فزاینده‌ای به سمت ناحیه‌ی سد پتانسیل (سمت راست) گسترش می‌یابد. این گسترش فضایی، به‌ویژه برای حالت با بالاترین انرژی، برجسته است و نشان می‌دهد که احتمال حضور الکترون در خارج از محدوده‌ی اصلی چاه به‌طور قابل‌توجهی افزایش یافته است. این رفتار، کاملاً با افزایش بخش موهومی ویژه‌مقدار (از مرتبه 10^{-18} به 10^{-5}) مطابقت دارد و به‌وضوح نشان می‌دهد که با افزایش انرژی حالت، عمر حصر کوانتومی کاهش یافته و کاهش احتمال تونل‌زنی افزایش می‌یابد. مقایسه چگالی‌های احتمال توابع شبه‌مقید در این شرایط با مقادیر پایه در غیاب میدان الکتریکی نشان دهنده کاهش چگالی احتمال است (جدول ۱).



شکل ۲: پتانسیل محدودکننده و حالت‌های شبه مقید الکترونی در حضور میدان الکتریکی قوی.

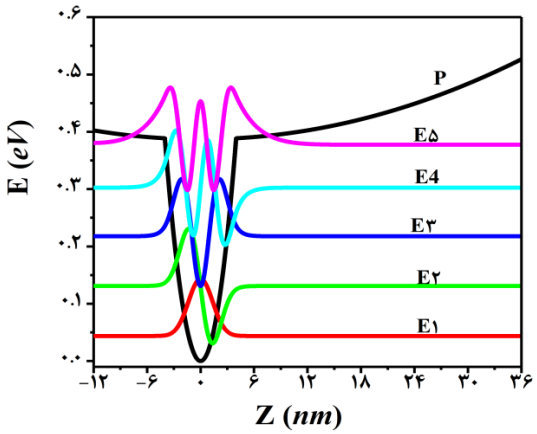
جدول۱: تحلیل کمی توابع موج: اثر اعمال میدان الکتریکی قوی.

حالت‌های مقید	$F_z = ۱۰۰ \frac{kV}{cm}$		$F_z = ۰$	
	چگالی احتمال	ویژه مقادیر انرژی (eV)	چگالی احتمال	ویژه مقادیر انرژی (eV)
تراز اول	۰/۹۹۹۹۵	۰/۰۴۲۴۰ −۴/۱×۱۰$^{-۱۸}$	۰/۹۹۹۹۷	۰/۰۴۳۴۴
تراز دوم	۰/۹۹۹۱۵	۰/۱۲۹۴۵ −۹/۵×۱۰$^{-۱۸}$	۰/۹۹۹۴۱	۰/۱۳۰۵۱
تراز سوم	۰/۹۹۱۲۶	۰/۲۱۵۸۳ −۱/۷×۱۰$^{-۱۸}$	۰/۹۹۳۸۹	۰/۲۱۷۰۱
تراز چهارم	۰/۹۰۳۶۹	۰/۲۹۹۲۹ −۳/۴×۱۰$^{-۱۸}$	۰/۹۵۵۷۳	۰/۳۰۱۶۴
تراز پنجم	———	———	۰/۶۵۴۵۳	۰/۳۷۵۶۱

شکل ۳ نشان می‌دهد که؛ اعمال میدان مغناطیسی فشرده شدن پتانسیل از کناره‌ها و خمیدگی متقارن رو به بالا در ناحیه سد را باعث می شود، که منجر به تشکیل پنج حالت مقید با ویژه‌مقادیر حقیقی می‌شود که نشان‌دهنده عدم تونل‌زنی در حضور میدان مغناطیسی است. مقایسه با شکل ۱ و جدول ۱ نشان می‌دهد که میدان مغناطیسی باعث جابجایی خفیف تمام ترازهای انرژی به سمت مقادیر بالاتر شده است. این جابجایی مثبت، منطبق با اثر افزایشی پتانسیل مغناطیسی بر انرژی کل حفره است. چگالی احتمال هر حالت نیز افزایش یافته است (جدول ۱ و ۲)؛ که نشان‌دهنده متمرکزتر شدن توابع موج در مرکز چاه است که نتیجه فشرده‌سازی هندسی چاه پتانسیل توسط میدان مغناطیسی است. به این ترتیب، میدان مغناطیسی در این پیکربندی حصر کوانتومی را تشدید کرده و اثر تثبیت‌کننده بر حالت‌های مقید دارد.

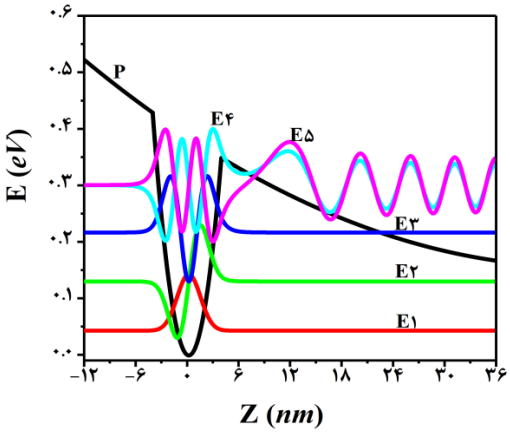
جدول۲: تحلیل کمی توابع موج: اثر اعمال میدان مغناطیسی.

حالت های مقید	$F_z = ۱۰۰ \frac{kV}{cm}$ $B = ۲۵\,T$		$F_z = ۰$ $B = ۲۵\,T$	
	چگالی احتمال	ویژه مقادیر انرژی (eV)	چگالی احتمال	ویژه مقادیر انرژی (eV)
تراز اول	۰/۹۹۹۹۶	۰/۰۴۲۵۰	۰/۹۹۹۹۷	۰/۰۴۳۵۴
تراز دوم	۰/۹۹۹۱۷	۰/۱۲۹۷۶	۰/۹۹۹۴۲	۰/۱۳۰۸۱
تراز سوم	۰/۹۹۱۴۷	۰/۲۱۶۳۵	۰/۹۹۴۰۲	۰/۲۱۷۵۲
تراز چهارم	۰/۵۰۸۳۶	۰/۲۹۹۹۳	۰/۹۵۶۸۵	۰/۳۰۲۳۸
تراز پنجم	۰/۴۱۳۷۰	۰/۳۰۰۴۱	۰/۶۵۶۲۶	۰/۳۷۷۱۸



شکل ۳: پتانسیل محدودکننده و حالت‌های مقید الکترونی در حضور میدان مغناطیسی.

هنگامی که میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی به صورت همزمان اعمال می‌شوند، رفتار سامانه به طور کیفی تغییر می‌کند (شکل ٤) و پنج حالت مقید تشکیل می‌شود که نشان دهنده احیای حصر کوانتومی است و تونل‌زنی به صفر می‌رسد. مقایسه با شکل ۲ نشان می‌دهد که ترازهای انرژی به طور جزئی به سمت مقادیر بالاتر جابجا شده‌اند، که عمدتاً ناشی از سهم پتانسیل مغناطیسی است. ویژگی جالب این است که در ترازهای چهارم و پنجم جفت حالت‌های تبهگن با تقارن و پادتقارن مشابه چاه‌های کوانتومی دوقلو شکل می‌گیرند. کاهش چگالی احتمال در این دو حالت، نشان‌دهنده توزیع آن‌ها در ناحیه سد نازک‌شده است و تأییدکننده‌ی مدل تفسیری است.



شکل ٤: پتانسیل محدودکننده و حالت‌های مقید الکترونی در حضور هر دو میدان الکتریکی و مغناطیسی.

نتیجه گیری

در این پژوهش، تأثیر میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی بر خواص الکترونی و تونل‌زنی در چاه کوانتومی سهموی GaAsSb بررسی شد. نتایج نشان داد که میدان الکتریکی حالت‌های شبه‌مقید با ویژه‌مقادیر مختلط ایجاد کرده و تونل‌زنی را القا می‌کند. میدان مغناطیسی اثر تثبیت‌کننده دارد و حصر کوانتومی را تقویت می‌کند. در حضور همزمان دو میدان، اثر مغناطیسی غالب شده و تونل‌زنی سرکوب می‌شود. همچنین، شکل‌گیری جفت حالت‌های تبهگن متقارن–پادمتقارن در ترازهای بالایی، ساختار مؤثر دو چاهی ناشی از ترکیب این میدان‌ها را نشان می‌دهد.

سپاسگزاری

نویسندگان این مقاله مراتب سپاس و قدردانی خود را از دانشگاه آزاد اسلامی واحد اهواز بواسطه حمایت از این پژوهش اعلام می‌کنند.

مرجع‌ها

[1] Z. Najafi Chaleshtari, A. Haghighatzadeh, A. Attarzadeh, “Investigation of linear and third-order nonlinear optical properties of laser-dressed GaAs/GaAsSb/GaAs parabolic valence-band quantum wells”; *The European Physical Journal Plus* ,**138**, No. 2 (2023) 139.

[2] M. Indjin, J. Griffths, “Coherent electron quantum transport in $In_{0.53}Ga_{0.47}As/GaAs_{0.51}Sb_{0.49}$ double barrier resonant tunneling structures”, *Optical and Quantum Electronics*, **52** (2020) 1-9.

[3] A. Attarzadeh, A. Haghighatzadeh, F. Ungan, “Computational analysis of the intra/valence-band linear and nonlinear optoelectronic responses of a $GaAs_{0.75}Sb_{0.25}$/GaAs semi-V-shaped quantum well under simultaneous applications of a non-resonant-intense laser field and a high-intensity regime electric field”, *Optical and Quantum Electronics* **57**, NO.6 (2025) 367.

[4] A.Radu, E.C. Niculescu, M. Cristea, “Laser dressing effects on the energy spectra in different shaped quantum wells under an applied electric field”, *J. Optoelectron. Adv. Mater*, **10** (2008) 2555-2563.

[5] J. Zhang, J. Tang, Y. Kang, F. Lin, D. Fang, D. Wang, X. Fang, X. Wang, Z. Wei, “Structural and spectroscopy characterization of coaxial GaAs/GaAsSb/GaAs single quantum well nanowires fabricated by molecular beam epitaxy”, *CrystEngComm*. **21** (2019) 4150–4157.

[6] Z. Najafi Chaleshtari, A. Haghighatzadeh, A. Attarzadeh, “Investigating the effect of position-dependent effective mass on the valence-band electronic states of GaAs/GaAsSb/GaAs parabolic quantum wells modulated by intense laser fields”, *Solid State Communications*, **353** (2022) 114870.

[7] H. Dakhlaoui, J.A. Vinasco, C.A. Duque, “External fields controlling the nonlinear optical properties of quantum casecade laser based on staircase-like quantum wells”, *Superlattices and Microstructures*, **155** (2021) 106885.

بررسی تأثیر انرژی فرمی گرافن بر عملکرد یک جاذب فراماده پهن‌باند در ناحیه تراهرتز

فرخی ، زهرا[۱] ؛ پاکارزاده، حسن[۱]

[۱]دانشکده فیزیک ، دانشگاه صنعتی شیراز ، شیراز

چکیده

در این مقاله، یک جذب‌کننده فراماده پهن‌باند قابل تنظیم در ناحیه تراهرتز بر پایه گرافن و وانادیوم دی‌اکسید (VO_2) طراحی و شبیه سازی شده است. تنظیم‌پذیری ساختار از طریق کنترل انرژی فرمی انجام می‌شود. نتایج نشان می‌دهند که با افزایش انرژی فرمی گرافن از ۰ تا ۰/۳ الکترون‌ولت، میزان جذب و یکنواختی پاسخ فرکانسی ساختار بهبود می‌یابد. بهترین عملکرد در انرژی فرمی۰/۳ الکترون‌ولت مشاهده شده است؛ به‌طوری‌که جذب در بخش عمده بازه فرکانسی ۲ تا ۵ تراهرتز بیش از ۸۵ درصد بوده و در محدوده ۳/۵ تا٤/٥ تراهرتز به مقادیر نزدیک به جذب کامل می‌رسد. همچنین ساختار در انرژی فرمی ۰/٤ الکترون‌ولت نیز جذب بالایی را حفظ می‌کند. قابلیت تنظیم الکتریکی، عملکرد پهن‌باند و نیاز به ولتاژ کاری پایین، ساختار پیشنهادی را به گزینه‌ای مناسب برای حسگرها، آشکارسازها، مدولاتورها و تجهیزات مخابراتی تراهرتزی تبدیل می‌کند.

واژه های کلیدی: *تراهرتز،جاذب فراماده، گرافن، جاذب پهن باند، انرژی فرمی.*

Effect of Graphene Fermi Energy on the Performance of a Broadband Terahertz Metamaterial Absorber

Farrokhi, Zahra[1]; Pakarzadeh, Hassan[1]

[1]*Department of physics, Shiraz University of Technology, Shiraz*

Abstract

In this paper, a tunable broadband terahertz (THz) metamaterial absorber based on graphene and vanadium dioxide (VO_2) is designed and numerically investigated. The tunability of the proposed structure is achieved by controlling the graphene Fermi energy. The simulation results demonstrate that increasing the graphene Fermi energy from 0 to 0.3 eV enhances both the absorption level and the uniformity of the frequency response. The optimum performance is obtained at a Fermi energy of 0.3 eV, where the absorption exceeds 85% over most of the 2–5 THz frequency range and approaches near-perfect absorption within the 3.5–4.5 THz band. Furthermore, the absorber maintains a high absorption level at a Fermi energy of 0.4 eV. Owing to its electrical tunability, broadband performance, and low operating voltage requirement, the proposed structure is a promising candidate for applications in THz sensors, detectors, modulators, and next-generation terahertz communication systems.

Keywords: *Terahertz, Metamaterial Absorber, Graphene, Broadband Absorption, Fermi Energy.*

PACSNo. ***42***

مقدمه

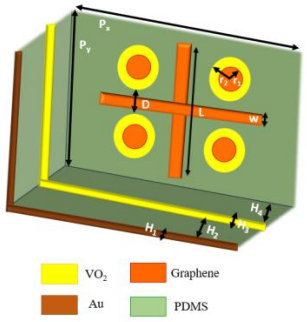
امواج تراهرتز(THz) در محدوده فرکانسی ۰/۱ تا ۱۰ تراهرتز قرار دارد و به دلیل ویژگی‌های منحصربه‌فرد خود در تصویربرداری، حسگری، ارتباطات بی‌سیم و سامانه‌های امنیتی مورد توجه قرار گرفته‌اند[۱]. فرامواد، ساختارهای الکترومغناطیسی (EM) زیر طول موجی هستند که به صورت دوره‌ای مرتب شده‌اند و مزایایی نسبت به مواد معمولی دارند[۲]. درواقع تشدید برانگیخته شده توسط ساختار هندسی منحصر به فرد سلول واحد، آن را قادر می سازد تا تعامل قوی با میدان های الکترومغناطیسی داشته باشد[۳]. این توانایی باعث می شود که به طور گسترده در زمینه های مختلف مانند جاذب فراماد که یکی از کاربردهای فراوان آن است اشاره کرد[۴]. در سال‌های اخیر، جاذب های فراماده به دلیل ضخامت کم، ابعاد فشرده و قابلیت دستیابی به جذب بالا، جایگزین مناسبی برای جاذب های متداول شده‌اند. با این حال بسیاری از ساختارهای گزارش‌شده دارای پهنای باند محدود یا فاقد قابلیت تنظیم‌پذیری هستند[۵]. ظهور مواد فعال نظیر گرافن و وانادیوم دی‌اکسید ، امکان طراحی جاذب های قابل تنظیم را فراهم کرده است. گرافن به دلیل رسانندگی قابل کنترل و قابلیت تنظیم انرژی فرمی از طریق اعمال ولتاژ خارجی، یکی از مناسب‌ترین مواد برای کاربردهای تراهرتزی محسوب می‌شود. همچنین VO_2 به عنوان یک ماده تغییر فاز، نقش مهمی در کنترل پاسخ الکترومغناطیسی ساختار ایفا می‌کند[۶].

گرافن یک ماده لانه زنبوری شکل با ساختاری دو بعدی است که از یک لایه اتم کربن ساخته شده است. دارای خواص بی نظیر الکترومغناطیسی، الکتریکی، نوری، مکانیکی، شیمیایی و حرارتی است. علاوه بر این، انرژی فرمی گرافن را می توان با اعمال ولتاژ بایاس خارجی تغییر داد. در نتیجه، فرکانس‌های پیک تشدید جذب را می‌توان به صورت دینامیکی با تغییر رسانندگی گرافن تنظیم کرد[۷].

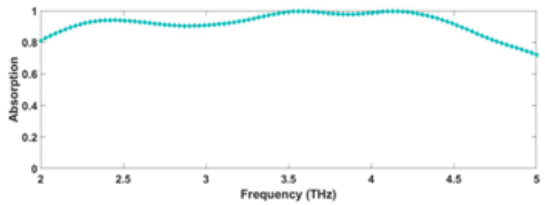
در این مقاله، یک جاذب فراماده چندلایه شامل گرافن و VO_2 معرفی شده و تأثیر تغییر انرژی فرمی گرافن در محدوده ۰ تا ۰/۴ الکترون‌ولت بر عملکرد جذبی آن مورد بررسی قرار گرفته است.

طراحی و مشخصات ساختار هندسی

گانگ و همکاران[۳] یک ساختار جاذب طراحی کرده‌اند که ما با تغییر هندسه و ابعاد پارامترهای آن ساختار را مانند شکل۱ تغییر داده شده است. این ساختار به‌صورت پنج لایه، از پایین به بالا عبارتند از: فلز طلا، لایه دی الکتریک پلی دی متیل سیلوکسان(PDMS)، لایه دی‌اکسید وانادیوم ، لایه دی الکتریک پلی دی متیل سیلوکسان (PDMS) و لایه ساختار مخلوط دی‌اکسید وانادیوم -گرافن است. همانطور که در شکل۱الف نشان داده‌شده‌است. پارامترهای‌ساختاری‌آن‌عبارتنداز: $P_x=P_y=120\mu m$, $D=35\mu m$پارامترشعاع‌چهارحلقه‌های‌دایره دی‌اکسید وانادیوم و گرافن به ترتیب عبارتنداز$r_1=7\mu m$،$r_2=15\mu m$پارامترهای‌ساختاری-متقاطع‌گرافن‌عبارتنداز:$L=100\mu m$، $W=10\mu m$، $Hg=0.34nm$. ثابت دی الکتریک لایه دی الکتریک PDMS 2.35 است،ضخامت-آن$H_4=14\mu m$، $H_2=35\mu m$ است. ضخامت لایه میانی دی‌اکسید وانادیوم و فلزطلا $H_1=H_3=200$ نانومتر است و رسانندگی VO_2 10000 S/m درنظر گرفته شده است و نمودار جذب برحسب فرکانس در شکل۲ آورده شده است.



شکل۱:طرح ساختار سلول واحد جاذب.



شکل۲: نمودارجاذب بر حسب فرکانس برای $\sigma_{VO_2} = 10000$ S/m و $E_f =$ 0 eV.

شکل ۲ طیف جذب ساختار را برای انرژی فرمی صفر نشان می‌دهد. در این حالت میزان جذب در بخش عمده بازه فرکانسی بین ۷۰ تا ۹۵ درصد قرار دارد و بیشینه جذب در ناحیه ۳.۵ تا ۴.۵ تراهرتز مشاهده می‌شود.

برای طراحی ساختارشکل۱ از نرم افزارCST ورژن ۲۰۱۹ از روش تفاضل محدود در حوزه‌ی زمان (FDTD) که در آن موج تراهرتز به طور عمود بر سطح جذب‌کننده طراحی‌شده در امتداد جهت z وارد می‌شود. در محاسبات عددی ما، هر دو جهت x و y شرایط مرزی سلول واحد را تنظیم می‌کنند، در حالی که جهت z شرط مرزی باز است.

رسانندگی گرافن و انرژی فرمی با استفاده از مدل کوبو و روابط زیر محاسبه شده است[۸].در این مقاله مقادیر انرژی فرمی ۰/۱، ۰/۲ و۰/۳ الکترون‌ولت مورد بررسی قرار گرفته‌اند.

$$\sigma_{gra} = \sigma_{inter} + \sigma_{intera} \quad (1)$$

$$\sigma_{inter} = \frac{e^2}{4\hbar^2}\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} arctan\left(\frac{\hbar\omega - 2E_f}{2}\right) \frac{j}{2\pi} \ln \frac{(\hbar\omega + 2E_f)^2}{(\hbar\omega + 2E_f)^2 + 4(K_B T)^2}\right] \quad (2)$$

$$\sigma_{intera} = \frac{2e^2 K_B T}{\pi\hbar^2} \frac{j}{\omega + \frac{j}{\tau}} \ln\left[2cosh\left(\frac{E_f}{2K_B T}\right)\right] \quad (3)$$

که در آن (e) بیانگر بار الکترون، (ħ) ثابت پلانک ، (k_B) ثابت بولتزمن و T، w،τ و E_f به‌ترتیب دمای محیط (۳۰۰ کلوین)، زمان آرامش ، فرکانس زاویه‌ای موج فرودی و انرژی فرمی گرافن هستند. بر اساس اصل طرد پائولی، هدایت سطحی گرافن عمدتاً توسط هدایت درون‌باندی تعیین می‌شود و سهم هدایت بین‌باندی را می‌توان نادیده گرفت. بنابراین، مطابق با مراجع [۹،۱۰]، رابطه (۱) را می‌توان به صورت زیر ساده‌سازی کرد:

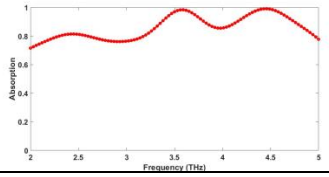
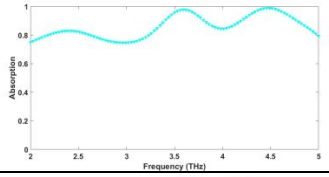
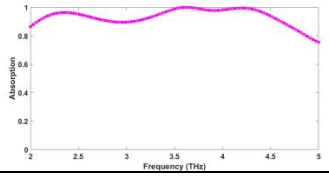
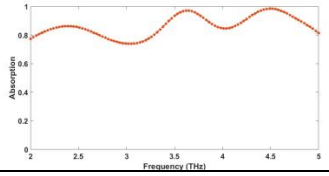
$$\sigma_{gra} = \frac{e^2 E_f}{\pi\hbar^2} \frac{j}{\omega + j\tau^{-1}} \quad (4)$$

رابطه (۴) نشان می‌دهد که هدایت سطحی گرافن نه تنها به فرکانس زاویه‌ای موج الکترومغناطیسی فرودی و زمان آرامش وابسته است، بلکه به انرژی فرمی نیز بستگی دارد. بنابراین، هدایت سطحی گرافن را می‌توان از طریق تغییر زمان آرامش و انرژی فرمی کنترل و تنظیم کرد. [۸].

نمودار اعمال انرژی فرمی مختلف گرافن

برای ساختار جاذب چندلایه طراحی شده(شکل۱) نمودارهای جذب برحسب فرکانس به ازای انرژی فرمی مختلف بررسی شده است که نتایج در جدول۱ آورده شده است. جدول۱ نمودار جذب برحسب فرکانس ساختارجاذب طراحی شده با اعمال انرژی فرمی مختلف ۰/۱، ۰/۲ و۰/۳ الکترون‌ولت گرافن را نشان میدهد.

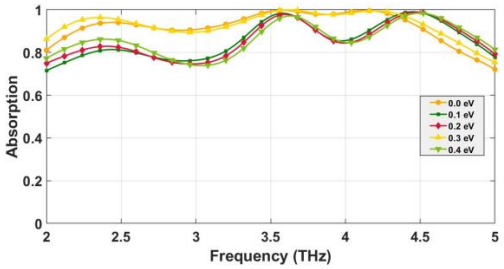
جدول۱. نمودار جذب برحسب فرکانس ساختارجاذب طراحی شده با اعمال انرژی فرمی مختلف گرافن.

ردیف	انرژی فرمی (eV)	نمودارجذب برحسب فرکانس
۱	۰/۱	
۲	۰/۲	
۳	۰/۳	
۴	۰/۴	

طبق جدول۱ در انرژی فرمی ۰/۱ الکترون‌ولت، جذب در محدوده ۳/۵ تا ۴/۶ تراهرتز به مقادیر بسیار بالا نزدیک می‌شود و در سایر نقاط نیز عمدتاً بالاتر از ۷۰ درصد باقی می‌ماند. با افزایش انرژی فرمی به ۰/۲ الکترون‌ولت، جذب در اکثر فرکانس‌ها افزایش یافته و پاسخ ساختار یکنواخت‌تر می‌شود.

بهترین عملکرد در انرژی فرمی ۰/۳ الکترون‌ولت مشاهده می‌شود. در این حالت جذب در بخش عمده بازه ۲ تا ۵ تراهرتز از ۸۵ درصد بیشتر بوده و در محدوده ۳/۵ تا ۴/۵ تراهرتز به مقدار تقریباً واحد می‌رسد. همچنین نوسانات طیف جذب نسبت به سایر حالت‌ها کاهش یافته است که نشان‌دهنده بهبود تطبیق امپدانسی ساختار با فضای آزاد است.

در انرژی فرمی ۰/۴ الکترون‌ولت نیز جذب بالا حفظ می‌شود، اما نسبت به حالت بهینه ۰/۳ الکترون‌ولت کاهش جزئی در برخی نواحی فرکانسی مشاهده می‌شود.



شکل ۳ مقایسه طیف جذب برای مقادیر مختلف انرژی فرمی از ۰ تا ۰/۴ الکترون‌ولت.

شکل ۳ مقایسه طیف جذب برای مقادیر مختلف انرژی فرمی از ۰ تا ۰/۴ الکترون‌ولت را نشان می‌دهد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، افزایش انرژی فرمی تا ۰/۳ الکترون‌ولت موجب افزایش سطح جذب و یکنواختی پاسخ فرکانسی می‌شود. این موضوع ناشی از بهبود هدایت سطحی گرافن و برقراری شرایط مناسب‌تر تطبیق امپدانسی است. در نتیجه، مقدار ۰/۳ الکترون‌ولت به عنوان نقطه عملکرد بهینه ساختار تعیین می‌شود.

نتیجه گیری

در این مقاله یک جذب‌کننده فراماده‌ای پهن‌باند قابل تنظیم مبتنی بر گرافن و وانادیوم دی‌اکسید در ناحیه تراهرتز طراحی و شبیه‌سازی شد. نتایج نشان دادند که تغییر انرژی فرمی گرافن تأثیر قابل توجهی بر عملکرد جذبی ساختار دارد.

با افزایش انرژی فرمی از ۰ تا ۰/۳ الکترون‌ولت، جذب و یکنواختی پاسخ فرکانسی بهبود یافته و بهترین عملکرد در انرژی فرمی ۰/۳الکترون‌ولت حاصل می‌شود. در این حالت جذب در بخش عمده بازه ۲ تا ۵ تراهرتز بیش از ۸۵ درصد بوده و در برخی فرکانس‌ها مانند ۳/۵ و ۴/۵ تراهرتز به جذب کامل نزدیک می‌شود. همچنین در انرژی فرمی ۰/۴ الکترون‌ولت نیز ساختار عملکرد مناسبی از خود نشان می‌دهد.

این ساختار جاذب برای حسگرهای تراهرتزی، کلیدهای نوری، مدولاتورها و سامانه‌های مخابراتی نسل آینده کاربرد دارد.

مرجع‌ها

[1] Huo Dai, Si-Yuan Liao, Jun-Rui Pan, Hai-Feng Zhang; “Theoretical investigation of a tunable vanadium dioxide-based metastructure for ultra-wideband absorption and linear-to-circular polarization conversion across triple-octave frequencies”; Nanoscale (2025).

[2] Tao H, Bingham C M, Strikwerda A C, *et al.*, “Highly flexible wide angle of incidence terahertz metamaterial absorber: Design, fabrication, and characterization,” *Phys. Rev. B,* **78**, 241103 (2008).

[3] Zong, S., Zeng, D., Yuan, W., Liu, G., & Liu, Z. “Recent advances on perfect light absorbers and their promise for high-performance opto-electronic devices”, *Chinese Optics Letters*, ***20***, 073603(2022).

[4] Du Z, He C, Xin J, *et al.*, “Terahertz dynamic multichannel holograms generated by spin-multiplexing reflective metasurface,” *Opt. Express* **32**, 248–259 (2024).

[5]Cao T., Wei C.W., Simpson R.E., Zhang L. and Cryan M.J., “Broadband polarizationindependent perfect absorber using a phase-change metamaterial at visible frequencies”, *Sci. Rep*., **4**, 3955(2014).

[6] Zhao Y T,Wu B and Huang B J., “Switchable broadband terahertz absorber/reflector enabled by hybrid graphene-gold metasurface’’, *Opt. Express* ,**25**, 7161–9(2017).

[7] Nickpay M. R, Danaie M, and Shahzadi A., “Graphene-based tunable quad-band fan-shaped split-ring metamaterial absorber and refractive index sensor for THz spectrum”, Micro and Nanostructures, 173, 207473۲۰۲۳)).

[8] Yang, G., Yan, F., Du, X., Li, T., Wang, W., Lv, Y., Zhou, H. and Hou, Y., Tunable broadband terahertz metamaterial absorber based on vanadium dioxide. *Aip Advances*, **12**, (2022.).

[9] Hu, N.; Wu, F.L.; Bian, L.A. “Dual broadband absorber based on graphene metamaterial in the terahertz range”. Opt. Mater. Express, **8**, 3899(2018).

[10] Liu, M.; Yin, X.B. “A graphene-based broadband optical modulator”. Nature, **474**, 64–67(2011).

مطالعه عددی اثر جنس و ضخامت پوسته بر ویژگی‌های نوری و پلاسمونی نانوذرات هسته–پوسته دو فلزی

فائزه رحیمی نژاد[۱]، ، سمیه پناهی بخش[۲*] ، لاله فرهنگ متین[۱] ، کتایون سماواتی[۱]

۱تهران، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد تهران شمال ، گروه فیزیک

۲ تهران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده لیزر، فوتونیک و کوانتوم

چکیده

در این مقاله، پاسخ اپتیکی و پلاسمونی نانوذرات هسته–پوسته دو فلزی با هسته نقره (Ag) و پوسته‌هایی از جنس طلا (Au) ، مس (Cu) و آلومینیوم (Al) به صورت عددی مورد مطالعه قرار گرفته است. شبیه‌سازی‌ها با استفاده از روش المان محدود (FEM) در نرم‌افزار کامسول انجام شده است. شعاع هسته نقره در تمامی حالت‌ها برابر با 50 nm فرض شده و ضخامت پوسته (t) از 5 nm تا 25 nmتغییر داده شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که جنس پوسته تعیین‌کننده اصلی بازه طول‌موجی تشدید پلاسمون سطحی موضعی (LSPR) است؛ به طوری که پوسته‌های طلا و مس منجر به انتقال به قرمز و پوسته آلومینیوم تمایل به حفظ قله‌ها در طول‌موج‌های کوتاه‌تر دارد. همچنین افزایش ضخامت پوسته (t) در هر سه حالت، سطح مقطع پراکندگی (SCS) را به شدت افزایش داده و آن را به مکانیزم غالب در فرآیند خاموشی تبدیل می‌کند. این ساختارها پتانسیل بالایی برای کاربرد در سلول‌های خورشیدی، حسگرهای زیستی و ادوات فوتوترمال دارند.

واژه های کلیدی: *نانوپلاسمونیک، هسته–پوسته، تشدید پلاسمون سطحی موضعی(LSPR) ، نرم‌افزار کامسول.*

Numerical Study of the Effect of Shell Material and Thickness on the Optical and Plasmonic Properties of Bimetallic Core-Shell Nanoparticle

Faezeh Rahiminejad[1], SomayehPanahibakhsh*[2], Laleh Farhang matin[1] , , Katayoon Samavati[1]

[1] Department of Physics , North Tehran Branch Islamic Azad University, Tehran

[2] Laser, photonics and quantum research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran

Abstract

In this paper, the optical and plasmonic responses of bimetallic core–shell nanoparticles consisting of a silver (Ag) core and gold (Au), copper (Cu), and aluminum (Al) shells were numerically investigated. Simulations were carried out using the Finite Element Method (FEM) in COMSOL Multiphysics software. The radius of the silver core was fixed at 50 nm in all cases, while the shell thickness (t) was varied from 5 nm to 25 nm. The simulation results indicate that the shell material is the primary factor determining the wavelength range of the Localized Surface Plasmon Resonance (LSPR). Specifically, gold and copper shells lead to a redshift in the resonance peaks, whereas aluminum shells tend to preserve the peaks at shorter wavelengths. Furthermore, increasing the shell thickness (t) significantly enhances the Scattering Cross Section (SCS) in all three configurations, making scattering the dominant mechanism in the extinction process. These structures exhibit great potential for applications in solar cells, biosensors, and photothermal devices.

***Keywords**: Nanoplasmonics, Core–Shell Nanoparticles, Localized Surface Plasmon Resonance (LSPR), COMSOL Multiphysics*

PACS No.81

مقدمه

نانوپلاسمونیک به دلیل توانایی فوق‌العاده در محبوس‌سازی و تقویت میدان‌های الکترومغناطیسی در ابعاد زیر طول‌موج، توجه وسیعی را در حوزه‌های حسگری، پزشکی تشخیصی، کاتالیزورهای نوری و افزایش بازدهی سلول‌های خورشیدی جلب کرده است. در میان فلزات نجیب، نقره (Ag) به دلیل اتلاف اهمی بسیار پایین و بازدهی نوری بالا در ناحیه مرئی، به عنوان بهترین ماده پلاسمونی شناخته می‌شود[۱]. با این حال، ناپایداری شیمیایی و اکسیداسیون سریع نقره در شرایط محیطی، عملکرد طولانی‌مدت نانوذرات نقره خالص را با چالش جدی مواجه می‌کند. برای رفع این چالش، ساختارهای هسته–پوسته[1] به عنوان یک راهکار کارآمد معرفی شده‌اند [۲]. پوشاندن هسته نقره با یک پوسته فلزی محافظ، علاوه بر حفظ هسته از اکسیداسیون، امکان مهندسی و تنظیم فیزیکی قله تشدید پلاسمون سطحی موضعی[2] را فراهم می‌سازد. در این پژوهش، سه فلز طلا (Au)، مس (Cu) و آلومینیوم (Al) به عنوان پوسته انتخاب شده‌اند. طلا به دلیل زیست‌سازگاری و پایداری فوق‌العاده، مس به عنوان گزینه‌ای اقتصادی با جذب فوتوترمال بالا، و آلومینیوم به دلیل فرکانس پلاسمای بالا و پاسخ مناسب در طول‌موج‌های کوتاه، رفتارهای اپتیکی کاملاً متفاوتی را در ترکیب با هسته نقره ایجاد می‌کنند[۳]. هدف این مقاله، بررسی و مقایسه سیستماتیک اثر ضخامت (t) و جنس سه پوسته فلزی طلا، مس و آلومینیوم بر سطح مقطعهای جذب (ACS)، پراکندگی (SCS) و خاموشی (Ext) نانوذره است که در نهایت با توجه به مشخصات پلاسمونی هر یک پتانسیل کاربرد نانو ذره دوفلزی مورد نظر شناخته می شود.

با وجود مطالعات متعدد درباره نانوذرات هسته–پوسته، اغلب پژوهش‌های پیشین بر بررسی یک جنس پوسته یا تعداد محدودی از پارامترهای هندسی متمرکز بوده‌اند و مقایسه‌ای جامع از تأثیر جنس پوسته و تغییرات ضخامت آن بر رفتار پلاسمونی نانوذرات با هسته نقره ارائه نشده است. در این پژوهش، اثر سه ماده پوسته شامل طلا، مس و آلومینیوم در بازه ضخامت ۵ تا ۲۵ نانومتر با استفاده از روش المان محدود در نرم‌افزار کامسول به‌صورت نظام‌مند بررسی و مقایسه شده است. نوآوری این مطالعه در تحلیل هم‌زمان تأثیر جنس و ضخامت پوسته بر طیف‌های جذب، پراکندگی و خاموشی، همچنین بررسی جابه‌جایی قله تشدید پلاسمونی و تغییر مکانیزم‌های اتلاف نوری است. نتایج این پژوهش می‌تواند در انتخاب ساختار مناسب نانوذرات هسته–پوسته برای کاربردهایی مانند حسگرهای پلاسمونیکی، فوتوترمال‌تراپی، تصویربرداری زیستی و طراحی ادوات نوری در مقیاس نانو راهگشا باشد [۴].

روش عددی و شبیه‌سازی

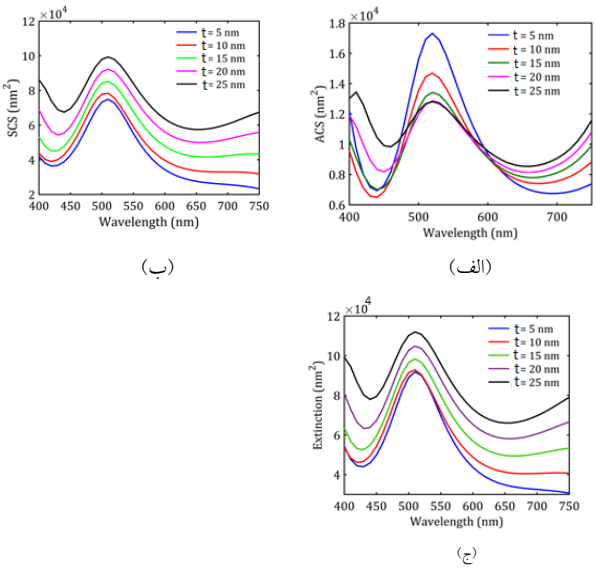
در این تحقیق، ویژگی‌های اپتیکی نانوذره هسته–پوسته دو فلزی با استفاده از ماژول اپتیک موجی [3] در نرم‌افزار کامسول بر پایه روش المان محدود (FEM) شبیه‌سازی شده است. ساختار هندسی شامل یک هسته کروی از جنس نقره با شعاع ثابت nm ۵۰ است که توسط یک پوسته کروی هم‌مرکز با ضخامت متغیر t (شامل مقادیر ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ و ۲۵ نانومتر) احاطه شده است. ثابت‌های دی‌الکتریک وابسته به طول‌موج برای فلزات نقره، طلا، مس و آلومینیوم از مراجع معتبر تجربی (مانند پالیک و جانسون–کریستی) استخراج و به نرم‌افزار معرفی شده است [۵]. کل ساختار نانوذره در محیط دی‌الکتریک یکنواخت هوا قرار گرفته و تحت تابش موج تخت الکترومغناطیسی در بازه طول‌موجی ۴۰۰ تا ۷۵۰ nm قرار دارد. برای جلوگیری از بازتابش امواج متفرق شده و شبیه‌سازی یک محیط بی‌نهایت، از لایه PML در اطراف ناحیه محاسباتی استفاده شده است. سطح مقاطع جذب (C_{abs})، پراکندگی (C_{scat}) و خاموشی (C_{ext}) از طریق انتگرال‌گیری از بردار پوئینتینگ روی سطوح داخلی و خارجی نانوذره محاسبه شده‌اند.

[1] Core-Shell
[2] LSPR
[3] Wave Optics

نتایج و بحث

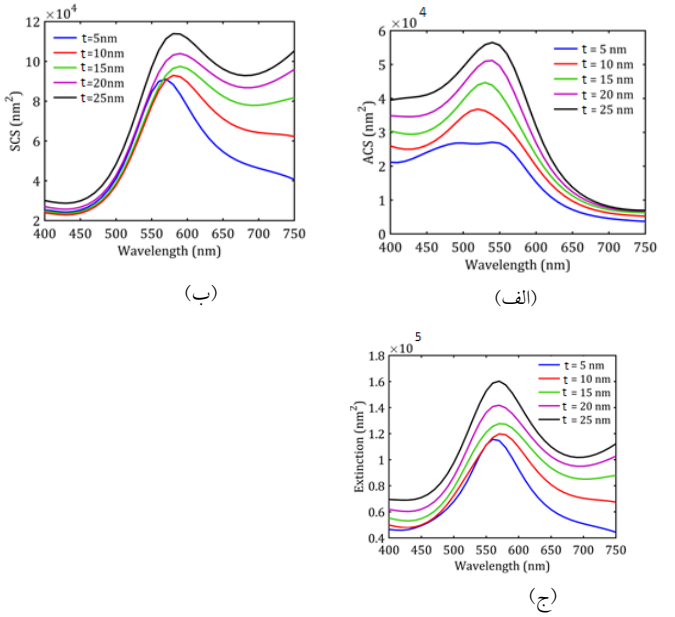
بر اساس نمودارهای شکل ۱ برای سیستمAg@Al ، قله اصلی تشدید پلاسمونی در محدوده طول‌موجی مرئی (حدود 510 nm)ظاهر می‌شود. با افزایش ضخامت پوسته آلومینیوم (t) از ۵ به ۲۵ نانومتر، موقعیت طول‌موج تشدید تغییرات بسیار ناچیزی را نشان می‌دهد. این پدیده به دلیل فرکانس پلاسمای بالای آلومینیوم و چگالی بالای الکترون‌های آزاد آن است. با ضخیم‌تر شدن پوسته آلومینیوم، شدت سطح مقطع پراکندگی (SCS) روند افزایشی منظمی دارد (شکل ۱ ب)، در حالی که سطح مقطع جذب (ACS) در ضخامت‌های بالا دچار کاهش شدت در قله می‌شود.

با اعمال پوسته طلا روی هسته نقره، رفتار نوری سیستم به طور کامل تغییر می‌کند. قله تشدید در نمودار خاموشی برای ضخامت $t = 5$ nm در محدوده 560 nm واقع شده است که با افزایش ضخامت به $t = 25$ nm، این قله با یک جابجایی آشکار به قرمز، به طول‌موج 580 nm می‌رسد. علت این امر، ضریب شکست حقیقی بالاتر طلا نسبت به نقره و محیط پیرامون است که سبب کاهش فرکانس نوسان تجمعی الکترون‌ها می‌شود. به دلیل جفت‌شدگی فرکانس پلاسمونی این ساختار با گذارهای بین‌باندی طلا در نواحی زیر 600 nm، اتلاف[4] رخ داده و قله‌ها دچار پهن‌شدگی می‌شوند.



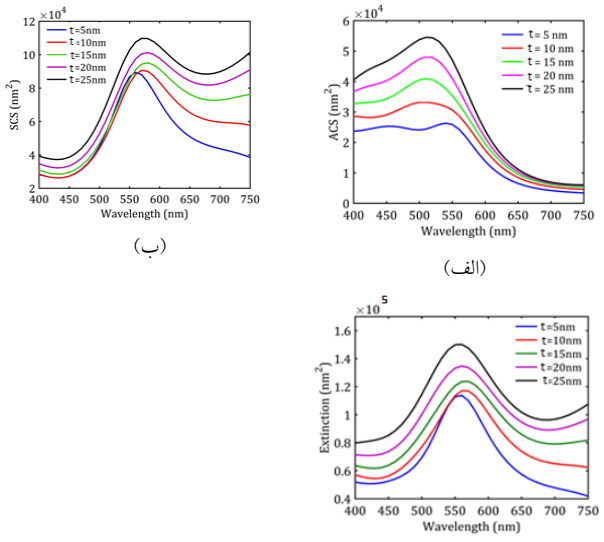
(الف) (ب) (ج)

شکل ۱: نمودارهای الف) سطح مقطع جذب، ب) پراکندگی و ج) خاموشی برای نانوذره با هسته از جنس نقره و پوسته از جنس آلومینیوم



(ب) (الف) (ج)

شکل ۲: نمودارهای الف) سطح مقطع جذب، ب) پراکندگی و ج) خاموشی برای نانوذره با هسته از جنس نقره و پوسته از جنس طلا



(ب) (الف) (ج)

شکل ۳: نمودارهای الف) سطح مقطع جذب، ب) پراکندگی و ج) خاموشی برای نانوذره با هسته از جنس نقره و پوسته از جنس مس

[4] Landau

در شکل ۳ نمودارهای مربوط به پوسته مس، رفتاری تا حدودی مشابه با طلا اما با اتلاف شدیدتر را نشان می‌دهند. در سیستم Ag@Cu، قله تشدید خاموشی در محدوده 555 nm تا 570 nm جابجا می‌شود. با افزایش ضخامت مس، شدت قله خاموشی افزایش یافته و به محدوده 1.5×10^5 nm^2 می‌رسد.

مس دارای لبه جذب بین‌باندی قوی در ناحیه مرئی است. این ویژگی باعث می‌شود که قله جذب (ACS) در سیستم Ag@Cu نسبت به طلا پهن‌تر شود. این پهن‌شدگی گرچه فاکتور کیفیت پلاسمونی را کاهش می‌دهد، اما برای کاربردهای تشخیصی وسیع‌باند و سیستم‌های گرمایش نوری[5] یک مزیت بزرگ به شمار می‌رود[۶].

یک ویژگی مشترک در هر سه سیستم (Al, Au, Cu) این است که با افزایش ضخامت پوسته (t) و در نتیجه بزرگتر شدن ابعاد کل نانوذره (عبور قطر کل از 100 nm)، سطح مقطع پراکندگی (SCS) به شدت بر مقطع جذب(ACS) غلبه می‌کند .بر اساس نظریه می، در نانوذرات بزرگ، قطبش‌پذیری دوقطبی دچار تأخیر فاز شده و سهم جمله پراکندگی به صورت توان‌های بالاتری از شعاع (r^6) نسبت به جذب (r^3) رشد می‌کند. بالاترین میزان پراکندگی به ترتیب در پوسته‌های طلا و مس مشاهده می‌شود که آن‌ها را برای کاربردهای بازپخش نور در سلول‌های خورشیدی لایه نازک بسیار مناسب می‌سازد.

نتیجه گیری

در این تحقیق، اثر جنس و ضخامت پوسته بر مشخصات پلاسمونی نانوذرات هسته-پوسته با هسته نقره به روش المان محدود بررسی شد. نتایج نشان داد که پوسته آلومینیوم قله تشدید را در طول‌موج‌های کوتاه‌تر (510 nm) حفظ می‌کند، در حالی که پوسته‌های طلا و مس باعث جابجایی قله به فرکانس‌های پایین‌تر 580 nm می‌شوند. با افزایش ضخامت پوسته (t) از ۵ تا ۲۵ نانومتر، حجم ماده برهم‌کنش‌کننده افزایش یافته و منجر به تقویت شدت خاموشی نوری می‌شود . در تمامی حالات، به دلیل بزرگ بودن ابعاد کل ذره(D > 100 nm) ، مکانیزم پراکندگی مکانیزم غالب در اتلاف نوری است . پوسته مس به دلیل گذارهای بین‌باندی، پهن‌ترین قله و بیشترین جذب پهن‌باند را ارائه می‌دهد، در حالی که طلا بهترین تعادل را بین پایداری، و شدت پلاسمونی برقرار می‌کند.

[5] Photothermal Therapy

مرجع‌ها

[۱] Bassam Al-Qadi.Numerical simulations of the optical properties of SiO2@Au core–shell nanoparticles. 14, 065207 (2024); doi: 10.1063/5.0214571 *AIP Advances*

[۲] *Sungi Kim, Jae-Myoung Kim.* "Nonnoble-Metal-Based Plasmonic Nanomaterials: Recent Advances and Future Perspectives"Plasmonic Nanomaterials.*Adv. Mater.* 2018, 1704528.

[۳] Chen LK (2019) Dementia care in developing countries. Aging Med

[۴] .Adhikari S, Spaeth P, Kar A, Baaske MD, Khatua S, Orrit M (2020) *Photothermal microscopy: imaging the optical absorption of singlenanoparticlesandsinglemolecules.ACSnano*14(12):16 414–16 445

[۵] Max Brynolf, Rohini Sengup. "Magneto-Plasmonic Gold & Nickel Core-Shell Structures". Examensarbete 15 hp ,ISSN: 1401-5757,2019.

[۶] nanoparticles: "Surface plasmons in metallic M A Garcia and applications"JOURNAL OF PHYSICS D: APPLIED fundamentals (2011) ,283001. PHYSICS,

بررسی تغییرات جهتی بلورمایع نماتیک با ناهمسانگردی دیامغناطیسی منفی آلائیده شده با نانوذرات فرومغناطیس

صوفی دوش، حسین[۱] ؛ پورصمد بناب، جعفر[۱]؛ دژآلود، طاهره[۱]

[۱]گروه اپتیک و لیزر، دانشگاه بناب، بناب

چکیده

در این مقاله به روش تئوری پیوستاری[۱] اختلال جهتی ایجاد شده توسط میدان مغناطیسی خارجی در بلورمایع دارای پذیرفتاری دیامغناطیسی منفی آلائیده شده با نانوذرات فرومغناطیس بررسی شده است. جهت گیری فرونماتیک (مخلوط بلورمایع و نانوذرات فرومغناطیس) در غیاب میدان، در میدان های ضعیف و در میدان های بزرگ مور مطالعه قرار گرفته است. نشان داده‌ایم که در این نوع سوسپانسیون به محض اعمال میدان مغناطیسی خارجی، مولکول‌های بلورمایع برخلاف بلورمایع خالص با میدان مغاطیسی خارجی اندرکنش و چرخش می‌کنند. همچنین طبق انتظار با اعمال میدان مغناطیسی بیشتر از آستانه، ممان دوقطبی نانوذرات فرومغناطیس کاملاً با میدان خارجی هم جهت می‌شوند.

واژه های کلیدی: *تئوری پیوستاری – بلورمایع با ناهمسا نگردی دیامغناطیسی منفی – فرونماتیک*

Investigation of the Orientational Variations of Nematic Liquid Crystals with Negative Diamagnetic Anisotropy Doped with Ferromagnetic Nanoparticles

Soufi Doush, Hosein [1]; Poursamad Bonab, Jafar[1] ; Dezhaloud, Tahereh[1]

[1] Department of Laser and Optical Engineering, University of Bonab, Bonab

Abstract

Using the continuum theory approach, the orientational distortion induced by an external magnetic field in a liquid crystal with negative diamagnetic susceptibility doped with ferromagnetic nanoparticles has been investigated. The orientation of the ferronematic system (a mixture of liquid crystal and ferromagnetic nanoparticles) has been studied in the absence of the magnetic field, under weak magnetic fields, and under strong magnetic fields. We have shown that, in this type of suspension, immediately upon the application of an external magnetic field, the liquid crystal molecules, unlike those in a pure liquid crystal, interact with the external magnetic field and undergo reorientation. Furthermore, as expected, when the applied magnetic field exceeds the threshold value, the magnetic dipole moments of the ferromagnetic nanoparticles become completely aligned with the direction of the external magnetic field.

***Keywords**: continuum theory - liquid crystal with negative diamagnetic susceptibility - ferronematic*

PACS No. 81

[1] *continuum theory*

مقدمه

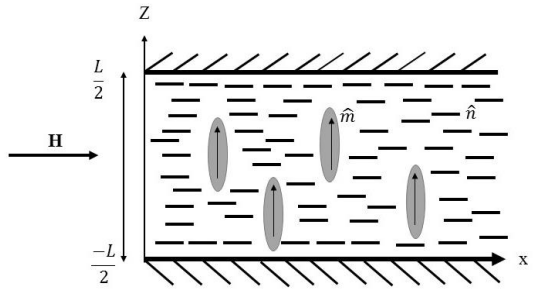
در دنیای امروز بلورهای مایع در صنعت به خصوص در ساخت نمایشگرها و ابزارهای نوری کاربرد وسیعی دارند. بلورهای مایع در برخی جهات دارای خواص بلوری و در برخی جهات خواص مایعات را دارند. این مواد از نظر مغناطیسی جزو مواد دیامغناطیس بوده و چنانچه در معرض میدان مغناطیسی قرار بگیرند، اندرکنش خاصی با میدان ایجاد نمی‌کنند؛ اما چنانچه بزرگی میدان خارجی از مرتبه ی 10^4 گاوس باشد! خواص بلورمایع تغییر می‌کند. در سال ۱۹۷۰ اولین بار دوژن و همکارانش به صورت نظری اثبات کردند؛ در صورتی که بلورمایع نماتیک[۲] با نانوذرات فرومغناطیس آلائیده شود و سپس این مخلوط در معرض میدان خارجی قرار بگیرد، جهت‌گیری مولکول‌های بلورمایع در میدان‌های به مراتب بسیار کوچک امکان پذیر خواهد بود [۱]. این پیش‌بینی چندی بعد توسط رائول و همکارانش به صورت آزمایشگاهی تأیید گردید [۲]. ریخر و بوریلف تئوری دوژن را توسعه داده [۳] و از آن زمان به بعد تحقیقات گسترده ای در حوزهٔ بلورهای مایع آلائیده شده با نانوذرات صورت گرفته است. البته باید توجه کرد میزان غلظت نانوذره در داخل بلور مایع باید به حدی باشد که خواص ذاتی محیط میزبان (بلورمایع) چه از نظر ظاهری چه از نظری میکروسکپیکی دچار تغییر نشود.

اندرکنش فرونماتیک[۳] (بلور مایع آلائیده با نانو ذرات فرومغناطیس)، به دو روش صورت می‌پذیرد. یک) میدان خارجی با مولکول بلورمایع اندرکنش کرده و سبب تغییر جهت مولکول های بلور مایع می‌شود. دو) میدان با ممان دوقطبی مغناطیسی نانوذره اندرکنش کرده و سبب چرخش نانودره شده و این چرخش به صورت مکانیکی به مولکول بلور مایع منتقل و در نتیجه موجب تغییر چرخش مولکول های بلور مایع می‌شود.

بیشتر تحقیقات انجام گرفته بر روی بلورمایع‌های بوده است که دارای ناهمسانگردی مغناطیسی مثبت بوده اند [۵و۴] و تحقیقات اندکی بر روی بلورهای مایع نماتیک با ناهمسانگردی پذیرفتاری دیامغناطیسی منفی ($\Delta\chi \prec 0$) صورت گرفته است [۶]. تحقیق پیش‌رو طبق داده‌های مربوط به بلور مایع، ZLI-1695 که ناهمسانگردی پذیرفتاری آن منفی است، ($\Delta\chi \prec 0$) انجام گرفته است[۷].

انرژی آزاد و معادلات تعادل

سلول به ضخامت L حاوی فرونماتیک را در نظر بگیرید. محور x موازی با صفحات محدود کنندهٔ سلول و محور Z عمود بر صفحات است. میدان مغناطیسی موازی با صفحات به سلول اعمال می‌شود. فرض می‌کنیم لنگراندازی[۴] بین مولکول‌های بلورمایع و نانوذرات نرم و عمود و نیز لنگراندازی بین مولکول بلورمایع و صفحات سلول سخت و مسطح باشد. جهت میدان مغناطیسی خارجی موازی با صفحات سلول $\overrightarrow{H}=(H,0,0)$ به فرونماتیک وارد می شود. شکل ۱



شکل ۱: لایهٔ فرونماتیک در میدان مغناطیسی خارجی

عبارت انرژی آزاد F را می توان به صورت زیر نوشت:

$$F=\iiint F_v dv \qquad (۱)$$

$$F_v = F_1+F_2+F_3+F_4+F_5 \qquad (۲)$$

$$F_1 = \frac{1}{2}\left[K_1\left(\vec{\nabla}\times n\right)^2+K_2\left(n.\vec{\nabla}\times n\right)^2+K_3\left(n\times\vec{\nabla}\times n\right)^2\right] \qquad (٤)$$

$$F_2=-\frac{1}{2}\Delta\chi\left(n.\overrightarrow{H}\right)^2 \qquad (٤)$$

$$F_3=-\overrightarrow{M}_s f\left(n.\overrightarrow{H}\right) \qquad (٥)$$

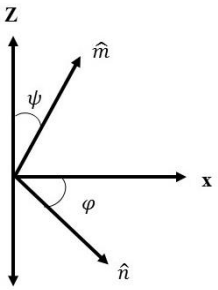
[2] Nematic Liquid Crystal
[3] Ferronematic
[4] Anchoring

$$F_4 = \frac{w}{d}(m.n)^2 \qquad (۶)$$

$$F_5 = \frac{K_B T}{v}(f \ln f) \qquad (۷)$$

K_1 ، K_2 ، K_3 ضرایب الاستیک، n بردار جهت‌نما، m ممان‌دوقطبی مغناطیسی نانوذرات، $\overrightarrow{M}_s$، مغناطش اشباع ذرات، f کسر حجمی ذرات با ممان مغناطیسی $\vec{\mu} = \overrightarrow{M}_s v\, m$، K_B ثابت بولتزمان، T دما و v حجم یک نانو ذره، $\overrightarrow{H}$ میدان مغناطیسی، $\Delta\chi$ ناهمسانگردی پذیرفتاری بلور مایع، w چگالی انرژی سطحی مولکول های جفت شده با ذرات مغناطیسی است. (اگر $w \succ 0$ در غیاب میدان میدان خارجی، کمینهٔ انرژی متناسب با حالتی است که بردار جهت نما (دیرکتور[5]) $n \| m$ باشد.)

در صورت اعمال میدان، نانوذره تمایل دارد هم‌جهت با میدان خارجی و نیز مولکول بلورمایع به دلیل $\Delta\chi \prec 0$ تمایل دارد طوری چرخش کنند که عمود بر میدان خارجی جهت‌گیری نمایند. شکل ۲



شکل ۲: انحراف مولکول بلورمایع ذرات مغناطیسی

می‌توان نوشت:

$$n = (\cos\varphi, 0, -\sin\varphi)$$
$$m = (\cos\psi, 0, \sin\psi)$$

که φ زوایهٔ بردار جهت‌نما با محور x و زاویهٔ ψ زاویهٔ ممان دوقطبی مغناطیسی با محور z است.

با تعریف پارامترهای $h = HL\sqrt{\frac{|\Delta\chi|}{K_1}}$ ، $b = \frac{M_s \bar{f} L}{\sqrt{K_1 |\Delta\chi|}}$ ، $\kappa = \frac{K_B T \bar{f} L^2}{K_1 v}$ ، $\sigma = \frac{w \bar{f} L^2}{K_1 d}$ و انجام $\bar{f}\, g = f$ عملیات جبری به رابطهٔ ۸ می توان رسید.

$$F = \int_{\frac{-1}{2}}^{\frac{1}{2}} [\frac{1}{2}\varphi'^2 K(\varphi) + \frac{1}{2}h^2 \sin^2\varphi - bhg \sin\psi - \sigma g \sin^2(\psi-\varphi) + \kappa g \ln g]\, d\zeta \qquad (۸)$$

که $K(\varphi) = \cos^2\varphi + k \sin^2\varphi$ ، $k = \frac{K_3}{K_1}$ ، $\zeta = \frac{z}{L}$ است.

اگر رابطهٔ (۸) را نسبت به φ و ψ و g کمینه کنیم، به معادلات زیر می رسیم.

$$K(\varphi)\varphi'' + \frac{1}{2}\frac{dk}{d\varphi}\varphi'^2 + \frac{1}{2}h^2 \sin 2\varphi - \sigma g \sin 2(\psi-\varphi) = 0 \qquad (۹)$$

$$bh\cos\psi + \sigma \sin 2(\psi-\varphi) = 0 \qquad (۱۰)$$

$$g = Q Exp[\frac{bh}{k}\sin\psi + \frac{\sigma}{\kappa}\sin^2(\varphi-\psi)] \qquad (۱۱)$$

که: $Q^{-1} = \int_{\frac{-1}{2}}^{\frac{1}{2}} Exp[\frac{bh}{k}\sin\psi + \frac{\sigma}{\kappa}\sin^2(\varphi-\psi)]\, d\zeta$ اثر تفکیک را توصیف می‌کند.

محاسبات عددی

با اعمال میدان خارجی، اختلال در بافت و جهت‌گیری فرونماتیک ایجاد می‌شود. در میدان‌های ضعیف زوایای بردار جهت نما و مغناطش بسیار کوچک هستند. با خطی کردن معادلات ۱۰ و ۱۱ می توان به روابط ۱۲ و ۱۳ رسید:

$$\varphi'' + h^2\varphi - 2\sigma g(\psi-\varphi) = 0 \qquad (۱۲)$$

$$bhg + \sigma g(\psi-\varphi) = 0 \qquad (۱۳)$$

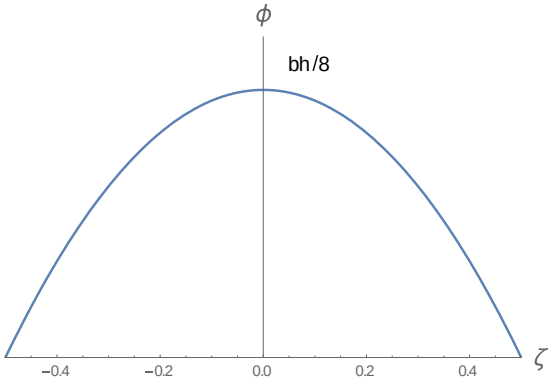
با توجه به فرض اولیه، لنگراندازی سخت و تخت مابین مولکول‌های بلورمایع و دیواره‌ها: $\varphi(\frac{1}{2}) = \varphi(\frac{-1}{2}) = 0, g = 1$

[5] Director

و $\varphi'' = \frac{d^2\varphi}{d\zeta^2}$ از رابطه های ۱۲ و ۱۳ می‌توان رابطهٔ ۱٤ را استخراج کرد.

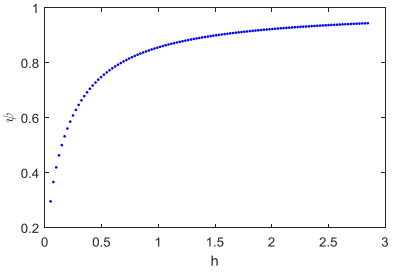
$$\varphi = \frac{-bh}{2}\zeta^2 + \frac{bh}{8} \qquad (۱٤)$$

با رسم نمودار برای حالت حدی (معادلهٔ ۱٤) ملاحظه می‌شود حتی در میدان‌های بسیار کوچک هم، مولکول‌های بلورمایع چرخش می‌کنند. بیشترین انحراف در مرکز سلول $\zeta = 0$ اتفاق می‌افتد، طبق رابطهٔ اثر تفکیک[6] بیشترین تجمع نانوذرات هم در مرکز سلول روی می‌دهد. هرچقدر میدان h و غلظت نانوذره b زیاد باشد، میزان انحراف نیز زیاد خواهد بود. شکل۳



شکل ۳: تغییر جهت مولکول بلورمایع در میدان های بسیار کوچک

با در نظر گرفتن داده‌های تجربی ارائه شده برای ZLI-1695 و حل عددی معادلات (۹)، (۱۰) و (۱۱) در نرم افزار متلب، در مرکز سلول $\zeta = 0$ برای حالت $b = 10, \sigma = 2.5, \kappa = 0.1$، و انحراف نانوذرات (ψ) با افزایش میدان خارجی از مقدار صفر شروع به افزایش و در نهایت کاملا موازی با میدان خارجی قرار می‌گیرند. شکل ٤



شکل ٤: تغییر جهت نانوذرات مغناطیسی در مرکز سلول برای حالت

$$b = 10, \sigma = 2.5, \kappa = 0.1$$

نتایج

بلورهای مایع تقریباً موادی غیرمغناطیسی هستند طوری‌که ساختار جهت‌گیری‌بلورمایع خالص، فقط در میدان‌های بسیار بزرگ مختل می‌گردد؛ در این مقاله اثبات کردیم، چنانچه بلورمایع نماتیک با ناهمسانگردی دیامغناطیسی منفی، با نانوذرات فرومغناطیسی آلائیده گردد، چرخش مولکول بلورمایع فرونماتیک حتی در میدان خارجی بسیار کوچک نیز اتفاق می‌افتد. همچنین چرخش نانوذرات دوپ شده در بلور مایع، از مقدار صفر تا مقدار نهایی آن (کاملاً موازی) با میدان خارجی به صورت عددی با برنامهٔ محاسباتی متلب شبیه سازی شده است که این امر مطابق با پیش بینی‌های علمی است.

مراجع

[1] Brochard, F., and P. G. De Gennes. "Theory of magnetic suspensions in liquid crystals." *Journal de Physique* **31**, no. 7 (1970): 691-708.
[2] Rault, J., P. Cladis, and J.J.P.L.A. Burger, *Ferronematics*. 1970. **32**(3): p. 199-200.
[3] Burylov, S. and Y.L. Raikher, *Macroscopic properties of ferronematics caused by orientational interactions on the particle surfaces. I. Extended continuum model.* Molecular Crystals and Liquid Crystals Science and Technology. Section A. Molecular Crystals and Liquid Crystals, 1995. **258**(1): p. 107-122.
[4] Petrov, D., A.J.M.C .Zakhlevnykh, and L. Crystals, *Freedericksz transition in compensated ferronematic liquid crystals.* 2012. **557**(1): p. 60-72.
[5] Petrov, D. A., Skokov, P. K., Zakhlevnykh, A. N., & Makarov, D. V. (2019). Magnetic segregation effect in liquid crystals doped with carbon nanotubes. *Beilstein Journal of Nanotechnology*, ***10***(1), 1464-1474.
[6] Zakhlevnykh, A. and D.J.P.T. Petrov, *Magnetic field induced orientational transitions in soft compensated ferronematics.* 2014. **87**(1): p. 1-18.
[7] Kopčanský, P., et al., *The structural instabilities in ferronematic based on liquid crystal with negative diamagnetic susceptibility anisotropy.* 2010. 322(22): p**. 3696-3700**.

[6] Segregation Effect

مقایسه عددی رفتار پلاسمونی در آرایه‌های مربعی با تک نانوذره هسته-پوسته دوفلزی

فائزه رحیمی نژاد[۱]، ، سمیه پناهی بخش[۲*] ، لاله فرهنگ متین[۱] ، کتایون سماواتی[۱]

۱تهران، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد تهران شمال ، گروه فیزیک

۲ تهران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده لیزر، فوتونیک و کوانتوم

چکیده

در این مقاله، پاسخ نوری و مشخصات تشدید پلاسمون سطحی موضعی (LSPR) آرایه‌های متشکل از چهار نانوذره هسته-پوسته دوفلزی با هسته طلا (Au) و پوسته‌هایی از جنس مس (Cu) و نیکل (Ni) مورد مطالعه عددی قرار گرفته است. ذرات دارای شعاع هسته 50 nm و ضخامت پوسته 10 nm بوده و در گوشه‌های یک چیدمان مربعی قرار گرفته‌اند. شبیه‌سازی‌ها بر پایه روش المان محدود (FEM) در نرم‌افزار کامسول انجام شده است. در این پژوهش، سطح مقطع های جذب(ACS) ، پراکندگی (SCS) و خاموشی (ECS) آرایه چهارتایی محاسبه و با پاسخ نوری تک‌نانوذره هسته-پوسته متناظر مقایسه گردید. نتایج نشان می‌دهد که در حالت تک‌ذره، هسته طلا قله اصلی را در ناحیه مرئی هدایت می‌کند، اما قرارگیری ذرات در آرایه مربعی به دلیل جفت‌شدگی الکترومغناطیسی شدید در گپ‌های بین‌ذره‌ای، منجر به تقویت سطح مقطع خاموشی تا بیش از ۳ تا ۴ برابر نسبت به حالت تک‌ذره می شود و تقارن آرایه، مدهای چندقطبی مرتبه بالاتر را در طول‌موج‌های کوتاه (320-350 nm) تحریک می‌کند. این آرایه‌های منسجم پلاسمونی، بستری ایده‌آل برای کاربردهایی نظیر طیف‌سنجی رامان ارتقاءیافته سطحی (SERS) و گرمایش نوری به شمار می‌روند.

واژه های کلیدی: آرایه پلاسمونی، جفت‌شدگی میدان نزدیک، نانوذرات دوفلزی، مدهای چندقطبی، نرم‌افزار کامسول.

Numerical Comparison between the Plasmonic Behavior of Square Arrays and Single Bimetallic Core-Shell Nanoparticles

Faezeh *Rahiminejad[1], SomayehPanahibakhsh*[2], Laleh Farhang matin[1] , , Katayoon Samavati[1]*

[1] Department of Physics , North Tehran Branch Islamic Azad University, Tehran

[2] Laser, photonics and quantum research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran

Abstract

In this paper, the optical response and localized surface plasmon resonance (LSPR) characteristics of arrays consisting of four bimetallic core-shell nanoparticles with a gold (Au) core and copper (Cu) and nickel (Ni) shells are numerically studied. The particles have a core radius of 50 nm and a shell thickness of 10 nm, and are placed at the corners of a square arrangement. The simulations are performed using the finite element method (FEM) in COMSOL software. In this study, the absorption cross-section (ACS), scattering cross-section (SCS), and extinction cross-section (ECS) of the four-particle array are calculated and compared with the optical response of a corresponding single core-shell nanoparticle. The results show that in the single-particle case, the gold core dominates the main peak in the visible region, but the placement of particles in the square array, due to strong electromagnetic coupling in the interparticle gaps, leads to an enhancement of the extinction cross-section by more than 3 to 4 compared to the single-particle case. Furthermore, the symmetry of the array excites higher-order multipole modes at shorter wavelengths (320–350 nm). These coherent plasmonic arrays represent an ideal platform for applications such as surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) and photothermal heating.

***Keywords**: Plasmonic array, near-field coupling, bimetallic nanoparticles, multipole modes, COMSOL software*

PACS No.81

مقدمه

تغییر چیدمان نانوذرات پلاسمونی از حالت تک‌عنصری به ساختارهای خوشه‌ای[1] و آرایه‌ای، یکی از مؤثرترین روش‌ها برای مهندسی در مقیاس نانو و ایجاد ویژگی‌های اپتیکی نوظهور است. زمانی که چند نانوذره فلزی در فاصله‌ای بسیار کوتاه از یکدیگر (کمتر از قطر ذرات) قرار می‌گیرند، میدان‌های ناپایدار[2] ناشی از نوسانات پلاسمونی آن‌ها با یکدیگر تداخل کرده و پدیده «جفت‌شدگی پلاسمونی»[3] را به وجود می‌آورند. این فرآیند منجر به تمرکز شدید میدان الکترومغناطیسی در فضای فاصله میان ذرات و شکل‌گیری «نقاط داغ»[4] می‌گردد [۱].

در این میان مهندسی نانوذرات دوفلزی[5] به فرم ساختار هسته–پوسته[6] یکی از جذاب‌ترین استراتژی‌ها برای کنترل پاسخ اپتیکی و بهبود پایداری شیمیایی مواد پلاسمونی است. سیستم‌هایی که از فلزات نجیب در ترکیب با فلزات واسطه یا کاتالیزوری استفاده می‌کنند، به دلیل ایجاد ویژگی‌های نوری منحصربه‌فرد، جایگاه ویژه‌ای در حسگری و فوتوکاتالیز دارند [۲]. در این میان، طلا (Au)به عنوان هسته، پایداری فوق‌العاده و تشدید پلاسمونی شدیدی را فراهم می‌کند، در حالی که پوسته‌هایی از جنس مس (Cu)و نیکل (Ni) می‌توانند فرکانس تشدید را جابجا کرده و ویژگی‌های جدیدی (مانند پاسخ فوتوترمال پهن‌باند یا خواص مگنتو–پلاسمونیک) به سیستم تزریق کنند. چیدمان مربعی چهارتایی[7] به دلیل تقارن هندسی بالا، پتانسیل فوق‌العاده‌ای در برهم‌کنش دوقطبی–دوقطبی مدهای هم‌فاز و همچنین تحریک مدهای تاریک مرتبه بالا دارد [۳].

در این پژوهش، نانوذرات هسته–پوسته Au@Cu و Au@Ni با ابعاد (هسته ۵۰ و پوسته ۱۰ نانومتر) را در یک آرایه چهارتایی مربعی چیده و با استفاده از روش المان محدود، تغییرات فیزیکی مقاطع اپتیکی آن‌ها را در مقایسه با حالت تک‌ذره تحلیل کرده ایم.

مدل و روش عددی

شبیه‌سازی‌های این پژوهش با استفاده از روش المان محدود (FEM) در محیط نرم‌افزار کامسول انجام شده است. هندسه ساختار شامل چهار نانوذره دوفلزی کروی متقارن است که در گوشه‌های یک مربع بر روی یک صفحه دی‌الکتریک قرار گرفته‌اند. برای شبیه سازی های تک ذره که کروی هستند نیز روش شبیه سازی به همین صورت است با این تفاوت که فقط یک نانوذره در مرکز مختصات قرار گرفته و میدان با شرایط داده شده زیر به آن اعمال می شود. پاسخ نوری این سیستم تحت تابش یک موج تخت با قطبش خطی در بازه طول‌موجی ۲۵۰ تا ۱۰۰۰ نانومتر ارزیابی شده است. گذردهی نسبی مختلط وابسته به فرکانس $\varepsilon(\omega)$ برای مواد فلزی (Au، Cu، Ni) با استفاده از داده‌های ثابت نوری موجود در کتابخانه مواد کامسول چند فیزیکی تعریف شد. این داده‌های کتابخانه‌ای برای Au، Cu از اندازه‌گیری‌های تجربی جانسون و کریستی [۴] و برای Ni از مجموعه‌های موجود در کتابچه راهنمای Palik [۵] بدست می آید. شعاع هسته $r = 50$ نانومتر انتخاب شد و ضخامت پوسته (t) برای همه شبیه‌سازی‌ها ۱۰ نانومتر در نظر گرفته شد. هوا ($n = 1.00$) به عنوان محیط اطراف نانوذرات در نظر گرفته شد. پارامتر فاصله بین ذرات g در آرایه چهارتایی ۱۰ نانومتر در نظر گرفته شد. صفحه ذرات موازی با سطح زیرلایه (صفحه xy) بود و موج تخت فرودی با میدان الکتریکی با قطبش در امتداد محور z در جهت y منتشر شد. یک لایه PML تعریف شده در نرم افزار کامسول جهت جلوگیری از بازتاب‌های غیرفیزیکی و مشخص بودن دامنه شبیه‌سازی در نظر گرفته شد. آزمایش‌های همگرایی شبکه، دقت عددی مستقل از اندازه المان را تضمین می کند. سیستم نانوذره توسط یک موج صفحه‌ای قطبی‌شده خطی مورد تابش قرار می گیرد. سطح مقطع های جذب، پراکندگی و خاموشی با استفاده از تعاریف استاندارد بر اساس توان به‌دست‌آمده از شبیه‌سازی‌های عددی موج کامل محاسبه می‌شوند. به‌طور خاص، سطح مقطع جذب از انتگرال حجمی چگالی تلفات ارزیابی می‌شود، که تلفات اهمی ذاتی و انتقال‌های بین باندی در پوسته‌های فلزی را در نظر می‌گیرد. سطح مقطع پراکندگی از بردار پوینتینگ میدان دور با انتگرال‌گیری از

[1] Clusters
[2] Evanescent Fields
[3] Plasmonic Coupling
[4] Hotspots
[5] Bimetallic
[6] Core-Shell
[7] Quadramer

توان الکترومغناطیسی پراکنده‌شده روی یک سطح بسته محاسبه می‌شود. سطح مقطع خاموشی به صورت مجموع سهم جذب و پراکندگی به‌دست می‌آید[۶].

از آنجایی که شبیه‌سازی‌ها معادلات ماکسول را به‌طور خودسازگار حل می‌کنند، تمام اثرات جفت‌شدگی میدان نزدیک و میدان دور در پیکربندی نانوذرات به‌طور طبیعی بدون تکیه بر تقریب‌های تحلیلی گنجانده شده‌اند. فرمول‌های محاسبه سطح مقطع جذب از انتگرال‌های تلفات حجمی و سطح مقطع پراکندگی از بردار پوئینتینگ یکپارچه میدان پراکنده، از روش‌شناسی تثبیت‌شده‌ای که در مطالعات پلاسمونیک مشابه، مانند کار اولیوخین و همکاران، استفاده می‌شود، پیروی می‌کنند [۷].

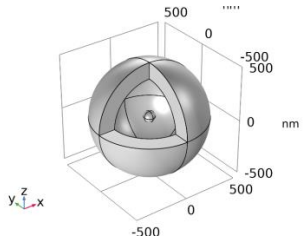
نتایج و بحث

در شکل ۱ شماتیک نانوذره به همراه لایه PML برای تک نانوذره کروی و درشکل ۲ نمای سه بعدی و دوبعدی شماتیک نانوذره چهارتایی با هندسه هسته–پوسته نشان داده شده است. با توجه به شکل۳ که نمودارهای سطح مقطع خاموشی برای نانوذرات تکی و چهارتایی با هسته طلا و پوسته از جنس: نیکل و مس نشان می‌دهد، پاسخ اپتیکی سیستم Au@Ni دارای ویژگی‌های فیزیکی به شرح زیر است. چندگانگی مدهای تشدید[۸] در نمودار سطح مقاطع این سیستم، دو ناحیه تشدید متمایز دیده می‌شود. یک پیک فرعی و شانه در ناحیه طول‌موجی کوتاه مرئی و فرابنفش (حدود ۳۲۰ تا ۳۵۰ نانومتر) ظاهر شده است که ناشی از تحریک مدهای مرتبه بالاتر (مانند مدهای چهارقطبی[۹]) در نانوذره هسته–پوسته است. پیک اصلی و قدرتمند تشدید دوقطبی[۱۰] در محدوده ۵۸۰ نانومتر رخ می‌دهد که عمدتاً توسط هسته طلا هدایت می‌شود. سهم اثر پوسته نیکل در سطح مقطع پراکندگی (SCS) با مقدار ۸.۵×۱۰^{۴} نانومتر مربع سهم بالاتری نسبت به جذب (ACS) در تشکیل قله خاموشی دارد. حضور پوسته نیکل به دلیل گذارهای الکترونی نوار d، باعث ایجاد یک میرایی[۱۱] فیزیکی روی پلاسمون‌های هسته طلا شده که عریض‌تر شدن پهنای نیم‌باند قله تشدید را به همراه دارد.شکل۴ نمودارهای سطح مقطع خاموشی، ویژگی‌های اپتیکی سیستم متشکل از هسته طلا و پوسته مس را به تصویر می‌کشند. تیز بودن قله دوقطبی در سیستم Au@Cu، تشدید پلاسمونی اصلی در محدوده طول‌موجی ۵۹۰ nm رخ می‌دهد. قله تشدید در این سیستم بسیار تیزتر از سیستم حاوی نیکل است و سطح مقطع پراکندگی (SCS) با یک جهش بلند به نزدیکی $۱.۶ \times ۱۰^{۵}\ nm^2$ می‌رسد که نشان‌دهنده بازدهی بالای پراکندگی نور در این ترکیب فلزی است. نمودار جذب (ACS) نشان می‌دهد که در طول‌موج‌های کوتاه (زیر ۵۰۰ nm)، به دلیل لبه جذب بین‌باندی[۱۲] مس و طلا، جذب ساختار بالا است؛ اما در طول‌موج تشدید (۵۹۰ nm)، مدهای پلاسمونی با کمترین تداخل گذارهای بین‌باندی فعال می‌شوند که فاکتور کیفیت بالایی را ایجاد می‌کند. مشاهده جفت‌شدگی پلاسمونی[۱۳] اصلی‌ترین نتایج فیزیکی این پژوهش، در شکل ۴ شامل نمودارهای سطح مقطع خاموشی برای نانوذرات تکی و چهارتایی با هسته طلا و پوسته از جنس نیکل و مس نهفته است، جایی که سطح مقطع خاموشی کل (ECS) برای یک تک‌نانوذره هسته–پوسته (خط‌چین قرمز) در مقایسه با آرایه چهارتایی (خط آبی) رسم شده است. برای تک‌ذره سیستم طلا–مس (Au@Cu) ، قله خاموشی در حدود $۱۰^{۵}\ nm^2$ × ۰.۵ است. اما با قرارگیری این ذرات در آرایه چهارتایی مربعی، قله خاموشی کل با یک جهش خیره‌کننده به مقدار $۲ \times ۱۰^{۵}\ nm^2$ می‌رسد (افزایش‌دقیقاً ۴ برابری).در سیستم طلا–نیکل (Au@Ni) نیز رفتار مشابهی برقرار است؛ قله خاموشی از حدود $۱۰^{۵}\ nm^2$ × ۰.۴۵ برای تک‌ذره به نزدیک $۱.۴۵ \times ۱۰^{۵}\ nm^2$ برای آرایه افزایش می‌یابد (تقویت بیش از ۳ برابری). این تقویت شدید فیزیکی فراتر از جمع ریاضی ساده چهار ذره مستقل است. هنگامی که نانوذرات هسته–پوسته در فاصله نزدیکی از یکدیگر در زوایای یک مربع آرایش می‌یابند، میدان‌های دوقطبی الکترومغناطیسی‌هر ذره به صورت هم‌فاز با ذرات مجاور جفت می‌شوند[۱۴]. این تداخل

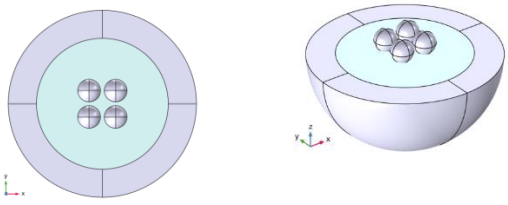
[8] Multimode Resonance
[9] Quadrupole
[10] Dipolar LSPR
[11] Damping

[12] Interband Transitions
[13] Plasmonic Coupling
[14] Near-field coupling

سازنده میدان نزدیک، باعث ایجاد یک ممان دوقطبی کل بسیار بزرگ در کل آرایه شده و مدهای به اصطلاح «روشن»[۱۵] آرایه را به شدت تقویت می‌کند. این امر گویای شکل‌گیری نقاط فوق‌العاده قوی در گپ‌های میانی است.

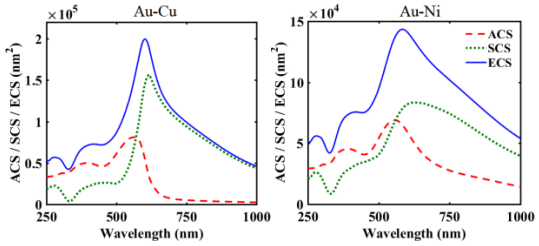


شکل ۱: شماتیک نانوذره به همراه لایه PML برای تک نانوذره کروی.



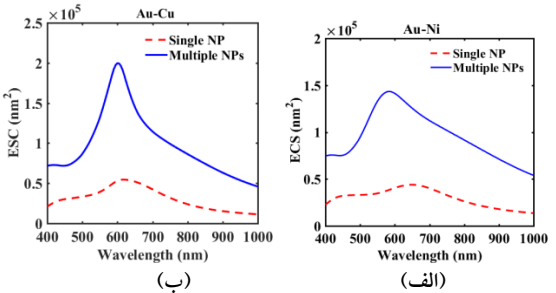
(ب) (الف)

شکل ۲ : شماتیک نانوذره چهار تایی با ساختار هسته–پوسته: الف) نمای سه بعدی و ب) نمای دو **بعدی**.



(ب) (الف)

شکل۳ :نمودارهای سطح مقطع جذب، پراکندگی و خاموشی برای نانوذرات چهارتایی با هسته از جنس طلا و پوسته از جنس: الف) نیکل وب) مس.



(ب) (الف)

شکل ۴: نمودارهای سطح مقطع خاموشی برای نانوذرات تکی و چهارتایی با هسته طلا و پوسته از جنس:الف) نیکل وب) مس.

نتیجه گیری

در این پژوهش، اثرات جفت‌شدگی پلاسمونی در آرایه‌های مربعی متشکل از نانوذرات هسته–پوسته دوفلزی Au@Cu و Au@Ni به روش المان محدود (کامسول) بررسی شد. نتایج نشان داد که در هر دو سیستم، مد دوقطبی اصلی در محدوده 580-590 ظاهر می‌شود که ناشی از پاسخ اپتیکی هسته طلا است، در حالی که تقارن آرایه باعث تحریک مدهای چهارقطبی مرتبه بالا در طول‌موج‌های کوتاه (320-350 nm) می‌گردد. مقایسه آرایه با تک‌ذره اثبات کرد که سطح مقطع خاموشی به دلیل جفت‌شدگی سازنده میدان نزدیک الکترومغناطیسی در فواصلی مابین ذرات، بین ۳ تا ۴ برابر تقویت می‌شود. پوسته مس به دلیل اتلاف اهمی کمتر، مقطع پراکندگی و فاکتور کیفیت بالاتری را نسبت به پوسته نیکل در رژیم آرایه‌ای ارائه می‌دهد .نتایج این شبیه‌سازی، راهکار فیزیکی کارآمدی برای طراحی حسگرهای پلاسمونی با حساسیت بالا و ادوات طیف‌سنجی نوری پیشرفته ارائه می‌دهد.

مرجع‌ها

[۱]. F Rahiminejad, S Panahibakhsh,(2026) Tunable plasmonic coupling in core–shell planar tetramers: Composition and gap dependent resonances and mode evolution, *Materials Today Communications*, doi:.114950.
[۲]. Y. Yang, B. Zhang, X. Sun, Y. Tao, G. Yang, C. Liu, Z. Wang, L. Sun, Q. Zhang, Tuning the modal coupling in three-dimensional Au@ Cu 2 O@ Au core–shell–satellite nanostructures for enhanced plasmonic photocatalysis, Chem. Sci. 16 (18) (2025) 8069–8081
[۳].Adhikari S, Spaeth P, Kar A, Baaske MD, Khatua S, Orrit M (2020) Photothermal microscopy: imaging the optical absorption of singlenanoparticlesandsinglemolecules.ACSnano14(12):16 414–16 445
[۴] S. Khorshidsavar, M. Aliannezhadi, S. Panahibakhsh, Induced surficial silver nanoparticles by nanosecond Excimer laser irradiation on different substrates for surface-enhanced Raman spectroscopy applications, Opt. Quantum Electron. 57 (7) (2025)
[۵]. A. Amirjani, N.B. Amlashi, Z.S. Ahmadiani, Plasmon-enhanced photocatalysis based on plasmonic nanoparticles for energy and environmental solutions: a review, ACS Appl. Nano Mater. 6 (11) (2023) 9085
[۶]. M.W. Juma, Z. Birech, N.M. Mwenze, A.M. Ondieki, M. Maaza, S.D. Mokhotjwa, Localized surface plasmon resonance sensing of Trenbolone acetate dopant using silver nanoparticles, Sci. Rep. 14 (1) (2024) 572
[۷]. D. Liu, C. Xue, Plasmonic coupling architectures for enhanced photocatalysis, Adv. Mater. 33 (46) (2021) 2005738

[15] Bright Modes

طراحی و شبیه سازی آنتن‌های اپتیکی پچ محدب و مقعر در قطبش‌های TE و TM

استیری ، مهدیه[۱] ؛ نیکوفرد، محمود[۲]

[۱،۲]پژوهشکده علوم و فن‌آوری نانو دانشگاه کاشان ، بلوار قطب راوندی ، کاشان

چکیده

در این مقاله، یک آنتن نوری پچ مبتنی بر پشته‌ی سیلیکون بر روی عایق (SOI) با استفاده از شبیه‌سازی‌های تمام‌موج در نرم‌افزار CST و الگوریتم بهینه‌سازی نلدر–مید طراحی و تحلیل شده است. عملکرد این آنتن در محدوده فرکانسی ۱۸۲ تا ۲۰۷ تراهرتز برای دو هندسه محدب و مقعر (با حکاکی عمیق) در دو قطبش TE و TM مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهد که ساختار محدب به دلیل ضریب شکست مؤثر بالاتر، عملکرد موثرتری در محصورسازی میدان نزدیک دارد. در مقابل، هندسه مقعر با حکاکی عمیق در قطبش TM ، به دلیل کاهش بازتاب مستقیم، به یک تطبیق امپدانس پهن‌باند، پایداری فرکانسی بالا و عملکرد تابشی برتر در میدان دور دست می‌یابد و بیشینه جهت‌داری ۱۰/۵ دسی‌بل را ارائه می‌دهد.

واژه‌های کلیدی: آنتن اپتیکی، پچ محدب، پچ مقعر، قطبش TE/TM،حکاکی موجبر عمیق ، بهینه‌سازی نلدر–مید

Design and Simulation of Convex and Concave Patch Optical Antennas in TE and TM Polarizations

Estiri, Mahdiah[1]; Nikoufard, Mahmoud[2]

[1,2] Institute of Nano Science, University of Kashan, Kashan,

Abstract

This paper presents the design and analysis of a silicon-on-insulator (SOI) based patch optical antenna optimized via the Nelder-Mead algorithm using full-wave CST simulations. The performance of both convex and deep-etched concave geometries is evaluated across the 180-207 THz frequency range under TE and TM polarizations. The numerical results indicate that while the convex structure offers superior near-field light confinement due to its higher effective refractive index, the deep-etched concave geometry under TM polarization provides broadband impedance matching, excellent frequency stability, and enhanced far-field radiation, achieving a maximum directivity of 10.5 dB.

Keywords: Optical antenna, Convex patch, Concave patch, TE/TM polarization, Deep etch Waveguide, Nelder-Mead optimization

PACS No. 42.79.G, 42.82.Et, 78.67.Pt

مقدمه

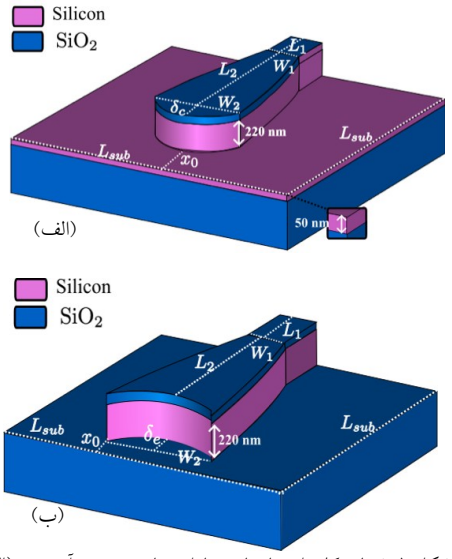
در دهه‌های اخیر، کنترل نور به یکی از چالش‌های اصلی در حوزه فوتونیک تبدیل شده است. آنتن‌های اپتیکی با پل زدن بین میدان‌های نزدیک و دور، نقشی کلیدی در این مسیر ایفا می‌کنند. در حالی که آنتن‌های پلاسمونیک (فلزی) به دلیل محصور کردن شدید میدان مورد توجه بوده‌اند، تلفات اهمی بالا و گرمای تولیدی، کارایی آن‌ها را محدود کرده است. به همین جهت، آنتن‌های تمام‌دی‌الکتریک با گذردهی بالا (مانند سیلیکون) به عنوان جایگزینی ایده‌آل معرفی شده‌اند که علاوه بر تلفات ناچیز، از تشدیدهای مغناطیسی و الکتریکی هم‌زمان پشتیبانی می‌کنند[۱]. این ویژگی، امکان مهندسی فاز و ایجاد منابعی مشابه اصول هویگنس را فراهم آورده و منجر به افزایش کارایی تابشی و فاکتور پورسل می‌گردد.

تحلیل این ساختارها اغلب نیازمند تطبیق مفاهیم کلاسیک آنتن‌های رادیویی (RF) با حوزه اپتیک است. مطالعات پیشین نشان

داده‌اند که می‌توان پارامترهایی نظیر امپدانس ورودی Z_{in} و مقاومت تابشی را برای آنتن‌ها تعریف کرد و با استفاده از مدارهای نوری، تشدیدهای مدار کوتاه و مدار باز را در آن‌ها تنظیم نمود[۲]. همچنین، استفاده از پارادایم مدارهای نوری برای مدل‌سازی جریانات جابجایی در آنتن‌های هیبریدی، امکان کنترل دقیق فرکانس و تطبیق امپدانس را فراهم کرده است که برای کاربردهایی نظیر حسگری نوری و ارتباطات نوری مقیاس ضروری است [۳].

یکی از چالش‌های اساسی در طراحی آنتن‌های مجتمع، چگونگی تزریق توان از موجبر به آنتن و کنترل جهت‌داری تابش است. استفاده از موجبرهای سیلیکون بر روی عایق (SOI) به دلیل سازگاری با تکنولوژی CMOS، بستری مناسب برای این هدف فراهم می‌آورد. برای مثال، نانوآنتن‌های شیپوری هیبریدی بر پایه SOI نشان داده‌اند که می‌توان در پهنای باند وسیع (۱۶۰ تا ۴۰۷ تراهرتز)، بهره تابشی بالا و تطبیق امپدانس مناسبی ایجاد کرد [۴]. از سوی دیگر، ترکیب نانوآنتن‌های پلاسمونیک با موجبرهای دی‌الکتریک (مانند نیترید سیلیکون) نشان‌دهنده پتانسیل بالای سیستم‌های هیبریدی در کنترل جهت‌دار نور در مدارهای مجتمع نوری است [۵]. در این میان، هندسه‌ی موجبرهای واسط نقش تعیین‌کننده‌ای در کاهش تلفات تبدیل مد ایفا می‌کنند؛ به‌طوری که استفاده از موجبرهای مخروطی[۱] بی‌دررو[۲] می‌تواند بازده انتقال را تا ۹۸٪ افزایش داده و از بازتاب‌های ناخواسته جلوگیری کند [۶].

در این پژوهش، با هدف بهینه‌سازی عملکرد آنتن‌های اپتیکی پچ، دو هندسه نوین محدب و مقعر مورد مطالعه قرار گرفته است. در ساختار محدب، لایه‌ای از سیلیکون به ضخامت ۲۷۰ نانومتر بر روی بستر SiO_2 قرار داده شده و با استفاده از فرآیند لیتوگرافی، ستونی با ارتفاع استاندارد ۲۲۰ نانومتر ایجاد گردیده است که از طریق یک موجبر انتقالی مخروطی به پروفایل محدب متصل می‌شود. در مقابل، در ساختار مقعر، با بهره‌گیری از تکنیک‌های خوردگی عمیق[۳]، لایه سیلیکونی به‌طور انتخابی حذف شده تا ستون ۲۲۰ نانومتر مستقیماً به پروفایل مقعر متصل گردد. در نهایت لایه‌ی ۵۰ نانومتر از SiO_2 به عنوان کلاهک بر روی آن قرار داده می‌شود. این دو هندسه، که در شکل ۱ نمایش داده شده‌اند، مبنای تحلیل‌های بعدی در زمینه تطبیق امپدانس و بهبود الگوی تابشی هستند.



شکل ۱: شمای کلی از ساختار و پارامترهای هندسی آنتن پچ (الف) محدب (ب) مقعر

در هر دو ساختار، موجبر مخروطی نقش کلیدی در انتقال تدریجی مد نوری و کاهش بازتاب ناشی از پرش امپدانسی بین ستون سیلیکونی و پروفایل‌های محدب/مقعر ایفا می‌کند. این تحقیق بر بهینه‌سازی ابعاد هندسی در بازه فرکانسی ۱۸۲ تا ۲۰۷ تراهرتز تمرکز داشته و عملکرد آنتن را در دو قطبش مد الکتریکی عرضی (TE) و مد مغناطیسی عرضی (TM) از نظر تطبیق امپدانس و الگوی میدان دور در فرکانس مرکزی ۱۹۳/۵ تراهرتز مورد ارزیابی قرار می‌دهد.

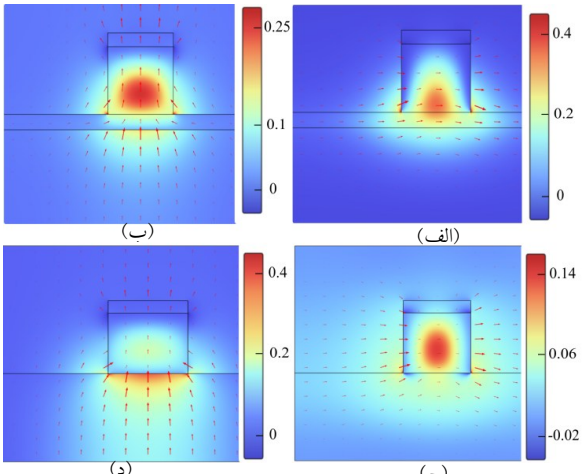
ساختار آنتن

در شکل ۱، هندسه دو آنتن اپتیکی پچ با پروفایل‌های محدب (شکل ۱–الف) و مقعر (شکل ۱–ب) نمایش داده شده است. این دو ساختار با هدف دستیابی به بیشترین تطبیق امپدانس در بازه فرکانسی ۱۸۲ تا ۲۰۷ تراهرتز و همچنین بهبود الگوی تابشی در فرکانس کاری ۱۹۳/۵ تراهرتز طراحی شده‌اند. پیش از آغاز فرآیند بهینه‌سازی، ابعاد موجبر ورودی که ستون سیلیکونی را به پچ متصل می‌کند، در محیط COMSOL Multiphysics و از طریق یک جاروب پارامتری تعیین شد. معیار انتخاب این ابعاد، بیشترین احتمال انتقال توان و تمرکز مدال در مرکز موجبر بود. نتایج این تحلیل، که بیشترین چگالی توان را در ابعاد انتخاب‌شده نشان می‌دهد، در شکل ۲ ارائه

شده است. این ابعاد پایه، در ادامه به‌عنوان بخشی از مجموعه پارامترهای نهایی در جدول ۱ نیز گزارش شده‌اند.

جدول ۱ : ابعاد بهینه‌شده آنتن‌های محدب و مقعر

	a	L_1	W_2	L_2	L_{sub}	x_0	δ_e/δ_c
محدب	۱۰۵	۳۷۱	۶۹۷	۱۱۲۲	۲۲۳۶	۴۸۷	۲۵۶
مقعر	۱۱۵	۳۹۱	۷۱۳	۱۲۸۳	۱۸۸۵	۲۱۱	۱۸۷



شکل ۲: متوسط زمانی جریان توان بر حسب (w2/m) پیکان‌ها میدان الکتریکی را نشان می‌دهند (الف) پروفایل محدب در مود TE_{00} (ب) پروفایل محدب در مود TM_{00} (ج) پروفایل مقعر در مود TE_{00} (د) پروفایل مقعر در مودTM_{00}

پس از تعیین ابعاد موجبر، فرآیند بهینه‌سازی پروفایل‌های محدب و مقعر در محیط CST Studio Suite و با بهره‌گیری از الگوریتم Nelder–Mead Simplex انجام گرفت. برای اتصال تدریجی موجبر به پچ و جلوگیری از بازتاب‌های ناشی از پرش امپدانسی، از یک موجبر انتقالی با پروفایل $y = ax^2 - c$ استفاده شده است که در آن پارامتر a یکی از متغیرهای کلیدی در فرآیند بهینه‌سازی محسوب می‌شود. در ساختار محدب، یک لایه سیلیکونی ۵۰ نانومتر به‌عنوان هسته افزوده شده است تا لوب‌های جانبی کاهش یافته و جهت‌داری میدان دور بهبود یابد. از نظر هندسی، پروفایل محدب بر اساس کمان یک دایره و پروفایل مقعر بر اساس کمان یک بیضی شکل گرفته است. به‌منظور تمایز پارامترهای هندسی، از زیرنویس‌های δ_c برای ساختار دایره‌ای/محدب و δ_e برای ساختار بیضوی/مقعر استفاده شده است. در نهایت، مجموعه کامل ابعاد بهینه‌شده شامل پارامترهای موجبر، پروفایل انتقالی و هندسه پچ، که مبنای شبیه‌سازی‌های میدان دور و نزدیک در ادامه مقاله قرار گرفته‌اند، در جدول ۱ ارائه شده و با ساختارهای نشان داده شده در شکل ۱ مطابقت کامل دارد.

..... در ساختارهای آنتن دی‌الکتریک، می‌توان از نور ساختاریافته نزدیک به مادون قرمز (NIR) برای تحریک مودهای نوری تشدیدی استفاده کرد، به شرطی که میدان فرودی به‌گونه‌ای طراحی شود که با پاسخ آنتن مطابقت داشته باشد [۷]. در مورد ساختار آنتن موجبر پشته‌ای دی‌الکتریک، این موضوع به صورت تحریک NIR توصیف می‌شود که قطبش و توزیع فضایی میدان آن به شکلی انتخاب شده‌اند تا به‌طور مؤثر با مود تشدیدی موجبر دی‌الکتریک (شکل ۲) جفت شوند.

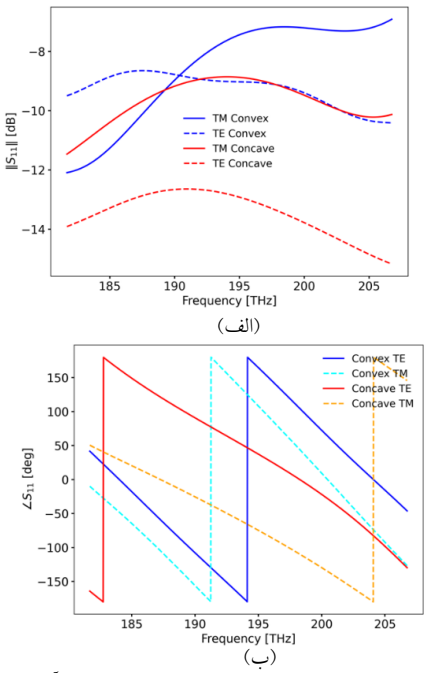
نتایج شبیه‌سازی

در تحلیل عملکرد آنتن‌های نوری با ساختارهای متفاوت، بررسی طیف اندازه ضریب بازتاب ($|S_{11}|$) در شکل ۳-الف، نشان می‌دهد که آنتن مقعر در قطبش TM (خط ممتد قرمز) بهترین عملکرد دامنه‌ای را ارائه می‌دهد؛ مقدار $|S_{11}|$ در این حالت در حدود ۱۴- تا ۱۵- دسی‌بل قرار دارد که به‌طور قابل‌توجهی کمتر از مقدار متناظر در ساختار محدب است (که در حالت TM تا ۷/۵- دسی‌بل افزایش می‌یابد).

این کاهش بازتاب نشان‌دهنده تطبیق امپدانس پهن‌باند و پایداری فرکانسی بالای هندسه مقعر است، به‌طوری‌که بازتاب مستقیم کاهش و انعکاس‌های داخلی در حفره موجب بهبود تطبیق می‌شوند.

در ادامه، با ارجاع به طیف فاز ضریب بازتاب (S_{11}) در شکل ۳ ب، می‌بینیم که نقطه تشدید (جایی که فاز به$\pm 180^\circ$ می‌رسد) در آنتن محدب برای قطبش TE تقریباً در حوالی فرکانس کاری ۱۹۳/۵ تراهرتز قرار گرفته است. در مقابل، آنتن مقعر در قطبش TE در فرکانس۱۸۲ تراهرتز و در قطبش TM در فرکانس ۲۰۴ تراهرتز به تشدید می‌رسد. این جابجایی فرکانسی در ساختار مقعر نشان‌دهنده تغییر در طول مسیر اپتیکی مؤثر و ایجاد دوشکستی هندسی است که ناشی از محصورشدگی متفاوت میدان در حفره مقعر می‌باشد.

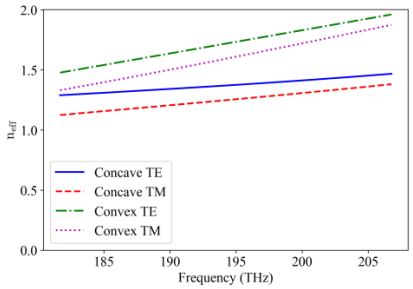
نتیجه‌گیری کلی این است که هرچند نقطه دقیق تشدید فازی ساختار مقعر با فرکانس مرکزی ۱۹۳/۵ تراهرتز منطبق نیست، اما از منظر اندازه $|S_{11}|$ و پایداری پهن‌باند (به‌ویژه در قطبش TM) عملکرد بهتری ارائه می‌دهد؛ بنابراین برای کاربردهایی که نیاز به بازتاب بازگشتی کم و تطبیق امپدانس پهن‌باند دارند، آنتن مقعر گزینه برتری محسوب می‌شود.



شکل ۳: طیف‌های اندازه (الف) و فاز (ب) پارامتر S_{11} برای آنتن‌های محدب و مقعر در دو قطبش TE و TM

شکل ۴ طیف تغییرات ضریب شکست مؤثر n_{eff} را نسبت به فرکانس برای دو هندسه و در دو قطبش TE و TM نشان می‌دهد. این پارامتر معیار مستقیمی از میزان محبوس‌شدگی میدان و پاشندگی ساختار است. همان‌گونه که مقادیر استخراج‌شده در فرکانس ۱۹۳/۵ تراهرتز نیز تأیید می‌کنند، هندسه محدب دارای ضریب شکست مؤثر بالاتری است؛ به‌طوری‌که n_{eff} برای TM برابر ۱/۵۶ و برای TE برابر ۱/۷۰ است. این افزایش مستقیم به حضور لایه نازک سیلیکون با ضریب شکست بالا در ساختار محدب مربوط می‌شود که میدان را به‌شدت در داخل آنتن محبوس کرده و موجب افزایش حساسیت پاشندگی می‌گردد. در مقابل، در هندسه مقعر که این لایه حذف شده است، مقادیر n_{eff} به‌طور محسوسی کاهش یافته و برای TM برابر ۱/۲۴ و برای TE برابر ۱/۳۳ است؛ این کاهش نشان‌دهنده نفوذ بیشتر میدان به محیط اطراف و کاهش حساسیت امپدانسی نسبت به تغییرات فرکانس است (مطابق با نتایج شکل ۵). تمامی حالات دارای پاشندگی نرمال هستند، اما شیب پاشندگی (dn_{eff}/df) در هندسه محدب به دلیل حضور لایه سیلیکونی تندتر است.

با وجود تقارن هندسی، اختلاف بین مقادیر n_{eff} در دو قطبش TEو TM. نشان‌دهنده پاسخ متفاوت مرزهای فیزیکی آنتن به جهت‌گیری میدان‌های الکتریکی است. در هر دو هندسه، قطبش TEضریب شکست مؤثر بیشتری را تجربه می‌کند—چه در ساختار محدب با مقدار ۱/۷۰ و چه در ساختار مقعر با مقدار ۱/۳۳ —که بیانگر محبوس‌شدگی قوی‌تر این مد در مقایسه با قطبش TM است.



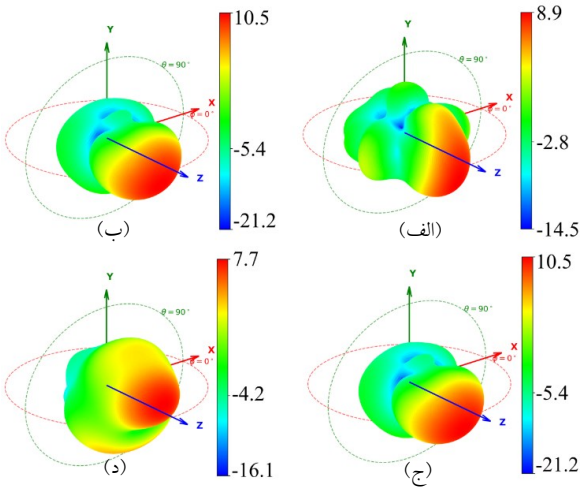
شکل ۴: طیف ضریب شکست مؤثر با استخراج پارامترهای ماده

الگوهای تابشی سه‌بعدی و دوبعدی آنتن نوری طراحی‌شده (شکل‌های ۵ و ۶) بیانگر تفاوت بنیادین دو هندسه محدب و مقعر در تمرکز انرژی، کنترل پرتو و پاسخ قطبشی هستند. تحلیل میدان دور در فرکانس ۱۹۳/۵ تراهرتز نشان می‌دهد که ساختار مقعرِ حاصل از حکاکی عمیق، با دستیابی به جهت‌داری[۴] ۱۰/۵ دسی‌بل در قطبش TE و ۷/۷ دسی‌بل در قطبش TM ، عملکرد تابشی برتری نسبت به ساختار محدب ارائه می‌دهد؛ در حالی که در هندسه محدب، مقادیر متناظر تنها ۸/۹ دسی‌بل برای TE و ۶/۷ دسی‌بل برای TM هستند. این اختلاف عملکرد ناشی از بازآرایی مؤثر میدان در ساختار مقعر و کاهش پراکندگی انرژی در جهات غیربهینه است.

در ساختار محدب، افزودن لایه ۵۰ نانومتر سیلیکون با هدف بهبود رفتار میدان دور در قطبش TM انجام شده است. این لایه موجب کاهش بخشی از لوب‌های ناخواسته و بهبود هم‌ترازی پرتو در راستای زاویه‌ی صفر درجه در صفحه $\phi = 0°$ می‌شود؛ با این حال، حضور آن همچنان منجر به شکل‌گیری لوب‌های فرعی

قابل‌توجه و محدود شدن کارایی تابشی نسبت به ساختار مقعر است. در مقابل، حذف این لایه در هندسه مقعر باعث شکل‌گیری الگوی تابشی منسجم‌تر و کاهش چشمگیر پراکندگی انرژی شده است.

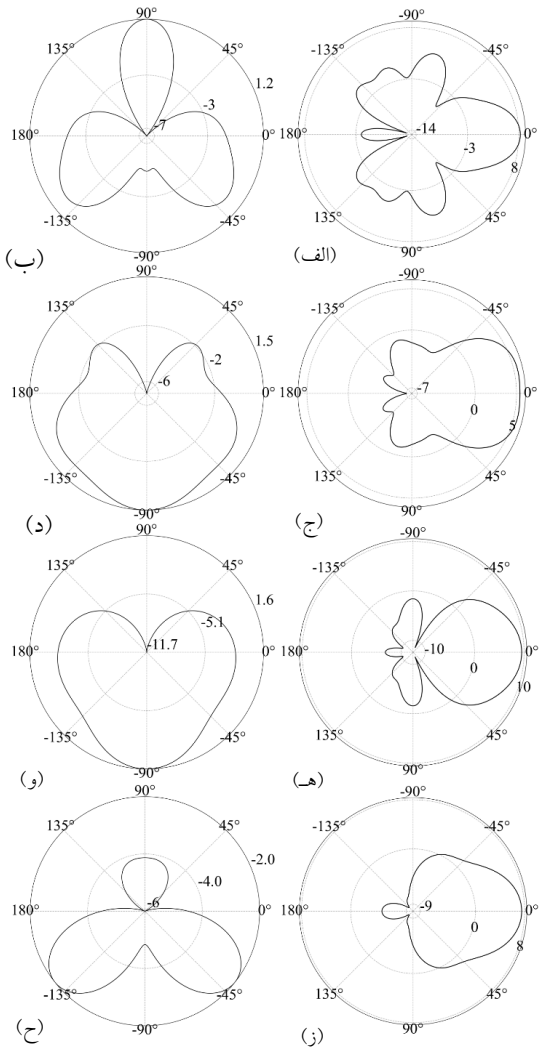
بررسی الگو در صفحه $\theta = 90°$ نیز نشان می‌دهد که تفاوت پاسخ میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی به هندسه، عامل اصلی عدم تقارن بین دو قطبش است. این عدم تقارن در ساختار مقعر – به‌ویژه در قطبش TM – به بهبود جهت‌داری و کاهش پراکندگی منجر می‌شود، در حالی که در ساختار محدب، حتی با وجود لایه ۵۰ نانومتر، همچنان موجب ایجاد لوب‌های فرعی بزرگ و افت کارایی تابشی می‌گردد.



شکل ۵: الگوهای سه‌بعدی میدان دور و جهت‌داری آنتن طراحی‌شده برای ساختارهای محدب و مقعر تحت دو قطبش TE و TM. زیرشکل‌های (الف) تا (د) به‌ترتیب شامل: (الف) محدب–TE، (ب) محدب–TM، (ج) مقعر–TE، (د) مقعر–TM هستند. این الگوهای سه‌بعدی شکل کلی لوب اصلی، جهت‌گیری پرتو و ویژگی‌های تقارن را نشان می‌دهند و امکان مقایسه‌ی مستقیم بین ساختارهای محدب و مقعر و همچنین رفتار تابشی وابسته به قطبش را فراهم می‌کنند.

نتیجه گیری

در این پژوهش، طراحی و تحلیل مقایسه‌ای دو هندسه نوین محدب و مقعر برای آنتن‌های اپتیکی پچ در بستر فناوری SOI و در دو قطبش TE و TM مورد بررسی دقیق قرار گرفت. نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های تمام‌موج نشان‌دهنده یک موازنه‌ی فیزیکی مشخص میان محصورشدگی میدان در محیط داخلی و بازدهی تابشی در میدان دور است.



شکل ۶: نمودارهای قطبی میدان دور برای ساختارهای محدب و مقعر در قطبش‌های TE و TM، در دو صفحه‌ی فضایی $\phi = 0°$ (ستون اول) و $\theta = 90°$ (ستون دوم). (الف) ساختار محدب، قطبش TE، صفحه‌ی $\phi = 0°$ (ب) همان ساختار، قطبش TE، صفحه‌ی $\theta = 90°$. (ج) همان ساختار، قطبش TM، صفحه‌ی $\phi = 0°$. (د) همان ساختار، قطبش TE، صفحه‌ی $\theta=90°$. (هـ) ساختار مقعر، قطبش TE، صفحه‌ی $\phi = 0°$. (و) همان ساختار، قطبش TE، صفحه‌ی $\theta = 90°$. (ز) همان ساختار، قطبش TM، صفحه‌ی $\phi = 0°$. (ح) همان ساختار، قطبش TM، صفحه‌ی $\theta = 90°$. این نمودارهای قطبی، جهت اصلی پرتو، پهنای لوب و رفتار لوب‌های جانبی را با دقت نشان می‌دهند و مکمل الگوهای سه‌بعدی بوده و امکان تحلیل دقیق اثر هندسه و قطبش بر ویژگی‌های تابشی را فراهم می‌کنند.

در هندسه محدب، وجود لایه سیلیکونی نازک کمکی (۵۰ نانومتری) منجر به افزایش ضریب شکست مؤثر (n_{eff}) و ایجاد پاشندگی نرمال شدیدتر می‌شود که پتانسیل بالایی را برای تمرکز شدید نور در مقیاس نانو و کاربردهای میدان نزدیک فراهم می‌کند؛ هرچند که این محصورشدگی قوی، به دلیل ماهیت تشدیدی، پهنای باند تطبیق امپدانس را محدود کرده و موجب شکل‌گیری لوب‌های فرعی در میدان دور می‌گردد. در طرف مقابل، هندسه مقعر که با فرآیند حکاکی عمیق طراحی شده، پاسخ فرکانسی بسیار پایداری را در کل پهنای باند ۱۸۲ تا ۲۰۷ تراهرتز ارائه می‌دهد. در این ساختار، به‌کارگیری پروفایل مقعر در انتهای آنتن نوری همراه با حکاکی عمیق، با ایجاد تغییر تدریجی در توزیع میدان و کاهش ناپیوستگی مؤثر ضریب شکست در ناحیه گذار، به بهبود تطبیق امپدانس و کاهش محسوس پارامتر S_{11}، به‌ویژه در قطبش TM، منجر می‌شود. علاوه بر این، آنتن مقعر موفق می‌شود با بازآرایی و سرکوب لوب‌های جانبی ناخواسته، انرژی نوری را با جهت‌داری منسجم‌تر و بالاتر (حداکثر ۱۰/۵ دسی‌بل) به فضای آزاد جفت کند.

در مجموع، یافته‌های این تحقیق نشان می‌دهد که آنتن محدب گزینه‌ای ایده‌آل برای کاربردهای تقویت میدان نزدیک و حسگری نوری است، در حالی که آنتن مقعر با حکاکی عمیق به دلیل پهنای باند وسیع، تلفات بازگشتی ناچیز و جهت‌داری منحصربه‌فرد، پتانسیل بالایی برای استفاده در ارتباطات نوری مجتمع و مدارهای فوتونیکی فشرده دارد.

از منظر کاربردی، آنتن‌های پچ اپتیکی طراحی‌شده در این پژوهش را می‌توان به‌عنوان المان تشعشعی در آرایه‌های فازی نوری[5] به‌کار برد که هسته‌ی اصلی سامانه‌های لیدار[6] حالت‌جامد و مخابرات نوری فضای آزاد[7] هستند؛ در این کاربردها، جفت‌شدگی کارآمد نور از موجبر مجتمع به فضای آزاد و کنترل مستقل قطبش‌های TE و TM از الزامات کلیدی طراحی محسوب می‌شوند [۸ و۹]. به‌طور مشخص، هندسه‌ی مقعر به دلیل پهنای باند وسیع، پایداری فرکانسی بالا و تلفات بازگشتی ناچیز، گزینه‌ی مناسبی برای عناصر تشعشعی آرایه‌های فازی در مدارهای مخابراتی مجتمع و حسگری مسافت LiDAR است؛ در حالی که هندسه‌ی محدب، به دلیل محصورشدگی قوی میدان نزدیک، برای کاربردهایی نظیر تقویت میدان در حسگرهای نوری و طیف‌سنجی مقیاس‌نانو مناسب‌تر است [۱۰]. علاوه بر این، سازگاری کامل این طراحی‌ها با فناوری CMOS، امکان مجتمع‌سازی متراکم آرایه‌های چندالمانی و کاهش هزینه‌ی ساخت سامانه‌های فوتونیکی یکپارچه را فراهم می‌آورد.

مرجع‌ها

[1] A. E. Krasnok, A. E. Miroshnichenko, P. A. Belov, and Y. S. Kivshar, "All-dielectric optical nanoantennas," *Opt. Express*, vol. 20, pp. 20599–20604, 2012.
[2] A. Alù and N. Engheta, "Input Impedance, Nanocircuit Loading, and Radiation Tuning of Optical Nanoantennas," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 043901, 2008.
[3] A. Alù and N. Engheta, "Theory, Modeling and Features of Optical Nanoantennas," *IEEE Trans. Antennas Propag.*, vol. 61, pp. 1508–1517, 2013.
[4] A. Nourmohammadi and M. Nikoufard, "Ultra-Wideband Photonic Hybrid Plasmonic Horn Nanoantenna with SOI Configuration," *Silicon*, vol. 12, pp. 193–198, 2020.
[5] F. Bernal Arango, A. Kwadrin, and A. F. Koenderink, "Plasmonic Antennas Hybridized with Dielectric Waveguides," *ACS Nano*, vol. 6, pp. 10156–10167, 2012.
[6] Y. Fu, T. Ye, W. Tang, and T. Chu, "Efficient adiabatic silicon-on-insulator waveguide taper," *Photonics Res.*, vol. 2, no. 3, pp. A41–A44, Jun. 2014.
[7] E. Melik-Gaykazyan *et al.*, "From Fano to Quasi-BIC Resonances in Individual Dielectric Nanoantennas," *Nano Lett.*, vol. 21, pp. 1765–1771, 2021.
[8] S. Khajavi, D. Melati, P. Cheben, J. H. Schmid, C. A. A. Ramos, and W. N. Ye, "Highly efficient ultra-broad beam silicon nanophotonic antenna based on near-field phase engineering," *Sci. Rep.*, vol. 12, p. 18808, 2022.
[9] C. V. Poulton *et al.*, "Long-Range LiDAR and Free-Space Data Communication With High-Performance Optical Phased Arrays," *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, vol. 25, pp. 1–8, 2019.
[10] M. J. R. Heck, "Highly integrated optical phased arrays: photonic integrated circuits for optical beam shaping and beam steering," vol. 6, pp. 93–107, 2017.

[1] Taper
[2] Adiabatic
[3] Deep Etching
[4] Directivity

[5] Optical Phased Array (OPA)
[6] Light Detection and Ranging (LiDAR)
[7] Optical free-space Communication

پلاریتون‌های فونون سطحی جایگزیده در نانوساختارهای کاربید سیلیسیم (SiC)

نوری، مریم

دانشکده فیزیک، دانشگاه قم،بلوار غدیر،قم

چکیده

سیستم‌های پلاسمونیک فلزی در ناحیه مادون‌قرمز به دلیل تلفات اهمی بالا با محدودیت جدی در حسگری مواجهند. در این پژوهش، از پلاریتون‌های فونون سطحی جایگزیده در نانوساختارهای کاربید سیلیسیم به عنوان جایگزینی کم‌تلفات استفاده شده است. پاسخ نوری آرایه‌های تناوبی از نانوحفره‌های استوانه‌ای و نانوستاره‌های شش‌پر در بازه ۱۳–۱۰ میکرومتر(باند رست‌شترالن SiC)با روش FDTD شبیه‌سازی شد. نانوحفره SiC یک رزونانس تیز در ۱۱.۵ میکرومتر با ضریب کیفیت ۲۶.۱ نشان می‌دهد. افزایش شعاع حفره، جابه‌جایی قرمز قابل پیش‌بینی قله تشدید را به دنبال دارد که بیانگر قابلیت تنظیم‌پذیری است. نانوستاره شش‌پر SiC یک رزونانس قوی در ۱۱.۷ میکرومتر با تقویت میدان ۱۲ برابری در نوک بازوها (نقاط داغ) ایجاد می‌کند که ناشی از اثر میله‌برق‌گیر است. به دلیل پهنای خط باریک و تلفات دی‌الکتریک ناچیز SiC ، این نانوساختارها حساسیت و فاکتور شایستگی قابل رقابتی با همتایان پلاسمونیک دارند. نتایج نشان می‌دهد که نانوساختارهای SiC بستری مناسب برای حسگرهای فوق‌حساس و کم‌تلفات در فروسرخ میانی هستند.

واژه‌های کلیدی : پلاریتون‌های فونون سطحی موضعی، کاربید سیلیسیم، نانوحفره، نانوستاره، حسگر مادون‌قرمز.

Localized Surface Phonon Polaritons in Silicon Carbide (SiC) Nanostructures

Noori, Maryam

Department of Physics, University of Qom

Abstract

Metallic plasmonic systems, despite their high ability to confine light at subwavelength scales, face serious limitations in sensing applications due to high ohmic losses, especially in the mid-infrared region. In this study, to overcome this limitation, localized surface phonon polaritons in silicon carbide (SiC) nanostructures are employed as a low-loss alternative. The optical response of periodic arrays of cylindrical nanoholes and six-pointed nanostars is simulated and analyzed using the finite-difference time-domain method over the wavelength range of 10–13 μm, which corresponds to the Reststrahlen band of SiC. The results show that the SiC nanohole exhibits a sharp phonon resonance at 11.5 μm with a quality factor of 26.1. A gradual increase in the hole radius leads to a systematic and predictable redshift of the resonance peak, demonstrating the tunability of the structure. In contrast, the six-pointed SiC nanostar exhibits a strong resonance at 11.7 μm with a 12-fold electric field enhancement at the tips (hot spots), arising from the lightning rod effect. Owing to the narrow linewidth and negligible dielectric loss of SiC in the infrared, these nanostructures offer sensitivity and figure of merit competitive with their metallic plasmonic counterparts. The findings confirm that SiC-based nanostructures, leveraging localized surface phonon polariton modes, provide a promising platform for the development of highly sensitive, low-loss, and chemically stable sensors in the mid-infrared region.

Keywords: *Localized surface phonon polaritons, silicon carbide, nanohole, nanostar, mid-infrared sensor.*

مقدمه

در دو دهه‌ی اخیر، کنترل نور در ابعاد کوچک‌تر از طول موج به یکی از موضوعات اصلی نانوفوتونیک تبدیل شده است[۳–۱] .در این زمینه، پلاسمون–پلاریتون‌های سطحی در فلزات نجیب به دلیل توانایی منحصربه‌فرد در متمرکزسازی میدان الکترومغناطیسی در مقیاس نانومتری، توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده‌اند[۷–٤] .با این حال، کاربرد این ساختارها در ناحیه طیفی مادون‌قرمز با چالش اساسی تلفات اهمی بالا و میرایی سریع گرما تبدیل کرده و عملکرد حسگرها را محدود می‌کند[۷–۵].برای غلبه بر این محدودیت، نسل جدیدی از ساختارهای نانوفوتونیکی مبتنی بر پلاریتون‌های فونون سطحی در مواد قطبی معرفی شده است. این مدهای نوری از جفت‌شدگی فوتون‌ها با ارتعاشات شبکه اتمی (فونون‌های نوری طولی و عرضی) حاصل می‌شوند و به طور ذاتی دارای فاکتور کیفیت بالاتر و طول عمر بیشتری نسبت به همتایان پلاسمونیک خود هستند[۱۰–۸] .به عبارت دیگر، پلاریتون‌های فونون سطحی می‌توانند نور را با تلفات بسیار کمتر در ناحیه مادون‌قرمز هدایت و محبوس کنند [۱۳–۱۱].در میان مواد قطبی، کاربید سیلیسیم (SiC)سه ویژگی مهم دارد: باند رست‌شترالن پهن در ناحیه ۱۰ تا ۱۳ میکرومتر،

پایداری شیمیایی و حرارتی عالی، و همچنین امکان رشد لایه‌های با کیفیت بلوری بالا. این ویژگی‌ها کاربید سیلیسیم را به بستری ایده‌آل برای تحقق و بهره‌گیری از مدهای پلاریتون فونون سطحی تبدیل کرده است[۱۷-۱٤].مطالعات اخیر نشان داده‌اند که مهندسی هندسی درمقیاس نانو – نظیر ساخت دیسک‌ها، نوارها یا آرایه‌های تناوبی – می‌تواند پاسخ نوری پلاریتون‌های فونون سطحی را به طور قابل توجهی تقویت کرده و کنترل فضایی آن‌ها را ممکن سازد[۲۰-۱۸]. در این میان، آرایه‌های نانوحفره به دلیل تمرکز شدید میدان در لبه‌ها و گوشه‌های ساختاری، پتانسیل بالایی برای کاربردهای حسگری نشان داده‌اند[۲۳-۲۲]. همچنین، ساختارهای نانوستاره با بازوهای تیز، به دلیل اثر میله‌برق‌گیر، قادر به ایجاد نقاط داغ بسیار قوی هستند که برای طیف‌سنجی تقویت‌یافته (مانند طیف‌سنجی رامان سطحی) حیاتی‌باشند [۲٦-۲۵].با وجود پیشرفت‌های یادشده، بیشتر مطالعات موجود بر روی ساختارهای ساده و متقارن مانند دیسک‌ها یا نوارهای کاربید سیلیسیم متمرکز بوده‌اند. به طور خاص، هیچ مطالعه‌ای تاکنون به صورت همزمان و کمی، نانوحفره‌ها و نانوستاره‌های SiC را از نظر ضریب کیفیت، تقویت میدان، حساسیت و فاکتور شایستگی در ناحیه فروسرخ مقایسه نکرده است. همچنین، تأثیر پارامترهای هندسی (مانند شعاع در نانوحفره‌ها و تیز بودن بازوها در نانوستاره‌ها) بر پاسخ تشدیدی این دو دسته ساختار، به طور همزمان بررسی نشده است. پر کردن این خلأ علمی، هدف اصلی پژوهش حاضر را تشکیل می‌دهد.در این مقاله، به منظور پر کردن شکاف یادشده، پاسخ نوری نانوحفره‌های استوانه‌ای و نانوستاره‌های شش‌پر تناوبی ساخته‌شده از کاربید سیلیسیم در بازه طول‌موج ۱۰ تا ۱۳ میکرومتر (منطبق بر باند رست‌شترالن کاربید سیلیسیم) با استفاده از روش عددی تفاضل محدود در حوزه زمان شبیه‌سازی و تحلیل می‌شود[۲۷]. نوآوری‌های این پژوهش عبارتند از: ارائه یک مقایسه کمی مستقیم بین دو خانواده ساختار (حفره و ستاره) از نظر شاخص‌های عملکردی، محاسبه دقیق ضریب کیفیت و تقویت میدان برای هر دو ساختار در شرایط نوری یکسان، تعیین حساسیت و فاکتور شایستگی نانوحفره‌های کاربید سیلیسیم و مقایسه آن با حسگرهای پلاسمونیک فلزی سنتی، و بررسی اثر تغییر شعاع در نانوحفره‌ها بر جابه‌جایی طول موج تشدید به عنوان یک راهکار تنظیم‌پذیری.پس از این مقدمه، بخش دوم به تشریح روش شبیه‌سازی، جزئیات هندسی و پارامترهای ماده می‌پردازد. در بخش سوم، نتایج شبیه‌سازی برای نانوحفره منفرد، نانوحفره‌ها با شعاع‌های متفاوت و نانوستاره شش‌پر به ترتیب ارائه می‌شود. بخش چهارم به بحث و تفسیر فیزیکی نتایج، مقایسه با کارهای پیشین و بررسی کاربردهای حسگری اختصاص دارد. در نهایت، بخش پنجم نتیجه گیری می باشد.

روش شبیه سازی

پاسخ نوری نانوساختارهای SiC با روش عددی تفاضل محدود در حوزه زمان (FDTD) و نرم‌افزار Ansys Lumerical FDTD 2020 شبیه‌سازی شد [۲۷]. این روش به دلیل حل مستقیم معادلات ماکسول و دقت طیفی بالا انتخاب شد.

خواص نوری SiC

کاربید سیلیسیم با استفاده از یک مدل نوسانگر تک‌لورنتزی مدل‌سازی شده است که برهم‌کنش فوتون‌ها با فونون‌های نوری طولی و عرضی را توصیف می‌کند[۸،۱۲،۱٤]. تابع دی‌الکتریک وابسته به فرکانس برابر:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty \left(1+\frac{\omega_{LO}^2-\omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2-\omega^2-i\gamma\omega}\right)$$

در این رابطه، ϵ_∞ = ٦.٧ ثابت دی‌الکتریک وابسته به فرکانس بالاست، ω_{LO} = ۹۷۲ cm^{-1} و ω_{TO}= ۷۹۷ cm^{-1} به ترتیب فرکانس‌های فونون طولی و عرضی هستند،و γ= ٤.٥ cm^{-1} هم ضریب میرایی را نشان می‌دهد[١٦-١٥].. باند رست شترالن بین ω_{TO} و ω_{LO}، یعنی حدود ۱۰.۳ تا ۱۲.۵ میکرومتر قرار دارد[۸].

هندسه ساختارها

نانوحفره‌های استوانه‌ای :آرایه مربعی با شعاع μm ۰.۵ ، ضخامت لایه کاربید سیلیسیم μm ۱ و دوره تناوب آن μm ۳ انتخاب و برای تنظیم‌پذیری، شعاع در ۱۰ گام ازμm (۰.۳ تا ۰.۷)تغییر داده شد.

نانوستاره‌های شش‌پر :آرایه مربعی کاربید سیلیسیم با طول بازو μm ۱و عرض نوک تقریباnm ۵۰ ، ضخامت لایه μm ۱و دوره تناوب μm ٤ که برای بهره‌گیری از اثر میله‌برق‌گیر انتخاب شده است[۲٦-۲۵].

تنظیمات شبیه‌سازی

شبیه‌سازی در یک سلول واحد با شرایط مرزی تناوبی در راستای X و Y انجام شد. در راستای Z از شرایط مرزی کاملاً منطبق با ضخامت ۱ میکرومتر و مرتبه ۸ استفاده گردید[۲۷]. چشمه نور از نوع میدان کل-میدان پراکنده با قطبش خطی X و تابش عمودی بود. بازه طیفی ۸ تا ۱۳ میکرومتر و تعداد نقاط فرکانسی ۳۰۰ عدد تنظیم شد. برای مدل‌سازی دقیق لبه‌های تیز، یک ناحیه مش اختصاصی با ابعاد زیر تعریف شد[۲۱].

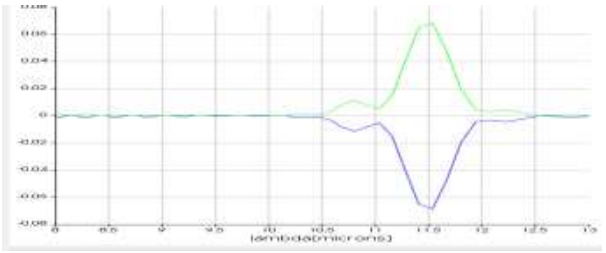
$\Delta X = \Delta Y = 0.24\mu m$ وگام $dx = dy = 0.005$ برای هر ساختار، طول موج تشدید و پهنای باند در نیمه‌حداکثر از طیف عبور استخراج شدوضریب کیفیت از رابطه زیر بدست آمد[۲۰–۸].

$$Q = \lambda_{res}/\mathrm{FWHM}$$

توزیع میدان الکتریکی در صفحه میانی ساختار در لحظه تشدید ثبت شد. تقویت میدان به صورت نسبت بیشینه میدان به میدان فرودی محاسبه شد. حساسیت با جابه‌جایی طول موج تشدید بر حسب تغییر ضریب شکست محیط اطراف $\Delta n = 0.1$ تعیین گردید. فاکتور شایستگی از تقسیم حساسیت بر پهنای باند در نیمه‌حداکثر به دست آمد. شبیه‌سازی‌ها در دمای اتاق (۳۰۰ کلوین) و با فرض ماده غیرمغناطیسی انجام شد.

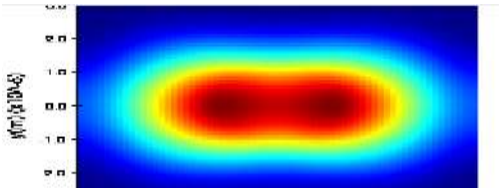
نانوحفره منفرد

شکل ۱ تغییرات نسبی عبور را بر حسب طول موج برای نانوحفره کاربید سیلیسیم نشان می‌دهد. یک قله تشدید تیز در طول موج ۱۱.۵۳ میکرومتر مشاهده می‌شود. این قله متناظر با برانگیختگی مد پلاریتون فونون سطحی جایگزیده است و در داخل باند رست‌شترالن کاربید سیلیسیم (حدود ۱۰.۳ تا ۱۲.۵ میکرومتر) قرار داردکه با پیش‌بینی‌های نظری [۸,۱۲] و نتایج تجربی پیشین همخوانی دارد[۲۱–۲۰].



شکل ۱ –طیف تغییرات نسبی عبور ($\Delta T/T$) برای نانوحفره SiC با شعاع ۰.۵ میکرومتر. قله تشدید LSPPhP در λ = ۱۱.۵۳ μm قابل مشاهده است

شکل ۲ توزیع نرمال‌شده میدان الکتریکی ($|E|/|E_0|$) را در صفحه میانی ساختار در طول موج تشدید نشان می‌دهد.

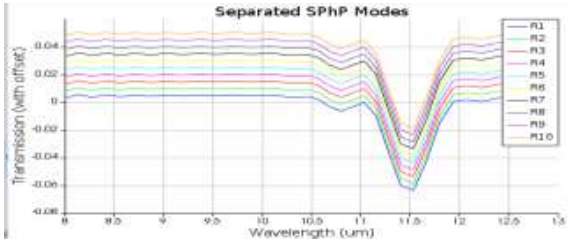


شکل۲–توزیع میدان الکتریکی در نانو–حفره SiC در طول موج ۱۱.۵μm
نقاط داغ در لبه های حفره، تمرکز شدید میدان را نشان می دهند

میدان به شدت در لبه‌های حفره متمرکز شده و نقاط داغ تشکیل می‌دهد که رفتار آنتن نوری زیرطول‌موج را تأیید می‌کند[۲۱–۲۰]. ضریب کیفیت با استفاده از طول موج تشدید و پهنای باند در نیمه‌حداکثر ۰.٤٤میکرومتر برابر ۲٦.۲ محاسبه شد[۸]. این مقدار نشان‌دهنده تلفات نوری کم در نانوحفره SiC نسبت به پلاسمونیک فلزی در مادون‌قرمز و محبوس‌سازی خوب نور است.

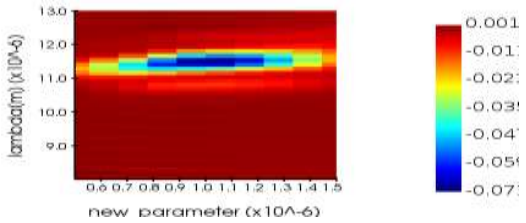
نانوحفره‌ها با شعاع‌های متفاوت

شکل ۳ قله تشدید را در μm (۱۱.٦–۱۱.٤)برای ۱۰ شعاع نشان می‌دهد. افزایش شعاع، جابه‌جایی منظم به سوی طول موج بلندتر (قرمز) دارد که تأییدکننده وابستگی فرکانس تشدید به ابعاد هندسی و قابلیت تنظیم‌پذیری است[۲۲–۲۰].



شکل ۳–طیف عبور نانو–حفره‌های SiC با شعاع‌های مختلف(R_1 تا R_{10})محور افقی: طول‌موج (μm) ومحور عمودی: توان عبوری نرمال‌شده

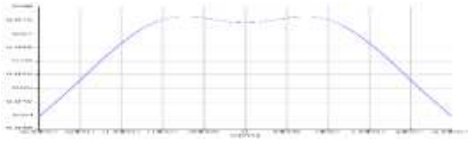
شکل ٤ توزیع میدان را برای چند شعاع منتخب نشان می‌دهد. تمرکز میدان در لبه‌ها در همه شعاع‌ها مشهود است و بیشینه میدان (۰.۰۲۳ واحد نرم‌افزار) تقریباً ثابت می‌ماند که بیانگر پایداری اثر آنتن نوری است[۲۲–۲۰].



شکل ٤–توزیع میدان الکتریکی نرمال‌شده در نانوحفره‌های SiC برای چند شعاع منتخب

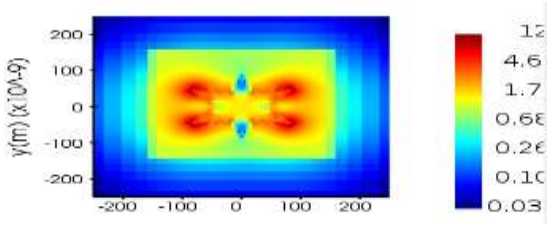
نانوستاره شش‌پر

شکل ۵ قله تشدید LSPPhP را در μm ۱۱.۷ نشان می‌دهد که در آن نوسانات بارهای پلاریزاسیون با میدان فرودی هم‌فاز شده و جذب و پراکندگی بیشینه می‌شود [۸,۱۲].



شکل۵– طیف عبور و جذب نانوستاره شش‌پر SiC. قله تشدید LSPPhP در طول موج ۱۱.۷ میکرومتر قابل مشاهده است.

شکل ٦ تقویت میدان ۱۲ برابری ($|E|/|E_0| \approx 12$) در نوک بازوها (شدت ١٤٤ برابر) را نشان می‌دهد [۲۵,۲۶].



شکل٦– توزیع میدان الکتریکی نرمال‌شده در نانوستاره شش‌پر در طول موج

نتایج: نانوساختارهای ستاره‌ای SiC با ضریب کیفیت ۲٦.۲ در ۱۱.۵۳ میکرومتر و جابه‌جایی قرمز وابسته به شعاع، قابلیت تنظیم‌پذیری دارند [۲۲، ۲۰–۸] و میدان در لبه‌ها پایدار است [۲۱، ۲۰]. در ۱۱.۷ میکرومتر، تقویت میدان ۱۲ برابری در نوک بازوها، آن‌ها را برای SERS و مدیریت حرارتی مناسب می‌کند [۲٦–۲٤]. فاکتور شایستگی بالاتر نسبت به فلزات [۲۵، ۲۳، ۲۲] با مطالعات تجربی تأیید شده است [۲۵–۲۳]. با وجود محدودیت شبیه‌سازی (نادیده‌گرفتن عواملی مانند ناهمواری سطح و دما)، نتایج نشان‌دهنده پتانسیل بالای SiC برای جایگزینی پلاسمونیک در فروسرخ است.

مراجع:

[1] W. Xia and G. Zheng, "Spectral analysis of localized surface phonon polaritons in resonant silicon carbide hollow cylinder array," J. Opt., vol. 24,
[2] R. Hillenbrand, Y. Abate, M. Liu, X. Chen, no. 9, p. 095101, Aug. 2022.
and D. N. Basov, "Surface phonon polaritons," Nat. Rev. Mater., vol. 10, p.
.285, 2025

[3] S. M. V. Esfidani, M. J. Tadjer, and T. G. Folland, "Lifetime and molecular coupling in surface phonon polariton resonators," ACS Omega, vol. 9, no. 19, pp. 21080–21089, May 2024.

[4] T. Fei, T. Cheng, H. Zhao, X. Xie, L. Zhang, Z. Fu, J.-Y. Yang, and L. Liu, "Temperature effects on infrared dielectric functions and surface phonon polaritons in 4H-SiC: A spectroscopic ellipsometry study," J. Appl. Phys., vol. 132, no. 12, p. 123101, Sep 2022.

[5] J. D. Caldwell et al., "Low-loss, infrared and terahertz nanophotonics using surface phonon polaritons," Nanophotonics, vol. 4, no. 1, pp. 44–68, 2015.

[6] T. Wang et al., "Optical properties of single infrared resonant circular microcavities for surface phonon polaritons," Nano Lett., vol. 13, no. 11, pp. 5051–5055, Nov. 2013.

[7] X. Zou, G. Zheng, Y. Chen, F. Xian, and L. Xu, "Tunable and angle-independent thermal emitter based on surface phonon polariton mode in the mid-infrared range," Opt. Mater., vol. 84, pp. 91–95, Oct. 2018.

[8] F. Cui and G. Zheng, "Photonic-grating-enabled selective manipulation of surface waves within the Reststrahlen band," Opt. Mater., vol. 122, p. 111814, Dec. 2021.

[9] C. T. Ellis et al., "Aspect-ratio driven evolution of high-order resonant modes and near-field distributions in localized surface phonon polariton nanostructures," Sci. Rep., vol. 6, p. 32959, Sep. 2016.

[10] A. Mancini et al., "Near-field spectroscopy of cylindrical phonon-polariton antennas," ACS Nano, vol. 14, no. 7, pp. 8508–8517, Jul. 2020

[11] I. Razdolski et al., "Resonant enhancement of second harmonic generation in the mid-infrared using localized surface phonon polaritons in sub-diffractional nanostructures*," Nano Lett., vol. 16, no. 11, pp. 6954–6959, Nov*. 2016.

[12] A. Taflove and S. C. Hagness, Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method, 3rd ed. Norwood, MA, USA: Artech House, 2005.
[13] Y. Chen et al., "High-Q localized surface phonon polariton resonators in SiC nanodisks and nanoholes," ACS Photonics, vol. 6, no. 8, pp. 2076–2082, Aug. 2019.

[14] Lumerical Inc., Lumerical FDTD User Guide. Ansys, Inc., 2020.

[15] X. Chen, Z. Wang, and Y. Zhang, "Sensing applications of surface phonon polaritons in SiC nanostructures," Nanophotonics, vol. 10, no. 16, pp. 2957–2970, 2021.

[16] S. Yang and H. Wang, "Ultra-sensitive mid-infrared sensing using localized surface phonon polaritons in SiC nano-hole arrays," Opt. Express, vol. 33, no. 4, pp. 8912–8925, 2025.

[17] F. Neubrech, S. A. Maier, and J. Aizpurua, "Surface phonon polariton-enhanced infrared molecular sensing," Chem. Rev., vol. 120, no. 15, pp. 7487–7565, Aug. 2020.

[18] D. Rosenmann, M. K. Kim, and J. D. Caldwell, "Extreme light confinement and sensing using surface phonon polaritons in nanostructured SiC," Nano Lett., vol. 23, no. 8, pp. 3341–3347, Apr. 2023.

[19] D. Korobkin, Y. A. Urzhumov, B. Neuner III, G. Shvets, C. Zorman, and Z. Zhang, "Mid-infrared metamaterial based on perforated SiC membrane: engineering optical response using surface phonon polaritons," Appl. Phys. A, vol. 88, pp. 605–609, Jun. 2007.

[20] J. D. Caldwell et al., "Low-loss, extreme subdiffraction photon confinement via silicon carbide localized surface phonon polariton resonators," Nano Lett., vol. 13, no. 8, pp. 3690–3697, Aug. 2013.

[21] M. Ameen, A. Garcia-Etxarri, M. Schnell, R. Hillenbrand, and J. Aizpurua, "Infrared phononic nanoantennas: Localized surface phonon polaritons in SiC disks," Chin. Sci. Bull., vol. 55, no. 24, pp. 2625–2629, 2010.

[22] "Giant transmission and dissipation in perforated films mediated by surface phonon polaritons," Phys. Rev. B, vol. 78, p. 205408, 2008.

[23] Y. A. Urzhumov, D. Korobkin, B. Neuner III, and G. Shvets, "Optical properties of sub-wavelength hole arrays in SiC membranes," J. Opt. A: Pure Appl. Opt., vol. 9, no. 9, pp. S322-S328, 2007.

[24] "Temperature-sensitive hybridization of propagating and localized surface phonon polaritons in polar 4H-SiC nano-resonators," ACS Photonics, 2025.

[25] "Enhancing outcoupling of near-field radiative heat transfer via magnetic dipole resonance," Phys. Rev. Appl., 2025.

[26] "Optical flat-band and planar negative refraction in SiC infrared metasurface," Opt. Express, 2025.

[27] "Phonon-Polaritonic Bowtie Nanoantennas: Controlling Infrared Thermal Radiation at the Nanoscale," Nano Lett., vol. 23, no. 15, pp. 6930–6936, 2023.

مدولاتور نوری مبتنی بر ساختار SiCOI با استفاده از ماده تغییر دهنده فاز GST در طول موج 1.55µm

عباس‌پور، مبینا ؛ نیکوفرد، محمود

کاشان، دانشگاه کاشان، دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر گروه الکترونیک

mnik@kashanu.ac.ir

چکیده

در این مقاله برای نخستین بار، یک مدولاتور نوری فعال مبتنی بر ماده تغییردهنده فاز GST بر روی ساختار موجبری SiCOI در طول موج مخابراتی 1.55µm طراحی و شبیه‌سازی شده است. ساختار پیشنهادی شامل لایه موجبر SiC با ضخامت بهینه 0.29µm به منظور پشتیبانی همزمان از مودهای اصلی TE و TM و لایه پوششی GST با ضخامت 0.1µm می‌باشد. با اعمال محرک حرارتی یا الکتریکی، فاز GST بین حالت آمورف و بلوری ضریب شکست جابه‌جا شده و ضریب جذب نوری ماده تغییر می‌کند که منجر به مدوله‌سازی شدت نور عبوری می‌شود. بررسی توزیع توان و میدان الکتریکی با نرم‌افزار COMSOL Multiphysics نشان می‌دهد که مودهای TMبه صورت پلاسمونیکی در مرز GST و SiC منتشر می‌شوند، در حالی که مودهای TE به دلیل ضریب شکست بالای GST در لایه پوششی انتشار می‌یابند. همچنین تأثیر ضخامت لایه GST بر بخش حقیقی و موهومی ضریب شکست مؤثر در هر دو فاز بررسی گردید. شبیه‌سازی انتشار نور با نرم‌افزار Lumerical FDTD Solutions نشان داد که طول انتشار در فاز آمورف برای هر دو مود TE و TM برابر 1µm است، در حالی که در فاز بلوری این مقدار برای مودهای TE و TM به ترتیب به 0.144µm و 0.136µm کاهش می‌یابد. این اختلاف چشمگیر در طول انتشار بین دو فاز آمورف و بلوری، ساختار پیشنهادی را برای کاربرد کلیدزنی نوری فعال و مدولاسیون جذبی در مخابرات نوری بسیار مناسب می‌سازد.

واژه‌های کلیدی: ژرمانیوم آنتیموان تلوراید (GST)، سیلیکون کارباید روی عایق (SiCOI)، مدولاسیون جذبی، مدولاتورهای نوری، مواد تغییردهنده فاز.

Optical Modulator Based on SiCOI Structure Using GST Phase Change Material at 1.55µm Wavelength

Abbaspour, Mobina; Nikoufard, Mahmoud

Kashan, University of Kashan , Faculty of Electrical and Computer Engineering, Department of Electronics
mnik@kashanu.ac.ir

Abstract

In this paper, an active optical modulator based on the phase-change material (PCM) GST is designed and simulated for the first time on a SiCOI waveguide platform operating at the 1.55 µm telecommunications wavelength. The proposed structure consists of a SiC waveguide layer with an optimized thickness of 0.29 µm, enabling the simultaneous propagation of the fundamental transverse electric (TE) and transverse magnetic (TM) modes, together with a 0.1 µm GST cladding layer. By applying either a thermal or an electrical stimulus, the GST undergoes a reversible phase transition between its amorphous and crystalline states, resulting in changes in its refractive index and optical absorption coefficient, thereby enabling intensity modulation of the transmitted light. The optical power and electric field distributions, analyzed using COMSOL Multiphysics, demonstrate that the TM modes propagate as plasmonic modes at the GST–SiC interface, whereas the TE modes are primarily confined within the GST cladding due to its high refractive index. Furthermore, the influence of the GST layer thickness on both the real and imaginary parts of the effective refractive index was investigated for the amorphous and crystalline phases. Optical propagation simulations performed using Lumerical FDTD Solutions reveal that the propagation length in the amorphous phase is 1 µm for both TE and TM modes. In contrast, upon crystallization, the propagation lengths decrease significantly to 0.144 µm and 0.136 µm for the TE and TM modes, respectively. This pronounced difference in propagation length between the amorphous and crystalline phases makes the proposed structure a highly promising candidate for active optical switching and absorption-based optical modulation in optical communication systems.

***Keywords**: Germanium Antimony Telluride (GST), Silicon Carbide on Insulator (SiCOI), Absorption modulation, optical modulators, phase-change materials.*
PACS No. 42.79.Gn, 42.79.Hp

مقدمه

تـا کنـون، انـواع متعـددی از ادوات مجتمـع نـوری بـا بهره‌گیـری از بسترهای گوناگون طراحی و ساخته شـده‌اند کـه در ایـن میـان، سـاختار سیلیکون روی عایق (SOI) و نیترید سیلیکون (SiN) روی ویفر سیلیکونی از اهمیـت ویـژه‌ای برخوردارنـد. در هـر دوی ایـن سـاختارها، ابتـدا بـا اکسیداسیون ویفـر سـیلیکونی تـا ضـخامت چنـد میکرومتـر، لایـه‌ای از سیلیکون بلوری (c-Si) یا SiN به عنوان هسته موجبر قـرار داده می‌شـود [۱]. اخیراً، سیلیکون کاربیـد (SiC) جـایگزین Si و SiN در لایـه مـوجبر شده است. این ماده مکمل مناسبی برای بسترهای مبتنی بر سـیلیکون بـه شمار رفته و به پیشرفت مدارهای مجتمع نوری کمک شایانی می‌کند. در حال حاضر، گونه‌های مختلفی از SiC شامل 4H-SiC، 6H-SiC (با شبکه شش‌گوشی) و 3C-SiC (با ساختار بلوری مکعبی) مورد مطالعه و تولیـد قرار گرفته‌اند. از مزایای کلیدی SiC می‌توان به رسانندگی گرمایی بـالاتر نسبت به Si و SiO_2، ضریب شکست بیشتر در مقایسه بـا SiN، عملکـرد مناسب در چگالی توان نوری بالا، تلفات نـوری کـم، و محصورشـدگی عالی باریکه نوری در لایه هسته اشاره کرد [۲، ۳].

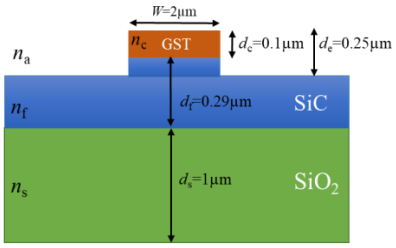
مدولاتورهای نوری، ادواتی هستند که از نـور بـرای تغییـر و مدولـه کردن سیگنال‌ها استفاده می‌کنند و کاربرد گسترده‌ای در شبکه‌های ارتباط نوری دارند. این مـدولاتورها در انـواع الکترونـوری، گرمـایی–نـوری و سامانه‌های میکروالکترومکانیکی (MEMS) ساخته می‌شوند و نسـبت بـه مدولاتورهای الکترونیکی سنتی، مزایایی نظیر پهنای باند بـالاتر، مصـرف انرژی کمتر و سرعت کلیدزنی بیشتر را ارائه می‌دهنـد [۶-۴]. مـدولاتور نوری مبتنی بر مواد تغییردهنده فاز (PCM)، از خواص نـوری ایـن مـواد برای هدایت و مسیریابی سیگنال‌های نوری بهره می‌برد. ماده تغییردهنـده فاز، ماده‌ای است که بـا اعمـال گرمـا یـا جریـان الکتریکـی و در نتیجـه جابه‌جایی میـان فازهـای مختلـف، ویژگی‌هـای نـوری آن قابـل کنتـرل می‌شود. به این ترتیب، اعمال سیگنال الکتریکی به مدولاتور، سبب گـرم شدن لایه PCM و تغییر خواص نوری آن می‌گردد [۷].

ماده (GST) $Ge_2Sb_2Te_5$ نمونه‌ای بارز از مواد تغییردهنده فاز است که در سه فاز آمورف، بلوری مکعبی و بلـوری شش‌گوشـی قابـل مشـاهده می‌باشد. از ویژگی‌های منحصـربه‌فرد ایـن مـاده، قابلیـت تبـدیل از فـاز آمورف به بلوری در زمانی کمتر از 50ns است [۸].

در این مقاله، بر ماده SiC به عنوان لایه موجبر تمرکـز کـرده و سـعی داریم یک مدولاتور نوری جدید در طول موج 1.55μm با استفاده از ماده تغییردهنده فاز GST بر روی لایه SiC طراحی کنیم. هدف اصلی در ایـن طراحی، مدوله‌سازی شدت نـور عبـوری از مـدولاتور بـا بهره‌گیـری از تغییرات ضریب جذب ماده‌ی GST در دو فاز آمورف و بلوری می‌باشد.

ساختار مدولاتور مبتنی بر GST-PCM

در شکل ۱، سطح مقطع مدولاتور به صورت دوبعدی نشان داده شده است که در آن ماده GST به عنوان پوشش ساختار به کار رفته است. ضخامت لایه GST (d_c) برابر 0.1μm، عمق خوردگی (d_e) برابر 0.25μm و پهنای پشته برابر 2μm است. مواد SiO_2 و SiC در طول موج 1.55μm به ترتیب دارای ضریب شکست 1.444 و 3.1847 هستند که این مقادیر از مرجع [۹] استخراج شده‌اند. بر اساس محاسبات، ضخامت بهینه لایه SiC برای مودهای اصلی TE و TM به ترتیب 0.13μm و 0.29μm محاسبه شد و برای اینکه ساختار مورد نظر بتواند از هر دو مود اصلی TE و TM پشتیبانی کند، ضخامت 0.29μm برای لایه SiC در نظر گرفته شد [۱۰].



شکل ۱: نمای طرحواره مدولاتور پیشنهادی با ماده تغییردهنده فاز GST به عنوان لایه پوششی.

ضریب شکست مختلط ماده‌ی GST بر اساس رابطه‌ی پاشـندگی سـلمیر (رابطه ۱) و با استفاده از ضرایب گزارش‌شده در مرجع [۱۱] برای بازه‌ی طول‌موجی 1μm تا 2.2μm محاسبه شده است (جدول ۱).

$$n^2(\lambda) = 1 + \sum_{i=1}^{3} \frac{B_i - \lambda^2}{\lambda^2 - C_i} \qquad (۱)$$

جدول ۱: ضرایب سلمیر برازش‌شده برای ماده GST در دو فاز آمورف و بلوری

فاز	B_i	C_i (μm²)	RMSE فیت
آمورف	13.346	0.345	0.049
بلوری	39.489	−0.029	0.179

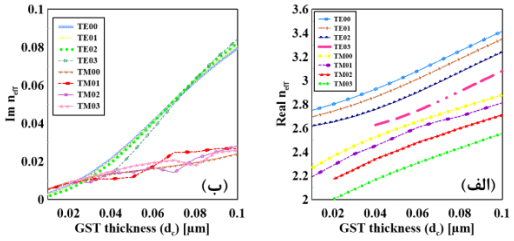
در طول‌موج مرجع 1.55μm، مقدار بخش حقیقی ضریب شکست بـرای فازهای آمورف و بلوری به‌ترتیب 4.6 و 7.45 به‌دست آمده کـه مطابقـت بسیار خوبی با داده‌های تجربی مراجع [۱۱, ۱۲] دارد. شایان ذکـر اسـت که رابطه‌ی سلمیر ذاتاً بـرای محیط‌هـای بـدون تلـف تعریـف می‌شـود؛ ازاین‌رو، اگرچه این رابطه برای فاز آمورف با جـذب نـاچیز ($k\approx0.12$) از دقت بالایی برخوردار است، در فاز بلوری با جذب قابل‌توجـه ($k\approx1.49$)

صرفاً تقریبی برای بخش حقیقی ارائه می‌دهد و بخش موهومی مستقیماً از داده‌های تجربی استخراج شده است. در نتیجه مقادیر بخش حقیقی و موهومی ضریب شکست مؤثر مادهٔ GST برای دو فاز آمورف و بلوری در طول موج 1.55μm به ترتیب برابر 0.12j + 4.6 و 1.49j + 7.45 در نظر گرفته شده است [۱۱, ۱۲].

همچنین، چشمه‌ی نور ورودی به صورت پیوسته (CW) با توان خطی در محدوده‌ی میلی‌وات (جهت جلوگیری از اثرات گرمایی غیرخطی) و با مد اصلی TE00 و TM00 به ورودی موجبر تزریق می‌گردد.

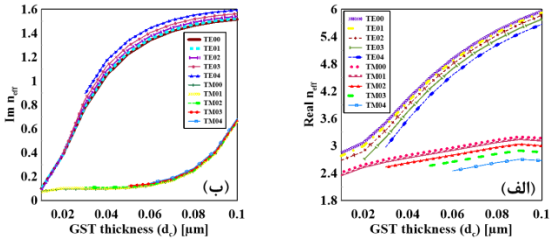
تاثیر ضخامت لایه پوشش GST بر قسمت حقیقی و موهومی ضریب شکست موثر

با توجه به اهمیت تأثیر ضخامت لایه GST بر ضریب شکست مؤثر، ابتدا تأثیر ضخامت این ماده (d_c) را بر بخش حقیقی و موهومی ضریب شکست مؤثر در فاز آمورف و در طول موج 1.55μm بررسی کردیم که به ترتیب در شکل‌های (۲-الف و ب) نشان داده شده است. در این ساختار، چهار مود از نوع TE و چهار مود از نوع TM منتشر می‌شوند و تعداد مودهای منتشرشده با افزایش ضخامت لایه GST افزایش می‌یابد. بخش‌های حقیقی و موهومی ضریب شکست ساختار به ترتیب به مقادیر 4.6 و 0.1 میل می‌کنند که به ترتیب برابر با بخش حقیقی و موهومی ضریب شکست ماده GST در فاز آمورف است (شکل۲-الف وب). این بدان معناست که با افزایش ضخامت لایه GST، تأثیر این لایه بر ضریب شکست مؤثر غالب می‌شود.



شکل ۲: الف) قسمت حقیقی و ب) قسمت موهومی ضریب شکست موثر بر حسب ضخامت لایه GST در فاز آمورف. پهنای پشته برابر با 2μm می‌باشد.

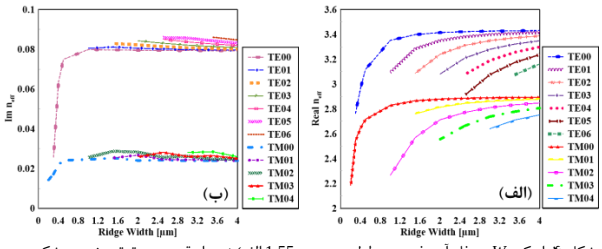
در ادامه، تأثیر ضخامت ماده GST بر بخش حقیقی و موهومی ضریب شکست مؤثر، در فاز بلوری بررسی می‌شود (شکل ۳-الف و ب). مطابق شکل، با تغییر ضخامت لایه GST، مودهای TE مشابه حالت آمورف به دلیل ضریب شکست بالای GST در لایه پوششی منتشر می‌شوند و با افزایش ضخامت لایه GST، بخش‌های حقیقی و موهومی ضریب شکست مؤثر افزایش خواهند یافت، اما مودهای TM پلاسمونیک بوده و در مرز GST و SiC منتشر می‌شوند. بخش‌های حقیقی و موهومی مودهای TE بسیار نزدیک به یکدیگر هستند و رفتار مشابهی را برای مودهای TM مشاهده می‌کنیم.



شکل ۳: نمودار الف) قسمت حقیقی و ب) قسمت موهومی ضریب شکست موثر بر حسب ضخامت لایه GST در فاز بلوری. پهنای پشته برابر با 2μm می‌باشد.

تاثیر پهنای پشته بر قسمت حقیقی و موهومی ضریب شکست موثر

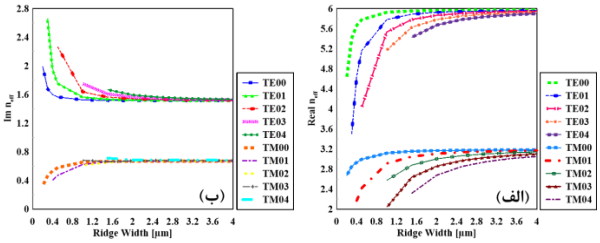
مطابق شکل ۴ در فاز آمورف و طول موج 1.55μm، تأثیر پهنای پشته (W) بر ضریب شکست موثر ساختار پیشنهادی با ضخامت پوشش GST معادل 0.1μm بررسی شد. در کل، دوازده مود قابل انتشار شامل هفت مود TE و پنج مود TM شناسایی گردید. با افزایش W، تعداد مودها افزایش یافته و هر دو بخش حقیقی و موهومی ضریب شکست موثر به مقادیر متناظر ماده GST در فاز آمورف (به ترتیب 4.6 و 0.12) نزدیک می‌شوند که نشان‌دهنده غلبه اثر لایه GST است. بخش حقیقی و موهومی ضریب شکست در مودهای TE بیشتر از مودهای TM است. مودهای TE و TM از پهنای قطع مشخصی ظاهر می‌شوند: به‌ترتیب برای مودهای TE00 تا TE06 از پهنای 0.3μm تا 2.5μm، و برای مودهای TM00 تا TM04 از پهنای 0.2μm تا 3μm.



شکل ۴: اسکن W در فاز آمورف و در طول موج 1.55μm الف) نمودار قسمت حقیقی ضریب شکست موثر بر حسب W ب) نمودار قسمت موهومی ضریب شکست موثر بر حسب W. ضخامت پوشش GST، 0.1μm می‌باشد.

در فاز بلوری و طول موج 1.55μm، تأثیر پهنای پشته (W) بر ضریب شکست موثر ساختار با ضخامت پوشش GST برابر 0.1μm مطابق شکل ۵ بررسی شد. در این حالت، ده مود قابل انتشار شامل پنج مود TE و پنج مود TM شناسایی گردید. با افزایش W، تعداد مودها افزایش یافته و بخش حقیقی و موهومی ضریب شکست موثر به مقادیر متناظر ماده GST در فاز بلوری (به ترتیب 7.45 و 1.49) نزدیک می‌شوند. مقادیر

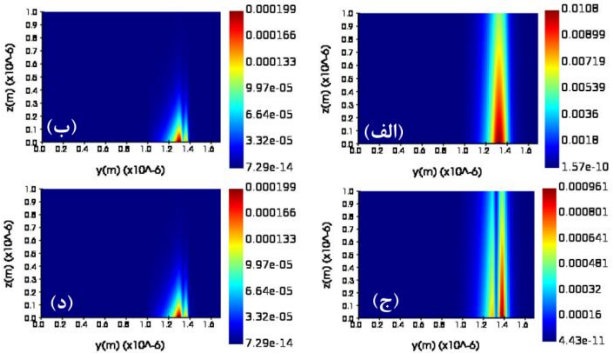
حقیقی و موهومی ضریب شکست در مودهای TE بیشتر از مودهای TM است. مودهای TE و TM از پهنای قطع 0.2µm به بالا قابل مشاهده هستند. پهنای قطع برای مودهای TE00 تا TE04 به ترتیب 0.2µm، 0.3µm، 0.5µm، 1µm و 1.5µm و برای مودهای TM00 تا TM04 به ترتیب 0.2µm، 0.4µm، 1µm و 1.5µm است.



شکل ۵: اسکن W در فاز بلوری و در طول موج 1.55µm الف) نمودار قسمت حقیقی ضریب شکست موثر بر حسب W ب) نمودار قسمت موهومی ضریب شکست موثر بر حسب W. ضخامت پوشش GST، 0.1µm می‌باشد.

انتشار نور

مطابق شکل ۶، انتشار نور درون یک مدولاتور به طول 1µm برای دو فاز آمورف و بلوری و در دو مود TE و TM مورد بررسی قرار گرفته است. در هر دو مود، تفاوت قابل‌توجهی در طول انتشار مربوط به فاز آمورف در مقایسه با فاز بلوری مشاهده می‌شود. به‌طور مشخص در مود TE، جذب در فاز آمورف ناچیز است، در حالی‌که در فاز بلوری به شدت افزایش می‌یابد؛ این پدیده ناشی از بزرگ‌تر بودن بخش موهومی ضریب شکست ماده GST در فاز بلوری نسبت به فاز آمورف است.



شکل۶: انتشار نور و توزیع توان در دو فاز آمورف و بلوری در ماده GST در طول موج 1.55µm برای مودهای TM الف) فاز آمورف ب) فاز بلوری و برای مودهای TE ج) فاز آمورف د) فاز بلوری.

افزون بر این، در فاز بلوری به دلیل رفتار پلاسمونیک ماده، جذب به میزان چشمگیری افزایش یافته و در نتیجه طول انتشار کاهش می‌یابد. بر اساس شبیه‌سازی‌های انجام‌شده با نرم‌افزارLumerical FDTD Solutions در طول موج 1.55µm، طول انتشار برای مود TM در فازهای آمورف و بلوری به ترتیب 1µm و 0.136µm، و برای مود TE در این دو فاز به ترتیب 1µm و 0.144µm محاسبه شده است.

نتیجه گیری

در این مقاله، طراحی و شبیه‌سازی یک مدولاتور نوری مبتنی بر لایه‌ی تغییر فازدهنده GST بر روی ساختار SiCOI در طول موج 1.55µm مورد بحث قرار گرفت. نتایج حاصل از محاسبات مؤید آن است که اختلاف قابل‌توجه در ضرایب شکست مؤثر و ضرایب جذب در دو فاز آمورف و بلوری، برای مودهای TE و TM، زمینه‌ی مناسبی برای مدوله‌سازی شدت نور از طریق مکانیزم جذبی فراهم می‌آورد. بررسی پارامترهای هندسی نظیر ضخامت لایه‌ی پوشش GST و پهنای پشته (W) حاکی از آن است که با بهینه‌سازی این ابعاد، می‌توان نسبت تضعیف و طول انتشار را به‌گونه‌ای کنترل کرد که تمایز فازی بیشینه‌ای حاصل شود. این ویژگی، ساختار پیشنهادی را به گزینه‌ای کارآمد برای کاربردهای کلیدزنی نوری و مدولاسیون در مدارهای مجتمع نوری سیلیکونی تبدیل می‌کند.

مرجع‌ها

[1] A. Chatterjee, S. K. Sikdar, and S. K. Selvaraja; "High-speed waveguide integrated silicon photodetector on a SiN-SOI platform for short reach datacom"; *Optics Letters* **44**, No. 7 (2019) 1682-1685.
[2] A. B. Minella, D. Pohl, C. Täschner, R. Erni, R. Ummethala, M. H. Rümmeli, and B. Rellinghaus; "Silicon carbide embedded in carbon nanofibres: structure and band gap determination"; *Physical Chemistry Chemical Physics* **16**, No. 44 (2014) 24437-24442.
[3] T. Fan, H. Moradinejad, X. Wu, A. A. Eftekhar, and A. Adibi; "High-Q integrated photonic microresonators on 3C-SiC-on-insulator (SiCOI) platform"; *Optics Express* **26**, No. 20 (2018) 25814-25826.
[4] C. Han, M. Jin, Y. Tao, B. Shen, and X. Wang; "Recent progress in silicon-based slow-light electro-optic modulators"; *Micromachines* **13**, No. 3 (2022) 400.
[5] C. Wang, M. Zhang, X. Chen, M. Bertrand, A. Shams-Ansari, S. Chandrasekhar, and M. Lončar; "Integrated lithium niobate electro-optic modulators operating at CMOS-compatible voltages"; *Nature* **562**, No. 7725 (2018) 101-104.
[6] M. Xu, M. He, H. Zhang, J. Jian, Y. Pan, X. Liu, and X. Cai; "High-performance coherent optical modulators based on thin-film lithium niobate platform"; *Nature Communications* **11**, No. 1 (2020) 3911.
[7] R. Himmelhuber, R. A. Norwood, Y. Enami, and N. Peyghambarian; "Sol-gel material-enabled electro-optic polymer modulators"; *Sensors* **15**, No. 8 (2015) 18239-18255.
[8] H. Wu, W. Han, and X. Zhang; "Ultrafast dynamics of different phase states Ge2Sb2Te5 film induced by a femtosecond laser pulse irradiation"; *Materials* **15**, No. 19 (2022) 6760.
[9] *Refractive Index Database*; "Optical constants of SiO_2 and SiC"; Available: https://refractiveindex.info
[10] M. Abbaspour, M. Nikoufard, and M. A. Mahdian; "Optical modulator based on SiC structure using VO2 phase change material at 2.1µm wavelength"; *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* **35**, No. 2 (2024) 124.
[11] J. A. Frantz, J. D. Myers, A. Clabeau, R. Y. Bekele, N. Hong, M. A. Vincenti, M. Gandolfi, and J. S. Sanghera; "Optical constants of germanium antimony telluride (GST) in amorphous, crystalline, and intermediate states"; *Optical Materials Express* **13**, No. 12 (2023) 3631-3640.
[12] H. Liang, R. Soref, J. Mu, A. Majumdar, X. Li, and W.-P. Huang; "Simulations of Silicon-on-Insulator Channel-Waveguide Electrooptical 2×2 Switches and 1×1 Modulators Using a $Ge_2Sb_2Te_5$ Self-Holding Layer"; *Journal of Lightwave Technology* **33**, No. 9 (2015) 1805-1813.

طراحی و شبیه‌سازی مدولاتور نوری مبتنی بر موجبر $SiO_2/SiC/SiO_2$ با لایه پوششی Sb_2S_3 قابل تنظیم با تغییر فاز

عباس‌پور، مبینا ؛ نیکوفرد، محمود

کاشان، دانشگاه کاشان، دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر گروه الکترونیک

mnik@kashanu.ac.ir

چکیده

مدولاتورهای نوری، اجزای کلیدی در سیستم‌های ارتباطات نوری هستند که کنترل شدت، فاز و قطبش نور را ممکن می‌سازند. در پژوهش حاضر، یک مدولاتور نوری فعال الکتروجذبی مبتنی بر ماده تغییردهنده فاز Sb_2S_3 برای طول موج مخابراتی 1.55µm طراحی و شبیه‌سازی شده است. ساختار پیشنهادی از نوع SiCOI (لایه SiC بر روی زیرلایه SiO_2) با لایه پوششی Sb_2S_3 به ضخامت 0.1µm می‌باشد. با اعمال محرک حرارتی یا الکتریکی، فاز Sb_2S_3 بین حالت آمورف و بلوری جابه‌جا شده و ضریب جذب نوری ماده تغییر می‌کند. پس از بهینه‌سازی ضخامت لایه SiC به مقدار 0.29µm، ضریب شکست مؤثر برای مودهای TE و TM در هر دو فاز با استفاده از نرم‌افزار COMSOL محاسبه گردید. شبیه‌سازی‌های انتشار نور با نرم‌افزار Lumerical FDTD نشان داد که در فاز آمورف، به دلیل جذب ناچیز Sb_2S_3، توان نوری در هر دو مود تقریباً بدون افت در طول مدولاتور منتشر می‌شود (طول انتشار نامحدود)، در حالی که در فاز بلوری، طول انتشار برای مودهای TE و TM به ترتیب برابر 0.2989µm و 0.2988µm محاسبه شد. ساختار پیشنهادی مزیت کلیدی استقلال از پلاریزاسیون را داراست که امتیازی بسیار ارزشمند در فوتونیک محسوب می‌شود. در نهایت، ساختار با طول 10µm برای کاربرد سوئیچینگ نوری فعال در مخابرات نوری مناسب ارزیابی می‌گردد.

واژه های کلیدی: *مدولاتور نوری، مواد تغییردهنده فاز، Sb_2S_3، SiC، موجبر نوری، مدولاتور الکتروجذبی.*

Design and Simulation of an Optical Modulator Based on $SiO_2/SiC/SiO_2$ Waveguide with Sb_2S_3 Phase-Change Material Cladding

Abbaspour, Mobina; Nikoufard, Mahmoud

Kashan, University of Kashan , Faculty of Electrical and Computer Engineering, Department of Electronics

mnik@kashanu.ac.ir

Abstract

Optical modulators are key components in optical communication systems, enabling control over the intensity, phase, and polarization of light. In the present study, an active electroabsorption optical modulator based on the phase-change material Sb_2S_3 is designed and simulated for the telecommunication wavelength of 1.55µm. The proposed structure is of the SiCOI type (an SiC layer on an SiO_2 substrate) with an Sb_2S_3 cladding layer thickness of 0.1µm. By applying a thermal or electrical stimulus, the phase of Sb_2S_3 switches between amorphous and crystalline states, thereby altering the material's optical absorption coefficient. After optimizing the SiC layer thickness to 0.29µm, the effective refractive index for both TE and TM modes in the two phases was calculated using COMSOL Multiphysics. Light propagation simulations performed with Lumerical FDTD revealed that in the amorphous phase, due to the negligible absorption of Sb_2S_3, the optical power propagates through the modulator with almost no loss (unlimited propagation length), while in the crystalline phase, the propagation length for TE and TM modes was calculated to be 0.2989µm and 0.2988µm, respectively. The proposed structure offers the key advantage of polarization independence, which is considered a highly valuable feature in photonics. Finally, the structure with a length of 10µm is evaluated as suitable for active optical switching applications in optical telecommunications.

Keywords: *Optical modulator, Phase change material, Sb_2S_3, SiC, Optical waveguide, Electroabsorption modulator.*

PACS No. 42.79.Gn, 42.79.Hp

مقدمه

مدولاتورهای نوری، اجزای کلیدی در سیستم‌های مخابرات نوری و فوتونیک یکپارچه هستند که کنترل پویای شدت، فاز و قطبش نور را امکان‌پذیر می‌سازند. در میان رویکردهای نوین، مواد تغییردهنده فاز (PCM) به دلیل سوئیچینگ غیرفرار، مصرف توان پایین و تغییرات چشمگیر ضریب شکست بین فاز آمورف و بلوری توجه گسترده‌ای یافته‌اند [۱]. آنتیموان تری‌سولفید (Sb_2S_3) با تلفات نوری ناچیز و اختلاف ضریب شکست $\Delta n \approx 0.35$ در طول موج 1.55μm، گزینه‌ای ایده‌آل برای مدولاتورهای کم‌تلفات است [۲].

از میان بسترهای موجبری، سیلیکون کارباید روی عایق (SiCOI) به‌عنوان پلتفرمی نوظهور مطرح شده است [۳]. SiC با ضریب شکست بالا (2.3 تا 3.2)، پنجره شفافیت گسترده (0.37 μm تا 5.6μm)، تلفات انتشار پایین (0.15dB/cm)، رسانایی حرارتی عالی و ضریب ترمو-اپتیک پایین، پایداری حرارتی چشمگیری دارد [۴]. ویژگی منحصربه‌فرد SiC، دارا بودن ضریب غیرخطی مرتبه دوم (χ^2) است که امکان اثرات الکترواپتیک و تولید هارمونیک دوم را فراهم می‌آورد [۵].

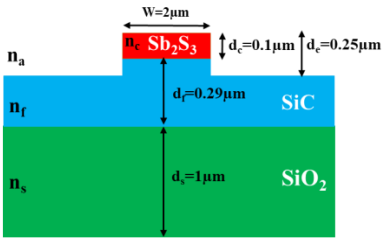
سوئیچ‌های فوتونیکی مبتنی بر PCM، نسل جدیدی از ادوات بازپیکربندی‌پذیر با قابلیت غیرفرار هستند [۶]. برخلاف سوئیچ‌های الکترواپتیک سنتی، این سوئیچ‌ها تنها در لحظه تغییر وضعیت انرژی مصرف می‌کنند. Sb_2S_3 با ضریب خاموشی بسیار پایین ($k<10^{-5}$) در هر دو فاز، گزینه‌ای برتر برای کاربردهای کم‌تلفات است [۷]. تحقیقات پیشین نشان داده‌اند که ساختارهای مبتنی بر Sb_2S_3 بر روی سیلیکون قادر به دستیابی به تلفات درج کمتر از 0.12 dB هستند [۸].

در پژوهش حاضر، برای نخستین بار یک مدولاتور نوری فعال الکتروجذبی مبتنی بر Sb_2S_3 بر روی لایه موجبری SiC در طول موج 1.55μm طراحی و شبیه‌سازی شده است. با توجه به اینکه تاکنون مطالعه جامعی بر روی ترکیب Sb_2S_3 با موجبر SiC انجام نشده، ساختار پیشنهادی مزایای محصورشدگی مناسب نور در SiC و سوئیچینگ کم‌تلفات در Sb_2S_3 را یکپارچه ساخته و گامی مؤثر در توسعه ادوات فوتونیک یکپارچه محسوب می‌شود.

هندسه مدولاتور

نمای دوبعدی از سطح مقطع مدولاتور نوری طراحی‌شده در شکل ۱ ارائه گردیده است. در این ساختار، از ماده Sb_2S_3 به‌عنوان لایه پوششی استفاده شده است. Sb_2S_3 نمونه‌ای از مواد موسوم به PCM محسوب می‌شود که ویژگی برجسته آن، قابلیت تغییر برگشت‌پذیر خواص نوری در پاسخ به تحریک‌های حرارتی یا الکتریکی است. این ماده می‌تواند با اعمال محرک مناسب، بین دو فاز آمورف و بلوری جابه‌جا شود و بدین ترتیب عملکرد سوئیچینگ نوری را ممکن می‌سازد [۹].

پارامترهای هندسی ساختار به‌صورت زیر تعریف شده‌اند: ضخامت لایه Sb_2S_3 (d_c) برابر با 0.1μm، عمق خوردگی (d_e) برابر با 0.25μm، و پهنای پشته (W) برابر با 2μm در نظر گرفته شده است. همچنین زیرلایه این ساختار از جنس SiO_2 بوده و ضخامت آن با d_s نشان داده می‌شود که مقدار 1μm برای آن درنظر گرفته شده است.



شکل ۱: شماتیک مدولاتور پیشنهادی با استفاده از ماده Sb_2S_3-PCM به عنوان لایه پوشش.

بر اساس محاسبات انجام‌شده در مرجع [۱۰]، ضخامت بهینه لایه موجبری SiC برای انتشار مود اصلی TE و TM به‌ترتیب برابر با 0.13μm و 0.29μm گزارش شده است. از آنجا که هدف، پشتیبانی ساختار پیشنهادی از هر دو مود اصلی TE و TM است، ضخامت لایه SiC (d_f) برابر با مقدار بهینه برای مود TM، یعنی 0.29μm، انتخاب گردیده است. لازم به ذکر است که مقادیر ضریب شکست مواد SiO_2 و SiC در طول موج 1.55μm به‌ترتیب برابر با 1.444 و 3.1847 می‌باشند [۱۱, ۱۲]. افزون بر این، مقادیر بخش حقیقی و موهومی ضریب شکست ماده Sb_2S_3 برای دو فاز آمورف و بلوری در طول موج 1.55μm به ترتیب برابر با 2.85 +0j و 3.20 +0.08j می‌باشد. که از مرجع [۱۳] استخراج شده است.

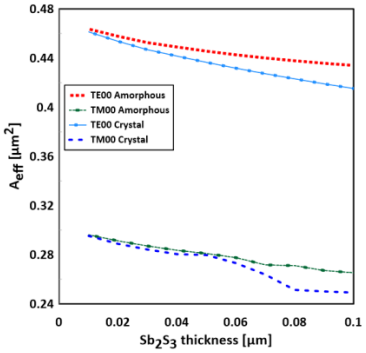
تاثیر ضخامت لایه Sb_2S_3 بر میزان محصورشدن نور

برای ارزیابی میزان محصورشدگی نور در ساختار مدولاتور پیشنهادی، از پارامتر سطح مقطع مؤثر (A_{eff}) استفاده می‌شود. این پارامتر مطابق با رابطه ۱ تعریف و محاسبه می‌شود. کمیت A_{eff} بیانگر سطح مقطع مود در صفحه‌ای عمود بر جهت انتشار می‌باشد. در این رابطه، تابع P(x,y) توزیع توان نوری را در سطح مقطع مدولاتور نشان می‌دهد.

$$A_{eff} = \frac{1}{\max\{P(x,y)\}} \int_A P(x,y)\mathrm{d}A \qquad (۱)$$

پارامتر A_{eff} برای ضخامت 0.01µm تا 0.1µm از لایه Sb_2S_3 با حل عددی معادله مود موجبر به روش المان محدود در COMSOL Multiphysics و ریزسازی مش در نواحی مرزی، به‌دست آمد. سپس با انتگرال‌گیری عددی رابطه ۱ روی کل سطح مقطع دامنه محاسباتی، مقدار A_{eff} برای هر ضخامت به‌صورت جداگانه محاسبه می‌گردد. شکل ۲ تغییرات پارامتر A_{eff} را بر حسب ضخامت لایه پوششی Sb_2S_3، در حالی که پهنای پشته برابر با 2µm ثابت در نظر گرفته شده است، نشان می‌دهد. این شکل میزان محصورشدگی نور در لایه SiC را برای مودهای اصلی TE00 و TM00 در هر دو فاز آمورف و بلوری مقایسه می‌کند. همان‌طور که انتظار می‌رود، هرگونه تغییر در ابعاد ساختار مدولاتور، به‌ویژه تغییر در ضخامت لایه پوششی Sb_2S_3، بر روی سطح مقطع مؤثر مود تأثیر می‌گذارد. از آنجا که سطح مقطع مؤثر معیاری معکوس از میزان تمرکز نور است، افزایش آن نشان‌دهنده کاهش محصورشدگی نور در لایه SiC خواهد بود.

شکل ۲ به وضوح نشان می‌دهد که میزان محصورشدگی نور در لایه SiC برای مود TE00 در فاز آمورف بیشتر از مقدار متناظر آن در فاز بلوری است. علاوه بر این، مشاهده می‌شود که با افزایش ضخامت لایه پوششی Sb_2S_3، به تدریج از میزان نوری که در لایه SiC متمرکز می‌شود کاسته می‌گردد. ما همین روند را برای مود TM00 نیز بررسی کرده‌ایم و به نتایج مشابهی دست یافته‌ایم. به این صورت که در مود TM00 نیز میزان محصورشدگی نور در لایه SiC برای فاز آمورف بیشتر از فاز بلوری است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که در هر دو مود TE و TM، فاز آمورف لایه پوششی Sb_2S_3 منجر به محصورشدگی مؤثرتر نور در ناحیه SiC می‌شود، در حالی که گذار به فاز بلوری این محصورشدگی را تضعیف می‌کند.



شکل ۲: نمودار A_{eff} بر حسب ضخامت لایه پوشش Sb_2S_3. پهنای پشته برابر با 2µm می‌باشد.

انتشار نور در مدولاتور مبتنی بر ماده Sb_2S_3-PCM

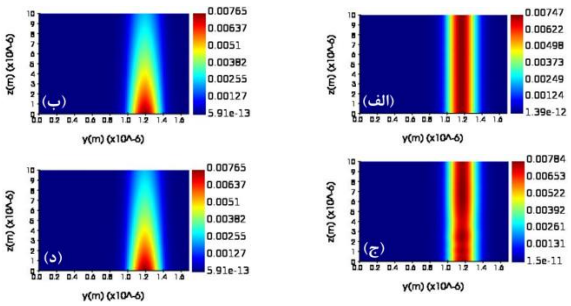
به منظور بررسی رفتار انتشار نور در مدولاتور پیشنهادی مبتنی بر ماده تغییردهنده فاز Sb_2S_3، شبیه‌سازی‌های عددی با استفاده از نرم‌افزار Lumerical FDTD Solutions در طول موج مخابراتی 1.55µm انجام شد. این شبیه‌سازی‌ها برای دو مود اصلی TE و TM و در هر دو فاز آمورف و بلوری، درون مدولاتوری به طول 10µm صورت گرفته است. نتایج در شکل‌های ۳ و ۴ ارائه شده است.

همان‌طور که در شکل ۳ مشاهده می‌شود، تفاوت چشمگیری در الگوی انتشار نور بین دو فاز آمورف و بلوری برای هر دو مود وجود دارد. در هر دو فاز، به دلیل ضریب شکست نسبتاً بالای SiC، میدان نوری عمدتاً درون لایه SiC متمرکز شده است. در مود TE، فاز آمورف جذب ناچیزی دارد، اما در فاز بلوری به دلیل ماهیت نیمه‌فلزی Sb_2S_3، جذب به طور قابل‌توجهی افزایش می‌یابد. برای مود TM نیز روند مشابهی مشاهده می‌گردد.

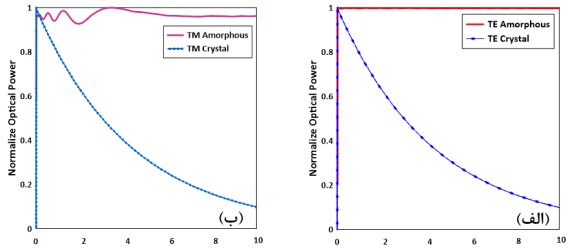
شکل ۴ توزیع توان نوری را به صورت یک‌بعدی در امتداد مرکز لایه SiC نشان می‌دهد. از روی این نمودارها، طول انتشار (فاصله کاهش توان به نصف مقدار اولیه) در فاز بلوری ماده محاسبه شده است. در فاز آمورف، به دلیل عدم جذب قابل‌توجه

ماده Sb_2S_3، منحنی توان نوری برای هر دو مود TE و TM تقریباً ثابت و خطی است؛ بنابراین طول انتشار در این فاز عملاً نامحدود محسوب می‌شود. برای مود TE، طول انتشار در فاز بلوری برابر 0.2989μm با توان نرمال‌شده 0.5 محاسبه گردید. برای مود TM نیز طول انتشار در فاز بلوری معادل 0.2988μm با توان 0.5 به‌دست آمد.

نتایج نشان می‌دهد که مودهای TE و TM عملکرد سوئیچینگ بسیار مشابهی دارند. در نتیجه، ساختار پیشنهادی عملکردی مستقل از پلاریزاسیون دارد؛ بدین معنا که در هر دو مود TE و TM، تغییر فاز ماده از آمورف به بلوری با موفقیت منجر به مدولاسیون الکتروجذبی می‌شود. این استقلال از پلاریزاسیون، یک مزیت کلیدی در فوتونیک محسوب شده و ارزش بالایی برای کاربردهای مخابرات نوری دارد.



شکل ۳: انتشار نور و توزیع توان در دو فاز آمورف و بلوری در ماده Sb_2S_3 در طول موج 1.55μm برای مودهای TE الف) فاز آمورف ب) فاز بلوری و برای مودهای TM ج) فاز آمورف د) فاز بلوری.



شکل ۴: مقایسه مودهای اصلی در طول موج 1.55μm و در دو فاز آمورف و بلوری الف) مود TE ب) مود TM.

نتیجه گیری

در این مطالعه، یک مدولاتور نوری از نوع الکتروجذبی و فعال، با بهره‌گیری از لایه تغییردهنده فاز Sb_2S_3 بر بستر ساختار SiCOI در طول موج 1.55μm، به کمک شبیه‌سازی‌های عددی طراحی و مورد ارزیابی قرار گرفت. یافته‌ها حاکی از آن است که جابه‌جایی فازی Sb_2S_3 میان دو حالت آمورف و بلوری، سبب ایجاد مدولاسیون الکتروجذبی مؤثر در هر دو قطبش TE و TM می‌گردد. در حالت آمورف، به واسطه جذب بسیار ناچیز ماده، انتشار نور با افت ناچیز و عملاً طول انتشار بی‌نهایت همراه است؛ این در حالی است که در حالت بلوری، طول انتشار برای مودهای TE و TM به ترتیب به 0.2989μm و 0.2988μm می‌رسد. نکته حائز اهمیت، ویژگی برجسته استقلال عملکرد از پلاریزاسیون نور در ساختار پیشنهادی می‌باشد؛ قابلیتی که در حوزه فوتونیک از ارزش ویژه‌ای برخوردار است. با در نظر گرفتن اختلاف فاحش طول انتشار بین فاز آمورف (عملاً بی‌نهایت) و فاز بلوری (حدود 0.299μm)، ساختار طراحی‌شده توانمندی بالایی برای کاربرد به عنوان سوئیچ نوری فعال از نوع الکتروجذبی داراست. این مدولاتور ضمن سازگاری با فرآیندهای یکپارچه‌سازی نوری، به دلیل ماهیت مستقل از پلاریزاسیون، راهکاری کارآمد و متمایز برای سامانه‌های مخابرات نوری پیشرفته به شمار می‌رود.

مرجع‌ها

[1] W. T. Huang et al.; "Emerging Modulator Technologies in Silicon Photonics"; *IEEE Nanotechnology Magazine* **19**, No. 3 (2025) 35-45.

[2] K. Aryana et al.; "Optical and Thermal Properties of $Ge_2Sb_2Te_5$, Sb_2Se_3, and Sb_2S_3 for Reconfigurable Photonic Devices"; *Optical Materials Express* **13**, No. 11 (2023) 3277-3286.

[3] D. M. Lukin et al.; "Silicon Carbide Photonics for Quantum Information Processing"; *Nature Photonics* **14**, No. 6 (2020) 330-334.

[4] Q. Zhang, J. Wang, and A. W. Poon; "Silicon Carbide Microring Resonators for Integrated Nonlinear and Quantum Photonics"; *Photonics* **11**, No. 8 (2024) 701.

[5] X. Yi and M. Loncar; "Photonic Integrated Circuits Based on Cubic Silicon Carbide"; *Smart Photonic and Optoelectronic Integrated Circuits*, Vol. 13370, SPIE. (2025) 13-15.

[6] S. Abdollahramezani et al.; "Tunable Nanophotonics Enabled by Chalcogenide Phase-Change Materials"; *Nanophotonics* **9**, No. 5 (2020) 1189-1241.

[7] Z. Yu, C. Lin-ying, and L. Ye-gang; "Nonvolatile Tunable Optical Switches Based on Sb_2S_3 and Sb_2Se_3 Phase Change Materials and Their Properties"; *Journal of Functional Materials and Devices* **28**, No. 2 (2022) 121-126.

[8] F. Bao et al.; "Compact Polarization-Independent Non-Volatile Optical Switches"; Optics Letters 50, No. 19 (2025) 6048-6051.

[9] W. Dong et al.; "Wide Bandgap Phase Change Material Tuned Visible Photonics"; *Advanced Functional Materials* **29**, No. 6 (2019) 1806181.

[10] M. Abbaspour, M. Nikoufard, and M. A. Mahdian; "Optical modulator based on SiC structure using VO_2 phase change material at 2.1μm wavelength"; *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, No. 2 (2024) 124.

[11] J. Kischkat et al.; "Mid-Infrared Optical Properties of Thin Films of Aluminum Oxide, Titanium Dioxide, Silicon [12] Dioxide, Aluminum Nitride, and Silicon Nitride"; *Applied Optics* **51**, No. 28 (2012) 6789-6798.

[12] J. I. Larruquert et al.; "Self-Consistent Optical Constants of SiC Thin Films"; *Journal of the Optical Society of America A* **28**, No. 11 (2012) 2340-2345.

[13] M. Delaney, I. Zeimpekis, D. Lawson, D. W. Hewak, and O. L. Muskens; "A New Family of Ultralow Loss Reversible Phase-Change Materials for Photonic Integrated Circuits: Sb_2S_3 and Sb_2Se_3"; *Advanced Functional Materials* **30**, No. 36 (2020) 2002447.

امکان سنجی ساخت زیست حسگر مبتنی بر بلور فوتونی یک بعدی

فولادی آذر، سجاد[۱]؛ واحدی، علی[۱]؛ طالب زاده، ربابه[۱،۳]؛ غفوری، محمد[۲]؛ فکری اول، صدیقه[۳]

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

[۲] گروه فیزیک، واحد شبستر، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران

[۳] مرکز تحقیقات بیوتکنولوژی ، واحد تبریز ، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران

چکیده

در این مقاله، یک حسگر مبتنی بر بلور فوتونی یک‌بعدی از لایه‌های اکسید روی و پلی آنیلین با لایه نقص مرکزی طراحی و با روش ماتریس انتقال در متلب شبیه‌سازی شد. نمونه‌ها به‌صورت زوج لایه با ٤ تا ٨ دوره ساخته شدند که افزایش تعداد لایه‌ها موجب کاهش نویز شد. نتایج طیفی تشکیل باند ممنوعه فوتونی و رفتار انتخاب‌گر نوری را نشان داد و عملکرد مناسب ساختار به‌عنوان آینه براگ در ناحیه مرئی تأیید شد. در نهایت، قابلیت بالای این ساختار برای کاربرد در حسگرهای زیستی نشان داده شد

واژه های کلیدی: *حسگر زیستی- بلور فوتونی یک بعدی - مدهای نقص و مواد هیبریدی.*

Feasibility study on the fabrication of a one-dimensional photonic crystal-based biosensor

Fouladiazar, Sajjad[1]; Vahedi, Ali[1]; Talebzadeh, robabeh[1,3]; Ghafouri, Mohammad[2]; Fekri Aval, Sedigheh[3]

[1] Department of physics, Ta. C., Islamic Azad University,Tabriz, Iran.
[2] Department of physics, Shab. C., Islamic Azad University,Tabriz, Iran.
[3]Biotechnology Research Center, Ta. C., Islamic Azad University, Tabriz, Iran.

Abstract

In this paper, a one-dimensional photonic crystal sensor based on ZnO and PANI layers with a central defect layer was designed and simulated using the transfer matrix method in MATLAB. The samples were fabricated as layer pairs with 4 to 8 periods, and increasing the number of layers reduced noise. The spectral results showed the formation of a photonic band gap and optical selective behavior, and the proper performance of the structure as a Bragg mirror in the visible region was confirmed. Finally, the high potential of this structure for application in biosensors was demonstrated.

***Keywords**: Biosensor, Photonic crystal, Refractive index, Defect modes, Hybrid materials*

PACS No. *87*

مقدمه

بلورهای فوتونی یک‌بعدی نیز به دلیل ساختار ساده، هزینه کم و حساسیت بالا، گزینه‌ای مناسب برای توسعه زیست حسگرها هستند. در این پژوهش، امکان‌سنجی طراحی و ساخت زیست‌حسگر نوری مبتنی بر بلور فوتونی یک‌بعدی با هدف دستیابی به حساسیت بالا در تشخیص زیستی بررسی شده است [۱]. حسگرهای زیستی مبتنی بر بلور فوتونی یک بعدی با استفاده از ساختارهای متناوب و ایجاد مدهای تشدیدی، تغییرات کوچک

ضریب شکست ناشی از حضور آنالیت را آشکار می‌کنند. ساختار آن‌ها شامل لایه‌های فوتونی، لایه نقص، سطح شناسایی زیستی و سامانه آشکارسازی نوری است و به کارگیری موادی مانند گرافن و بلورمایع می‌تواند عملکرد و حساسیت آن‌ها را بهبود بخشد[۲]. علی و همکاران(۲۰۲٤) به حساسیت بالای این حسگرها در تشخیص بیماری‌ها و ساختارهای هیبریدی گرافن–بلور مایع اشاره کردند[۳]. بشیری و همکاران با استفاده از گرافن و بلورمایع، عملکرد حسگرهای ترا هرتزی را بهبود دادند[٤]. همچنین، الشورباجی و همکاران با بهره‌گیری از بلورهای فوتونی، حساسیت بالایی برای تشخیص سل گزارش کردند [٥]. عبدالغنی و همکاران نیز به بهینه‌سازی ساختار برای شناسایی باکتری‌ها پرداختند [٦]. امروزه مطالعات بکاربردهای بالینی، استفاده از مواد نوین و مدل‌سازی تئوریک برای بهبود حسگرها ادامه دارند[۷]. هدف این پژوهش، طراحی، شبیه‌سازی و امکان‌سنجی ساخت یک بلور فوتونی یک‌بعدی مبتنی بر لایه‌های اکسید روی و پلی‌آنیلین و بررسی ویژگی‌های آن به‌عنوان بستری مناسب برای توسعه زیست‌حسگرهای نوری مبتنی بر تغییر ضریب شکست است.

روش تحقیق

مطابق شکل ۱، حسگر پیشنهادی به صورت بلور فوتونی $Air/(ZnO/PANI)^N/D/(ZnO/PANI)^N/Glass$ در نظر گرفته شده است که در آن N تعداد دوره‌های بلور فوتونی و D نشان‌دهنده لایه نقص است. لایه‌های اکسید روی و پلی‌آنیلین به‌صورت دوره‌ای در دو طرف یک لایه نقص قرار گرفته‌اند. لایه نقص با ضخامت های بهینه به‌عنوان محیط حسگر عمل کرده و تغییرات ضریب شکست نمونه زیستی در این ناحیه موجب جابه‌جایی مد نقص در طیف عبور می‌شود. ضرایب شکست مواد به‌ترتیب برابر با ۱/۳۸ و ۱/۳۱ در نظر گرفته شده‌اند. به‌منظور بررسی عملکرد حسگر، تأثیر پارامترهایی نظیر ضخامت لایه نقص، تعداد دوره‌های بلور فوتونی، زاویه تابش نور و تغییرات ضریب شکست محیط حسگر می تواند مورد مطالعه قرار گیرد. شبیه‌سازی ساختار بر پایه روش ماتریس انتقال (Transfer Matrix Method, TMM) انجام می‌شود. استفاده از اکسید روی به دلیل ضریب شکست بالا، پایداری شیمیایی و زیست‌سازگاری مناسب و همچنین پلی‌آنیلین به دلیل خواص نوری و الکتریکی مطلوب، موجب بهبود ویژگی‌های حسگری ساختار و افزایش حساسیت تغییرات محیطی می‌شود. غلظت آن در محدوده یک تا پنج درصد وزنی تنظیم و پیش از لایه‌نشانی، از فیلتر مناسب برای حذف ذرات درشت استفاده گردید[5]. حساسیت به عنوان اصلی ترین مشخصه ارزیابی حسگر به صورت میزان جابجایی طول موج تشدید نسبت به میزان تغییر ضریب شکست ماده محاسبه می شود [۳]:

$$S = \frac{\partial \lambda}{\partial n}$$

جابجایی طول موج تشدید با اعمال روش ماتریس انتقال برای کل ساختار محاسبه شد. اگر ماتریس انتقال کل به صورت[۳]:

$$M = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} = \quad (۱)$$

$$M_L = \begin{bmatrix} \cos(k_{lz}\, d_l) & jq_l^{-1}\sin(k_{lz}\, d_l) \\ jq\, \sin(k_{lz}\, d_l) & \cos(k_{lz}\, d_l) \end{bmatrix} \quad (۲)$$

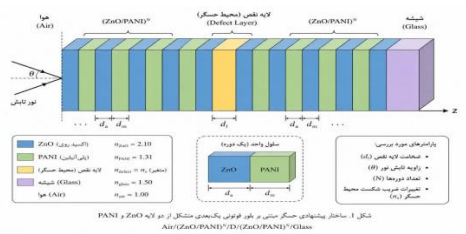
D و P به ترتیب ماتریس انتقال و انتشار لایه M_l ، $q_k = (\frac{\mu_k}{\varepsilon_k})^{\frac{1}{2}}$ و $\beta_k = \frac{2\pi n_k}{\lambda} cos\theta_k(z_k - z_{k-1})$ هستند، عبور و بازتاب نور را می توان بر اساس عناصر ماتریس به دست آورد:

$$T = \left|2P/((M_{11} + M_{12}P)P + M_{21} + M_{22P})\right|^2 \quad (3)$$

$$P' = n\cos(\theta) \quad (٤)$$

که عبور (T) و انعکاس (R) بصورت زیرنوشته می شوند:

$$T = |t|^2 = \left|\frac{1^2}{M_{11}}\right|, \qquad R = |r|^2 = \left|\frac{M_{21}^2}{M_{22}}\right| \quad (٥)$$

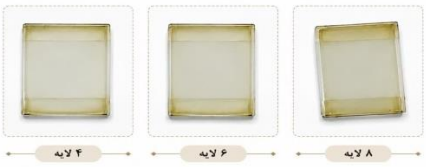


شکل ۱. ساختار پیشنهادی حسگر حیاتی بر بلور فوتونی یک‌بعدی متشکل از دو لایه ZnO و PANI به صورت $Air/(ZnO/PANI)^N/D/(ZnO/PANI)^N/Glass$

شکل ۱ : ساختار زیست حسگر بلور فوتونی یک بعدی پیشنهادی.

برای ساخت زیست‌حسگر بلور فوتونی یک‌بعدی با استفاده از پلی‌آنیلین و اکسید روی مراحل مختلفی از جمله آماده‌سازی

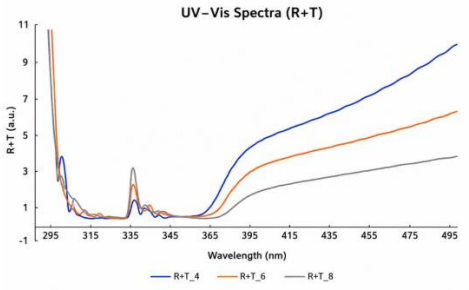
محلول پلی‌آنیلین، تهیه سوسپانسیون اکسید روی، آماده‌سازی زیر لایه، لایه‌نشانی به روش لایه نشانی پوششی–چرخشی، تثبیت لایه‌ها و ارزیابی مورفولوژیکی و نوری حسگر انجام شده است. طیف جذب نمونه‌ها با استفاده از دستگاه طیف‌سنج UV–Vis در محدوده طول موج ۳۰۰ تا ۸۰۰ نانومتر و در تابش عمود بر سطح نمونه در دمای محیط و با استفاده از زیرلایه شیشه‌ای انجام گرفت. همچنین به موضوعاتی مانند یکنواختی، کنترل ضخامت و کیفیت لایه‌ها توجه شد. برای آماده‌سازی محلول پلی‌آنیلین، ابتدا این ماده از فیلتر عبور داده شد تا ذرات درشت حذف شوند. سپس حلال ان– متیل–۲– پیرولیدون (N-Methyl-2-pyrrolidone, NMP) به آن افزوده شد تا سوسپانسیونی نسبتاً یکنواخت به دست آید. در تهیه سوسپانسیون اکسید روی، این ماده در حلال ایزوپروپانول یا استون پراکنده شد و با استفاده از همزن مغناطیسی یا التراسونیک، محلولی یکنواخت ایجاد گردید. زیرلایه شسته شده کاملاً تمیز برای لایه‌نشانی، روی دستگاه لایه نشانی پوششی– چرخشی قرار داده شد و با استفاده از سیستم خلأ تثبیت گردید. سپس مقدار مشخصی از محلول پلی‌آنیلین روی سطح ریخته شد و با اعمال سرعت چرخش کنترل شده، یک لایه یکنواخت ایجاد شد. پس از آن، لایه اکسید روی نیز به همین روش بر سطح اعمال شد تا ساختار چند لایه تشکیل گردد. برای تثبیت لایه‌ها، نمونه‌ها در بازه دمایی ملایم حرارت داده شدند. سپس نمونه‌ها (شکل۲) در کوره آزمایشگاهی در دمای بالا و به مدت مشخص قرار گرفتند تا حلال‌های باقی‌مانده حذف شده، یکنواختی ساختار بهبود یابد و خواص اپتیکی تثبیت شود.



شکل۲: نمونه‌های زیست‌حسگر با تعداد لایه های متفاوت.

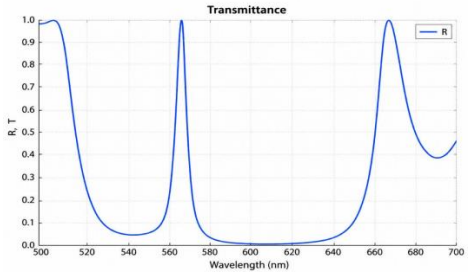
بحث و نتایج

ابتدا لایه اکسید روی و سپس پلی آنیلین لایه گذاری شدند. در اولین سری از ٤ زوج لایه تا ٨ زوج و در مرحله بعدی فقط زوج لایه های ٤ و ٦ و ٨ تهیه شدند. اختلاف سری اول و دوم در ضخامت و یا به عبارتی در سرعت لایه نشانی بود مطابق شکل ۳ با افزایش تعداد لایه، نویزها کاهش یافته اند. بر اساس شکل ۳، یک پیک جذبی مشخص در حوالی ۳٤٥ نانومتر مشاهده شد که بیشترین شدت آن مربوط به نمونه ٨ زوج لایه بود. پس از این ناحیه، جذب نمونه‌ها کاهش یافته و در محدوده ۳۸۰–۳٦۰ نانومتر به حداقل رسید. با افزایش طول موج به بیش از ۳۸۰ نانومتر، روند افزایشی جذب مشاهده گردید. در این بخش نمونه ٤ لایه بیشترین جذب و نمونه ٨ لایه کمترین مقدار جذب را داشت. این نتایج نشان می‌دهد که تغییر ضخامت و تعداد موجب تغییر رفتار اپتیکی نمونه‌ها و تفاوت در انتقال‌های الکترونی و برهم‌کنش نور- ماده شده است. که این پاسخ نشان‌دهنده افزایش کیفیت لایه‌نشانی و کاهش پراکندگی نور در ساختار چندلایه است.



شکل۳ : نمودار طیف جذب نوری.

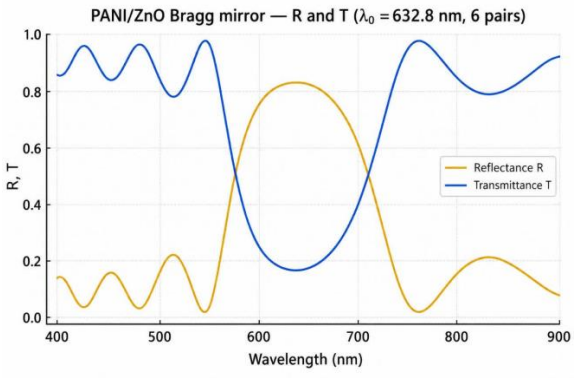
شکل ٤ طیف عبور شبیه‌سازی‌شده ساختار متشکل از ٦ زوج لایه متناوب به همراه یک لایه نقص (نمونه زیستی) را نشان می‌دهد.



شکل٤: طیف عبور ساختار فوتونی متشکل از ٦ زوج لایه با لایه نقص مرکزی در طول موج طراحی ٦۳۲/۸ نانومتر.

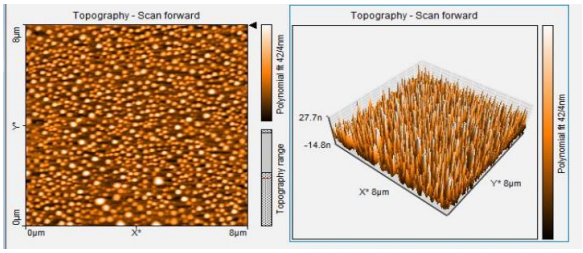
وجود لایه نقص موجب ایجاد یک مد تشدید در داخل باند ممنوعه فوتونی شده و عبور انتخابی نور در این ناحیه را امکان‌پذیر می‌سازد. تفاوت‌های مشاهده‌شده در موقعیت و شدت قله‌ها ناشی از شرایط واقعی ساخت، با شبیه‌سازی است. با وجود این

اختلافات، هر دو نتیجه تشکیل باند ممنوعه فوتونی ساختار را تأیید می‌کنند. وجود دو قله مشخص در حدود ۵۷۰ نانومتر و ۶۷۰ نانومتر بیانگر آن است که ماده در این نواحی طیفی، بیشترین عبور را دارد. در مقابل، کاهش شدید مقدار عبور بین این دو طول موج نشان می‌دهد که ماده در این بازه، جذب قابل توجهی دارد و نور را کمتر عبور می‌دهد. بنابراین ساختار مورد بررسی دارای پاسخ طیفی قابل‌تنظیم و هدفمند است و می‌تواند در کاربردهایی که نیازمند انتخاب‌گری طول‌موجی هستند، عملکرد مطلوبی ارائه دهد. این ویژگی‌ها اهمیت ماده را در طراحی سیستم‌های اپتیکی پیشرفته برجسته می‌کند. شکل ۵ طیف‌های بازتاب و عبور ساختارمتشکل از شش جفت لایه متناوب را در طول موج طراحی ۶۳۲/۸ نانومتر نشان می‌دهد. نتایج بیانگر تشکیل یک باند ممنوعه فوتونی مشخص در محدوده تقریبی ۵۸۰ تا ۷۲۰ نانومتر است.



شکل۵ : نمودار طیف بازتاب و عبور

تشکیل باند ممنوعه فوتونی در حوالی طول موج ۶۳۲/۸ نانومتر ناشی از بازتاب براگ حاصل از تناوب منظم لایه‌های پلی‌آنیلین و اکسید روی است. بیشینه بازتاب حدود ۸۳ درصد نشان می‌دهد که شش جفت لایه برای ایجاد یک زیست حسگر کارآمد کافی است. نتایج تجربی و شبیه‌سازی تطابق کیفی مناسبی با یکدیگر دارند. شبیه‌سازی تشکیل باند ممنوعه فوتونی و رفتار انتخاب‌گر طیفی ساختار را پیش‌بینی کرد و نتایج اندازه‌گیری طیف جذب نیز نشان داد که با افزایش تعداد زوج‌لایه‌ها، یکنواختی ساختار بهبود یافته و نویز طیف کاهش می‌یابد. در ادامه، مطابق شکل ۶ بررسی مورفولوژی سطح با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی (Atomic Force Microscopy, AFM) انجام شد. این تحلیل با هدف بررسی زبری سطح، یکنواختی لایه‌ها، ساختار نانو مقیاس و ارزیابی کیفیت تشکیل ساختار فوتونی انجام گرفت و پارامترهای کمی سطح استخراج شد. همچنین میزان یکنواختی، تکرارپذیری و مناسب بودن سطح برای برهم‌کنش‌های زیستی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان داد که تغییرات ارتفاع در محدوده قابل قبول بوده و توزیع یکنواخت برجستگی‌ها، بیانگر تشکیل مناسب لایه‌های اکسید روی و پلی آنیلین است. همچنین، میانگین اندازه ذرات در مقیاس نانومتری قرار داشته که برای تشکیل ساختار بلور فوتونی مناسب ارزیابی شد.



شکل۶ : توپوگرافی لایه‌های اکسید روی و پلی آنیلین با دستگاه AFM

نتیجه گیری

نتایج تجربی و شبیه سازی تشکیل باند ممنوعه فوتونی و رفتار انتخاب‌گر نوری را نشان دادند و عملکرد مناسب ساختار به‌عنوان زیست حسگر در ناحیه مرئی تأیید شد. این ساختار از مزیت‌هایی مانند ساخت ساده، هزینه کمتر و زیست‌سازگاری مناسب برخوردار است. ساختار پیشنهادی می‌تواند به‌عنوان بستری مناسب برای توسعه زیست‌حسگرهای نوری مبتنی بر تغییر ضریب شکست مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع‌ها

[1] J. Bashiri, B. Rezaei, J. Barvestani *et al.*, “High-performance terahertz biosensor utilizing a hybrid one-dimensional photonic crystal with liquid crystal and graphene components,” Scientific Reports, vol. 15, 5784, Feb. 2025.
[2] 2D Gallium Sulfide-Based 1D Photonic Crystal Biosensor for Glucose Concentration Detection, PubMed, 2024.
[3] A. Saber et al., “Blood component detection utilizing photonic crystal biosensors,” Results in Optics, vol. 16, 2024.
[4] J. Bashiri, B. Rezaei, J. Barvestani et al., “High-performance terahertz biosensor utilizing a hybrid one-dimensional photonic crystal with liquid crystal and graphene components,” Scientific Reports, vol. 15, 2025.
[5] M. Elshorbagy et al., “Topological one-dimensional photonic crystal-based nanosensor for tuberculosis detection,” 2024.
[6] A. Abdelghany et al., “Ternary one-dimensional photonic crystal biosensors for efficient bacteria detection,” Optical Materials, 2025.
[7] N. A. Vanyushkin et al., “Sensitivity analysis of defected one-dimensional photonic crystal refractive index sensors,” arXiv, 2024.

اثر همدوسی فضایی بر جابه‌جایی گوس- هانچن در بلور فوتونی دارای تشدید فانو با لایه غیرخطی ENZ

باوقار، مهرداد[۱]؛ طالب زاده، ربابه[۲،۳]

[۱] مجتمع پژوهشی شمالغرب کشور، سازمان انرژی اتمی ایران، بناب، ایران
[۲] گروه فیزیک، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران
[۳] مرکز تحقیقات نانوفناوری صنعتی، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران

چکیده

در این مقاله، تأثیر همدوسی فضایی باریکه نور ناهمدوس از نوع شل-گاوسی بر جابه‌جایی گوس-هانچن در یک بلور فوتونی یک‌بعدی با ساختار نامتقارن حاوی لایه نقص از جنس اکسید ایندیم-قلع (ITO) در ناحیه گذردهی نزدیک به صفر (Epsilon-Near-Zero) با تلفیق روش ماتریس انتقال و نظریه همدوسی متقابل مورد بررسی قرار گرفته است. شکست تقارن ساختاری با انتخاب تعداد تناوب‌های نابرابر، منجر به برهمکنش تداخلی یک حالت گسسته مد نقص با طیف پیوسته حالات بلوری شده و شکل‌گیری تشدید فانو را در طول موج ۱۵۷۴ نانومتر به همراه دارد. لایه نقص ITO در محدوده ENZ، دارای ضریب شکست غیرخطی کر بوده و پاسخ آن به شدت نور وابسته است. نتایج نشان می‌دهد که افزایش طول همدوسی فضایی به دلیل کاهش پهنای طیف زاویه‌ای پرتو فرودی موجب افزایش شدت مؤثر درون لایه نقص می‌گردد. این افزایش شدت، از طریق اثر کر نوری مرتبه سوم باعث تغییر در ضریب شکست لایه نقص شده و مستقیماً شرط تشدید فاز در حفره فوتونی را تحت تاثیر قرار می‌دهد. تحلیل پروفایل شدت در صفحه خروجی بلور، جابه‌جایی واضح قله شدت را با افزایش همدوسی تأیید می‌کند. این نتایج حاکی از آن است که کنترل همدوسی فضایی با ترکیب پدیده فانو در ساختار بلور فوتونی، مسیری نوین برای طراحی ادوات تمام نوری با قابلیت تنظیم فعال، از جمله حسگرهای فوق‌حساس، سوئیچ‌های نوری با پاسخ فوق‌سریع را فراهم می‌آورد.

واژه های کلیدی: *همدوسی فضایی، جابجایی گاوس-هانچن، تشدید فانو*

Effect of Spatial Coherence on Goos–Hänchen Shift in a Photonic Crystal Featuring Fano Resonance and an ENZ Nonlinear Layer

Bavaghar, Mehrdad[1]; Talebzadeh, Robabeh[2,3]

[1] North West Research Complex, Atomic Energy Organization of Iran, Bonab, Iran
[2] Department of Physics, Ta. C., Islamic Azad University, Tabriz, Iran
[3] Industrial Nanotechnology Research Center, Ta. C., Islamic Azad University, Tabriz, Iran

Abstract

In this paper, we investigate the effect of spatial coherence of a partially coherent Gaussian-Schell beam on the Goos-Hänchen shift. The study uses a one-dimensional photonic crystal with an asymmetric structure containing an ITO defect layer in the ENZ range. We employ the transfer matrix method combined with mutual coherence theory. Structural asymmetry, achieved by unequal periods, induces Fano resonance at 1574 nm via interaction between a discrete defect mode and the continuous photonic spectrum. The ITO defect layer has a Kerr-type nonlinear refractive index with an intensity-dependent response. Our results show that increasing the spatial coherence length reduces the angular spectral width, thereby enhancing the effective intensity inside the defect layer. This intensity enhancement alters the refractive index through the third-order Kerr effect and directly modifies the phase resonance condition. Analysis of the output intensity profile confirms a lateral shift of the intensity peak with increasing coherence. We conclude that controlling spatial coherence combined with Fano resonance offers a novel pathway for actively tunable all-optical devices, including ultra-sensitive sensors and fast optical switches.

***Keywords**: Spatial coherence, Goos-Hänchen shif, Fano resonance*
PACS No. 32, 42, 78

مقدمه

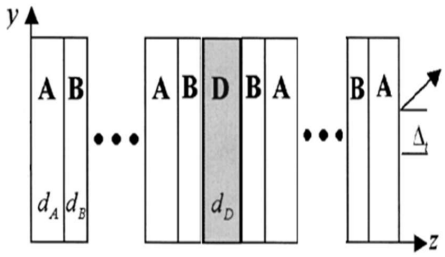
پدیده‌های نوری غیرخطی در دهه‌های اخیر به دلیل کاربردهای گسترده در پردازش تمام‌نوری داده‌ها و اطلاعات کوانتومی، توجه بسیاری از پژوهشگران را به خود جلب کرده است. با این حال، مواد معمولی تحت تابش شدید نور همدوس، پاسخ غیرخطی ضعیفی از خود نشان می‌دهند. در این میان، مواد با گذردهی الکتریکی نزدیک به صفر (ENZ) به دلیل توانایی فوق‌العاده در تقویت اثرات غیرخطی نوری، به عنوان بستری نوین برای نسل جدید ادوات فوتونیکی مطرح شده است. از جمله این مواد، اکسید ایندیم-قلع (ITO) در ناحیه طیفی است، که قسمت حقیقی ثابت دی‌الکتریک آن تقریباً به صفر می‌رسد، که ITO در این ناحیه، ضریب شکست غیرخطی بزرگی از مرتبه ($n_2 \approx 10^{-11}\ m^2/W$) را از خود نشان می‌دهد، که چندین میلیون برابر بزرگتر از ضریب شکست غیرخطی شیشه معمولی است، این تغییرات بزرگ ضریب شکست همراه با زمان بازیابی در حد پیکوثانیه، ITO را به گزینه‌ای ایده‌آل برای کاربردهای سوئیچینگ و مدولاسیون تمام نوری تبدیل کرده است[۱-۳].

از سوی دیگر، پدیده گوس-هانچن که به جابه‌جایی جانبی باریکه نوری در بازتاب کلی از سطح مشترک دو محیط گفته می‌شود، از دیرباز موضوع تحقیقات گسترده بوده‌است[۴-۵]. با ظهور بلورهای فوتونی به عنوان ساختارهای تناوبی با قابلیت کنترل انتشار امواج الکترومغناطیسی، امکان افزایش و کنترل این جابه‌جایی با استفاده از لایه‌های نقص و ایجاد تشدیدهای تیز فراهم شده‌است. در این میان، تشدید فانو (Fano resonance) که ناشی از برهمکنش تداخلی میان یک حالت گسسته (مد نقص) و یک طیف پیوسته از حالت‌های بلوری است، به دلیل پروفایل نامتقارن و شیب فاز بسیار تند در نزدیکی طول موج تشدید، نقشی کلیدی در افزایش حساسیت سیستم‌های نوری ایفا می‌کند[۶-۷]. در بلورهای فوتونی یک‌بعدی، شکست تقارن ساختاری (مانند استفاده از تعداد تناوب‌های نابرابر یا افزودن لایه کلاهک دی‌الکتریک) می‌تواند منجر به ظهور تشدید فانو شود.

با این حال، بیشتر مطالعات انجام‌شده در زمینه جابه‌جایی گوس-هانچن در بلورهای فوتونی، بر پایه نور کاملاً همدوس بوده و تأثیر همدوسی فضایی، نادیده گرفته شده‌است. در کاربردهای عملی، منابع نوری واقعی دارای درجات مختلفی از همدوسی فضایی و زمانی هستند. از این رو، مطالعه پدیده‌های نوری در شرایط ناهمدوس از اهمیت ویژه‌ای برخوردار بوده و یکی از مدل‌های استاندارد برای توصیف نورهای ناهمدوس، باریکه شل- گاوسی است، که با معرفی طول همدوسی فضایی (σ_L) به عنوان پارامتر کلیدی، می توان به توصیف همدوسی مکانی و تأثیر آن بر رفتار انتشار پرداخت[۸-۹]. در این مقاله، تأثیر تغییرات طول همدوسی فضایی بر پاسخ غیرخطی ITOدر جابه‌جایی گوس-هانچن بلور فوتونی یک‌بعدی به صورت نظری بررسی می‌شود.

ساختار و مدل نظری

ساختار بلور فوتونی مورد بررسی به صورت یک بعدی و نامتقارن $(AB)^3D(BA)^8$ طراحی شده است. لایه‌های A و B به ترتیب از جنس دی‌اکسید سیلیسیم (SiO_2) با ضریب شکست $n_A = 1.46$ و سیلیکون (Si) با ضریب شکست $n_B = 3.5$ تشکیل شده‌اند. لایه نقص D از جنس اکسید ایندیم- قلع با ضریب شکست مختلط $n_D = 0.1 + 0.05i$ و نیز ضخامت d_D=50 nm در نظر گرفته شده‌است. ضخامت لایه‌ها با شرط یک چهارم طول موج $\lambda_0/4n\cos(\theta_0)$ برای زاویه تابش $\theta_0 = 10°$ در طول موج متناظر با قله تشدید فانو($\lambda_0 = 1574$ nm) محاسبه و در شکل۱ نشان داده شده است.



شکل۱: ساختار بلورفوتونی یک‌بعدی با لایه نقص

فرض می‌کنیم یک باریکه گاوسی همدوس با قطبش TE از هوا با زاویه تابشθ_0 نسبت به بلور فوتونی یک‌بعدی در صفحه ورودی z=0 برخورد می‌کند، انتشار نور فرودی در بلور فوتونی از معادلات ماکسول پیروی کرده و ماتریس انتقال برای هر لایه‌ی بلور فوتونی

با ضریب شکست n_j و ضخامت d_j برای دو موقعیت z و $z+\Delta z$ در لایه j ام به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$M_j=\begin{bmatrix}\cos(k_z^j\Delta z) & i\frac{1}{q_j}\sin(k_z^j\Delta z)\\ iq_j\sin(k_z^j\Delta z) & \cos(k_z^j\Delta z)\end{bmatrix} \quad (۱)$$

که در آن $k_z^j=(n_j^2k^2-k_y^2)^{1/2}$ با شرط $k^2\succ k_y^2/n_j^2$ و در غیر این صورت $k_z^j=i(k_y^2-n_j^2k^2)^{1/2}$ نشان داده خواهد شد. در این رابطه $q_j=k_z^j/k$ و k_y مولفه عرضی بردار موج فرودی می باشد، در نهایت با استفاده از روش ماتریس انتقال، ضرایب بازتاب و عبور را می‌توان بدست آورد.

$$r(k_y)=\frac{[q_0X_{22}(k_y)-q_sX_{11}(k_y)]-[q_0q_sX_{12}(k_y)-X_{21}(k_y)]}{[q_0X_{22}(k_y)+q_sX_{11}(k_y)]-[q_0q_sX_{12}(k_y)+X_{21}(k_y)]}$$
$$t(k_y)=\frac{2q_0}{[q_0X_{22}(k_y)+q_sX_{11}(k_y)]-[q_0q_sX_{12}(k_y)+X_{21}(k_y)]} \quad (۲)$$

که در آن $q_0=q_s=(k^2-k_y^2)^{1/2}$ می‌باشد. همچنین می‌توان با استفاده از تبدیل فوریه و با معلوم بودن میدان فرودی باریکه و درایه‌های ماتریس انتقال کل، $E_i(0,k_y)=(\omega_0/\sqrt{2})\exp[-\omega_0^2(k_y-k_{y0})^2/4]$ توزیع میدان را در هر نقطه از بلور فوتونی با مولفه عرضی موج اولیه $k_{y0}=k\sin(\theta_0)$ به صورت زیر بدست آورد:

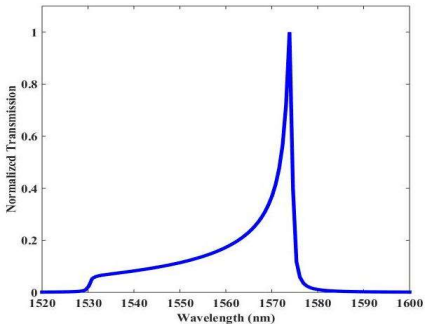
$$E(z,y)=\int E(z,k_y)\exp(-ik_yy)dk_y=$$
$$\int E_i(0,k_y)[1+r(k_y)]X_{11}(z,k_y)\exp(-ik_yy)dk_y$$
$$+\int E_i(0,k_y)[1-r(k_y)]X_{12}(z,k_y)\}\exp(-ik_yy)dk_y \quad (۳)$$

البته رابطه ۳، برای نور همدوس می باشد.

بحث و نتایج

اگر نور فرودی جزئی همدوس از نوع شل- گاوسی فرض شود، می‌توانیم تابع همدوسی متقابل اولیه را در صفحه ورودی $(z=0)$ در دو نقطه دلخواه ازفضا طبق رابطه ٤ بیان کنیم.

$$\Gamma(y_1,0;y_2,0)=\langle E^*(y_1,0)E(y_2,0)=$$
$$\exp(-\frac{y_1^2}{2\omega_0})\exp(-\frac{y_2^2}{2\omega_0})\exp(-\frac{(y_1-y_2)^2}{4\delta_L^4})\exp(-ik_{y0}(y_1-y_2)) \quad (٤)$$



شکل ۲: تشدید فانو در طیف عبوری بلور فوتونی یک‌بعدی نامتقارن

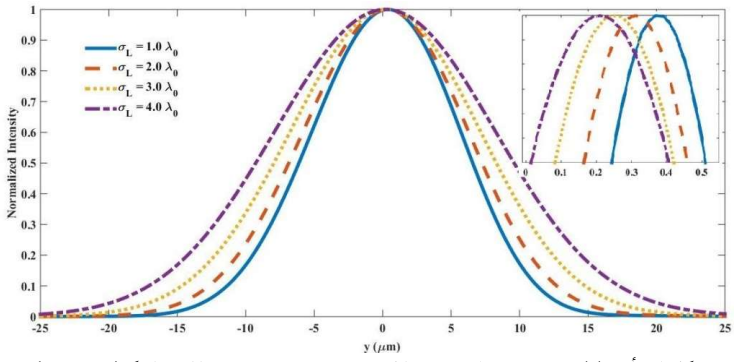
در رابطه تابع همدوسی ω_0، پهنای کمر باریکه و σ_L ضریب همدوسی نور فرودی است، که قدرت همدوسی بین دو نقطه مختلف فضایی از باریکه را نشان می‌دهد. بنابراین با بهره گیری از نرم افزار متلب، طیف عبوری ساختار را مطابق شکل ۲ رسم نمودیم و به طول موج تشدید فانو $\lambda_0=1574nm$ با پهنای یک نانومتری دست یافتیم.

با اعمال تبدیل فوریه معکوس و جابجایی به حوزه فرکانس فضایی، می‌توان چگالی طیفی متقاطع اولیه را بصورت رابطه ٥ بدست آورد:

$$W(0,k_{y1};0,k_{y2})=\iint\Gamma(y_1,0;y_2,0)\exp[i(k_{y1}y_1-k_{y2}y_2)]dy_1dy_2 \quad (٥)$$
$$=\frac{\omega_0^2}{\sqrt{1+\frac{\omega_0^2}{\delta_L^2}}}\exp\{-\frac{(k_{y1}-k_{y0})^2+(k_{y2}-k_{y0})^2}{2(\delta_L^2+\omega_0^2)/\delta_L^2\omega_0^2}\}\times$$
$$\exp\{-\frac{(k_{y1}-k_{y2})^2}{4(\delta_L^2+\omega_0^2)/\omega_0^4}\}$$

که در این رابطه، پهنای مؤثر طیف زاویه‌ای فضایی متناسب با، $\Delta k_y=(\delta_L^{-2}+\omega_0^{-2})^{1/2}$ است. با ثابت بودن کمر باریکه ω_0، می‌توان دریافت، کاهش ضریب همدوسی $(\delta_L/\omega_0\to 0)$، منجر به افزایش پهنای طیف زاویه‌ای مؤثر شده و باریکه را کاملاً به حالت ناهمدوس نزدیک می‌کند، نیز با افزایش ضریب همدوسی $(\delta_L/\omega_0\to\infty)$ پهنای طیف زاویه‌ای مؤثر کاهش یافته و باریکه به سمت همدوسی کامل گرایش می‌یابد. در نهایت می‌توان محدوده این نسبت را برای هر باریکه واقعی بین صفر و بی‌نهایت در نظر گرفت. شکل ۳، توزیع شدت میدان در صفحه خروجی بلور فوتونی را با تبدیل فوریه معکوس دو بعدی بر روی چگالی طیفی متقاطع میدان‌های عبوری $W_{out}(k_{y1},k_{y2})$ و انتگرال‌گیری نسبت به مؤلفه‌های زاویه‌ای فضایی

(k_{y1}, k_{y2}) نشان می‌دهد. همانطورکه مشاهده می‌شود، با افزایش طول همدوسی و موضعی شدن قوی‌تر میدان عبوری، قله شدت جابجا می‌شود. این جابه‌جایی عرضی، وقوع پدیده گوس- هانچن را تأیید کرده و وابستگی آن به طول همدوسی فضایی را نشان می‌دهد.



شکل ۳: تأثیر طول همدوسی فضایی بر پروفایل شدت در صفحه خروجی با کمر باریکه($\omega_0 = 5\lambda_0$)

نتیجه گیری

در این مقاله با شکست تقارن ساختاری و ایجاد تشدید فانو در طول موج ۱۵۷٤ نانومتر توانستیم، تأثیر همدوسی فضایی باریکه شل-گاوسی را بر جابه‌جایی گوس- هانچن در بلور فوتونی یک‌بعدی نامتقارن با لایه نقص بررسی کنیم. نتایج نشان داد که افزایش طول همدوسی فضایی به دلیل کاهش پهنای طیف زاویه‌ای، شدت مؤثر درون لایه نقص را تحت تأثیر قرار داده و جابه‌جایی گوس- هانچن را از حدود صفر به حدود یک میکرومتر افزایش می‌دهد.

مرجع‌ها

[۱] M. Z. Alam, I. De Leon, and R. W. Boyd; "Large optical nonlinearity of indium tin oxide in its epsilon-near-zero region"; *Science* **352,** No. 6287 (2016) 795–797.
[۲] Y. Tamashevich, T. Shubitidze, L. Dal Negro, and M. Ornigotti; "Field theory description of the non-perturbative optical nonlinearity of epsilon-near-zero media"; *APL Photonics* **9**, No 1 (2024).
[۳] T. Liu, T. Yan, R. Hong, C. Tao, and D. Zhang; "Tunability of Epsilon-Near-Zero and Nonlinear Optical in ITO Transparent Conductive Films"; *Acta Optica Sinica* **3**, No. 3 (2026).
[٤] Li-Gang Wang and Shi-Yao Zhu;"Giant lateral shift of a light beam at the defect mode in one-dimensional photonic crystals"; *Optics Letters* **31**, No. 1 (2006) 101-103.
[٥] Li-Qin Wang, Li-Gang Wang, Shi-Yao Zhu and M Suhail Zubairy; "The influence of spatial coherence on the Goos–Hanchen shift at total internal reflection"; *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **41**, (2008) 055401.
[٦] A. H. Aly, D. Mohamed, H. A. Elsayed, and A. Mehaney; "Fano Resonance by Means of the One-Dimensional Superconductor Photonic Crystals"; *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **31**, (2018) 3827-3833.
[۷] Wenzhe. He, Fei. Wang, …; "Nonlinearly Tunable Fano Resonance in One-Dimensional Light Tunneling Heterostructure"; *Photonics* **13**, No. 1 (2026).
[۸] L. G. Wang, N. H. Liu, Q. Lin, and S. Y. Zhu; "Propagation of coherent and partially coherent pulses through one-dimensional photonic crystals"; *Physical Review E* **70**, No. 1 (2004) 016601.
[۹] L. Mandel and E. Wolf; "*Optical Coherence and Quantum Optics*"; Cambridge University Press. (1995) .

تولید رنگ ساختاری با به‌کارگیری متاسطح‌های دی‌الکتریک سلیکون نیترید

مدرس ، محمدحسین[۱] ؛ علیان‌نژادی ، مریم[۱*]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه سمنان ، سمنان

چکیده

رنگ ساختاری یکی از جذاب‌ترین کاربردهای حوزه نانوفوتونیک است که در آن از برهم‌کنش نور با نانوساختارهای زیرطول موجی، برای ایجاد رنگ‌هایی زنده و پایدار بهره‌برداری می‌شود. استفاده از متاسطح‌های دی‌الکتریک برای ایجاد رنگ ساختاری، که بر پایه تشدید می کار می‌کنند، دارای مزایایی چون اتلاف کم‌تر و ایجاد رنگ‌های نسبتا تک فام با بازده بالا می‌باشد. در این پژوهش، رنگ ساختاری ناشی از متاسطح‌هایی با ساختار مکعب‌مستطیلی تناوبی از جنس سیلیکون نیترید مورد بررسی قرار می‌گیرد. همچنین، تاثیر قطبش نور فرودی بر طیف بازتابی نانوساختار با روش تفاضل محدود در حوزه زمان مورد ارزیابی قرار می‌گیرد.

واژه‌های کلیدی: *رنگ ساختاری، متاسطح‌های دی‌الکتریک، تشدید می، پراکندگی، قطبش*

Generation of Structural Color Using Silicon Nitride Dielectric Metasurfaces

Modarres, Mohammadhossein[1]; Aliannezhadi, Maryam[1]*

[1] Faculty of Physics, Semnan University, PO Box:35195-363, Semnan.Iran

Abstract

Structural color is one of the most fascinating applications of nanophotonics, in which the interaction of light with subwavelength nanostructures is exploited to generate vivid and durable colors. The use of dielectric metasurfaces based on Mie resonances for structural color generation offers advantages such as lower optical losses and the production of relatively monochromatic colors with high efficiency. In this study, the structural color produced by periodic silicon nitride metasurfaces with rectangular cuboid nanostructures is investigated. In addition, the effect of the polarization of the incident light on the reflection spectrum of the nanostructure is evaluated using the finite-difference time-domain (FDTD) method.

***Keywords**: Dielectric metasurface, Mie resonances, Polarization, Scattering, Structural color*

PACS No. 42

مقدمه

رنگ‌های ساختاری، که از برهم‌کنش نور با نانوساختارهای زیرطول‌موجی ناشی می‌شوند، جایگزینی مناسب برای رنگدانه‌های شیمیایی رایج هستند. مزایای این رنگ‌ها دوام بالا، سازگاری با محیط زیست و ایجاد تصاویری با وضوح فوق‌العاده بالا، حتی فراتر از حد پراش، است. متاسطح‌ها یا همان آرایه‌های دوبعدی ساخته‌شده از تشدیدگرهای نانومقیاس مهندسی‌شده، می‌توانند به عنوان بستری مناسب برای رنگ ساختاری مورد بهره‌برداری قرار گیرند. متاسطح‌های تمام‌دی‌الکتریک در این گروه به دلیل اتلاف نوری کم و تشدید همزمان چندقطبی‌های الکتریکی و مغناطیسی می توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند و بهره‌گیری از آنها امکان کنترل کارآمد طیف‌های پراکندگی و در نتیجه تولید رنگ‌های زنده را فراهم می‌کند [۱].

تشدید می اساس ایجاد رنگ‌های ساختاری در متاسطح‌های دی‌الکتریک

است. نانوساختارهای دی‌الکتریک با ضریب شکست بالا، مانند سیلیکون (Si) یا تیتانیوم دی‌اکسید (TiO_2)، را می‌توان به گونه‌ای طراحی کرد که چندقطبی‌های الکتریکی و مغناطیسی را برانگیخته کنند. برهم‌کنش این چندقطبی‌ها منجر به پدیده‌هایی مانند اثر کرکر می‌شود؛ که با تنظیم تداخل بین پاسخ‌های الکتریکی و مغناطیسی می‌توان به پراکندگی نور را در جهت دلخواه کنترل کرد و در نتیجه خلوص و روشنایی رنگ را بهبود داد [۲]. با این وجود، دستیابی همزمان به طیف رنگی گسترده، اشباع بالا، روشنایی بالا و وضوح فضایی بالا با چالش‌هایی همراه است؛ از طرفی، این ویژگی‌ها برای کاربردهای عملی مانند نمایشگرهای پیشرفته، رمزنگاری نوری و ضدجعل ضروری هستند [۳]. بنابراین، این حوزه مورد توجه خاص پژوهشگران جهانی قرار گرفته است.

پژوهش‌های اخیر روشهای مختلفی را برای رفع این محدودیت‌ها بررسی کرده‌اند. برای مثال، متاسطح‌های سیلیکون آمورف هیدروژنه (a-Si:H) که بر پایه شرایط کامل کرکر طراحی شده‌اند، توانسته‌اند نانوچاپ‌های رمزنگاری‌شده پویا و وابسته به قطبش ایجاد کنند و از این نظر، ظرفیت بالای این ساختارها را برای کاربردهای امنیتی پیشرفته نشان دهند [٤].

لوئو و همکاران با طراحی متاسطحی بر پایه نانوساختارهای نیمه‌بیضی‌گون TiO_2 نشان دادند که تغییر پیوسته هندسه سطح می‌تواند برانگیختگی تشدیدهای چندقطبی ناخواسته را کاهش دهد و در نتیجه، قله‌های بازتاب باریک‌تر و رنگ‌های ساختاری با اشباع بالاتر ایجاد کند [۵]. نتایج آن‌ها نشان داد که این ساختارها در کنترل پاسخ طیفی و بهبود خلوص رنگ، عملکرد بهتری نسبت به هندسه‌های رایج مانند نانوستون‌های استوانه‌ای دارند.

استفاده از متاسطح‌های سیلیکون نیترید(Si_3N_4) برای دستیابی به رنگ‌های ساختاری زنده، توسط یانگ و همکاران گزارش شد [٦]. آن‌ها از ناهنجاری‌های رایلی در طول‌موج‌های کوتاه‌تر برای سرکوب تشدیدهای نامطلوب مرتبه‌بالای می استفاده کردند، که باعث کاهش اشباع رنگ، به ویژه در ناحیه طیفی قرمز شد. همچنین با استفاده از تشدیدهای شبکه دوقطبی مغناطیسی، موفق به تولید طیف رنگی وسیعی شدند، که بیشتر فضاهای رنگی sRGB و Adobe RGB را پوشش می‌داد.

با وجود اهمیت سطوح رنگی کوک‌پذیر و پویا، دستیابی به رنگ‌های ثابت با بازدهی بالا در کل ناحیه طیفی مرئی، با طراحی ساده و قابل ساخت، هنوز یکی از اهداف اصلی این حوزه است. در این پژوهش، متاسطح‌های با ذرات زیرطول موجی با ساختار مکعب‌مستطیلی تناوبی از جنس سیلیکون نیترید بر روی زیرلایه SiO_2 پیشنهاد و شبیه‌سازی می‌شوند. شبیه‌سازی‌ها با نوردهی متاسطح توسط چشمه نور سفید و تحلیل طیف بازتاب ساختارهای مختلف به روش FDTD انجام می‌شود. همچنین تاثیر قطبش نور بر طیف بازتاب مورد بررسی قرار می‌گیرد.

مبانی نظری

در متاسطح‌های تناوبی، هر واحد سازنده را می‌توان به عنوان یک پراکنده‌کننده می در نظر گرفت که برهمکنش آن با امواج الکترومغناطیسی فرودی، به صورت پراکندگی میدان الکترومغناطیسی محلی آشکار می‌شود. بر اساس بسط هماهنگ‌های برداری کروی در نظریه پراکندگی می، فرآیند پراکندگی را می‌توان به کانال‌های پراکندگی چندقطبی از جمله دوقطبی الکتریکی، دوقطبی مغناطیسی تجزیه کرد.

$$\mathbf{P} = \frac{1}{i\omega}\int d^3\mathbf{r}\mathbf{J} \qquad (۱)$$

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2c}\int d^3\mathbf{r}(\mathbf{r}\times\mathbf{J}). \qquad (۲)$$

که در این روابط $\mathbf{P}$ ممان دوقطبی الکتریکی، $\mathbf{M}$ ممان دو قطبی مغناطیسی، $\mathbf{J}$ چگالی جریان قطبش است که با رابطه:

$$\mathbf{J} = i\omega\varepsilon_0(n^2-1)\mathbf{E} \qquad (۳)$$

مشخص می‌شود که در آن ω بسامد زاویه‌ای اپتیکی، c سرعت نور و $\mathbf{r}$ بردار جابجایی فضایی است.

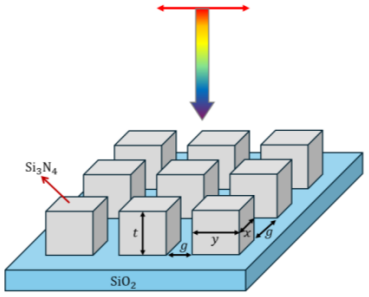
در شبکه‌های نانوذرات، تشدیدهای مؤثر دیگری نیز تحریک می‌شوند، که به آنها تشدیدهای شبکه می گفته می‌شود. این تشدیدها که در طول‌موج‌های نزدیک به ناهنجاری‌های رایلی رخ می‌دهند، در طراحی متاسطح‌های مورد استفاده در نمایشگرها، باید در نظر گرفته شوند؛ زیرا اثر جفت‌شدگی در ساختارهای آرایه‌ای اهمیت دارد. شایان ذکر است که تشدیدهای می مرتبه بالا توسط ناهنجاری‌های رایلی در طول‌موج‌های نسبتاً کوتاه سرکوب می‌شوند. جفت‌شدگی تقویت‌شده می‌تواند بر طیف بازتاب غالب شود و در نتیجه یک تشدید تیز و یکه ایجاد کند. برای تولید رنگ با خلوص بالا، ترکیب تشدید دوقطبی مغناطیسی و تشدید شبکه می، روش مناسبی است، زیرا هیچ تشدید می دیگری در طول‌موج‌های بلندتر رخ نمی‌دهد. همزمان، سهم تشدید دوقطبی الکتریکی در بازتاب می‌تواند سرکوب شود.

روش شبیه‌سازی

متاسطح شبیه‌سازی شده در این پژوهش، یک شبکه نانوساختار مکعب‌مستطیلی از جنس سیلیکون نیترید (Si_3N_4) بر روی زیر لایه

سیلیکا (SiO_2) است. عرض و ضخامت نانوذرات که به ترتیب با x و t مشخص می‌شوند، در متاسطح‌های مختلف ثابت و به ترتیب ۲۰۰ و ۲۷۰ نانومتر در نظر گرفته شده‌اند. همچنین فاصله هر نانوذره با نانوذره کناری ۱۰۰نانومتر است. وجه تمایز متاسطح‌ها، طول نانوذرات مکعب‌مستطیلی یعنی مولفه y آن‌ها است که مقدار آن از ۱۶۰ تا ۳۶۰ نانومتر، با گام‌های ۲۰ نانومتر، تغییر داده شده است. طرحواره ساختار متاسطح‌های مورد مطالعه در شکل ۱ نشان داده شده است.

در این پژوهش، از روش تفاضل محدود در حوزه زمان برای شبیه‌سازی و برهم‌کنش نور با متاسطح‌ها استفاده شده است.



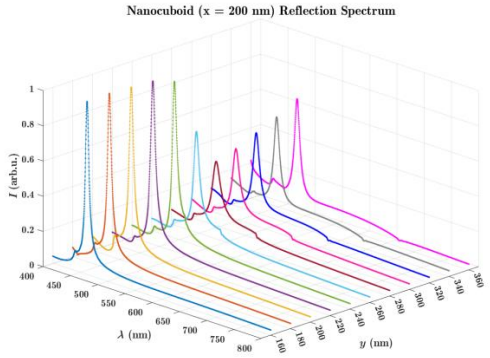
شکل ۱ : طرحواره تصویردانه‌های رنگی متاسطح Si_3N_4 نوردهی شده با نور تخت سفید قطبیده در راستای طول (ضلع y) مکعب‌مستطیل‌ها.

متاسطح‌ها را با دو چشمه نور سفید تخت، یکی قطبیده خطی در راستای عرض مکعب‌مستطیل‌ها (x) و دیگری قطبیده خطی در راستای طول مکعب‌مسطیل‌ها (y)، نوردهی می‌کنیم. طیف نور تابیده‌شده دارای پروفایل شبه‌گاوسی در بازه ۴۰۰ تا ۸۰۰ نانومتر است. نتایج این شبیه‌سازی‌ها در بخش بعد به تفصیل آمده است.

نتایج

شکل ۲ طیف بازتاب نانوذرات مکعب‌مستطیلی با عرض متفاوت را، که با چشمه نور سفید تخت قطبیده خطی در راستای عرض مکعب‌مستطیل‌ها (x)، نشان می‌دهد. با تغییر طول مکعب‌مستطیل‌ها، نه تنها محل قله طیف بازتابی نانوذرات تغییر محسوسی نمی‌کند، بلکه با افزایش نسبت طول به عرض مکعب مستطیل‌ها، شدت قله کاهش می‌یابد و طیف نور بازتابی پهن‌تر می‌شود. بنابراین نوردهی متاسطح با این چشمه نور نمی‌تواند، رنگ‌های ساختاری متنوعی در طیف نور سفید را تولید کند.

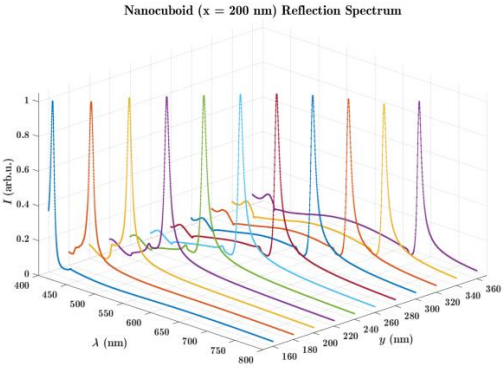
با تغییر جهت قطبش خطی چشمه به راستای طول مکعب‌مستطیل‌ها (y)، بار دیگر متاسطح‌های شبیه‌سازی شده را نوردهی می‌کنیم. شکل ۳ طیف



شکل ۲ : طیف بازتاب نانومکعب‌مستطیل‌های با عرض ثابت ۲۰۰نانومتر، نوردهی شده با نور قطبیده در راستای عرض مکعب‌مستطیل‌ها (محور x).

بازتاب نانوذرات مکعب‌مستطیلی با عرض متفاوت که با نور قطبیده در راستای طول (y) مکعب مستطیل‌ها نوردهی شده است، را نشان می‌دهد. با افزایش طول مکعب‌مستطیل‌ها، قله طیف بازتابی به سمت ناحیه قرمز جابه‌جا می‌شود. بنابرین نوردهی متاسطح‌های با y های متفاوت با این چشمه نور، منجر به تولید رنگ‌های متنوعی در ناحیه مرئی می‌شود.

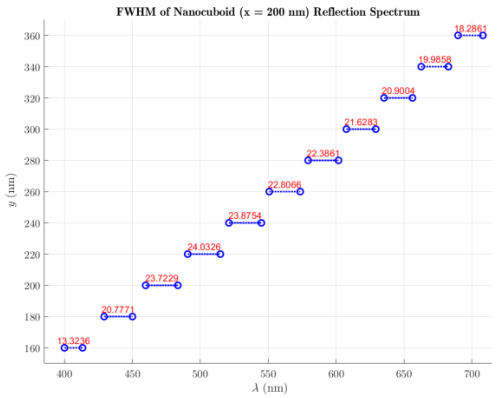
شکل ٤ تمام‌پهنا در نیم‌بیشینه قله طیف‌های بازتاب مکعب مستطیل‌ها را برحسب طول آنها نمایش می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود پهنای طیفی هر مکعب‌مستطیل حداکثر ۲٤ نانومتر است و بر این اساس می‌توان ادعا کرد، طیف بازتاب آنها تا حد زیادی تک‌فام است.



شکل ۳ : طیف بازتاب نانومکعب‌مستطیل‌های با عرض ثابت ۲۰۰نانومتر، نوردهی شده با نور قطبیده در راستای طول مکعب‌مستطیل‌ها (محور y).

مبنای تولید رنگ در متاسطح‌های پیشنهادی، ناشی از برهم‌کنش نور با نانوساختارهای سیلیکون‌نیترید است که رفتار تشدیدی می را از خود نشان می‌دهند. هر نانوساختار مکعب‌مستطیلی، همانند یک حفره نوری کوچک عمل کرده و در طول‌موج‌های تشدیدی خاصی، فوتون‌های فرودی را به صورت کارآمد پراکنده یا بازتاب می‌کند. دلیل اصلی «تغییر

رنگ» با تغییر پارامتر هندسی، جابجایی طیفیِ مدهای تشدیدیِ دوقطبی الکتریکی و مغناطیسی است . به عبارت دیگر، با افزایش ابعاد از ۱۶۰ تا ۳۶۰ نانومتر ، حجم ماده دی‌الکتریک در هر واحدِ سلول افزایش یافته و شرایط مرزی برای مدهای تشدیدی تغییر می‌کند. این تغییر هندسی منجر به انتقال قله‌های بازتاب به سمت طول‌موج‌های بلندتر می‌شود. بنابراین، با کوک کردن دقیق ابعاد نانوساختار، می‌توان قله بازتاب را بر روی طول‌موج‌های مختلف ناحیه مرئی قفل کرد که نتیجه آن تولید رنگ‌های ساختاری متنوع و با اشباع بالا است.

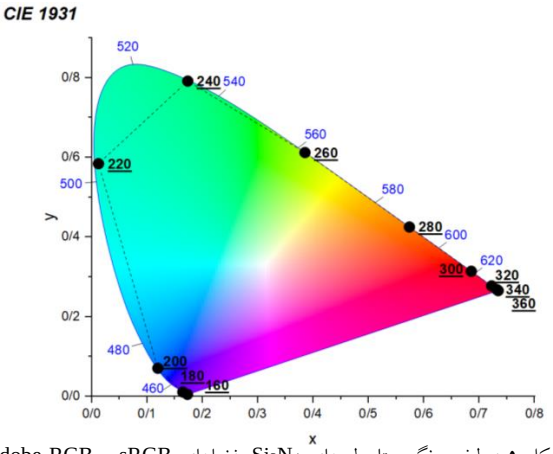


شکل ٤ : نمودار تمام‌پهنا در نیم‌بیشینه طیف‌های بازتاب نانومکعب‌مستطیل‌ها با عرض ثابت ۲۰۰نانومتر و طول متفاوت.

شکل ۵، نگاشت طول موج قله طیف بازتاب متاسطح‌های شبیه‌سازی شده بر مختصات رنگی CIE 1931 را نشان می‌دهد. برچسب‌های نقاط سیاه‌رنگ در این نمودار، نشان‌دهنده طول مکعب‌مستطیل‌ها (مولفه y) بر حسب نانومتر است. این نمودار نشان می‌دهد که با تنظیم طول نانومکعب‌مستطیل‌های سازنده این متاسطح‌ها، می‌توان رنگ‌های ساختاری مختلف در ناحیه مرئی را تولید کرد.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، متاسطح‌های ساخته شده از نانوساختارهای مکعب–مستطیلی از جنس سیلیکون نیترید، با روش FDTD شبیه‌سازی شد. عرض مکعب‌مستطیل‌های متاسطح‌های مختلف، یکسان در نظر گرفته شد و تاثیر تغییر طول ساختار مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که تغییر محسوس در طیف بازتابی متاسطح‌ها وقتی مشاهده می‌شود که نور تابیده شده به متاسطح دارای قطبش خطی در راستای طول مکعب‌مستطیل‌ها باشد. در این حالت با تغییر طول مکعب مستطیل‌ها در بازه ۲۰۰ نانومتری می‌توان تمامی رنگ‌های متنوع در ناحیه مرئی، از بنفش تا قرمز، را تولید



شکل ۵ : طیف رنگی متاسطح‌های Si_3N_4، فضاهای sRGB و Adobe RGB در مختصات رنگی CIE 1931. برچسب‌های نقاط، طول نانومکعب‌مستطیل‌ها را نشان می‌دهند.

کرد. همچنین در شرایطی که قطبش در راستای عرض مکعب‌مستطیل‌ها باشد نه تنها تولید رنگ‌های متنوعی اتفاق نمی‌افتد، بلکه در بعضی از طول‌ها، باعث کاهش قابل‌توجه شدت نور بازتاب شده می‌شود. از این ویژگی می‌توان در تولید سطوحی استفاده کرد که نقش آن‌ها، فقط در یک قطبش نور خاص نمایان می‌شود.

معادل‌های انگلیسی

اثر کرکر	Kerker effect
تفاضل محدود در حوزه زمان	Finite Difference Time Domain (FDTD)
تمام‌پهنا در نیم‌بیشینه	Full width at half maximum (FWHM)
تشدید می	Mie Resonance
جابجایی طیفی	Spectral Shift

مرجع‌ها

[۱] V. E. Babicheva and A. B. Evlykhin; "*Mie-resonant metaphotonics*"; *Advances in Optics and Photonics* **16**, No. 3 (2024) 539-658.
[۲] W. Yang, S. Xiao, Q. Song, Y. Liu, Y. Wu, S. Wang, J. Yu, J. Han and D. P. Tsai; "*All-dielectric metasurface for high-performance structural color*"; *Nature Communications* **11**, No. 1 (2020) 1864.
[۳] B. Yang, H. Cheng, S. Chen and J. Tian;"*Structural colors in metasurfaces: principle, design and applications*"; *Materials Chemistry Frontiers* **3**, (2019) 750-761.
[۴] J. Jang, H. Jeong, G. Hu, C.W. Qiu, K.T. Nam and J. Rho; "*Kerker-Conditioned Dynamic Cryptographic Nanoprints*"; *Advanced Optical Materials* **7**, No. 4 (2018) 1801070.
[۵] J. Luo, Q. Li, G. Xiao, B. Wang, H. Yang and S. Yu; "*Structural color based on a TiO_2 semi-ellipsoidal nanostructures metasurface*"; *Optics Express* **34**, No. 4 (2026) 6650.
[۶] J. H. Yang, V. E. Babicheva, M. W. Yu, T. C. Lu, T. R. Lin and K. C. Shen; "*Structural Colors Enabled by Lattice Resonance on Silicon Nitride Metasurfaces*"; *ACS Nano* **14**, No. 5 (2020) 5678-5685.

*ایمیل نویسنده مسئول: m_aliannezhadi@semnan.ac.ir

شناسایی تومور لیپوما با بهره گیری از بلورهای فوتونی آلاییده با ابررسانا

ربابه طالب زاده[۱و۳]؛ شبنم عندلیبی میاندوآب[۲و۳]

[۱] گروه فیزیک، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران
[۲] گروه مهندسی برق، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران
[۳] مرکز تحقیقات نانوفناوری صنعتی، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران

چکیده

در این مقاله، یک حسگر زیستی بر پایه‌ی بلور فوتونی یک‌بعدی لایه‌ای طراحی و شبیه‌سازی شده است. ساختار پیشنهادی شامل لایه‌های تناوبی سیلیس و هوا بوده و یک کاواک از جنس نانوکامپوزیت ابررسانای دمای بالای بیسموت در آن تعبیه شده است. با استفاده از روش ماتریس انتقال، طیف تراگسیل ساختار بررسی گردید. نتایج نشان می‌دهد که در طیف تراگسیل، مدهای تشدیدی واضحی برای نمونه‌های مختلف بافت مغزی ظاهر می‌شود که موقعیت آن‌ها به ضریب پرشدگی کاواک وابسته است. با بهینه‌سازی پارامترها، حساسیت حسگر برای تشخیص تومور لیپوما در بافت مغز به میزان $1627.9\,nm/RIU$ *افزایش یافته است. بنابراین ساختار پیشنهادی می‌تواند به عنوان یک حسگر زیستی کارآمد در طراحی ادوات تشخیص بیماری‌های مغزی مورد استفاده قرار گیرد.*

واژه های کلیدی: *نانوکامپوزیت ابررسانایی بیسموت، روش ماتریس انتقال، حسگر زیستی، تومور لیپوما*

Lipoma Tumor Detection Using Photonic Crystals Doped with Superconductor

Robabeh Talebzadeh[*1,3], Shabnam Andalibi Miandoab [*2,3]

[1] Department of physics, Ta C, Islamic Azad University, Tabriz, Iran
[2] Department of Electrical Engineering, Ta C, Islamic Azad University, Tabriz, Iran
[3] Industrial Nanotechnology Research Center, Ta C, Islamic Azad University, Tabriz, Iran

Abstract

In this paper, a one-dimensional layered photonic crystal biosensor is designed and simulated. The proposed structure consists of periodic layers of silica and air, with a cavity made of bismuth-based high-temperature superconducting nanocomposite. The transmission spectrum of the structure is investigated using the transfer matrix method. The results show distinct resonant modes in the transmission spectrum for different brain tissue samples, whose positions depend on the filling factor of the cavity. By optimizing the parameters, the sensitivity of the biosensor for detecting lipoma tumor in brain tissue is enhanced to $1627.9\,nm/RIU$ *. Therefore, the proposed structure can serve as an efficient biosensor for the design of brain disease diagnostic devices.*

Keywords*: BSCCO superconducting nanocomposite, Transfer matrix method, Biosensor, Lymphoma tumor*

PACS No. (87)

مقدمه

تومورهای مغزی از جمله انواع شایع تومورها هستند که کارکرد طبیعی مغز را مختل می‌سازند. اگر به موقع تشخیص داده شوند، قابل درمان‌اند، اما روند درمان پرهزینه و همراه با رنج برای بیمار است. بنابراین توسعه راهکارهایی سریع، دقیق و کم‌هزینه برای شناسایی زودهنگام تومورها امری حیاتی است [۱].

سلول‌های تومورهای بدخیم مغزی نسبت به سلول‌های سالم، آب بیشتری در خود دارند. این موضوع سبب تغییر ضریب شکست بافت می‌شود؛ به گونه‌ای که ضریب شکست سلول‌های سرطانی بیشتر از سلول‌های طبیعی است. برای نمونه، ضریب شکست نواحی گوناگون مغز انسان در بازه ۱،۳ تا ۱،۴۲ قرار دارد [۱]. بنابراین می‌توان از تغییر این ویژگی فیزیکی برای تشخیص و طراحی حسگر بهره گرفت. تاکنون حسگرهای زیستی متعددی مبتنی بر بلور فوتونی معرفی شده‌اند [۲]. وجود کامپوزیت‌های ابررسانا در ساختار بلور فوتونی، به طور قابل ملاحظه‌ای تیزی مدهای تشدیدی و در پی آن حساسیت حسگر را افزایش می‌دهد. این ویژگی مستقیماً به تفکیک بهتر بین بیماری‌هایی با ضریب شکست نزدیک به هم کمک می‌کند [۳]. با توجه به دمای بحرانی بالاتر و سمیت کمتر بیسموت در مقایسه با دیگر فلزات سنگین، در این پژوهش تأثیر به‌کارگیری ابررسانای پایه بیسموت را بر میزان حساسیت حسگرهای زیستی مبتنی بر بلورهای فوتونی یک‌بعدی مورد بررسی قرار داده‌ایم.

مدل تئوری و فرمول بندی مساله

ساختار حسگر زیستی پیشنهادی $(AB)^N CDC(AB)^N$ که قادر به تشخیص بافت های سرطانی مغز است شامل دو بلور فوتونی یک بعدی $(AB)^N$ می باشد که در شکل ۱ نشان داده شده است. در اینجا، A و B لایه های هر تناوب و N دوره تناوب مورد استفاده در طراحی را نشان می دهند. ضخامت لایه ها به ترتیب برابر با d_1 و d_2 و نیز ضریب شکست آنها n_1 و n_2 در نظر گرفته شده است. این دو بلور فوتونی از طریق حفره هوا D به ضخامت d_4 بهم متصل شده اند که با مواد نانوکامپوزیت از جنس ابررسانای دمای بالای پایه بیسموت به ضخامت d_3 پوشانده شده اند همان طور که در شکل ۱ نشان داده شده است، نمونه های مایع مغزی نخاعی[1] با ضریب شکست معین n_4 حاوی بافت های مختلف استخراج شده از قسمت های مختلف مغز انسان از طریق یک سوزن بلند به داخل این حفره تزریق می شوند. این روش موسوم به پونکسیون کمری در تشخیص برخی بیماری ها مانند منتژیت، لیپوما، گلیوما و خونریزی در اطراف مغز و مشابه آن مفید واقع می شود. همچنین از این روش برای تزریق بی حس کننده های نخاعی و شیمی درمانی نیز استفاده می شود.

در ارتباط با مواد ابررسانای مورد استفاده در ساختار، باید به این مورد اشاره کرد که بیشتر خواص مواد ابررسانا را می‌توان توسط مدل دو شاره‌ای توصیف کرد[٤]. ضریب گذردهی نسبی الکتریکی ابررسانا با استفاده از مدل دو شاره‌ای و تقریب‌های اعمالی و استفاده از عمق نفوذ لندن در حالت دمای غیرصفر و بدون اتلاف از رابطه زیر بدست می‌آید[٤]:

$$\varepsilon_{Sc}(\omega)=1-\left(\frac{c}{\omega\,\lambda(T)}\right)^2, \qquad (۱)$$

که در آن c سرعت نور، ω فرکانس موج الکترومغناطیسی و

$$\lambda(T)=\frac{\lambda_0}{\sqrt{1-\left(\frac{T}{T_C}\right)^n}} \qquad (۲)$$

که λ_0 عمق نفوذ لندن در دمای صفر درجه کلوین و T_c دمای بحرانی ابررسانا می‌باشد و بنابراین ضریب شکست نانوکامپوزیت های ابررسانایی را می توان طبق رابطه ماکسول-گارنت به صورت زیر در نظر گرفت [۵]:

$$n_3=\sqrt{\varepsilon_{NC}}=\sqrt{\frac{\varepsilon_m(2\eta\varepsilon_{sc}-2\eta\varepsilon_m+\varepsilon_{sc}+2\varepsilon_m)}{(2\varepsilon_m+\varepsilon_{sc}+\eta\varepsilon_m-\eta\varepsilon_{sc})}} \qquad (۳)$$

1. **Cerebrospinal Fluid (CSF)**

که در آن ε_m گذردهی الکتریکی ماده دی الکتریک، ε_{sc} گذردهی الکتریکی ابررسانا و η ضریب پرشدگی یا ضریب کسر حجمی کامپوزیت ها هست به این معنی که معرف بخشی یا کسری از نانوذرات هست که در ماده تعبیه شده است.

با توجه به اینکه ماتریس انتقال کل برای ساختار مورد مطالعه به صورت $M=(M_AM_B)^N M_C M_D M_C (M_AM_B)^N$ و نیز ضریب تراگسیل آن عبارت است از [٦]:

$$t=\frac{2}{m_{11}+m_{22}-m_{12}\cos(\theta_0)-\frac{m_{21}}{\cos(\theta_0)}} \qquad (٤)$$

که در آن m_{ij} ها درایه‌های ماتریس M هستند.

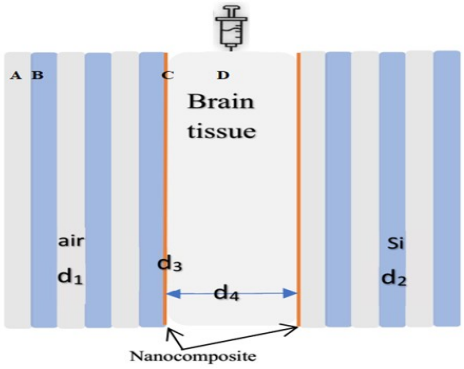
حساسیت به عنوان اصلی ترین مشخصه ارزیابی زیست حسگر به صورت میزان جابجایی طول موج تشدید (حاصل از اعمال روش ماتریس انتقال) نسبت به میزان تغییر در ضریب شکست ماده محاسبه می شود [٦]:

$$S=\frac{\Delta\lambda_R}{\Delta n} \qquad (٥)$$

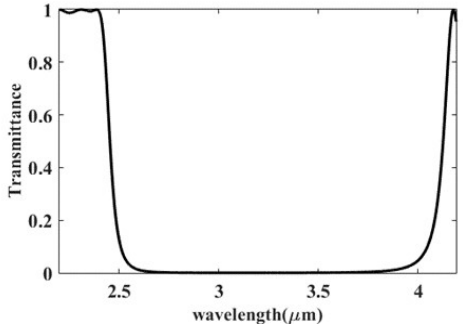
بحث و نتایج عددی

استفاده از حسگرهای زیستی به دلیل دقت و حساسیت و همچنین در مواردی به دلیل عدم نیاز به وسایل پیشرفته و صرف زمان و هزینه زیاد برای تشخیص آنالیت‌ها مورد توجه قرار گرفته است. برای این منظور ساختار حسگر زیستی $(AB)^N CDC(AB)^N$ مطابق شکل ۱ را در نظر گرفتیم که در آن لایه A سیلیس و لایه B هوا به ترتیب با ضریب شکست های $n_1=3.3$ و $n_2=1$ به ضخامت های $d_1=0.35\mu m$ و $d_2=0.275\mu m$ لایه های متناوب بلور فوتونی یک بعدی را تشکیل می دهند. کاواک هوا به ضخامت d_4 با دو لایه نانوکامپوزیت ابررسانای دمای بالای پایه بیسموت به ضخامت $d_3=0.09\mu m$ و عمق نفوذ $\lambda_0=150nm$ همچنین دمای بحرانی $T_C=95K$ احاطه شده است[٥]. همچنین تعداد دوره تناوب را $N=3$ و تابش را عمود بر ساختار در نظر گرفتیم.

برای مطالعه خواص حسگری ساختار پیشنهادی، ابتدا طیف تراگسیل بلور فوتونی یک بعدی را با بهره گیری از روش ماتریس انتقال در محیط نرم افزار مطلب رسم کردیم. مطابق شکل ۲ مشاهده کردیم که پهنای گاف باندی در گستره طول موجی $2.4-4.1\mu m$ در طیف تراگسیل ساختار ظاهر می شود که نسبتا پهن و قابل استفاده برای خواص حسگری می باشد. هرچند با در نظر گرفتن تعداد زیادی از تناوب ها گاف باند پهن ساختار تیزتر خواهد بود اما با توجه به محدودیت و هزینه های ساخت سعی کردیم با کمترین تعداد تناوب $N=3$، خواص حسگری ساختار پیشنهادی را مطالعه کنیم.



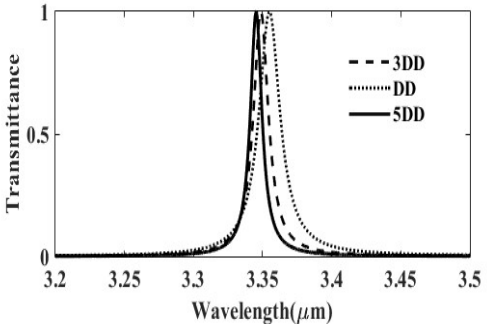
شکل۱ : طرح شماتیک ساختار حسگر زیستی



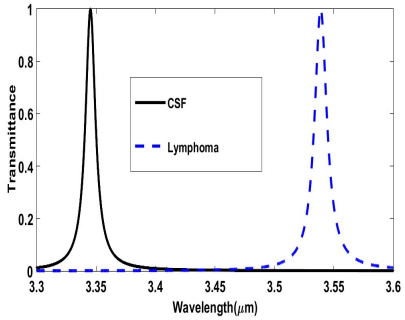
شکل۲ : طرح طیف تراگسیل بلور فوتونی $(AB)^3$

با افزودن کاواکی با ضخامتی برابر با ضخامت یک تناوب از بلور فوتونی $d_4=d_1+d_2=1DD$ با دو لایه نانوکامپوزیت ابررسانای دمای بالای بیسموت با فرض اینکه حاوی مایع مغزی به ضریب شکست $n=1.3333$ باشد، با انتخاب ضریب پرشدگی

$\eta = 0.2$ و با در نظر گرفتن ضخامت های مختلف محل قرارگیری نمونه در ساختار حسگر پیشنهادی، موقعیت مد تشدیدی را بررسی کردیم. مطابق شکل ۳، مشاهده کردیم که با افزایش ضخامت جایگاه قرار گیری نمونه تا $5DD$ ، مد تشدیدی به سمت طول موج های کوچک جابجا می شود.



شکل۳ : مد تشدیدی در طیف تراگسیل ساختار



شکل٤: طول موج مرکزی مد تشدیدی در طیف تراگسیل حسگر

با انتخاب ضخامت جایگاه قرار گیری نمونه $5DD$، جایگاه مد تشدیدی را برای بیماری لیپوما مطابق شکل ٤ مشخص کردیم. برای بررسی بهتر حساسیت حسگر زیستی، حساسیت ساختار بر حسب ضخامت محل قرار گیری نمونه محاسبه کردیم. مطابق نتایج آورده شده در جدول ۱، میزان حساسیت تا $1.6279\ \mu m / RIU$ افزایش می یابد.

جدول ۱: طول موج مرکزی مد تشدیدی و حساسیت ساختار

Brain Tissues	RI	S(μm/RIU) d_d=1DD	S(μm/RIU) d_d=3DD	S(μm/RIU) d_d=5DD	S(μm/RIU) d_d=7DD
CSF	1.3333	-	-	-	-
Lymphoma	1.4591	1.4591	0.8116	1.2798	1.6279

نتیجه گیری

در این مطالعه ساختار حسگر زیستی مبتنی بر بلورهای فوتونی یک بعدی را معرفی کردیم که قادر به تشخیص بافت های سرطانی مغز باشد. نشان دادیم حضور لایه هایی از نانوکامپوزیت های ابررسانایی بیسموت در ساختار پیشنهادی می تواند منجر به تقویت برهمکنش بین امواج الکترومغناطیسی و نمونه های تحت بررسی شود طوری که با در نظر گرفتن نمونه مایع مغزی به عنوان نمونه مرجع و نمونه هایی از لیپوما بیماری شایع بافت مغزی، قادر به بهینه سازی ساختار پیشنهادی به عنوان حسگر زیستی تا حساسیت $1.6279\ \mu m / RIU$ رسیدیم.

سپاسگزاری در صورت لزوم

از دانشگاه آزاد اسلامی واحد تبریز برای حمایت مالی از طرح پژوهشی اینجانبان که بخشی از نتایج آن در اینجا آورده شد، تقدیر و تشکر می کنیم.

مرجع‌ها

[1] J. Sun, S. J. Lee and L. Wu, "Sarntinoranont, M.; Xie, H. Refractive index measurement of acute rat brain tissue slices using optical coherence tomography". *Opt. Express, 20*, 1084–1095, 2012

[2] A. Soltani, F. Ouerghi, F. AbdelMalek, and S.Haxha, "Comparative study of one dimensional photonic crystal heterostructure doped with a high and low-transition temperature superconducting for a owtemperature sensor," *Opt. Commun*. Vol. 445, pp. 268–272,2019.

[3] H. M. Yasseen and A. F. Shukur, "Tunable high-sensitivity biosensor based on one-dimensional superconductor-dielectric photonic crystal," *J. Supercond. Nov. Magn*., 2025 (in press).

[4] H. F. Zang, S. B. Liu, and H. Yang, "Omnidirectional photonic band gaps in one-dimensional ternary superconductor-dielectric photonic crystals based on a new Thue-Morse aperiodic structure," *J. Supercond. Nov. Magn*. 27. 41-52, 2014

[5] A.H, Aly and D. Mohamed, "BSCCO/SrTiO3 One Dimensional Superconducting Photonic Crystal for Many Applications," *J. Supercond.Nov. Magn*. 18, 1699–1703, 2015.

[6] S. Andalibi Miandoab and R. Talebzadeh "Ultra-sensitive and selective 2D hybrid highly doped semiconductor-graphene biosensor based on SPR and SEIRA effects in the wide range of infrared spectral," *Optical Materials* 129, 112572, 2022

تبیین ساختار چندزیرپالسی در لیزر فیبری آلاییده به اربیوم کیوسوئیچ فعال با رویکرد امواج رونده

نظری ، علی‌رضا[۱]؛ سیاهوشی، ناصر[۱]

[۱] گروه فوتونیک، دانشکده علوم پایه شهید فخری‌زاده، دانشگاه جامع امام حسین، تهران، ایران؛

چکیده

در این مقاله، دینامیک شکل‌گیری پالس در یک لیزر فیبری آلاییده به اربیوم کیوسوئیچ فعال با استفاده از یک مدل توزیع‌یافته مبتنی بر رویکرد امواج رونده بررسی شده است. برخلاف مدل‌های نقطه‌ای که تنها تحول زمانی میدان را در نظر می‌گیرند، مدل حاضر با لحاظ هم‌زمان تغییرات مکانی و زمانی، قادر است ساختار چندقله‌ای پالس خروجی را با دقت مناسبی بازتولید کند. برای این منظور شکل کلی پالس، تعداد زیرپالس‌ها و فاصله زمانی میان قله‌ها بررسی و با تحلیل هم‌زمان دو خروجی کاواک نشان داده شد که جابه‌جایی زمانی زیرپالس‌ها با فرضیه قفل‌مدی سازگار نبوده و ساختار چندقله‌ای، پیامد مستقیم زمان‌پرواز نور و حرکت رفت‌وبرگشتی انرژی در کاواک است. در ادامه، اثر زمان خیز مدولاتور بر رفتار پالس بررسی شد و با تعریف کمیت عمق مدولاسیون، گذار از رژیم چندزیرپالسی به رژیم تک‌پالسی هموار به‌صورت کمّی نشان داده شد. نتایج این پژوهش چارچوبی قابل اتکا برای تحلیل و کنترل شکل پالس در لیزرهای فیبری کیوسوئیچ فعال فراهم می‌سازد.

واژه های کلیدی: *لیزر فیبری کیوسوئیچ فعال، مدل توزیع‌یافته، امواج رونده، ساختار چندزیرپالسی، عمق مدولاسیون.*

Elucidation of the Multi-Sub-Pulse Structure in Actively Q-Switched Erbium-Doped Fiber Lasers Using a Traveling-Wave Approach

Nazari, Alireza[1]; Siahvashi, Naser[1]

[1] Department of Photonics, Shahid Fakhrizadeh Faculty of Basic Sciences, Imam Hossein University, Tehran, Iran ؛

Abstract

In this paper, the dynamics of pulse formation in an actively Q-switched erbium-doped fiber laser are investigated using a distributed model based on the traveling-wave approach. Unlike point models, which consider only the temporal evolution of the field, the present model simultaneously accounts for both spatial and temporal variations, enabling it to reproduce the multi-peak structure of the output pulse with satisfactory accuracy. For this purpose, the overall pulse shape, the number of sub-pulses, and the temporal spacing between adjacent peaks were examined; through the simultaneous analysis of the two cavity outputs, it was shown that the temporal shift between the sub-pulses is inconsistent with the mode-locking hypothesis, and that the multi-peak structure is instead a direct consequence of the light time-of-flight and the back-and-forth motion of energy within the cavity. Subsequently, the effect of the modulator rise time on the pulse morphology was investigated, and by defining the modulation-depth quantity, the transition from the multi-sub-pulse regime to the smooth single-pulse regime was quantitatively demonstrated. The results of this study provide a reliable framework for the analysis and control of pulse shape in actively Q-switched fiber lasers.

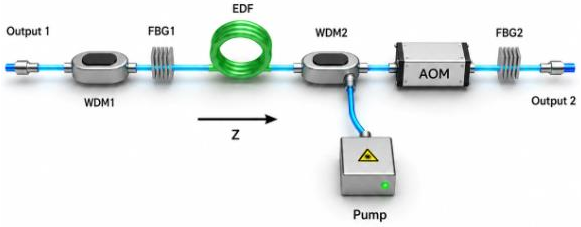
***Keywords**: Actively Q-switched fiber laser, Distributed model, Traveling-wave approach, Multi-sub-pulse structure, Modulation depth*
PACS No 42.55.Wd, 42.60.Gd

مقدمه

لیزرهای فیبری پالسی نانوثانیه‌ای آلائیده به اربیوم به دلیل ویژگی‌هایی مانند کیفیت باریکه مناسب، پایداری حرارتی بالا و ساختار فشرده، در طیف گسترده‌ای از کاربردها جایگاه ویژه‌ای یافته‌اند. از جمله این کاربردها می‌توان به سنجش از دور، فاصله‌یابی، تولید ابرپیوستار و تبدیل فرکانس غیرخطی اشاره کرد [۱]. در این میان، کیوسوئیچ فعال با استفاده از مدولاتور آکوستو-اپتیکی(AOM) یکی از روش‌های متداول برای تولید این پالس‌ها به شمار می‌رود [۲]. در کاواک‌های بلند، پالس خروجی این لیزرها غالباً به‌صورت یک پوش ساده ظاهر نمی‌شود، بلکه شامل زیرساختارهای چندقله‌ای است که می‌تواند بر عملکرد آن اثر بگذارد. ازاین‌رو، شناخت منشأ این رفتار و امکان کنترل آن، برای طراحی دقیق این لیزرها اهمیت ویژه‌ای دارد [۱]. در بسیاری از مطالعات، رفتار زمانی لیزر با استفاده از مدل‌های نقطه‌ای توصیف شده است. این مدل‌ها به دلیل صرف‌نظر کردن از تحول مکانی میدان در طول کاواک، در تبیین ساختارهای چندقله‌ای و روابط زمانی میان زیرپالس‌ها با محدودیت روبه‌رو هستند. در مقابل، مدل توزیع‌یافته این امکان را فراهم می‌سازد که انتشار نور، تخلیه بهره و تحول توان در طول فیبر به‌صورت واقع‌بینانه‌تری بررسی شود [۱]. در این پژوهش، یک مدل توزیع‌یافته مبتنی بر امواج رونده برای بررسی لیزر فیبری کیوسوئیچ فعال ارائه شده است. ابتدا دقت مدل از طریق مقایسه با داده‌های تجربی ارزیابی می‌شود. سپس با تحلیل هم‌زمان دو خروجی کاواک، نشان داده می‌شود که ساختار چندقله‌ای مشاهده‌شده ناشی از پویایی رفت‌وبرگشتی انرژی در کاواک است و نمی‌توان آن را به قفل‌مدی نسبت داد. در ادامه نیز اثر زمان خیز مدولاتور(مدت‌زمان گذار تلفات از بیشینه به کمینه) بر رفتار زمانی پالس بررسی شده و با استفاده از شاخص عمق مدولاسیون، مرز گذار میان رژیم چندزیرپالسی و رژیم تک‌پالسی هموار مشخص می‌شود.

تئوری و روش محاسباتی

مدل‌سازی دینامیک لیزر در این پژوهش بر پایه رویکرد امواج رونده و حل هم‌زمان معادلات دیفرانسیل جزئی جفت‌شده انجام شده است. برای توصیف دقیق محیط فعال آلاییده به اربیوم، معادلات نرخ بر اساس مدل پنج‌ترازه تدوین شده‌اند تا فرایندهای جذب، گسیل و سازوکارهای اتلافی مؤثر در محیط بهره به‌صورت واقع‌بینانه در نظر گرفته شوند [۱]. این رویکرد، در مقایسه با مدل‌های متمرکز، امکان بررسی هم‌زمان تحول زمانی و مکانی میدان نوری را در طول کاواک فراهم می‌کند و ازاین‌رو برای تحلیل ساختار چندقله‌ای پالس‌ها مناسب‌تر است. شماتیک چیدمان مورد مطالعه، در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱. شماتیک لیزر فیبری کیوسوئیچ فعال آلائیده به اربیوم با کاواک خطی.

این چیدمان لیزر فیبری کیوسوئیچ فعال یک کاواک خطی فابری-پرو به طول کل ۱۰٫۳ متر است که بخش فعال آن را ۴ متر فیبر تک‌مد آلاییده به اربیوم تشکیل می‌دهد. پمپاژ محیط بهره از طریق تقسیم‌کننده طول موج (WDM2) به‌وسیله یک دیود لیزر ۹۷۵ نانومتری با توان ۲۵۰ میلی‌وات انجام می‌شود. دو انتهای کاواک به‌ترتیب به وسیله توری‌های براگ فیبری (FBG۱و FBG۲) با ضرایب بازتاب ۸۹٫۴٪ و ۳۷٫۶٪ محدود شده‌اند. این نامتقارنی در بازتاب آینه‌ها سبب می‌شود که بخشی از توان نوری از هر دو انتهای کاواک استخراج شود؛ در نتیجه، مقایسه هم‌زمان ویژگی‌های زمانی پالس در خروجی‌های ۱ و ۲ امکان‌پذیر می‌شود [۱]. در این پیکربندی، مدولاتور آکوستواپتیکی در سمت راست کاواک و در فاصله بین WDM2 و FBG2 قرار گرفته است و با تغییر تلفات درون‌کاواک، فرایند کیوسوئیچ فعال را کنترل می‌کند. همچنین نرخ تکرار مدولاتور برابر ۱۰۰ هرتز در نظر گرفته شده است تا فاصله زمانی میان دو کیوسوئیچ متوالی به‌اندازه‌ای بزرگ باشد که وارونگی جمعیت در محیط فعال پیش از باز شدن مجدد کاواک به مقدار کافی بازیابی شود [۱]. معادلات حاکم بر تغییرات مکانی-زمانی توان پمپ و سیگنال در فیبر به ترتیب عبارت‌اند از:

$$\left(\frac{n_p}{c}\frac{\partial}{\partial t} \pm \frac{\partial}{\partial z}\right) P_p^{\pm}(z,t) = -\alpha_p(z,t) P_p^{\pm}(z,t) \quad (۱)$$

$$\left(\frac{n_s}{c}\frac{\partial}{\partial t}\pm\frac{\partial}{\partial z}\right)P_s^{\pm}(z,t)=g_s(z,t)P_s^{\pm}(z,t)+\frac{\Omega}{4\pi}\eta\frac{N_2}{\tau_{21}}h\nu_s\pi a^2 \quad (۲)$$

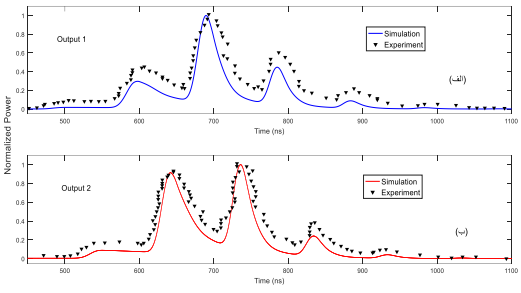
که در این روابط $P_s^{\pm}.P_p^{\pm}$ به ترتیب توان سیگنال لیزر و پمپ(علامت + نشان‌دهنده‌ی انتشار رو به جلو و – رو به عقب است.) n_s,n_p به ترتیب ضریب شکست فیبر برای سیگنال لیزر و پمپ c، سرعت نور در خلا، α_p,g_s به ترتیب ضریب جذب پمپ و ضریب بهره سیگنال لیزر ، Ω کسر فوتون های هدایت شده در فیبر ، η کسر طیفی گسیل خودبه‌خودی تقویت شده بازتاب شده از آینه‌ها و a شعاع هسته فیبر می‌باشد. برای توصیف کمّی میزان چندقله‌ای بودن پالس و شدت فرورفتگی‌های میان زیرپالس‌ها، کمیت عمق مدولاسیون تعریف می‌شود. این کمیت از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\Delta M(\%)=\frac{P_{peak}-P_{valley}}{P_{peak}}\times 100 \quad (۳)$$

که در آن P_{peak} توان قله اصلی پالس و P_{valley} کمینه توان میان قله اصلی و قله بعدی است. بنابراین، ΔM معیاری صریح از شدت فرورفتگی‌های میان زیرپالس‌ها به شمار می‌رود.

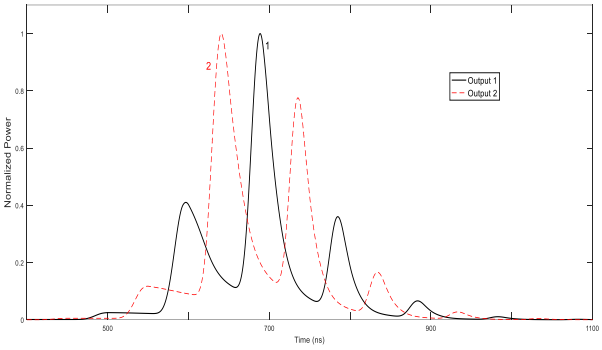
شبیه‌سازی

برای شبیه‌سازی معادلات مبتنی بر مدل موج رونده از نرم‌افزار متلب استفاده شده است. در شکل ۲ تغییرات توان خروجی بر حسب تغییرات زمان، برای خروجی‌های دو طرف کاواک نشان داده شده است. با توجه به توانمندی مدل امواج رونده با در نظر گرفتن هم‌زمان تحولات مکانی و زمانی، ساختار کلی پالس، تعداد زیرپالس‌ها و فاصله زمانی میان قله‌ها در شکل مشاهده می‌شود. این فاصله زمانی که در حدود ۱۰۰ نانوثانیه است، با فرض ضریب شکست گروهی هسته فیبر(n=۱,۴۵)، با زمان یک رفت‌وبرگشت کامل نور در کاواک ۱۰,۳ متری سازگاری دارد. جهت مقایسه‌ی روشن‌تر رفتار پالس‌ها، نتایج حاصل با داده‌های تجربی [۱] مقایسه و دو نمودار تنها با یک جابه‌جایی زمانی جزئی هم‌تراز شده‌اند. همان‌طور که از شکل مشخص است، انطباق مطلوبی میان نتایج عددی و داده‌های تجربی مشاهده می‌شود.



شکل۲. توان بهنجارشده بر حسب زمان برای (الف) خروجی ۱ و (ب) خروجی ۲؛ مقایسه نتایج عددی (خط پیوسته) با داده‌های تجربی.

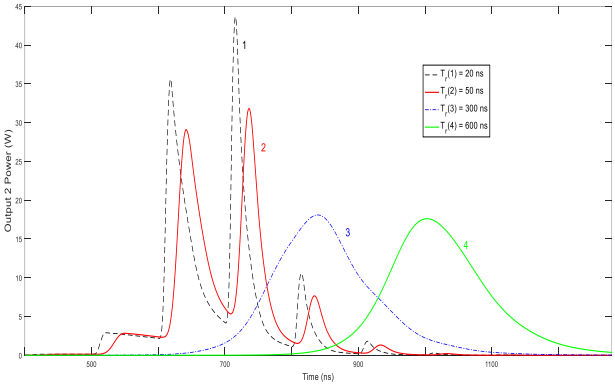
برای تبیین منشأ فیزیکی ساختار چندقله‌ای، تغییرات زمانی دو خروجی کاواک به‌صورت هم‌زمان در شکل۳ بررسی شده است. مطابق شکل زیرپالس‌های ساطع‌شده از دو انتهای کاواک بر هم منطبق نبوده و با جابه‌جایی زمانی تقریباً ۵۰ نانوثانیه‌ای، معادل نیمی از زمان رفت‌وبرگشت نور در کاواک، نسبت به یکدیگر ظاهر می‌شوند؛ رفتاری که با حرکت رفت‌وبرگشتی بسته‌های انرژی در طول کاواک سازگار است. نکته‌ی تعیین‌کننده اما در ماهیت خود مدل نهفته است: معادلات امواج رونده‌ی به‌کاررفته فاقد هرگونه سازوکار جفت‌شدگی فاز همدوس میان مدهای طولی‌اند و بنابراین قادر به بازتولید قفل‌مدی نیستند. ساختار چندقله‌ای و فاصله‌ی زمانی قله‌ها پیامد دینامیک تخلیه‌ی بهره و زمان‌پرواز نور است و نیازی به فرض قفل‌مدی ندارد. جابه‌جایی زمانی مشاهده‌شده میان دو خروجی نیز این تصویر را تأیید می‌کند.



شکل۳. توان بهنجارشده بر حسب زمان؛ مقایسه رفتار زمانی پالس در خروجی ۱ (خط پیوسته) و خروجی ۲ (خط چین).

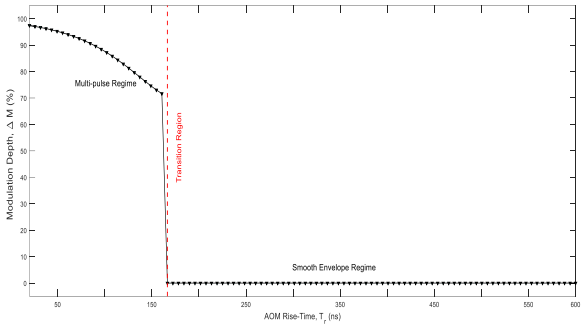
در ادامه اثر زمان خیز مدولاتور بر رفتار زمانی پالس خروجی بررسی شده است. مطابق شکل۴ در زمان خیز کوتاه ۲۰ نانوثانیه، زیرپالس‌ها به‌وضوح شکل گرفته‌اند و خروجی دارای ساختاری

چندقله‌ای، تیز و پرتوان با توان بیشینه حدود ۴۴ وات است. با افزایش زمان خیز به ۵۰ نانوثانیه، ساختار چندقله‌ای همچنان حفظ می‌شود، اما قله‌ها نرم‌تر شده و پوش کلی پالس پهن‌تر می‌شود. با افزایش زمان خیز به ۳۰۰ نانوثانیه، علاوه بر افت توان بیشینه به حدود ۱۸ وات، آغاز شکل‌گیری پالس با تأخیر همراه شده و پهنای زمانی پوش افزایش می‌یابد. در نهایت، برای زمان خیز ۶۰۰ نانوثانیه، ساختار چندقله‌ای به‌طور کامل محو شده و خروجی به یک پوش تک‌پالسی هموار و عریض تبدیل می‌شود. این روند نشان می‌دهد که افزایش زمان خیز مدولاتور، خروجی کاواک را از رژیم چندزیرپالسی پرتوان به سمت رژیم تک‌پالسی هموار سوق می‌دهد.



شکل۴. توان خروجی ۲ بر حسب زمان؛ رفتار زمانی پالس به ازای مقادیر مختلف زمان خیز مدولاتور.

به منظور ارائه یک تفسیر کمّی از تغییرات رفتار پالس(شکل۴)، عمق مدولاسیون (رابطه۳) در شکل ۵ ترسیم شده است. نتایج نشان می‌دهد که در زمان‌های خیز کوتاه (کمتر از ۱۰۰ نانوثانیه)، عمق مدولاسیون در بازه ۹۰ تا ۹۸ درصد قرار دارد که بیانگر حضور غالب ساختار چندزیرپالسی است. با افزایش زمان خیز، مقدار ΔM به‌تدریج کاهش یافته و در بازه ۱۶۰ تا ۱۷۰ نانوثانیه به صفر می‌رسد. این سقوط به صفر، دقیقاً معادل محو شدن فرورفتگی‌ها و وقوع یک گذار دینامیکی از رژیم چندزیرپالسی به رژیم تک‌پالسی هموار است. پایداری مقدار صفر برای زمان‌های طولانی‌تر نیز تسلط کامل این رژیم هموار را تأیید می‌کند. در نتیجه، زمان خیز مدولاتور پارامتری کلیدی در تعیین مرز فیزیکی میان این دو رژیم عملکردی است.



شکل۵. عمق مدولاسیون بر حسب زمان خیز مدولاتور.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، رفتار پالس در یک لیزر فیبری کیوسوئیچ فعال با استفاده از یک مدل توزیع‌یافته مبتنی بر امواج رونده بررسی شد. نتایج نشان داد که این مدل، با در نظر گرفتن هم‌زمان تحول‌های مکانی و زمانی، قادر است ساختار کلی پالس، زیرپالس‌ها و فاصله زمانی میان قله‌ها را با دقت مناسبی بازتولید کند. مقایسه با داده‌های تجربی اعتبار مدل را تأیید کرد. تحلیل هم‌زمان دو خروجی کاواک نشان داد که زیرپالس‌ها در دو انتهای کاواک هم‌زمان ظاهر نمی‌شوند، بلکه با یک جابه‌جایی زمانی مشخص نسبت به یکدیگر دیده می‌شوند. این نتیجه بیانگر آن است که منشأ ساختار چندقله‌ای، حرکت رفت‌وبرگشتی انرژی و زمان‌پرواز نور در کاواک است. همچنین بررسی اثر زمان خیز مدولاتور نشان داد که با افزایش این پارامتر، خروجی کاواک از رژیم چندزیرپالسی به رژیم تک‌پالسی هموار گذار می‌کند. تعریف و محاسبه عمق مدولاسیون نیز امکان توصیف کمّی این گذار را فراهم نمود. نتایج این پژوهش می‌تواند مبنایی مناسب برای تحلیل دقیق‌تر و طراحی هدفمند لیزرهای فیبری کیوسوئیچ فعال باشد.

مرجع‌ها

[1] S. A. Kolpakov et al., “Distributed model for actively Q-switched erbium-doped fiber lasers,” IEEE J. Quantum Electron., 47(7), 928–934 (2011).
[2] Y. O. Barmenkov et al., “Excited-state absorption in erbium-doped silica fiber with simultaneous excitation at 977 and 1531 nm,” J. Appl. Phys., 106(8), 083108 (2009).
[3] C. Cuadrado-Laborde et al., “Transform-limited pulses generated by an actively Q-switched distributed fiber laser,” Opt. Lett., 33(22), 2590–2592 (2008).
[4] Y. Wang and C.-Q. Xu, “Switching-induced perturbation and influence on actively Q-switched fiber lasers,” IEEE J. Quantum Electron., 40(11), 1583–1596 (2004).

کمینه‌سازی افت حبس‌شدگی در تار مغزی تهی پادتشدیدی با انتخاب مناسب ضخامت مویرگ بر پایه مراتب پادتشدید

پاکارزاده، حسن[۱]؛ یکتاپرست، بنفشه[۱]؛ رضائیان کوچی، سلیمان[۱]

[۱] *دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز ، بلوار مدرس ، شیراز*

چکیده

در این پژوهش، یک تار بلور فوتونی مغزی تهی پادتشدیدی تک‌حلقه‌ای با هفت مویرگ برای کاربردهای انتقال نور لیزر پرتوان در بازه ۱۰۳۰ تا ۱۰۸۰ نانومتر طراحی و شبیه‌سازی شده است. کمینه‌سازی افت حبس‌شدگی با بررسی پارامترهای هندسی ساختار از جمله نسبت $F=d/D$ (d قطر خارجی مویرگ، D قطر مغزی) و انتخاب ضخامت دیواره مویرگ‌ها (t) بر اساس مراتب مختلف پادتشدید انجام شد. نتایج نشان داد که ساختار مناسب با $F=0.65$ و $t=1250nm$ کمترین افت حبس‌شدگی را برابر با $22.421\ dB/km$ در طول موج ۱۰۶۴ نانومتر فراهم می‌کند. نتایج بیانگر نقش مؤثر انتخاب مناسب ضخامت مبتنی بر شرایط پادتشدید در کاهش افت و بهبود عملکرد تارهای مغزی تهی پادتشدیدی است.

واژه های کلیدی: *تار مغزی تهی، سازوکار پادتشدید، افت حبس‌شدگی، پارامترهای هندسی، انتقال پرتوان.*

Minimization of Confinement Loss in a Hollow-Core Anti-Resonant Fiber via Appropriate Capillary Thickness Selection Based on Anti-Resonant Orders

Pakarzadeh, Hassan[1]; Yektaparast, Banafsheh[1]; Rezaeian Koochi, Soleiman[1]

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

Abstract

In this study, a seven-capillary single-ring hollow-core anti-resonant photonic crystal fiber was designed and simulated for high-power laser light delivery in the 1030–1080 nm wavelength range. Confinement loss minimization was achieved by investigating the geometric parameters of the structure, including the ratio F=d/D (d outer diameter of capillary, D core diameter), and by selecting the capillary wall thickness based on different anti-resonant orders. The results showed that a suitable structure with F=0.65 and t=1250nm provides a minimum confinement loss of 22.421dB/km at 1064 nm. The results indicate the significant role of wall-thickness selection based on anti-resonant conditions in reducing confinement loss and improving the performance of hollow-core anti-resonant fibers.

Keywords: *Hollow-core fiber, Anti-resonant mechanism, Confinement loss, Geometric parameters, High-power transmission.*
PACS No. 42

مقدمه

تارهای نوری به‌عنوان یکی از مهم‌ترین بسترهای انتقال و کنترل نور، نقش مهمی در سامانه‌های مخابراتی، حسگری، پزشکی و فناوری‌های لیزری ایفا می‌کنند. با وجود موفقیت گسترده تارهای سیلیکایی متداول، محدودیت‌هایی نظیر جذب در نواحی فرابنفش و فروسرخ، اثرات غیرخطی و آستانه نسبتاً پایین آسیب لیزری، استفاده از آن‌ها را در کاربردهای پرتوان با چالش مواجه ساخته است [۱,۲]. در این راستا، توسعه تارهای بلور فوتونی امکان کنترل مؤثر ویژگی‌های انتشار نور از طریق مهندسی پارامترهای ساختاری را فراهم کرده است. در میان انواع مختلف تارهای بلور فوتونی، تارهای مغزی تهی به دلیل هدایت بخش عمده توان نوری در هوا،

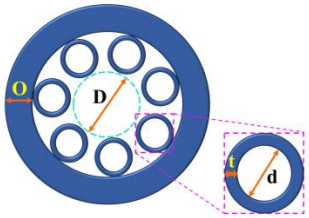
از اهمیت ویژه‌ای برخوردارند. این ویژگی موجب کاهش اثرات غیرخطی، افزایش آستانه آسیب لیزری و بهبود انتقال پالس‌های پرانرژی می‌شود [۳]. نسل نخست این تارها مبتنی بر سازوکار گاف نواری فوتونی بود، اما محدودیت‌هایی نظیر پهنای باند محدود، حضور مدهای سطحی ناخواسته و پیچیدگی ساخت، توسعه ساختارهای جایگزین را ضروری ساخت [٤].

در ادامه، تارهای مغزی تهی پادتشدیدی معرفی شدند که هدایت نور را از طریق سازوکار بازتاب پادتشدیدی و جفت‌شدگی مهارشده فراهم می‌کنند [٥]. مطالعات نشان داده‌اند که عملکرد این ساختارها عمدتاً توسط افت حبس‌شدگی ناشی از نشتی مد از مغزی به غلاف محدود می‌شود [٦]. بر اساس این مدل، دیواره‌های نازک سیلیکایی پیرامون مغزی مشابه تشدیدگرهای فابری–پرو عمل کرده و شرایط پادتشدید نقش تعیین‌کننده‌ای در میزان محبوس‌سازی نور ایفا می‌کند [۷]. ازاین‌رو، پارامترهای هندسی به‌ویژه ضخامت دیواره‌ها تأثیر مستقیمی بر میزان افت این تارها دارند.

در این پژوهش، تأثیر پارامترهای هندسی ساختار نظیر ضخامت مویرگ‌ها، قطر مغزی، قطر خارجی مویرگ و نسبت قطر خارجی مویرگ به قطر مغزی بر میزان افت حبس‌شدگی در یک تار مغزی تهی پادتشدیدی تک‌حلقه‌ای مورد بررسی قرار گرفته و شرایط بهینه برای دستیابی به کمترین میزان افت شناسایی شده است.

طراحی ساختار

در این پژوهش، فرآیند طراحی و شبیه‌سازی عددی ساختار پیشنهادی با استفاده از نرم‌افزار Lumerical MODE بر پایه روش تفاضل محدود (FDE) صورت گرفته است. پیکربندی کلی ساختار مطابق شکل۱ شامل یک تار مغزی تهی پادتشدیدی با هفت مویرگ سیلیکایی غیرتماسی در غلاف می‌باشد. در این ساختار، نور درون مغزی هوا هدایت شده و غشاهای نازک سیلیکایی پیرامون آن نقش لایه‌های تشدیدگر را ایفا می‌کنند. پارامترهای هندسی اصلی شامل قطر مغزی (D)، قطر خارجی مویرگ‌ها (d)، ضخامت دیواره مویرگ‌ها (t)، و ضخامت پوشش بیرونی تار O=(d+D)×3 می‌باشند. همچنین نسبت هندسی F=d/D به‌عنوان پارامتری کلیدی در طراحی در نظر گرفته شده است.



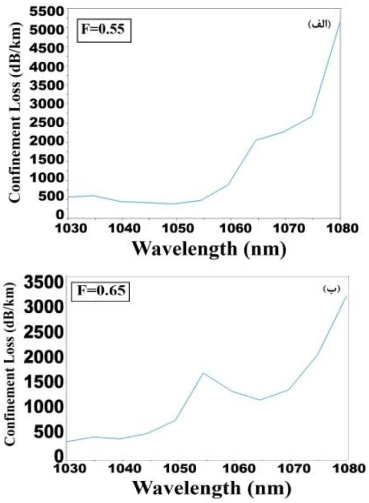
شکل۱ : سطح مقطع تار نوری مغزی تهی پادتشدیدی تک حلقه‌ای پیشنهادی.

در این مدل عددی، شرط مرزی جذب کامل (PML) برای حذف بازتاب‌های ناخواسته در مرزهای محاسباتی اعمال شده و ماده زمینه از نوع Corning 7980 Silica در نظر گرفته شده است که ضریب شکست آن بر اساس روابط سلمایر و به‌صورت تابعی از طول موج محاسبه می‌شود. برای دستیابی به هدایت تک‌مدی، سرکوب مدهای مرتبه بالاتر از طریق کنترل جفت‌شدگی تشدیدی با مدهای غلاف ضروری است که این موضوع به‌شدت به پارامترهای هندسی، به‌ویژه نسبت F=d/D و تعداد مویرگ‌های غلاف وابسته است. نتایج عددی نشان می‌دهد که افزایش تعداد مویرگ‌ها به N≥8 موجب تضعیف کارایی جفت‌شدگی تشدیدی برای حذف مدهای مرتبه بالاتر می‌شود، در حالی که استفاده از کمتر از ٦ مویرگ باعث افزایش افت مد پایه می‌گردد. بنابراین، ساختار با ۷ مویرگ غیرتماسی به‌عنوان پیکربندی بهینه انتخاب شده است.

نتایج شبیه سازی و بحث

به‌منظور دستیابی به حداقل افت حبس‌شدگی در بازه طول موجی ۱۰۳۰ تا ۱۰۸۰ نانومتر، فرآیند بهینه‌سازی ساختار در دو مرحله انجام شد. در گام نخست، نسبت هندسی F در بازه ۰.۵۰ تا ۰.۷۵ با گام ۰.۰۵، با ثابت نگه داشتن قطر مغزی (D=30μm) و ضخامت اولیه دیواره مویرگ‌ها (t=600nm) مورد بررسی قرار گرفت. این بازه بر اساس مطالعات پیشین در ساختارهای تک‌حلقه‌ای فیبرهای مغزی تهی پادتشدیدی انتخاب شد، زیرا ناحیه عملکرد بهینه این ساختارها معمولاً در حوالی ۰.٦ تا ۰.۷

گزارش شده است. در تمامی شبیه‌سازی‌ها، مد پایه (LP_{01}) به‌عنوان مد هدف در نظر گرفته شد.



شکل۲: افت حبس‌شدگی برحسب طول موج به‌ازای الف) F=0.55μm؛ و ب) F=0.65μm.

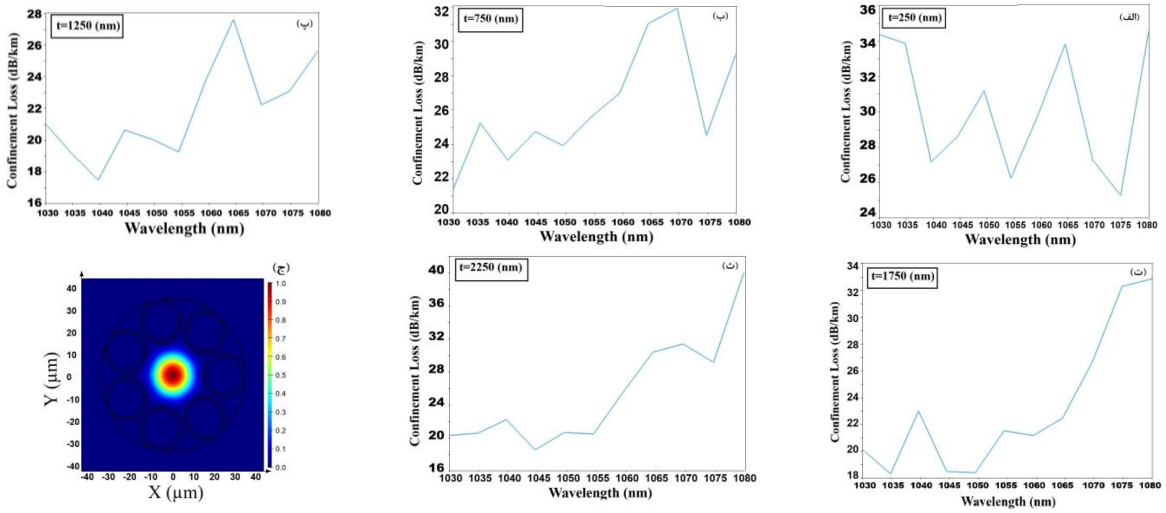
شکل‌های ۲ به‌ترتیب تغییرات طیفی افت حبس‌شدگی را برای مقادیر F=0.55 و F=0.65 در بازه ۱۰۳۰ تا ۱۰۸۰ نانومتر به‌عنوان نمونه‌ای جهت مقایسه نشان می‌دهند. نتایج نشان می‌دهد که مقدار F=0.65 کمترین افت را در کل بازه طیفی مورد مطالعه فراهم می‌کند. این رفتار ناشی از نقش نسبت Fدر جفت‌شدگی مدی میان مد پایه مغزی و مدهای غلاف است. افزایش F موجب بهبود سرکوب مدهای مرتبه بالاتر می‌شود، در حالی که کاهش آن می‌تواند شرایط جفت‌شدگی مدی را تغییر داده و بر افت حبس‌شدگی اثرگذار باشد. ازاین‌رو، مقدار F=0.65 تعادل مناسبی برای دستیابی به حداقل افت حبس‌شدگی فراهم می‌کند.

پس از تعیین مقدار بهینه F=0.65، اثر ضخامت دیواره مویرگ‌ها بر افت حبس‌شدگی بررسی شد. از آنجا که این پارامتر موقعیت نواحی تشدید و پادتشدید را تعیین کرده و به‌طور مستقیم بر میزان محبوس‌سازی میدان در مغزی اثر می‌گذارد، انتخاب صحیح آن نقش مهمی در عملکرد ساختار دارد. از رابطه (۱) برای تعیین ضخامت‌های متناظر با مراتب مختلف پادتشدید در بازه طول موجی مورد نظر استفاده شده است، که در آن $\lambda_{antires}$ بیانگر طول‌موج پادتشدیدی، t ضخامت دیواره مویرگ، n_1 و n_2 به‌ترتیب ضرایب شکست محیط مغزی و سیلیکا، و m مرتبه پادتشدید است. با در نظر گرفتن بازه ۱۰۳۰ تا ۱۰۸۰ نانومتر، ضخامت‌های متناظر با مراتب مختلف پادتشدید محاسبه شده و مقادیر ۲۵۰، ۷۵۰، ۱۲۵۰، ۱۷۵۰ و ۲۲۵۰ نانومتر به‌عنوان گزینه‌های بررسی انتخاب شدند. برخلاف رویکرد متداول که در آن ابتدا ضخامت ثابت و سپس طول موج‌های پادتشدیدی استخراج می‌شود، در این پژوهش طول موج ثابت در نظر گرفته شده و ضخامت‌های متناظر با مراتب مختلف پادتشدید تحلیل شده‌اند. این روش امکان بررسی عملکرد ساختار در ضخامت‌های بالاتر را فراهم می‌کند که علاوه بر استحکام مکانیکی بیشتر، در بسیاری از موارد می‌توانند به کاهش افت نیز منجر شوند. در نتیجه، این رویکرد امکان بهینه‌سازی مستقیم ساختار در بازه طول موج هدف را فراهم کرده و انتخاب دقیق‌تر ضخامت به‌منظور کمینه‌سازی افت حبس‌شدگی را نسبت به روش‌های متداول امکان‌پذیر می‌سازد.

$$\lambda_{antires} = \frac{4t}{(2m+1)}\sqrt{n_2^2 - n_1^2}; m = 0,1,2,.... \quad (۱)$$

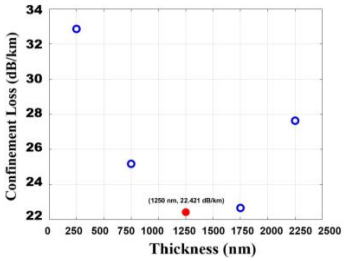
شکل‌های ۳ الف تا ث نتایج حاصل از تغییر ضخامت دیواره مویرگ‌ها را برای ساختار با F=0.65 نشان می‌دهند. مقایسه طیف‌های افت حبس‌شدگی نشان می‌دهد که ضخامت t=1250nm بهترین عملکرد را در کل بازه طیفی مورد مطالعه ارائه می‌دهد. در این حالت، افت حبس‌شدگی در تمامی طول موج‌های بازه مورد نظر در کمترین مقدار خود، کمتر از 30 dB/km، باقی مانده و در برخی نقاط طیفی به مقادیر بسیار پایین‌تر نیز می‌رسد.

به‌منظور بررسی تأثیر ضخامت دیواره مویرگ‌ها، تغییرات افت حبس‌شدگی مد پایه بر حسب t در طول موج ۱۰٦٤ نانومتر در شکل ٤ نشان داده شده است. با افزایش ضخامت از ۲۵۰ تا ۱۲۵۰ نانومتر، افت کاهش یافته و به کمینه 22.421 dB/km می‌رسد. در ضخامت‌های کمتر، بازتاب پادتشدیدی به اندازه کافی قوی نبوده و بخشی از میدان به ناحیه غلاف کوپل می‌شود. در مقابل، افزایش ضخامت فراتر از ۱۲۵۰نانومتر موجب تغییر شرایط تشدید و افزایش نشتی مد پایه به غلاف شده و افت دوباره افزایش می‌یابد. بنابراین، ضخامت ۱۲۵۰نانومتر ضمن ایجاد شرایط بهینه پادتشدید و حداقل‌سازی نشتی مدی، نقطه تعادلی مناسبی میان



شکل۳ : افت حبس‌شدگی برحسب طول موج به‌ازای F=0.65µm و الف) t=250nm، ب) t=750nm، پ) t=1250nm، ت) t=1750nm، ث) t=2250n. ج) نمودار توزیع میدان مد.

استحکام مکانیکی در فرآیند ساخت، کاهش افت و بهینه‌سازی هدایت مد پایه در کل بازه طیفی است.



شکل٤ : مقادیر افت به‌ازای tهای مختلف مربوط به تار مغزی تهی پادتشدیدی ۷ حلقه برای مقدار ثابت F=0.65 در طول موج ۱۰٦٤ نانومتر.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، یک تار بلور فوتونی مغزی تهی پادتشدیدی تک‌حلقه‌ای با هفت مویرگ در بازه طول موجی ۱۰۳۰ تا ۱۰۸۰ نانومتر طراحی و بهینه‌سازی شد. در این راستا، رویکردی مبتنی بر انتخاب ضخامت دیواره مویرگ‌ها بر اساس مراتب مختلف پادتشدید برای یک طول موج هدف به‌کار گرفته شد که امکان بررسی عملکرد ساختار در ضخامت‌های گوناگون و انتخاب شرایط بهینه را فراهم کرد. نتایج نشان داد که نسبت F=0.65 و ضخامت t=1250nm بهترین عملکرد را ارائه داده و کمترین افت حبس‌شدگی برابر با 22.421 dB/km را در طول موج ۱۰٦٤ نانومتر ایجاد می‌کنند. نتایج حاصل نشان می‌دهد که انتخاب هدفمند ضخامت دیواره مویرگ‌ها بر مبنای شرایط پادتشدید، راهکاری مؤثر برای کاهش نشتی مدی و بهبود عملکرد تارهای مغزی تهی پادتشدیدی در انتقال لیزرهای پرتوان است. مزیت اصلی این رویکرد نسبت به روش‌های متداول، امکان انتخاب ضخامت‌های بهینه با در نظر گرفتن همزمان افت پایین، استحکام مکانیکی و قابلیت ساخت مناسب‌تر است.

مرجع‌ها

[۱] R. F. Cregan et al.; "Single-Mode Photonic Band Gap Guidance of Light in Air"; *Science* **285**, No. 5433 (1999) 1537–1539.
[۲] S. Ramachandran et al.; "High-energy (nanojoule) femtosecond pulse delivery with record dispersion higher-order mode fiber"; *Opt. Lett.* **30**, No. 23 (2005) 3225.
[۳] G. Humbert et al.; "Hollow core photonic crystal fibers for beam delivery"; *Opt. Express* **12**, No. 8 (2004) 1477–1484.
[٤] P. S. Light, F. Couny, Y. Y. Wang, N. V. Wheeler, P. J. Roberts, and F. Benabid; "Double photonic bandgap hollow-core photonic crystal fiber"; *Opt. Express* **17**, No. 18 (2009) 16238–16243.
[٥] F. Benabid, J. C. Knight, G. Antonopoulos, and P. S. J. Russell; "Stimulated Raman scattering in hydrogen-filled hollow-core photonic crystal fiber"; *Science* **298**, No. 5592 (2002) 399–402.
[٦] F. Gérôme, R. Jamier, J.-L. Auguste, G. Humbert, and J.-M. Blondy; "Simplified hollow-core photonic crystal fiber"; *Opt. Lett.* **35**, No. 8 (2010) 1157–1159.
[۷] P. Jaworski et al.; "Antiresonant Hollow-Core Fiber-Based Dual Gas Sensor for Detection of Methane and Carbon Dioxide in the Near- and Mid-Infrared Regions"; *Sensors* **20**, No. 14 (2020) 3813.

بررسی جذب نور در ساختارهای لایه ای متشکل از لایه جاذب و بلور های مایع کلستریک و نماتیک

افشاری پور، فائزه[1]؛ شعاری نژاد، سعیده[1]؛ شهشهانی، فاطمه[1]

[1] *گروه فیزیک نظری و نانوفیزیک، دانشکده فیزیک دانشگاه الزهرا ، ده ونک ، تهران*

چکیده

در این پژوهش موضوع جذب نور در لایه های جاذب را با استفاده از ساختار های لایه ای مبتنی بر بلورهای مایع مورد بررسی قرار می دهیم. با توجه به اهمیت مسئله افزایش جذب نور در سلول های خورشیدی به منظور تامین انرژی، این کار پژوهشی گامی در این امر مهم است. بلورهای مایع به عنوان یک محیط ناهمسانگرد خواص منحصر به فردی در برهمکنش با میدان های الکترومغناطیسی از خود نشان می‌دهند. به کمک آرایشی از لایه های بلور مایع در ساختار بلورهای فوتونی، کنترل پذیری فرآیند عبور و بازتاب نور از ساختار بیشتر خواهد بود. در این مقاله میزان جذب در یک ساختار لایه ای ناهمسانگرد، با استفاده از روش ماتریس انتقال محاسبه و بررسی می شود. سپس با استفاده از شبیه سازی عددی، طیف جذب در یک لایه جاذب فرضی در حضور ساختارهای لایه ای شامل بلور مایع کلستریک و نماتیک بدست می آید. بطور کلی، تاثیر استفاده از بلور مایع در میزان جذب در لایه جاذب، به عنوان پیش درآمدی بر پژوهش های جدی تر، مورد مطالعه قرار می گیرد.

واژه های کلیدی: *بلور مایع، بلور فوتونی، لایه جاذب، جذب نور، بلور مایع نماتیک، بلور مایع کلستریک، روش ماتریس انتقال*

Investigating light absorption in layered structures including absorber layer-, Nematic and Cholesteric liquid crystals

Afsharipur, Faezeh[1]; Shoarinejad, Saeedeh[1]; Shahshahani, Fatemeh[1]

[1] *Department of theoretical physics and nanophysics, Faculty of physics, University of Alzahra, Tehran, Iran.*

Abstract

This research investigates light absorption in absorber layers utilizing layered structures formed from liquid crystals. Given the importance of enhancing light absorption in solar cells to provide energy, this work represents a significant step in addressing this issue. Liquid crystals, as anisotropic materials, exhibit unique properties when interacting with electromagnetic fields. By arranging liquid crystal layers within a photonic crystal structure, we can achieve greater control over the processes of light transmission and reflection. In this paper, we calculate and analyze the absorption rate in an anisotropic layered structure using the transfer matrix method. Numerical simulations are then employed to obtain the absorption spectrum in a hypothetical absorber layer incorporating Nematic and Cholesteric liquid crystal layered structures. Overall, this study examines the impact of liquid crystals on the absorption rate within the absorber layer as a preliminary exploration for more in-depth future research.

***Keywords**: liquid crystal, photonic crystal, absorber layer, light absorption, Nematic liquid crystal, Cholesteric liquid crystal, Transfer matrix method*

مقدمه

پژوهش ها در مورد افزایش جذب در سلول های خورشیدی در زمینه های مختلفی صورت می‌گیرد. یکی از این زمینه ها، طراحی پوشش هایی برای کاهش بازتاب از سطح سلول و در نتیجه جذب بیشتر است. با همین رویکرد، و در نظر داشتن خواص اپتیکی بلور های مایع و محیط های بلور فوتونی، تاثیر استفاده از چند ساختار لایه ای بلور مایع بر میزان جذب در لایه جاذب مورد بررسی قرار گرفته است. برای اینکه بتوانیم میزان عبور و بازتاب نور را در ساختارهای لایه ای بدست آوریم نیاز به دانستن روشی برای بررسی نحوه انتشار امواج الکترومغناطیسی در این ساختارهای لایه ای است. روشی که از آن استفاده می کنیم، روش ماتریس انتقال است. بسته به اینکه این لایه ها همسانگرد یا ناهمسانگرد باشد، شیوه بدست آوردن ماتریس انتقال هم متفاوت خواهد بود[1].

در محیط های ناهمسانگردی مانند بلورهای مایع مسئله پیچیده تر است. در محیط های بلور مایع، راستای میانگین جهت گیری مولکولی با معرفی جهت نما(Director) مشخص می شود، و مد های TE و TM منتشر شده در چنین محیط هایی، بسته به اینکه عمود بر این راستا قرار داشته باشند یا نه، دو مد جدید ولی نه مستقل، تشکیل می دهند. بنابراین در چنین محیط های ناهمسانگردی عملا چهار مد انتشار غیر مستقل داریم. در اینصورت باید با استفاده از ماتریس های 4×4 به ماتریس انتقال برسیم. البته در صورتی که تابش نور را عمودی در نظر گرفته و تنها یک مد انتشار را بررسی کنیم، عملا محاسبات را برای محیط های ناهمسانگرد، به ماتریس های 2×2 کاهش داده ایم[1].

ماتریس انتقال در محیط های ناهمسانگرد

در محیط های ناهمسانگرد، با وجود جهت گیری مولکول ها در یک راستای مشخص، تنها یک ضریب شکست را نمی‌توان به ماده ناهمسانگرد نسبت داد. امواج الکترومغناطیسی سرعت انتشار متفاوتی در راستاهای عمود و موازی با جهت نمای ماده ناهمسانگرد دارند[2]. بنابراین برای این‌گونه مواد ضریب شکست عادی، n_o و یک ضریب شکست غیرعادی، n_e تعریف می‌شود . [2] هم چنین، برای مشخص کردن تانسور دی الکتریک باید توجه کرد که جهت گیری محورهای بلور ناهمسانگرد در فضا مهم هستند. تانسور دی الکتریک یک بلور ناهمسانگرد با رابطه (1) داده می شود [1]:

$$\tilde{\epsilon} = A\begin{pmatrix}\epsilon_1 & 0 & 0\\ 0 & \epsilon_2 & 0\\ 0 & 0 & \epsilon_3\end{pmatrix}A^{-1} \qquad (1)$$

رویکرد ما برای رسیدن به ماتریس انتقال، یافتن دامنه میدان های الکتریکی و مغناطیسی قبل و بعد از عبور از محیط ناهمسانگرد است. با داشتن تانسور دی الکتریک و جای گذاری آن در معادله انتشار و درنظر گرفتن شرایط پیوستگی، به معادله (2) می رسیم:

$$\begin{pmatrix}A_1(n-1)\\ A_2(n-1)\\ A_3(n-1)\\ A_4(n-1)\end{pmatrix} = D^{-1}(n-1)D(n)P(n)\begin{pmatrix}A_1(n)\\ A_2(n)\\ A_3(n)\\ A_4(n)\end{pmatrix} \qquad (2)$$

در رابطه (2)، $A(n)$ ها دامنه میدان الکتریکی در هر لایه هستند که پس از حل معادله انتشار، هرکدام 4 مقدار در هر لایه خواهند داشت. ماتریس های $D(n)$ و $P(n)$ به ترتیب ماتریس های دینامیک و انتشار نامیده میشوند[1]. نهایتا از رابطه (3) می توان ماتریس انتقال از لایه *n-1* ام به لایه n ام را بدست آورد:

$$T_{n-1,n} = D^{-1}(n-1)D(n)P(n) \qquad (3)$$

با داشتن ماتریس انتقال، می توانیم میزان عبور نور از ساختار لایه ای در هر قطبش را با استفاده از ماتریس جونز بدست آوریم[3]:

$$J = \begin{pmatrix}t_{xx} & t_{xy}\\ t_{yx} & t_{yy}\end{pmatrix} \qquad (4)$$

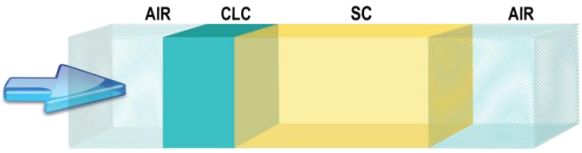
$$t_{xx} = \frac{T(3,3)}{T(1,1)T(3,3)-T(1,3)T(3,1)} \qquad (5)$$

سایر مولفه های ماتریس جونز نیز با استفاده از مولفه های ماتریس انتقال قابل محاسبه خواهند بود.

بررسی ساختار های لایه ای مختلف

ابتدا جذب نور را در یک ساختار ساده شامل تنها یک لایه جاذب شبیه‌سازی و سپس با اضافه کردن لایه‌هایی از بلور مایع، طیف جذب را محاسبه می کنیم و نهایتا با مقایسه نتایج به تحلیل آنها می پردازیم. لازم به ذکر است که برای این ساختارها، تابش نور عمودی را در نظر می گیریم که دارای مد TE است.

مطابق شکل1، به ساختار ساده لایه جاذب، یک لایه بلور مایع کلستریک (Cholesteric) اضافه می کنیم[2]. طوری که نور فرودی به بلور مایع بتابد. این ساختار را ساختار CLC-SC می-نامیم. در این شکل لایه جاذب، به عنوان ماده‌ای برای سلول خورشیدی و با علامت اختصاری SC مشخص شده است. برای سهولت در محاسبات، لایه جاذب را همسانگرد و بدون پاشندگی فرض می کنیم.

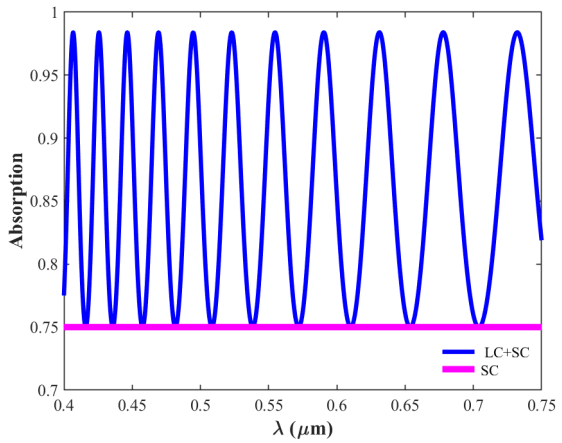


شکل1 : نمایی از ساختاری شامل لایه جاذب و یک لایه بلور مایع کلستریک (ساختار CLC-SC).

ضخامت لایه جاذب $200\mu m$ و ضریب شکست آن $n=3+0.01i$ در نظر گرفته شده است. مشخصات لایه کلستریک در جدول1 آمده است. نتیجه محاسبات در شکل 2 قابل مشاهده است.

جدول1 : مشخصات لایه بلور مایع کلستریک.

گام بلور مایع کلستریک، یک لایه	ضخامت، t، (میکرومتر)	n_e	n_o
۳۰	۴	۱/۵۵	۱/۵

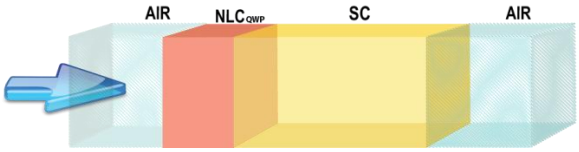


شکل2 : طیف جذبی ساختار مرکب شامل لایه جاذب و یک لایه بلور مایع کلستریک در مقایسه با لایه جاذب تنها.

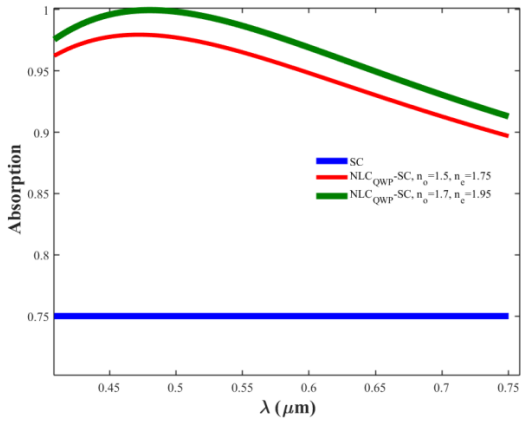
همانطور که از شکل 2 مشاهده می‌شود، در ساختار CLC-SC، به دلیل ضخامت کم تیغه بلور مایع در مقایسه با ضخامت لایه جاذب، وابستگی طیف جذبی به طول موج، ظاهر شده و شکل تناوبی آن حاصل از تداخل امواج رفت و برگشت، مشابه آنچه که در کاواک فابری–پرو رخ می‌دهد، قابل توجه است. بلور مایع کلستریک ذاتا یک بلور فوتونی یک بعدی است[4]. همانگونه که می دانیم امتداد جهت نمای این نوع بلورهای مایع بطور تناوبی در یک ساختار مارپیچی تغییر جهت می دهد که دوره تناوب این پیچش، گام بلور مایع کلستریک نامیده می شود[2] . بنابراین، بلور مایع کلستریک عملا مانند چندین لایه با ضریب شکست های مختلف عمل می کند. برای مقایسه، طیف جذبی ساختار یک لایه جاذب تنها با رنگ سرخابی نمایش داده شده است. این نتایج نشان می‌دهد که با اضافه کردن یک لایه بلور مایع کلستریک، میزان جذب از مقدار 0.75 به مقدار متوسط 0.85 در بازه‌ی طول موجی 0.4–0.75 نانومتر، افزایش می‌یابد که ناشی از تغییرات تناوبی ضریب شکست در بلور مایع کلستریک است که سبب ایجاد بازتاب‌های متوالی نور می‌شود.

ساختار بعدی را طوری در نظر می گیریم که از یک لایه جاذب و یک لایه ربع موج از بلور مایع نماتیک (Nematic) که ساده ترین فاز این مواد هستند، تشکیل شده باشد[2]. طرح ساده‌ای از این ساختار در شکل3 نمایش داده شده است. ضخامت لایه ربع موج

به صورت $t=\lambda_0/(4\,n_o)$ در محاسبات وارد می‌شود. λ_0 طول موج مرکزی در طیف مرئی و n_o ضریب شکست عادی بلور است. این ساختار را NLCQWP-SC می‌نامیم. با انجام محاسبات به روش ماتریس انتقال و با استفاده از حل عددی طیف جذبی را برای چنین ساختاری بدست می آوریم. نتایج در شکل 4 نشان داده شده است.



شکل3 : طرح ساده‌ای از ساختار مرکب شامل لایه جاذب و یک لایه ربع موج از بلور مایع نماتیک (NLCQWP-SC).



شکل4 : طیف جذبی ساختارNLCQWP-SC

در شکل4، طیف جذب ساختار NLCQWP-SC به ازای دو مقدار متفاوت ضریب شکست عادی و غیرعادی رسم شده است. همچنین، برای مقایسه طیف جذبی ساختار ساده تک لایه جاذب SC را نیز رسم کرده ایم.

نمودار آبی رنگ مربوط به طیف جذبی ساختار ساده تک لایه، نمودار قرمز مربوط به طیف جذبی ساختار NLCQWP-SC با ضرایب شکست n_e =1.75 و n_o=1.5 و نمودار به رنگ سبز مربوط به ساختار فوق با ضرایب شکست n_e =1.95 و n_o=1.7 است. همانطور که شکل 4 نشان می‌دهد، با اضافه کردن لایه ربع موج، طیف جذبی افزایش قابل ملاحظه ای پیدا کرده است و از مقدار 0.75 در تک لایه جاذب، به مقدار میانگین 0.95 در بازه‌ی طول موجی 0.4–0.75 نانومتر افزایش یافته است. علت افزایش میزان جذب به عملکرد لایه ربع موج در مقابل انتشار نور و تداخل بس پرتویی نسبت داده می شود که بر اساس آن، برای طول موج های نزدیک به طول موج مرکزی، عبور به بیشترین مقدار خود می‌رسد.

نتیجه گیری

در این پژوهش، طیف جذبی دو ساختار شامل بلور های مایع کلستریک و نماتیک، در تابش عمودی و قطبش TE با استفاده از روش ماتریس انتقال و شبیه سازی عددی بدست آمد و تغییرات کلی در میزان جذب در لایه جاذب به ازای هر کدام از این ساختارها بررسی شد.در ساختار CLC-SC تقریبا 10 درصد افزایش میانگین جذب نسبت به لایه جاذب تنها را در بازه‌ی طول موجی 0.4–0.75 نانومتر شاهد بودیم. و در ساختار NLCQWP-SC افزایش 20 درصدی حاصل شد. نتایج بدست آمده، علاوه بر اهمیت کاربردی در حوزه سلول های خورشیدی، می تواند به عنوان مقدمه ای بر پژوهش های نظری پیچیده تر در این زمینه مورد توجه قرار گیرد.

مرجع‌ها

[1] Yeh, Pochi. "*Electromagnetic Propagation in Birefringent Layered Media*." Journal of the Optical Society of America **69** (May 1, 1979).

[2] Iam-Choon Khoo. "*Liquid Crystal Optics and Electro-Optics*." In Liquid Crystals, 124–56. John Wiley & Sons, Ltd, (2007).

[3] Cos, J, J Ferre-Borrull, J Pallares, and L F Marsal. "*Tunable Fabry–Pérot Filter Based on One-Dimensional Photonic Crystals with Liquid Crystal Components*." Optics Communications 282, no. **6** (2009).

[4] Timofeev, Ivan, Vasily Arkhipkin, Stepan Vetrov, Victor Zyryanov, and Wei Lee. "*Enhanced Light Absorption with a Cholesteric Liquid Crystal Layer*." Optical Materials Express **3** (March 26, 2013)

محاسبه پارامتر ساختار ضریب شکست جو بر پایه تابع همبستگی سرعت باد

بنام، خسرو[1*]؛ خوشبخت، طاهره[1]

۱-گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، صندوق پستی ۱۱۵، شهرکرد، ایران

چکیده

پارامتر ساختار ضریب شکست C_n^2 یکی از کمیت‌های کلیدی در توصیف آشفتگی جوی و بررسی اثرات آن بر انتشار امواج نوری در جو است. روش‌های مختلفی برای برآورد این پارامتر ارائه شده است که هر یک بر پایه داده‌های هواشناسی و مدل‌های فیزیکی متفاوتی استوار هستند. در این پژوهش، ابتدا داده‌های تجربی سرعت باد در ارتفاعات مختلف از ایستگاه‌های هواشناسی زمینی و سامانه‌های ماهواره‌ای استخراج شده است. سپس یک مدل تئوری برای سرعت باد پیش‌بینی شده است و در ادامه با استفاده از این مدل، تابع همبستگی سرعت باد حساب شده است. با بهره‌گیری از تابع همبستگی سرعت باد و رابطه نیمه‌تجربی هافناگل–والی، پارامتر ساختار ضریب شکست C_n^2 برای ساعت‌های مختلف شبانه‌روز محاسبه شده است. در نهایت، با تعریف یک مدل میانگین برای سرعت باد و محاسبه تابع همبستگی سرعت باد متناظر با آن، مقدار متوسط C_n^2 در طول یک شبانه‌روز تعیین شده است.

واژه‌های کلیدی : *پارامتر ساختار ضریب شکست C_n^2 ، آشفتگی جوی، تابع همبستگی سرعت باد، مدل هافناگل–والی*

Calculation of the atmospheric refractive-index structure parameter based on the wind speed correlation function

Benam, Khosrow[1]; Khoshbakht, Tahereh[1]

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Shahrekord University, Shahrekord, P. O. Box: 115, Iran

Abstract: *The refractive-index structure parameter C_n^2 is a key quantity used to characterize atmospheric turbulence and assess its impact on optical wave propagation in the atmosphere. Various methods have been proposed for estimating this parameter, each based on different meteorological data and physical models. In this study, experimental wind-speed data at various altitudes were first obtained from ground-based meteorological stations and satellite-based observations. Then, a theoretical model was developed for the wind speed, and subsequently, the wind-speed correlation function was derived from this model. Using the wind speed correlation function and the Hufnagel–Valley semi-empirical model, values of the refractive index structure parameter C_n^2 were calculated for different hours of the day. Finally, by defining an average wind speed model and computing the corresponding wind speed correlation function, the daily mean value of C_n^2 was determined over a 24-hour period.*

Keywords: *The refractive-index structure parameter C_n^2, atmospheric turbulence, Hufnagel–Valley model, wind speed correlation function.*

PACS No. 92

مقدمه

جو زمین که اکثرا از نیتروژن و اکسیژن تشکیل شده است، نسبت به نور مرئی شفاف است. اما از آنجا که هوا خلا نیست بلکه ماده است، سرعت نور در آن کاهش می‌یابد. ضریب شکست هوا به دما بستگی دارد، که خود با چگالی هوا در ارتباط است. تغییرات جزئی دما و چگالی هوا، باعث نوسانات محلی و تغییرات فازی در مسیر پرتو نوری می‌شوند. همچنین این نوسانات، باعث تغییرات تصادفی در سرعت باد یا همان گردابه‌های موجود در جو می‌شوند که ما آن را به صورت حرکت متلاطم یا آشفتگی در جو مشاهده می‌کنیم. اثر تجمعی این تغییرات، می‌تواند ناهمگنی‌های قابل توجه در پروفایل شاخص ضریب شکست جو ایجاد کند. آشفتگی جوی تأثیرات قابل توجهی بر عملکرد سیستم‌های ارتباطات نوری فضای

آزاد دارد[۱]؛ به‌ویژه نوسانات زمانی و مکانی شدت نور در دهانه دریافت‌کننده‌ها که منجر به افزایش و کاهش توان، تغییر زاویه ورود پرتو و کاهش انسجام مکانی می‌شود. پارامتر ساختاری ضریب شکست، C_n^2،[۱] یک شاخص آماری برای سنجش شدت آشفتگی در جو است که وابستگی شدیدی به ارتفاع عمودی دارد[۷-۲]. بنابراین، برای درک اثرات آشفتگی جوی، باید پروفایل C_n^2 در طول مسیر انتشار نوری در جو مشخص شود. در صورت در دسترس بودن امکانات تجربی، پارامتر C_n^2 را می توان در هر لحظه به صورت تجربی اندازه‌گیری کرد، اما به دلیل وضعیت خاص جغرافیایی هر منطقه، نصب فرستنده و گیرنده وسایل اندازه‌گیری این پارامتر در هر لحظه و در هر مکان امکان‌پذیر نیست. بنابراین منطقی‌ترین راه این است که با استفاده از داده‌های تجربی یا نیمه تجربی برای هر منطقه جغرافیایی، یک مدل تقریبی تئوری طراحی کرد.

یکی از روش‌های مهم محاسبه کمیت C_n^2، استفاده از داده‌های هواشناسی است[۷-۲]. مدل‌های زیادی از قبیل هافناگل‌والی،[۲] آندریاس- فیلیپس[۳] و سایر مدل‌های مشابه، این کمیت را به صورت تابعی از ارتفاع از سطح زمین و همچنین تابع همبستگی سرعت باد حساب کرده‌اند[۱۱-۸]. یکی از پارامترهای مهم در این مدل‌ها، تابع همبستگی سرعت باد است. در اکثر این مدل‌ها، این کمیت را ثابت در نظر می گیرند در حالی که این کمیت بستگی به ارتفاع از سطح زمین دارد و همچنین تابع شرایط زمانی و مکانی هر منطقه جغرافیایی است.

در این کار پژوهشی، ابتدا با استفاده از داده‌های تجربی موجود در ایستگاه‌های هواشناسی زمینی و ماهواره‌ای، برای هر ساعت از شبانه‌روز سوم فوریه ۲۰۲۵ (۱۵ بهمن۱۴۰۳)، پروفایل سرعت باد نسبت به ارتفاع از سطح زمین برای نقطه‌ای در شهرکرد ایران تشکیل شده است و سپس تا ارتفاع حدود سی و چهار کیلومتری سطح زمین، یک مدل نظری برای تابع سرعت باد بر حسب ارتفاع از سطح زمین برای هر ساعت از شبانه‌روز تعریف شده است. ضرایب مدل مذکور، از تطابق با داده‌های تجربی محاسبه شده‌اند. سپس با استفاده از مدل نظری سرعت باد، تابع همبستگی سرعت باد در هر ساعت حساب شده است. در ادامه، با استفاده از مدل هافناگل‌والی (HV)، پارامترساختار ضریب شکست C_n^2 که معیار سنجش آشفتگی در محیط است، در ساعت‌های مختلف شبانه‌روز محاسبه شده است. در انتها، با استفاده از میانگین داده‌های تجربی سرعت باد در طول شبانه‌روز مذکور، یک مدل جامع‌تر برای سرعت باد طراحی شده است و در نهایت با محاسبه تابع همبستگی سرعت باد متناظر با آن، متوسط کمیت C_n^2 در طول شبانه‌روز مذکور محاسبه شده است. در قسمت بعدی این مقاله، به ترتیب مبانی نظری، روش کار، نتیجه‌گیری و مراجع آورده شده است.

مبانی نظری

در این قسمت، ابتدا روابط تئوری مدل‌های مورد استفاده به صورت خلاصه بیان می شوند. طبق نظریه کولموگروف، تانسور ساختاری سرعت D_{ij} به صورت زیر تعریف می‌شود[۱۰،۱۲]:

$$D_{ij} = \left\langle \left[V_i(\vec{r}_1+\vec{r}) - V_i(\vec{r}_1)\right]\left[V_j(\vec{r}_1+\vec{r}) - V_j(\vec{r}_1)\right] \right\rangle \quad (۱)$$

که در آن V_i و V_j مولفه‌های مختلف بردار سرعت در دو نقطه هستند. اگر r خیلی کوچک باشد و در ناحیه داخلی آشفتگی باشد، این تابع ساختار از قانون معروف $\frac{2}{3}$ پیروی می کند.

$$D_V = C_n^2\, r^{\frac{2}{3}} \quad (۲)$$

که در آن، کمیت C_n^2 پارامتر ساختار ضریب شکست است و معیاری برای اندازه‌گیری شدت آشفتگی در جو است. واحد این کمیت $m^{-\frac{2}{3}}$ است. اندازه‌گیری‌های تجربی و نظری زیادی برای پروفایل C_n^2 انجام شده است. یکی از مدل‌هایی که این کمیت را به صورت نیمه تجربی محاسبه کرده است، مدل هافناگل والی است که به صورت زیر است[۸].

$$C_n^2(h) = 2.2\times10^{-23} h^{10} e^{-h}\left(\frac{W}{27}\right)^2 + 10^{-16} e^{-\frac{2}{3}h} \quad (۳)$$

در رابطه فوق، h ارتفاع از سطح دریا بر حسب کیلومتر است، W تابع همبستگی سرعت باد است[۱۰].

[۱] refractive-index structure parameter

[۲] Hufnagel – Valley

[۳] Andreas–Phillips

$$W=\left[\left(\frac{1}{h_i-h_f}\right)\int_{h_i}^{h_f}V^2(h)dh\right]^{\frac{1}{2}} \quad (٤)$$

عبارت $V(h)$ تابع سرعت باد بر حسب ارتفاع است، h ارتفاع از سطح دریا است و مقادیر h_i و h_f به ترتیب ابتدا و انتهای بازه اندازه‌گیری سرعت باد هستند و بر حسب کیلومتر بیان می شوند. مدل زیر برای سرعت باد بر حسب ارتفاع تعریف شده است.

$$V(h)=A_1 exp\left[-\left(\frac{h-A_2}{A_3}\right)^2\right]+A_4 exp\left[-\left(\frac{h-A_5}{A_6}\right)^2\right] \quad (٥)$$

ضرایب A_1 تا A_6 از برازش با داده‌های تجربی محاسبه می شوند.

روش کار

در این قسمت، نتایج محاسبات مدل نظری سرعت باد و همچنین پارامتر C_n^2 برای روز سوم فوریه ۲۰۲۵ (۱۵ بهمن ۱٤۰۳) در نقطه‌ای از شهرکرد ایران آورده شده است. ابتدا برای هر ساعت از شبانه روز مذکور، داده های تجربی سرعت باد از سطح زمین تا ارتفاع حدود ۳٤ کیلومتری سطح زمین از ایستگاههای زمینی و ماهواره‌ای استخراج شده است[۱۳]. در ادامه، از برازش کردن رابطه (٥) با داده‌های تجربی، ضرایب A_1 تا A_6 مدل نظری سرعت باد برای هر ساعت از شبانه‌روز مذکور، حساب شده است. به عنوان مثال، مقدار این ضرایب و خطای[٤] RMSE برای ساعت ۰۱:۰۰ بامداد در جدول (۱) آمده است. نمودار سرعت باد بر حسب ارتفاع با استفاده از داده‌های تجربی و همچنین مدل نظری سرعت باد در شکل (۱) برای ساعت ۰۱ بامداد رسم شده است. نمودار نشان می دهد که مدل نظری سرعت باد، تطابق بالایی با داده های تجربی دارد. اندازه خطای RMSE هم نسبت به داده‌های سرعت باد مقداری منطقی است.

در ادامه، با استفاده از رابطه (٤)، تابع همبستگی سرعت باد محاسبه شده است. اکثر مدل‌ها این پارامتر را برای همه زمان‌ها و مکان‌ها ثابت در نظر می گیرند، اما از آن جایی که سرعت باد در هر ساعت و در هر مکان متفاوت است، با توجه به رابطه (٤)، نشان داده شد که مقدار آن برای هر ساعت از شبانه روز متغیر است و بستگی به سرعت باد در هر مکان خاص دارد. سرانجام با جایگذاری رابطه (٤) در (۳)، پارامتر C_n^2 برای ساعت ۰۱ بامداد حساب شده است. نمودار لگاریتمی C_n^2 بر حسب ارتفاع در شکل (۲) رسم شده است. نمودار نشان می دهد که این پارامتر در نزدیکی سطح زمین بیشترین مقدار را دارد و با افزایش ارتفاع از سطح زمین مقدار آن کاهش می یابد.

در قسمت پایانی این کار پژوهشی، به جای اینکه C_n^2 را در هر ساعت از شبانه‌روز جداگانه حساب کنیم، مقدار متوسط C_n^2 در طول شبانه‌روز مذکور حساب شده است. ابتدا متوسط داده‌های تجربی سرعت باد در طول ۲٤ ساعت شبانه روز محاسبه شده است و سپس یک مدل نظری مطابق رابطه (٥) با آنها برازش شده است و مقدار ضرایب A_1 تا A_6 محاسبه و در جدول (۱) یادداشت شده است. در ادامه، با استفاده از رابطه (٤)، تابع همبستگی سرعت باد متناظر با مدل میانگین سرعت باد حساب شده است. در نهایت با قرار دادن آن در رابطه (۳)، پارامتر C_n^2 متوسط محاسبه شده است. نمودار سرعت باد بر حسب ارتفاع با استفاده از داده‌های متوسط تجربی و همچنین مدل نظری متوسط در شکل (۳) رسم شده است. نمودار نشان می دهد که مدل نظری همگرایی بالایی با داده های تجربی متوسط دارد. همچنین نمودار لگاریتمی C_n^2 متوسط بر حسب ارتفاع در شکل (۲) رسم شده است. نمودار نشان می دهد که شدت آشفتگی جوی در لایه‌های مختلف جو یکنواخت نیست. بیشترین مقادیر در نزدیکی سطح زمین مشاهده می‌شود. با افزایش ارتفاع، مقدار آن به طور کلی کاهش می‌یابد که بیانگر کاهش شدت آشفتگی جوی در لایه‌های بالاتر است. این نتایج نشان می‌دهد که لایه‌های پایینی جو بیشترین تأثیر را بر کیفیت انتشار امواج نوری و عملکرد سامانه‌های اپتیکی دارند. در صورتی که در یک منطقه خاص امکان اندازه‌گیری تجربی C_n^2 نباشد، برای اینکه داده‌های جامع‌تری برای C_n^2 به دست آوریم، بهتر است که این محاسبات را در طول شبانه‌روزهای بیشتری انجام دهیم و سپس به همین شیوه C_n^2 میانگین را به صورت تقریبی محاسبه کنیم.

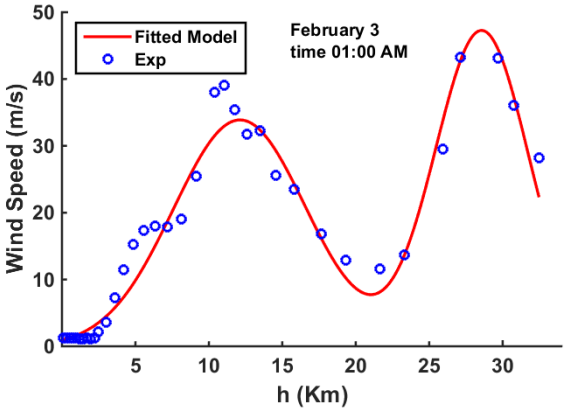
جدول (۱): مقدار ضرایب A_1 تا A_6 و مقدار خطای RMSE برای ساعت ۰۱ بامداد و همچنین مقدار متوسط سرعت (Averaged) برای تمام شبانه‌روز

زمان	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	RMSE
01:00 AM	47.23	28.58	4.50	33.88	12.11	6.40	2.63
Averaged	47.86	10.78	5.42	45.63	29.23	6.00	2.33

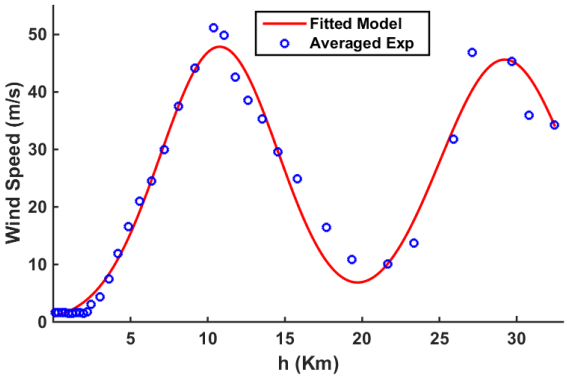
[٤] Root Mean Square Error

نتیجه گیری

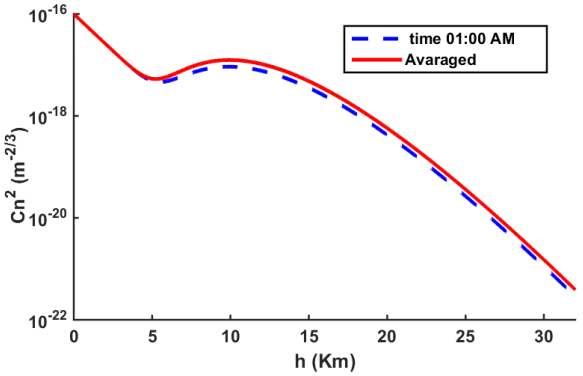
در این کار پژوهشی، کمیت C_n^2 با استفاده از اندازه‌گیری سرعت باد در ارتفاعات مختلف برای روز سوم فوریه ۲۰۲۵ محاسبه شده است. سپس یک مدل تئوری برای سرعت باد پیش‌بینی شده است. نشان داده شده است که مدل تعریف شده برای سرعت باد با داده‌های تجربی تطابق بالایی دارد. در ادامه با استفاده از مدل تئوری سرعت باد، تابع همبستگی سرعت باد حساب شده است، سپس با استفاده از این کمیت و همچنین با به کار بردن رابطه نیمه تجربی هافناگل- والی، C_n^2 در طول بیست و چهار ساعت شبانه روز حساب شده است. نشان داده شد که مقدار این کمیت در سطح زمین بیشترین مقدار را دارد و با افزایش ارتفاع، مقدار آن به تدریج کاهش می یابد. سرانجام با میانگین گیری داده‌های تجربی سرعت باد در طول شبانه‌روز مذکور، یک مدل متوسط برای سرعت باد به دست آورده شده است و در پایان با استفاده از این مدل متوسط، کمیت C_n^2 به طور متوسط برای یک شبانه‌روز محاسبه شده است. مقدار این کمیت، توزیع شدت آشفتگی جوی را در لایه‌های مختلف جو نشان می‌دهد. نمودار نشان می دهد، میزان آشفتگی در لایه‌های پایین جو بیشتر است و در نتیجه بیشترین اختلال به سامانه‌های ارتباطی و نوری در این ناحیه وارد می شود.



شکل(۱): نمودار سرعت باد بر حسب ارتفاع برای مدل نظری و داده‌های تجربی در ساعت ۰۱ بامداد



شکل(۲): نمودار سرعت باد بر حسب ارتفاع برای مدل نظری میانگین و داده‌های تجربی میانگین در طول یک شبانه‌روز



شکل(۳): نمودار پارامتر C_n^2 بر حسب ارتفاع برای ساعت ۰۱ بامداد و همچنین مدل میانگین برای یک شبانه‌روز

مراجع

[1] E. Leitgeb et al., J. Opt. Fiber Commun. Rep 2 (2005).
[2] M. Sivasligil et al., Appl. Opt. 52 (2013) 3127-3133.
[3] M. Uysal et al., Wireless Commun., IEEE Trans 5 (2006) 1229-1233.
[4] B. Li et al., Optik 126, (2015) 2726-2730.
[5] Y. Han, X. Wu, T. Luo J. Opt. Soc. Am. A 37 (2020) 995-1001.
[6] N. Vedrenne et al., Opt. Lett 32 (2007) 2659-2661.
[7] C. Bi et al., J. Opt. Soc. Am. A 37 (2020) 1785-1794.
[8] G. C. Valley, Appl. Opt 19 (1980) 574-577.
[9] P. B. Ulrich, WJSA/MA/TN-88-013, Arlington, VA (1988).
[10] R. K. Tyson, B. W. Frazier, Principles of Adaptive Optics, 5th ed., CRC Press, Boca Raton, FL (2022).
[11] A. S. Gurvich et al., Laser Radiation in Turbulent Atmo-sphere, Science, Moscow (1977).
[12] A. Kolmogorov, Classic Papers on Statistical Theory, Wiley (Interscience), New York (1961).
[13] European Centre for Medium-Range Weather Forecasts (ECMWF), Copernicus Climate Data Store(CDS),www.cds.climate.copernicus.eu.

بررسی اثر اتلاف غیرفعال و جذب حالت برانگیخته بر عملکرد لیزر فیبری آلاییده به اربیوم کلیدزنی Q

نظری ، علی‌رضا[۱] ؛ سیاهوشی، ناصر[۱]

[۱] گروه فوتونیک، دانشکده علوم پایه شهید فخری‌زاده، دانشگاه جامع امام حسین، تهران، ایران؛

چکیده

در این پژوهش، نقش اتلاف غیرفعال کاواک و جذب حالت برانگیخته (ESA) در عملکرد لیزر فیبری آلاییده به اربیوم کلیدزنی Q فعال به‌صورت عددی بررسی شده است. مدل‌سازی بر پایه روش امواج رونده انجام شده و محیط فعال اربیوم به‌منظور لحاظ‌کردن اثر ESA با یک مدل پنج‌ترازه توصیف شده است. ابتدا، وابستگی انرژی پالس خروجی به اتلاف غیرفعال بررسی شد. سپس دینامیک زمانی پالس، شامل تأخیر تشکیل، افت دامنه توان و تغییر پوش زمانی، برای دو مقدار اتلاف اضافی با نتایج تجربی مقایسه گردید. نتایج نشان می‌دهد که افزایش اتلاف غیرفعال نه‌تنها انرژی خروجی را کاهش می‌دهد، بلکه موجب تغییر در دینامیک تشکیل پالس نیز می‌شود. تحلیل انرژی اولیه ذخیره شده در فیبر نیز نشان داد که ESA یکی از مسیرهای اصلی مصرف انرژی ذخیره‌شده در فیبر است. مقایسه‌ی خروجی مدل شامل ESA با حالت بدون آن نشان داد که نادیده گرفتن این پدیده به پیش‌بینی غیرواقعی توان قله و شکل زمانی پالس منجر می‌شود. بنابراین، لحاظ‌کردن ESA برای مدل‌سازی دقیق لیزرهای فیبری کیوسوئیچ اربیوم ضروری است.

واژه های کلیدی: *لیزر فیبری آلاییده به اربیوم، کلیدزنی Q فعال، جذب از حالت برانگیخته، اتلاف غیرفعال کاواک، مدل پنج‌ترازی*

Investigation of the Effects of Passive Loss and Excited-State Absorption on the Performance of a Q-Switched Erbium-Doped Fiber Laser

Nazari, Alireza[1]; Siahvashi, Naser[1]

[1] Department of Photonics, Shahid Fakhrizadeh Faculty of Basic Sciences, Imam Hossein University, Tehran, Iran؛

Abstract

In this study, the roles of cavity passive loss and excited-state absorption (ESA) on the performance of an actively Q-switched erbium-doped fiber laser are investigated numerically. The modeling is based on a distributed traveling-wave approach, and the erbium gain medium is described by a five-level model to account for the effect of ESA. First, the dependence of the output pulse energy on the passive loss is examined. Then, the temporal dynamics of the pulse—including the build-up delay, peak-power reduction, and temporal envelope variation are compared with experimental results for two additional passive-loss values. The results show that increasing the passive loss not only reduces the output energy but also alters the pulse build-up dynamics. Analysis of the initial energy stored in the fiber further reveals that ESA is one of the main pathways for consuming this stored energy. A comparison between the output of the complete model (including ESA) and that without it shows that neglecting this phenomenon leads to unrealistic predictions of the peak power and the temporal pulse shape. Therefore, accounting for ESA is essential for accurate modeling of actively Q-switched erbium-doped fiber lasers.

***Keywords**: Erbium-doped fiber laser, Active Q-switching, Excited-state absorption, Passive cavity loss, Five-level model*
PACS No 32

مقدمه

لیزرهای فیبری کلیدزنیQ آلاییده به اربیوم به دلیل تولید پالس در ناحیه ۱٫۵۵ میکرومتر، در کاربردهایی مانند مخابرات نوری، حسگرهای فیبری، لیدار و بازتاب‌سنجی نوری در حوزه زمان مورد توجه‌اند[۱]. در این لیزرها، انرژی پالس و توان قله به نحوه ذخیره و تخلیه انرژی در محیط فعال و نیز اتلاف‌های درون‌کاواکی وابسته است. این اتلاف‌ها را می‌توان به دو دسته تقسیم کرد: اتلاف‌های غیرفعال کاواک، ناشی از اجزایی مانند مدولاتور آکستواپتیکی (AOM)، اتصالات و اسپلایس‌ها[۲]؛ و اتلاف‌های ذاتی محیط فعال، که در فیبرهای اربیومی، جذب از حالت برانگیخته(ESA[1]) از مهم‌ترین آن‌هاست[۱]. ESA بخشی از انرژی ذخیره‌شده را پیش از مشارکت در گسیل القایی مصرف کرده و می‌تواند انرژی قابل استخراج و دینامیک زمانی پالس را محدود کند. در بسیاری از مدل‌های شبیه‌سازی، محیط اربیوم به‌صورت یک سامانه شبه‌سه‌ترازه در نظر گرفته می‌شود و اثرESA نادیده گرفته می‌شود؛ در نتیجه، انرژی و توان قله پالس بیش از مقدار واقعی تخمین زده می‌شود. این دو دسته اتلاف مستقل از هم نیستند؛ اتلاف غیرفعال با تغییر دینامیک رفت‌وبرگشت پالس در کاواک، میزان تأثیرگذاری ESA را نیز تعدیل می‌کند. ازاین‌رو، در این مقاله با استفاده از مدل امواج رونده، ابتدا اثر اتلاف غیرفعال بر انرژی و دینامیک زمانی پالس بررسی شده و سپس با تحلیل انرژی اولیه ذخیره شده در فیبر و مقایسه حالت‌های با و بدون ESA، نقش توأمان این دو در محدودشدن عملکرد لیزر بررسی می‌شود.

معادلات و روش محاسباتی

شماتیک چیدمان مورد مطالعه در شکل ۱ آمده است. این چیدمان شامل پمپ ۹۷۶ نانومتر، تقسیم کننده طول موج(WDM)، دو توری براگ فیبری با بازتاب‌های ۳۰٪ و ۹۸٪، ۴ متر فیبر بهره، ۷ متر فیبر غیرفعال تک‌مد، تضعیف‌کننده متغیر(VA)و مدولاتور آکوستواپتیکی (AOM) است. فیبر غیرفعال برای افزایش طول کاواک به حدود ۱۴ متر به‌کار رفته و VA که از تلفات خمشی در بخشی از همین فیبر ایجاد می‌شود، برای اعمال اتلاف درون‌کاواکیِ کنترل‌پذیر استفاده شده است. مدل‌سازی عددی با حل معادلات امواج رونده انجام شد. برای توصیف دقیق محیط فعال اربیوم، از مدل پنج‌ترازه استفاده شد تا اثر ESA نیز لحاظ شود. پارامترهای ساختاری و شرایط کاری سامانه، شامل توان پمپ ۲۰۰ میلی‌وات، نرخ تکرار ۱۰۰ هرتز و مشخصات اجزای کاواک، مطابق داده‌های تجربی تنظیم شدند[۲]. مدل پنج‌ترازه‌ی به‌کار رفته در این پژوهش به‌صورت زیر است:

$$\frac{\partial N_2}{\partial t}=\frac{\sigma_{12}^{s}I_s}{h\nu_s}N_1+\frac{\sigma_{12}^{se}I_{se}}{h\nu_{se}}N_1-\frac{\sigma_{21}^{s}I_s}{h\nu_s}N_2+\frac{N_3}{\tau_{32}}-\frac{\sigma_{21}^{se}I_{se}}{h\nu_{se}}N_2-\frac{\sigma_{24}^{s}I_s}{h\nu_s}N_2-\frac{\sigma_{24}^{se}I_s}{h\nu_{se}}N_2-\frac{N_2}{\tau_{21}} \quad (۱)$$

$$\frac{\partial N_3}{\partial t}=\frac{\sigma_{13}I_p}{h\nu_p}N_1-\frac{\sigma_{31}I_p}{h\nu_p}N_3-\frac{\sigma_{35}I_p}{h\nu_p}N_3+\frac{N_4}{\tau_{43}}-\frac{N_3}{\tau_{32}} \quad (۲)$$

$$\frac{\partial N_4}{\partial t}=\frac{\sigma_{24}^{s}I_s}{h\nu_s}N_2+\frac{\sigma_{24}^{se}I_{se}}{h\nu_{se}}N_2-\frac{N_4}{\tau_{43}}+\frac{N_5}{\tau_{54}} \quad (۳)$$

$$\frac{\partial N_5}{\partial t}=\frac{\sigma_{35}I_p}{h\nu_p}N_3-\frac{N_5}{\tau_{54}} \quad (۴)$$

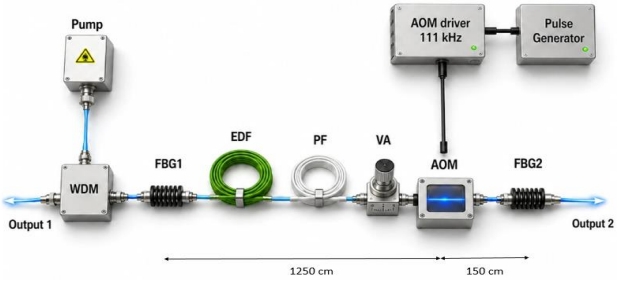
$$N_1+N_2+N_3+N_4+N_5=N_0 \quad (۵)$$

در این معادلات N_i جمعیت تراز i ، N_0 غلظت کل یون های اربیوم، I_s, I_p, I_{se} به ترتیب شدت سیگنال لیزر، پمپ و گسیل خودبه‌خودی تقویت شده، h ثابت پلانک، ν_s, ν_p, ν_{se} به ترتیب فرکانس نسبت داده شده به سیگنال لیزر، پمپ و گسیل خودبه-خودی تقویت شده، σ_{ij} سطح مقطع گذار(جذب یا گسیل) بین تراز های i و j و τ_{ij} زمان واهلش از تراز i به j می‌باشد. همچنین انرژی پالس خروجی را می‌توان با یک رابطه‌ی نمایی برحسب اتلاف غیرفعال کاواک تقریب زد:

$$E_{out}=E_0\exp(-\frac{Loss[dB]}{3.45dB}) \quad (۶)$$

که در این رابطه E_{out} انرژی پالس خروجی، E_0 انرژی در اتلاف صفر و ثابت ۳٫۴۵ نرخ افت نمایی بر حسب دسی بل می‌باشد.

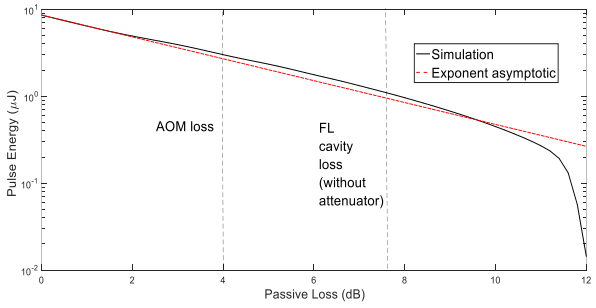
1 Excited-State Absorption



شکل ۱. طرحواره لیزر فیبری کلیدزنی Q با مدولاتور آکستواپتیکی(AOM).

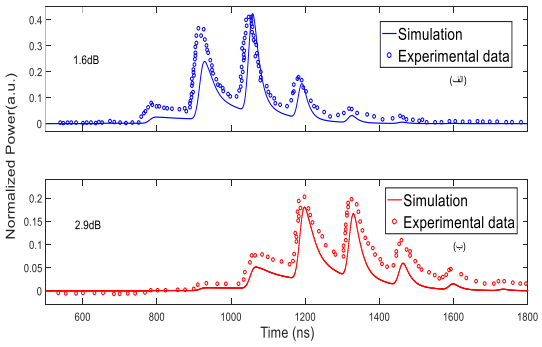
شبیه‌سازی

برای شبیه‌سازی معادلات مبتنی بر مدل موج رونده از نرم‌افزار متلب استفاده شده است. در شکل ۲، وابستگی انرژی پالس خروجی به اتلاف غیرفعال بررسی شده است. منحنی پیوسته، نتایج شبیه‌سازی، خط‌چین مورب روند نمایی، و خط‌چین‌های عمودی به‌ترتیب نشان‌دهنده‌ی تلفات AOM(۴dB) و تلفات ذاتی کاواک (۷,۴dB) هستند. نتایج نشان می‌دهد در تلفات کمتر از۹dB ، انرژی پالس با افزایش اتلاف رفتار نمایی کاهشی دارد که به‌خوبی با رابطه‌ی (۶) مطابقت دارد. مطابق شکل، با کاهش تلفات از مقدار ذاتی کاواک(۷,۴dB) به تلفات AOM (۴dB)، انرژی استخراج‌شده از حدود ۱,۱ میکروژول به بیش از ۳ میکروژول افزایش می‌یابد که گویای اثر مطلوب کاهش اتلاف است. با عبور اتلاف از مرز ۹dB، روند نمایی تغییر کرده و دچار افت شدید بازدهی می‌شود. انطباق قابل‌قبول این روند با نتایج تجربی، صحت عملکرد مدل عددی پیاده‌سازی‌شده را نشان می‌دهد.



شکل ۲. انرژی پالس بر حسب اتلاف غیرفعال کاواک.

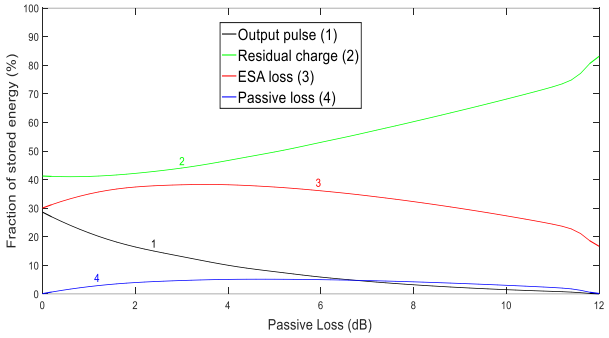
در ادامه، اعتبار مدل از طریق مقایسه تغییرات زمانی پالس‌های شبیه‌سازی‌شده با داده‌های تجربی[۱]، برای دو مقدار اتلاف اضافی القاشده توسط تضعیف‌کننده متغیر (۱,۶dB و۲,۹dB) مورد ارزیابی قرار گرفت. با احتساب افت ذاتی کاواک، این مقادیر متناظر با تلفات کل۹dB و ۱۰,۳dB هستند. مطابق شکل۳، با افزایش اتلاف درون‌کاواکی، پالس خروجی دیرتر تشکیل شده، دامنه توان قله بهنجار شده آن از حدود ۰,۴۲ به ۰,۱۸ کاهش می‌یابد و پوش زمانی آن نیز تغییر می‌کند؛ به‌طوری‌که قله اصلی حدود ۱۳۰ ns دیرتر ظاهر می‌شود. افزایش اتلاف موجب می‌شود سامانه برای غلبه بر آستانه نوسان به تعداد رفت‌وبرگشت‌های بیشتری نیاز داشته باشد. در نتیجه، پیش از تبدیل مؤثر انرژی ذخیره‌شده به پالس خروجی، بخش بزرگ‌تری از آن در قطعات غیرفعال هدر رفته و آزادسازی نهایی انرژی با شدت کمتر و تاخیر بیشتر رخ می‌دهد. همچنین، فاصله زمانی بین زیرپالس‌های مجاور در این پوش چندقله‌ای حدود ۱۳۵ نانوثانیه است که دقیقاً معادل زمان رفت‌وبرگشت فوتون در کاواک ۱۴ متری با فرض ضریب شکست گروهی هسته فیبر(n=۱,۴۵)، می‌باشد.



شکل۳. توان بهنجارشده بر حسب زمان؛ اعتبارسنجی دینامیک زمانی پالس کیوسوئیچ در دو مقدار اتلاف اضافی درون‌کاواکی:(الف) ۱,۶dB، (ب) ۲,۹dB.

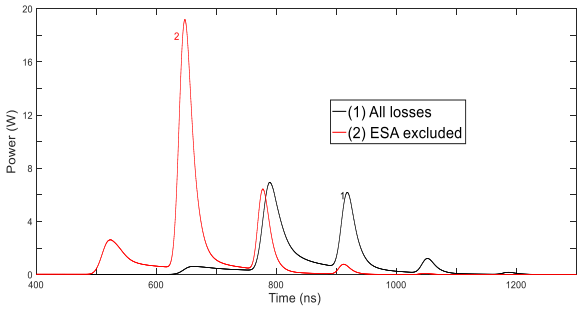
برای بررسی نحوه مصرف انرژی بر حسب اتلاف غیرفعال، انرژی اولیه ذخیره‌شده در فیبر به چهار مسیر اصلی تفکیک شده است. مطابق شکل۴، با افزایش اتلاف غیرفعال، سهم انرژی مفید خروجی در قالب پالس (منحنی ۱) به‌صورت یکنواخت و شدید کاهش می‌یابد؛ به‌طوری‌که سامانه به‌تدریج توانایی خود را در استخراج مؤثر انرژی از محیط فعال از دست می‌دهد. هم‌زمان، سهم انرژی باقی‌مانده در فیبر (منحنی ۲) به‌طور پیوسته افزایش می‌یابد که نشان می‌دهد در تلفات بالا، بخش بزرگ‌تری از وارونگی جمعیت بدون تبدیل مؤثر به پالس باقی می‌ماند. از سوی دیگر، جذب از حالت برانگیخته یاESA (منحنی ۳) در بخش عمده‌ای از بازه‌ی بررسی‌شده یکی از بزرگ‌ترین مسیرهای اتلاف انرژی است و

حتی از سهم انرژی پالس خروجی نیز بزرگ‌تر باقی می‌ماند. این رفتار نشان می‌دهد که ESA صرفاً یک اثر جانبی کوچک نیست، بلکه یک مسیر اصلی اتلاف انرژی در عملکرد لیزر است. روند این مؤلفه نیز معنادار است: در اتلاف‌های کم تا میانی، سهم ESA ابتدا به دلیل افزایش تعداد رفت‌وبرگشت‌های پالس در کاواک، اندکی افزایش می‌یابد و سپس با افزایش بیشتر اتلاف، به‌دلیل کاهش وارونگی جمعیت و در نتیجه کاهش جمعیت تراز برانگیخته‌ی در دسترس برای جذب، کاهش می‌یابد. در مقابل، اتلاف مستقیم غیرفعال (منحنی ۴) با وجود نقش تعیین‌کننده‌اش در افت عملکرد لیزر، از نظر سهم مستقیم در بودجه انرژی، نسبتاً کوچک باقی می‌ماند و در کل بازه، تنها چند درصد از انرژی اولیه را به خود اختصاص می‌دهد.



شکل۴. سهم انرژی (بر حسب درصدی از انرژی ذخیره‌شده) بر حسب اتلاف غیرفعال کاواک.

در ادامه به بررسی اثر چشم‌پوشی از ESA بر رفتار پالس پرداخته شده است. مطابق شکل۵، حذف ESA به خطای محاسباتی قابل‌توجهی منجر می‌شود؛ به‌طوری‌که توان قله از حدود ۷٫۱ وات به حدود ۱۹٫۳ وات ،یعنی نزدیک به ۲٫۷ برابر، افزایش می‌یابد و پالس با تاخیر زمانی کمتری نسبت به حالت واقعی تشکیل می‌گردد. این اختلاف در توان، زمان و پوش پالس نشان می‌دهد که تقریب محیط اربیوم به‌صورت سامانه‌ی شبه‌سه‌ترازه برای پیش‌بینی دقیق رفتار پالس کافی نیست. بنابراین، برای پیش‌بینی دقیق رفتار لیزر و جلوگیری از تخمین‌های غیرواقعی از انرژی خروجی، به‌کارگیری مدل پنج‌ترازه جهت لحاظ‌کردن کامل اثرات ESA در شبیه‌سازی‌ها ضروری است.



شکل۵. توان خروجی بر حسب زمان؛ مقایسه تغییرات زمانی پالس کیوسوئیچ در دو حالت: با لحاظ تمام تلفات کاواک (منحنی ۱) و با حذف فرضی اثر جذب از حالت برانگیخته (منحنی ۲).

نتیجه‌گیری

در این مقاله، اثر اتلاف‌های غیرفعال کاواک و جذب از حالت برانگیخته(ESA) بر عملکرد لیزر فیبری آلاییده به اربیوم بررسی شد. نتایج نشان داد افزایش اتلاف غیرفعال، انرژی پالس را کاهش داده و موجب تأخیر، افت دامنه و تغییر پوش زمانی می‌شود؛ با افزایش اتلاف از ۱٫۶dB به ۲٫۹dB ، قله پالس ۱۳۰ns دیرتر ظاهر شد و دامنه توان قله بهنجار شده از ۰٫۴۲ به ۰٫۱۸ کاهش یافت. مقایسه با داده‌های تجربی مرجع نیز تأیید کرد که مدل عددی روندهای اصلی رفتار لیزر را با دقت قابل قبولی بازتولید می‌کند. تحلیل انرژی اولیه ذخیره‌شده نشان داد که افت بازدهی تنها ناشی از اتلاف مستقیم نیست، بلکه نتیجه بازتوزیع انرژی میان پالس خروجی، انرژی باقی‌مانده در فیبر و مسیرهای اتلافی ذاتی است که در این میان ESA نقش مهمی در محدودکردن انرژی قابل استخراج دارد. همچنین حذف ESA از مدل به پیش‌بینی غیرواقعی توان قله و دینامیک زمانی پالس منجر شد. بنابراین، برای مدل‌سازی قابل اعتماد این لیزرها، استفاده از مدل پنج‌ترازه و لحاظ‌کردن هم‌زمان اتلاف‌های غیرفعال و ESA ضروری است.

مرجع‌ها

[1] Y. O. Barmenkov et al.; "*Influence of Cavity Loss Upon Performance of Q-Switched Erbium-Doped Fiber Laser*"; *IEEE Photon.* Technol. Lett. **25**, No. 10 (2013) 977-980.
[2] S. A. Kolpakov et al.; "*Distributed model for actively Q-switched erbium-doped fiber lasers*"; *Quantum Electron.* **47**, No. 7 (2011) 928-934.
[3] S. Jia, L. Li, M. Ma, S. Zhang, S. Li, and H. Chen; "*Flexible and switchable multi-wavelength erbium-doped fiber laser with reconfigurable spacing via NPR and a tunable Sagnac filter*"; *Optical and Quantum Electronics* **57**, No. 12 (2025).
[4] Y. Barmenkov, J. A. Minguela-Gallardo, L. Morales-Padilla, and P. Muniz-Cánovas; "*Fiber Laser Model Considering Excited-State Absorption and Cooperative Upconversion*"; *Photonics* **12**, No. 10 (2025) 951.

بررسی ویژگی های بلور های مایع نماتیک با ناهسانگردی پذیرفتاری دیامغناطیسی منفی آلائیده با نانو ذارت فرو مغناطیس

صوفی دوش، حسین[۱]؛ پورصمد بناب، جعفر[۱]؛ دژآلود، طاهره[۱]

[۱] گروه مهندسی اپتیک و لیزر، دانشگاه بناب، بناب، آذربایجان شرقی

چکیده

در این تحقیق تغییر خواص بلورهای مایع نماتیک با ناهمسانگردی پذیرفتاری دیامغناطیسی منفی آلائیده شده با نانوذرات فرومغناطیس به صورت نظری و به روش تئوری پیوستاری بررسی شده است. به جهت وجود نانو ذره در داخل سوسپانسیون، بردار جهت‌نمای بلورمایع از همان ابتدای اعمال میدان مغناطیسی چرخش می‌کند (بر خلاف بلورمایع خالص) به دلیل منفی بودن ناهمسانگردی پذیرفتاری دیامغناطیسی بلور مایع، با افزایش میدان خارجی، (بسته به غلظت نانو ذرات داخل بلور مایع) بردار جهت‌نما در نقطهٔ اعمال میدان آستانه به طور ناگهانی، به حالت اولیه یعنی عمود بر میدان خارجی برمی‌گردد.

واژه های کلیدی: ***بلورمایع - ناهمسانگردی پذیرفتاری دیامغناطیسی منفی – نانو ذرات فرومغناطیس***

Investigation of the Properties of Nematic Liquid Crystals with Negative Diamagnetic Susceptibility Anisotropy Doped with Ferromagnetic Nanoparticles

Soufi Doush, Hosein[1]; Poursamad Bonab, Jafar[1]; Dezhaloud, Tahereh[1]
[1] Department of Laser and Optical Engineering, University of Bonab, Bonab

Abstract

In this study, the variation of the properties of nematic liquid crystals with negative diamagnetic susceptibility anisotropy doped with ferromagnetic nanoparticles is theoretically investigated in the framework of continuum theory. Due to the presence of nanoparticles in the suspension, director of the liquid crystal begins to rotate immediately upon the application of an external magnetic field, in contrast to the behavior observed in pure liquid crystals. .due to the negative diamagnetic susceptibility anisotropy of the liquid crystal, at a certain value of the external magnetic field (depending on the concentration of nanoparticles dispersed within the liquid crystal), the director undergoes a sudden reorientation and returns to its initial state, aligning perpendicular to the external magnetic field.

Keywords*: liquid Crystal, Negative diamagnetic anisotropy, ferromagnetic Nanoparticle*

PACS No.81

مقدمه

بلورهای مایع مواد شگفت‌انگیزی هستند. این مواد ویژگی مواد جامد و مایع را توأمان دارا هستند [۱] درمیان بلورهای مایع، نماتیک[1] ها بیشتر از سایر بلورهای مایع مورد بررسی قرارگرفته‌اند. در سه دههٔ اخیر بلورمایع نماتیک را به قصد تغییردادن پارامترهایی نظیر: دمای‌گذار، گذار فردریکز[2]، پارامتر نظم

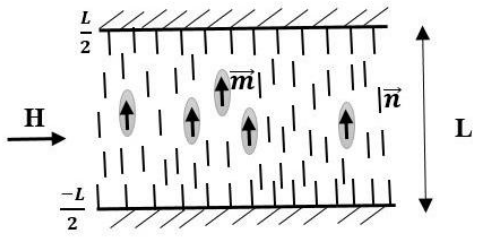
[1] Nematic
[2] Freedericksz transiton

و ... با نانوذرات فرومغناطیس آلائیده کرده و درباره‌اش تحقیق کرده‌اند. نتایج بدست آمده حاکی از تغییرات محسوس این پارامترها بوده‌است. آلائیده کردن بلورهای‌مایع نماتیک با نانوذرات، از سال ۱۹۷۰ به صورت نظری ایده پردازی [۲] و تا به امروز چه به صورت آزمایشگاهی و چه نظری مورد تحقیق پژوهشگران قرارگرفته است. بلورهای مایع از نظر مغناطیسی جزو دیامغناطیس‌ها هستند؛ لذا اعمال میدان مغناطیسی خارجی بر آنها تأثیر چندانی ندارد، مگر آنکه میدان مغناطیسی خارجی آنقدر قوی باشد که به بازچرخش بردار جهت‌نمای[3] بلورمایع منجر شود (مکانیسم دوقطبی[4]) اما چنانچه بلورهای مایع نماتیک را با نانوذرات فرومغناطیس بیالایند، در این‌صورت تأثیرپذیری بلورهای مایع آلائیده از میدان مغناطیسی تغییر محسوسی می‌کند. منشأ این تغییر ناشی از اندرکنش دوقطبی‌های مغناطیسی نانوذرات با میدان خارجی (مکانیسم چهارقطبی[5]) و تأثیر آن بر بافت بلورمایع است. در سال‌های اخیر اکثر قریب به اتفاق مطالعات انجام گرفته بر روی بلورهای‌مایع دارای ناهمسانگردی دیامغناطیسی مثبت[6] متمرکز بوده است؛ مطالعات انگشت شماری برروی بلورهای‌مایع با ناهمسانگردی منفی صورت گرفته است [۳و۴] در این مقاله به صورت تئوری تأثیر نانوذارات فرومغناطیسی بر روی خواص بلورهای مایع نماتیک با ناهمسانگردی پذیرفتاری منفی[7] بررسی شده است.

مدل نظری

از دیرباز آلائیده کردن بلورهای‌مایع نماتیک با نانوذرات فرومغناطیسی [۵و۶] فروالکتریکی [۷] و مولتی فروئیکی [۸] در جهت تغییر خواص بلورمایع نماتیک مورد توجه پژوهشگران بوده است. برای مشاهده‌ی اثرات مغناطیسی در بلورهای‌مایع، به میدان‌های مغناطیسی خارجی بزرگی نیاز داریم، چون که پذیرفتاری مغناطیسی در بلورمایعات بسیار کوچک و از مرتبهٔ 10^{-7} است. برای اینکه تأثیر میدان مغناطیسی در بلورهای مایع محسوس‌تر گردد، آنها را با نانوذرات مغناطیسی می‌آلایند .اندازهٔ نانوذرات آنقدر کوچک است که ساختار بلورمایع را برهم نمی‌زنند، لذا یک بلورمایع آلائیده از نظر ظاهری کاملاً مشابه با بلورمایع خالص است. از سوی دیگر اندازهٔ نانوذرات آنقدری بزرگ است که این ذرات، خواص ذاتی شان (فرومغناطیسی و فروالکتریکی) را حفظ کرده؛ طوری که می‌توانند بلورمایع میزبان را تحت تأثیر قرار بدهند. در این مقاله می‌خواهیم با تئوری پیوستاری[8] که اساسش را دوژن و همکارانش ارائه داده اند؛ خواص بلورمایع دارای ناهمسانگردی مغناطیسی منفی آلائیده شده با نانوذرات فرومغناطیس را بررسی نمائیم.

فرض می‌کنیم بلورمایع آلائیده با نانوذرات فرومغناطیس را در سلولی با ضخامت L قرار داده ایم. فرض می‌شود لنگراندازی[9] بین مولکول‌های بلورمایع و دیوارهای سلول از نوع عمود و سخت و نیز لنگراندازی بین مولکول‌های بلورمایع و نانوذرات از نوع تخت و نرم است. میدان خارجی هم به طور موازی به سلول حاوی سوسپانسیون وارد می شود. (شکل ۱)

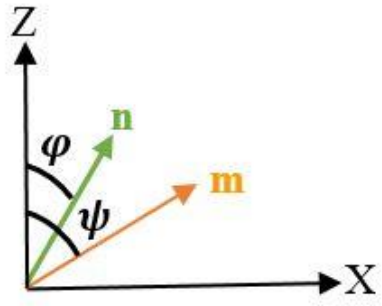


شکل ۱: سلول حاوی سوسپانسیون بلورمایع و نانوذرات فرومغناطیس

با اعمال میدان مغناطیسی خارجی، از آنجایی که ناهمسانگردی پذیرفتاری مغناطیسی بلورمایع منفی است $\Delta\chi \prec 0$ لذا مولکول‌های بلورمایع تمایل دارند که به صورت عمود بر میدان خارجی جهت‌گیری کنند. از طرف دیگر ممان مغناطیسی نانوذرات هم تمایل به هم جهت شدن با میدان خارجی دارد، با اعمال میدان مغناطیسی خارجی، ممان مغناطیسی نانوذره طوری چرخش می‌کند که هم جهت با میدان قرار بگیرد از طرفی دیگر بلورمایع نیز تحت تأثیر مکانسیم چهارقطبی شروع به چرخش کرده اما با توجه به منفی بودن $\Delta\chi$، با اعمال میدان خارجی بیشتر از حالت

[3] director
[4] Dipole mechanism
[5] Quadrupole mechanism
[6] Positive anisotropy of Susceptibility
[7] Negative anisotropy of Susceptibility
[8] *continuum theory*
[9] Anchoring

آستانه، مولکول بلورمایع به حالت عمود بر جهت میدان خارجی برمی‌گردد. (شکل ۲)



شکل ۲: چرخش مولکول بلورمایع و ممان دوقطبی مغناطیسی نانوذره در اثر میدان مغناطیسی خارجی

می‌توان برهم خوردن تعادل جهتی و برهم خوردن ساختار مغناطیسی سوسپانسیون را با کمینه انرژی آزاد توصیف کرد.

$$F = \iiint F_v dv \qquad (۱)$$

$$F_v = F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 \qquad (۲)$$

$$F_1 = \frac{1}{2}\left[K_1\left(\vec{\nabla}\times n\right)^2 + K_2\left(n.\vec{\nabla}\times n\right)^2 + K_3\left(n\times\vec{\nabla}\times n\right)^2\right] \qquad (۳)$$

$$F_2 = -\frac{1}{2}\Delta\chi\left(n.\vec{H}\right)^2 \qquad (۴)$$

$$F_3 = -\vec{M}_s f\left(n.\vec{H}\right) \qquad (۵)$$

$$F_4 = \frac{w}{d}(m.n)^2 \qquad (۶)$$

$$F_5 = \frac{K_B T}{v}(f\ \ln f\ ) \qquad (۷)$$

K_1 ، K_2 ، K_3 ضرایب الاستیک، n بردار جهت‌نما، m ممان دوقطبی مغناطیسی نانوذرات، $\vec{M}_s$ ، مغناطش اشباع ذرات f کسر حجمی ذرات با ممان مغناطیسی $\vec{\mu} = \vec{M}_s v\, m$ ، K_B ثابت بولتزمان، T دما و v حجم یک نانو ذره، $\vec{H}$ میدان مغناطیسی، $\Delta\chi$ ناهمسانگردی پذیرفتاری بلور مایع است. (m با n موازی یا آنتی موازی است.) بعد از کمینه کردن معادلهٔ ۱ و انجام عملیات جبری به معادلاتی می‌رسیم که تحلیل و حل معادلات، نحوه‌ی چرخش مولکول‌های بلورمایع و نانوذرات، تغییر میدان آستانهٔ گذارفردیکز (افزایش/کاهش)، تغییر دمای گذار و تغییر خواص اپتیکی را به دست می‌دهد.

مطالعهٔ پیش رو براساس خواص بلورمایع نماتیک *ZLI-1695* با $\Delta\chi \prec 0$ صورت گرفته است. [۹]

در غیاب میدان مغناطیسی، بلورمایع آلائیده با نانوذرات فرومغناطیس (فرونماتیک) ساختاری یکنواخت دارد و بردار جهت‌نما و ممان دوقطبی مغناطیسی ذرات با همدیگر موازی اند $n \parallel m$. با توجه به شکل ۲ می توان نوشت:

$$n = (\sin\varphi, 0, \cos\varphi)$$

$$m = (\sin\psi, 0, \cos\psi)$$

در اینجا φ و ψ به ترتیب زوایای بردار جهت‌نما و ممان مغناطیسی نانوذره با محور z هستند؛ با انجام برخی تغییر متغیرها و تعریف پارامترهای بدون بعد، معادلهٔ انرژی آزاد به صورت زیر درمی‌آید:

$$F = \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} [\frac{1}{2}\varphi'^2 K(\varphi) + \frac{1}{2}h^2 \sin^2\varphi - bhg\sin\psi - \sigma g\cos^2(\varphi-\psi) + \kappa g\ln g\,]d\zeta$$

(۷)

که در آن $K(\varphi) = \sin^2\varphi + k\cos^2\varphi$ ، $k = \frac{K_3}{K_1}$ ،

$h = HL\sqrt{\frac{|\Delta\chi|}{K_1}}$ ، $b = \frac{M_s \bar{f} L}{\sqrt{K_1|\Delta\chi|}}$ ، $\kappa = \frac{K_B T \bar{f} L^2}{K_1 v}$ ،

$\sigma = \frac{w\bar{f}L^2}{K_1 d}$ ، $\bar{f}\, g = f$ (کسر حجمی نانوذرات در سوسپانسیون) می‌باشد. با کمینه کردن F نسبت به φ و ψ به معادلات جفت‌شدهٔ ۸ و ۹ می رسیم:

$$K(\varphi)\varphi'' + \frac{1}{2}\varphi'^2\frac{dk}{d\varphi} - \frac{1}{2}h^2\sin 2\varphi - \sigma g\sin 2(\varphi-\psi) = 0$$

(۸)

$$bh\cos\psi + \sigma\sin 2(\varphi-\psi) = 0 \qquad (۹)$$

در غیاب میدان مغناطیسی خارجی:

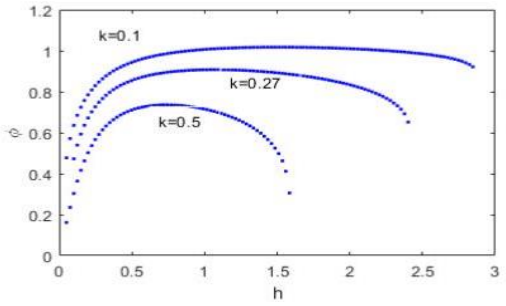
$$\varphi(\zeta) \equiv 0, \psi(\zeta) \equiv 0, g(\zeta) \equiv 0$$

که این شرایط معادل ساختار یکنواخت فرونماتیک است.

با اعمال میدان مغناطیسی، این شرایط تغییر یافته و ساختار سوسپانسیون مختل می شود. (ممان دوقطبی نانوذرات و هم بردار جهت‌نمای مولکول بلور مایع شروع به چرخش می‌کنند.)

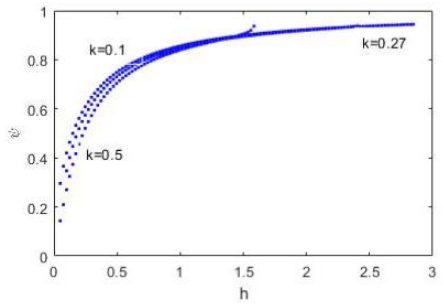
نتیجه گیری:

با حل معادلات جفت‌شده به روش عددی (نرم افزار متلب)، مطابق انتظار، با اعمال میدان مغناطیسی، زاویهٔ بردار جهت‌نما شروع به افزایش می‌کند؛ اما طبق پیش‌بینی، با افزایش میدان خارجی تا مقدار مشخصی(میدان بحرانی)، با توجه به منفی بودن ناهمسانگردی پذیرفتاری بلور مایع $\Delta\chi \prec 0$ ، انتظار بر این است که بردار جهت‌نمای بلورمایع عمود بر میدان مغناطیسی خارجی قرار بگیرد؛ یعنی زاویهٔ بردار جهت‌نما دوباره به حالت اولیه یعنی $\varphi = 0$ برگردد؛ لذا زاویهٔ بردار جهت‌نمای بلورمایع با محور x [10] هنگام رسیدن میدان به مقدار بحرانی‌اش، به طور ناگهانی صفر می‌شود. (عمود بر جهت میدان مغناطیسی خارجی) این رفتار در نمودار شکل ۳ نشان داده شده است. همچنین با افزایش میدان خارجی، نانو ذرات مغناطیسی شروع به چرخش کرده و با افزایش میدان، ممان مغناطیسی نانوذرات، هم‌جهت با میدان خارجی جهت گیری می‌کنند. هم‌چنانکه در شکل ۳ پیداست، بردار جهت‌نمای بلورمایع با ناهمسانگردی دیامغناطیسی منفی آلائیده شده با نانوذرات فرومغناطیس، به محض اعمال میدان، حتی در میدان‌های ضعیف (برخلاف بلورهای مایع خالص) شروع به چرخش می‌کند.



شکل ۳: وابستگی زاویهٔ بردار جهت‌نما به میدان مغناطیسی در غلظت‌های مختلف نانوذرات ($\kappa = 0.5, \kappa = 0.27, \kappa = 0.1$) به ازای $\zeta = 0, b = 10, \sigma = 2.5$

بدیهی است که نانوذرات فرومغناطیس تمایل دارند در جهت همسو با میدان مغناطیسی خارجی قرار بگیرند. شکل ٤



شکل ٤: وابستگی زاویهٔ ممان دوقطبی به میدان مغناطیسی در غلظت‌های مختلف نانو ذرات ($\kappa = 0.5, \kappa = 0.27, \kappa = 0.1$) به ازای $\zeta = 0, b = 10, \sigma = 2.5$.

مرجع‌ها

[1] Khoo, I.-C., *Liquid crystals*. John Wiley & Sons. 2022.

[2] Brochard, F., and P. G. De Gennes. "Theory of magnetic suspensions in liquid crystals." *Journal de Physique* **31**, no. 7 (1970): 691-708.

[3] Kopčanský, P ,.et al., *The structural instabilities in ferronematic based on liquid crystal with negative diamagnetic susceptibility anisotropy*. **322**(22): p. 3696-3700. 2010.

[4] Zakhlevnykh, A. N., & Petrov, D. A. (2016). *Orientational transitions in antiferromagnetic liquid crystals*. *Physics of the Solid State*, ***58***(9), 1906-1915

[5] Petrov, D., A.J.M.C. Zakhlevnykh, and L. Crystals, *Freedericksz transition in compensated ferronematic liquid crystals*. **557**(1): p. 60-72. 2012.

[6] Petrov, D.A., et al., Magnetic segregation effect in liquid crystals doped with carbon nanotubes. **10**(1): p. 1464-1474. 2019.

[7] Reshetnyak, V.J.M.C. and L. *Crystals, Effective dielectric function of ferroelectric LC suspensions*. **421**(1): p. 219-224. 2004.

[8] Emdadi, M., et al., *Investigation of nematic liquid crystals doped with spherical multiferroic nanoparticles in the presence of a magnetic field*. **48**: p. 433-441. 2018.

[۹] Kopčanský, P., Potočová, I., Koneracká, M., Timko, M., Jadzyn, J., Czechowski, G., & Jansen, A. M. G. (2003). *The structural instabilities of ferronematic based on liquid crystal with low negative magnetic susceptibility*. *physica status solidi (b)*, ***236***(2), 450-453.

[10] Easy Axis

انتشار باریکه لیزر گاوسی و تولید هماهنگ دوم در پلاسمای چند یونی

گودرزی، رضا؛ جعفری میلانی، محمدرضا

پژوهشکده لیزر، فوتونیک و کوانتوم، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، تهران

چکیده

اثر خودکانونی باریکه لیزر گاوسی بر تولید هماهنگ دوم (SHG) در یک پلاسمای با گونه‌های چند یونی در حضور اثرات غیرخطی نیروهای پاندرموتیو و بار-فضا بررسی شده است. با محاسبه تغییرات توزیع چگالی الکترون، معادله دیفرانسیل حاکم بر تحول اندازه لکه باریکه لیزر در تقریب پیرامحوری به دست آمد و سپس انتشار و تحول باریکه‌ی لیزری در آن پلاسما بررسی شد. در ادامه عبارتی برای اختلال چگالی مرتبط با موج پلاسما و چگالی جریان غیرخطی متناظر با آن استخراج شد که به عنوان منبعی برای تولید هماهنگ دوم عمل می‌کند. نشان داده شد که یک بازه شدت اولیه لیزر برای پلاسما وجود دارد که در آن بازه، خودکانونی باریکه رخ می‌دهد و مقدار دامنه هماهنگ دوم بیشترین مقدار را دارا است. همچنین نتایج نشان داد که حضور گونه‌های یونی با بار بالاتر، اثر خودکانونی باریکه و در نتیجه بازده SHG را کاهش می‌دهد.

واژه های کلیدی: *خودکانونی باریکه لیزر، هماهنگ دوم، پلاسما*

Gaussian laser beam propagation and second harmonic generation in multi-ion plasma

Goodarzi, Reza; J. Milani, Mohammad Reza

Laser, Photonics and Quantum Research School, NSTRI, Tehran

Abstract

Self-focusing effect of Gaussian laser beam on second harmonic generation (SHG) in a plasma with multi-ionic species has been investigated in the presence of nonlinear effects of ponderomotive and space-charge forces. By calculating the modified electron density distribution, the differential equation governing the evolution of the laser beam spot size was obtained in the paraxial approximation, and then the propagation and evolution of the laser beam in such plasma was investigated. Next, an expression for the density disturbance associated with the plasma wave and the corresponding nonlinear current density was extracted, which acts as a source for the second harmonic generation. It was shown that there is a range of initial laser intensity for plasma in which the laser beam self-focusing occurs and the magnitude of the second harmonic amplitude has the largest value. Also, the results showed that the presence of ionic species with a higher charge increases the beam's self-focusing effect and thus the SHG amplitude.

***Keywords**: self-focusing of laser beam, second harmonic, plasma*

PACS No.

مقدمه

برهمکنش لیزر با پلاسما به دلیل کاربرد فراوان آن در همجوشی هسته‌ای، تولید هماهنگ‌های بالا، لیزر اشعه ایکس و شتابدهنده‌های پلاسمایی، اهمیت بسیاری دارد [۱]. در اکثر این کاربردها لازم است که چگونگی انتشار و تحول پالس لیزر پر شدت در یک پلاسما در حضور اثرات غیرخطی بررسی شود [۲]. در بین پدیده‌های غیرخطی، فرآیند خودکانونی پالس لیزر از اهمیت بسیار بالایی برخوردار است، تمام فرآیندهای غیرخطی دیگر، تحت تأثیر تغییرات توزیع شدت لیزر در طول انتشار آن در محیط پلاسما هستند. هنگامی که یک باریکه لیزر با شدت بالا در

پلاسما انتشار می‌یابد، به دلیل گرادیان شدت یا همان نیروی پاندرموتیو، دچار پدیده خودکانونی می‌شود. این تمرکز شدید نور، الکترون‌ها را از نواحی مرکزی پرشدت به بیرون رانده و گرادیان‌های چگالی شدیدی را در پلاسما ایجاد می‌کند. از آنجا که پلاسما در حالت عادی محیطی با تقارن مرکزی است، تولید هماهنگ دوم در آن به طور طبیعی امکان پذیر نیست اما گرادیان‌های چگالی القایی و میدان‌های الکترواستاتیک ناشی از جدایش بار، تقارن ناوردایی مکانی پلاسما را می‌شکنند و در نتیجه، برهم‌کنش میدان الکتریکی نوسانی لیزر با این ناهمگنی‌های چگالی الکترونی، یک جریان غیرخطی در فرکانس مرتبه دوم پدید می‌آورد که به عنوان چشمه تابش، منجر به تولید هماهنگ دوم می‌شود [۳]. اکثر پلاسماهای تجربی، ناشی از تبخیر مواد مرکب یا آلیاژی، حضور گاز زمینه و یا یونش چند مرحله‌ای یک عنصر، شامل انواع یون‌ها با درجه یونش متفاوت بوده لذا در این مقاله تأثیر خودکانونی شدن باریکه لیزری گاوسی در پلاسمای یک یونی و پلاسمای با دو گونه یونی و با بارهای مختلف جهت تولید هماهنگ‌های دوم مورد مطالعه قرار گرفته است. تفاوت اصلی این مقاله با کارهای گذشته، بررسی اثر تولید هماهنگ دوم است اما در مقالات گذشته تولید تراهرتز بررسی شده است [4].

معادلات اساسی

نظریه تولید هماهنگ دوم در پلاسما بر پایه دینامیک غیرخطی سیال الکترونی و معادلات ماکسول استوار است. در یک پلاسمای همگن، به دلیل تقارن مرکزی، ضریب غیرخطی مرتبه دوم صفر است. اما پدیده خودکانونی لیزر با ایجاد گرادیان چگالی شدیدی این تقارن را می‌شکند. در ادامه، نظریه و معادلات اساسی این فرآیند گام‌به‌گام آورده شده است. حال باریکه لیزر گاوسی $\vec{E}=\hat{x}A_0\exp(-i(\mathrm{k}_0\mathrm{z}-\omega_0\,\mathrm{t}))$ با بسامد و بردار موج k_0,ω_0 را در نظر بگیرید که در راستای محور z در یک پلاسمای حاوی یون‌ها با بارهای مختلف منتشر می‌شود. که در آن $A_0^2=\frac{A_{00}^2}{f(z)}\exp(\frac{-r^2}{f(z)^2r_0^2})$ و A_{00} دامنه اولیه میدان الکتریکی لیزر، r_0 اندازه لکه اولیه و f پارامتر بی‌بعد پرتو (بیانگر اندازه لکه لیزر) است. از معادله تکانه برای الکترون‌ها و یون‌ها شامل ترم‌های گرادیان فشار، بار–فضا و نیروی پاندرموتیو در حالت مانا و شرایط شبه خنثایی پلاسما، توزیع چگالی الکترون‌ها با معادله ۱ داده می‌شود [4]:

$$n_e=\sum_j Z_j n_{j0}\left(\frac{n_e}{n_{e0}}\right)^{-\eta z_j}\exp(-\eta z_j\frac{e^2}{4m_eT_{e0}\omega^2}EE^*) \quad (۱)$$

که در آن $\eta=T_{e0}/T_{i0}$، $\mathrm{T}_{i0},\mathrm{T}_{e0}$ دمای اولیه الکترون و یون، n_{j0} چگالی اولیه یون j‌ام و j گونه یون را نشان می دهد. می‌توان تابع دی‌الکتریک $\varepsilon(r,z)$را در تقریب پیرامحوری، حول r تا مرتبه دوم بسط (تیلور) داد، در نتیجه خواهیم داشت:

$$\varepsilon_0(z)=1-\Omega^2\frac{n_{ea}}{n_{e0}} \quad (۲)$$
$$\varepsilon_r(z)=\frac{\partial\varepsilon(r,z)}{\partial r^2}\Big|_{r=0}=-\Omega^2 n_{er}/n_{e0}$$

در معادله ۲، n_{ea} (مؤلفه محوری) و n_{er} (مؤلفه شعاعی) چگالی هستند که فقط تابعی از مسافت انتشار (z) می‌باشند. با استفاده از معادله موج، معادله حاکم بر اندازه لکه باریکه f به صورت زیر به دست می‌آید [5]:

$$\varepsilon_0\frac{\partial^2 f}{\partial\xi^2}=\frac{1}{f^3}-\rho^2\varepsilon_r f, \quad (۳)$$

در معادله ۳، $\xi=z\omega/c$ (طول انتشار بهنجار) $\rho=r_0\omega_0/c$ می‌باشد. این رابطه، معادله دیفرانسیل مرتبه دوم حاکم بر تحول اندازه لکه باریکه لیزر نسبت به فاصله انتشار ξ در پلاسما است؛ ترم اول در سمت راست آن به پدیده پراکندگی و ترم دوم به خودکانونی شدن باریکه مربوط است. پاسخ پلاسما به میدان لیزر، از معادلات هیدرودینامیکی برای الکترون‌ها تبعیت می‌کند که عبارتند از:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t}+\nabla\cdot(n_e v) \quad (۴)$$
$$\frac{\partial v}{\partial t}+(v.\nabla)v=-\frac{e}{m}(E+v\times B) \quad (۵)$$

برای به دست آوردن پاسخ در فرکانس مرتبه دوم ($2\omega_0$)، می‌توان کمیت‌های پلاسما را به صورت یک بسط اختلالی حول حالت تعادل نوشت:

$$\begin{cases} n_e=n_0+n_1+n_2+\dots \\ v=v_1+v_2+\dots \end{cases} \quad (۶)$$

پاسخ‌های مرتبه اول، عبارتند از:

$$\begin{cases} v_1 = \frac{e}{i\omega m} E \\ n_1 = \frac{1}{i\omega} \nabla.(n_0 v_1) = \\ \frac{e}{m\omega^2} \nabla.(n_0 E) = \frac{e}{m\omega^2} (n_0 \nabla.E + E.\nabla n_0) \end{cases} \quad (۷)$$

پاسخ مرتبه دوم عبارت است از:

$$\frac{\partial v_2}{\partial t} + (v_1.\nabla) v_1 = -\frac{e}{m}(E_{2\omega} + v_1 \times B_1) \rightarrow \quad (۸)$$
$$v_2 \approx \frac{i}{4\omega} \nabla (v_1.v_1) = \frac{-ie^2}{4m^2\omega^3} \nabla (E.E)$$

در معادله بالا، $E_{2\omega}$ میدان هماهنگ دوم با فرکانس 2ω است. در نتیجه چگالی جریان غیر خطی هماهنگ دوم عبارت است از:

$$J = -e(n_0 v_2 + n_1 v_1) \rightarrow \quad (۹)$$
$$J = \frac{ie^3}{4m^2\omega^3}\left[n_0 \nabla (E.E) + 4E(E.\nabla n_0 + n_0 \nabla.E)\right]$$

در یک پلاسمای یکنواخت، عبارت‌های ∇n_0 و $\nabla.E$ هر دو صفر شده و پلاسما توانایی تابش هماهنگ دوم را ندارد اما در باریکه خودکانونی شده، تقارن برهم خورده و جریانی غیر صفر برای تابش هماهنگ دوم وجود دارد. این جریان غیرخطی در معادله موج ماکسول به عنوان چشمه میدان هماهنگ دوم در نظر گرفته می‌شود. در نتیجه می‌توان با استفاده از معادلات مربوط به چگالی و قرار دادن آن‌ها در رابطه چگالی جریان، جریان غیرخطی مولد هماهنگ دوم را به‌دست آورد که با جایگذاری آن در معادله موج، میدان هماهنگ دوم به‌دست می‌آید:

$$E_2 = \frac{e\omega_p^2}{c^2 m_e} \frac{2}{k_2^2 - k_0^2} \left(\frac{1}{\omega^2 + v_{th}^2 k^2 - \omega_p^2}\right) \quad (۱۰)$$
$$\times \frac{rA_{00}^2}{r_0^2 f^4} \exp\left(-\frac{r^2}{2r_0^2 f^2}\right).$$

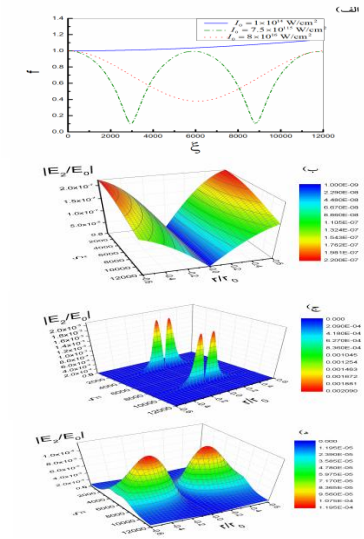
معادله (۱۰) برای محاسبه میدان هارمونیک دوم به کار می‌رود. ارتباط آن با خودکانونی از این طریق است که ابتدا معادله (۳) تغییرات اندازه لکه باریکه لیزر را در اثر خودکانونی تعیین می‌کند. کاهش اندازه لکه موجب افزایش شدت موضعی لیزر شده و در نتیجه اثرات غیرخطی، اختلال چگالی و جریان غیرخطی تقویت می‌شوند. بنابراین، معادله (۱۰) با استفاده از نتایج معادله (۳)، افزایش تولید هارمونیک دوم ناشی از خودکانونی را محاسبه می‌کند.

بحث و نتایج

در بخش قبلی معادلات حاکم بر پهنای باریکه و میدان تابشی هماهنگ دوم در نتیجه انتشار باریکه لیزر گاوسی در یک پلاسمای چند یونی و غیربرخوردی با در نظر گرفتن نیروی پاندرموتیو به دست آمد. با در نظر گرفتن لیزر Nd:YAG با فرکانس $\omega = 1.77\times10^{15} rad/s$، قطر لکه $r_0 = 20\mu m$، چگالی الکترونی پس زمینه $n_{e0} = 10^{19} cm^{-3}$، دمای اولیه الکترون $T_{e0} = 1.5\,keV$، $\eta = 1$، $j=2$، $Z_1=1$، $Z_2=2$ (ترکیب پلاسمای هیدروژن و هلیوم)، و $n_{10}=0.5n_{e0}$ معادلات ۳ و ۱۰ به صورت عددی حل و نتایج آن بحث می‌شوند. اثر یون‌های چند بار یونیزه در یک پلاسما روی انتشار و خودکانونی در شرایط مختلف لیزری و پلاسمایی بررسی شد. در شکل (۱-الف) تغییرات پارامتر بدون بعد f نسبت به مسافت انتشار ξ برای سه شدت اولیه لیزری مختلف رسم شده است. مقدار $f<1$, $f>1$ به ترتیب بیانگر واکانونی یا خودکانونی باریکه لیزر در حین انتشار است. نمودار در شکل (۱-الف) بیانگر این است که رفتار پارامتر f برای شدت‌های مختلف یکسان نیست، طوری که مثلاً رژیم انتشار برای $I_0 = 10^{14}\ W/cm^2$ کاملاً واگرا است. با افزایش شدت، رژیم انتشار از واگرایی به خودکانونی عوض می‌شود. در ادامه با افزایش شدت لیزر، پارامتر پرتو f به مقدار کمینه‌ی خود (بیشترین خودکانونی) می‌رسد و سپس با افزایش بیشتر شدت لیزر، مقدار f دوباره زیاد و خودکانونی شدن باریکه تضعیف می‌شود. در واقع افزایش پیوسته‌ی شدت اولیه لیزر (I_0) الزاماً منجر به افزایش خودکانونی باریکه لیزر در حین انتشار در پلاسما نمی‌شود. لذا اولاً، این رفتار دلالت بر وجود یک بازه شدتی است که در آن بازه، خودکانونی شدن لیزر اتفاق می‌افتد، ثانیاً در آن بازه یک نقطه بازگشتی شدت برای خودکانونی شدن باریکه لیزر وجود دارد که در آن خودکانونی شدن باریکه به بیشینه مقدار خود می‌رسد و اشباع می‌شود.

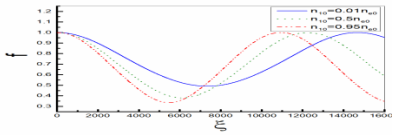
شکل ۱ (ب–د) میدان هماهنگ دوم بهنجارشده، متناظر با آن شدت‌ها را نشان می‌دهد. رفتار میدان هماهنگ دوم مشابه رفتار پارامتر باریکه است. مقدار تابش هماهنگ دوم برای رژیم واکانونی، بسیار کمتر از رژیم خودکانونی است. به عبارتی در اثر خودکانونی لیزر شدت موضعی بالا رفته و تولید هماهنگ دوم نیز افزایش می‌یابد.

اثر چگالی یون‌های متفاوت موجود در پلاسما بر انتشار و تولید میدان هماهنگ دوم برای یک شدت ثابت $I_0 = 8\times10^{16}\,\mathrm{W/cm^2}$ در شکل (۲) آورده شده است.



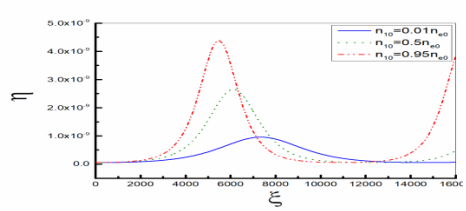
شکل۱- الف) روند تغییرات اندازه لکه باریکه (f) در راستای انتشار ξ بر حسب مقادیر مختلف شدت اولیه لیزر. (ب-د) دامنه میدان هماهنگ دوم بهنجارشده متناظر با آن شدت‌ها.

شکل (۲) رفتار پارامتر پهنای باریکه با تغییر چگالی n_{10} را نشان می‌دهد. مطابق با شکل (۲) مقدار چگالی گونه‌های متفاوت یونی تأثیر قابل توجهی در رژیم انتشار دارد. در حالتی که $n_{10} = 0.01n_{e0}$ پدیده خودکانونی بسیار ضعیف مشاهده می‌شود در حالی که وقتی چگالی یون تک بار یونیزه افزایش می‌یابد قدرت خودکانونی افزایش می‌یابد و هنگامی که n_{10} به مقدار چگالی اولیه n_{e0} می‌رسد و به شرایط پلاسمای تک یونی نزدیک می‌شود قدرت خودکانونی چشمگیر می‌شود.



شکل۲-تغییرات اندازه لکه باریکه (f) بر حسب مسافت انتشار برای چگالی‌های اولیه یونی متفاوت برای شدت $I_0 = 8\times10^{16}\,\mathrm{W/cm^2}$.

شکل (۳) بازده تولید هماهنگ دوم برای مقادیر مختلف نسبت‌های اولیه چگالی الکترونی یکبار یونیده به چگالی الکترونی زمینه ثابت n_{10}/n_{e0} را برای $I_0 = 8\times10^{16}\,\mathrm{W/cm^2}$ نشان می‌دهد.



شکل۳- بازده تغییرات اندازه لکه باریکه (f) بر حسب مسافت انتشار برای چگالی‌های اولیه یونی متفاوت

بازده تولید هماهنگ دوم هنگامی که n_{10} به مقدار چگالی الکترونی زمینه n_{e0} میل می‌کند (متناظراً $n_{20}(=n_{e0}-n_{10})$ کم می‌شود) و به شرایط پلاسمای تک یونی نزدیک می‌شود بیشتر می‌شود.

نتیجه گیری

در این مقاله اثر مشخصه‌های انتشار باریکه‌ی پرشدت گاوسی بر تولید هماهنگ دوم در یک پلاسمای چند یونی با در نظر گرفتن نیروی غیرخطی نیروی پاندرموتیو و بار-فضا مورد بررسی قرار گرفت. نشان داده شد که در این پلاسما با چگالی ثابت، باریکه‌ی لیزر فقط در گستره‌ای از شدت اولیه متحمل پدیده خودکانونی می‌شود. نتایج نشان می‌دهد حضور یون‌های مختلف موجود در پلاسما موجب افزایش میدان بار-فضا و بنابراین قوی‌تر شدن اثر غیرخطی شده که در نتیجه آن خودکانونی شدن و نیز دامنه تابش هماهنگ دوم کاهش می‌یابد.

مرجع‌ها

[1] E. Pickwell, V. Wallace, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2006, *39*, R301.

[2] H. Zhong, A. Redo-Sanchez, X. C. Zhang, *Opt. Express* 2006, *14*, 9130.

[3] Zhang, Z., Wu, H.-C., Shi, Y., et al. Conservation of angular momentum in second harmonic generation from under-dense plasmas. Communications Physics, 2020, 3, 204.

[4] Jafari Milani MR, Rezaei S, Jafari MJ. Cross-focusing of two chirped Gaussian laser beams and THz wave generation in plasmas of multi-ion species under a weakly relativistic and ponderomotive regime. Plasma Science and Technology. 2022 Oct 1;24(10):105001.

[5] S. Misra, S. Mishra, and M. Sodha, Self-focusing of a Gaussian electromagnetic beam in a multi-ions plasma, Phys. Plasmas, 2013, 20.

بررسی عددی انتقال حرارت دوبعدی در مدل تک‌لایه بافت پوست تحت تابش پرتو لیزر مستطیلی

حمزوی، فهیمه[۱]؛ کریمی، محمد جواد[۱]؛ بهادران، مهدی[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز، شیراز

چکیده

لیزردرمانی با متمرکز کردن پرتوهای نور بر نواحی هدف، روشی دقیق برای درمان‌های پزشکی فراهم می‌کند که در آن آسیب به بافت‌های سالم اطراف به حداقل می‌رسد. در این پژوهش، انتقال حرارت و پاسخ حرارتی بافت زیستی تحت تابش پرتو لیزر مستطیلی با استفاده از یک مدل دوبعدی عدم تعادل حرارتی موضعی در محیط متخلخل مورد بررسی قرار گرفته است. معادلات حاکم به‌صورت عددی و با استفاده از روش تفاضل محدود در نرم‌افزار متلب حل شده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که شدت لیزر و مدت زمان تابش هر دو نقش تعیین‌کننده‌ای در افزایش دمای بیشینه دارند. به‌طور کلی، این مطالعه اهمیت کنترل پارامترهای لیزر و ویژگی‌های ساختاری بافت را در بهینه‌سازی کاربردهای درمانی مبتنی بر لیزر برجسته می‌کند.

واژه های کلیدی: *بافت زیستی، توزیع دما، پرتو لیزر مستطیلی، محیط متخلخل.*

Numerical analysis of two-dimensional heat transfer in a single-layer skin tissue model under rectangular laser beam irradiation

Hamzavi, Fahimeh[1]; Karimi, Mohammad Javad[1]; Bahadoran, Mahdi[1]

[1] Department of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz

Abstract

Laser therapy, by focusing light beams on targeted regions, provides a precise medical treatment method in which damage to surrounding healthy tissues is minimized. In this study, heat transfer and the thermal response of biological tissue under rectangular laser beam irradiation are investigated using a two-dimensional Local Thermal Non-Equilibrium model in a porous medium. The governing equations are solved numerically using the finite difference method in MATLAB. The results show that both laser intensity and irradiation duration play a decisive role in increasing the peak temperature. Overall, this study highlights the importance of controlling laser parameters and tissue structural properties in optimizing laser-based therapeutic applications.

***Keywords**: Biological tissue, Temperature distribution, Rectangular laser beam, Porous medium.*

PACS No: 42,44,87.

مقدمه

انتقال حرارت زیستی به فرآیند انتقال و توزیع انرژی حرارتی در بافت‌های زنده شناخته می‌شود که در اثر منابع خارجی مانند تابش لیزر ایجاد می‌گردد. هنگام تابش لیزر به بافت، فوتون‌های لیزر توسط کروموفورهای درون بافت جذب می‌شوند و منجر به تبدیل انرژی نور به گرما می‌شوند. افزایش دما در بافت می‌تواند منجر به بروز اثرات حرارتی گوناگونی شود که به عواملی همچون شدت و مدت زمان تابش لیزر، طول موج پرتو، خواص نوری و حرارتی بافت وابسته است [۱]. به همین دلیل، تحلیل دقیق انتقال حرارت

در بافت‌های زیستی از اهمیت ویژه‌ای در کاربردهای پزشکی مبتنی بر لیزر، از جمله درمان سرطان، جراحی‌های پوستی، چشم‌پزشکی و سایر درمان‌های فتوترمال برخوردار است [۲].

مدل عدم تعادل حرارتی موضعی (LTNE) در سال ۱۹۹۳ برای محیط‌های چندفازی و متخلخل توسعه یافت و امکان بررسی انتقال حرارت در شرایطی را فراهم کرد که دمای فازهای مختلف محیط یکسان نیست [۳]. بافت‌های زیستی به دلیل ساختار پیچیده و ماهیت متخلخل خود، اغلب نیازمند مدل‌سازی بر پایه نظریه محیط‌های متخلخل هستند.

مطالعات انجام‌شده توسط چن و همکاران نشان داده است که در نظر گرفتن اثر تخلخل می‌تواند دقت پیش‌بینی توزیع دما و پاسخ حرارتی بافت را به‌طور قابل توجهی افزایش دهد [٤]. در مجموع، این مدل‌ها نقش حیاتی در هدایت توسعه فناوری لیزر، برنامه‌ریزی درمان و ارزیابی ایمنی ایفا می‌کنند و در نهایت به بهبود مستمر درمان‌های لیزری برای دستیابی به بهترین نتایج بالینی منجر می‌شوند.

پرتوهای یکنواخت یا مستطیلی توجه قابل توجهی در بسیاری از مطالعات و کاربردها در درمان‌های پزشکی دریافت کرده‌اند. وانگ و همکاران [۵] از پرتوهای مستطیلی در مدل درمان فرادرمانی خود استفاده کردند تا بررسی کنند که چگونه یک توزیع حرارتی یکنواخت به گرمایش بافت تا عمق سود می‌رساند.

در این پژوهش، پاسخ حرارتی بافت زیستی تحت تابش پرتو لیزر مستطیلی با استفاده از مدل دوبعدی LTNE در یک محیط متخلخل مورد بررسی قرار گرفته است. برخلاف بسیاری از مطالعات پیشین که عمدتاً بر شرایط تابش ثابت متمرکز بوده‌اند، در این مطالعه تأثیر تغییر مدت زمان تابش لیزر بافت بر توزیع دما و رفتار حرارتی بافت تحلیل شده است.

تئوری

به‌منظور مدل‌سازی انتقال حرارت در بافت زیستی، بافت به‌عنوان یک محیط متخلخل متشکل از دو فاز خون و فاز بافت در نظر گرفته می‌شود. توزیع دما در فاز بافت و فاز خون به‌ترتیب با دماهای T_t و T_b توصیف می‌شود. برای فاز خون، معادله حاکم به صورت زیر نوشته می‌شود [٦]:

$$\varepsilon(\rho c)_b\left(\frac{\partial T_b}{\partial t}+V\cdot\nabla T_b\right)=\varepsilon k_b\left(\nabla^2 T_b\right)+\alpha A\left(T_t-T_b\right)$$
$$+wc_b\left(T_t-T_b\right)+\varepsilon Q_{mb}+\varepsilon Q_L \quad (۱)$$

و برای فاز بافت داریم [٦]:

$$(1-\varepsilon)(\rho c)_t\frac{\partial T_t}{\partial t}=(1-\varepsilon)k_t\left(\nabla^2 T_t\right)+\alpha A\left(T_t-T_b\right)$$
$$-wc_b\left(T_t-T_b\right)+(1-\varepsilon)Q_{mt}+(1-\varepsilon)Q_L \quad (۲)$$

که ε تخلخل، T دما، k هدایت حرارتی، α ضریب انتقال گرما، A ضریب انتقال بین بافت و خون، Q_m گرمای سوخت و ساز بدن، w پرفیوژن ، c ظرفیت گرمایی، ρ چگالی و اندیس t و b به ترتیب بافت و خون است.

Q_L بیانگر منبع گرمایی ناشی از جذب انرژی لیزر است. با در نظر گرفتن دو مرحله تابش لیزر در بازه‌های زمانی مختلف، منبع حرارتی لیزر به صورت زیر تعریف می‌شود [۷]:

$$Q_L(x,z,t)=I_1(t)\Phi(x,z)+I_2(t)\Phi(x,z) \quad (۳)$$

که در آن $\Phi(x,z)$ توزیع انرژی جذب‌شده ناشی از لیزر در راستای محور x است. برای بافت‌های با ضریب جذب بالا، این توزیع انرژی با استفاده از تابع هویساید به صورت زیر بیان می‌شوند [۸]:

$$\Phi(x,z)=(1-R_d)\mu_a Q$$
$$\left(\begin{array}{l}H\left(x-x_0+\frac{w_x}{2}\right)H\left(x_0+\frac{w_x}{2}-x\right)\\+H\left(x-x_1+\frac{w_x}{2}\right)H\left(x_1+\frac{w_x}{2}-x\right)\end{array}\right)e^{-\mu_t z} \quad (٤)$$

که μ_a ضریب جذب، R_d ضریب بازتاب پوست ، Q شدت لیزر، w_x پهنای پرتو، μ_t ضریب تضعیف و H تابع هویساید است.

توابع زمانی $I_1(t)$ و $I_2(t)$ که بازه‌های روشن و خاموش بودن لیزر را مشخص می‌کنند، به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\mathrm{I}_1(t)=\begin{cases}1 & t_1\le t\le t_2\\ 0 & otherwise\end{cases}\qquad \mathrm{I}_2(t)=\begin{cases}1 & t_3\le t\le t_4\\ 0 & otherwise\end{cases} \tag{۵}$$

که $t_1=0\,s$ و $t_3=150\,s$ ثابت و t_2 و t_4 متغییر هستند.

در این مطالعه، یک بافت زیستی با جذب بالا و ضخامت (L) در معرض تابش یک پرتو لیزر قرار دارد (شکل ۱). گرمایش ناشی از لیزر به‌صورت یک شار حرارتی اعمال‌شده بر سطح بالایی بافت مدل‌سازی شده است، در حالی که سطح پایینی بافت عایق حرارتی فرض می‌شود. شرایط مرزی به صورت زیر بیان می‌شود:

برای محور x :

$$\frac{\partial T_t}{dx}(0,z,t)=0 \qquad \frac{\partial T_t}{dx}(L,z,t)=0 \tag{۶}$$

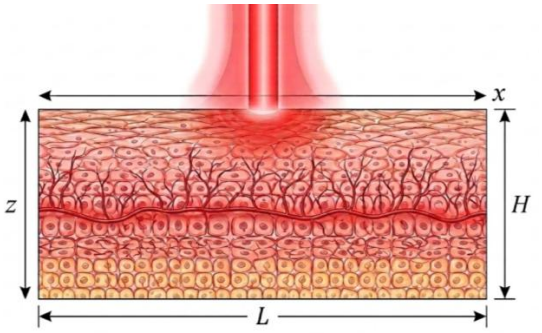
برای محور z :

$$-k_{eff}\frac{\partial T_t}{\partial z}(x,0,t)=\Phi(x,0,t) \qquad \frac{\partial T_t}{\partial z}(x,H,t)=0 \tag{۷}$$

همچنین شرایط اولیه برابر است با:

$$T_t(x,z,0)=T_{t0} \qquad \frac{\partial T_t}{\partial x}(x,z,0)=0 \qquad T_b(x,z,0)=T_{b0} \tag{۸}$$

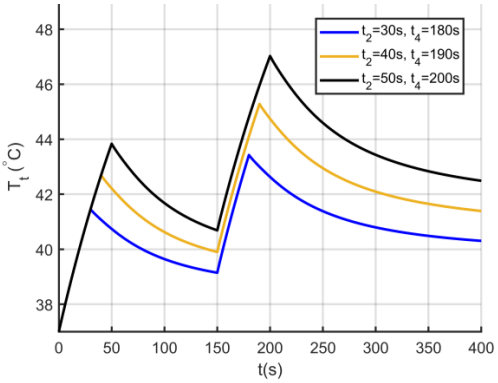
در این پژوهش، حل عددی معادلات حاکم با استفاده از روش تفاضل محدود و پیاده‌سازی در نرم‌افزار متلب انجام شده است. خواص ترموفیزیکی خون و بافت و همچنین پارامترهای لیزر از مراجع [۶،۷] استخراج شده‌اند.



شکل ۱ : طرحواره بافت پوست تحت تابش لیزر.

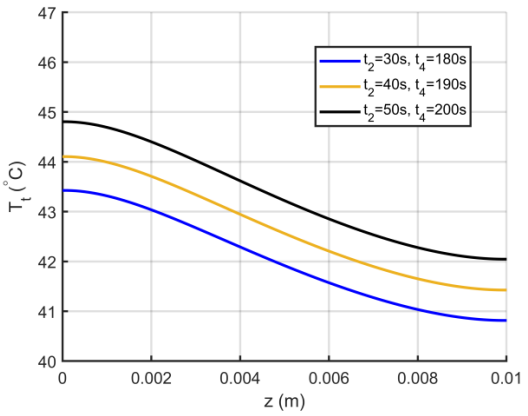
نتایج

شکل ۲ تغییرات دمای بافت را در طول زمان برای سه بازه زمانی مختلف تابش لیزر و در شدت لیزر $2\times10^6\,W/m^2$ نشان می‌دهد. با شروع تابش، دما به‌سرعت افزایش یافته و در طول مدت اعمال لیزر به بیشینه مقدار خود می‌رسد. نتایج نشان می‌دهد که افزایش مدت زمان تابش موجب جذب انرژی بیشتر توسط بافت شده و در نتیجه دمای بالاتری ایجاد می‌کند.



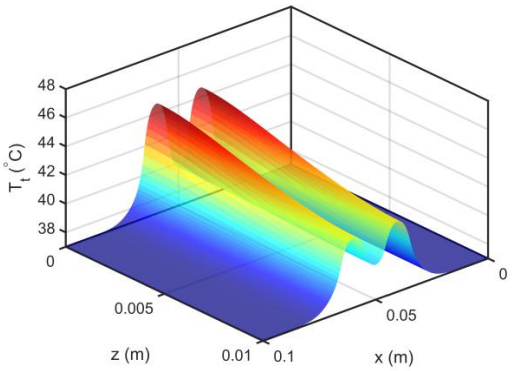
شکل۲ : اثر زمان تابش لیزر برتغییرات دما در طول زمان و $x=0.04\,m$ و $z=0.004\,m$.

در شکل ۳، تغییرات دما در امتداد محور z برای پرتو لیزر مستطیلی برای زمان‌های تابش لیزر مختلف نشان داده شده است. مدت زمان‌های تابش طولانی‌تر منجر به دماهای بالاتر بافت می‌شود.



شکل۳ : تأثیر زمان تابش لیزر بر دما در امتداد محور z در $x = 0.04\,m$ و t_4.

شکل ٤ توزیع دما را در امتداد محورهای x و z برای مدت زمان $t_2 = 50\,s$ و $t_4 = 200\,s$ تابش لیزر نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که گرمایش عمدتاً در ناحیه تابش متمرکز بوده و با افزایش زمان تابش، علاوه بر افزایش دمای بیشینه، عمق نفوذ حرارتی نیز بیشتر می‌شود. این موضوع بیانگر تجمع بیشتر انرژی در بافت و گسترش ناحیه تحت تأثیر گرمایش است.



شکل٤ : اثر زمان تابش لیزر بر دما در امتداد محورهای x و z در $t_2 = 50\,s$ و $t_4 = 200\,s$.

نتیجه گیری

در این پژوهش، انتقال حرارت در بافت زیستی تحت تابش پرتو مستطیلی با استفاده از مدل دوبعدی LTNE در محیط متخلخل بررسی شد. بافت به‌صورت دو فاز شامل خون و بافت مدل‌سازی گردید و اثر پرفیوژن و هدایت حرارتی در نظر گرفته شد. حل عددی معادلات با روش تفاضل محدود در محیط نرم افزار متلب انجام شد. نتایج نشان داد که افزایش مدت زمان تابش لیزر موجب افزایش دمای بیشینه به دلیل تجمع انرژی حرارتی می‌شود. در مجموع، کنترل پارامترهای تابش و ویژگی‌های ساختاری بافت نقش مهمی در بهینه‌سازی درمان‌های لیزری دارد.

مرجع‌ها

[۱] J. Hristov; "Bio-heat models revisited: concepts, derivations, nondimensalization and fractionalization approaches"; *Frontiers in Physiology* **7** (2019) 189.
[۲] D. Kim, H. Kim; "Numerical study on optimization of quantitative treatment conditions for skin cancer photothermal therapy considering multiple blood vessels"; *Computer Methods and Programs in Biomedicine* **240** (2023) 107738.
[۳] M. Quintard, S. Whitaker; "One- and two-equation models for transient diffusion processes in two-phase systems"; *Advances in Heat Transfer* **23** (1993) 369–464.
[٤] K. Chen, L. Fan, Z. Hu, Y. Xu; "Dual-phase-lag heat conduction analysis of a three-dimensional finite medium heated by a moving laser beam with circular or annular cross-section"; *European Physical Journal E* **139** (2024) 594.
[٥] D. Wang, J. Xu, T. Huang, R. Jing, J. Zhang, R. Xiao; "Effect of beam shaping on laser joining of CFRP and Al-Li alloy"; *Optics & Laser Technology* **143** (2021) 107336.
[٦] J. Ma, X. Yang, S. Liu, Y. Sun, J. Yang; "Exact solution of thermal response in a three-dimensional living bio-tissue subjected to a scanning laser beam"; *International Journal of Heat and Mass Transfer* **124** (2018) 1107–1116
[۷] Y. Wang, X. Lu, W. Zheng, Z. Wang; "Bio-thermal response and thermal damage in biological tissues with non-equilibrium effect and temperature-dependent properties induced by pulse-laser irradiation"; *Journal of Thermal Biology* **113** (2023) 103541.
[۸] J. Edrisa, M. Hassan, M. MA Almazah; "Bio-thermal non-equilibrium dynamics and thermal damage in biological tissues induced by multiple time pulse-laser irradiations"; *Case Studies in Thermal Engineering* **61** (2024) 104989.

مدل‌سازی انتقال حرارت زیستی در بافت متخلخل تحت تابش پرتو لیزر گاوسی: ترکیب مدل عدم تعادل حرارتی موضعی با اثر تأخیر فاز دوگانه

حمزوی، فهیمه[۱] ؛ کریمی، محمد جواد[۱]؛ بهادران، مهدی[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز، شیراز

چکیده

در این مطالعه، پاسخ حرارتی بافت زیستی تحت تابش لیزر گاوسی با استفاده از مدل انتقال حرارت زیستی عدم تعادل حرارتی موضعی همراه با اثر تأخیر فاز دوگانه مورد بررسی قرار گرفت. بافت به‌صورت یک محیط متخلخل دو فازی اشباع‌شده از خون مدل‌سازی شد و برای فاز بافت و فاز خون، معادلات انرژی مجزا در نظر گرفته شد. معادلات حاکم با اعمال شرایط مرزی مناسب، به‌صورت عددی در نرم‌افزار متلب حل شدند. نتایج نشان داد که افزایش شدت لیزر موجب افزایش قابل‌توجه دمای بافت و تشدید آسیب حرارتی می‌شود.

واژه های کلیدی: *آسیب حرارتی بافت، انتقال حرارت زیستی، توزیع دما، تأخیر فاز دوگانه، پرتو لیزر گاوسی.*

Bioheat transfer modeling in porous biological tissue under Gaussian laser beam irradiation: Combining local thermal non-equilibrium model with dual-phase-lag effect

Hamzavi, Fahimeh[1]; Karimi, Mohammad Javad[1]; Bahadoran, Mahdi[1]

[1] Department of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz

Abstract

In this study, the thermal response of biological tissue under Gaussian laser irradiation was investigated using the Local Thermal Non-Equilibrium bioheat transfer model incorporating the Dual-Phase-Lag effect. The tissue was modeled as a two-phase porous medium saturated with blood, and separate energy equations were considered for the tissue phase and the blood phase. The governing equations were solved numerically in MATLAB under appropriate boundary conditions. Results indicated that increasing laser intensity leads to a significant rise in tissue temperature and intensification of thermal damage.

***Keywords**: Thermal damage, Bioheat transfer, Temperature distribution, Dual-phase-lag, Gaussian laser beam.*

PACS No: 42,44,87.

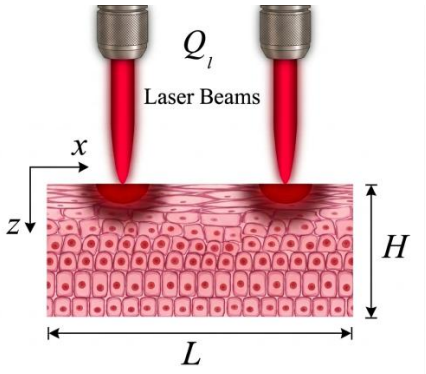
مقدمه

انتقال حرارت زیستی، فرآیند انتقال انرژی حرارتی در بافت‌های زنده از طریق مکانیسم‌هایی نظیر هدایت حرارتی، همرفت ناشی از جریان خون و تولید حرارت متابولیک است. درک و مدل‌سازی این فرآیند از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است، زیرا نقش مهمی در تنظیم دمای بدن، عملکردهای فیزیولوژیکی و بسیاری از روش‌های تشخیصی و درمانی ایفا می‌کند. ازاین‌رو، انتقال حرارت زیستی به یکی از موضوعات مهم در مهندسی زیست‌پزشکی و علوم پزشکی تبدیل شده است [۱]. در سال‌های اخیر، لیزرها به دلیل دقت بالا، قابلیت تمرکز انرژی و ایجاد گرمایش موضعی

کنترل‌شده، کاربرد گسترده‌ای در درمان‌های پزشکی یافته‌اند. این ویژگی‌ها لیزر را به ابزاری مؤثر در کاربردهایی نظیر فتوترمال‌تراپی، برداشت تومورها و جراحی‌های کم‌تهاجمی تبدیل کرده است [۲]. مدل‌های تأخیر فازی تک‌گانه (SPL) و دوگانه (DPL) درک دقیق‌تری از انتقال حرارت در بافت‌های زیستی فراهم می‌کنند. در حالی که مدل SPL تنها یک تأخیر حرارتی را در نظر می‌گیرد، مدل DPL با لحاظ کردن دو تأخیر، توصیف دقیق‌تری از پاسخ بافت به گرمایش لیزری ارائه می‌دهد. اغلب مطالعات انجام شده در این زمینه از مدل DPL استفاده کرده‌اند [۳]. به‌عنوان نمونه، ژانگ و همکاران [٤] با به‌کارگیری مدل تعمیم‌یافته تأخیر فاز دوگانه، پاسخ حرارتی پوست تحت تابش لیزر را بررسی کرده و نقش تأخیر فازی شار حرارت و قطر رگ‌های خونی را مورد مطالعه قرار دادند. شارما و همکاران [٥] توزیع دما و میزان آسیب حرارتی در بافت پوست را در طول تابش لیزر گاوسی بررسی کردند. نتایج آن‌ها نشان داد که پارامترهای تابش تأثیر قابل توجهی بر توزیع دما و میزان آسیب حرارتی بافت دارند. بیشتر مدل‌های متداول انتقال حرارت زیستی، بر اساس قانون فوریه هستند که انتشار گرما را با سرعت نامحدود فرض می‌کند. با این حال، این رویکرد نمی‌تواند برای محیط‌های ناهمگن، مانند بافت‌های زیستی که انتشار گرما سرعت نامحدودی دارد، قابل اعتماد باشد. به‌منظور رفع این محدودیت، مدل‌های هذلولی مختلفی برای توصیف انتشار موج حرارتی معرفی شده‌اند که در میان آنها می‌توان مدل تأخیر فاز دوگانه اشاره کرد. در این پژوهش، یک مدل انتقال حرارت زیستی مبتنی بر نظریه عدم تعادل حرارتی موضعی (LTNE) با در نظر گرفتن اثر تأخیر فاز دوگانه ارائه شده است که توصیف دقیق‌تری از فرآیند انتقال حرارت در بافت‌های زیستی فراهم می‌کند. این مدل، اثرات تخلخل محیط و جذب انرژی ناشی از تابش لیزر را نیز در بر می‌گیرد. به‌منظور بررسی پاسخ حرارتی بافت، دو پرتو لیزر با پروفایل شدت گاوسی در دو موقعیت مجزا بر سطح بافت اعمال شده‌اند. همچنین از یک لیزر پالسی Nd:YAG با طول موج ۱۰٦٤ نانومتر به‌عنوان منبع حرارتی استفاده شده است. این طول موج به دلیل عمق نفوذ مناسب در بافت‌های زیستی و کاربرد گسترده در درمان فوتوترمال انتخاب شده است. در نهایت، تأثیر شدت‌های مختلف لیزر بر توزیع دما و آسیب حرارتی بافت به‌صورت عددی مورد تحلیل و ارزیابی قرار گرفته است.

تئوری

در این مطالعه، بافت پوست به‌صورت یک محیط متخلخل دو ناحیه‌ای شامل ناحیه عروقی (خون) و ناحیه خارج‌عروقی (بافت) مدل‌سازی شده است. ناحیه عروقی شامل شبکه‌ای از رگ‌های خونی پیچیده است که نقش مؤثری در انتقال حرارت و توزیع دما در بافت ایفا می‌کند. به‌منظور بررسی پاسخ حرارتی بافت، یک بافت زیستی با ضریب جذب بالا و ضخامت (H) در نظر گرفته شده است که تحت تابش دو پرتو لیزر در دو موقعیت مجزا $x_0 = 0.04\,m$ و $x_1 = 0.06\,m$ قرار می‌گیرد. هندسه فیزیکی مسئله در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱ : طرحواره بافت پوست تحت تابش دو پرتو لیزر.

معادلات حاکم بر انتقال حرارت در فاز خون و بافت، اثرات تخلخل محیط، تبادل حرارتی بین دو فاز، پرفیوژن خون، تولید حرارت متابولیک و جذب انرژی لیزر را در بر می‌گیرند. بر این اساس، معادلات انتقال حرارت برای محیط متخلخل دوبعدی به صورت زیر نوشته می‌شوند [٦]:

برای فاز خون:

$$\frac{\partial T_b}{\partial t}+\tau_q\frac{\partial^2 T_b}{\partial t^2}+\frac{\varepsilon(\rho c)_{eff}}{G(\rho c)_{eff}}\left(\nu\cdot\nabla T_b\right)=$$
$$\alpha_{eff}\left(\frac{\partial^2 T_b}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T_b}{\partial z^2}+\tau_T\left(\frac{\partial^3 T_b}{\partial t\partial x^2}+\frac{\partial^3 T_b}{\partial t\partial z^2}\right)\right) \qquad (۱)$$
$$+\frac{\varepsilon Q_{mb}+(1-\varepsilon)Q_{mt}+Q_L}{(\rho c)_{eff}}$$

برای فاز بافت:

$$\frac{\partial T_t}{\partial t}+\tau_q\frac{\partial^2 T_t}{\partial t^2}-\frac{G}{(\rho c)_{eff}}\left(T_b-T_t\right)=$$
$$\alpha_{eff}\left(\frac{\partial^2 T_t}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T_t}{\partial z^2}+\tau_T\left(\frac{\partial^3 T_t}{\partial t\partial x^2}+\frac{\partial^3 T_t}{\partial t\partial z^2}\right)\right) \quad (۲)$$
$$+\frac{\varepsilon Q_{mb}+(1-\varepsilon)Q_{mt}+Q_L}{(\rho c)_{eff}}+$$
$$\frac{\varepsilon(\rho c)_{eff}}{G(\rho c)_{eff}}\left(\varepsilon\frac{\partial Q_{mb}}{\partial t}+(1-\varepsilon)\frac{\partial Q_{mt}}{\partial t}+\frac{\partial Q_L}{\partial t}\right)$$

که ε تخلخل، τ_q زمان تاخیر شار گرما، τ_T زمان تاخیر گرادیان دما، T_t دمای بافت، T_b دمای خون، $(\rho c)_{eff}$ چگالی و ظرفیت گرمایی ویژه موثر، G ضریب جفت شدگی خون و بافت، Q_m منبع گرمای سوخت‌وساز بدن، Q_L منبع گرمای لیزر، α_{eff} ضریب حرارتی موثر است.

برای مدل‌سازی منبع حرارتی، از دو پرتو لیزر با توزیع شدت گاوسی استفاده شده است. عبارت Q_L به صورت زیر است:

$$Q_L(x,z,t)=I_1(t)\Phi(x,z)+I_2(t)\Phi(x,z) \quad (۳)$$

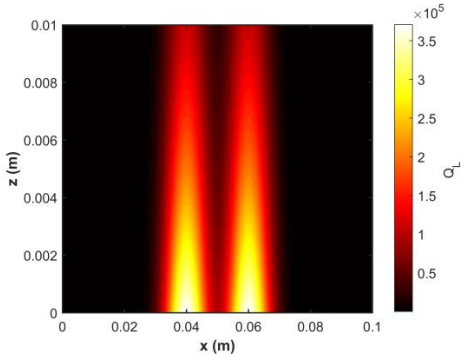
که در آن $I_1(t)$ و $I_2(t)$ شدت پیک دو پرتو لیزر در زمان t است و به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\mathrm{I}_1(t)=\begin{cases}1 & t_1\le t\le t_2\\ 0 & otherwise\end{cases}\}$$
$$\mathrm{I}_2(t)=\begin{cases}1 & t_3\le t\le t_4\\ 0 & otherwise\end{cases}\} \quad (٤)$$

که t_1، t_2، t_3 و t_4 به ترتیب برابر با ۰، ۳۰، ۱۵۰ و ۱۸۰ ثانیه است. با در نظر گرفتن دو پرتو لیزر با توان‌های یکسان، توزیع انرژی جذب‌شده در بافت $\Phi(x,z)$ به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\Phi(x,z)=(1-R_d)\mu_a Q\left(e^{\frac{-2(x-x_0)^2}{\sigma^2}}+e^{\frac{-2(x-x_1)^2}{\sigma^2}}\right)e^{-\mu_t z} \quad (۵)$$

که μ_a ضریب جذب، μ_t ضریب تضعیف، Q شدت لیزر، σ پهنای پرتو، R_d ضریب بازتاب سطح پوست است. شکل ۲ توزیع فضایی انرژی جذب‌شده ناشی از تابش دو پرتو لیزر گاوسی با شدت $1\times10^6\ W/m^2$ را در بافت نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که بیشترین میزان جذب انرژی در نواحی متناظر با مراکز دو پرتو لیزر رخ داده است. همچنین، با افزایش عمق بافت و فاصله از مراکز پرتوها، میزان انرژی جذب‌شده به‌طور قابل‌توجهی کاهش می‌یابد که ناشی از جذب و پراکندگی نور در بافت است. شرایط اولیه و شرایط مرزی مسئله مطابق مرجع [٦] در نظر گرفته‌شده‌اند. حل عددی معادلات حاکم با استفاده از نرم‌افزار متلب انجام شده است. همچنین، خواص ترموفیزیکی خون، بافت و پارامترهای لیزر مورد استفاده در این مطالعه از مرجع [٥،٦] استخراج شده‌اند.

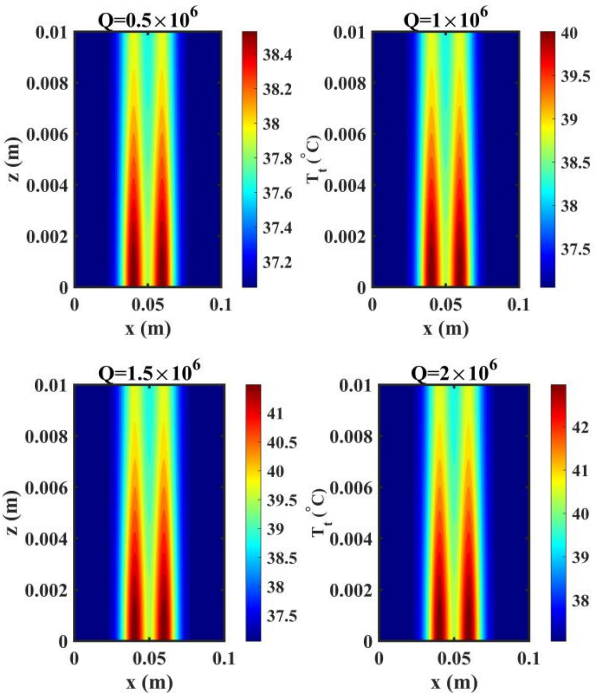


شکل۲: توزیع فضایی انرژی جذب‌شده پرتو لیزر گاوسی در بافت.

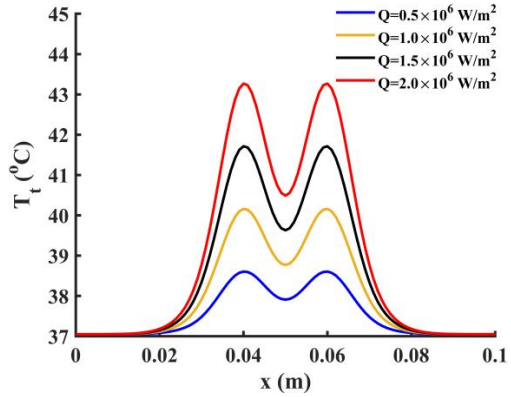
نتایج

در این بخش، اثر شدت لیزر بر توزیع دما و آسیب حرارتی بافت مورد بررسی قرار می‌گیرد. نتایج عددی حاصل از مدل LTNE توسعه‌یافته با در نظر گرفتن اثر تأخیر فاز دوگانه ارائه شده و تأثیر شدت تابش لیزر بر میدان دمایی و رفتار حرارتی بافت تحلیل می‌شود. شکل ۳ توزیع دمای ایجاد شده در بافت را در صفحه x-z برای چهار شدت مختلف لیزر نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، پرتو گاوسی باعث ایجاد یک ناحیه گرمایی متمرکز در اطراف محور مرکزی پرتو می‌شود، به‌طوری که بیشترین دما در مرکز ناحیه تابش رخ داده با افزایش فاصله از مرکز پرتو، دما تدریجی کاهش می‌یابد. افزایش شدت لیزر علاوه بر افزایش دمای بیشینه، موجب گسترش ناحیه گرم‌شده نیز می‌شود.

شکل ٤ تغییرات دمای بافت را در امتداد محور x برای شدت‌های مختلف لیزر نشان می‌دهد. نتایج نشان می‌دهد با افزایش شدت لیزر، دمای بافت در نواحی تابش افزایش می‌یابد و دو بیشینه دمایی در محل تابش پرتوها مشاهده می‌شود. همچنین، دما با فاصله گرفتن از نواحی تابش به‌تدریج کاهش یافته و به دمای اولیه بافت نزدیک می‌شود.

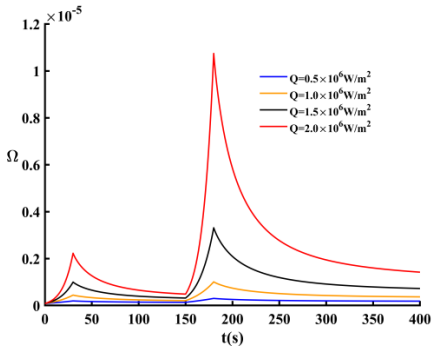


شکل۳: توزیع دما در صفحه x-z تحت تابش پرتوهای لیزر گاوسی برای شدت‌های مختلف.



شکل٤: تغییرات دمای بافت در امتداد محور x تحت تابش دو پرتو لیزر گاوسی برای شدت‌های مختلف لیزر در زمان t_4 و مکان $z = 0.004\ m$.

شکل ۵ تغییرات آسیب حرارتی بافت را در طول زمان برای شدت‌های مختلف لیزر نشان می‌دهد. نتایج حاکی از آن است که افزایش شدت لیزر موجب تشدید آسیب حرارتی می‌شود. علاوه بر این، بیشترین نرخ رشد آسیب در بازه ۱۵۰ تا ۱۸۰ ثانیه، هم‌زمان با اعمال پالس دوم لیزر مشاهده می‌شود.



شکل۵: تغییرات آسیب حرارتی بافت تحت تابش پرتوهای لیزر گاوسی با شدت‌های مختلف در t_4 و $z = 0.004\ m$.

نتیجه گیری

در این پژوهش، پاسخ حرارتی بافت پوست تحت تابش دو پرتو لیزر گاوسی با استفاده از مدل انتقال حرارت زیستی مبتنی بر نظریه عدم تعادل حرارتی موضعی با اعمال اثر تأخیر فاز دوگانه بررسی شد. نتایج نشان داد که افزایش شدت لیزر موجب افزایش دمای بافت و گسترش ناحیه گرم‌شده می‌شود. همچنین، میزان آسیب حرارتی با افزایش شدت لیزر افزایش یافته و بیشترین رشد آسیب در زمان اعمال پالس دوم لیزر مشاهده شد. نتایج این مطالعه بیانگر نقش مهم شدت لیزر در کنترل توزیع دما و آسیب حرارتی بافت بوده و می‌تواند در بهینه‌سازی کاربردهای درمانی مبتنی بر لیزر مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع‌ها

[۱] F. Mebarek-Oudina, G. Dharmaiah, "The role of quadratic-linearly radiating heat source with Carreau nanofluid and exponential space-dependent past a cone and a wedge: A medical engineering application and renewable energy"; *Journal of Computational Biophysics and Chemistry* **22**, No. 8 (2023) 997–1011.

[۲] P. P. Namakshenas, F.M. Di Matteo, "Optimization of laser dosimetry based on patient-specific anatomical models for the ablation of pancreatic ductal adenocarcinoma tumor"; *Scientific Reports* **13,** No. 1 (2023) 11053.

[۳] Q. Zhang, Y. Sun, J. Yang, "Thermoelastic behavior of skin tissue induced by laser irradiation based on the generalized dual-phase lag model"; *Journal of Thermal Biology*. **100** (2021) 103038.

[٤] Q. Zhang, Y. Sun, J. Yang, A.K. Soh, X. Wang, "Theoretical analysis of thermal response in biological skin tissue subjected to multiple laser beams"; *Case Studies in Thermal Engineering* **24** (2021) 100853.

[٥] S.K. Sharma, D. Kumar, "A study on non-linear DPL model for describing heat transfer in skin tissue during hyperthermia treatment"; Entropy **22** (2020) 481.

[٦] J. Edrisa, M. Hassan, M. MA Almazah, "Bio-thermal non-equilibrium dynamics and thermal damage in biological tissues induced by multiple time pulse-laser irradiations"; *Case Studies in Thermal Engineering* **61** (2024) 104989.

شبیه‌سازی حسگر گازی بر پایه سیلیکون نیترید در پنجره مخابرات نوری

صبوری، علیرضا؛ بخشی، زهرا

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شاهد، تهران، ایران

چکیده

توسعه حسگرهای نوری دقیق با پاسخ‌دهی سریع، امکان ساخت دستگاه‌های آزمایشگاهی قابل حمل و یکپارچه روی تراشه را فراهم کرده و افق‌های جدیدی در سنجش و پایش گشوده است. این حسگرها با حساسیت بالا، ایمنی کامل در برابر تداخلات الکترومغناطیسی، تولید انبوه کم‌هزینه و ادغام آسان با میکروسیستم‌های سیال و الکترونیکی، گزینه‌ای ایده‌آل برای کاربردهای صنعتی، زیست‌محیطی و پزشکی هستند. در این پژوهش، حسگر گازی مبتنی بر میکروتشدیدکننده حلقه‌ای (میکروورینگ رزوناتور) از جنس سیلیکون نیترید بر بستر دی‌اکسید سیلیکون طراحی شد. سیلیکون نیترید به دلیل سازگاری با فناوری نیمه‌هادی مکمل اکسید فلزی، تلفات نوری پایین و پایداری شیمیایی، انتخابی مناسب می‌باشد. شبیه‌سازی‌ها در لومریکال با غلظت‌های مختلف دی‌اکسید کربن انجام گرفت. نتایج نشان‌دهنده حساسیت ۶۷۶ nm/RIU، فاکتور کیفیت ۶۳۵ و محدوده طیف آزاد حدود ۲۴ نانومتر است که عملکرد متعادل و دقیقی برای تشخیص تغییرات ضریب شکست فراهم می‌کند. این ترکیب مطلوب، همراه با ابعاد کوچک و مصرف توان ناچیز، پتانسیل بالایی برای دستگاه‌های قابل حمل ایجاد می‌کند و پایه‌ای برای تحقیقات آینده در حسگرهای نانوفوتونیک به شمار می‌رود.

واژه های کلیدی: *حسگر گازی، میکروتشدیدکننده نوری، شبیه‌سازی*

Simulation of Silicon Nitride-Based Gas Sensor in Optical Communication Window

Sabouri, Alireza; Bakhshi, Zahra

Department of physics, Faculty of basic sciences, Shahed university, Tehran, Iran

Abstract

The development of high-precision optical sensors with fast response times has enabled the realization of compact, chip-integrated laboratory devices, opening new horizons in sensing and monitoring. Featuring high sensitivity, full immunity to electromagnetic interference, low-cost mass production capabilities, and seamless integration with microfluidic and electronic systems, these sensors have become ideal for diverse industrial, environmental, and medical applications. In this study, a gas sensor based on a silicon nitride microring resonator fabricated on a silicon dioxide substrate was designed. Silicon nitride was selected due to its excellent compatibility with Complementary Metal-Oxide-Semiconductor (CMOS) technology, low optical losses, and high chemical stability. Comprehensive simulations were performed using Lumerical software under various carbon dioxide concentrations. The results demonstrate a sensitivity of 676 nm/RIU, a quality factor (Q-factor) of 635, and a Free Spectral Range (FSR) of approximately 24 nm, indicating a well-balanced performance for precise refractive index detection. This favorable combination of high sensitivity and Q-factor, along with the device's compact footprint and ultra-low power consumption, highlights its strong potential for portable sensing applications and lays a foundation for future research in nanophotonic sensors.

Keywords: *Gas sensor, optical microring resonatos, simulation*

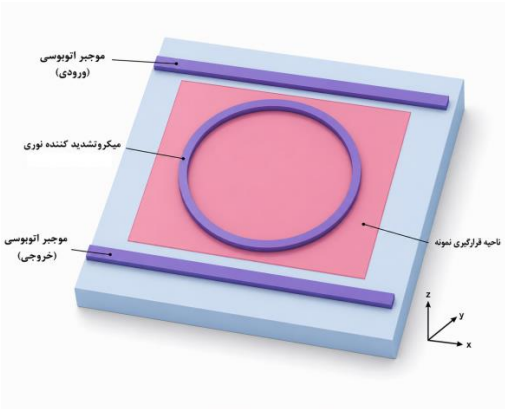
PACS No. ۴۲

مقدمه

حسگرهای فوتونیکی مبتنی بر میکروتشدیدکننده‌های حلقه‌ای در سال‌های اخیر به یکی از موضوعات مورد توجه جدی در حوزه حسگری گازی تبدیل شده‌اند. این حسگرها به دلیل اندازه بسیار فشرده، حساسیت بالای آن‌ها به تغییرات جزئی شاخص شکست، سازگاری با فرآیندهای ساخت نیمه‌هادی و قابلیت یکپارچه‌سازی آسان با سایر اجزای فوتونیکی، مزایای قابل‌توجهی نسبت به روش‌های سنتی ارائه می‌دهند. در میان مواد مختلف، سیلیکون نیترید (Si_3N_4) به عنوان یک پلتفرم بسیار مناسب برای کار در طول موج مخابراتی ۱۵۵۰ نانومتر شناخته شده است. این ماده تلفات انتشار بسیار پایینی دارد، شاخص شکست مناسبی ارائه می‌کند و از پایداری شیمیایی بالایی برخوردار است. در پژوهش حاضر، طراحی و شبیه‌سازی یک حسگر گازی مبتنی بر میکروتشدیدکننده‌های حلقه‌ای از جنس سیلیکون نیترید انجام شده است. این ساختار با بهره‌گیری از تعامل مستقیم میدان نوری محبوس‌شده در تشدیدکننده با محیط گازی اطراف، حساسیت بالایی را ایجاد می‌کند. طراحی به گونه‌ای انجام شده که حسگر بتواند تغییرات غلظت CO_2 را با دقت مناسب تشخیص دهد. فاکتور کیفیت بالا و حد تشخیص پایین این حسگر، آن را برای پایش دقیق غلظت گازها در کاربردهای زیست‌محیطی، صنعتی و پزشکی ایده‌آل می‌سازد.با توجه به روند رو به رشد نیاز به حسگرهای هوشمند، فشرده و قابل‌حمل، توسعه این نوع ساختارها می‌تواند گام مهمی در جهت تحقق سیستم‌های حسگری نسل بعدی باشد [۱].

شبیه‌سازی

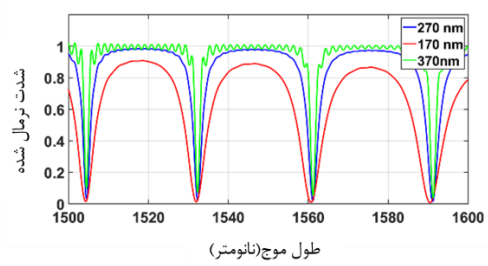
در این طراحی از نرم افزار لومریکال برای شبیه‌سازی استفاده شده است. این نرم افزار با توجه به دقت بسیار بالایی که در شبیه‌سازی‌ها دارد یکی از بهترین نرم افزارهای مورد استفاده در زمینه اپتیک و فوتونیک می‌باشد. در این مطالعه، یک حسگر نوری به شعاع تقریبا ٦ میکرومتر و سطح مقطع ۳٦۰×۷۰۰ نانومتر طراحی و شبیه‌سازی شده است. ساختار کلی این حسگر به صورت شکل ۱ می‌باشد که کادر قرمز رنگ قرارگرفته بر روی میکروحلقه محل قرارگیری نمونه مورد آزمایش می‌باشد. در این شبیه‌سازی از یک منبع نوری که در بازه فرکانسی بین ۱۵۰۰ نانومتر تا ۱٦۰۰ نانومتر کار می‌کند، استفاده گردیده است. این منبع برای دست‌یابی به ضریب حساسیت بالا و کیفیت بالا، در حسگرهای نوری بسیار مورد توجه می‌باشد. تغییر در هندسه چیدمان حسگر، می‌تواند باعث افزایش برهمکنش در حلقه‌ها و موجبر شود که در نتیجه باعث تغییر طیفی در نور خروجی می‌شود. مکان قله‌های تشدید، پهنای خط در نصف بیشینه شدت هر پیک تشدید با ویژگی‌های هندسی مانند محیط هر حلقه، عرض و ارتفاع موجبر، عرض و عمق شکاف‌های جفت شوندگی مرتبط می‌باشد. در ادامه برخی از عوامل هندسی حسگر، برای رسیدن به ساختار بهینه درنظر گرفته شده است. فاکتورهای در نظر گرفته شده به‌شرح زیر می‌باشند، فاصله شکاف بین حلقه تشدیدکننده و موجبرهای اتوبوسی، عرض موجبر اتوبوسی و ارتفاع حسگر.



شکل ۱: ساختار مورد استفاده به‌عنوان حسگر زیستی.

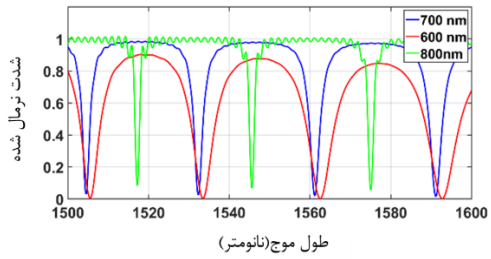
یکی از پارامترهای مهم در بهینه‌سازی ساختار میکروتشدیدکننده‌های نوری پیدا کردن فاصله مناسب بین موجبراتوبوسی و موجبرخمیده است. برای دست یابی به بهینه‌ترین فاصله شکاف بین موجبراتوبوسی و حلقه‌ای، نمودار شدت طیف عبوری در میکروتشدیدکننده نوری در فاصله شکاف‌های مختلف رسم گردیده است. همانطور که در شکل ۲ مشاهده می‌کنید در فاصله شکاف‌های مختلف شدت‌های مختلفی نمایش داده شده که ایده‌ال‌ترین فاصله با توجه به نمودار طیف عبوری برابر با ۲۷۰

نانومتر می‌باشد زیرا دارای بیشترین شدت عبور و کم‌ترین مقدار پهنای کامل در نیمه بیشینه می‌باشد.



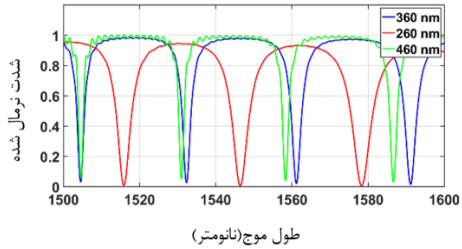
شکل۲: تاثیر فاصله‌های مختلف شکاف بین موجبر و حلقه تشدیدکنند.

یکی از با اهمیت‌ترین پارامترها در شبیه‌سازی بدست آوردن عرض مناسب موجبر می‌باشد، زیرا اگر عرض موجبر با دقت مناسب انتخاب نشود شاهد ایجاد مدهای غیر اصلی در شبیه سازی خواهیم بود. برای اعتبارسنجی انتخاب عرض مناسب، از ماژول مد نرم افزار لومریکال استفاده شده است. این ماژول بر پایه حل‌کننده روش تفاضل محدود در حوزه زمان با گام زمانی متغیر عمل می‌کند. برای بدست آوردن ایده‌ال‌ترین عرض در این ساختار، نمودار طیف عبور را برای عرض‌های مختلف همانند شکل ۳ رسم گردیده است. همانطور که در شکل ۳ مشاهده می‌کنید بهترین عرض برای ساختار حسگر پیشنهادی با توجه به شدت طیف عبوری عرض ۷۰۰ نانومتری می‌باشد.



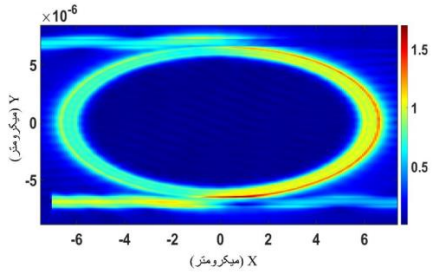
شکل۳: تاثیر اندازه عرض‌های مختلف در ساختار حسگر.

درنهایت آخرین پارامتری که به آن پرداخته شده، تاثیر ارتفاع می‌باشد. ارتفاع نیز باید همچون عرض با دقت انتخاب گردد و تمام شرایطی که برای عرض موجبر ذکر شد، برای انتخاب ارتفاع نیز صادق باشد برای این منظور نمودار طیف عبوری برای عرض‌های مختلف مطابق شکل ٤ رسم شده است. همانطور که در این شکل پیداست بهترین ارتفاع با توجه به شدت میدان و مقدار پهنای کامل در نیمه بیشینه برابر با ۳٦۰ نانومتر می‌باشد.



شکل٤: تاثیر ارتفاع‌های مختلف بر روی طیف عبوری حسگر.

با توجه به بهینه‌سازی‌های انجام شده بر روی عرض و ارتفاع ساختار مورد نظر، نمودار شدت میدان الکتریکی در شکل ۵ ارائه شده است.

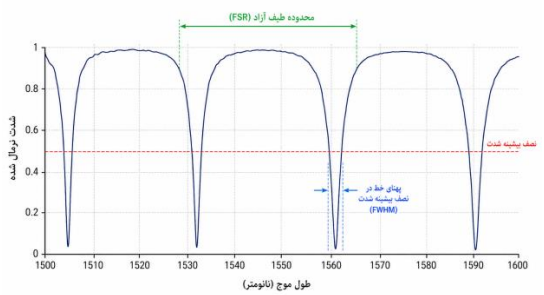


شکل۵: نمودار شدت میدان پس از اجرای شبیه‌سازی.

در ادامه، پارامترهای عملکردی کلیدی حسگر شامل حساسیت، محدوده طیف آزاد و فاکتور کیفیت محاسبه و تحلیل گردیده است. محدوده طیف آزاد که فاصله بین دو رزونانس در یک تشدیدگر است، با استفاده از معادله ۱ بر حسب فاصله طول موجی تعریف می‌شود.

$$FSR=\frac{\lambda^{2}}{2\pi R\times n_g} \qquad (۱)$$

که مقدار n_g توسط ماژل مد در نرم افزار لومریکال استخراج شده و مقدار آن برابر با ۲/۲۹ بدست آمده است. پس از استفاده از معادله ۱ و جایگذاری طول موج و شعاع حلقه در آن مقدار محدوده طیف آزاد برابر با ٢٤/٣٦ نانومتر بدست می‌آید و مقدار پهنای خط در نصف بیشینه شدت با توجه به‌نمودار طیف عبور که در شکل ۵ مشاهده می‌کنید مقدار آن برابر با ۲/٤٦ نانومتر محاسبه گردیده است[۲].



شکل ٦: نمودار طیف عبوری و محدوده طیف آزاد و پهنای خط در بیشینه شدت

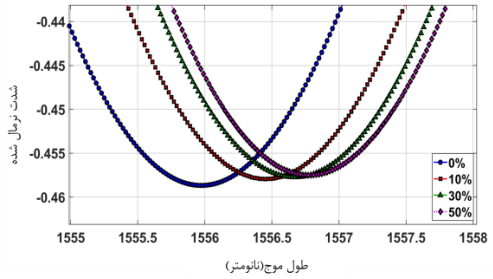
تاثیر غلظت‌های مختلف گاز کربن دی اکسید

در این بخش، غلظت‌های مختلف گاز کربن دی اکسید در ناحیه مشخص شده حسگر قرار گرفته و حساسیت حسگر برای هر غلظت محاسبه شده است. انتخاب سیلیکون نیترید به عنوان ماده هسته، عمدتاً به دلیل پایداری شیمیایی و حرارتی بالای آن صورت گرفته است. همانطور که در جدول ۱ مشاهده می‌کنید هر غلظت دارای یک ضریب شکست متفاوت می‌باشد، که طبق این جدول در شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گرفته‌اند.

جدول ۱: ضریب شکست غلظت‌های مختلف دی اکسید کربن [۳]

حساسیت – ضریب شکست	درصدهای مختلف دی اکسید کربن
۱/۳۵۵۸	۰
۱/۳۵٦۷	۱۰
۱/۳۵۷۱	۳۰
۱/۳۵۷۳	۵۰

در ادامه با توجه به ضریب شکست‌های مطرح شده در جدول فوق نمودار طیف عبوری برای غلظت‌های مطرح شده در شکل ۷ رسم گردیده است.



شکل ۷: نمودار طیف عبوری برای غلظت‌های مختلف.

همانطور که در شکل ۷ به وضوح مشاهده می‌کنید قله‌های تشدید با توجه به تغییرات ضریب شکست تغییر کرده است که مقدار این تغییرات پس از اندازه گیری تقریبا برابر با ۱ نانومتر می‌باشد. طبق معادله ۲ می‌توان حساسیت را محاسبه کرد که مقدار این حساسیت برابر است با ٦٧٦ nm/RIU می‌باشد.

$$S=\frac{\Delta\lambda}{\Delta n} \qquad (۲)$$

یکی از پارامترهای مهم در حسگرهایی که بر مبنای میکروتشدیدکننده‌های حلقه‌ای نوری طراحی و ساخته می‌شوند فاکتور کیفیت می‌باشد که از رابطه تغییرات طول موج تقسیم بر تغییرات ضریب شکست بدست می‌آید و برای ساختار طراحی شده مقدار آن برابر با ٦٣٥ می‌باشد.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، حسگر گازی مبتنی بر میکروتشدید کننده نوری از جنس سیلیکون نیترید طراحی شد که با دستیابی به تعادل کم‌نظیر میان حساسیت بالا (٦٧٦ nm/RIU) و فاکتور کیفیت مناسب (٦٣٥)، ضمن بهره‌گیری از مزایای کلیدی سازگاری با فناوری نیمه‌هادی مکمل اکسید فلزی، پایداری شیمیایی، حرارتی و ابعاد فشرده، پتانسیل چشمگیری برای یکپارچه‌سازی در سامانه‌های قابل‌حمل و هوشمند جهت پایش دقیق محیطی، صنعتی و پزشکی ارائه می‌دهد. این ساختار با غلبه بر محدودیت‌های مواد مرسوم، مسیری کارآمد و مقرون‌به‌صرفه را برای نسل آینده حسگرهای نوری هموار ساخته و با وجود چالش‌های باقی‌مانده در بهینه‌سازی تجربی، پایه‌ای مستحکم برای توسعه فناوری‌های تشخیصی پیشرفته و کاهش وابستگی به تجهیزات حجیم آزمایشگاهی فراهم می‌آورد.

مرجع‌ها

[۱] Butt, M.A. et al. (۲۰۲٤). Numerical and Experimental Demonstration of a Silicon Nitride Ring Resonator. Applied Sciences.

[۲] Heebner J., Grover R., and Ibrahim T., Optical microresonator theory. Springer(۲۰۰۸).

[۳] Oliveira, M. C., Delgado, F. S., Jucá, M. A., Faraco Filho, R. L., & Silveira, D. D. (۲۰۱۹). Optical Fiber Sensor for Carbon Dioxide Measurement Using Tapered Long Period Grating. In Proceedings of the Latin American Workshop on Optical Fiber Sensors (LAWOFS)

طراحی، ساخت و آزمایش میدانی حسگر فیبر نوری توزیعی ارتعاش مدفون

عارف ، سیدهاشم[۱]؛ محمودی ، علی[۱]؛ فاضلی ، سیدمهدی[۱]؛ کاظمی، محمدجواد[۱]

[۱]گروه اپتیک و لیزر، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم، بلوارالغدیر، قم

چکیده

در این پژوهش، طراحی، ساخت و ارزیابی میدانی یک سامانه حسگر ارتعاش توزیعی مبتنی بر فیبر نوری و تکنیک بازتاب‌سنجی نوری ارائه شده است. سامانه توسعه‌یافته با بهره‌گیری از پراکندگی رایلی برگشتی، امکان آشکارسازی و مکان‌یابی اختلالات ارتعاشی و صوتی را در طول فیبر فراهم می‌کند. به‌منظور ارزیابی عملکرد سامانه، مجموعه‌ای از آزمایش‌های آزمایشگاهی و میدانی شامل تحریک ارتعاشی کنترل‌شده و آزمون استاندارد ضربه چکش بر روی کابل‌های فیبر نوری مدفون اجرا شد. در آزمایش میدانی دو نوع کابل فیبر نوری در کانال به طول حدود ۹۰ متر و با عمق ۶۰ سانتی متری مدفون شد. نتایج نشان داد که سامانه قادر است بسامد ارتعاشات و موقعیت وقوع رویدادها را با دقت مکانی مناسب شناسایی کند. همچنین ثبت موفق سیگنال‌های ارتعاشی در فواصل ۲ تا ٤ کیلومتری، کارایی بالای سامانه را در کاربردهای پایش گسترده تأیید کرد. تحلیل داده‌های ثبت‌شده بیانگر حساسیت مطلوب سامانه نسبت به طیف وسیعی از بسامدهای صوتی و مکانیکی است.

واژه های کلیدی: *حسگر صوتی–ارتعاشی توزیعی، پراکندگی ریلی، بازتاب‌سنجی نوری در حوزه زمان*

Design, fabrication and testing of a distributed fiber optic vibration sensor

Aref, Seyed Hashem[1]; Mahmoudi[1], Ali; Fazeli[1], Seyed Mahdi[1]; Kazemi, MohammadJavad[1]

[1] Laser&Optics Group, Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Qom, Qom,

Abstract

This study presents the design, implementation, and field evaluation of a distributed fiber-optic vibration sensing system based on Optical Time Domain Reflectometry. By exploiting Rayleigh backscattering, the developed system enables the detection and localization of acoustic and vibrational disturbances along the entire length of the optical fiber. To evaluate the system performance, a series of laboratory and field experiments were conducted, including controlled vibration excitation and standard hammer-impact tests on buried fiber-optic cables. In the field trial, two types of fiber-optic cables were buried in a trench approximately 90 m long and 60 cm deep. The experimental results demonstrated that the system is capable of accurately identifying both the frequency content of vibrations and the location of event occurrences with appropriate spatial resolution.

Keywords: *Distributed Acoustic-Vibration Sensor, Rayleigh Scattering, Optical Time Domain Reflectometry*

PACS No.42, 43

مقدمه

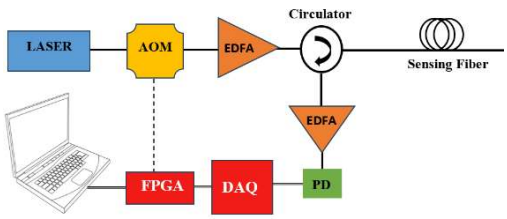
مفهوم حسگری صوتی–ارتعاشی توزیعی[۱] (DAS-DVS) برای طیف وسیعی از محیط‌های حسگری، مانند کابل‌های کواکسیال و سامانه‌های الکتریکی قابل اجرا است ولی پیاده‌سازی آن بر پایه فیبر نوری به دلیل مزایای متمایز آن، توجه زیادی را به خود جلب کرده است. از زمان ظهور در اوایل ۲۰۱۰، DAS مبتنی بر فیبر نوری از تحقیقات آزمایشگاهی به ابزاری قوی برای نظارت از راه دور در صنعت با پیشرفت در فناوری فوتونیک و الگوریتم های پردازش داده تبدیل شده است [۱]. DAS مبتنی بر فیبر نوری، بر اساس پس‌پراکندگی همدوس ریلی در فیبرهای نوری می باشد. سیستم‌های DAS اکنون می‌توانند با استفاده از روش‌های یادگیری ماشین [۲]، مجموعه داده‌های بزرگ را با دقت بیشتری تجزیه و تحلیل کنند. عملکرد DAS در شرایط سخت، از جمله تاسیسات اعماق دریا و

[1] Distributed Acoustic - Vibration sensing

مناطق با دمای بالا به اثبات رسیده است. محققان نشان داده‌اند که با انجام تغییراتی روی فیبر، نسبت سیگنال به نویز (SNR) افزایش یافته و دامنه عملیاتی را می توان گسترش داد [۳]. این پیشرفت‌ها در استقرار سیستم‌های DAS برای نظارت بر خطوط لوله، تحقیقات لرزه‌نگاری و سنجش محیطی بوده و بر سازگاری آن تأکید دارند. نظارت و پایش ژئوفیزیکی یکی از کاربردهای مهم DAS است، زیرا جایگزین مقرون به صرفه‌تری برای آرایه‌های لرزه‌نگاری سنتی ارائه می‌دهد. به طور مثال، کارکرد DAS در نظارت بر آتشفشان‌ها گزارش شده است [٤]. فناوری DAS در کاربردهای عملی مانند نظارت صنعتی و شهری آزمایش شده و دقت آن در شناسایی رویدادهایی مانند عبور و مرور وسایل نقلیه، حفاری و نفوذ و تهاجم ارزیابی شده است [۵]. پیاده‌سازی DAS در نظارت بر فضای زیر آب نیز افزایش یافته است، از جمله در یک مطالعه مهم، اثربخشی DAS در استفاده از فیبرهای مخابراتی موجود برای نظارت بر فعالیت‌های لرزه‌ای نشان داده شده است [٦].

اصول نظری و طراحی چیدمان

اساس سامانه DAS مبتنی بر بازتاب سنجی حساس به فاز در حوزه زمان (φ-OTDR) است و با بهره‌گیری از پراکندگی رایلی برگشتی و اثرات تداخلی موجود درآن، امکان تشخیص تغییرات فاز و شدت ناشی از اختلالات خارجی به‌صورت پیوسته و با وضوح مکانی مناسب فراهم می شود. در φ-OTDR، پالس‌های نوری با همدوسی بالا بصورت تناوبی به فیبر حسگر تزریق و امواج پس‌پراکنده رایلی از نقاط مختلف درون پالس با یکدیگر تداخل می‌کنند. در نتیجه این تداخل، سیگنال بازگشتی به شدت حساس به تغییرات فاز ناشی از اختلالات خارجی است. هرگونه موج مکانیکی یا صوتی که به فیبر اعمال شود، باعث تغییر طول و ضریب شکست هسته فیبر شده و تغییر فاز ایجاد می‌کند. این تغییر فاز عملا منجر به تغییر شدت سیگنال برگشتی شده و با بازیابی فاز، اختلالات و در نتیجه عامل خارجی شناسایی و با محاسبه زمان رفت‌وبرگشت سیگنال، موقعیت آن به دقت تعیین می‌شود [۱]. در شکل ۱ طرح چیدمان مورد استفاده ارائه شده است. مطابق شکل نور لیزر با همدوسی بالا و پهنای بسامدی ۳ KHz و طول موج ۱۵۵۰/۱۲ nm ابتدا توسط AOM به پالس هایی با پهنای ۱۰۰ تا۲۰۰ نانوثانیه و نرخ تکرار f_R ($f_R = \frac{v}{2L}$ که L طول فیبر و v سرعت نور در مغزی فیبر نوری است) تبدیل و پس از تقویت توسط EDFA و حذف نویز ASE به توان قله بیش از ۵۰۰ میلی وات رسیده و سپس از طریق چرخاننده نوری به مسیر فیبر مورد آزمایش منتقل می شود، سپس سیگنال ناشی از پراگندگی مجددا توسط EDFA با بهره ۲۷dB تقویت و توسط آشکارسازی نوری با پهنای باند بیش از ۱۰۰ MHz تقویت و نویزگیری می شود. در این چیدمان ازADC و FPGA با قابلیت ۲۵ MS/s بترتیب برای ثبت داده ها و تولید پالس تحریک AOM استفاده شده است.



شکل ۱. چیدمان تجربی DVS مبتنی برآشکارسازی مستقیم

سیستم φ-OTDR را می‌توان به مجموعه‌ای از تداخل‌سنج‌های فابری–پرو تصادفی توزیع‌شده در طول فیبر مدل کرد. در این مدل، پراکندگی و تداخل درون پالس معادل بازتاب و تداخل از آینه‌های تداخل‌سنج است. شدت سیگنال برگشتی (I) به‌صورت زیر بیان می‌شود:

$$I = \sum_{i=1}^{N} r_i^2 + 2\sum_{j=1}^{N-1}\sum_{k=j+1}^{N} r_j r_k \cos(\varphi_j - \varphi_k)$$

که جمله دوم نشان‌دهنده تداخل چندنقطه‌ای بین پراکنده‌های تصادفی درون نیم‌پهنای پالس است. در حضور اختلال فاز θ در پراکنده pام، تفاوت شدت بین دو رد متوالی (ΔI) به‌صورت زیر محاسبه می‌شود که رفتار غیرخطی و پدیده محوشدگی را توصیف می‌کند:

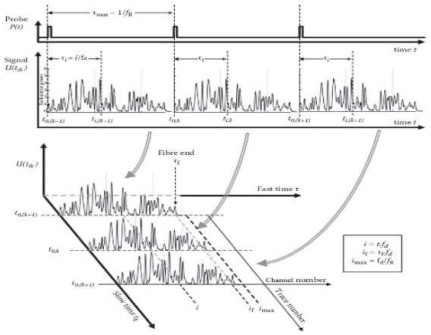
$$\Delta I = 2\sum_{j=1}^{q-1}\sum_{k=q}^{N} r_j r_k[\cos(\varphi_j - \varphi_k) - \cos(\varphi_j - \varphi_k - \theta)]$$

روش آشکارسازی مستقیم (مطابق شکل ۱) بعنوان ساده‌ترین و کم‌هزینه‌ترین پیکربندی، سیگنال بازگشتی مستقیماً توسط آشکارساز ثبت می‌شود. پردازش اولیه سیگنال مطابق شکل ۲ است بطوریکه ابتدا یک سیگنال خام خروجی φ-OTDR، ردپراکنش‌های (Traces) متوالی حاصل از تکرار پالس، پشت‌سرهم دریافت و سپس طی یک

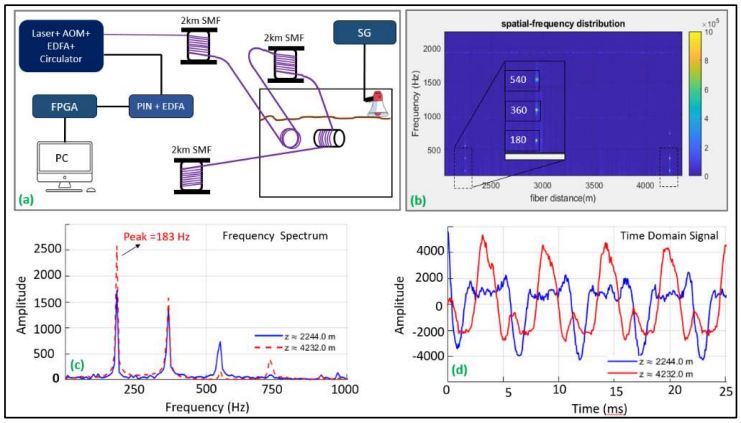
عملیات بازآرایی، هر ردپراکنش که متناظر با پایش یک پالس در طول فیبر است جدا شده و ردپراکنش های متوالی در طول محور زمان آهسته پشت‌سرهم قرار می گیرند. به این ترتیب خروجی دو بعدی φ-OTDR به صورت یک داده سه بعدی در می آید. در طول زمان آهسته، ردپراکنش ها قرار دارند که تغییرات زمانی سیگنال بازپراکندگی را در موقعیت مشخص نشان می دهند و در طول زمان سریع، کانال های داده قرار دارند که تغییرات زمانی سیگنال پراکندگی را در نقاط مختلف فیبر نشان می دهند.

سناریو آزمایش ها و تحلیل نتایج

در این پژوهش ما یک سامانه DAS مطابق شکل ۱ و با مشخصات مذکور، ساخته و چند آزمایش طراحی و اجرا کرده ایم. در سناریو اول (درون آزمایشگاه)، برای تست دقت مکان یابی و حساسیت سامانه در تشخیص بسامد ارتعاش خارجی، یک چیدمان آزمایشگاهی (شکل۳ –a) را پیاده سازی کرده ایم. در این چیدمان در فاصله های ۲ و ٤ کیلومتری از سامانه دو پیچه ۳ متری فیبر، که یکی از آنها به منظور افزایش حساسیت روی یک استوانه تفلونی پیچانده شده است، درون یک جعبه حاوی خاک رس در عمق تقریبی ۲۰cm مدفون شد. با استفاده از یک بلندگو روی سطح خاک، ارتعاشی با بسامد ۱۸۰Hz ایجاد شد.



شکل۲. مقیاس های زمانی در حسگری توزیعی ارتعاش

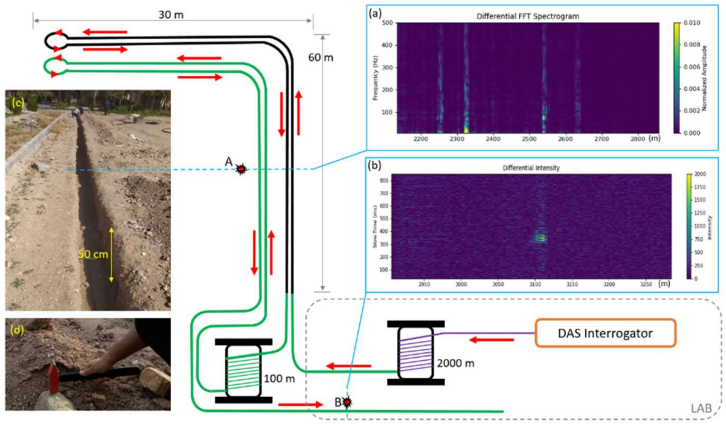


شکل۳. چیدمان و نتایج سناریو اول (داخل آزمایشگاه). a) طرحواره چیدمان آزمایش. b) توزیع بسامد–مکان. c) طیف فوریه. d) سیگنال زمانی.

مطابق شکل ۳–b و c، این بسامد و هماهنگ های بعدی آن توسط هر دو پیچه فیبری در مکان متناظر (با دقت ۱۰ متر، متناظر با پهنای پالس ۱۰۰ns) تشخیص داده شده است. مکانیزم های مختلفی، بویژه پاسخ غیر خطی در روش شدت سنجی، در ایجاد هماهنگ های بالاتر دخیل هستند. شکل ۳–d سیگنال های زمانی متناظر را نشان می دهد.

در سناریو دوم (آزمون میدانی)، تست استاندارد ضربه چکش انجام شد. این تست از آن جهت اهمیت دارد که ارتعاش ناشی از ضربه شامل طیف وسیعی از بسامدهای صوتی است، و بر اساس آن می‌توان میزان حساسیت سامانه به بسامدهای مختلف را مطالعه کرد. در این سناریو یک کانال حدود ۹۰ متری به عمق ٦۰ سانتی متر حفر شده و دو نوع کابل فیبر نوری (٤ هسته ای و ٤۸ هسته ای) در این کانال مدفون شده است. فضای زیر و بالای کابل ها با ۱۰ سانتیمتر خاک الک شده پوشانده شده است و سپس کانال با خاک معمولی کاملا پرشده است. استفاده از خاک الک شده مطابق استانداردهای مرسوم و برای حفاظت فیبر از آسیب و کاهش اتلاف است. همچنین

این امر به تقویت جفت شدگی صوتی خاک و فیبر کمک می کند. در شکل ٤ طرحواره مسیر نور در فیبر نشان داده شده است. آزمون چکش در دو نقطه از مسیر فیبر انجام شده است: یکی در محل دفن فیبر در بیرون آزمایشگاه که چهار فیبر (مسیر رفت و برگشت نور) از کنار آن مکان عبور می کنند (نقطه A در شکل ٤) و دومی در انتهای فیبر برگشتی به آزمایشگاه (نقطه B در شکل ٤). در شکل ٤ (a) نمودار توزیع بسامد برحسب مکان (توان طیفی ارتعاش) برای داده های ثبت شده مربوط به آزمون چکش در نقطه A رسم شده است. همانطور که انتظار می رود در ٤ نقطه مسیر فیبر (در ۲۲۵۰m، ۲۳۲۵m، ۲۵٤۰m و ۲٦۲۵m متناظر با مکانهای ثبت ضربه در طول مسیرهای مختلف رفت و برگشت نور در نقطه A) ضربه توسط سامانه ثبت شده است.



شکل٤. مسیر نور در کابل های مدفون و برگشت به آزمایشگاه و قرقره های به کار رفته برای ایجاد تاخیر. چیدمان و نتایج سناریو دوم (آزمون میدانی). a) و b) توان طیفی برحسب مکان برای آزمون چکش در نقطه A (فیبر مدفون) و نقطه B (فیبر برگشتی به آزمایشگاه). c) و d) موقعیت و مشخصات کانال حفر شده و آزمون چکش.

فاصله بین نقاط ثبت ارتعاش توسط فیبر های مختلف (ناحیه های پرشدت روی نمودار) با طول مسیر های رفت و برگشتی نور در فیبر همخوانی دارد. تفاوت بین شدت سیگنال های ثبت شده توسط فیبر های مختلف مربوط به عوامل متعددی از جمله تفاوت کابل‌های بکار رفته و همچنین کاهش شدت نور به دلیل اتلاف (مخصوصا در محل جوش فیبر های مختلف) است. در شکل ٤ (b) نمودار تغییر توزیع شدت نور برگشتی برحسب زمان (کند) و مکان (در طول فیبر) مربوط به آزمون چکش در نقطه B (در داخل آزمایشگاه) نشان داده شده است. مطابق انتظار، گستره زمانی سیگنال مربوط به ضربه چکش محدود (حدود ۵۰ms) است.

نتیجه گیری

یک سامانه حسگر توزیعی صوتی فیبر نوری طراحی و ساخته شده است. همچنین چند آزمایش میدانی (با مدفون کردن فیبر در یک کانال با طول حدود ۹۰ متر) برای ارزیابی عملکرد آن انجام شده است. براساس نتایج آزمایش های انجام شده در داخل و بیرون آزمایشگاه، به صورت عملی نشان داده شد که از فیبر های مدفون در خاک در عمق های استاندارد مخابراتی می توان به عنوان حسگر توزیع شده صوتی–ارتعاشی برای کشف ضربه و خوانش بسامد ارتعاشات خارجی استفاده کرد.

مرجع‌ها

[۱] Arthur H. Hartog; *An introduction to distributed optical fibre sensors*. CRC press, (2017).
[۲] A.L. Stork, et al.; "Application of machine learning to microseismic event detection in distributed acoustic sensing data", Geophysics 85 (5) (2020).
[۳] P.S. Westbrook, et al.; "Enhanced optical fber for distributed acoustic sensing beyond the limits of Rayleigh backscattering", iScience 23 (6) (2020).
[٤] P. Jousset, et al.; "Fiber optic distributed acoustic sensing of volcanic events", Nat.Commun. 13 (1) (2022).
[٥] S. Saharudin, et al.; "Field verifcation of distributed acoustic fber optic sensor system using customized disturbance simulator equipment", IEEE Sensors Lett. 7 (9) (2023).
[٦] P.D. Hernandez, J.A. Ramirez, M.A. Soto; "Deep-learning-based earthquake detection for fber-optic distributed acoustic sensing", J. Light. Technol. 40 (8) (2022)

پیاده سازی آزمایشگاهی ارتعاش سنج توزیعی فیبر نوری و خوانش فاز به روش PGC-DCM

مکتوبیان، عارفه؛ عارف، سید هاشم

آزمایشگاه تحقیقاتی فوتونیک، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم، قم

چکیده

در این مقاله یک حسگر توزیعی فیبرنوری حساس به فاز (φ-OTDR) با استفاده از وامدگردانی همودین بر پایه الگوریتم PGC-DCM پیاده سازی شده است. برای این منظور ابتدا یک حسگر موضعی فیبر نوری بر پایه تداخل سنجی به روش PGC-DCM طراحی و مشخصه یابی شد تا کارآیی این روش در خوانش فاز در خروجی سیستم φ-OTDR ارزیابی گردد. سپس سیستم φ-OTDR به روش مستقیم به صورت شدت سنجی پیاده سازی شد و ارتعاشات شبیه سازی شده در آزمایشگاه توسط حسگر مشخصه یابی گردید. در نهایت، این دو روش با یکدیگر ترکیب شده و یک حسگر توزیعی حساس به فاز برای کاربردهای ارتعاش سنجی توزیعی و خوانش فاز پیاده سازی شد.

واژه های کلیدی: *تداخل سنج تمام فیبری، حسگر توزیعی فیبر نوری، بازتاب سنجی نوری در حوزه زمان، ارتعاش سنجی توزیعی حساس به فاز.*

Laboratory implementation of a fiber optic distributed vibrometer using the PGC-DCM method

Maktoubian, Arefe; Aref, Seyed Hashem

Photonics research laboratory, Department of Physics, Faculty of basic sciences, University of Qom, Qom

Abstract

In this paper, a distributed phase-sensitive fiber optic sensor (φ-OTDR) has been implemented using homodyne demodulation based on the PGC-DCM algorithm. For this purpose, first, a local fiber optic interferometric sensor using the PGC-DCM method was designed and characterized to evaluate the effectiveness of this method in reading the phase at the output of the φ-OTDR system. Then, the φ-OTDR system was implemented by the direct intensity-based method, and the simulated vibrations in the laboratory were characterized by the sensor. Finally, these two methods are combined and a distributed phase-sensitive sensor has been implemented for distributed vibrometry applications and phase reading at the output of the system.

***Keywords**: All-fiber interferometry, distributed fiber optic sensor, time-domain optical reflectometry, phase-sensitive distributed vibrometry.*
PACS No. 42, 43

مقدمه

حسگرهای تداخل‌سنجی فیبر نوری به تغییرات فاز بسیار حساس هستند و می‌توانند برای اندازه گیری تغییرات لحظه‌ای کرنش در طول فیبر به کار روند. بسته به هدف، روش‌های مختلفی برای استخراج تغییرات فاز در امتداد فیبر نوری وجود دارد. دو روش ارزان و مناسب وامدگردانی همودین غیر فعال[1]، استفاده از حامل تولید فاز (PGC) و کوپلر ۳×۳ فیبری است. وامدگردانی PGC مزایایی مانند دامنه دینامیکی زیاد، خطی بودن مناسب، حساسیت بالا و قابلیت چندگانه‌سازی حسگرها را داراست؛ از این‌رو به طور گسترده برای وامدگردانی سیگنال حسگرهای تداخل‌سنجی فیبر نوری استفاده می‌شود [۱]. علاوه بر این، در این روش در مقایسه با روش کوپلر ۳×۳، تنها به یک آشکارساز نیاز است و بنابراین هزینه کمتری دارد. در بخش اول مقاله، اصول و نحوه پیاده سازی PGC برای یک حسگر ارتعاش موضعی تشریح می شود. در بخش دوم،

[1] Passive homodyne demodulation

حسگر توزیعی (φ-OTDR) به روش شدت سنجی پیاده سازی و مشخصه یابی می‌گردد. ساده‌ترین رویکرد در ارتعاش سنجی توزیعی، همین روش مستقیم و پایش ارتعاشات از روی تغییرات شدت نور تداخلی است. این روش به دلیل رفتار غیرخطی، برای کاربردهایی که به تابع انتقال قابل پیش‌بینی نیاز دارند، مناسب نیست. با این حال، این روش برای تشخیص، مکان یابی و حتی طبقه بندی رویدادهای اغتشاشی با موفقیت استفاده شده است. در بخش سوم بازیابی کمی فاز در حسگر توزیعی (φ-OTDR) به عنوان هدف نهایی، پیاده سازی می شود.

خوانش فاز با حسگر ارتعاش سنج موضعی

در یک حسگر تداخل سنجی با ساختاری مشابه شکل۱، اگر کرنش $\delta l(t)$ ناشی از ارتعاشات بر یکی از دو بازوی تداخل سنج اعمال شود، اختلاف فاز نوری دو بازو به صورت زیر خواهد بود:

$$\varphi(t) = 4\pi \frac{n[\Delta L + \xi \delta l(t)]}{\lambda} \quad (۱)$$

که در آن λ، n، ΔL و ξ به ترتیب طول موج لیزر، ضریب شکست، اختلاف طول دو بازو و ضریب فوتوالاستیسیته فیبر (برابر ۰/۷۸) هستند. بنابراین با محاسبه $\varphi(t)$ می توان اطلاعات کرنش و ارتعاشات اعمال شده بر فیبر را استخراج کرد. سیگنال خروجی در حالت ساده به صورت $S(t) = S_0 + S_1 cos\varphi(t)$ است که در آن S_0 و S_1 به ترتیب مؤلفه های DC و AC سیگنال هستند. اگر بخواهیم $\varphi(t)$ از $S(t)$ وامدگردانی شود، در روش PGC باید یک سیگنال فاز حامل با بسامدی چند برابر سیگنال ارتعاشی و دامنه مناسب تولید شود. این سیگنال را می‌توان با مدولاسیون جریان در لیزرهای دیودی یا با مدولاتورهای فاز ایجاد کرد. اعمال مدولاسیون جریان به دیود لیزر به ناچار یک مدولاسیون شدت نوری جانبی ایجاد کرده و منجر به اعوجاج در خروجی می شود [۲]. عملاً استفاده از مدولاتورهای فاز، نظیر مبدل پیزوالکتریک (PZT) یا مدولاتور الکترواپتیک (EOM)، می‌تواند از این مشکل جلوگیری کند [۳]. اگر سیگنال فاز حامل با دامنه C و بسامد ω_c بصورت $Ccos\omega_c t$، باشد، سیگنال تداخلی به صورت زیر بیان می شود:

$$S(t) = S_0 + S_1 cos[Ccos(\omega_c t - \theta) + \varphi(t)] \quad (۳)$$

که در آن θ تأخیر فاز حامل است. اگر سیگنال تداخلی $S(t)$ به ترتیب در هماهنگ اول و دوم سیگنال فاز حامل ضرب شود، پس از اعمال فیلتر پایین‌گذر (LPF)، یک جفت مؤلفه هم‌فاز و متعامد به صورت زیر به دست می‌آید [۵]:

$$P_1(t) = LPF[S(t)cos\omega_c t] = -S_1 J_1(C)cos\theta sin\varphi(t) \quad (۴)$$

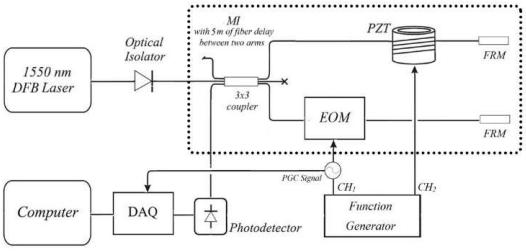
$$P_2(t) = LPF[S(t)cos2\omega_c t] = -S_1 J_2(C)cos2\theta cos\varphi(t) \quad (۵)$$

که J_1 و J_2 توابع بسل مرتبه اول و دوم هستند. روش های مختلف استخراج فاز $\varphi(t)$ از مولفه های P_1 و P_2، انواع روش های وامدگردانی PGC را به دنبال دارد که از جمله آنها می توان به وامدگردانی آرک تانژانت و روش مشتق‌گیری و ضرب متقاطع یا DCM اشاره کرد. از این میان، الگوریتم DCM برای φ-OTDR مناسب تر است چراکه به الگوریتم‌های پیچیده فازگشایی فاز (phase-unwrapping) نیاز ندارد و در برابر اعوجاجات هارمونیک نامطلوب مقاوم‌تر است [۴].

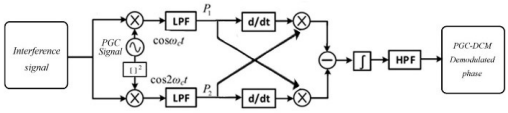
مطابق شکل۲ با اعمال محاسبات الگوریتم DCM بر مولفه های P_1 و P_2 سیگنال خروجی به صورت زیر به دست می‌آید [۵]:

$$Y(t) = S_1^2 J_1(C)J_2(C)cos(\theta)cos(2\theta)\varphi(t) = B\varphi(t) \quad (۶)$$

واضح است که خروجی وامدگردانی متناسب با فاز مورد اندازه‌گیری $\varphi(t)$ است و ضریب B تحت تأثیر عمق مدولاسیون C، تاخیر فاز θ و شدت لیزر (متناظر با S_1) است. سامانه حسگر موضعی بر اساس تداخل سنج مایکلسون مطابق شکل۱، در آزمایشگاه پیاده سازی شده است.



شکل۱. نمودار شماتیک ارتعاش سنج موضعی مایکلسون



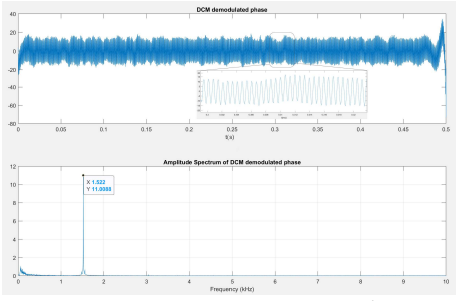
شکل۲. نمودار شماتیک الگوریتم دیجیتال DCM

برای شبیه سازی ارتعاشات اعمالی بر فیبر، از مبدل پیزو الکتریک (PZT) با ۵ متر فیبر پیچیده شده دور آن و سیگنال سینوسی با بسامد ۱۵۲۳ Hz استفاده شده است. مدولاتور الکترواپتیک (EOM)

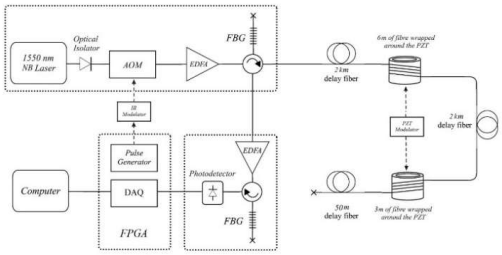
سیگنال حامل فاز با بسامد ۲۰ kHz را روی بازوی دیگر اعمال می کند. سیگنال تداخلی خروجی و سیگنال حامل، همزمان توسط مبدل آنالوگ به دیجیتال (DAQ) ثبت شده و در رایانه با پیاده سازی الگوریتم PGC مطابق شکل۲، سیگنال فاز متناسب با ارتعاش استخراج می شود. نمونه سیگنال خروجی وامدگردانی شده و تبدیل فوریه آن در شکل۳ نمایش داده شده است. اندازه گیری فرکانس در این آزمایش با تفکیک ۲ هرتز (پنجره زمانی ۰.۵ ثانیه) انجام شده است. در تحلیل های بیشتر، در محدوده دامنه ۱ تا ۱۰ ولت، بین ولتاژ اعمالی به PZT و دامنه قله بسامد در تحلیل فوریه سیگنال، رفتار خطی مشاهده شد.

شدت سنجی با حسگر ارتعاش سنج توزیعی

اساس حسگری توزیعی مبتنی بر بازتاب سنجی نوری حوزه زمان (OTDR)، تشخیص تغییرات سیگنال بازپراکندگی رایلی همدوس است که توسط مراکز پراکندگی کاتوره‌ای موجود در هسته فیبر ایجاد شده و به ابتدای فیبر بازمی گردد. برای این منظور سامانه ای مشابه شکل٤ طراحی و در آزمایشگاه پیاده سازی شد. در این سامانه نور لیزر بسیار همدوس با استفاده از مدولاتور آکوستواپتیکی (AOM) به صورت یک رشته پالس‌های کاوشگر با دوره تناوب تکرار ٤٤ میکروثانیه، پس از تقویت توسط EDFA و حذف نویز ASE، به درون فیبر حسگر ارسال می شود. سیگنال بازگشتی، پس از عبور از تقویت کننده EDFA توسط آشکارساز سریع و برد پردازش سریع FPGA ثبت می شود. سپس داده ها در امتداد مقیاس فاصله و زمان به صورت داده‌های دو بعدی بازآرایی شده و پردازش داده لازم انجام می‌شود. برای استخراج اطلاعات فرکانسی از داده دوبعدی، توزیع فضایی بسامد داده ها محاسبه می شود.



شکل۳: سیگنال ارتعاش ۱۵۲۳ Hz استخراج شده از ارتعاش سنج موضعی.

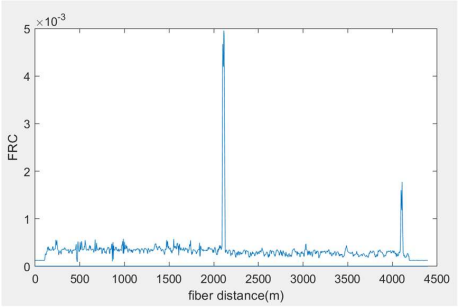


شکل٤. نمودار شماتیک ارتعاش سنج توزیعی حساس به دامنه.

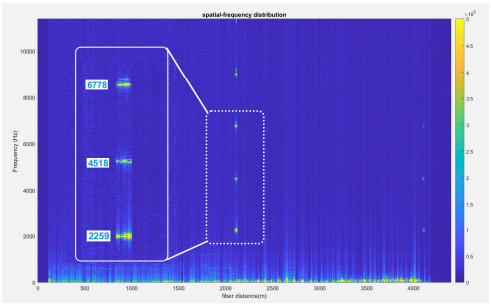
همچنین برای ارزیابی میزان نوسانات ردپراکنش ها، ضریب نسبت نوسانات (FRC) به شکل زیر تعریف و محاسبه شده است [٦]:

$$FRC = \frac{1}{M_{k}-1}\sum_{i=2}^{M_k}|k_i-k_{i-1}|/T_p \qquad (۷)$$

که در آن M_k تعداد کل ردپراکنش‌های متوالی، k_i توان نوری بازپراکنده نرمال‌شده در یک نقطه مشخص از فیبر حسگر در ردپراکنش i ام و T_p دوره تناوب تکرار پالس می باشد. این کمیت می تواند معیاری برای مکان یابی محدوده اغتشاش در فیبر باشد.



شکل۵: توزیع فضایی ضریب نسبت نوسانات ردپراکنش ها.



شکل٦: توزیع فضایی بسامد ردپراکنش ها.

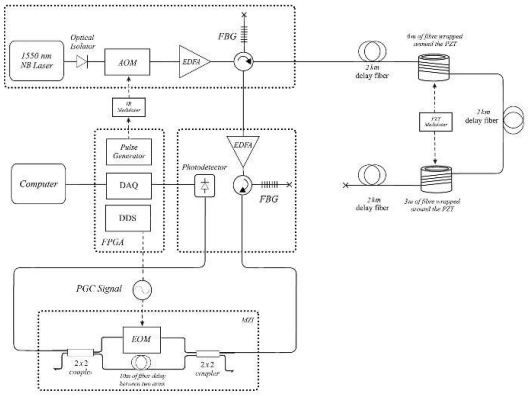
در طرح پیاده سازی شده، در دو موقعیت حدودی ۲ و ٤ کیلومتری از فیبر حسگر، فیبر بطول ۵ متر بدور یک PZT بطور مشترک پیچانده شده و سیگنال سینوسی با بسامد ۲۲۵٦ هرتز اعمال شده است. شکل ۵ نمودار توزیع فضایی FRC اندازه گیری شده را نشان

می دهد که در آن، مکان دو پیچه با دقت ۱۰ متر متناظر با عرض پالس ۱۰۰ نانوثانیه در طول فیبر تشخیص داده شده است. همچنین توزیع فضایی بسامد دامنه بازپراکندگی، در شکل٦ آمده است که بسامد ۲۲۵٦ Hz و هماهنگ های بالاتر (به علت پاسخ غیرخطی در روش شدت سنجی) با تفکیک فرکانسی حدود ۸ هرتز (پنجره زمانی حدود ۱۲۵ میلی ثانیه) در مکان پیچه ها، در آن مشخص است.

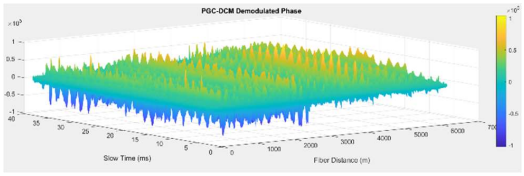
خوانش فاز با حسگر ارتعاش سنج توزیعی

در نهایت برای خوانش فاز در سیستم φ-OTDR، مطابق شکل ۷، طبق مرجع [۷] سیگنال بازپراکنده وارد یک تداخل سنج ماخ–زندر نامتعادل با تاخیر ۱۰ متر می شود و از طریق وامدگردانی PGC و استفاده از الگوریتم DCM، فاز به صورت ماتریسی به طور همزمان به ازای تمام کانال های داده محاسبه می‌شود (هر کانال داده، متناظر با نرخ نمونه برداری ۲۵ MS/s در FPGA، معادل تفکیک فضایی ٤ متر در حسگر توزیعی است). در این طرح، تولید سیگنال حامل نیز توسط FPGA پیاده سازی شده است.

در این آزمون از ٦ کیلومتر فیبر نوری و دو PZT در موقعیت های ۲ و ٤ کیلومتری در مسیر فیبر استفاده شده است. شکل ۸ توزیع فضایی–زمانی نمونه فاز سیگنال وامدگرانی شده، با تفکیک فضایی ۱۰ متر و تفکیک زمانی ٦٤ میکروثانیه (متناظر با دوره تکرار پالس) را نشان می دهد. در این نمودار سه بعدی دامنه سیگنال استخراج شده از فاز، بر حسب رادیان به صورت تابعی از زمان در امتداد فیبر نمایش داده شده است و تغییرات زمانی ارتعاشات اعمالی در مکان پیچه ها در طول فیبر مشخص است.



شکل۷: نمودار شماتیک ارتعاش سنج توزیعی حساس به فاز PGC.



شکل۸: توزیع فضایی–زمانی سیگنال ارتعاش ۷۱۲ Hz اعمال شده در دو نقطه ۲ و ٤ کیلومتری فیبر ارتعاش سنج توزیعی حساس به فاز.

نتیجه گیری

به منظور خوانش فاز در حسگرهای توزیعی فیبری حساس به فاز (φ-OTDR) مبتنی بر پس پراکندگی رایلی، روش‌های متعددی وجود دارد. یکی از این روش‌ها، بهره‌گیری از تداخل‌سنجی نامتعادل و پیاده سازی وامدگردانی غیر فعال PGC در خروجی حسگر توزیعی است که امکان استخراج فاز را فراهم می‌کند.

در این پژوهش، ابتدا تداخل‌سنجی فیبری موضعی مشخصه یابی، و الگوریتم PGC-DCM پیاده سازی شد. سپس از این ساختار برای خوانش فاز در حسگر توزیعی مبتنی بر φ-OTDR استفاده و نتایج آزمایش مربوطه گزارش شده است.

مرجع‌ها

[۱] Sh. Huang and H. Lin; "Modified phase-generated carrier demodulation compensated for the propagation delay of the fiber"; *Applied Optics* **46**, No. 31 (2007).

[۲] S.C. Huang, Y.F. Huang, F.H. Hwang; "An improved sensitivity normalization technique of PGC demodulation with low minimum phase detection sensitivity using laser modulation to generate carrier signal"; *Sensors Actuators* **A 191** (2013) 1–10.

[۳] Q. Lin, L. Chen, S. Li, X. Wu; "A high-resolution fiber optic accelerometer based on intracavity phase generated carrier (PGC) modulation"; *Meas. Sci. Technol* **22(1)** (2011).

[٤] A. E. Alekseev, V. S. Vdovenko, V. T. Potapov, & I. A. Sergachev; "A phase-sensitive optical time-domain reflectometer with dual-pulse phase modulated probe signal"; *Laser Physics* **24(5)** (2014).

[٥] Sh. Zhang, Y. Chen, B. Chen, L. Xie; "A PGC-DCDM demodulation scheme insensitive to phase modulation depth and carrier phase delay in an EOM-based SPM interferometer"; *Optics Communications* **474** (2020) 126183.

[٦] H. Qian, B. Luo, H. He, X. Zhang, X., Zou, X., et all; "Phase Demodulation Based on DCM Algorithm in Phase-OTDR With Self-Interference Balance Detection"; *IEEE Photonics Technology Letters* **32(8)** (2020) 1041-1135.

[۷] G. Fang, T. Xu, W. Feng, & Li, F; "Phase sensitive optical time domain reflectometer based on phase generated carrier algorithm"; *Journal of Light wave Technology*, **33(13)** (2015) 2811–2816.

طراحی و توسعه زنجیره تقویت و آشکارسازی کم‌نویز برای حسگر qPlus در کاربردهای میکروسکوپ پروب روبشی

رجائی گلسفیدی، آرین[۱]؛ چیمه، عباس[۱]

[۱] *دانشکده فیزیک، دانشکدگان علوم، دانشگاه تهران، انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران*

چکیده

حسگر qPlus به دلیل ضریب کیفیت بالا، پایداری مکانیکی مناسب و حساسیت زیاد، امروزه به یکی از گزینه‌های مطرح در سامانه‌های مدرن میکروسکوپ پروب روبشی تبدیل شده است. در این پژوهش، سامانه الکترونیکی مورد نیاز برای یکپارچه‌سازی حسگر qPlus با میکروسکوپ پروب روبشی موجود در آزمایشگاه طراحی شده است. ساختار پیشنهادی شامل مدار تحریک، جبران اثرات خازنی ناخواسته و زنجیره تقویت مبتنی بر تقویت‌کننده ترانس‌ایمپدانس است. عملکرد سامانه از طریق تحلیل‌های تئوری، شبیه سازی در محیط LTspice و ارزیابی عملی اولیه مورد بررسی قرار گرفت. نتایج تحلیل‌های تئوری و شبیه‌سازی نشان داد زنجیره تقویت دارای بهره‌ای در حدود ٤٤ دسی‌بل بوده و در فرکانس مرجع ۳۲/۷۶۸ کیلوهرتز، چگالی طیفی نویز خروجی حدود ۷/۵٤ میکروولت بر جذر هرتز و نویز معادل ورودی حدود ۱۰۱ فمتوآمپر بر جذر هرتز است. این نتایج، همراه با ارزیابی‌های عملی اولیه، مؤید قابلیت معماری پیشنهادی برای به‌کارگیری حسگر qPlus در سامانه میکروسکوپ پروب روبشی موجود در آزمایشگاه است.

واژه های کلیدی: حسگر*qPlus* ، میکروسکوپ پروب روبشی ، تقویت کننده ترانس‌ایمپدانس ، تقویت کننده کم‌نویز.

Design and Development of a Low-Noise Amplification and Detection Chain for qPlus Sensors in Scanning Probe Microscopy Applications

Rajaei Golsefidi, Arian[1]; Chimeh, Abbas[1]

[1] *Department of Physics, College of Science, University of Tehran, Tehran*

Abstract

Due to its high quality factor, suitable mechanical stability, and high sensitivity, the qPlus sensor has become one of the prominent options in modern scanning probe microscopy systems. In this research, the electronic system required for integrating a qPlus sensor with the scanning probe microscope available in the laboratory is presented. The proposed structure includes a sensor excitation circuit, compensation of undesired capacitive effects, and an amplification chain based on a transimpedance amplifier. The performance of the system was evaluated through theoretical analyses, simulations in the LTspice environment, and preliminary experimental assessments. The results of theoretical analyses and simulations showed that the amplification chain provides a gain of approximately 44 dB and, at the reference frequency of 32.768 kHz, achieves an output noise spectral density of about 7.54 μV/√Hz and an equivalent input noise of about 101 fA/√Hz. These results, together with the preliminary experimental evaluations, confirm the capability of the proposed architecture for employing the qPlus sensor in the scanning probe microscopy system available in the laboratory.

***Keywords**: qPlus Sensor, Scanning Probe Microscopy, Transimpedance Amplifier, Low-Noise Amplifier.*

PACS No. 7

مقدمه

میکروسکوپ‌های پروب روبشی (SPM) از مهم‌ترین ابزارهای مطالعه و مشخصه‌یابی ساختارها در مقیاس نانو به شمار می‌روند. در میان انواع مختلف SPM، میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) به دلیل توانایی تصویربرداری با تفکیک‌پذیری بالا و امکان مطالعه خواص سطحی مواد در مقیاس نانو، به یکی از مهم‌ترین ابزارهای پژوهشی در علوم و مهندسی تبدیل شده است [۱]. در سال‌های اخیر، حسگر qPlus به دلیل ضریب کیفیت بالا، پایداری مکانیکی مناسب و قابلیت آشکارسازی مستقیم ارتعاشات، به یکی از گزینه‌های مطرح در سامانه‌های مدرن AFM تبدیل شده است. این حسگر که بر پایه یک چنگال کوارتزی اصلاح‌شده ساخته می‌شود، امکان عملکرد پایدار در شرایط مختلف آزمایشگاهی را فراهم کرده و در بسیاری از سامانه‌های تصویربرداری با تفکیک‌پذیری بالا مورد استفاده قرار گرفته است [۲]، [٤]. همچنین قابلیت استفاده هم‌زمان در سامانه‌های ترکیبی AFM/STM از دیگر ویژگی‌های مهم این حسگر به شمار می‌رود [۳]–[٤].

با وجود مزایای متعدد حسگر qPlus، بهره‌برداری از آن مستلزم استفاده از سامانه الکترونیکی مناسب برای تحریک حسگر، جبران اثرات خازنی ناخواسته و تقویت سیگنال‌های اندازه‌گیری‌شده است. از آنجا که عملکرد نهایی سامانه به‌طور مستقیم تحت تأثیر نویز، بهره و پایداری مدارهای الکترونیکی قرار دارد، طراحی زنجیره تقویت کم‌نویز از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است [۲]–[٤]. در این پژوهش، سامانه الکترونیکی مورد نیاز برای به‌کارگیری حسگر qPlus در میکروسکوپ پروب روبشی موجود در آزمایشگاه طراحی و ارزیابی شده است. ساختار پیشنهادی شامل مدار تحریک، بخش جبران اثرات خازنی ناخواسته و زنجیره تقویت مبتنی بر تقویت‌کننده ترانس‌ایمپدانس است. عملکرد سامانه از طریق تحلیل‌های تئوری، شبیه‌سازی و ارزیابی‌های عملی اولیه مورد بررسی قرار گرفته است.

طراحی سامانه الکترونیکی

نخست، زیرساخت الکترونیکی میکروسکوپ پروب روبشی موجود در آزمایشگاه مورد بررسی قرار گرفت تا امکان یکپارچه‌سازی حسگر qPlus با حداقل تغییرات در معماری اصلی دستگاه ارزیابی شود. این بررسی نشان داد که منبع تغذیه متقارن، مولد سیگنال دیجیتال و ورودی مجزای تقویت‌کننده قفل‌شونده (Lock-in Amplifier) در سامانه موجود در دسترس هستند. از این رو، راهبرد طراحی بر توسعه یک زیرسامانه سازگار با امکانات موجود و افزودن قابلیت استفاده از حسگر qPlus متمرکز شد.

مدل الکتریکی حسگر qPlus از یک شاخه معادل مکانیکی شامل مقاومت، سلف و خازن معادل سری در کنار ظرفیت خازنی موازی الکترودهای حسگر تشکیل شده است [۲]، [٤]. این حسگر معمولاً در بازه فرکانسی حدود ۲۵ تا ۳۳ کیلوهرتز عمل کرده و سیگنال خروجی آن در محدوده جریان‌های نانوآمپری تا زیر نانوآمپری قرار می‌گیرد [۲]–[٤]. در چنین ساختاری، سیگنال تحریک می‌تواند از طریق ظرفیت خازنی ذاتی حسگر مستقیماً به مسیر اندازه‌گیری کوپل شده و مؤلفه‌ای ناخواسته در خروجی ایجاد کند. از سوی دیگر، دامنه بسیار کوچک سیگنال مفید، استفاده از زنجیره تقویت با بهره بالا و نویز ورودی بسیار کم را ضروری می‌سازد.

بر این اساس، معماری نهایی سامانه از سه بخش اصلی شامل مدار تحریک، مدار جبران اثرات خازنی و زنجیره تقویت مبتنی بر تقویت‌کننده ترانس‌ایمپدانس تشکیل شد. در این ساختار، مدار تحریک وظیفه راه‌اندازی حسگر، بخش جبران خازنی وظیفه کاهش مؤلفه‌های ناشی از کوپل خازنی و زنجیره تقویت وظیفه تبدیل و تقویت سیگنال خروجی تا سطح مناسب برای پردازش توسط سامانه آشکارسازی را بر عهده دارد.

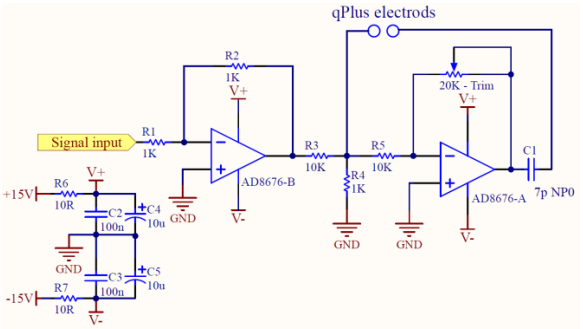
مدار تحریک و جبران اثرات خازنی ناخواسته

با توجه به الزامات الکترونیکی حسگر qPlus، مدار تحریک و جبران اثرات خازنی طراحی‌شده در شکل ۱ نشان داده شده است. در بخش تحریک، سیگنال تولیدشده توسط مولد سیگنال سامانه پس از عبور از یک تقویت‌کننده وارونگر با بهره واحد، ضمن ایزوله‌شدن از بار حسگر، برای استفاده در مسیرهای تحریک و

جبران آماده می‌شود. سپس دامنه سیگنال به کمک یک تقسیم مقاومتی کاهش یافته و به حسگر اعمال می‌شود. این روش امکان تولید دامنه‌های تحریک پایین و پایدار را فراهم می‌کند.

به منظور جبران اثرات خازنی ذاتی حسگر و کاهش کوپل مستقیم سیگنال تحریک به مسیر اندازه‌گیری، از یک مدار جبران خازنی فعال استفاده شد. دامنه سیگنال جبرانی به‌گونه‌ای تنظیم می‌شود که مؤلفه‌های ناخواسته ناشی از ظرفیت خازنی حسگر تا حد امکان حذف شوند. از آنجا که مقدار ظرفیت خازن جبران‌ساز مستقیماً بر عملکرد این فرآیند اثر می‌گذارد، از خازن NP0 با پایداری حرارتی بالا و ضریب ولتاژی ناچیز استفاده شد.

با توجه به حساسیت بالای سامانه نسبت به نویز تغذیه، برای تمامی طبقات از شبکه‌های دیکوپلینگ محلی استفاده شد. در این شبکه‌ها، خازن‌های ۱۰۰ نانوفاراد X7R و ۱۰ میکروفاراد تانتالیوم به کار گرفته شدند تا ضمن تضعیف اغتشاشات فرکانس بالا، پایداری خطوط تغذیه نیز حفظ شود.



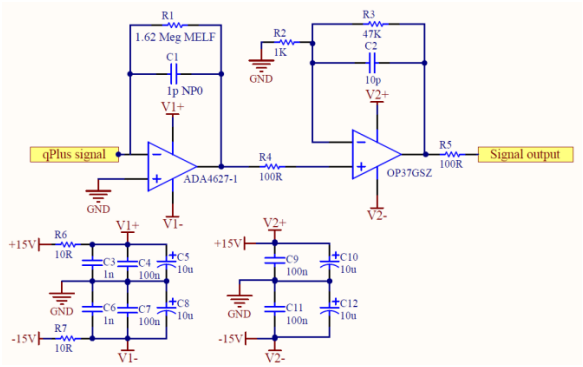
شکل ۱، شماتیک بخش تحریک و جبران اثرات خازنی سامانه پیشنهادی.

زنجیره تقویت و تبدیل جریان به ولتاژ

زنجیره تقویت و تبدیل جریان به ولتاژ در شکل ۲ نشان داده شده است. در این ساختار، سیگنال خروجی حسگر ابتدا به یک تقویت‌کننده ترانس‌ایمپدانس کم‌نویز اعمال می‌شود. برای پایداری این طبقه، یک خازن NP0 با ظرفیت ۱ پیکوفاراد در مسیر بازخورد قرار داده شد که مقدار آن به گونه‌ای انتخاب شد تا ضمن حفظ پایداری، پاسخ فرکانسی در بازه کاری مورد نظر تغییر محسوسی نداشته باشد. همچنین برای مقاومت بازخورد از نوع فیلم فلزی استوانه‌ای (MELF) استفاده شد که به دلیل نویز اضافی کم و پایداری مناسب انتخاب گردید. خروجی این طبقه نیز از طریق یک مقاومت سری به مرحله بعدی متصل شد تا اثر بارهای خازنی بر پایداری آن کاهش یابد.

پس از تبدیل سیگنال جریان به ولتاژ، سیگنال توسط یک تقویت‌کننده ناوارونگر تقویت شد. این آرایش علاوه بر جلوگیری از وارونگی فاز اضافی در خروجی نهایی، بارگذاری مرحله بعد بر تقویت‌کننده ترانس‌ایمپدانس را کاهش می‌دهد. خروجی نهایی نیز از طریق یک مقاومت سری به کانکتور خروجی متصل شد تا اثر ظرفیت کابل و تجهیزات اندازه‌گیری کاهش یابد.

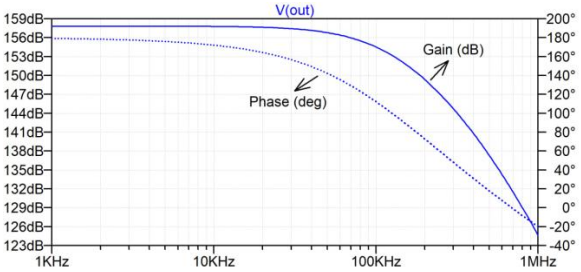
برای تمامی طبقات از شبکه‌های دیکوپلینگ محلی مبتنی بر خازن‌های X7R و تانتالیوم استفاده شد و در طبقه ترانس‌ایمپدانس نیز یک خازن اضافی با ظرفیت ۱ نانوفاراد جهت بهبود عملکرد فرکانس بالای این شبکه برای هر پایه تغذیه به کار گرفته شد.



شکل ۲، شماتیک زنجیره تقویت و تبدیل جریان به ولتاژ سامانه پیشنهادی.

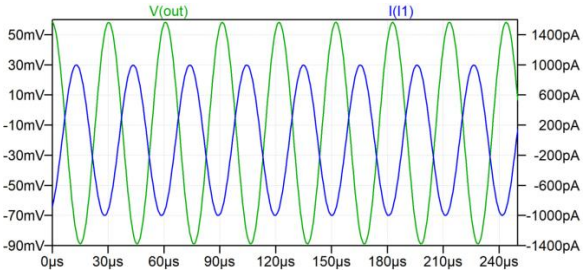
نتایج شبیه‌سازی و ارزیابی عملکرد

شبیه‌سازی‌های این بخش با استفاده از نرم‌افزار LTspice انجام شده‌اند [۵]. نتایج تحلیل AC مدار در شکل ۳ ارائه شده است. در این شبیه‌سازی‌ها، حسگر qPlus به‌صورت یک منبع جریان سینوسی مدل شد. نتایج نشان می‌دهد که مدار در بازه ۲۵ تا ۳۳ کیلوهرتز از پایداری مناسبی برخوردار بوده و بهره آن در حدود ٤٤ دسی‌بل تقریباً ثابت باقی می‌ماند، در حالی که فاز تنها حدود ٦ درجه تغییر می‌کند. این میزان تغییرات اندک در بهره و فاز، نشان‌دهنده ثبات مناسب عملکرد مدار در محدوده کاری مورد نظر است. همچنین فرکانس قطع مدار حدود ۹٤/۲ کیلوهرتز به دست آمد که بیانگر مناسب بودن پهنای باند طراحی است.



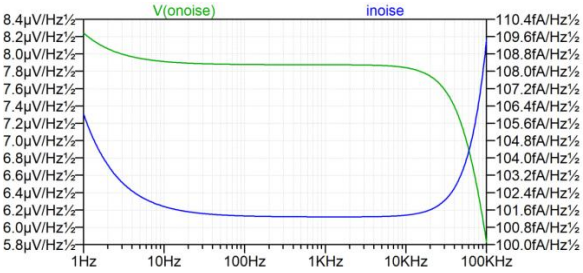
شکل ۳، نتایج تحلیل AC زنجیره تقویت شامل بهره و پاسخ فازی مدار در بازه فرکانسی مورد بررس.

نتایج تحلیل گذرا در شکل ٤ نشان می‌دهد که مدار در فرکانس کاری ۳۲/۷٦۸ کیلوهرتز قادر به تقویت جریان ورودی و بازسازی مناسب شکل موج خروجی است. دامنه خروجی با بهره محاسبه‌شده در تحلیل AC سازگار بوده و اعوجاج قابل توجهی مشاهده نمی‌شود.



شکل ٤، نتایج تحلیل گذرا زنجیره تقویت برای جریان سینوسی ورودی با دامنه ۱ نانوآمپر در فرکانس ۳۲/۷٦۸ کیلوهرتز.

نتایج تحلیل نویز در شکل ۵ آورده شده است. نویز خروجی در قالب چگالی طیفی نویز در محدوده چند میکروولت بر جذر هرتز قرار دارد و نویز معادل ورودی در فرکانس ۳۲/۷٦۸ کیلوهرتز حدود ۱۰۱ فمتوآمپر بر جذر هرتز محاسبه شد که نشان‌دهنده حساسیت بالای مدار برای اندازه‌گیری جریان‌های بسیار کوچک است.



شکل ۵، چگالی طیفی نویز معادل ورودی (منحنی آبی) و چگالی طیفی نویز خروجی (منحنی سبز) حاصل از تحلیل نویز زنجیره تقویت.

به منظور ارزیابی اولیه عملکرد مدار، نمونه‌ای از زنجیره تقویت روی برد سوراخ‌دار پیاده‌سازی شد. این نمونه با استفاده از تغذیه متقارن تأمین‌شده توسط دستگاه میکروسکوپ پروبی روبشی موجود در آزمایشگاه راه‌اندازی گردید و توانست سیگنال‌های آزمایشی در محدوده حدود ۱۰۰ نانوآمپر را با موفقیت دریافت و تقویت کند. نتایج حاصل، صحت عملکرد بخش‌های اصلی مدار را تأیید نمود. در حال حاضر ساخت یک نمونه کامل از سامانه به صورت برد مدار چاپی (PCB) به منظور انجام آزمون‌های عملی و ارزیابی نهایی عملکرد در دست انجام است.

نتیجه گیری

در این پژوهش، سامانه‌ای الکترونیکی برای به‌کارگیری حسگر qPlus شامل مدار تحریک، جبران اثرات خازنی و زنجیره تقویت کم‌نویز طراحی و ارزیابی شد. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که پایداری بهره در بازه ۲۵ تا ۳۳ کیلوهرتز، فرکانس قطع حدود ۹٤/۲ کیلوهرتز، نویز معادل ورودی حدود ۱۰۱ فمتوآمپر بر جذر هرتز در فرکانس ۳۲/۷٦۸ کیلوهرتز و نویز خروجی از مرتبه چند میکروولت بر جذر هرتز، همگی با الزامات عملکردی سامانه برای این کاربرد سازگار هستند. همچنین، پیاده‌سازی اولیه زنجیره تقویت و آزمایش آن با استفاده از تغذیه و سیگنال خروجی دستگاه میکروسکوپ پروبی روبشی آزمایشگاه، امکان یکپارچه‌سازی عملی حسگر qPlus و سامانه الکترونیکی پیشنهادی با میکروسکوپ پروبی روبشی موجود در آزمایشگاه را تأیید کرد. ساخت و ارزیابی نسخه کامل مدار بر روی برد مدار چاپی نیز در دست انجام است.

مرجع‌ها

[۱] G. Binnig, C. F. Quate, and C. Gerber, “Atomic Force Microscope,” *Physical Review Letters*, vol. **56**, no. 9, pp. 930–933, 1986.
[2] F. J. Giessibl, “Principles and Applications of the qPlus Sensor,” *Surface Science Reports*, vol. **64**, no. 8, pp. 321–354, 2009.
[3] F. J. Giessibl, “Atomic Force Microscopy with qPlus Sensors,” *MRS Bulletin*, vol. **49**, no. 1, pp. 57–64, 2024.
[4] F. J. Giessibl, “The qPlus Sensor, a Powerful Core for the Atomic Force Microscope,” *Review of Scientific Instruments*, vol. **90**, no. 1, 011101, 2019.
[5] Analog Devices, Inc., LTspice XVII [Computer software]. Available: https://www.analog.com/ltspice

شبیه سازی فیبر نوری و تاثیر نانو ساختار ها در چگونگی توزیع میدان های الکتریکی و مغناطیسی آن

بخشی، مریم؛ ضمیرانوری، جاوید؛ ندافان، مرضیه*

دانشکده فیزیک دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران

m.nadafan@sru.ac.ir

چکیده

این مقاله به بررسی اثر قرارگیری نانوذرات نقره با قطر ۶۰۰ نانومتر بر روی روکش فیبر نوری با استفاده از نرم‌افزار Lumerical می‌پردازد. هدف اصلی، تحلیل تغییرات در مشخصه‌های انتشار نور و بررسی پدیده پلاسمونیک ایجاد شده توسط این نانوذرات در تعامل با ساختار فیبر است.

واژه‌های کلیدی: Lumerical ؛ فیبر نوری؛ نانوذرات نقره؛ حسگرها؛ تشدید پلاسمون سطحی

Simulation of optical fiber and the effect of nanostructures on how its electric and magnetic fields are distributed

Bakhshi, Maryam; Zamir Anvari, Javid; Nadafan, Marzieh*

Department of Physics, University of Shahid Rajaee Teacher Training University, Tehran

m.nadafan@sru.ac.ir

Abstract

This study employs Lumerical simulations to investigate the impact of embedding 600 nm silver nanoparticles within an optical fiber cladding. The research focuses on analyzing modifications in light propagation properties and exploring the plasmonic effects arising from the interaction between the silver nanoparticles and the fiber architecture.

Keywords: Lumerical; Fiber Optics; Silver Nanoparticles; Sensors; Surface Plasmon Resonance

PACS No.: 42.81.-i, 78.67.Bf, 02.70.-c

مقدمه

در عصر حاضر، توسعه صنایع مختلف به‌شدت وابسته به فناوری‌های پیشرفته ارتباطی و انتقال داده است که فیبرهای نوری نقش‌محوری در آن‌ها ایفا می‌کنند. دستیابی به بهینه‌ترین نوع فیبر نوری برای کاربردهای صنعتی خاص، مستلزم درک عمیق و بررسی دقیق ویژگی‌های ساختاری انواع فیبر، به‌ویژه هسته و روکش آن‌ها، است. مطالعات پیشین نشان داده‌اند که عامل‌های ساختاری فیبر، از جمله ضریب شکست و جنس مواد به‌کاررفته در هسته و روکش، تأثیر مستقیم و قابل‌توجهی بر عملکرد نهایی فیبر (مانند میزان اتلاف نور، پهنای باند و مقاومت در برابر عوامل محیطی) دارند. بااین‌حال، آزمایش‌های تجربی برای بهینه‌سازی این پارامترها می‌تواند هزینه‌بر و زمان‌گیر باشد. در این راستا، نرم‌افزارهای شبیه‌سازی به‌عنوان ابزاری کارآمد، امکان بررسی

طیف وسیعی از طراحی‌های فیبر را بادقت بالا و هزینه‌ای به‌مراتب کمتر فراهم می‌آورند. نرم‌افزار لومریکال(Lumerical) ، به‌ویژه ماژول FDTD Solutions آن، به‌عنوان یک پلتفرم قدرتمند برای مدل‌سازی و تحلیل ادوات نوری شناخته شده است و امکان استخراج دقیق اطلاعات عملکردی را تسهیل می‌بخشد. پژوهش حاضر بر شبیه‌سازی فیبر نوری پوشش داده شده با نانوذرات نقره با استفاده از این نرم‌افزار متمرکز است. هدف اصلی این مطالعه، ارزیابی خواص این نوع فیبر نوری نوین و تحلیل تأثیر حضور و پراکندگی نانوذرات نقره بر الگوی انتشار نور و در نهایت، پتانسیل کاربردی آن در صنایع مختلف است.

نرم‌افزار شبیه‌سازی لومریکال ماژول FDTD

به‌منظور انجام شبیه‌سازی‌های نوری و طراحی ادوات نانو فوتونیکی، از نرم‌افزار **FDTD Solutions** استفاده می‌شود. این نرم‌افزار یک حل‌کننده سه‌بعدی معادلات ماکسول مبتنی بر روش تفاضل محدود در حوزه زمان (FDTD) است که بادقت و کارایی بالا، امکان طراحی، تحلیل و بهینه‌سازی ادوات و مواد نانو فوتونیکی را فراهم می‌سازد. از این ابزار به طور گسترده در شبیه‌سازی بلورهای فوتونیکی، ساختارهای پلاسمونیکی، حسگرهای تصویری CMOS، نانوذرات، تشدیدگرها، ادوات مبتنی بر توری، فرایندهای لیتوگرافی و انواع موج‌برها استفاده می‌شود [۱، ۲].

گسسته‌سازی معادلات ماکسول با استفاده از طرح FDTD

معادلات ماکسول، اساس درک ما از پدیده‌های الکترومغناطیسی هستند و به ما امکان می‌دهند تا طیف وسیعی از رفتار میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی را توضیح دهیم. با استفاده از این معادلات، می‌توان میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی را در هر نقطه و در هر زمان تعریف کرد:

$$E^{(n+1)} = E^{n} + \frac{\Delta t}{\varepsilon}(\nabla \times H^{(n+\frac{1}{2})}) \qquad (۱)$$

$$H^{(n+\frac{3}{2})} = H^{(n+\frac{1}{2})} - \frac{\Delta t}{\mu}(\nabla \times E^{(n+1)}) \qquad (۲)$$

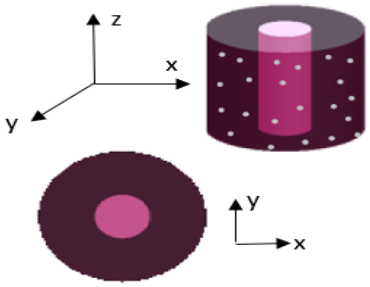
بنابراین، برای به‌دست‌آوردن مؤلفه میدان الکتریکی، بایستی تبدیل فوریه برحسب زمان مشابه معادله زیر گرفته شود:

$$E(\omega) = \int_{0}^{T} dt E(t) e^{i\omega t} \qquad (۳)$$

این امر به ما اجازه می‌دهد تا مشخص کنیم هر میدان الکتریکی در چه فرکانس یا طول‌موجی حضور دارد. سپس، با درنظرگرفتن بردار پویتینگ، $S = \frac{1}{2}\mathrm{Re}(E \times H^{*})$ در راستای صفحه خروجی، می‌توانیم چگالی پروفایل توان را ارزیابی کنیم که نشان‌دهنده میزان انرژی منتقل شده در واحد سطح و زمان است [۳].

مدل شبیه‌سازی فیبر نوری

برای شبیه‌سازی بر همکنش نور با فیبر نوری پوشیده شده با نانوذرات نقره، ابتدا ساختار هندسی موردنظر طراحی می‌شود. هسته فیبر نوری به‌صورت یک استوانه با ضریب شکست ۱/۴۵، طول ۲۰۰ میکرومتر و قطر ۱۲ میکرومتر در مرکز مختصات تعریف می‌گردد. لایه روکش فیبر نیز به شکل استوانه‌ای با ضریب شکست ۱/۴۴، قطر ۳۲ میکرومتر و طول ۲۰۰ میکرومتر طراحی می‌شود. بر روی سطح روکش فیبر، نانوذرات نقره با شعاع ۶۰۰ نانومتر قرار می‌گیرند. ناحیه شبیه‌سازی به‌گونه‌ای در نظر گرفته می‌شود که یک نانوذره در مرکز آن قرار گرفته و بر همکنش نور با این نانوذره موردمطالعه و تحلیل قرار گیرد.



شکل ۱:فیبر نوری پوشیده شده با نانوذرات نقره

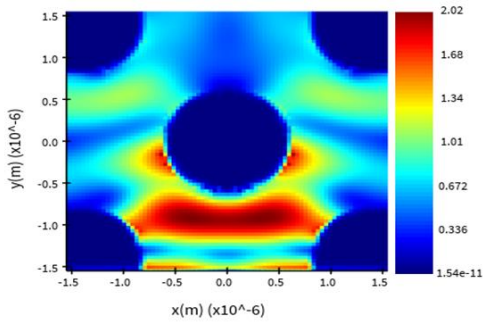
نحوه توزیع میدان الکتریکی در اطراف نانوذره

میدان الکتریکی در اطراف سطح نانوذره بسیار تقویت شده است، به‌خصوص در نواحی نزدیک به سطح ذره. این نشان می‌دهد که نانوذره، به‌عنوان یک عامل پراکنش قوی، انرژی نوری ورودی را متمرکز و تغییر جهت می‌دهد و موجب تشکیل میدان‌های بسیار قوی در اطراف خود می‌شود (شکل ۲).

خطوط رنگی و توزیع گرادیان نشان می‌دهد که میدان به سمت خارج از نانوذره پخش می‌شود، با تمرکز بالاتر در سمت پایین و اطراف ذره. این پدیده، نشان‌دهنده‌ی برهم‌کنش‌های پلاسمونیک است که توسط نقره، شناخته‌شده‌ترین فلز در برهم‌کنش‌های پلاسمونیک نوری، ایجاد می‌شود. این نانوذره می‌تواند برپایه‌ی شکل، اندازه و ضریب شکست، پدیده‌های نوری مانند تمرکز یا پراکنش قوی را نشان دهد.

ورود نور از پایین، باعث شده است که میدان در راستای واردشده‌ی نور قوی‌تر باشد و در نتیجه، تمرکز میدان در مناطقی است که امواج نوری در حال پراکنش هستند، به‌ویژه در اطراف سطح ذره. این حالت مشابه حالت‌های پدیده‌های پلاسمونیک سطحی است که منجر به تمرکز میدان در نواحی خاص می‌شود که کاربردهای متعددی در سنجش‌های نوری، تشخیص بیولوژیکی و تقویت سیگنال‌های نوری دارد.

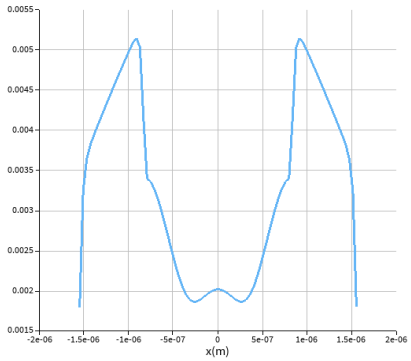
حباب‌های آبی‌رنگ نشان‌دهنده مناطقی با شدت میدان بسیار کم، و نواحی قرمز و زرد نشان از تمرکز بالای میدان است. تمرکز میدان در نزدیکی سطح نقره، نشان‌دهنده بهره‌برداری از اثرات پلاسمون سطحی است که می‌تواند منجر به افزایش حساسیت در کاربردهای نوری، مانند حسگرهای پلاسمونیک، شود.



شکل ۲: پروفایل میدان الکتریکی فیبر نوری پوشیده شده با نانوذرات نقره

نمودار میدان مغناطیسی در اطراف نانوذره

نمودار خطی میدان مغناطیسی به شکل زیر است:



شکل ۳: نمودار میدان مغناطیسی فیبر نوری پوشیده شده با نانوذرات نقره

نمودار نشان می‌دهد که در فاصله‌ی کمی از دو طرف نانوذره، شدت میدان مغناطیسی **به‌شدت افزایش پیدا می‌کند** و دو قله‌ی بلند در دو طرف ایجاد می‌شود. این یعنی این نواحی اطراف نانوذره، مثل یک ذره‌بین عمل کرده و میدان را در آنجا متمرکز می‌کنند. این پدیده به‌خاطر ترکیب چند اثر است: نانوذره نقره باخاصیت پلاسمونیک خود نور را جذب و میدان را تقویت می‌کند، و هم‌زمان، ساختار فیبر نوری هم در نحوه انتشار و

بازتاب نور نقش دارد. در واقع، نانوذره و فیبر با هم کار می‌کنند تا این میدان را در دو سمت نانوذره تقویت کنند.

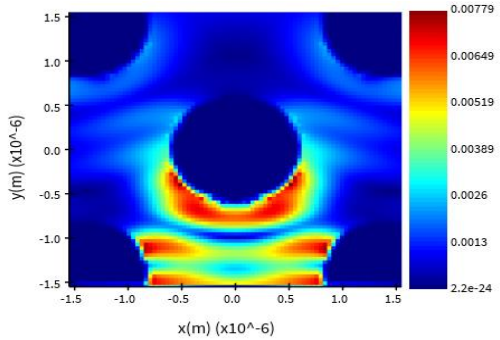
اما در مرکز، درست جایی که از نانوذره رد می‌شویم، شدت میدان مغناطیسی **خیلی کمتر** می‌شود و یک دره ایجاد می‌کند. این نشان می‌دهد که در این نقطه، میدان‌ها طوری با هم تداخل می‌کنند که اثر همدیگر را خنثی می‌کنند (تداخل مخرب). این تداخل مخرب، شاید به‌خاطر شکل خاصی باشد که میدان‌ها در مرکز نانوذره و روی فیبر پیدا می‌کنند.

نکته‌ی دیگری که در نمودار دیده می‌شود، این است که در فاصله‌های دورتر، نزدیک به لبه‌های ناحیه‌ی مورد بررسی، میدان یک‌دفعه تغییر می‌کند و رفتار موج‌دار یا ناگهانی نشان می‌دهد. این رفتار معمولاً به این خاطر است که شبیه‌سازی ما یک محدودیت دامنه دارد و این تغییرات ناگهانی، اثرات لبه‌های این ناحیه‌ی محاسباتی است و لزوماً رفتار فیزیکی در بی‌نهایت را نشان نمی‌دهد.

در کل، این نمودار به ما می‌گوید که نانوذره نقره روی فیبر نوری می‌تواند میدان مغناطیسی را در نقاط خاصی **به‌شدت تقویت کند** که این خودش برای کاربردهایی مثل حسگرها یا تقویت سیگنال‌های نوری بسیار مفید است، اما در نقاط دیگر باعث کاهش میدان می‌شود [۴، ۵].

نحوه توزیع توان در اطراف نانوذره

در قلب نانوذره (آن دایره تیره مرکز)، توان تقریباً صفر است، چون فلز نقره در این فرکانس‌ها به‌عنوان یک محافظ عمل کرده و اجازه عبور توان نوری به داخل خود را نمی‌دهد. اما بلافاصله پس از برخورد موج به نانوذره، می‌بینیم که بیشترین چگالی توان (بخش‌های قرمز و زرد با مقادیر نزدیک به ۰/۰۰۰۷) درست در فصل مشترک نانوذره و سطح فیبر متمرکز شده است. این یعنی نانوذره نقره توان نوری را از محیط اطراف گرفته و آن را به‌صورت یک «تجمع توان موضعی» در زیر خود متمرکز کرده است. در واقع، این ناحیه قرمز، منطقه‌ای است که در آن جریان توان به حداکثر رسیده و این اثرِ تمرکز انرژی، دقیقاً همان هدفی است که در طراحی ادوات فوتونیک و حسگرهای پلاسمونیک دنبال می‌شود.



شکل ۴: پروفایل توان برای فیبر نوری پوشیده شده با نانوذرات نقره

نتیجه‌گیری

نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که حضور نانوذره نقره موجب برهم‌کنش مؤثر میان مود هدایت‌شده‌ی فیبر و پلاسمون‌های سطحی موضعی شده است. در نتیجه، میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی درون نانوذره به طور قابل‌توجهی تضعیف شده و بیشترین تمرکز آن‌ها در ناحیه‌ی مجاور سطح ذره و در امتداد مسیر ورود نور شکل‌گرفته است.

منابع

[1] NADDAFAN, Marzieh, et al. *The refractive index sensor of the SMF covered by nanodiamond layer*. *International Journal of Nano Dimension*, 2022, 13.1: 96-104.

[۲] عابدی، کامبیز؛ رازقی‌زاده، محمدرضا. *شبیه‌سازی ادوات نوری با نرم‌افزار لومریکال*. انتشارات مهرجرد، ۱۳۹۵.

[3] NADAFAN, M., et al. *Transmission Behavior of Single-Mode Fiber Based on a Microchannel*. *Acta Physica Polonica: A*, 2021, 139.6.

[4] YEE, K. S. *Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media*. 1966.

[5] RODEN, J. A.; GEDNEY, S. D. *An efficient FDTD implementation of the CFS-PML for arbitrary media. Microwave and optical technology letters*, 2000.

بررسی ضریب حساسیت حسگر پلاسمون سطحی در چیدمان کرشمن برای اندازه گیری غلظت گلوکز

فرامرزی ، پریزاد[۱] ؛ معدنی پور، خسرو[۲]

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

[۲] آزمایشگاه اندازه گیری اپتیکی، دانشگاه صنعتی امیر کبیر ، تهران

چکیده

در این پژوهش عملکرد یک حسگر گلوکز مبتنی بر پدیده تشدید پلاسمون سطحی (SPR) در ساختار کرشمن به صورت نظری و تجربی مورد بررسی قرار گرفته است. برای بررسی تجربی، یک سامانه حسگری مبتنی بر ساختار کرشمن طراحی و پیاده‌سازی شد. در این ساختار از منشور شیشه‌ای و لایه نازک طلا به عنوان عنصر فعال استفاده گردید. محلول‌های گلوکز با غلظت‌های مختلف به عنوان نمونه مورد آزمایش قرار گرفتند و تغییرات زاویه تشدید ناشی از تغییر ضریب شکست آن‌ها اندازه‌گیری شد. حساسیت تجربی حسگر برابر با ۱۲۰.۸ درجه بر واحد ضریب شکست به دست آمد. مقایسه نتایج نظری و تجربی تطابق مناسبی را نشان داد.

واژه های کلیدی: *تشدید پلاسمون سطحی، حسگر گلوکز، ساختار کرشمن، حسگر نوری.*

Investigation of the Sensitivity of a Surface Plasmon Resonance Sensor Based on the Kretschmann Configuration for Glucose Concentration Measurement

Faramarzi, Parizad[۱]; Madanipour, Khosro[۲]

[۱] *Department of Physics and Energy engineering, Amirkabir University of Technology, Tehran*

[۲] *Optical Measurement Central Laboratory, Amirkabir University of Technology, Tehran*

Abstract

In this study, the performance of a glucose sensor based on the surface plasmon resonance (SPR) phenomenon in the Kirschmann structure was investigated theoretically and experimentally. For the experimental investigation, a sensing system based on the Kirschmann structure was designed and implemented. In this structure, a glass prism and a thin gold layer were used as the active element. Glucose solutions with different concentrations were tested as samples and the changes in the resonance angle due to the change in their refractive index were measured. The experimental sensitivity of the sensor was obtained to be 120.8 degrees per unit refractive index. Comparison of the theoretical and experimental results showed a good agreement.

Keywords: *Surface Plasmon Resonance (SPR), glucose sensor, Kretschmann configuration, optical sensor.*

PACS No. *33*

مقدمه

امروزه پایش دقیق و سریع غلظت گلوکز در نمونه‌های زیستی از اهمیت ویژه‌ای در تشخیص و کنترل بیماری‌هایی نظیر دیابت برخوردار است. روش‌های متداول اندازه‌گیری گلوکز اگرچه از دقت مناسبی برخوردارند، اما در بسیاری از موارد نیازمند آماده‌سازی نمونه، استفاده از مواد شیمیایی و صرف زمان نسبتاً زیاد هستند. از این‌رو توسعه حسگرهای زیستی با حساسیت بالا، پاسخ سریع و قابلیت اندازه‌گیری برخط مورد توجه پژوهشگران قرار

گرفته است [۲]. یکی از فناوری‌های نوین در زمینه حسگرهای زیستی، تشدید پلاسمون سطحی(SPR) است[۳].

مبانی نظری

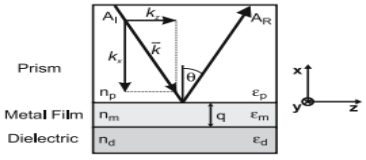
پلاسمون‌های سطحی نوسانات جمعی الکترون‌های آزاد در فصل مشترک فلز و دی‌الکتریک هستند. هنگامی که نور قطبیده TM با زاویه مناسب به یک لایه فلزی نازک تابیده شود، انرژی فوتون‌ها به پلاسمون‌های سطحی منتقل شده و پدیده تشدید پلاسمون سطحی رخ می‌دهد [۴]. در شرایط تشدید، افت شدیدی در شدت نور بازتابی مشاهده می‌شود که به زاویه تشدید معروف است. این زاویه به ضریب شکست محیط مجاور لایه فلزی وابسته بوده و کوچک‌ترین تغییر در محیط باعث جابه‌جایی زاویه تشدید می‌شود [۳]. رایج ترین رویکرد برای تحریک پلاسمون های سطحی استفاده از ساختار منشور و روش بازتاب کلی تضعیف شده (ATR) است. دو پیکربندی کرشمن (Kretschmann) و اتو (Otto) با استفاده از همین روش وجود دارد [۱]. هندسه کرشمن ، شامل یک منشور با ضریب شکست n_pبا یک لایه نازک فلزی با گذردهی دی‌الکتریک ε_mو ضخامت d، با یک دی‌الکتریک با ضریب شکست n_dو ضریب گذردهی ε_d می شود. هنگامی که یک موج نوری منتشر شده در منشور به لایه فلزی برخورد می کند، بخشی از نور به داخل منشور منعکس می شود و بخش دیگر به شکل یک موج الکترومغناطیسی ناهمگن در فلز منتشر می شود [۶]. این موج ناهمگن به صورت تصاعدی در جهت عمود بر فصل مشترک منشور و فلز فروپاشی می کند به عنوان یک موج ناپایدار شناخته می شود. موج ناپایدار از لایه فلزی نفوذ می کند و با پلاسمون سطحی در مرز بیرونی لایه فلزی، بین دی الکتریک و فلز، جفت می شود. ثابت انتشار پلاسمون سطحی β_{sp}که در امتداد لایه فلزی نازک منتشر می شود به صورت زیر می تواند بیان شود:

$$\beta_{sp} = \frac{\omega}{c}\sqrt{\frac{\varepsilon_m \varepsilon_d}{\varepsilon_m + \varepsilon_d}} \qquad ۲\text{-}۱$$

برای اینکه جفت شدن بین موج ناپایدار و پلاسمون سطحی اتفاق بیفتد، ثابت انتشار موج ناپایدار β_{EW} و β_{sp} پلاسمون سطحی باید برابر باشد که رابطه زیر را نتیجه میدهد:

$$n_p \sin\theta = \sqrt{\frac{\varepsilon_m \varepsilon_d}{\varepsilon_m + \varepsilon_d}} \qquad ۲\text{-}۲$$

بنابراین برای هر طول موج، شرایط تطابق تنها برای یک زاویه تابش خاص، یعنی زاویه جفت شدگی، برآورده می‌شود [۵].

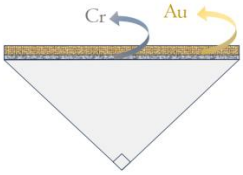


۱. بررسی نور بازتابی در هندسه کرشمن

اگر شکل۱ به عنوان شماتیک فرضی منشور و پرتوهای نور فرودی و بازتابی در نظر گرفته بشود. r_{pmd} ضریب بازتاب دامنه از سه لایه به صورت زیر به دست میاید:

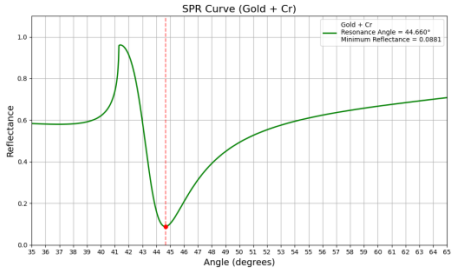
$$r_{pmd} = \frac{r_{pm} + r_{md}\exp(2ik_{zm}d_m)}{1 + r_{pm}r_{md}\exp(2ik_{zm}d_m)} \qquad ۲\text{-}۳$$

ضریب بازتابندگی برابر با $R = |r_{pmd}|^2$، نمودار تغییرات بازتابندگی نسبت به زاویه بدست میاید. وابستگی های زاویه ای بازتاب و فاز نور با قطبش TE فاقد ویژگی تشدید است، هیچ مدی نمی تواند توسط نور با قطبش TE در این ساختار دچار تشدید بشود [۱]. در این مقاله از طلا به عنوان لایه نازک فلزی استفاده شده است و از کروم به عنوان لایه میانی بین طلا و منشور استفاده شده است. شکل۲ شماتیکی از ساختار منشور مد نظر است.



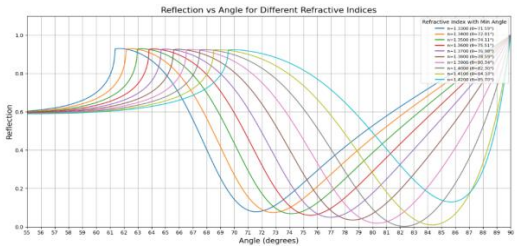
۲. شماتیکی لایه نشانی طلا-کروم روی منشور

برنامه پایتون به عنوان بستر بررسی نظری به کار گرفته شده است. معادله ۳-۲ به عنوان ساختار اولیه کد نویسی استفاده می شود. یک منشور با لایه نشانی کروم یک نانومتر، طلا ۲۸ نانومتر ، منشور در محیط فرضی هوا و منبع نور لیزر تک رنگ با طول موج ۶۳۲ نانومتر در نظر گرفته میشود. زاویه با کمترین شدت بازتاب، زاویه تشدید پلاسمون سطحی است با توجه به نتایج شبیه سازی، شکل۳، در زاویه 44.66° اتفاق افتاده است.



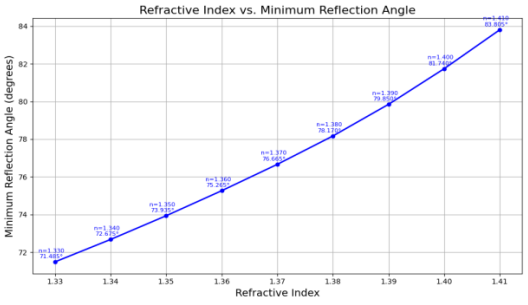
۳. تشدید پلاسمون سطحی در ارایش کرشمن با در نظر گرفتن طلا۲۸ نانومتر، کروم ۱ نانومتر، ضریب شکست منشور ۱.۵۱۵۵، ضریب شکست هوا ۱.۰۰۰

غلظت های مختلفی از محلول گلوکزبا بازه ضریب شکست ۱.۳۳۰ تا ۱.٤۱۰ در نظر گرفته می شود. شکل٤ ، نمودار بازتابش مربوط به محلول با غلظت های مختلف را نشان میدهد. هر محلول در زاویه خاص خود دچار افت شدت می شود.



۱. تشدید پلاسمون سطحی در آرایش کرشمن، ضخامت طلا: ۲۸ نانومتر، ضخامت کروم ۱ نانومتر، ضریب شکست منشور:۱.۵۱۵۵، ضریب شکست محلول بازه ۱.۳۳۰۰-۱.۳٤۰۰

میتوان از طریق اندازه گیری زاویه تشدید پلاسمون سطحی مقدار ضریب شکست و غلظت محلول مد نظر را پیشبینی کرد. نمودار کالیبراسیون نظری، نمودار تغییرات ضریب شکست نسبت به زاویای تشدید، رسم میشود. به عنوان نمودار مرجعی برای بررسی ضریب شکست محلول گلوکز از آن استفاده کرد. نمودار۵ ضریب حساسیت $۱۵۴\ ^{deg}/_{RIU}$ را نتیجه میدهد.



۲. بررسی تغییرات ضریب شکست به زاویه تشدید پلاسمون سطحی در ساختار کرشمن، طلا-کروم

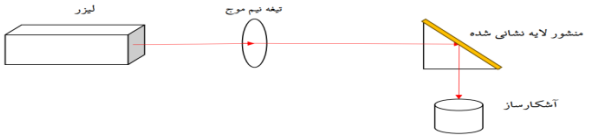
۳. کارها و نتایج تجربی

سیستمی با آرایش کرشمن طراحی شده است. غلظت های مختلف گلوکز مورد آزمایش قرار میگیرد. نتایج تجربی با نتایج تئوری مقایسه و ضریب حساسیت آن مورد بررسی قرار میگیرد. با توجه به شکل۷ در این پروژه از لیزر هلیم نئون قطبیده ٦۳۲ نانومتر پایدار سازی شده با توان ۲میلی وات، منشور قائم الزاویه، آشکارساز فوتودایود سیلیکونی، صفحه مدرج، تیغه نیم موج، گلوکز با غلظت های مختلف، ضریب شکست سنج آبه استفاده شده است. ابتدا روی منشور لایه نازک کروم ۱ نانومتر سپس لایه ۲۸ نانومتر طلا لایه نشانی میشود. برای اندازه گیری بهتر زاویه فرودی به وتر منشور از یک صفحه مدرج با دقت ۰.۰۱ استفاده شده است. از تیغه نیم موج برای عوض کردن مد نور فرودی (TMبه TE و یا برعکس) به منشور استفاده می شود. اشکار ساز مقدار شدت نور بازتاب شده از وتر منشور را با استفاده از برنامه، اندازه گیری و ثبت شدت نور، ثبت و اندازه گیری میکند. با استفاده از ضریب شکست سنج آبه ضریب شکست غلظت های مختلف گلوکز اندازه گیری میشود. این ضریب شکست ها به عنوان مقادیر مرجع برای مقایسه نتایج نهایی استفاده میشود. در جدول۱ اندازه گیری ضریب شکست محلول ها نوشته شده است.

۱. غلظت و ضریب شکست محلول های متفاوت گلوکز در آب مقطر

غلظت بر حسب میلیمولار	۲۰۰	۳۰۰	٦۰۰	۸۰۰	۱۰۰۰
ضریب شکست	۱.۳۳۹۰	۱.۳٤۰۰	۱.۳۵۰۰	۱.۳۵۵۰	۱.۳۵٦۰

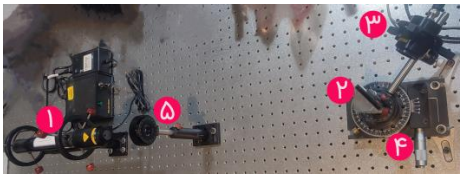
در این چیدمان ابتدا لیزر، تیغه نیم موج، منشور و اشکار ساز قرار دارد. در شکل٦ شماتیکی از چیدمان نشان داده شده است.



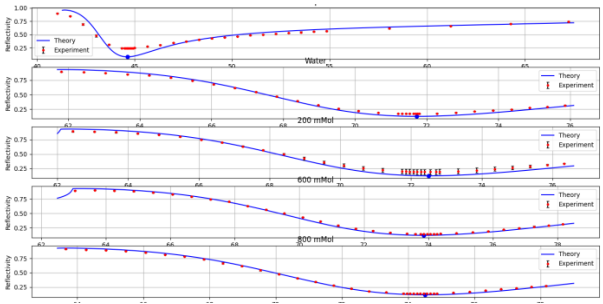
۳. شماتیکی از چیدمان بررسی نور بازتابی از منشور در ساختار کرشمن

نور لیزر بازتاب شده از منشور به آشکارساز میرسد. مقادیر شدت در مانیتور با استفاده از برنامه ثبت و اندازه گیری مقدار شدت نور برای هر زاویه ذخیره میشود. نمودار شدت نسبت به زاویه رسم میگردد.مقادیر اندازه گیری شده تجربی و مقایسه آن با نمودار تئوری در شکل۸ نشان داده شده است. برای محیط هوا به صورت

تجربی در زاویه 44.67° تشدید پلاسمون اتفاق افتاده است و در حالت شبیه سازی در زاویه 44.62° تشدید رخ داده است که در نتیجه این اختلاف زاویه، ۰.۰۰۰۷ واحد ضریب شکست خطا دارد.

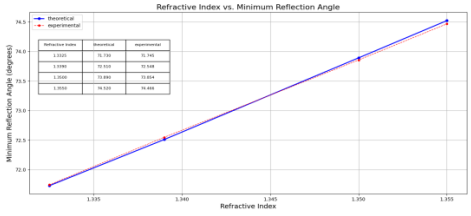


۷.چیدمان بررسی نور بازتابی از منشور در ساختار کرشمن به صورت تجربی.
۱.لیزر ۲.منشور ۳.آشکارساز ٤.صفحه مدرج ۵.تیغه نیم موج



۸ تشدید پلاسمون سطحی در آرایه کرشمن، بررسی داده های تجربی و نظری در محیط هوا، آب مقطر، محلول گلوکز ۲۰۰، ۶۰۰ و ۸۰۰ میلی مولاریته

با قرار دادن یک قاب پشت منشور، محلی برای قرارگیری محلول ها تعبیه می شود. ضریب شکست آب مقطر ۱.۳۳۲۵، با استفاده از ضریب شکست سنج آبه اندازه گیری شده است. در نتایج تجربی در زاویه 71.74° افت شدت برای آب مقطر اتفاق افتاده است که در نتیجه آن خطای کمتر از ۰.۰۰۰۱۱ واحد ضریب شکست را نتیجه داده است. محلول ۲۰۰ میلی مولاریته داخل مخزن منشور ریخته می شود. تشدید پلاسمون سطحی در زاویه 72.54° اتفاق میافتد. خطای زاویه با نتایج تجربی 0.03° محاسبه و خطای ضریب شکست ۰.۰۰۰۳ نسبت به مقدار اندازه گیری شده در ضریب شکست سنج آبه را نتیجه می دهد. محلول ۶۰۰ میلی مولاریته گلوکز در مخزن منشور ریخته میشود. افت شدت در 73.85° اتفاق می افتد. در حالت تئوری تشدید در زاویه 73.87° اتفاق می افتد. در نتیجه خطای موجود ۰.۰۰۰۱۸ واحد ضریب شکست نسبت به مقدار اندازه گیری شده اختلاف وجود دارد. با ریختن محلول ۸۰۰ میلی مولاریته در مخزن پشت منشور در زاویه 74.46° تشدید پلاسمون سطحی رخ میدهد. با توجه به مقدار اختلاف زاویه با حالت نظری، تفاوت ۰.۰۰۰۵ واحد ضریب شکست وجود دارد. نمودار تغییرات زاویه نسبت به ضریب شکست رسم میشود. شکل۸ تغییرات زاویه به ضریب شکست را نشان میدهد. با توجه به نتایج تجربی در این آزمایش برای گلوکز در محدوده ۱.۳۳۲۵ تا ۱.۳۵۵۰ ضریب حساسیت $120.8\ ^{deg}/_{RIU}$ و توان تفکیک ۰.۰۰۰۸۲RIU در این حسگر آزمایشگاهی بدست آمده است.



٤. بررسی زاویه تشدید پلاسمون سطحی به ضریب شکست

٤. نتیجه گیری

با تغییر ۰.۰۰۰۸۲RIU واحد ضریب شکست در محیط، حسگر ما تغییر را حس می کند. با توجه به نمودار۸ می توان زمینه ساخت یک حسگر بر اساس پدیده تشدید پلاسمون سطحی فراهم کرد. در نهایت ضریب شکست بدست آمده را در نمودار کالیبراسیون قرار داده و ضریب شکست آن را می توان تا سه رقم اعشار دقیق پیشبینی کرد. ضریب حساسیت $120.8\ ^{deg}/_{RIU}$ بدست آورده شد. در نهایت میتوان پایش دقیق و سریع غلظت گلوکز را از طریق توسعه حسگر های تشدید پلاسمون سطحی انجام داد و نتایج قابل قبولی بدست آورد.

مرجع‌ها

[۱] J. a. M. P. Homola, Surface plasmon resonance (SPR) sensors, Berlin Heidelberg: Springer, ۲۰۰٦.

[۲] J. P. e. a. Chambers, "Biosensor recognition elements," *molecular biology,* Vols. ۱۰,۱-۲, pp. ۱-۱۲, ۲۰۰۸.

[۳] A. K. a. R. Mkrtchyan, "Recent advances in Surface Plasmon Resonance (SPR) biosensors for foodanalysis: a review," *Food Science and Nutrition,* pp. ۱۰۵۵-۱۰۷۷, ۲۰۲۳.

[٤] R. H. Ritchie, " Plasma losses by fast electrons in thin films,," *Physical review ,* vol. , no. ۸۷٤, ۱۹۵۷.

[۵] V. H. S. P. a. R. J. P. Yesudasu, "Recent progress in surface plasmon resonance based sensors: A comprehensive review," *Heliyon,* no. ۷,۳, ۲۰۲۱.

[٦] M. a. E. W. Born, "Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light," *Elsevier,* ۲۰۱۳.

بررسی عددی اثر ضخامت لایه مکسین بر انتشار نور در فیبر نوری پلی متیل متاکریلات به روش تفاضل محدود در حوزه زمان

آقچای ، علی محمد ؛ ندافان، مرضیه*؛ ضمیرانوری، جاوید؛ پریشانی، مرضیه

دانشکده فیزیک دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی ، تهران

**m.nadafan@sru.ac.ir*

چکیده

در این پژوهش، اثر ضخامت لایه مکسین (Ti_3C_2) بر انتشار نور در یک فیبر نوری با هسته پلیمری از جنس پلی متیل متاکریلات به روش تفاضل محدود در حوزه زمان به‌صورت عددی بررسی شد. نتایج نشان داد که در میان ضخامت‌های بررسی‌شده، در ضخامت ۱/۵میکرومتر بیشترین تمرکز میدان الکتریکی در هسته با مقدار تقریبی $1.474 \times 10^{-1}\ N/m$، بیشینه میدان مغناطیسی حدود $1.38 \times 10^{-3}\ A/m$ و توان خروجی حدود $0.2\ mW$ به دست آمد. نتایج بیانگر آن است که کنترل ضخامت لایه مکسین می‌تواند در بهبود ویژگی‌های انتشار نور در فیبرهای نوری مبتنی بر مواد دوبعدی برای کاربردهای فوتونیکی و حسگری مؤثر باشد.

واژه های کلیدی: *فیبر نوری، هسته پلیمری، ضخامت مکسین، تفاضل محدود در حوزه زمان (FDTD)، انتشار نور*

Numerical Investigation of the Effect of MXene Layer Thickness on Light Propagation in a Polymethyl methacrylate (PMMA) Optical Fiber Using the Finite-Difference Time-Domain (FDTD) Method

Aghchay, Ali mohammad; Naddafan, Marzieh*; Zamir Anvari, Javid; Parishani, Marzieh

Department of Physics, University of Shahid Rajaee Teacher Training, Tehran

**m.nadafan@sru.ac.ir*

Abstract

In this study, the effect of MXene (Ti_3C_2) layer thickness on light propagation in a polymethyl methacrylate (PMMA)-core optical fiber was numerically investigated using the finite-difference time-domain (FDTD) method. The results revealed that, among the investigated thicknesses, the 1.5 μm MXene layer exhibited the highest electric field confinement within the fiber core, with a maximum electric field of approximately 1.47×10^{-1} V/m, a maximum magnetic field of approximately 1.38×10^{-3} A/m, and an output optical power of about 0.2 mW. These findings indicate that controlling the MXene layer thickness can improve the light propagation characteristics of optical fibers incorporating two-dimensional materials, offering potential for photonic and optical sensing applications.

Keywords: *Optical fiber, PMMA core, MXene layer thickness, Finite-difference time-domain (FDTD), Light propagation*

PACS No.: 42.81.-i, 42.25.Bs, 02.70.-c, 78.67.-n

مقدمه

از دهه ۱۹۶۰ میلادی تاکنون، فیبرهای نوری به یکی از مهم‌ترین بسترهای انتقال اطلاعات تبدیل شده‌اند. فیبرهای نوری به دلیل پهنای باند زیاد، تلفات کم، مصونیت در برابر تداخلات الکترومغناطیسی و ابعاد کوچک، کاربرد گسترده‌ای در انتقال اطلاعات، سامانه‌های مخابرات، حسگرهای اپتیکی، افزاره‌های فوتونیکی، تجهیزات پزشکی و صنایع مختلف یافته‌اند[۱]. عملکرد فیبرهای نوری به مشخصات هندسی و خواص اپتیکی اجزای تشکیل‌دهنده آن‌ها وابسته است؛ ازاین‌رو انتخاب جنس هسته، روکش و لایه‌های پوششی تأثیر مستقیمی بر نحوه هدایت نور، میزان تلفات و حساسیت ساختار خواهد داشت. در سال‌های اخیر، استفاده از مواد دوبُعدی به‌عنوان پوشش فیبرهای نوری مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است. یکی از این مواد، مکسین (MXene) است که به دلیل هدایت الکتریکی بالا، ضریب شکست مناسب، جذب نوری قابل تنظیم و برهم‌کنش قوی نور و ماده، قابلیت استفاده در حسگرهای نوری، مُدولاتورها و

ادوات فوتونیکی را دارد[۲]. به‌کارگیری این ماده در کنار پلیمرهایی مانند پلی متیل متاکریلات (PMMA) می‌تولند موجب تغییر توزیع میدان الکترومغناطیسی و کنترل ویژگی‌های انتشار نور در ساختارهای فیبرنوری شود. علاوه بر استفاده از مواد دوبُعدی، به مشابه این پژوهش می توان از یک میکروکانال بهره برد تا از این ساختار در کاربردهای حسگری و فوتونیکی استفاده شود.

فیزیک مسئله و روش عددی (FDTD)

انتشار نور در فیبرهای نوری بر پایه حل معادلات ماکسول و برقراری شرایط مرزی مناسب در فصل مشترک مواد مختلف قابل توصیف است.

در این پژوهش، تحلیل انتشار نور با استفاده از روش تفاضل محدود در حوزه زمان (FDTD) انجام شده است. این روش یکی از دقیق‌ترین روش‌های عددی برای حل مستقیم معادلات ماکسول در حوزه زمان بوده و امکان بررسی توزیع میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی در ساختارهای پیچیده، توان عبوری، تلفات انتشار و برهم‌کنش نور با مواد مختلف را فراهم می‌سازد و به همین دلیل در طراحی ادوات فوتونیکی و فیبرهای نوری کاربرد گسترده‌ای دارد[۳]. در این روش، میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی به صورت متناوب بر روی شبکه یی(Yee Cell) محاسبه شده و مقادیر آن‌ها در هر گام زمانی به‌روزرسانی می‌شود. معادلات به‌روزرسانی میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی به صورت زیر بیان می‌شوند :

$$E^{(n+1)} = E^n + \frac{\Delta t}{\varepsilon}\nabla \times H^{(n+\frac{1}{2})} \qquad (۱)$$

$$H^{(n+\frac{3}{2})} = H^{(n+\frac{1}{2})} - \frac{\Delta t}{\mu}\nabla \times E^{(n+1)} \qquad (۲)$$

که در آن (E) و (H) به ترتیب میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی، (ε) گذردهی الکتریکی، (μ) تراوایی مغناطیسی و (Δt) گام زمانی شبیه‌سازی هستند.

به منظور استخراج پاسخ طیفی، میدان‌های زمانی به حوزه فرکانس منتقل شدند. تبدیل فوریه میدان الکتریکی مطابق رابطه زیر محاسبه شد :

$$E(\omega) = \int_0^T e^{i\omega t}E(t)dt \qquad (۳)$$

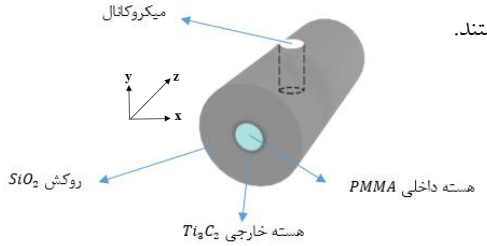
همچنین چگالی توان الکترومغناطیسی از بردار پوینتینگ به دست آمد :

$$S = \frac{1}{2}Real(E \times H^*) \qquad (۴)$$

که از آن برای محاسبه توان عبوری و بررسی میزان افت انتشار استفاده شد.

مدل‌سازی و نحوه شبیه‌سازی

مدل مورد بررسی شامل یک فیبر نوری استوانه‌ای سه‌لایه است که در راستای محور (z) قرار گرفته است. هسته داخلی از جنس PMMA با شعاع ۸ میکرومتر و ضریب شکست ۱/۴۹۳ در نظر گرفته شد. اطراف هسته، لایه‌ای از مکسین (Ti_3C_2) با شعاع خارجی ۹/۵ میکرومتر(ضخامت ۱/۵ میکرومتر) و ضریب شکست ۱/۶۶ قرار گرفت که نقش لایه فعال و هسته خارجی را ایفا می‌کند. همچنین یک روکش از جنس سیلیکا یا SiO_2 با شعاع ۴۰ میکرومتر و ضریب شکست ۱/۴۴ پیرامون ساختار قرار داده شد تا شرایط هدایت نور مشابه فیبرهای نوری متداول فراهم شود. طول ناحیه شبیه‌سازی برابر ۱۰۰ میکرومتر در نظر گرفته شد و نور از ابتدای فیبر در راستای محور (z) به داخل ساختار منتشر گردید. به منظور بررسی امکان استفاده از این ساختار در کاربردهای حسگری، یک میکروکانال استوانه‌ای با شعاع ۱۰ میکرومتر و طول ۳۰ میکرومتر به صورت عمود بر محور فیبر در مدل لحاظ شد (شکل ۱). در این مقاله تنها نقش هندسی این میکروکانال در ساختار معرفی شده است و تحلیل اثر تغییر ضریب شکست ماده داخل آن در محدوده اهداف این پژوهش قرار ندارد. ازاین‌رو، نتایج ارائه‌شده صرفاً بر بررسی اثر ضخامت لایه مکسین بر انتشار نور متمرکز هستند.

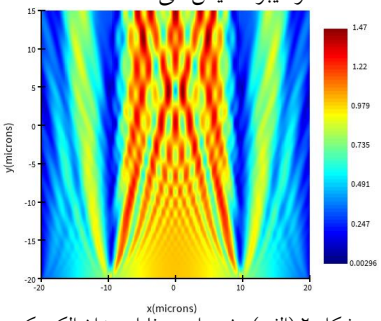


شکل ۱ : ساختار سه بعدی فیبر نوری و میکروکانال و انتشار در راستای طول فیبر نوری روی محور Z

برخلاف تمرکز صرف بر معرفی ساختار، در این مطالعه تغییرات توزیع میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی و همچنین توان عبوری بر اثر تغییر ضخامت لایه مکسین به صورت پارامتری تحلیل شده است.

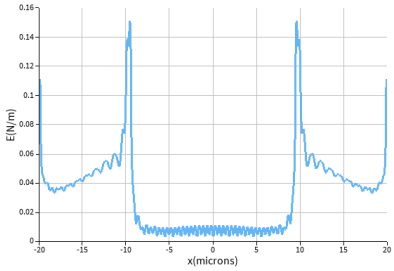
نحوه توزیع میدان الکتریکی

شکل ۲ (الف) و (ب) به ترتیب توزیع دوبعدی میدان الکتریکی در سطح مقطع فیبر و تغییرات میدان الکتریکی را در امتداد قطر فیبر نمایش می‌دهند.



شکل ۲ (الف) : نمودار پروفایل میدان الکتریکی

مطابق شکل ۲ (الف)، بیشترین شدت میدان الکتریکی در ناحیه هسته مشاهده می‌شود که بیانگر هدایت مناسب مُد اصلی در داخل هسته PMMA است. کاهش تدریجی شدت میدان در مرز هسته و لایه مکسین نشان می‌دهد که تنها بخش کوچکی از میدان به لایه جاذب نفوذ کرده است. این رفتار نشان‌دهنده آن است که شرایط بازتاب کلی داخلی همچنان برقرار بوده و مُد هدایت‌شده پایداری مناسبی دارد.



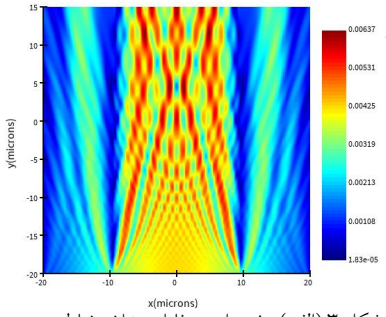
شکل ۲ (ب) : نمودار خطی میدان الکتریکی

بیشینه میدان الکتریکی در مرکز هسته حدود $1.474 \times 10^{-1}\, N/m$ به دست آمد که بیانگر تمرکز مناسب انرژی الکترومغناطیسی در ناحیه مرکزی فیبر است.

مطابق شکل ۲ (ب)، نمودار خطی میدان الکتریکی دارای یک قله متقارن در مرکز فیبر است که مشخصه مُد پایه (Mode Fundamental) محسوب می‌شود. باریک بودن این قله نشان‌دهنده محدودسازی مناسب میدان در هسته است. افزایش ضخامت لایه مکسین موجب کاهش ارتفاع قله و افزایش پهنای آن می‌شود که این رفتار ناشی از نفوذ بیشتر میدان به لایه جاذب و کاهش محدودسازی مُد است.

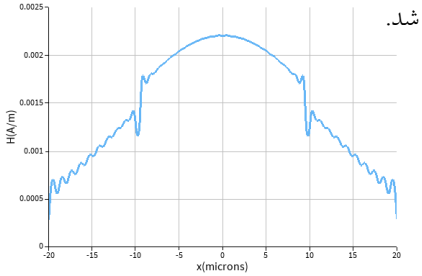
نحوه توزیع میدان مغناطیسی

شکل ۳ (الف) و (ب) به ترتیب توزیع دوبعدی و تغییرات میدان مغناطیسی را در امتداد قطر فیبر نشان می‌دهند.



شکل ۳ (الف) : نمودار پروفایل میدان مغناطیسی

همانند میدان الکتریکی در شکل ۳ (الف)، بیشترین شدت میدان مغناطیسی نیز در هسته مشاهده می‌شود. این موضوع بیانگر آن است که انرژی موج عمدتاً در هسته متمرکز بوده و میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی الگوی فضایی مشابهی را دنبال می‌کنند. نمودار میدان مغناطیسی دارای بیشینه‌ای در مرکز فیبر است که مقدار آن حدود $1.38 \times 10^{-3}\, A/m$ محاسبه شد.



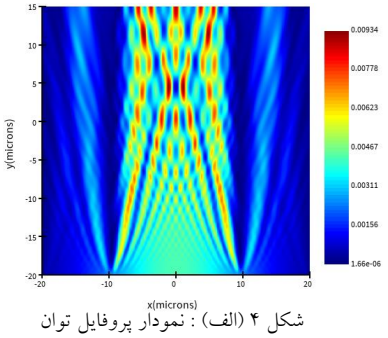
شکل ۳ (ب) : نمودار خطی میدان مغناطیسی

مقایسه میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی نشان می‌دهد که هر دو میدان مطابق معادلات ماکسول رفتار کرده و توزیع

فضایی مشابهی دارند. مطابق شکل ۳ (ب) با افزایش ضخامت لایه مکسین، دامنه میدان مغناطیسی نیز همانند میدان الکتریکی کاهش یافته و پهنای مد افزایش می‌یابد که رفتار آن به مُدهای نشتی(Leaky Modes) نزدیک می‌شود که نتیجه آن افزایش تلفات انتشار است[۴].

نحوه توزیع توان

شکل ۴ (الف) و (ب) به ترتیب توزیع دوبعدی توان و تغییرات آن را در امتداد محور انتشار نشان می‌دهند.

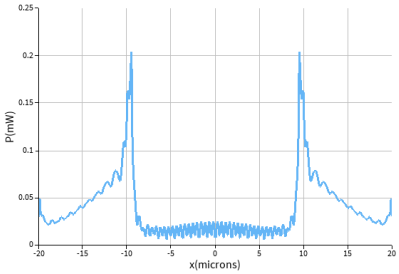


شکل ۴ (الف) : نمودار پروفایل توان

مطابق شکل ۴ (الف) و (ب)، بیشترین توان در نزدیکی منبع نور مشاهده می‌شود و با افزایش فاصله از منبع، مقدار آن به‌تدریج کاهش می‌یابد. این کاهش ناشی از جذب بخشی از انرژی توسط لایه مکسین است. در ضخامت ۱/۵ میکرومتر، نرخ افت توان محدود بوده و بخش عمده انرژی همچنان در هسته باقی می‌ماند. رفتار توان عبوری را می‌توان با قانون بیر- لامبرت توصیف کرد :

$$T = \frac{P}{P_0} = e^{-\alpha L} \qquad (۵)$$

که در آن (P_0) توان ورودی، (P) توان خروجی، (L) طول انتشار و (α) ضریب تلفات مؤثر ساختار است. با افزایش ضخامت لایه مکسین، مقدار (α) افزایش یافته و در نتیجه توان عبوری به‌صورت نمایی کاهش می‌یابد. نتایج نشان داد که توان خروجی در ضخامت ۱/۵ میکرومتر حدود 0.2mW است.



شکل ۴ (ب) : نمودار خطی توان

نتیجه گیری

در این پژوهش، به جای انجام فرآیند بهینه‌سازی، یک مطالعه پارامتری بر روی ضخامت لایه مکسین انجام شد. این مطالعه پارامتری به روش FDTD شبیه‌سازی شد و مطابق نتایج شبیه‌سازی، ضخامت ۱/۵ میکرومتر تعادل مناسبی میان محدودسازی میدان و کاهش تلفات ایجاد می‌کند؛ ازاین‌رو، توزیع میدان‌ها و توان برای این ضخامت ارائه شده است.

نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که ضخامت لایه مکسین یکی از پارامترهای مؤثر بر رفتار انتشار نور در فیبرهای نوری است و کنترل این پارامتر می‌تواند در طراحی فیبرهای نوری مبتنی بر مواد دوبُعدی مفید باشد. با توجه به اینکه در این پژوهش تنها اثر ضخامت لایه بررسی شده است، ارزیابی حساسیت ضریب شکست، بررسی پاسخ ساختار در حضور محیط‌های مختلف و اعتبارسنجی تجربی نتایج می‌تواند در مطالعات آینده انجام شود.

منابع

[1] E. Agrell *et al.*, “Roadmap of optical communications,” *J. Opt. (United Kingdom)*, vol. 18, no. 6, p. 063002, May 2016, doi: 10.1088/2040-8978/18/6/063002.

[2] D. Moss, “Large nonlinear optical absorption observed in MXene 2D films To cite this version : HAL Id : hal-04593514 Large nonlinear optical absorption observed in MXene 2D films,” 2024.

[۳] کامبیز عابدی، محمدرضا رزاقی زاده، *شبیه سازی ادوات نوری با نرم افزار لومریکال*. انتشارات مهرجرد، ۱۳۹۵.

[4] K. A. S. Usman *et al.*, “The Future of MXene Fibers,” *Adv. Mater.*, vol. 37, no. 36, p. 2506437, Sep. 2025, doi: 10.1002/adma.202506437.

اندازه‌گیری جابجایی عمقی بر پایه تخمین مقیاس شعاعی در تصاویر توری دایره‌ای

صابر، احد[۱]؛ آژنگ، آنیا[۱]، سیفی، مهسا[۱]

[۱]دانشکده علوم، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل، کد پستی ۵۶۱۹۹-۱۱۳۶۷

چکیده

در این مقاله، روشی ساده و غیرتماسی برای اندازه‌گیری جابجایی عمقی بر پایه تحلیل تصاویر توری دایره‌ای ارائه می‌شود. در روش پیشنهادی، یک توری دایره‌ای بر سطح جسم نصب شده و تصاویر آن در موقعیت‌های مختلف توسط یک سامانه تصویربرداری منفرد ثبت می‌گردد. جابجایی در راستای محور اپتیکی موجب تغییر بزرگ‌نمایی سامانه و در نتیجه ایجاد تغییر مقیاس شعاعی در تصویر توری می‌شود. برای استخراج این تغییر، تصاویر به مختصات قطبی تبدیل شده و نمایه‌های شعاعی یک‌بعدی از آن‌ها محاسبه می‌گردد. سپس عامل مقیاس با تطبیق این نمایه‌ها و کمینه‌سازی خطای مربعی برآورد شده و با استفاده از مدل کالیبره‌شده سامانه به جابجایی عمقی نگاشت می‌شود. نتایج تجربی نشان می‌دهد رابطه‌ای پایدار و قابل کالیبراسیون میان عامل مقیاس و جابجایی عمقی وجود دارد و سامانه دارای حساسیت حدود ۱۶ پیکسل بر میلی‌متر و حد تفکیک در حدود ۱۰ میکرومتر است.

واژه های کلیدی: *توری دایره‌ای، جابجایی عمقی، تخمین مقیاس، نمایه شعاعی، اندازه‌شناسی نوری.*

Out-of-Plane Displacement Measurement Based on Radial Scale Estimation in Circular Grating Images

Saber, Ahad[1]; Azhang, Ania[1]; Seyfi Mahsa[1]

[1]*Department of Science, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil, 56199-11367, Iran*

Abstract

A simple non-contact method for out-of-plane displacement measurement based on circular grating image analysis is presented. In the proposed approach, a binary circular grating is attached to the object surface, and images are recorded at different axial positions using a single-camera imaging system. Axial displacement induces a change in system magnification, leading to a corresponding radial scale variation in the recorded grating images. To extract this variation, the images are transformed into the polar domain and one-dimensional radial intensity profiles are computed. The scale factor is estimated through radial profile matching via least-squares minimization and mapped to displacement using a calibrated system model. Experimental results demonstrate a stable and monotonic relationship between scale factor and out-of-plane displacement, with a measured sensitivity of approximately 16 pixels/mm and a displacement resolution of about 10 μm.

***Keywords**: Circular grating, out-of-plane displacement, scale estimation, radial profile, optical measurement.*

PACS No. (42)

مقدمه

اندازه‌گیری دقیق جابجایی عمقی و تغییرات هندسی سطوح از موضوعات مهم در اندازه‌شناسی نوری، آزمون‌های غیرمخرب و مشخصه‌یابی مواد به شمار می‌رود [۱]. روش‌های اپتیکی به دلیل ماهیت غیرتماسی و سرعت بالا، کاربرد گسترده‌ای در این حوزه یافته‌اند. در میان این روش‌ها، تکنیک‌های تداخل‌سنجی نظیر تداخل‌سنجی نور سفید [۲،۳] و هولوگرافی دیجیتال [٤] قادر به اندازه‌گیری‌های بسیار دقیق هستند، اما نیاز به چیدمان‌های نسبتاً پیچیده و حساسیت بالا به شرایط محیطی، استفاده از آن‌ها را در بسیاری از کاربردهای عملی محدود می‌کند [۵–۸].

در مقابل، روش‌های مبتنی بر تحلیل تصاویر دیجیتال به دلیل سادگی و هزینه کمتر مورد توجه قرار گرفته‌اند. یکی از شناخته‌شده‌ترین این روش‌ها، همبستگی تصویر دیجیتال است که با مقایسه تصاویر ثبت‌شده قبل و بعد از تغییرشکل، میدان جابجایی

را استخراج می‌کند [۹–۱۱]. با وجود موفقیت این روش، اندازه‌گیری جابجایی عمقی با استفاده از یک دوربین همچنان چالش‌برانگیز است؛ زیرا جابجایی در راستای محور اپتیکی مستقیماً در صفحه تصویر ظاهر نمی‌شود و معمولاً به سامانه‌های چنددوربینه یا کالیبراسیون نسبتاً پیچیده نیاز دارد [۱۰].

از دیدگاه هندسی، جابجایی جسم در راستای محور اپتیکی موجب تغییر بزرگ‌نمایی سامانه تصویربرداری و در نتیجه تغییر مقیاس تصویر ثبت‌شده می‌شود. این تغییر مقیاس در صورت اندازه‌گیری دقیق، می‌تواند به عنوان شاخصی برای تعیین جابجایی عمقی مورد استفاده قرار گیرد. استفاده از الگوهای ساختاریافته، به‌ویژه توری‌های دایره‌ای، دقت اندازه‌گیری این تغییر را افزایش می‌دهد؛ زیرا تقارن محوری این الگوها سبب می‌شود جابجایی عمقی به صورت یک تغییر شعاعی یکنواخت در تصویر ظاهر شود.

در این مقاله، روشی ساده و غیرتماسی برای اندازه‌گیری جابجایی عمقی بر پایه تحلیل تصاویر توری دایره‌ای ارائه می‌شود. در روش، با تبدیل تصاویر به مختصات قطبی تبدیل و نمایه‌های شعاعی استخراج می‌شود. سپس عامل مقیاس تعیین شده و با استفاده از مدل هندسی سامانه تصویربرداری به جابجایی عمقی متناظر نگاشت می‌گردد. برخلاف روش‌های متداول مبتنی بر همبستگی تصویر دیجیتال که معمولاً نیازمند تحلیل دوبعدی تصاویر یا استفاده از سامانه‌های چنددوربینه هستند، در روش پیشنهادی از تقارن ذاتی توری دایره‌ای برای تبدیل مسئله تخمین مقیاس دوبعدی به یک مسئله یک‌بعدی استفاده شده است. این تبدیل ضمن کاهش پیچیدگی محاسباتی، موجب افزایش نسبت سیگنال به نویز و بهبود پایداری تخمین جابجایی عمقی می‌شود. نتایج شبیه‌سازی و آزمایش‌های تجربی نشان می‌دهد که روش پیشنهادی قادر به اندازه‌گیری جابجایی‌های عمقی کوچک تنها با استفاده از یک دوربین دیجیتال و یک الگوی چاپی ساده است.

مبانی نظری

جابجایی جسم در راستای محور اپتیکی سامانه تصویربرداری موجب تغییر فاصله جسم تا عدسی و در نتیجه تغییر بزرگ‌نمایی تصویر می‌شود. بنابراین جابجایی عمقی به صورت یک تغییر مقیاس در تصویر ثبت‌شده ظاهر می‌گردد. در این پژوهش از یک توری دایره‌ای به عنوان الگوی مرجع استفاده شده است که شدت آن در مختصات قطبی به صورت

$$I(r) = I_0\left[1 + a\cos\left(\frac{2\pi r}{p}\right)\right] \quad (1)$$

نوشته می‌شود که در آن I_0 میانگین شدت، a عمق مدولاسیون، p گام شعاعی توری و r مختصات شعاعی است. برای یک سامانه مبتنی بر عدسی نازک، بزرگ‌نمایی از رابطه

$$M = \frac{f}{u-f} \quad (2)$$

به دست می‌آید که در آن f فاصله کانونی و u فاصله جسم تا عدسی است. با جابجایی جسم به اندازه Δz در راستای محور اپتیکی بزرگ‌نمایی جدید برابر خواهد بود با

$$M(\Delta z) = \frac{f}{u+\Delta z-f} \quad (3)$$

و عامل مقیاس میان تصویر مرجع و تصویر جدید به صورت

$$s = \frac{M(\Delta z)}{M_0} \quad (4)$$

تعریف می‌شود. با جایگذاری روابط بزرگ‌نمایی در رابطه (٤)، عامل مقیاس به صورت

$$\mathrm{s} = \frac{\mathrm{u}-\mathrm{f}}{\mathrm{u}+\Delta\mathrm{z}-\mathrm{f}} \quad (5)$$

به دست می‌آید. بنابراین جابجایی عمقی متناظر با یک عامل مقیاس مشخص از رابطه

$$\Delta z = (u-f)\left(\frac{1}{s}-1\right) \quad (6)$$

قابل محاسبه است. با توجه به محدود بودن بازه جابجایی مورد بررسی در مقایسه با u، تغییرات بزرگ‌نمایی در محدوده اندازه‌گیری با تقریب مناسبی توسط مدل عدسی نازک توصیف شد. برای استخراج عامل مقیاس، ابتدا تصویر توری به مختصات قطبی منتقل می‌شود و سپس با میانگین‌گیری در راستای زاویه‌ای، یک نمایه شعاعی یک‌بعدی از تصویر به دست می‌آید. اگر $S_{ref}(r)$ نمایه شعاعی تصویر مرجع و $S(r)$ نمایه متناظر با تصویر ثبت‌شده پس از جابجایی باشد، تغییر مقیاس میان دو تصویر از طریق مقایسه این دو نمایه تعیین می‌شود. بدین منظور، مجموعه‌ای از ضرایب مقیاس فرضی s به نمایه مرجع اعمال شده و نمایه مقیاس‌یافته $S_{ref}(sr)$ با استفاده از درون‌یابی محاسبه می‌شود. سپس برای هر مقدار مقیاس، تابع خطای مربعی به صورت

$$E(s) = \sum_r\left[S(r) - S_{ref}(sr)\right]^2 \quad (7)$$

محاسبه و عامل مقیاس متناظر با کمترین مقدار تابع خطا به صورت

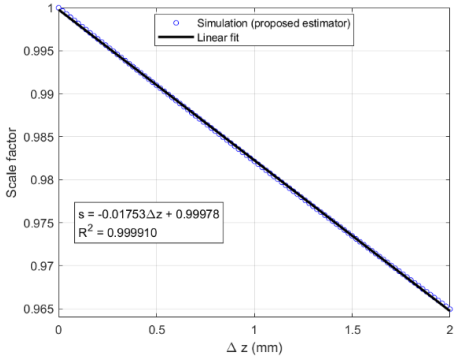
$$s^* = \text{argmin}_s E(s) \quad (۸)$$

انتخاب می‌شود که در آن argmin عملگری است که مقدار متغیر s را که تابع هزینه $E(s)$ را کمینه می‌کند، بازمی‌گرداند. در نهایت، با استفاده از رابطه هندسی بین بزرگ‌نمایی و فاصله جسم تا دوربین، مقدار عامل مقیاس به جابجایی عمقی متناظر نگاشت می‌شود.

در اثر جابجایی عمقی، کل ساختار توری به صورت یکنواخت در راستای شعاعی تغییر می‌کند و بنابراین اطلاعات موجود در تصویر را می‌توان در قالب یک نمایه شعاعی یک‌بعدی فشرده کرد. این ویژگی سبب افزایش نسبت سیگنال به نویز و بهبود پایداری تخمین عامل مقیاس می‌شود.

شبیه‌سازی عددی

برای ارزیابی عملکرد روش پیشنهادی، شبیه‌سازی عددی در محیط متلب انجام شد. یک توری دایره‌ای شامل ۵۰ حلقه هم‌مرکز با ابعاد ۶×۶ سانتی‌متر به‌عنوان الگوی مرجع در نظر گرفته شد و اثر جابجایی عمقی با اعمال عامل مقیاس متناظر بر اساس مدل هندسی سامانه شبیه‌سازی گردید. سپس تصاویر به مختصات قطبی تبدیل و نمایه‌های شعاعی استخراج شد و عامل مقیاس با کمینه‌سازی تابع خطای مربعی برآورد گردید. به منظور بررسی پایداری روش، برای هر جابجایی ۱۰۰ تکرار مونت‌کارلو با افزودن نویز گاوسی سفید با میانگین صفر و انحراف معیار معادل ۲ درصد دامنه انجام شد.

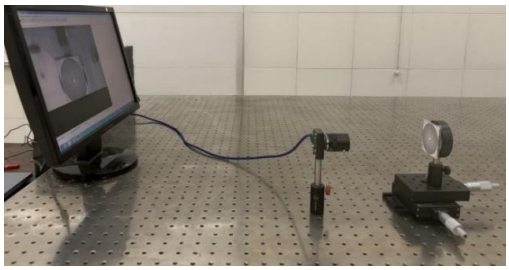


شکل ۱: رابطه بین عامل مقیاس و جابجایی عمقی همراه با برازش خطی.

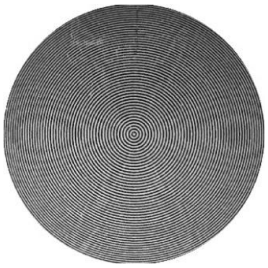
برای جابجایی‌های ۰ تا ۲ میلی‌متر با گام ۱۰ میکرومتر، اختلاف مقادیر واقعی و برآوردشده در ۲۰۱ نمونه و طی ۱۰۰ تکرار مونت‌کارلو محاسبه و شاخص‌های ریشه میانگین مربعات خطا، میانگین قدر مطلق خطا و بیشینه خطا استخراج شد. مقادیر این شاخص‌ها به‌ترتیب برابر با ۰/۵۹۹، ۰/۴۴۶ و ۱/۵۵ میکرومتر به دست آمد. شکل ۱ رابطه بین عامل مقیاس و جابجایی عمقی را به همراه برازش خطی نشان می‌دهد.

چیدمان آزمایشگاهی و روش تجربی

به منظور ارزیابی روش پیشنهادی، یک توری دایره‌ای باینری شامل ۵۰ حلقه هم‌مرکز با گام شعاعی ۰/۶۰mm طراحی و بر روی یک جسم صلب نصب شد. جسم روی یک جابجاگر میکرومتری با قدرت تفکیک ۱۰μm قرار گرفت و در راستای محور اپتیکی جابجا شد. سامانه تصویربرداری شامل دوربین CMOS با رزولوشن ۲۵۹۲×۱۹۴۴ پیکسل و اندازه پیکسل ۲/۲μm مجهز به عدسی با فاصله کانونی قابل تغییر بود که در فاصله تقریبی ۱۱۰ میلی‌متری از توری قرار داشت. تصویربرداری در نور سفید انجام شد و بزرگ‌نمایی مؤثر حدود ۰/۰۷۵ بود. تصاویر در بازه جابجایی ۰ تا ۲ میلی‌متر و با گام ۱۰ میکرومتر و تحت شرایط نوری ثابت ثبت شدند. شکل ۲ نمایی از چیدمان آزمایشگاهی و شکل ۳ نمونه‌ای از تصویر توری ثبت‌شده را نشان می‌دهد.



شکل ۲: چیدمان آزمایشگاهی شامل دوربین، جابجاگر و جسم حامل توری



شکل۳: نمونه‌ای از تصویر توری چاپ‌شده

پس از ثبت تصاویر، ناحیه شامل توری استخراج و به مختصات قطبی تبدیل شد. سپس با میانگین‌گیری زاویه‌ای، نمایه شعاعی یک‌بعدی هر تصویر استخراج گردید. عامل مقیاس هر تصویر نسبت به تصویر مرجع با تطبیق نمایه‌های شعاعی و کمینه‌سازی خطای مربعی برآورد شد. مقادیر عامل مقیاس استخراج‌شده در

جابجایی‌های معلوم، به عنوان نقاط کالیبراسیون در نظر گرفته شدند و با برازش آن‌ها، منحنی کالیبراسیون سامانه به دست آمد. نتایج نشان داد که عامل مقیاس در بازه ۰ تا ۲ میلی‌متر به‌صورت یکنواخت از ۱ به حدود ۰/۹٦٥٤ کاهش می‌یابد و حساسیت سامانه در حدود ۱٦ پیکسل بر میلی‌متر جابجایی عمقی به‌دست آمد. تحلیل نویز نیز حد تفکیک قابل تشخیص را در حدود $۱۰\mu m$ نشان داد. شیب منحنی کالیبراسیون حدود $۰/۰۱۷۳ mm^{-1}$ محاسبه شد که بیانگر رابطه قابل کالیبراسیون و پایدار بین تغییر مقیاس و جابجایی عمقی است. در نهایت، رابطه تجربی حاصل به‌عنوان مبنای نگاشت مقیاس به جابجایی در سامانه استفاده شد.

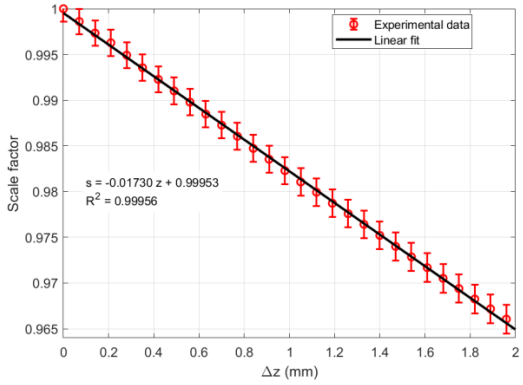
نتایج تجربی و بحث

شکل ٤ تغییرات عامل مقیاس را بر حسب جابجایی عمقی نشان می‌دهد. نتایج، رفتار یکنواخت عامل مقیاس را با افزایش فاصله جسم از سامانه نشان می‌دهد که با مدل هندسی تصویربرداری سازگار است. برازش خطی داده‌ها با ضریب تعیین $R^2 = ۰/۹۹۹۵$ بیانگر همبستگی قوی و قابلیت کالیبراسیون مناسب روش است. تحلیل حساسیت نشان داد که سامانه دارای حساسیت حدود ۱٦ پیکسل بر میلی‌متر و حد تفکیک در حدود ۱۰ میکرومتر است. کاهش گام توری تا حد توان تفکیک سامانه، حساسیت تخمین مقیاس را افزایش می‌دهد؛ اما در گام‌های بسیار کوچک، به دلیل محدودیت نمونه‌برداری و کاهش تباین، دقت اندازه‌گیری کاهش می‌یابد به طور کلی، فاصله کانونی و عدد کانون (#F) نیز بر حساسیت و دقت تخمین مقیاس مؤثرند؛ با این حال، این پارامترها در تمام آزمایش‌ها ثابت نگه داشته شدند. بنابراین، روش پیشنهادی قادر به آشکارسازی جابجایی‌های عمقی کوچک تنها با استفاده از یک دوربین منفرد و بدون نیاز به نور همدوس است.

نتیجه‌گیری

نتایج نظری و تجربی نشان داد که تغییر مقیاس استخراج‌شده دارای رابطه‌ای پایدار و قابل کالیبراسیون با جابجایی عمقی است. استفاده از تقارن محوری توری دایره‌ای و تبدیل نمایه دوبعدی به یک نمایه شعاعی یک‌بعدی، موجب افزایش پایداری در برابر نویز و بهبود تخمین مقیاس شده است.

سادگی چیدمان، استفاده از یک دوربین واحد و عدم نیاز به نور همدوس، روش پیشنهادی را برای کاربردهای اندازه‌شناسی نوری و پایش تغییرشکل مناسب می‌سازد. توسعه این رویکرد برای اندازه‌گیری میدان جابجایی و شرایط پیچیده‌تر می‌تواند مسیر پژوهش‌های آینده باشد.



شکل ٤: ضریب مقیاس بر حسب جابجایی عمقی

مرجع‌ها

[۱] F. Zhao, H. Tang, X. Zou, and X. Li; "A review of optical metrology techniques for advanced manufacturing applications"; *Micromachines* **16**, No. 11 (2025) 1224.
[۲] M. Jiang, D. Zhang, X. Wang, Y. Gong, and W. Zou; "Characterization of the Binary Micro-Grating Surface by Scanning White Light Interferometry"; *In 2012 Symposium on Photonics and Optoelectronics, IEEE*, (2012) 1-4.
[۳] L. Deck, and P. De Groot; "High-speed noncontact profiler based on scanning white-light interferometry"; *Applied optics* **33**, No. 31 (1994) 7334-7338.
[٤] W. Osten, A. Faridian, P. Gao, K. Körner, D. Naik, G. Pedrini, A. K. Singh, M. Takeda, and M. Wilke; "Recent advances in digital holography"; *Applied optics* **53**, No. 27 (2014): G44-G63.
[٥] G. Huang, C. Cui, X. Lei, Q. Li, S. Yan, X. Li, and G. Wang; "A review of optical interferometry for high-precision length measurement"; *Micromachines* **16**, No. 1 (2024) 6.
[٦] P. J. De Groot; "A review of selected topics in interferometric optical metrology"; *Reports on Progress in Physics* **82**, No. 5 (2019) 056101.
[۷] J. Lawall, and E. Kessler; "Michelson interferometry with 10 pm accuracy"; *Review of Scientific Instruments* **71**, No. 7 (2000) 2669-2676.
[۸] K. Zhu, B. Guo, Y. Lu, S. Zhang, and Y. Tan; "Single-spot two-dimensional displacement measurement based on self-mixing interferometry"; *Optica* **4**, No. 7 (2017) 729-735.
[۹] M. A. Sutton, J. H. Yan, V. Tiwari, H. W. Schreier, and J. J. Orteu; "The effect of out-of-plane motion on 2D and 3D digital image correlation measurements"; *Optics and Lasers in engineering*, **46** No. 10 (2008) 746-757.
[۱۰] C. J. Tay, C. Quan, Y. H. Huang, and Y. Fu; "Digital image correlation for whole field out-of-plane displacement measurement using a single camera"; *Optics Communications* **251**, No. 1-3 (2005) 23-36.
[۱۱] M. A. Sutton, J. J. Orteu, and H. Schreier; "Image correlation for shape, motion and deformation measurements: basic concepts, theory and applications"; *Springer Science & Business Media*, 2009.

کنترل رفتار جمعی ذرات مغناطیسی با بهره‌گیری از انبرک نوری لک‌وپیس

صدری ، محمدهادی[۱]؛ کعبی، ساره[۲]؛ مرادی، علی‌رضا[۲،۱]

[۱] دانکشده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، زنجان
[۲] پژوهشکده فیزیک کوانتومی و ماده، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی،تهران

چکیده

انبرک نوری مبتنی بر الگوی لک‌وپیس در سال‌های اخیر به‌عنوان بستری کارآمد برای به‌دام‌اندازی و کنترل همزمان تعداد زیادی ذره مورد توجه قرار گرفته است .الگوی لک وپیس ،حاصل برهم‌نهی تصادفی امواج نوری است که با ایجاد تعداد زیادی گرادیان موضعی شدت ،تله‌های نوری متعددی را شکل می‌دهد .این ویژگی ،در مقایسه با انبرک های نوری متداول ،امکان کنترل و دستکاری دینامیک جمعی ذرات را فراهم کرده و انبرک لک‌وپیس را به ابزاری مناسب برای بررسی سامانه‌های چندذره‌ای پیچیده تبدیل می‌کند .در این پژوهش ،به‌منظور افزایش کارایی به‌دام‌اندازی و بهره‌گیری از سازوکارهای کنترلی بیشتر ،از ریزذرات ترکیبی مگنتایت–سیلیکا برای انبرک نوری لک‌وپیس استفاده شده است .وجود فاز مغناطیسی در ساختار این ذرات امکان بهره‌گیری همزمان از نیروهای نوری و مغناطیسی باریکه لیزری را فراهم می‌سازد؛ که می‌تواند به افزایش پایداری تله ،بهبود کنترل حرکت ذرات ،تقویت سازمان‌دهی جمعی و در نهایت توسعه پلتفرم‌های پیشرفته دستکاری نوری–مغناطیسی منجر شود.

واژه های کلیدی :*انبرک نوری لک‌وپیس ،ذرات مغناطیسی ،رفتار جمعی ،برهم‌کنش نوری–مغناطیسی*

Manipulation of the Collective Dynamics of Magnetic Particles using Speckle Tweezers

Sadri, Mohammad Hadi[1]; Kabi Sareh[2]; Moradi, Ali-Reza[1,2]

[1] *Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan*
[2] *School of Quantum Physics and Matter, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), Tehran*

Abstract

Speckle tweezers (ST) has attracted intensive attention in recent years as an efficient platform for the simultaneous manipulation of ensemble of particles. Speckle pattern is formed through the random superposition of coherent optical waves and consists of numerous localized intensity gradients that give rise to multiple optical trapping sites. For complex many-particle systems, compared to conventional optical tweezers, ST enables enhanced control and manipulation of collective particle dynamics. In the present study, magnetite–silica (Fe_3O_4@SiO_2) composite microparticles are employed to improve the trapping efficiency of speckle tweezers and to introduce an additional control mechanism. The incorporation of a magnetic phase into the particle structure enables the simultaneous utilization of both the optical and magnetic components of the laser field. This combined interaction has the potential to enhance trap stability, improve control over particle motion, promote collective self-organization, and ultimately contribute to the development of advanced opto-magnetic manipulation platforms.

***Keywords**: Optical speckle tweezers; Magnetic particles; Collective dynamics; Opto-magnetic interactions*

مقدمه

انبرک نوری یکی از مهم‌ترین ابزارهای دستکاری غیرتماسی ذرات در مقیاس میکرو و نانو محسوب می‌شود. این فناوری که نخستین بار توسط آرتور اشکین معرفی شد، بر پایه نیروهای نوری ناشی از گرادیان شدت میدان الکترومغناطیسی عمل کرده و امکان به‌دام‌اندازی، جابه‌جایی و مطالعه ذرات را فراهم می‌کند[۱]. در انبرک‌های نوری متداول، باریکه لیزر به شدت کانونی شده معمولاً تنها یک تله نوری منفرد ایجاد می‌کند که برای بررسی خواص و دینامیک تک‌ذره‌ای مناسب است. اما بسیاری از کاربردهای نوین در حوزه‌های میکروسیالات، مواد نرم و سامانه‌های کلوئیدی نیازمند کنترل همزمان تعداد زیادی ذره و مطالعه رفتارهای جمعی آن‌ها هستند[۲]. برای پاسخ به این نیاز، روش‌های مختلفی به منظور ایجاد آرایه‌هایی از تله‌های نوری توسعه یافته‌اند که از جمله آن‌ها می‌توان به مهندسی جبهه‌موج با استفاده از مدوله‌کننده‌های فضایی نور و یا استفاده از ادوات تقسیم زمانی باریکه مانند انحراف‌کننده آکوستو–اپتیکی اشاره کرد. اگرچه این روش‌ها قابلیت ایجاد چندین تله را فراهم می‌کنند، اما معمولاً به تجهیزات پیچیده و هزینه‌های نسبتاً بالا نیاز دارند[۳]. در این میان، انبرک نوری مبتنی بر الگوی لک‌وپیس به‌عنوان رویکردی ساده، انعطاف‌پذیر و کم‌هزینه مورد توجه قرار گرفته‌اند. الگوی لک‌وپیس حاصل برهم‌نهی تصادفی امواج همدوس نوری است که توزیع فضایی پیچیده و تصادفی از شدت نور را ایجاد کرده و گرادیان‌های موضعی متعددی را پدید می‌آورد. در نتیجه، این ساختار به‌طور طبیعی تعداد زیادی تله نوری را فراهم کرده و امکان دستکاری همزمان تعداد زیادی ذره را مهیا می‌سازد. برخلاف آرایه‌های منظم تله‌های نوری چندگانه، توزیع تصادفی تله‌ها و نیروهای نوری در انبرک لک‌وپیس شرایط مناسبی برای مطالعه انتقال، جداسازی، هدایت و به‌ویژه کنترل حرکت جمعی ذرات در محیط‌های پیچیده فراهم می‌کند[۴-۶].

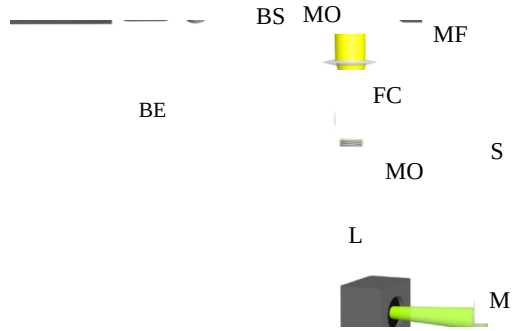
در کنار توسعه بسترهای چندتله‌ای، افزایش کارایی و پایداری تله‌اندازی نیز همواره یکی از چالش‌های اصلی در حوزه انبرک‌های نوری بوده است. افزایش توان لیزر اگرچه می‌تواند نیروی تله‌اندازی را تقویت کند، اما در بسیاری از کاربردها، به‌ویژه در محیط‌های زیستی، با محدودیت‌های ناشی از گرمایش و آسیب نمونه همراه است. یکی از راهکارهای پیشنهادی برای رفع این چالش، استفاده از ذراتی با خواص اپتیکی و مغناطیسی توأمان است. در این میان، ذرات هسته-پوسته مگنتایت-سیلیکا ($Fe_3O_4@SiO_2$) به دلیل برخورداری از پاسخ مغناطیسی امکان برهم‌کنش با مؤلفه مغناطیسی میدان الکترومغناطیسی نور در کنار مؤلفه الکتریکی آن را فراهم می‌کنند و در عین حال به واسطه پایداری فیزیکی و سازگاری شیمیایی مناسب، گزینه‌ای مطلوب برای مطالعات اپتومغناطیسی به شمار می‌روند[۷].

از جهتی از انبرک نوری لک‌وپیس به‌عنوان بستری برای مطالعه رفتار جمعی ریزذرات مگنتایت–سیلیکا استفاده شده است. از جهت دیگر، بررسی ظرفیت این سامانه برای بهره‌گیری همزمان از نیروهای نوری و مغناطیسی و ارزیابی تأثیر آن بر پایداری تله، کنترل حرکت ذرات در محیط‌های چندذره‌ای است.

آماده‌سازی نمونه‌ها و چیدمان آزمایشگاهی

برای انجام آزمایش‌های این پژوهش، از ریزذرات هسته–پوسته $Fe_3O_4@SiO_2$ به‌عنوان نمونه اصلی و از ذرات میکرونی سیلیکای خالص به‌عنوان نمونه مرجع استفاده شد .ذرات $Fe_3O_4@SiO_2$ از طریق پوشش‌دهی نانوذرات مگنتایت با سیلیکا سنتز شدند .محیط واکنش شامل ۲۶میلی‌لیتر اتانول ۲/۷ ،میلی‌لیتر آب ۳/۶ ،میلی‌لیتر آمونیاک ۰/۰۰۷ ،گرم KCl و ۰/۱گرم نانوذرات مگنتایت بود .برای تشکیل پوسته ،محلول حاوی ۲/٤گرم TEOS در ۱۳/۳میلی‌لیتر اتانول تهیه و با نرخ ۰/۱میلی‌لیتر بر دقیقه به محیط واکنش تزریق شد .همچنین TEOS در دو مرحله طی ٦ و ۱۲ ساعت به سامانه افزوده شد تا رشد یکنواخت پوسته سیلیکا حاصل شود. سنتز در دمای ۳۰ درجه سانتی‌گراد و تحت هم‌زدن مداوم با سرعت ۳۰۰ دور بر دقیقه انجام گرفت .پس از واکنش، ذرات به‌وسیله سانتریفیوژ جداسازی، سه بار با اتانول شستشو و در دمای محیط تحت خلأ خشک شدند. پوشش سیلیکا ضمن افزایش پایداری فیزیکی و شیمیایی، از تجمع هسته‌های مغناطیسی جلوگیری کرده و امکان تهیه سوسپانسیون‌های پایدار برای آزمایش‌های تله‌اندازی را فراهم می کند .

پس از آماده‌سازی نمونه‌ها، چیدمان انبرک نوری لک‌وپیس بر پایه تولید الگوی لک‌وپیس از طریق انتشار باریکه نور لیزر در یک فیبر



شکل ۱: چیدمان انبرک لک‌وپیس با فیبر نوری. BE: باریکه‌گستر، BS: باریکه شکن، FC :کوپلر فیبر، MF :فیبر چندین مدی، S: محل نمونه، MO :عدسی شیئی، M:آینه، L :عدسی.

چندین مدی طراحی و پیاده‌سازی شد)شکل .(۱در این سامانه ، برهم‌نهی تعداد زیادی مد فضایی در خروجی فیبر ،الگویی تصادفی از گرادیان‌های متعدد شدت ایجاد می‌کند که مجموعه‌ای از تله‌های نوری موضعی را برای به‌دام‌اندازی ذرات فراهم می‌سازد .به‌عنوان منبع نور ،از یک لیزر حالت جامد با طول موج ۵۳۲نانومتر و توان خروجی حداکثر ۱وات استفاده شده است .باریکه لیزر پس از عبور از باریکه‌گستر به درون فیبر چندهزارمدی کوپل شده و میدان لک وپیس حاصل بر روی صفحه نمونه هدایت می‌گردد .برای مشاهده و ردیابی ذرات ،نوردهی با نور سفید نیز توسط یک باریکه‌شکن به مسیر اپتیکی افزوده شده است .نمونه‌ها به‌صورت سوسپانسیون‌های رقیق در محفظه آزمایش قرار گرفته و اطلاعات و تحول آن‌ها پس از عبور از مسیر تصویربرداری توسط یک دوربین دیجیتالی (Thorlabs DCC 1524M)ثبت می‌شود.

پس از پایدارسازی چیدمان ،حرکت ذرات و فرآیند تله‌اندازی در شرایط مختلف ثبت و با استفاده از روش‌های پردازش تصویر و تحلیل آماری ارزیابی می‌شود .نتایج حاصل امکان مقایسه رفتار ذرات سیلیکایی و $Fe_3O_4@SiO_2$، و بررسی نقش برهم‌کنش‌های نوری و مغناطیسی در دینامیک سامانه را فراهم می‌کند.

نتایج و بحث

برای بررسی اثر میدان لک‌وپیس بر دینامیک ذرات ،ابتدا مسیر حرکت آن‌ها در غیاب و حضور میدان نوری مورد مطالعه قرار گرفت .در شکل ۲ (الف)، که لیزر خاموش است، مورد مطالعه قرار گرفت. در شکل ۲ (الف)، که لیزر خاموش است، ذره صرفاً تحت تأثیر حرکت براونی قرار دارد و در محیط میکروسکوپی آزادانه



شکل۲: مسیر حرکت ذرات در سه حالت: الف) حرکت براونی آزاد، ب) تله اندازی نوری ذره سیلیکا، و ج) ذره هسته–پوسته $Fe_3O_4@SiO_2$. تغییر رنگ از سبز روشن به سبز پررنگ، ترتیب زمانی حرکت ذره از ابتدا تا انتهای فرآیند را نشان می‌دهد.

جابه‌جا می‌شود .همان‌گونه که مشاهده می‌شود، دامنه جابه‌جایی نسبتاً بزرگ بوده و مسیر حرکت رفتاری تصادفی و گسترده از خود نشان می‌دهد که با ویژگی‌های شناخته‌شده حرکت براونی سازگار است .در شکل۲ (ب)، ذره سیلیکا (SiO_2) در میدان لک‌وپیس قرار گرفته است .گرادیان‌های شدت موجب تله‌اندازی ذره و کاهش دامنه حرکت آن می‌شوند؛ به‌طوری‌که مسیر ذره در اطراف یک موقعیت تعادلی متمرکز می‌شود .در شکل۲ (ج)،ذرات هسته–پوسته $Fe_3O_4@SiO_2$ نوسانات کمتری نسبت به ذرات سیلیکایی نشان داده و در ناحیه محدودتری مقید می‌شوند .این رفتار بیانگر آن است که علاوه بر نیروهای گرادیانی نوری ،برهم‌کنش‌های مرتبط با هسته مگنتایتی نیز در دینامیک ذرات نقش دارند .ازاین‌رو ،در این ساختارها فرآیند تله‌اندازی می‌تواند تحت تأثیر همزمان مؤلفه‌های الکتریکی و مغناطیسی میدان الکترومغناطیسی قرار گیرد.

از دیدگاه نظری ،نیروی وارد بر یک ذره در رژیم ریلی را می‌توان به صورت مجموع سهم‌های الکتریکی ،مغناطیسی و جملات برهم کنشی نوشت:

$$\vec{F} = \vec{F}_e + \vec{F}_m + \vec{F}_{e-m} \qquad (۱)$$

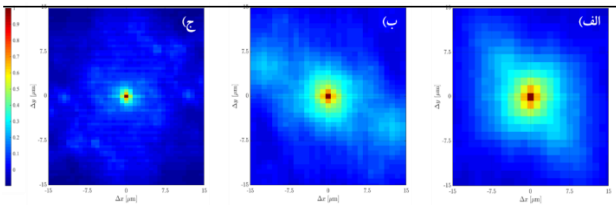
که در آن جمله نخست سهم دوقطبی الکتریکی ،جمله دوم سهم دوقطبی مغناطیسی و جمله سوم سهم برهم‌کنش الکتریکی–مغناطیسی را نشان می‌دهد .اگرچه در مدل‌های کلاسیک تله‌اندازی نوری ،مؤلفه‌های مغناطیسی معمولاً ناچیز فرض می‌شدند ،مطالعات اخیر نشان داده‌اند که در ساختارهای هسته–پوسته و مواد با پاسخ مغناطیسی تقویت‌شده ،این مؤلفه‌ها می‌توانند به افزایش نیروی تله و پایداری آن منجر شوند[۸]. مبنای این موضوع را می‌توان در

چارچوب استدلال لانداو–لیفشیتز بررسی کرد. بر اساس این نظریه، اهمیت پاسخ مغناطیسی با کمیتی به صورت زیر سنجیده می‌شود:

$$R \approx \left(\frac{\lambda}{l}\right)^2 \frac{\chi_M}{\chi_E}\,, \qquad (۲)$$

که در آن λ طول موج نور l ، اندازه مشخصه ذره و χ_M و χ_E به ترتیب پذیرفتاری‌های مغناطیسی و الکتریکی هستند .مطابق این رابطه ،با کاهش ابعاد ذره و افزایش پاسخ مغناطیسی ماده ،سهم مؤلفه مغناطیسی در برهم‌کنش نور و ماده افزایش می‌یابد .علاوه بر این ، مطالعات نتایج مرتبط با رزونانس می نشان می‌دهد که نانوذرات با ضریب شکست بالا قادر به بروز پاسخ مغناطیسی مؤثر در ناحیه اپتیکی هستند[۹].

در ذرات $Fe_3O_4@SiO_2$ مورد استفاده در این پژوهش ،هسته‌های مگنتایتی با قطر متوسط حدود ۲۵۰ نانومتر درون پوسته سیلیکایی قرار دارند؛ ازاین‌رو انتظار می‌رود مؤلفه مغناطیسی میدان لیزر نیز در فرآیند تله‌اندازی مشارکت داشته باشد .علاوه بر این ،مغناطش القاشده می‌تواند برهم‌کنش‌های دوقطبی–دوقطبی میان ذرات را ایجاد کرده و بر رفتار جمعی سامانه اثر بگذارد .بنابراین ،تفاوت مشاهده‌شده میان دینامیک ذرات $Fe_3O_4@SiO_2$ و سیلیکای خالص را می‌توان ناشی از هم‌زیستی نیروهای نوری و مغناطیسی دانست. برای ارزیابی کمی میزان محدودشدگی حرکت ذرات ،از تابع همبستگی چگالی فضایی دوبعدی استفاده شده است .در این روش ، ابتدا از روی مسیرهای ردیابی‌شده ،چگالی احتمال فضایی حضور ذرات $\rho(x,y)$ محاسبه و سپس تابع همبستگی فضایی $C(\Delta x,\Delta y)$ استخراج می‌شود .این تابع میزان همبستگی مکانی موقعیت ذرات را در فواصل مختلف نشان داده و معیاری مناسب برای سنجش موضعی شدن حرکت و شدت به‌دام‌افتادگی فراهم می‌کند، شکل۳ توزیع چگالی احتمال فضایی بازسازی‌شده را برای سه حالت مختلف نمایش می‌دهد .در غیاب میدان لک‌وپیس ،توزیع چگالی گسترده بوده و با حرکت براونی تقریباً آزاد ذرات سازگار است .با اعمال میدان لک‌وپیس ،حضور تله‌های نوری موضعی موجب تمرکز بیشتر توزیع و کاهش گستردگی فضایی آن می‌شود .این محدودشدگی در ذرات هسته–پوسته $Fe_3O_4@SiO_2$ بارزتر است؛ به‌گونه‌ای که توزیع



شکل۳. توزیع چگالی احتمال فضایی ذرات در: الف) حرکت آزاد، ب) تله‌اندازی نوری در میدان لک‌وپیس، وج) محدودشدگی تقویت‌شده در ذرات ترکیبی.

فضایی فشرده‌تر و موضعی‌تر مشاهده می‌شود .این نتیجه نشان می دهد که علاوه بر نیروی گرادیانی نوری، حضور مؤلفه‌های مغناطیسی و برهم‌کنش‌های مرتبط با هسته مگنتایتی می‌تواند به افزایش پایداری تله و محدودشدگی بیشتر حرکت ذرات منجر شود.

نتیجه گیری

نتایج این پژوهش نشان داد که میدان لک‌وپیس قادر است حرکت ذرات را به‌طور مؤثر محدود کرده و تله‌اندازی نوری پایداری ایجاد کند .مقایسه ذرات سیلیکایی و ذرات هسته–پوسته $Fe_3O_4@SiO_2$ بیانگر افزایش محدودشدگی و پایداری تله در حضور هسته مگنتایتی است .تحلیل کیفی و کمی مسیرهای ردیابی‌شده نیز حاکی از آن بود که علاوه بر نیروهای گرادیانی نوری ،برهم‌کنش‌های مغناطیسی در دینامیک ذرات نقش داشته و تله‌اندازی نوری پایدارتری ایجاد کند.

سپاسگزاری

این اثر تحت حمایت مادی بنیاد ملی علم ایران برگرفته شده از طرح شماره ٤٠٤٧٥٥٤انجام شده است.

مرجع‌ها

[1]Ashkin, A. (1970). Acceleration and Trapping of Particles by Radiation Pressure. Physical Review Letters, 24(4), 156–159.
[2] A. Grigorenko, N. Roberts, M. Dickinson, and Y. Zhang, "Nanometric optical tweezers based on nanostructured substrates," Nat. Photonics, vol. 2, no. 6, pp. 365–370, 2008.
[3] D. G. Grier, "A revolution in optical manipulation," Nature, vol. 424, no. 6950, pp. 810–816, 2003.
[4] Volpe, G., Kurz, L., Callegari, A., Volpe, G., & Gigan, S. (2014). Speckle optical tweezers: micromanipulation with random light fields. Optics express, 22(15), 18159-18167.
[5] Jamali, R., Nazari, F., Ghaffari, A., Velu, S. K., & Moradi, A. R. (2021). Speckle tweezers for manipulation of high and low refractive index micro-particles and nano-particle loaded vesicles. Nanophotonics, 10(11), 2915-2928.
[6] Sadri, M. H., Jamali, R., & Moradi, A. R. (2025). Speckle fields for controlling and analysis of microscopic collective motion. Optics Express, 33(11), 22864-22882.
[7] Kabi, S., Gorjizadeh Alinezhad, H., Langari, A., & Reihani, N. S. (2024). Impact of a laser magnetic field on optical trapping. Optica, 11(9), 1295-1302.
[8] Nieto-Vesperinas, M., Sáenz, J., Gómez-Medina, R., & Chantada, L. (2010). Optical forces on small magnetodielectric particles. Optics Express, 18, 11428–11443.
[9] Landau, L. D., Bell, J. S., Kearsley, M., Pitaevskii, L., Lifshitz, E., & Sykes, J. (2013). Electrodynamics of Continuous Media (Vol. 8). Elsevier.

تولید حالتهای غیرکلاسیکی اتم و میدان در یک سامانه اتم-کاواک باز

مجاوری ، بشیر؛ جعفرزاده بهربیگ، رسول؛ خداپرستی، میثم

گروه فیزیک، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان ، تبریز

چکیده

ما در این مقاله تولید حالتهای غیرکلاسیکی اتم و نور را در یک سامانه برهمکنشی اتم-کاواک باز شامل دو اتم دوترازی در حضور محیط کر بررسی می کنیم. فرایند پیشنهادی شامل تحول مارکوفی حالت اولیه سامانه که در آن میدان تک مدی کاواک در حالت همدوس و اتمها در حالت پایه خود مهیا شده اند، می باشد. فرض می کنیم که اتمها علاوه بر میدان تک مدی کاواک با یک میدان کلاسیکی نیز تهییج می شوند. ما تحول آمار تعداد فوتونی میدان کاواک و همچنین رابطه عدم قطعیت آنتروپی اتمها را در رژیم تهییج قوی با تاکید بر نقش محیط کر بحث کرده و نشان می دهیم که حضور محیط کر نقش مثبتی در کنترل چلاندگی آنتروپی اتمها و آمار زیرپواسونی میدان کاواک بازی می کند.

واژه های کلیدی: *حالتهای همدوس، حالات غیرکلاسیکی، پارامتر مندل، چلاندگی آنتروپی، محیط کر.*

Generation of non-classical states of atom and light in an open atom-cavity system

Mojaveri, Bashir; Jafarzadeh Bahrbeig, Rasoul; Khodaparasti, Meisam

Department of Physics, Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz

Abstract

In this paper, we investigate generation of non-classical states of atom and light in an atom-field interaction system in the presence of a Kerr medium. Our proposal is based on the Markovian dynamics of the initial state of system, where the single-mode cavity field are being in the coherent state and the atoms are prepared initially in their ground state. We discuss photon number statistics of the cavity field and also the atomic uncertainty relation in both the strong and weak driving regimes with emphasis on the Kerr medium played in control of these non-classical features, and show that the presence of Kerr medium plays a positive role on control of atomic entropy squeezing and sub-Poissonian statistics of the cavity field.

***Keywords**: Coherent state, non-classical states, Mendel parameter, Entropy squeezing, Kerr medium.*

مقدمه

تولید حالتهای غیرکلاسیکی نور و اتم یک حوزه ی تحقیقاتی خیلی جذاب در اپتیک کوانتومی است. حالتهای غیر کلاسیکی نور یا اتم دارای ویژگیهایی هستند که مفاهیم و اصول فیزیک کلاسیک را به چالش می کشند و موجب ایجاد برخی تفاوتهای اساسی بین فیزیک کلاسیک و کوانتوم می شوند. از اینرو، این حالتها ما را برای آزمودن اعتبار مکانیک کوانتومی قادر می سازند. حالتهای غیر کلاسیکی نور به حالتهایی از میدان کوانتیده الکترومغناطیسی گفته می شوند که تابع توزیع گلاوبر-سودارشان فضای فاز آنها منفی یا تکینگی آن بالاتر از تابع دلتای دیراک باشد. این حالتها سنگ بنای نظریه اطلاعات کوانتومی و اپتیک کوانتومی هستند. از آنجایی که محاسبه تابع توزیع گلاوبر-سودارشان برای طیف وسیعی ازهمه حالتهای نور ممکن نبوده داشتن آمار زیر پواسونی یا چلاندگی برای غیرکلاسیکی بودن یک حالت میدان کوانتیده کفایت می کند.

اثر کِر محیط یک منبع توانمند برای تولید حالتهای غیرکلاسیکی نور می باشد. محیطهای غیر خطی کِر می توانند برای تولید برخی حالتهای غیر کلاسیکی تک مدی مانند حالتهای گربه شرودینگر و درهمتنیده نور نیز مورد استفاده واقع شوند. یک آزمایش پیشگام در این زمینه، تولید حالتهای چلانده با استفاده از اثرات غیرخطی کِر یک فیبر نوری است[۱] . سامانه های اپتیکی مبتنی بر غیر خطیت کِر برای اهداف مختلف اطلاعات کوانتومی از جمله خالص سازی درهمتنیدگی[۲] ، انتقال کوانتومی [۳] و طراحی گیتهای کوانتومی فازی[٤] کاربرد فراوانی دارند. جفت کننده های غیرخطی کِر یک امکان ساده را برای تولید درهمتنیدگی فوتونها میسر می سازند [٥]. محیطهای کِر می توانند کارایی ماشینها گرمایی[٦] اپتیک-پایه را

ارتقا بخشند. در این مقاله می خواهیم در یک سامانه کوانتومی باز شامل برهم کنش یک کاواک تک مدی و دو اتم دوترازی تهییجی، تولید حالتهای غیرکلاسیکی اتم و میدان را با استفاده از دینامیک مارکوفی سامانه بررسی کنیم. ما از تاثیرات غیر خطی محیطهای کر برای عمق بخشیدن به ویژگیهای غیرکلاسیکی حالتهای میدان بهره خواهیم جست. در نهایت، برای مطالعه ماهیت غیرکلاسیکی حالتهای میدان کاواک و اتمها ما به ترتیب چلاندگی تعداد فوتونی و چلاندگی آنتروپی را در رژیم تهییج قوی مطالعه خواهیم کرد.

مدل بندی فیزیکی

ما یک سامانه ی اتم-کاواک باز شامل یک جفت اتم دو ترازی غیر برهمکنشی را در نظر می‌گیریم که در آن، اتمها در حضور یک محیط کر با یک میدان تک مدی کاواک برهمکنش می‌کنند. اتم‌ها هنگام برهمکنش با میدان کاواک توسط یک میدان لیزر خارجی با فرکانس مشخص نیز تهییج می‌شوند. این سامانه توسط هامیلتونی زیر توصیف می شود:

$$H=\frac{\omega_a}{2}\sum_{j=1}^{2}\sigma_z{}^{(j)}+\Omega\sum_{j=1}^{2}\left(e^{-i\omega_D t}\sigma_+^{(j)}+e^{i\omega_D t}\sigma_-^{(j)}\right)+\omega_f\hat{a}^\dagger\hat{a}+\chi a^{\dagger 2}a^2+g\sum_{j=1}^{2}\left(\sigma_+^{(j)}\hat{a}+\sigma_-^{(j)}\hat{a}^\dagger\right), \quad (1)$$

که در آن g ثابت جفت شدگی اتم-میدان، Ω فرکانس رابی برهمکنش اتم با میدان تهییجی، ω_a فرکانس گذار اتمی و ω_D و ω_f به ترتیب فرکانس میدان کلاسیکی و فرکانس میدان تک مدی و χ پذیرفتاری مرتبه سوم محیط کر است . فرض می کنیم که اتمها از محیط اطراف خود ایزوله هستند و فقط بواسطه میدان تحت تاثیر نوفه محیط قرار می گیرند. تحول حالت سامانه در تقریب بورن-مارکوف توسط معادله اصلی

$$\dot{\hat{\rho}}=-i[\hat{H},\hat{\rho}]+\hat{L}_f\hat{\rho}, \quad (2)$$

توصیف می‌شود که در آن $\hat{\rho}$ ماتریس چگالی سامانه بوده و $\hat{L}_f\hat{\rho}$ جمله اتلافی میدان به شکل زیر داده می‌شود:

$$\hat{L}_f\hat{\rho}=\frac{k}{2}[2\hat{a}\hat{\rho}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{\rho}-\hat{\rho}\hat{a}^\dagger\hat{a}] \quad (3)$$

که در آن k نرخ واپاشی میدان می‌باشد. برای حل معادله اصلی (۱) ابتدا با استفاده از تبدیل یکانی $U_0=\exp[-it\omega_0\left(\sum_{j=1}^{2}\frac{1}{2}\hat{\sigma}_z^{(j)}+\hat{a}^\dagger\hat{a}\right)]$ معادله اصلی را به تصویر برهمکنش می بریم. در این تصویر معادله اصلی به صورت زیر بازنویسی می شود:

$$\dot{\rho}_{IP}=-i[H_{IP},\hat{\rho}_{IP}]+L_f\hat{\rho}_{IP} \quad (4)$$

که در آن $\hat{\rho}_{IP}=U_0^\dagger\hat{\rho}\hat{U}_0$ است. هامیلتونی تصویر برهمکنش H_{IP} در رابطه بالا به صورت زیر داده می‌شود:

$$H_{IP}=-\delta\hat{a}^\dagger\hat{a}+\Omega\sum_{j=1}^{2}\left(\sigma_+^{(j)}+\hat{\sigma}_-{}^{(j)}\right)+\chi a^{\dagger 2}a^2+g\sum_{j=1}^{2}\left(\sigma_+^{(j)}\hat{a}+\sigma_-^{(j)}\hat{a}^\dagger\right). \quad (5)$$

که در آن $\delta=\omega_a-\omega_f$ نامیزانی فرکانسهای اتمی و میدان است. حال تبدیل یکانی دیگر به شکل $U_1=\exp\left[it\left(-\delta a^\dagger a+\Omega\sum_{j=1}^{2}\left(\sigma_j^++\sigma_j\right)\right)\right]$ را به معادله اصلی (۵) اعمال می کنیم. بعد از اعمال آن به شکل زیر نوشته می شود:

$$\dot{\rho}'=-i[\mathrm{H}',\rho']+L_f\,\rho', \quad (6)$$

که در آن $\rho'(t)=U_1^\dagger(t)\rho_{IP}(t)U_1(t)$ بوده و هامیلتونی H' به صورت زیر بدست می آید:

$$\hat{\mathrm{H}}'=U_1^\dagger H_{IP}U_1-iU_1^\dagger\frac{dU_1}{dt}=\chi a^{\dagger 2}a^2+\frac{g}{2}\sum_{j=1}^{2}\left[|E\rangle_{ij}\langle E|-|G\rangle_{ij}\langle G|+e^{2i\Omega t}|E\rangle_{ij}\langle G|-e^{-2i\Omega t}|G\rangle_{ij}\langle E|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta\mathrm{t}}\hat{a}+H.C\right] \quad (7)$$

که در آن

$$|E\rangle_j=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|e\rangle_j+|g\rangle_j\right],|G\rangle_j=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\mathrm{e}\rangle_j-|g\rangle_j\right] \quad (8)$$

پایه های پوشیده در فضای هیلبرت اتمی می باشند. حل معادله (٦) به صورت تحلیلی میسر نبوده و ما مجبور به استفاده از روشهای عددی هستیم. ما در ادامه تولید حالتهای غیرکلاسیکی میدان و اتم را بررسی مطالعه می کنیم. به این منظور به تحول چلاندگی حالتهای میدان و چلاندگی آنتروپی اتمها تمرکز می کنیم. با توجه به اصل عدم قطعیت تعداد فوتونی و فاز یک حالت میدان دارای چلاندگی تعداد می باشد هرگاه آمار فوتونی آن حالت زیر پواسونی باشد. برای اندازه گیری آمار فوتونی از پارامتر مندل استفاده می شود. پارامتر مندل به شکل زیر تعریف می شود:

$$\mathrm{Q}=\frac{<\Delta\mathrm{n}>^2-<\mathrm{n}>}{<\mathrm{n}>} \quad (9)$$

که در آن که در آن $< n >$ و $< \Delta n >$ به ترتیب مقادیر چشم دا شتی عملگر تعداد فوتونی و واریانس متناظر آن می با شند. برای حالتهای همدوس $|\alpha >$ که آمار تعداد فوتونی پواسونی دارند Q=۰ اســت. اما پارامتر مندل برای حالتهایی که آمار تعداد فوتونی ابرپواسونی دار ند Q<۰ بوده و برای حالتهایی که دارای آ مار زیرپواسونی هستند Q>۰ می باشد. آن حالتهایی که آمار زیرپواسونی دارند، حالتهای چلانده تعداد فوتونی نامیده می شوند.

همچنین برای تحلیل چلاندگی اتمها از آنتروپی شانون ا ستفاده می کنیم که یک سنجه ی عدم قطعیت بر اساس نظریه اطلاعات می با شد. با توجه به ا صل عدم قطعیت هایزنبرگ و ایده شانون، شکل دیگری از عدم قطعیت برای آنتروپی به شکل زیر معرفی می شود:

$$\delta H(\sigma_x)\delta H(\sigma_y) \geq \frac{4}{\delta H(\sigma_z)} \qquad (10)$$

که در آن σ_α ماتریس های پائولی و $\delta H(\sigma_\alpha) = \exp(H(\sigma_\alpha))$ که در آن $H(\sigma_\alpha)$ آنتروپی شانون ماتریس پائولی می با شد. با ا ستفاده از حالت اتمی سامانه، پارامتر چلاندگی برای اتم ۱ به شکل

$$E(\sigma_\alpha) = \delta H(\sigma_\alpha) - \frac{2}{\sqrt{\delta H(\sigma_z)}} \quad ,\alpha = x, y \qquad (11)$$

تعریف می شود به طوری که مقادیر منفی $E(\sigma_\alpha)$ نشانه ی چلاندگی آنتروپی اتم مورد نظر است. برای یک اتم دو ترازی با ماتریس چگالی $\rho(t)$ آنتروپی شانون به شکل زیر محاسبه می شود:

$$H(\sigma_\alpha) = -[P_1(\sigma_\alpha) ln P_1(\sigma_\alpha) + P_2(\sigma_\alpha) ln P_2(\sigma_\alpha)] , \qquad (12)$$

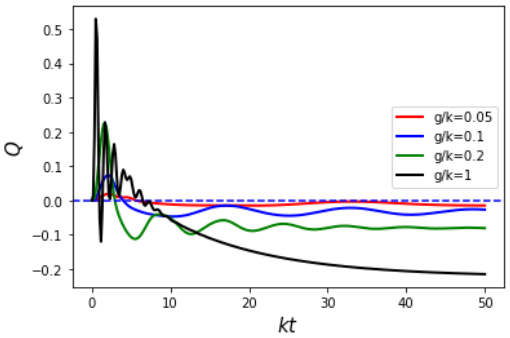
که در آن

$$P_1(\sigma_x) = \frac{1}{2}(1 + 2Re(\rho_{eg}(t))),$$
$$P_1(\sigma_y) = \frac{1}{2}(1 - 2Im(\rho_{eg}(t))),$$
$$P_2(\sigma_x) = \frac{1}{2}(1 - 2Re(\rho_{eg}(t))),$$
$$P_2(\sigma_y) = \frac{1}{2}(1 + 2Im(\rho_{eg}(t))), \; P_1(\sigma_z) = \rho_{gg}(t),$$
$$P_2(\sigma_z) = \rho_{ee}(t) \qquad (13)$$

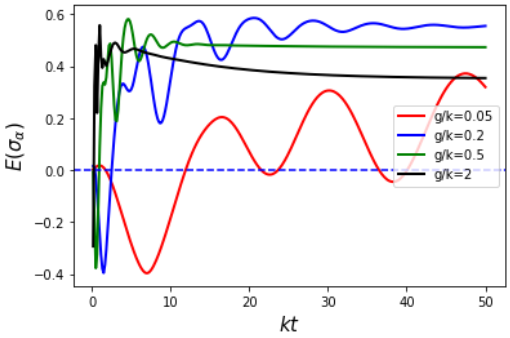
می باشند.

یافته ها

ما در این بخش دینامیک چلاندگی میدان و نیز چلاندگی اتم را با تاکید بر نقش محیط کر بر این ویژگی ها مطالعه کرده ایم. فرض کرده ایم که در زمان $t = 0$ هر دو اتمها در حالت پایه خود و میدان تک مدی کاواک در حالت شبه کلاسیکی $|\alpha >= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n >$ آماده شده با شند. ما فرض کرده ایم که اتمها در حالت تشدید با میدان هستند ($\delta = 0$).



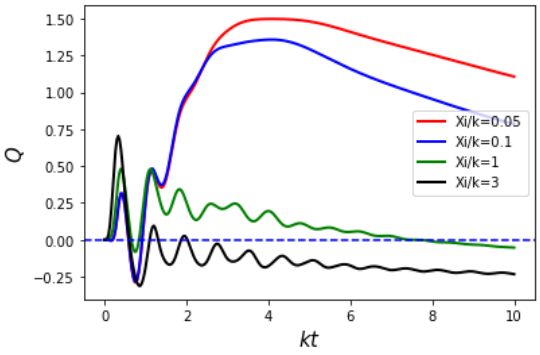
شکل ۱ : دینامیک پارامتر مندل در رژیم تهییج قوی ($\Omega = 2g$) برای g های مختلف.



شکل ۲ : دینامیک چلاندگی آنتروپی در رژیم تهییج قوی ($\Omega = 2g$) برای g های مختلف.

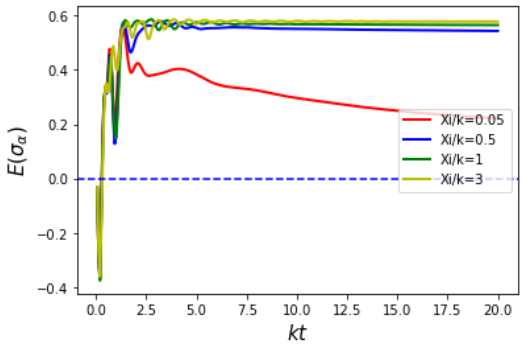
ما برای محاسبه حالت سامانه از بسته QuTiP در محیط پایتون استفاده کرده ایم. ابتدا در شکلهای ۱ و ۲ تحول زمانی به ترتیب Q و $E(\sigma_y)$ را در رژیم تهییج قوی ($\Omega = 2g$) برای ثابت های جفت شدگی اتم- میدان مختلف رسم کرده ایم. شکل ۱ به وضوح تولید حالتهای چلانده (غیرکلاسیکی) میدان را در رژیم تهییج قوی از طریق تحول مارکوفی حالت اولیه شبه کلاسیک $|\alpha >$ تحت هامیلتونی موثر (۷) نشان می دهد. در این رژیم، برای شدت جفت شدگی اتم-میدان ضعیف، آمار زیر پواسونی و در نتیجه چلاندگی تعداد فوتونی در برخی از بازه های زمانی مشاهده می شود. با افزایش شدت جفت شدگی، میزان چلاندگی تعداد فوتونی و همچنین بازه زمانی که در آن چلاندگی مشاهده می شود، افزایش

می یابد. شکل ۲ نشان می دهد که در رژیم تهییج قوی، چلاندگی آنتروپی اتم ۱ می تواند در زمانهای اولیه تحول ایجاد شود. این شکل همچنین نشان می دهد که با افزایش جفت شدگی اتم–میدان اگرچه بازه ی زمانی چلاندگی آنتروپی کوتاه می شود اما این پدیده زودتر رخ می دهد. در شکل های۳ و ٤ تحول زمانی به ترتیب Q و $E(\sigma_y)$ را در رژیم تهییج قوی به ازای ثابت های پذیرفتاری مختلف رسم کرده ایم $(g = 1.5k)$.



شکل۳ : دینامیک پارامتر مندل در رژیم تهییج قوی $(\Omega = 2g)$ برای χهای مختلف.

شکل۳ به وضوح نقش محیط کر در تولید حالتهای چلانده میدان را در رژیم تهییج قوی از طریق تحول مارکوفی حالت اولیه شبه کلاسیک نشان می دهد. بر اساس این شکل، برای ثابتهای پذیرفتاری کوچک، آمار زیر پواسونی و در نتیجه چلاندگی تعداد فوتونی فقط در یک بازه زمانی کوتاه مشاهده می شود. اما با افزایش ثابت پذیرفتاری، این ویژگی غیرکلاسیکی در یک بازه زمانی طولانی رخ می دهد.



شکل٤ : دینامیک چلاندگی آنتروپی در رژیم تهییج قوی $(\Omega = 2g)$ برای χهای مختلف.

علاوه براین، میزان چلاندگی تعداد فوتونی با افزایش ثابت پذیرفتاری افزایش می یابد. شکل ٤ نشان می دهد که تاثیر محیط کر فقط در زمان های اولیه برهمکنش اتفاق می افتد. با این وجود محیط کر تاثیر محسوسی بر میزان چلاندگی آنتروپی اتمی ندارد.

بحث و نتیجه‌گیری

در یک سامانه کوانتومی باز شامل برهم کنش یک کاواک و دو اتم دوترازی تهییجی در حضور محیط کر، تولید حالتهای غیرکلاسیکی اتم و میدان را با استفاده از دینامیک مارکوفی مطالعه کردیم. در رژیم تهییج قوی، جفت شدگی اتم–کاواک و محیط کر را بر چلاندگی تعداد فوتونی میدان و چلاندگی آنتروپی اتمها بررسی کردیم. نشان دادیم که آنها دینامیک چلاندگی های اتم و میدان را به شدت تحت تاثیر قرار می دهند. نشان دادیم که تاثیر جفت شدگی اتم–کاواک و حضور محیط کر بعد از گذشت زمانهای بسیار طولانی از شروع برهمکنش قابل مشاهده است.

منابع

[1] R. M. Shelby, M. D. Levenson, S. H. Perlmutter, R. G. DeVoe, and D. F. Walls, “Broad-band parametric amplification of quantum noise in an optical fiber,” Phys. Rev. Lett. **57**, 691–694 (1986).
[2] L.-M. Duan, G. Giedke, J. I. Cirac and P. Zoller, “Inseparability Criterion for Continuous Variable Systems”, Phys. Rev. Lett. **84**, 4002 (2000).
[3] D. Vitali, M. Fortunato and P. Tombesi, “Complete Quantum Teleportation with a Kerr Nonlinearity”, Phys. Rev. Lett. **85**, 445 (2000) .
[4] C.Ottaviani, D. Vitali, M. Artoni, F. Cataliotti and P. Tombesi, “Polarization Qubit Phase Gate in Driven Atomic Media”, Phys. Rev. Lett. **90**, 197902 (2003).
[5] W. Leoński and A. Miranowicz, “Kerr nonlinear coupler and entanglement”, *J. Opt. B*, ***6***(3), 37 (2004).
[6] U. C. Mendes, J. S Sales and N. G de Almeida, “Quantum Otto thermal machines powered by Kerr nonlinearity”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **54**, 175504 (2021).

انتقال بهینه جمعیت در الگوی جفت شدگی رامان با استفاده از مدل رزن–زنر معکوس

چنگیزی، اسماء ؛ سعادتی نیاری، مقصود

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل

چکیده

در این مقاله، مدل رزن–زنر معکوس که پیشتر برای انتقال بهینه جمعیت در سامانه‌های دوترازی معرفی شده بود، برای الگوی جفت‌شدگی رامان در سامانه‌های سه‌ترازی تعمیم داده می‌شود. در این روش، فرکانس رابی به صورت یک پالس مستطیلی ثابت در نظر گرفته می‌شود و واکوکی به صورت دو پالس سکانت–هیپربولیک مجزا در دو مرحله اعمال می‌گردد. با استفاده از تقارن دینامیکی SU(2) در هامیلتونی سامانه رامان، نشان داده می‌شود که انتشارگر سامانه بر حسب پارامترهای کیلی–کلاین قابل توصیف است. با تنظیم مناسب پارامترها، انتقال جمعیت پهن‌باند و مقاوم نسبت به تغییرات فرکانس رابی بین دو تراز زمینه در الگوی رامان حاصل می‌شود. نتایج عددی نشان می‌دهد که رفتار سامانه سه‌ترازی مشابه سامانه دوترازی است، هرچند بازه مقاومت در مدل رامان اندکی کوچک‌تر می‌باشد.

واژه های کلیدی: *انتقال بهینه جمعیت، الگوی جفت‌شدگی رامان، مدل رزن–زنر معکوس، پارامترهای کیلی–کلاین.*

Optimal population transfer in Raman coupling pattern using the inverse Rosen-Zener model

Changizi, Asma; Saadati-Niari, Maghsoud

Department of Physics, Faculty of Science, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil

Abstract

In this paper, the inverse Rosen-Zener model, previously introduced for optimal population transfer in two-state systems, is generalized to the Raman coupling pattern in three-state systems. In this method, the Rabi frequency is considered as a constant rectangular pulse, and the detuning is applied as two separate sech-shaped pulses in two stages. Using the SU(2) dynamical symmetry of the Raman system Hamiltonian, it is shown that the system propagator can be described in terms of Cayley-Klein parameters. By appropriately adjusting the parameters, broadband and robust population transfer between the two ground states in the Raman pattern is achieved. Numerical results demonstrate that the behavior of the three-state system is similar to that of the two-state system, although the robustness range in the Raman model is slightly smaller.

***Keywords**: Optimal population transfer, Raman coupling pattern, inverse Rosen-Zener model, Cayley-Klein parameters.*

PACS No.32

مقدمه

در اندرکنش سامانه‌های کوانتومی با میدانهای همدوس، الگوی جفت شدگی رامان یکی از الگوهای جفت شدگی جذاب می‌باشد. این الگو دارای دو تراز زمینه و یک تراز برانگیخته است و هدف از طراحی پالسها در این الگوها، انتقال جمعیت از یکی از ترازهای زمینه که حالت اولیه سامانه می‌باشد، به تراز زمینه دوم است. تا کنون تکنیکهای مختلفی برای انتقال جمعیت در این سامانه پیشنهاد شده است که مهمترین آن تکنیک گذار بی دررو تحریکی رامان[1]

[1] . stimulated Raman adiabatic passage (STIRAP).

[۱] می‌باشد که برای به کارگیری این تکنیک لازم است که سامانه در حالت تشدید کامل یا تشدید دو فوتونی با واکوکی ثابت باشد. در مرجع [۲] یک طرحواره برای انتقال بهینه جمعیت در سامانه‌های کوانتومی دو ترازی با استفاده از مدل رزن–زنر معکوس[۲] پیشنهاد شده است. در مدل رزن–زنر استاندارد [۳] بسامد رابی به صورت سکانت–هیپربولیک در نظر گرفته شده و واکوکی ثابت فرض می‌شود ولی در حالت معکوس آن بسامد رابی ثابت و واکوکی به صورت پالس سکانت–هیپربولیک در نظر گرفته می‌شود. در روش پیشنهادی در مرجع [۲] برای انتقال کامل جمعیت، فرکانس رابی از ابتدا تا انتهای تحول زمانی ثابت می‌ماند و پالس واکوکی در دو مرحله اعمال می‌شود و یک پروفایل تحریکی پهن باند را ایجاد کند.

در این مقاله نشان می‌دهیم که روش پیشنهادی در مرجع [۲] می‌تواند برای انتقال کامل جمعیت بین ترازهای زمینه در سامانه سه ترازی رامان به کار گرفته شود. برای این کار بسامدهای رابی و واکوکیها را طوری در نظر می‌گیریم که هامیلتونی سامانه دارای تقارن دینامیکی SU(2) باشد و بتوان انتشارگر سامانه را با استفاده از پارامترهای کیلی–کلاین توصیف کرد. در ادامه پارامترهای کیلی–کلاین را طوری تنظیم می‌کنیم که یک انتقال جمعیت با پروفایل پهن باند (بدون حساسیت به تغییرات بسامدهای رابی) را ایجاد کند. در این مقاله مدل رزن–زنر معکوس ابتدا برای سامانه دو ترازی شرح داده خواهد شد و در ادامه برای مدل رامان به کار گرفته می‌شود.

به کارگیری مدل رزن–زنر معکوس در سامانه دو ترازی

هامیلتونی اندرکنش یک سامانه کوانتومی دو ترازی با میدان همدوس در تقریب موج چرخان به صورت زیر است:

$$H^{(2)}(t)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-\Delta(t) & \Omega(t)\\ \Omega(t) & \Delta(t)\end{pmatrix}, \qquad (۱)$$

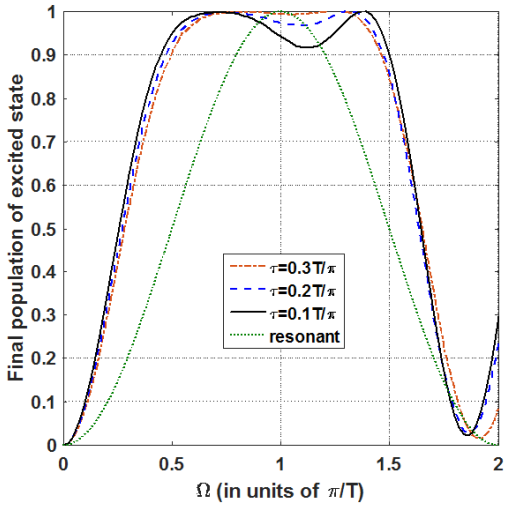
که $\Omega(t)$ بسامد رابی است که در اینجا ثابت در نظر گرفته می‌شود و $\Delta(t)$ واکوکی وابسته به زمان است. در این مدل فرض می‌کنیم که بسامد رابی به صورت یک پالس مستطیلی با عرض Ω و طول زمانی $3T$ باشد و پالس واکوکی وابسته به زمان در دو مرحله به کار گرفته شود که وابستگی زمانی آن در مرحله اول به صورت زیر باشد:

$$\Delta(t)=\Delta_0\,\mathrm{sech}\left(\frac{t-T}{\tau}\right), \qquad (۲)$$

همچنین وابستگی زمانی پالس واکوکی در مرحله دوم را به صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$\Delta(t)=-\Delta_0\,\mathrm{sech}\left(\frac{t-2T}{\tau}\right), \qquad (۳)$$

که در معادله بالا Δ_0 و τ نشان دهنده مقادیر بیشینه و پهنای پالس واکوکی بوده و T و $2T$ موقعیت مرکزی پالسهای واکوکی را در مرحله اول و دوم نشان می‌دهد. برای ایجاد پروفایل برانگیختگی پهن باند، پارامتر $\delta=\Delta_0\tau$ را تعریف می‌کنیم و مقدار آن را برابر با $\delta=2/3$ در نظر می‌گیریم و فرض می‌کنیم که $\tau<<T$ باشد [۲].



شکل ۱: جمعیت نهایی تراز برانگیخته نسبت به تغییرات Ω که برای مقادیر مختلف τ برای مدل رزن–زنر معکوس رسم شده است. منحنی نقطه چین مربوط به حالت تشدید است. مقادیر عددی در متن داده شده و $T=1$ در نظر گرفته شده است.

برای مطالعه عددی، جمعیت نهایی تراز برانگیخته نسبت به تغییرات Ω و برای مقادیر مختلف پهنای پالس واکوکی در شکل ۱ رسم شده است. برای انجام مقایسه، یک بار هم یک پالس مستطیلی با طول T و عرض Ω در حالت تشدیدی $\Delta(t)=0$ در

[2] . inverse Rosen-Zener model (iRZ).

نظر گرفته شده و جمعیت نهایی تراز برانگیخته نسبت به تغییرات Ω نیز رسم شده است (منحنی نقطه چین). مشاهد می‌شود که برای حالت تشدیدی فقط برای $\Omega=\pi$ که نشان دهنده مساحت پالس π است، جمعیت به صورت کامل منتقل می‌شود ولی برای مدل رزن–زنر معکوس در یک بازه وسیعی از مقادیر Ω جمعیت به تراز برانگیخته منتقل می‌شود و هر چه مقدار τ کوچکتر می‌شود، سامانه مقاومت بیشتری نسبت به تغییرات Ω از خود نشان می‌دهد.

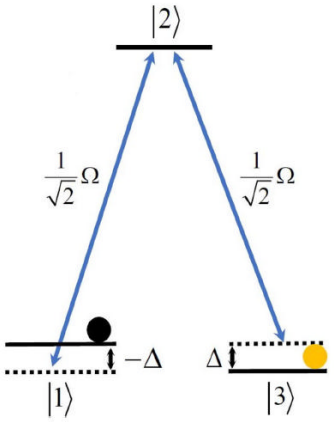
نکته مهمی که باید در اینجا به آن اشاره کنیم این است که انتشارگر یک سامانه دو ترازی بر حسب پارامترهای کیلی–کلاین a و b به صورت زیر است:

$$U^{(2)}=\begin{pmatrix} a & -b \\ b^{*} & a^{*} \end{pmatrix}, \qquad (٤)$$

که $|a|^2+|b|^2=1$. بنابراین چه در حالت تشدیدی و چه در حالت رزن–زنر معکوس، پارامترهای مربوط به بسامد رابی و واکوکی که منجر به انتقال کامل جمعیت می‌شوند، باعث می‌شوند که مقادیر پارامترهای کیلی–کلاین در انتهای تحول زمانی به صورت $a=0$ و $|b|=1$ باشد.

به کارگیری مدل رزن–زنر معکوس در مدل رامان

الگوی جفت شدگی رامان با دو تراز زمینه و یک تراز برانگیخته را در نظر می‌گیریم و فرض می‌کنیم که بسامدهای رابی و واکوکیها طوری باشند که هامیلتونی سامانه دارای تقارن دینامیکی SU(2) باشد. الگوی جفت شدگی این سامانه در شکل ۲ نمایش داده شده است.



شکل ۲– الگوی جفت شدگی مدل رامان با تقارن دینامیکی SU(2). دایره مشکی حالت اولیه و دایره زرد رنگ حالت هدف را نمایش می‌دهد.

هامیلتونی این سامانه در فضای $S=\{|1\rangle,|2\rangle,|3\rangle\}$ به صورت زیر می‌باشد:

$$H^{(3)}(t)=\begin{pmatrix} -\Delta(t) & \frac{\Omega(t)}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\Omega(t)}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\Omega(t)}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\Omega(t)}{\sqrt{2}} & \Delta(t) \end{pmatrix}, \qquad (٥)$$

با توجه به اینکه هامیلتونی (٥) دارای تقارن دینامیکی SU(2) می‌باشد، بنابراین انتشارگر آن بر حسب پارامترهای کیلی–کلاین به صورت زیر خواهد بود [٤و٥]:

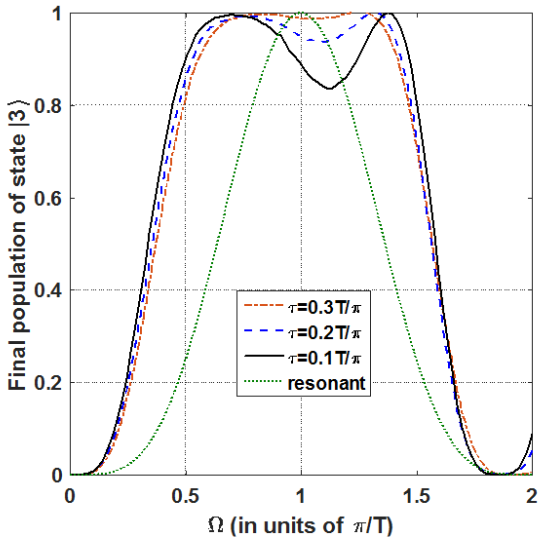
$$U^{(3)}=\begin{pmatrix} a^{2} & \sqrt{2}ab & b^{2} \\ -\sqrt{2}ab^{*} & |a|^{2}-|b|^{2} & \sqrt{2}a^{*}b \\ -b^{*2} & \sqrt{2}a^{*}b^{*} & a^{*2} \end{pmatrix}. \qquad (٦)$$

با در نظر گرفتن انتشارگر (٦)، اگر در انتهای تحول زمانی $a=0$ و $|b|=1$ باشد، جمعیت به صورت کامل از تراز $|1\rangle$ به تراز $|3\rangle$ در مدل رامان منتقل خواهد شد. بنابراین انتظار داریم پارامترهایی از بسامد رابی و واکوکی که منجر به انتقال کامل جمعیت در سامانه دو ترازی می‌شدند، بتوانند جمعیت را بین دو تراز زمینه در مدل رامان جابه‌جا کنند. بنابراین مطالعات عددی را برای هامیلتونی (٥) و با استفاده از پالسها و پارامترهایی که در بخش قبل انجام شد، انجام می‌دهیم.

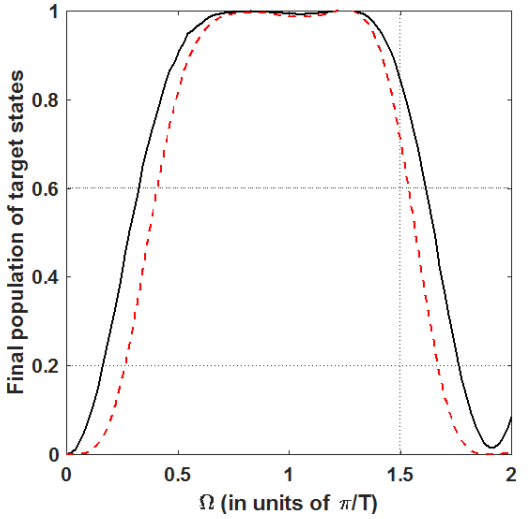
برای مطالعه عددی، جمعیت نهایی تراز $|3\rangle$ نسبت به تغییرات Ω و برای مقادیر مختلف پهنای پالس واکوکی τ در شکل ۳ رسم شده است و دوباره برای مقایسه بهتر حالت تشدیدی (منحنی نقطه چین) با پالس مستطیلی نیز در این شکل گنجانده شده است. مشاهده می‌شود که رفتار منحنیها همانند سامانه دو تراز می‌باشد و بنابراین مدل رزن–زنر معکوس می‌تواند برای انتقال بهینه جمعیت بین ترازهای زمینه در مدل رامان به کار گرفته شود.

هر چند که منحنیهای موجود در شکلهای ۱ و ۳ در مدل رزن–زنر معکوس رفتار یکسانی را از خود نشان می‌دهند ولی به نظر می‌رسد که مقاومت آنها نسبت به تغییرات Ω کمی با یکدیگر متفاوت است. برای بررسی این مساله، جمعیت نهایی تراز

برانگیخته در سامانه دو ترازی و تراز $|3\rangle$ در مدل رامان نسبت به تغییرات Ω برای $\tau = 0.1T/\pi$ در شکل ٤ رسم شده است. مشاهده می‌شود که در مدل رامان بازه مقاومت برای انتقال کامل جمعیت نسبت به تغییرات بسامد رابی اندکی کمتر از سامانه دو ترازی است.



شکل ۳: جمعیت نهایی تراز $|3\rangle$ نسبت به تغییرات Ω برای الگوی جفت شدگی رامان که برای مقادیر مختلف τ در مدل رزن–زنر معکوس رسم شده است. منحنی نقطه چین مربوط به حالت تشدید است.



شکل ٤: جمعیت نهایی تراز برانگیخته در سامانه دو ترازی (منحنی خط کامل) و جمعیت نهایی تراز $|3\rangle$ در الگوی رامان (منحنی خط چین) نسبت به تغییرات Ω در مدل رزن–زنر معکوس.

نتیجه گیری

در این مقاله، مدل رزن–زنر معکوس که پیشتر برای سیستم‌های دوترازی معرفی شده بود، با موفقیت به الگوی جفت‌شدگی رامان در سیستم‌های سه‌ترازی تعمیم داده شد. نشان داده شد که با در نظر گرفتن فرکانس رابی ثابت (پالس مستطیلی) و اعمال واکوکی به صورت دو پالس سکانت–هیپربولیک مجزا در دو مرحله زمانی، می‌توان جمعیت را به صورت پهن‌باند و مقاوم از تراز زمینه اول به تراز زمینه دوم در الگوی رامان منتقل کرد.

نتایج عددی نشان داد که رفتار سیستم سه‌ترازی رامان، مشابه سیستم دوترازی است و در هر دو سیستم، کاهش پهنای پالس واکوکی (τ) باعث افزایش مقاومت سیستم نسبت به تغییرات فرکانس رابی می‌شود. با این حال، مشاهده گردید که بازه مقاومت در مدل رامان اندکی کوچک‌تر از مدل دوترازی است.

مرجع‌ها

[۱] N. V. Vitanov, A. A. Rangelov, B. W. Shore, and K. Bergmann; *"Stimulated Raman adiabatic passage in physics, chemistry, and beyond"*; Reviews of Modern Physics **89**, No. 1 (2017) 015006.

[۲] B. T. Torosov and N. V. Vitanov; *"Robust high-fidelity coherent control of two-state systems by detuning pulses"*; Physical Review A **99**, No. 1 (2019) 013424.

[۳] N. Rosen and C. Zener; *"Double Stern-Gerlach experiment and related collision phenomena"*; Physical Review **40**, No. 4 (1932) 502.

[٤] E. Majorana; "Atomi orientati in campo magnetico variabile"; Il Nuovo Cimento 9, No. 2 (1932) 43-50.

[٥] M. Ebrahimpour, M. Saadati-Niari, and N. Shirkhanghah; "Efficient quantum state manipulation in multi-level systems using polychromatic pulse trains"; The European Physical Journal D **80**, No. 3 (2026) 19.

انتقال باریک‌باند جمعیت در زنجیره‌های کوانتومی با پالس‌های ترکیبی در حضور واکوکی

احسانی، نیّر ؛ سعادتی نیاری، مقصود

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل

چکیده

در این مقاله، عملکرد توالی‌های پالس ترکیبی باریک‌باند برای انتقال جمعیت در سامانه‌های زنجیره‌ای با تقارن دینامیک SU(2) در حضور واکوکی بررسی شده است. سامانه‌های دو، سه و پنج‌ترازی در نظر گرفته شده و جمعیت نهایی حالت‌های هدف بر حسب نرخ واکوکی برای توالی‌های با تعداد پالس مختلف، محاسبه شده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش تعداد پالس‌ها، پهنای ناحیه انتقال کاهش می‌یابد، هرچند کیفیت باریک‌باندی نسبت به حالت تشدیدی و برای خطای مساحت پالس پایین‌تر است. رفتار سامانه‌ها با افزایش ترازها یکسان نبوده و در سامانه سه‌ترازی تفکیک منحنی‌ها در کل بازه مشهود است، در حالی‌که در سامانه‌های دو و پنج‌ترازی انطباق در نرخ‌های کوچک دیده می‌شود.

واژه های کلیدی: *انتقال باریک‌باند، پالس‌های ترکیبی، سامانه‌های زنجیره‌ای، واکوکی.*

Narrowband population transfer in quantum chains using composite pulses in the presence of detuning

Ehsani, Nayyer; Saadati-Niari, Maghsoud

Department of Physics, Faculty of Science, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil

Abstract

In this paper, the performance of narrowband composite pulse sequences for population transfer in quantum chain systems with SU(2) dynamical symmetry in the presence of detuning is investigated. Two-level, three-level, and five-level systems are considered, and the final population of target states is calculated as a function of detuning for sequences with different numbers of pulses. The results show that increasing the number of pulses reduces the width of the transfer region, although the quality of narrowband behavior is inferior compared to the resonant case and for pulse area error. The behavior of the systems is not uniform with increasing number of levels; in the three-level system, clear separation of the curves is observed over the entire range, whereas in the two-level and five-level systems, overlap is seen at small detunings.

***Keywords**: Narrowband transfer, composite pulses, quantum chains, detuning*

PACS No. 32

مقدمه

در میان تکنیکهای مختلف برای کنترل همدوس سامانه‌های کوانتومی، توالی پالس ترکیبی به عنوان رویکردی کارآمد برای کاهش حساسیت بازده انتقال جمعیت نسبت به خطاهای پارامترهای لیزری، همچون مساحت پالس شناخته می‌شود[۲و۱]. در این روش، به جای اعمال یک پالس منفرد، چندین پالس پیاپی با فازهای متفاوت (و گاهی مساحت‌های متفاوت) به کار گرفته می‌شوند. با افزایش تعداد مراحل، می‌توان بازده انتقال جمعیت را در برابر انحراف مساحت پالس، پهن‌باند (کاهش حساسیت) یا باریک‌باند (افزایش حساسیت) ساخت.

در مرجع [۱] نشان داده شده است که با استفاده توالی از پالسهای ترکیبی وابسته به زمان با مساحت پالس یکسان و فازهای متفاوت می‌توان جمعیت را از تراز زمینه به تراز برانگیخته در سامانه کوانتومی دو ترازی منتقل کرد، طوریکه بسته به محاسبه فازها در هر مرحله، همراه با افزایش تعداد مراحل حساسیت بازده انتقال جمعیت نسبت به انحراف مساحت پالس، کاهش (پهن‌باند) یا افزایش (باریک‌باند) می‌یابد. روش به کار گرفته شده در مرجع [۱] برای انتقال کامل جمعیت در سامانه‌های زنجیره‌ای کوانتومی با تقارن دینامیکی SU(2) تعمیم داده شده است [۲]. همچنین اخیرا از توالی پالسهای ترکیبی برای ایجاد برهم نهی کوانتومی در سامانه‌های زنجیره‌ای موازی استفاده شده است [۳] که در آن از توالی پالسهای ترکیبی متقارن [۴] با مساحت پالس متفاوت در هر مرحله استفاده شده است.

در طرحواره پیشنهادی در مرجع [۲]، پروفایل باریک‌باند در سامانه‌های زنجیره‌ای نسبت به انحراف مساحت ایجاد شده است و سامانه در حالت تشدید کامل در نظر گرفته شده است. در این مقاله، با در نظر گرفتن سامانه‌های زنجیره‌ای در رژیم غیرتشدیدی، ایجاد پروفایل باریک‌باند را نسبت به نرخ واکوکی مورد بررسی قرار می‌دهیم. بدین منظور، سامانه‌های دوترازی، سه‌ترازی و پنج‌ترازی در نظر گرفته شده و جمعیت نهایی حالت‌های هدف بر حسب نرخ واکوکی و برای تعداد توالی‌های مختلف پالس‌های ترکیبی رسم می‌گردد. هدف، بررسی رفتار این سامانه‌ها با افزایش تعداد پالس‌ها و پاسخ به این پرسش است که آیا در حضور واکوکی نیز رفتار باریک‌باندی حفظ می‌شود یا خیر.

سامانه‌های زنجیره‌ای با تقارن دینامیکی SU(2)

الگوهای جفت شدگی زنجیره‌ای سامانه‌هایی هستند که در آن جفت شدگی بین حالتها به صورت $|1\rangle\leftrightarrow|2\rangle\leftrightarrow\cdots|N-1\rangle\leftrightarrow|N\rangle$ می‌باشد که در آن N تعداد ترازها می‌باشد. برای الگوی جفت شدگی زنجیره‌ای N ترازی با تقارن دینامیکی SU(2) عناصر هامیلتونی $H(t)$ از روابط زیر به دست می‌آیند [۲]:

$$H_{kk}(t)=m\Delta, \qquad (۱)$$

$$H_{k,k+1}(t)=H^{*}_{k+1,k}(t)=\frac{\Omega(t)}{2}\sqrt{k(N-1)}, \qquad (۲)$$

$$H_{kl}(t)=0,\ \ (|k-l|\geq 2), \qquad (۳)$$

که $k=1,2,\cdots,N$ و $m=k-(N+1)/2$ می‌باشد. همچنین $\Omega(t)$ بسامد رابی وابسته به زمان، Δ نرخ واکوکی بسامد لیزر نسبت به بسامد گذار در یک سامانه دو ترازی می‌باشد. دینامیک سامانه از معادله وابسته به زمان شرودینگر به صورت زیر تبعیت می‌کند:

$$i\frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt}=H(t)|\Psi(t)\rangle, \qquad (٤)$$

که $|\Psi(t)\rangle$ یک ماتریس ستونی با تعداد عناصر N می‌باشد که این عناصر نشان دهنده دامنه احتمال حضور سامانه در حالتهای مختلف می‌باشد. با در نظر گرفتن روابط (۱) تا (۳)، هامیلتونی سامانه‌های زنجیری با تقارن دینامیکی SU(2) و برای $N=2,3,5$ که در این مطالعه به کار گرفته خواهد شد به صورت زیر به دست می‌آید:

$$H^{(2)}(t)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-\Delta & \Omega\\ \Omega^{*} & \Delta\end{pmatrix}. \qquad (٤)$$

$$H^{(3)}(t)=\begin{pmatrix}-\Delta & \frac{\Omega}{\sqrt{2}} & 0\\ \frac{\Omega^{*}}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\Omega}{\sqrt{2}}\\ 0 & \frac{\Omega^{*}}{\sqrt{2}} & 0\end{pmatrix}. \qquad (٥)$$

$$H^{(5)}(t)=\begin{pmatrix}-2\Delta & \Omega & 0 & 0 & 0\\ \Omega^{*} & -\Delta & \sqrt{\frac{3}{2}}\Omega & 0 & 0\\ 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}\Omega^{*} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}\Omega & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}\Omega^{*} & \Delta & \Omega\\ 0 & 0 & 0 & \Omega^{*} & 2\Delta\end{pmatrix}. \qquad (٦)$$

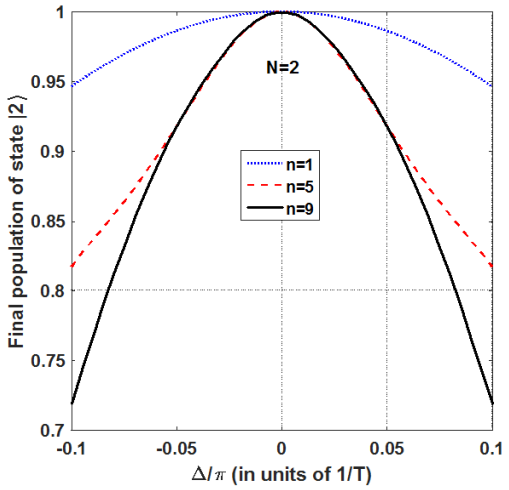
انتقال جمعیت با روش تنظیم مساحت پالس در حالت تشدید

سامانه‌های زنجیره‌ای با تقارن دینامیکی SU(2) دارای ویژگی مهمی هستند که امکان تعمیم مستقیم از سامانه دوترازی به سامانه‌ای با تعداد ترازهای دلخواه را فراهم می‌کند. به این صورت که اگر پارامترهای پالس در یک سامانه دوترازی به گونه‌ای تنظیم شوند که انتشارگر منجر به انتقال جمعیت از تراز اولیه به تراز نهایی گردد، همان پارامترها در سامانه‌های زنجیره‌ای با تعداد ترازهای بیشتر، انتقال جمعیت را از اولین تراز به آخرین تراز تضمین

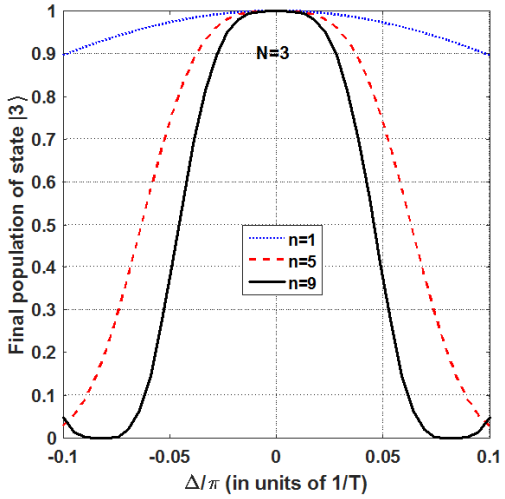
خواهند کرد. در حالت تشدیدی ($\Delta=0$) | در یک سامانه دو ترازی، اگر مساحت زمانی پالس $\Omega(t)$ در انتهای تحول زمانی برابر π باشد ($\int_{t_i}^{t_f}\Omega(t)dt=\pi$)، در این صورت جمعیت به صورت کامل از تراز $|1\rangle$ به تراز $|2\rangle$ منتقل خواهد شد. بنابراین اگر در حالت تشدیدی و برای سامانه‌های زنجیره‌ای با تعداد N دلخواه مساحت زمانی پالس $\Omega(t)$ در انتهای تحول زمانی برابر π باشد، جمعیت از تراز $|1\rangle$ به تراز $|N\rangle$ منتقل خواهد شد. برای مثال اگر وابستگی زمانی $\Omega(t)$ گاوسی و به صورت $\Omega(t)=\Omega_0\exp\left[(-t/T)^2\right]$ باشد، برای $\Omega_0=\sqrt{\pi}/T$ جمعیت در تمامی سامانه‌های زنجیره‌ایی تشدیدی با تقارن دینامیکی SU(2) از تراز $|1\rangle$ به تراز $|N\rangle$ منتقل خواهد شد.

بررسی عملکرد پالسهای باریک‌باند در حالت غیر تشدید

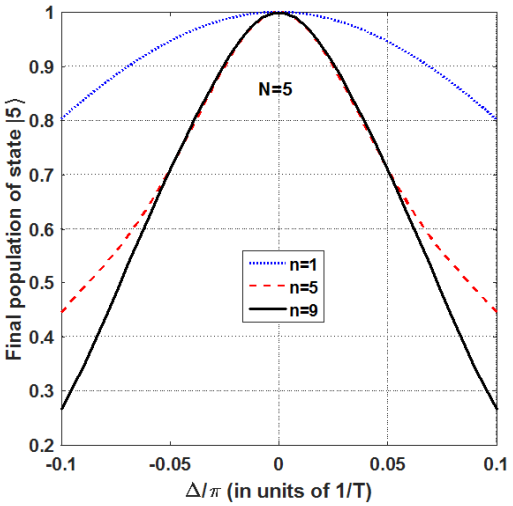
در مرجع [۲] نشان داده شده است که برای سامانه‌های زنجیره‌ای با تقارن دینامیکی SU(2) در حالت تشدیدی اگر به جای یک مرحله از یک توالی از پالسها استفاده کنیم که در آن مساحت زمانی پالس $\Omega(t)$ در انتهای هر مرحله برابر با π باشد، و در هر مرحله پالسها دارای فاز مشخصی باشند (توالی پالسهای ترکیبی)، در این صورت دوباره جمعیت از تراز $|1\rangle$ به تراز $|N\rangle$ منتقل خواهد شد. در حالتی که فازها برای انتقال جمیت باریک‌باند طراحی شده است، همراه با افزایش تعداد پالسها، حساسیت بازده انتقال جمیعت نسبت به انحراف مساحت پالس از مقدار π افزایش می‌یابد و در واقع پروفایل برانگیختی نازکتر می‌شود. در این بخش، فازهای محاسبه‌شده در مراجع [۲و۱] را برای توالی‌های باریک‌باند به‌کار می‌گیریم و با فرض عدم تشدید، به‌جای خطای مساحت، بازه‌ای برای واکوکی در نظر می‌گیریم. برای ارزیابی رفتار باریک‌باندی از معیاری کیفی استفاده می‌کنیم؛ بدین معنا که کاهش پهنای پروفایل تحریکی با افزایش تعداد پالس‌ها را به‌عنوان رفتار باریک‌باندی تلقی می‌کنیم. برای مطالعه عددی سامانه‌های زنجیره‌ای با $N=2,3,5$ را در نظر می‌گیریم. نمودار جمعیت نهایی حالتهای هدف نسبت به تغییرات نرخ واکوکی برای تک پالس بدون فاز با مساحت π ($n=1$) و تعداد $n=5,9$ پالس ترکیبی باریک‌باند در شکلهای ۱ تا ۳ نمایش داده شده است. مطالعه عددی با استفاده از نرم افزار متلب و با حل عددی معادله وابسته به زمان شرودینگر (٤) انجام شده است و از پالسهای گوسین با فرض $T=1$ استفاده شده است. نتایج عددی ارائه شده در شکل‌های ۱ تا ۳ نشان می‌دهند که توالی‌های پالس ترکیبی باریک‌باند، رفتار مشخصه خود را در حضور واکوکی نیز حفظ می‌کنند. به عبارت دیگر، با افزایش تعداد پالس‌ها، پهنای ناحیه انتقال جمعیت در فضای نرخ واکوکی کاهش می‌یابد که مؤید عملکرد باریک‌باندی پروتکل حتی در شرایط غیرتشدیدی است. با این حال، کیفیت باریک‌باندی مشاهده شده برای نرخ واکوکی در مقایسه با حالت تشدیدی و برای انحراف مساحت پالس (که در مرجع [۲] گزارش شده) به مراتب پایین‌تر است. منحنی‌های به دست آمده در اینجا پهنای بیشتری دارند که نشان‌دهنده حساسیت کمتر پروتکل به ناهماهنگی نسبت به خطای مساحت پالس می‌باشد. بررسی مقایسه‌ای سامانه‌های مختلف نشان می‌دهد که الگوی منظمی با افزایش تعداد ترازها مشاهده نمی‌شود. در سامانه‌های دوترازی (شکل ۱) و پنج‌ترازی (شکل ۳)، برای توالی‌های پنج و نه مرحله‌ای، منحنی‌های جمعیت در مقادیر کوچک نرخ واکوکی عملاً بر هم منطبق هستند و تنها در نرخ‌های واهلش بزرگ‌تر از یکدیگر جدا می‌شوند. در مقابل، برای سامانه سه‌ترازی (شکل ۲)، منحنی‌های مربوط به توالی‌های مختلف در تمام بازه نرخ واکوکی به طور محسوسی از یکدیگر تفکیک شده‌اند.



شکل ۱: وابستگی جمعیت نهایی تراز هدف به نرخ واکوکی (Δ/π) برای سامانه دوترازی. منحنی‌ها برای توالی‌های با تعداد پالس‌های n=1، n=5 و n=9 نشان داده شده‌اند. مساحت هر پالس برابر π در نظر گرفته شده و فازها مطابق با پروتکل باریک‌باند مرجع [۱] انتخاب شده‌اند.



شکل ۲: وابستگی جمعیت نهایی تراز هدف به نرخ واکوکی (Δ/π) برای سامانه سه‌ترازی. منحنی‌ها برای توالی‌های با تعداد پالس‌های n=1، n=5 و n=9 نشان داده شده‌اند. مساحت هر پالس برابر π در نظر گرفته شده و فازها مطابق با پروتکل باریک‌باند مرجع [۱] انتخاب شده‌اند.



شکل ۳: وابستگی جمعیت نهایی تراز هدف به نرخ واکوکی (Δ/π) برای سامانه پنج ترازی. منحنی‌ها برای توالی‌های با تعداد پالس‌های n=1، n=5 و n=9 نشان داده شده اند. مساحت هر پالس برابر π در نظر گرفته شده و فازها مطابق با پروتکل باریک‌باند مرجع [۱] انتخاب شده‌اند.

نتیجه گیری

در این مقاله، عملکرد توالی‌های پالس ترکیبی باریک‌باند در حضور واکوکی بررسی شد. نتایج نشان داد که این توالی‌ها رفتار باریک‌باندی خود را حتی در شرایط غیرتشدیدی حفظ می‌کنند، هرچند کیفیت آن نسبت به حالت تشدیدی (خطای مساحت پالس) پایین‌تر است. همچنین رفتار سامانه‌ها با افزایش تعداد ترازها از الگوی منظمی پیروی نمی‌کند. در سامانه‌های دو و پنج‌ترازی، منحنی‌های مربوط به توالی‌های پنج و نه مرحله‌ای در نرخ‌های واکوکی کوچک بر هم منطبق می‌شوند، در حالی‌که در سامانه سه‌ترازی این منحنی‌ها در کل بازه از هم جدا هستند.

لازم به ذکر است که یافته‌های این پژوهش مبتنی بر محاسبات عددی است؛ هرچند دلیل رفتار متمایز سامانه سه‌ترازی در مقایسه با سامانه‌های دو و پنج‌ترازی، می‌تواند به صورت نظری و با محاسبه تحلیلی انتشارگر کل سامانه پس از اعمال توالی پالس‌های ترکیبی، در کاری جداگانه مورد بررسی قرار گیرد.

اگرچه برای سادگی، سامانه‌های دو، سه و پنج‌ترازی بررسی شدند، انتظار می‌رود رفتار باریک‌باندی در حضور واکوکی برای ترازهای بیشتر با تقارن SU(2) نیز دیده شود؛ هرچند نظم آن نیاز به بررسی جداگانه دارد.

در این مطالعه از پالسها با وابستگی زمانی گاوسی استفاده شد، اما نتایج ارائه‌شده مستقل از شکل خاص پالس‌ها است و تنها شرط لازم، برقراری مساحت زمانی برابر با π برای هر پالس $\Omega(t)$ در هر مرحله می‌باشد.

مرجع‌ها

[۱] B. T. Torosov and N. V. Vitanov; "*Smooth composite pulses for high-fidelity quantum information processing*"; Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics, Vol. **83**, No. 5, (2011) 053420.

[۲] G. T. Genov, B. T. Torosov, and N. V. Vitanov; "*Optimized control of multistate quantum systems by composite pulse sequences*"; Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics, Vol. **84**, No. 6, (2011) 063413.

[۳] M. Farhangi, M. Saadati-Niari, and H. Mohammadzadeh; "*Unified Morris-Shore platform for coherent control: Demonstrating pulse-area, composite-pulse, and adiabatic passage techniques in multiladder systems*"; Physical Review A, Vol. **113**, No. 3, (2026) 032625.

[٤] H. L. Gevorgyan and N. V. Vitanov; "*Deterministic generation of arbitrary ultrasmall excitation of quantum systems by composite pulse sequences*"; Physical Review A, Vol. **108**, (2023) 032614.

روشی اپتیکی ساده و دقیق برای اندازه‌گیری شعاع کمر پرتو گاوسی بر اساس حداقل توان عبوری در کانون

خلیلی ماهانی، نیلوفر[۱]؛ خانزاده، محمد[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه ولی‌عصر رفسنجان، رفسنجان، کرمان

[۲] عضو هیئت‌علمی گروه فیزیک، دانشگاه ولی‌عصر رفسنجان، رفسنجان، کرمان

چکیده

در این پژوهش، روشی ساده، سریع و کم‌هزینه برای تعیین شعاع کمر پرتو لیزر گاوسی ارائه می‌شود که بر پایه عبور یک سیم باریک از ناحیه کانونی پرتو استوار است. در این روش، با قرار دادن سیم در نقطه کانونی عدسی، جایی که چگالی توان بیشینه و قطر پرتو کمینه است، حداقل توان عبوری ثبت می‌شود. سپس با استفاده از روابط تحلیلی مبتنی بر توزیع شدت گاوسی، شعاع کمر پرتو به‌طور مستقیم استخراج می‌گردد. چیدمان آزمایشگاهی شامل یک لیزر سبز با طول موج ۵۳۲ نانومتر، سیمی با قطر ۷۰ میکرومتر، آشکارساز نوری و مجموعه‌ای از عدسی‌های همگرا و موازی‌ساز طراحی و پیاده‌سازی شد. نتایج تجربی حاصل از این روش با نتایج به‌دست‌آمده از روش مرجع لبه‌چاقو و مقادیر نظری مقایسه گردید که اختلافی در حدود ۱,۲۵درصد را نشان داد. این تطابق قابل توجه، دقت و کارایی بالای روش پیشنهادی را تأیید می‌کند و بیانگر آن است که این روش می‌تواند به‌عنوان ابزاری قابل اعتماد برای اندازه‌گیری سریع و دقیق شعاع کمر پرتو در آزمایشگاه‌های آموزشی و پژوهشی مورد استفاده قرار گیرد.

واژه های کلیدی: شعاع کمر پرتو، سیم، نقطه کانونی، شدت گاوسی، پرتو گاوسی

A Simple and Accurate Optical Method for Measuring the Waist Radius of a Gaussian Laser Beam Based on Minimum Transmitted Power at the Focus

Khalili Mahani, Niloufar[1]; Khanzadeh, Mohammad[2]

[1] *Department of Physics, Vali-e-Asr University of Rafsanjan, Rafsanjan, Kerman, Iran*

[2] *Faculty Member, Department of Physics, Valiasr University of Rafsanjan, Rafsanjan, Kerman, Iran*

Abstract

In this study, a simple, fast, and low-cost method is proposed for determining the waist radius of a Gaussian laser beam, based on passing a thin wire through the focal region. By placing the wire at the focal point of a lens, where the power density is maximum and the beam diameter is minimum, the minimum transmitted power is recorded. The beam waist radius is then directly extracted using analytical relations derived from the Gaussian intensity distribution.The experimental setup includes a 532 nm green laser, a 70 μm diameter wire, a photodetector, and a set of lenses. The results were compared with the standard knife-edge method and theoretical predictions, showing a discrepancy of about 1.25%.This close agreement confirms the accuracy and efficiency of the proposed method, demonstrating its potential as a reliable tool for rapid and precise beam waist measurements in educational and research laboratories.

***Keywords**: Beam waist radius, wire, focal point, Gaussian intensity, Gaussian beam*
PACS No. 42.60.Jf

۱- مقدمه

در حوزه علوم کاربردی و مهندسی، لیزرها نقش مهمی در توسعه فناوری‌های نوین داشته و در زمینه‌هایی مانند فوتونیک و برهم‌کنش نور و ماده کاربرد گسترده‌ای دارند. شناخت پارامترهای اساسی پرتو لیزر، از جمله شعاع کمر پرتو، واگرایی و طول رایلی، برای طراحی و بهینه‌سازی سیستم‌های نوری ضروری است. در این میان، پرتو گاوسی به دلیل همدوسی بالا، واگرایی کم و توزیع شدت مشخص، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. روش‌های مختلفی برای اندازه‌گیری شعاع کمر پرتو ارائه شده‌اند، از جمله روش لبه‌چاقو، آشکارسازهایCCD ، فیبر نوری، خطوط رونچی و روزنه دایره‌ای [۱_۷]. با وجود دقت مناسب، این روش‌ها معمولاً با محدودیت‌هایی مانند نیاز به تجهیزات دقیق، حساسیت به نویز و زمان‌بر بودن اندازه‌گیری مواجه هستند [۸_۱۱]. در برخی مطالعات، از عبور یک سیم از میان ناحیه پرتو موازی‌شده برای تعیین شعاع پرتو استفاده شده است؛ با این حال، به دلیل یکنواختی نسبی شدت در این ناحیه، آشکارسازی تغییرات شدت با دقت کافی امکان‌پذیر نیست و اثرات پراش ناشی از سیم نیز موجب اعوجاج در الگوی شدت و افزایش نویز می‌شود، به‌طوری‌که استخراج دقیق پروفیل پرتو با چالش همراه است [۱۲].

در این پژوهش، روشی ساده، سریع و کم‌هزینه برای تعیین شعاع کمر پرتو گاوسی ارائه می‌شود که مبتنی بر عبور یک سیم از نقطه کانونی عدسی است. در این ناحیه، شدت پرتو بیشینه و قطر آن کمینه بوده و اثرات پراش کاهش می‌یابد. با اندازه‌گیری توان عبوری و استفاده از روابط تحلیلی، شعاع کمر پرتو به‌طور مستقیم استخراج می‌شود. نتایج این روش با مدل نظری و روش لبه‌چاقو مقایسه شده و تطابق خوبی را نشان می‌دهد که بیانگر دقت بالای روش پیشنهادی است.

۲- روش اندازه‌گیری شعاع کمر پرتو لیزر گاوسی

۲-۱ بررسی تحلیلی شعاع کمر پرتو

تعیین شعاع مؤثر پرتو و توزیع شدت آن، از مهم‌ترین مسائل در تحلیل پرتوهای لیزری است. یکی از روش‌های ساده و کاربردی، استفاده از یک مانع باریک مانند سیم با قطر D است که از ناحیه کانونی پرتو با توزیع شدت $I(x,y)$ عبور داده می‌شود. در این حالت، با قرارگیری سیم در مرکز پرتو، کمینه توان عبوری در آشکارساز ثبت می‌شود، زیرا بخش مرکزی پرتو مسدود می‌گردد. تحلیل تغییرات توان عبوری بر حسب موقعیت سیم، امکان استخراج اطلاعاتی درباره شعاع مؤثر پرتو را فراهم می‌کند.

توان عبوری و توان کل پرتو به‌ترتیب از روابط زیر به‌دست می‌آیند:

$$P_{trancemitted} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\frac{D}{2}}^{+\frac{D}{2}} I(x'.y')\,dx'\,dy' \quad (1)$$

$$P_{total} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} I(x'.y')\,dx'\,dy' \quad (2)$$

بنابراین، کمینه نسبت توان عبوری در کانون برابر است با:

$$T_{min} = 1 - \frac{P_{trancemitted}}{P_{total}} \quad (3)$$

توزیع شدت پرتو گاوسی در صفحه عرضی به‌صورت زیر بیان می‌شود:

$$I(x.y) = I_0 e^{-2\left(\frac{x^2}{w_X^2}+\frac{y^2}{w_Y^2}\right)} \quad (4)$$

که در آن I_0 شدت اولیه است، w_x و w_y به‌ترتیب شعاع‌های موثر پرتو (شعاع در نقطه‌ی $(1/e^2$) در راستاهای x و y را تعیین می‌کنند. توجه شود که $2w$ در این‌جا نشان‌دهنده‌ی قطر پرتو در سطح $1/e^2$ است. در نتیجه، رابطه ۳ به‌صورت زیر در می‌آید:

$$T_{min} = 1 - \frac{1}{w_G}\sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\frac{s}{2}}^{\frac{s}{2}} e^{-2\left(\frac{s}{w(z)}\right)} ds \quad (5)$$

و تابع خطای گاوسی به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2}\, dt \quad (6)$$

با توجه به تعریف تابع خطای گاوسی، میزان توان عبوری با حرکت سیم، برابر می‌شود با :

$$P_{trancemitted} = erf\left(\frac{D}{\sqrt{2}w_0}\right) w^2 \frac{\pi}{2} I_0 \quad (7)$$

در نتیجه، شعاع کمر پرتو در کانون از رابطه زیر به‌دست می‌آید:

$$w_0 = \frac{D}{\sqrt{2}\, erf^{-1}(1 - T_{min})} \quad (8)$$

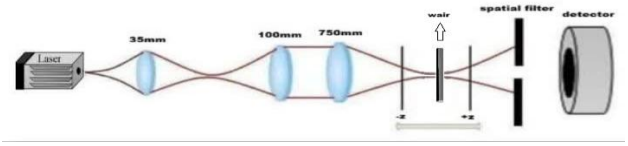


شکل۱: پراش حاصل از عبور سیم

۲-۲ چیدمان آزمایشگاهی برای اندازه‌گیری شعاع کمر پرتو لیزر

در این آزمایش، از لیزر سبز با طول موج ۵۳۲ نانومتر و توان ۱۵۰ میلی‌وات، به‌همراه سیمی با قطر ۷۰ میکرومتر، آشکارساز نوری و عدسی‌هایی با فواصل کانونی مختلف برای اندازه‌گیری شدت پرتو استفاده شد. در این راستا، از یک عدسی همگرا با فاصله کانونی ۳۵ میلی‌متر برای متمرکزسازی پرتو و ایجاد ناحیه کانونی، و همچنین یک عدسی همگرا دیگر با فاصله کانونی ۱۰۰میلی‌متر برای تنظیم دقیق‌تر اندازه لکه کانونی استفاده گردید. علاوه بر این، به‌منظور موازی‌سازی اولیه پرتو و کاهش واگرایی، از یک عدسی موازی‌ساز با فاصله کانونی حدود ۷۵۰میلی‌متر بهره گرفته شد.

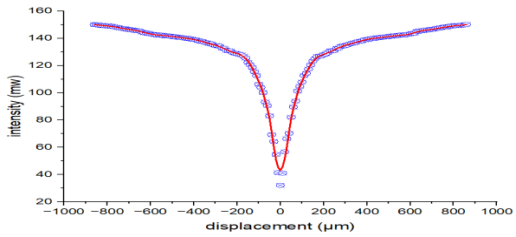
به‌دلیل غیر استاندارد بودن بسیاری از لیزرهای آزمایشگاهی، تعیین قطر پرتو از طریق روش موازی‌سازی انجام گرفت. به‌منظور کاهش خطا، آشکارساز در ناحیه خطی عملکرد خود نگه داشته شد و برای جلوگیری از اشباع، از فیلتر فضایی استفاده گردید. همچنین حرکت سیم با سرعت کم و به‌صورت یکنواخت انجام شد تا تغییرات توان به‌طور کامل توسط آشکارساز ثبت شده و سیگنال در محدوده پاسخ آن باقی بماند. نتایج نشان می‌دهد که مقدار اندازه‌گیری تنها به نقطه کمینه عبور وابسته بوده و به مسیر حرکت یا زاویه سیم وابستگی ندارد. در نهایت، انتخاب قطر سیم در بازه مناسب نقش مهمی در دقت اندازه‌گیری دارد.



شکل۲: شماتیکی ازچیدمان اپتیکی

۳- بحث و نتایج

بر اساس روش ارائه‌شده، کمینه توان عبوری از سیم در فواصل گوناگون نسبت به کمر پرتو اندازه‌گیری شد. این اندازه‌گیری‌ها در ناحیه‌ای متقارن پیرامون نقطه‌ی کانونی انجام گرفت و نتایج به‌صورت نمودار در شکل (۳) ارائه شده‌اند. همان‌گونه که دیده می‌شود، مقدار توان عبوری وقتی کمینه است که سیم دقیقاً در محل کمر باریکه قرار دارد و با دور شدن از این موقعیت توان عبوری به‌صورت متقارن افزایش می‌یابد. این روند به‌خوبی با توزیع نظری شدت پرتو گاوسی (رابطه‌ی ٤) مطابقت دارد و نشان می‌دهد که شدت مرکزی پرتو به پهنای کمر آن وابسته است. شکل (۳) تغییرات شدت یک پرتو گاوسی را نشان می‌دهد، که یک سیم با قطر ۷۰ میکرومتر از میان کانون آن عبور کرده و شدت کمینه آن برابر با ۳۲/۰٦ میلی‌وات شد و در نتیجه شعاع کمر پرتو گاوسی برابر با ۵۵/۳۷ میکرومتر شد.



شکل۳: نمودار کمینه توان نور عبوری از سیم درکمر پرتو

با توجه به نمودار شکل (۳) که تغییرات شدت بر حسب فاصله z نشان داده شده است، با استفاده از رابطه (۸) می‌توان شعاع پرتو را محاسبه کرد. در فواصل دورتر از کانون، برای محاسبه‌ی شعاع پرتو از رابطه (۱۰) استفاده می‌شود که رفتار پرتو را در ناحیه‌ی واگرای پس از کانون را توصیف می‌کند[۱۳_۱٤].

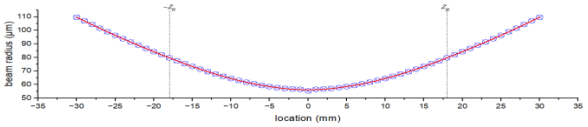
$$w^2(z) = w_0^2\left[1+\left(\frac{z}{z_0}\right)^2\right] (9)$$

برای بررسی و تأیید این روش، مقادیر تجربی به‌دست‌آمده با روش سیم در نقطه‌ی کانون با مقادیر تجربی حاصل از روش مرسوم لبه تیزچاقو مقایسه گردید و نتایج در جدول (۱) آورده شد. اختلاف میان روش سیم و روش لبه تیزچاقو تنها حدود ۱,۲۵ درصد به‌دست آمد؛ این میزان اختلاف ناچیز، نشان‌دهنده‌ی تطابق بسیار خوب داده‌های تجربی روش سیم با روش لبه تیزچاقو و بیانگر دقت بالای روش اندازه‌گیری است. علاوه بر این، در مقایسه با روش لبه‌چاقو که نیازمند برداشت چندین داده و پردازش آن‌ها برای بازسازی پروفیل پرتو است، روش حاضر با اتکا به اندازه‌گیری تنها یک کمینه توان در ناحیه کانونی، از سرعت بالاتری برخوردار است. همچنین در مقایسه با روش‌های مبتنی بر دوربین‌های CCD یا آشکارسازهای آرایه‌ای، که مستلزم تجهیزات گران‌قیمت و سامانه‌های پردازش تصویر هستند، این روش به دلیل استفاده از تجهیزات ساده‌تری مانند سیم و آشکارساز نوری، از نظر هزینه نیز به‌مراتب مقرون‌به‌صرفه‌تر است.

جدول ۱ : مقایسه شعاع کمرباریکه گاوسی از روش سیم با روش لبه چاقو و فرمول نظری

نقاط اندازه گیری شده (mm)	شعاع باریکه با روش سیم (μm)	شعاع باریکه با روش لبه‌چاقو (μm)	شعاع باریکه با فرمول نظری (μm)
0	55/37	56/06	53/82
1	56/46	56/14	53/91
2	56/73	56/39	54/19
3	57/15	56/79	54/64
4	57/73	57/36	55/27
5	58/52	58/07	56/07
6	59/4	58/92	57/04
7	60/55	59/91	58/15
8	61/67	61/03	59/42
9	63/03	62/27	60/82
10	64/47	63/63	62/35
11	66/11	65/1	63/99
12	67/77	66/68	65/75
13	69/49	68/36	67/61
14	71/4	70/13	69/56
15	73/39	71/99	71/59

با توجه به داده های جدول۱، در شکل٤، نمودار شعاع پرتو به عنوان تابعی از فاصله رسم شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، شعاع پرتو در موقعیت کمر پرتو حداقل مقدار را دارد و با افزایش فاصله از آن نقطه، به‌صورت متقارن افزایش میابد.



شکل٤: نمودار تغییرات شعاع باریکه در فواصل مختلف متقارن حول کانون

٤- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، روشی ساده، سریع و کم‌هزینه برای تعیین شعاع کمر پرتو لیزر ارائه شد. به‌منظور اعتبارسنجی، نتایج حاصل از روش سیم با روش لبه چاقو و رابطه نظری پرتو گاوسی در بازه ۵۵ تا ۱۱۰ میکرومتر مقایسه گردید که نشان‌دهنده دقت بالای روش پیشنهادی بود. ویژگی اصلی این روش، امکان محاسبه مستقیم شعاع پرتو بدون نیاز به تجهیزات پیچیده است، به‌گونه‌ای که حتی کاربران مبتدی نیز قادر به استفاده از آن هستند. با توجه به سادگی، دقت مناسب و نیاز حداقلی به تجهیزات، این روش می‌تواند جایگزین مناسبی برای روش‌های متداول و پیچیده بوده و کاربرد گسترده‌ای در آزمایشگاه‌های آموزشی و پژوهشی داشته باشد.

٥- منابع

[۱] Y. Suzaki and A. Tachibana, "Measurement of the μm sized radius of Gaussian laser beam using the scanning knife-edge," *Appl. Opt.*, vol. 14, no. 11, pp. 2809–2810, 1975.
[۲] J. M. Khosrofian and B. A. Garetz, "Measurement of a Gaussian laser beam diameter through the direct inversion of knife-edge data," *Appl. Opt.*, vol. 22, pp. 3406–3410, 1983.
[۳] J. A. Ruff and A. E. Siegman, "Single-pulse laser beam quality measurements using a CCD camera system," *Applied Optics*, vol. 31, pp. 4907–4909, 1992
[۴] S. K. Tiwari, S. P. Ram, J. Jayabalan, and S. R. Mishra, "Measuring a narrow Bessel beam spot by scanning a charge-coupled device (CCD) pixel," *Measurement Science and Technology*, vol. 21, p. 025308, 2010
[۵] F.-W. Sheu and C.-H. Chang, "Measurement of the intensity profile of a Gaussian laser beam near its focus using an optical fiber," *American Journal of Physics*, vol. 75, no. 10, pp. 956–960, 2007, doi: 10.1119/1.2723797
[۶] M. A. Karim, "Measurement of Gaussian beam diameter using Ronchi rulings," *Electronics Letters*, vol. 21, no. 10, pp. 427–428, May 1985
[۷] T. S. Khwaja and S. A. Reza, "Low-cost Gaussian beam profiling with circular irises and apertures," *Applied Optics*, vol. 58, no. 4, pp. 1048–1056, Feb. 2019, doi: 10.1364/AO.58.001048.
[۸] M. Bonnett Del Alamo, C. Soncco, R. Helaconde, J. Bazo, and A. M. Gago, "Laser spot measurement using cost-affordable devices," *AIP Advances*, vol. 11, no. 7, Art. no. 075016, 2021, doi: 10.1063/5.0046287
[۹] N. Singh, S. Krishnan, and S. K. Biswas, "Encapsulated bio-carbon soot film for measuring nano-size beam diameter of low power lasers," *Nano Select*, **vol. 5**, no. 2, pp. 1–8, 2024, doi: 10.1002/nano.202300083
[۱۰] P. B. Chapple, "Beam waist and M² measurement using a finite slit," *Optical Engineering*, vol. 33, no. 7, pp. 2461–2466, July 1994
[۱۱] ن. خلیلی‌ماهانی و م. خانزاده، "روشی ساده و سریع برای اندازه‌گیری ویژگی‌های لیزر با استفاده از شکاف قابل‌تنظیم"، *چهارمین همایش ملی پیشرفت‌های فناوری در فیزیک کاربردی*، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، ماهان، کرمان، ایران، ۱٤۰٤.
[۱۲] M. Mylonakis, S. Pandey, K. G. Mavrakis, G. Drougakis, G. Vasilakis, D. G. Papazoglou, and W. von Klitzing, "Simple precision measurements of optical beam sizes," *Applied Optics*, **vol. 26**, no. 24, pp. 31752–31760, Nov. 2018
[۱۳] Max Born and Emil Wolf, Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light, 7th (expanded) ed. Cambridge, U.K.: Cambridge Univ. Press, 1999
[۱۴] B. E. A. Saleh and M. C. Teich, *Fundamentals of Photonics*, 2nd ed., Hoboken, NJ: Wiley, 2007

رسم نمایه سه‌بعدی دقیق سطوح با حذف اثرات نامطلوب مدولاسیون فاز در بلورهای پیزو به کمک تحلیل مؤلفه‌های اساسی(PCA)

پروین ، پرویز[۱]؛ زیرک ، علیرضا[۲]؛ صالحی ، محمد[۱]

[۱] دانشکده فیزیک و مهندسی انرژی ، دانشگاه امیرکبیر ، تهران

[۲] پژوهشکده فوتونیک و فناوریهای کوانتومی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای ، تهران

چکیده

در این مقاله، عملکرد یک تداخل‌سنج جابجایی فاز در حضور خطاهای ناشی از غیرخطی بودن، هیسترزیس و عدم کالیبراسیون دقیق محرک پیزوالکتریک به‌صورت عددی مورد بررسی قرار گرفته است. به‌منظور کاهش اثر این خطاها ، یک روش مبتنی بر تحلیل مؤلفه‌های اساسی برای پردازش اینترفروگرام‌ها به کار گرفته شد. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که روش پیشنهادی، حتی در حضور نویز و غیرخطی‌های شدید، خطای RMS بازسازی را به کمتر از یک‌هزارم طول موج کاهش می‌دهد.

واژه های کلیدی: *تداخل سنجی جابجایی فاز، جابجاگر فاز پیزوالکتریک، خطای غیرخطی، تحلیل مولفه های اصلی، نمایه سنجی سه بعدی*

Accurate Three-Dimensional Surface Profiling with Removal of Undesirable Phase Modulation Effects in Piezoelectric Crystals Using Principal Component Analysis

Parvin, Parviz[1]; Zirak, Alireza[2]; Salehi, Mohammad[1]

[1] Faculty of Physics and Energy Engineering, Amirkabir University of Technology
[2] Photonic & Quantum Technologies Research School, Nuclear Science & Technology Research Institute, Tehran

Abstract

In this research, after implementing a phase-shifting interferometry setup, a Principal Component Analysis (PCA)-based surface reconstruction method was applied to overcome system vibration, calibration errors, and piezoelectric hysteresis. Simulation results show that this method reduces the RMS error of the reconstructed 3D profile to less than one-thousandth of a wavelength, even under severe nonlinear conditions.

***Keywords**: Phase-shifting interferometry, Piezoelectric phase shifter, Nonlinear error, Principal Component Analysis (PCA), Three-dimensional profiling*

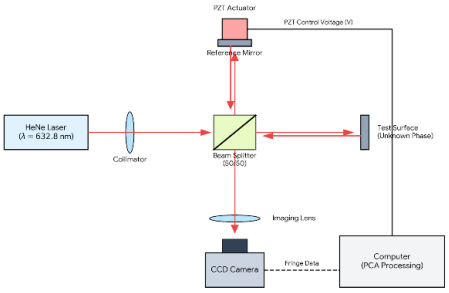
مقدمه

بمنظور افزایش دقت و حساسیت در اندازه‌گیری مشخصه‌های نوری اجسام از جمله صافی سطوح، ضریب شکست و ضخامت لایه‌ها، بکارگیری تداخل سنج جابجایی فاز یکی از قدرتمندترین راه‌کارها است [۱]. در این فناوری، بهره‌گیری از روش‌های عددی و پردازش سیگنال می‌تواند نقش تعیین‌کننده‌ای در کیفیت بازسازی فاز داشته و حساسیت اندازه‌گیری در مشخصه‌یابی سطوح اپتیکی و قطعات نیمه‌هادی را افزایش دهد [۲]. در سیستم‌های پیشرفته‌تر، فاز جبه نوری با گام‌های مشخص توسط بازوی پیزو و بوسیله یک درایور تغییر کرده و نوارهای تداخلی متعدد حاصله توسط الگوریتم‌های استاندارد بازسازی شده و مشخصه اپتیکی با کیفیت بهتر از روش‌های کلاسیک بازسازی می‌شوند [۳]؛ اما در عمل، جابجاگرهای پیزوالکتریک دارای ناهنجاری‌هایی نظیر هیسترزیس، خزش، غیر خطی بودن و عدم امکان کالیبراسیون دقیق محرک پیزو بدلیل چالش‌هایی از جمله لرزش‌های ناخواسته می‌باشند[۴][۵].

برای رفع این چالش، همگام با سیستم‌های سخت‌افزاری پرهزینه[۶]، روش‌های محاسباتی که به مقادیر دقیق جابجایی فاز وابسته نیستند

نیز توسعه یافته‌اند [۷]. در میان روش‌های محاسباتی مذکور، تحلیل مؤلفه‌های اساسی به عنوان موثرترین راه‌کار با سرعت بالای بازسازی و مقاوم برای دمدولاسیون فاز شناخته شده است [۸].

در این پژوهش، یک سیستم تداخل سنج فازی مطابق شکل (۱) مدل سازی شده است. سپس چارچوبی تحلیلی مبتنی بر تحلیل مولفه های اساسی پیشنهاد می‌شود که با تکیه بر تحلیل آماری اینترفروگرام‌ها، خطاهای غیرخطی پیزوالکتریک را بدون نیاز به کالیبراسیون سخت‌افزاری بشیوه موثری خنثی می‌کند.



شکل ۱- چیدمان تداخل سنج جابجایی فاز بوسیله محرک پیزوالکتریک

مبانی نظری

مدل شدت نور در یک تداخل‌سنج برای هر پیکسل (x,y) در فریم n-ام به صورت زیر بیان می‌شود :

$$I_{n(x,y)} = a(x,y) + b(x,y)\cos[\phi(x,y) + \delta_n] + \eta_{n(x,y)} \quad (1)$$

در این رابطه، $n = 1, 2, \ldots, N$ نمایانگر توالی فریم‌های ثبت شده توسط دوربین، I_n شدت روشنایی، a شدت نور پس‌زمینه و b دامنه مدولاسیون، δ_n مقدار جابجایی‌فاز اعمال شده توسط جابجاگر پیزوالکتریک در فریم-n ام و η_n نمایانگر نویز تصادفی گاوسی از جمله نویز حرارتی و لرزش در تصویر است. در نهایت ϕ نمایانگر فاز نسبی جبهه موج آزمون است که هدف نهایی اندازه‌گیری به شمار می‌رود. (x,y) هم مختصات صفحه اینترفروگرام است.

در حالت ایده‌آل فرض می‌شود در یک بلور پیزو، جابجایی فاز δ_n به صورت خطی با ولتاژ کنترل V_n بصورت $\delta_{\{id,n\}} = k\,V_n$ مطابق با ضریب کالیبراسیون k تغییر می‌کند. اما در عمل، باتوجه به وجود مشخصه‌های غیر خطی، می‌توان خطای مدولاسیون فاز را با استفاده از یک بسط تیلور به صورت زیر مدل‌سازی کرد:

$$\delta_n = \delta_{\{id,n\}} + \epsilon_n \quad (2)$$

$$\epsilon_n = \epsilon_1\delta_{\{id,n\}} + \epsilon_2\left(\delta_{\{id,n\}}\right)^2 + \epsilon_3\left(\delta_{\{id,n\}}\right)^3 + \cdots \quad (3)$$

در این معادله، $\delta_{\{id,n\}}$ جابجایی فازی ایده‌آل و ϵ_n نمایانگر جمع خطا و نویز فاز است. ضریب ϵ_1 خطای کالیبراسیون خطی و ϵ_2 و ϵ_3 ضرایب خطاهای غیرخطی مرتبه دوم و سوم هستند که منشا آنها خواص فیزیکی مواد پیزوالکتریک هستند. خطاهای دیگر از جمله لرزش تداخل سنج نیز با همین ضرایب مدل می‌شوند.

الگوریتم‌های متداول ازجمله الگوریتم ۵-مرحله‌ای هاریهاران ($N = 5$ با گام های $0, \frac{\pi}{2}, \pi, 3\frac{\pi}{2}, 2\pi$) به گونه‌ای طراحی شده‌اند که تنها نسبت به ϵ_1 مقاوم باشند [۳]. اما درچیدمان‌های عملی تداخل‌سنجی که وجود لرزش اجتناب ناپذیر بوه و یا کنترل حلقه بسته در سیستم پیزوالکتریک وجود ندارد، ضرایب غیرخطی ϵ_2و ϵ_3 غیرصفر بوده و بکارگیری الگوریتم‌ها با خطای زیادی همراه است. در تصاویر بازسازی شده این مقاله نیز به وضوح خواهیم دید که این نوع خطاها دارای هارمونیک‌هایی با فرکانس دو و سه برابر فرکانس فریزها می‌باشند که بطور مستقیم می‌توانند کیفیت بازسازی سطح را مخدوش کرده و بکارگیری رویکرد پیشنهادی مؤلفه‌های اساسی گام بسیار مهمی برای افزایش دقت خواهد بود.

روش محاسباتی

به منظور غلبه بر محدودیت‌های بنیادین بیان شده در بخش قبل، یک رویکرد محاسباتی جامع مبتنی بر تحلیل مؤلفه‌های اساسی بکارگیری و بهینه‌سازی شد که یک تداخل شنج پویا را به شیوه موثری از کالیبراسیون‌های سخت‌افزاری پیچیده و حلقه‌های کنترلی گران‌قیمت بی‌نیاز می‌سازد [۸]. تحلیل مؤلفه‌های اساسی بطور ذاتی یک تکنیک آماری چندمتغیره است که با انتقال داده‌های وابسته و نامتقارن به یک فضای متعامد جدید، امکان استخراج مولفه‌های سینوسی و کسینوسی مجموعه‌ای از اینترفروگرام‌ها با جابجایی فازی کاملاً نامعلوم یا مخدوش را فراهم می‌کند. همچنین با توجه به آنکه در این روش، همبستگی نقاط مختلف یک اینترفروگرام در محاسبات بازسازی منظور می‌شوند، لذا وجود اختلال در تصویر از جمله سوختن پیکسل‌های CCD و یا مخدوش بون قطعات اپتیکی، به شیوه موثری در حین عملیات بازسازی جبران می‌شوند. با فرض در اختیار داشتن N تصویر تداخلی ثبت‌شده، در گام نخست برای استخراج

سیگنال خالص و کاهش اثر تغییرات شدت پس‌زمینه $a(x,y)$ که اغلب در سیستم‌های اپتیکی واقعی به صورت فضایی ناهمگن توزیع شده است، مقدار میانگین زمانی شدت در هر پیکسل محاسبه شده و از تک‌تک تصاویر کسر می‌گردد:

$$\tilde{I}_{n(x,y)} = I_{n(x,y)} - \bar{I}(x,y) \approx b(x,y)\cos[\phi(x,y) + \delta_n] \quad (4)$$

در این معادله $\bar{I}(x,y) = \left(\frac{1}{N}\right) \sum_{i=1}^{N} I_{i(x,y)}$ است.

این عملیات پیش‌پردازش، شدت پس‌زمینه را تا حد بسیار زیادی حذف کرده و سیگنال متناوب حاوی اطلاعات فاز را نگه می‌دارد. در مرحله بعد، با فرض آنکه M نمایانگر تعداد کل پیکسل‌های هر فریم تصویر است، داده‌های تصویری به شکل یک ماتریس دوبعدی X به ابعاد M × N بازنویسی می‌شود. بر اساس این ساختار، ماتریس کواریانس فضایی تصاویر به صورت

$$C = X^T X \quad (5)$$

تشکیل میگردد که یک ماتریس مربعی کوچک به ابعاد N × N بوده و تحلیل ویژگی‌های آماری تغییرات شدت را ممکن می‌سازد. با حل معادله مقادیر ویژه و بردارهای ویژه برای این ماتریس کوواریانس بصورت، $Cv_k = \lambda_k v_k \, , \, k = 1,2,\ldots$

می‌توان مؤلفه‌های اصلی داده‌های فازی شامل بردارهای ویژه v_k و مقادیر ویژه متناظر آن‌ها را به صورت نزولی استخراج نمود. طبق اصول تعامد، دو بردار ویژه اول (v_1, v_2) که متناظر با دو مقدار ویژه بسیار بزرگتر نسبت به سایرین هستند و بیشترین میزان واریانس داده‌ها را در بر دارند، دقیقاً حاوی مولفه‌های سینوس و کسینوس فاز در هریک از نقاط سطح می‌باشند [۸]. با نگاشت مستقیم داده‌های اولیه بر روی این بردارهای فازی در فضای متعامد ایجاد شده، فاز پیچیده‌شده (wapped) $\phi(x,y)$ به سادگی و از طریق رابطه ریاضی آرک‌تانژانت چهار–ناحیه‌ای محاسبه می‌گردد:

$$\phi(x,y) = atan2(X\,v_2, X\,v_1) \quad (6)$$

نقطه قوت و برتری این رویکرد در آن است که برای عملکرد دقیق و فیلتر کردن خطاهای هارمونیک ناشی از پیزو، نیازی به آگاهی از مقادیر دقیق گام‌های فازی وجود ندارد. حتی در حضور خطاهای غیرخطی و یا نویز شدید تنها کافی است که این گام‌ها توزیع آماری مناسبی در بازه $[0,2\pi]$ داشته باشند. در اینصورت الگوریتم PCA می‌تواند مؤلفه‌های متعامد را با موفقیت تفکیک کرده و اثرات نامطلوب مدولاسیون را در همان مرحله استخراج فاز خنثی نماید. در نهایت، با توجه به آنکه فاز استخراج شده در این مرحله محدود به بازه $[-\pi,\pi]$ بوده و دارای ناپیوستگی‌های فیزیکی است، استفاده از یک الگوریتم استخراج فاز مطلق (Unwrapping) بمنظور ماسک‌گذاری مناطق پرنویز و یکپارچه‌سازی توزیع فاز ضروری است تا فاز پیوسته و مطلق $\phi(x,y)$ حاصل شود. پس از دستیابی به فاز پیوسته، مورفولوژی دقیق سطح، $h(x,y)$، به طور مستقیم از طریق رابطه بنیادین تداخل‌سنجی استخراج می‌گردد:

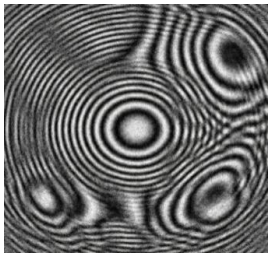
$$h(x,y) = \left(\frac{\lambda}{4\pi}\right)\phi(x,y) \quad (7)$$

شبیه سازی

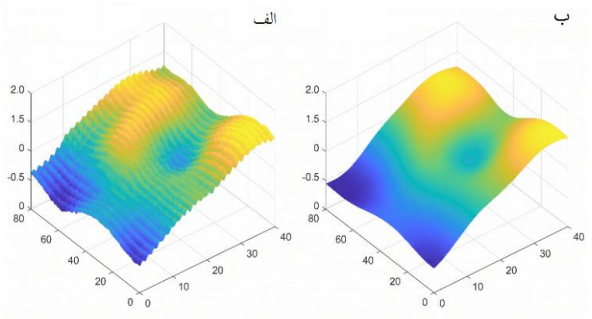
برای بررسی عملکرد چیدمان تداخل سنج دینامیکی جابجایی فاز و روش پیشنهادی بازسازی تصویر در حذف اثرات غیرخطی پیزوالکتریک، یک پلتفرم شبیه‌سازی دقیق و منطبق با چیدمان پیاده سازی شده در محیط پایتون شبیه سازی و توسعه داده شد. برای این منظور مورفولوژی سطح مرجع به عنوان یک نمایه سه‌بعدی پیچیده شامل قله‌ها و دره‌های گاوسی با دامنه ارتفاعی کل در حدود ۵۰۰ نانومتر تعریف شد. این سطح در شکل ۲ نشان داده شده است. همچنین مجموعه ای از تصاویر اینترفروگرام با N=11 فریم با طول موج ۶۳۲.۸ نانومتر و در حضور نویز تولید شدند. نویز تصادفی از نوع گاوسی با نسبت سیگنال به نویز ۳۰ دسی‌بل به تمام تصاویر افزوده شد که مقدار آن با توجه به شرایط اندازه گیری شده در آزمایشگاه و لرزش‌های موجود انتخاب گردید.

همچنین بمنظور شبیه سازی خطای پیزو و به منظور اثبات مقاومت الگوریتم بکار گرفته شده، یک خطای مدولاسیون فاز شدید به جابجایی‌های فازی $\delta_{\{id,n\}} = [0, \frac{\pi}{2}, \pi, \ldots, 5\pi]$ اعمال شد. بدین ترتیب پارامتر های خطا به صورت $\epsilon_1 = 0.1$ (۱۰٪)، ضریب خطای غیر خطی مرتبه دوم $\epsilon_2 = 0.05$ (۵٪)، و ضریب خطای غیر خطی مرتبه سوم $\epsilon_3 = 0.01$ (۰.۰۱٪) مدلسازی شدند. این تنظیمات نشان‌دهنده یک پیزوالکتریک با کالیبراسیون نامناسب و غیرخطی شدید است که الگوریتم‌های سنتی را دچار افت دقت شدید می‌کند.

به منظور مقایسه با روش PCA از الگوریتم استاندارد انتقال فاز ۵-مرحله‌ای هاریهاران [۳] استفاده شد. شکل۳ نتایج مقایسه را نشان می‌دهد. در نمایه بازسازی‌شده توسط الگوریتم هاریهاران (شکل ۳-الف)، خطاهای موج‌دار سیستماتیک با فرکانس دو و سه برابر فریزها به وضوح بر روی توپوگرافی سطح سوار هستند. دامنه این خطاها در حدود15 نانومتر اندازه‌گیری شد که کاملاً با تئوری تطابق دارد. خطایRMS سطح بازسازی شده برای الگوریتم هاریهاران 5.8 نانومتر بود. در مقابل، پس از اعمال الگوریتم تحلیل مولفه های اساسی بر روی همان مجموعه داده، خطای سیستماتیک که بصورت موج است به طور کامل ناپدید شد (شکل ۳-ب). خطای RMS سطح بازسازی شده برای الگوریتم ترکیبی پیشنهادی ما تنها به ۰.۰۸ نانومتر کاهش یافت که نشان‌دهنده بهبود بیش از ۷۰ برابری در دقت است. این مقدار خطا نیز ناشی از نویز تصادفی گاوسی باقی‌مانده و یا خطای تقریب زدن نویزهای غیر گاوسی است.



شکل ۲: یکی از اینترفروگرام‌های شبیه‌سازی‌شده (N=11) تحت نویز و خطای مدولاسیون فاز غیرخطی .



شکل ۳ : مقایسه دو الگوریتم هاریهاران(الف) و تحلیل مولفه های اصلی(ب) در ساخت پروفایل سه بعدی سطح

بحث و نتیجه گیری

در این مقاله، یک چارچوب تحلیلی جامع مبتنی بر تداخل‌سنجی انتقال فاز بمنظور بازسازی پروفایل سه‌بعدی دقیق سطوح و دیگر مشخصه‌های اپتیکی معرفی گردید که بر محدودیت‌ها و نقاط ضعف ذاتی جابجاگرهای پیزوالکتریک غلبه می‌کند. رویکرد پیشنهادی با تکیه بر تحلیل مؤلفه‌های اساسی، استقلال بسیار زیادی نسبت به عدم کالیبراسیون سخت‌افزار فراهم آورده و خطاهای سیستماتیک ناشی از پاسخ‌های غیرخطی، هیسترزیس و خزش در پیزوالکتریک را به صورت کاملاً موثری خنثی می‌سازد. اثبات این ادعا از طریق شبیه‌سازی رایانه‌ای تحت طول موج ۶۳۲.۸ نانومتر نشان داد که برخلاف الگوریتم‌های سنتی، تکنیک متعامدسازی تحلیل مولفه های اساسی قادر است حتی در حضور نویز محیطی و خطای غیرخطی شدید، خطای جذر میانگین مربعات سیستماتیک فاز را به کمتر از یک هزارم طول موج کاهش دهد. پایداری بالا، سرعت پردازش و دقت زیرنانومتری این روش، آن را برای کاربردهایی نظیر آزمون قطعات اپتیکی دقیق، لایه‌های نازک و صنایع نیمه‌هادی مناسب می‌سازد.

مرجع ها

[۱] D. Malacara, *Optical Shop Testing*, 3rd ed. John Wiley & Sons, Inc., 2007.
[۲] K. Creath, "Phase-measurement interferometry techniques," *Progress in Optics*, **vol. 26**, pp. 349-393, 1988.
[۳] P. Hariharan, B. F. Oreb, and T. Eiju, "Digital phase-shifting interferometry: a simple error-compensating phase-calculation algorithm," *Applied Optics*, **vol. 26**, no. 13, pp. 2504-2506, 1987.
[۴] A. Patil, B. Raphael, and P. Rastogi, "Generalized phase-shifting algorithm in the presence of nonlinear phase steps, harmonics, and noise," *Optics Letters*, **vol. 29**, no. 12, pp. 1381-1383, 2004.
[۵] G. De Nicola, et al., "Vibration compensation for phase-shifting interferometry with non-linear PZT response," *Optics Express*, **vol. 21**, no. 18, pp. 21414-21421, 2013.
[۶] C. K. Kim and J. H. Lee, "PZT-displacement measurement and hysteresis compensation for phase shifting interferometry," *Journal of the Optical Society of Korea*, **vol. 8**, no. 2, pp. 56-62, 2004.
[۷] Z. Wang, et al., "Advanced iterative algorithm for phase extraction of randomly phase-shifted interferograms," *Optics Letters*, **vol. 29**, no. 14, pp. 1671-1673, 2004.
[۸] J. Vargas, J. Antonio Quiroga, and T. Belenguer, "Phase-shifting interferometry based on principal component analysis," *Optics Letters*, **vol. 36**, no. 8, pp. 1326-1328, 2011.

بهینه‌سازی تولید باریکه‌های لاگر–گاوسی مرتبه بالا با استفاده از توری‌های چنگالی چندحلقه‌ای

خانی، پریسا[۱] ؛ امیری، پوریا[۱]؛ رسولی، سیف‌اله[۱،۲]

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

[۲] مرکز تحقیقات اپتیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه، زنجان

چکیده

باریکه‌های لاگر–گاوسی به دلیل حمل تکانه زاویه‌ای مداری و دارا بودن جبهه موج مارپیچی، از مهم‌ترین حالت‌های نور ساختاریافته به شمار می‌روند و کاربردهای وسیعی در مخابرات نوری، انبرک‌های نوری و اطلاعات کوانتومی یافته‌اند. تولید این باریکه‌ها معمولاً با استفاده از توری‌های چنگالی استاندارد انجام می‌شود، اما این توری‌ها تنها قادر به تولید حالت‌هایی با شاخص شعاعی صفر هستند. برای تولید باریکه‌های لاگر–گاوسی با شاخص شعاعی غیرصفر باید به این توری‌ها در شعاع‌های مشخصی پرش‌های فازی به اندازه‌ی π اعمال کرد. اگرچه استفاده از توری‌های چنگالی تعمیم‌یافته چندحلقه‌ای راهکاری شناخته شده است، اما موقعیت شعاعی دقیق این حلقه‌ها برای دستیابی به باریکه‌های لاگر–گاوسی بهینه، یک چالش اساسی بوده است. در این پژوهش، شعاع‌های بهینه حلقه‌ها بر اساس مقدار بیشینه معیار شباهت با حالت ایده‌آل نظری، به ازای مقادیر مختلف بار توپولوژیک و مولفه‌ی شعاعی به‌دست آمده است و نشان داده شده که با تنظیم دقیق شعاع حلقه‌ها متناسب با اندازه‌ی پهنای کمر باریکه‌ی ورودی، می‌توان به شباهت بالا با باریکه‌ی لاگر–گاوسی ایده‌آل دست یافت. در نهایت، طرح‌های بهینه حاصل از شبیه‌سازی به صورت تجربی بر روی یک تحریرگر فضایی نور بارگذاری و در آزمایشگاه پیاده‌سازی شدند که نتایج ثبت‌شده انطباق بسیار بالایی را با پیش‌بینی‌های نظری نشان می‌دهند.

واژه های کلیدی: *باریکه‌های لاگر–گاوسی، توری‌های چنگالی چند حلقه‌ای، بارتوپولوژیک، معیارشباهت، انتشارطیف‌زاویه ای.*

Optimization of High-Order Laguerre–Gaussian Beam Generation Using Multi-Ring Fork Gratings

Khani, Parisa[1]; Amiri, Pouria[1]; Rasouli, Saifollah[1,2]

[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan
[2]Optics Research Center, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan

Abstract

Laguerre–Gaussian (LG) beams, characterized by their helical wavefronts and orbital angular momentum (OAM), represent one of the most prominent classes of structured light, finding widespread applications in optical communications, optical tweezers, and quantum information processing. While standard fork gratings are commonly employed to generate these beams, they are limited to producing modes with a zero radial index ($p = 0$). To generate LG beams with non-zero radial indices, abrupt π-phase steps must be applied to these gratings at specific radii. Although generalized multi-ring fork gratings are a well-established solution, precisely determining the radial positions of these rings to achieve optimal LG beams remains a key challenge. In this study, the optimal ring radii were extracted by maximizing the similarity function relative to the ideal theoretical modes across various values of topological charges and radial indices. The results demonstrate that by precisely adjusting the ring radii relative to the input beam waist, a high similarity to the ideal Laguerre-Gaussian beam can be achieved. Finally, the optimized Multi-Ring Fork Gratings obtained from the simulation were experimentally encoded onto a spatial light modulator (SLM) and implemented in the laboratory. The recorded intensity profiles showed excellent agreement with the theoretical predictions.

Keywords*: Laguerre–Gaussian beams, Multi-ring fork gratings, Topological charge, Similarity function, Angular spectrum propagation.*

مقدمه

باریکه‌های لاگر–گاوسی از جواب‌های معادله موج هلمهولتز در تقریب پیرامحوری و دستگاه مختصات استوانه‌ای هستند. این باریکه‌ها با دو شاخص بار توپولوژیکی(l) وابسته به مولفه سمتی و شاخص شعاعی (p) شناخته می‌شوند. با غیرصفر شدن شاخص p، باریکه ساختاری چندحلقه‌ای به خود می‌گیرد که فاز میدان در مرز آن‌ها دچار پرش ناگهانی به اندازه π می‌شود. از سوی دیگر، فاز سمتی $\exp(il\phi)$ باعث ایجاد جبهه موج مارپیچی و حمل تکانه زاویه‌ای مداری می‌گردد [۱]، ویژگی منحصربه‌فردی که کاربردهای گسترده‌ای در انبرک‌های نوری، مخابرات فضای آزاد و اطلاعات کوانتومی دارد.

تولید این باریکه‌ها معمولاً با استفاده از توری‌های چنگالی استاندارد (حاصل ترکیب فاز مارپیچی با توری خطی) در مرتبه اول پراش انجام می‌شود [۲]. با این حال، توری‌های استاندارد تنها قادر به تولید مدهایی با شاخص شعاعی صفر هستند. اگرچه اعمال پرش‌های فاز π در راستای شعاعی و شکل‌گیری توری‌های چندحلقه‌ای راهکاری شناخته‌شده برای تولید باریکه‌های لاگر–گاوسی با شاخص شعاعی غیرصفر است [۳]، اما تعیین موقعیت شعاعی دقیق این حلقه‌ها نسبت به کمر باریکه ورودی جهت دستیابی به بیشترین شباهت به باریکه‌ی ایده‌آل لاگر–گاوسی، همواره یک چالش اساسی بوده است.

در این مقاله، بهینه‌سازی موقعیت این حلقه‌ها برای دستیابی به بالاترین میزان شباهت بررسی شده است. میدان خروجی با روش طیف زاویه‌ای محاسبه و شباهت آن با الگوی ایده‌آل اندازه‌گیری می‌شود. همچنین آزمایش عملی برای اعتبارسنجی شبیه‌سازی انجام شده است.

روابط نظری و نتایج شبیه‌سازی

رابطه‌ی یک توری چنگالی استاندارد که در مرتبه اول پراش خود باریکه با شاخص شعاعی صفر تولید می‌کند، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$T(r,\theta) = 0.5\left(1+\cos\left(\frac{2\pi}{d}x + l\theta\right)\right) \qquad (۱)$$

که در آن d گام توری، $x = r\cos\theta$ مختصات دکارتی و l بار توپولوژیکی باریکه است. از آنجا که توری‌های استاندارد رابطه (۱) تنها قادر به تولید باریکه‌هایی با ضریب شعاعی صفر هستند، برای تولید ضرایب بالاتر، این توری چنگالی را تعمیم داده و به شکل رابطه (۲) درخواهیم آورد:

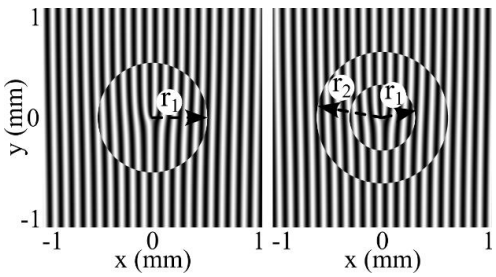
$$T_{\mathrm{MR}}(r,\theta) = 0.5\left(1+\cos\left(\frac{2\pi}{d}x + l\theta + \pi\sum_{n=1}^{p}\Theta(r-r_n)\right)\right) \qquad (۲)$$

که در آن p تعداد حلقه‌های اضافه شده، r_n موقعیت شعاعی n-امین حلقه و Θ تابع پله است. طبق این رابطه، هر بار که شعاع از مقدار r_n عبور می‌کند، یک فاز π به جمله درون کسینوس اضافه می‌شود که معادل معکوس شدن علامت تابع کسینوس و ایجاد پرش فاز ناگهانی در راستای شعاعی است. این تغییر ساختار فازی سبب ظهور نوارهای شعاعی جدید و شکل‌گیری حلقه‌های ثانویه در الگوی پراش دور می‌شود. شکل ۱ نمونه‌ای از طرح‌واره این توری‌ها را برای دو ضریب شعاعی مختلف نشان می‌دهد.

باریکه ورودی پیش از برخورد به توری، یک باریکه گاوسی خالص است که توزیع میدان آن در صفحه $z = 0^-$ (بلافاصله قبل از توری) به صورت رابطه (۳) تعریف می‌شود:

$$u(r, z=0^-) = A\exp\left(-\frac{r^2}{w_0^2}\right) \qquad (۳)$$

در این رابطه، w_0 نشان‌دهنده کمر باریکه در محل قرارگیری توری و A دامنه میدان است. پس از عبور باریکه از توری در صفحه $z = 0^+$، تابع میدان به صورت رابطه (۴) به‌دست می‌آید:



شکل 1: توری‌های چنگالی تعمیم یافته دامنه‌ای چندحلقه‌ای. (سمت چپ) توری تک‌حلقه‌ای و (سمت راست) توری دوحلقه‌ای. مشخصه‌های r_1 و r_2 به ترتیب موقعیت شعاعی حلقه‌های اول و دوم را نشان می‌دهند. توری نمایش‌داده‌شده یک توری سینوسی با گام $d = 0.1$ mm و $l = 1$ است.

$$u(r,\theta,z=0^{+}) = T_{MR}(r,\theta)\cdot u(r,z=0^{-}) \qquad (۴)$$

برای شبیه‌سازی انتشار این میدان تا صفحه هدف در فاصله z، از روش طیف زاویه‌ای استفاده می‌شود. این روش با در نظر گرفتن اثرات کامل پراش، میدان را در صفحه دلخواه بر اساس رابطه (۵) محاسبه می‌کند:

$$u(r,\theta,z) = \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}\{u(r,\phi,0^{+})\}\cdot H(f_x,f_y,z)\} \qquad (۵)$$

که در آن $\mathcal{F}$ و $\mathcal{F}^{-1}$ به ترتیب نشان‌دهنده تبدیل فوریه و معکوس آن هستند. همچنین $H(.)$ تابع انتقال فضای آزاد است که در بسامدهای فضایی f_x و f_y به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$H(f_x,f_y,z) = \exp(ikz)\exp\left(i\pi\lambda z\left(f_x^2+f_y^2\right)\right) \qquad (۶)$$

پس از محاسبه توزیع شدت باریکه شبیه‌سازی‌شده (I)، به منظور ارزیابی کیفیت ساختار شعاعی آن، از یک معیار شباهت (S) جهت سنجش میزان انطباق با باریکه لاگر–گاوسی ایده‌آل و مرجع (I^{ideal}) استفاده می‌شود. توزیع میدان باریکه لاگر–گاوسی ایده‌آل از رابطه نظری (7) به دست می‌آید [۴]:

$$u_{lp}^{\text{ideal}}(r,\phi) = \left(\frac{r\sqrt{2}}{w}\right)^{|l|}\exp\left(-\frac{r^2}{w^2}\right)L_p^{|l|}\left(\frac{2r^2}{w^2}\right)\exp(il\phi) \qquad (7)$$

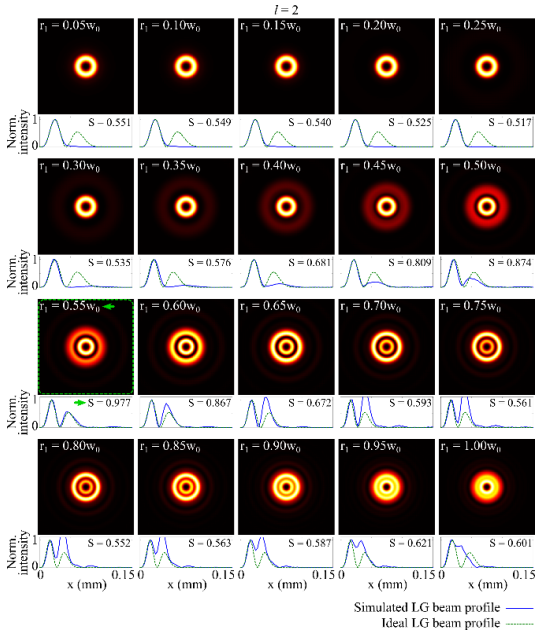
که در آن $L_p^{|l|}$ چندجمله‌ای لاگر تعمیم‌یافته است. در ادامه، رابطه معیار شباهت به صورت رابطه (۸) تعریف می‌شود [۵]:

$$S = \frac{\sum_i I_i\cdot I_i^{\text{ideal}}}{\sum_i I_i^2+\sum_i\left(I_i^{\text{ideal}}\right)^2-\sum_i I_i\cdot I_i^{\text{ideal}}} \qquad (8)$$

در این رابطه، I_i شدت میدان در مولفه‌ی i–ام و I_i^{ideal} شدت متناظر در باریکه مرجع است. مقدار این معیار در بازه $[0,1]$ قرار می‌گیرد. به طوری که $S=1$ بیانگر انطباق کامل و $S=0$ نشان‌دهنده عدم شباهت با باریکه لاگر–گاوسی ایده‌آل است.

به منظور دستیابی به بیشترین شباهت با باریکه مرجع، بهینه‌سازی دقیق موقعیت شعاعی حلقه‌ها، عاملی تعیین‌کننده در کنترل ساختار میدان است. در این راستا، برای باریکه‌ای با $l=2$ و $p=1$، اثر تغییرات r_1 در بازه $[0,1w_0]$ بر میزان شباهت بررسی شد. شکل ۲ نتایج شبیه‌سازی توزیع شدت پراش مرتبه اول را به ازای مقادیر مختلف r_1 نشان می‌دهد.

نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که ساختار و تقارن حلقه‌های توزیع شدت، به شدت تحت تاثیر مقدار شعاع r_1 قرار دارد. با تحلیل الگوهای شدتی، بیشترین میزان شباهت برابر با $S=0.977$ در شعاع $r_1=0.55w_0$ رخ می‌دهد که به عنوان شعاع بهینه برای تولید باریکه لاگر–گاوسی با $l=2$ و $p=1$ تعیین می‌شود. با همین روند، موقعیت حلقه‌های بهینه برای بارهای توپولوژیک مختلف استخراج شد. جدول ۱ مقادیر بهینه شعاع‌ها (r_1 و r_2) و میزان شباهت بیشینه متناظر با آن‌ها را برای بارهای توپولوژیک $l=0$ تا $l=5$، در هر دو حالت $p=1$ و $p=2$ خلاصه می‌کند.



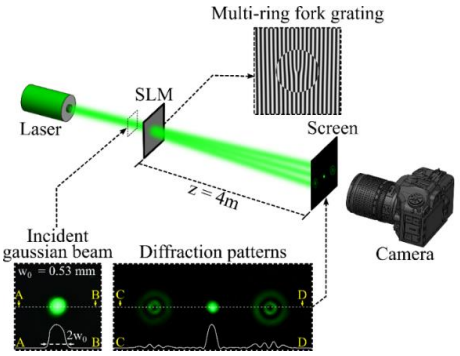
شکل 2: تصویر شدت شبیه‌سازی‌شده مرتبه اول پراش از توری چندحلقه‌ای برای مقادیر مختلف r_1. مشخصه‌های مورد استفاده برای این تصویر $l=2$، $p=1$، $\lambda=532\text{nm}$ و $w_0=1\text{mm}$ است. نمودارهای آبی‌رنگ پیوسته، نمایه شدتی شبیه‌سازی و نمودارهای سبزرنگ خط‌چین، نمایه شدتی باریکه ایده‌آل هستند.

جدول 1: مقادیر بهینه شعاع حلقه‌ها و بیشترین میزان شباهت برای بارهای توپولوژیک و شاخص‌های شعاعی مختلف.

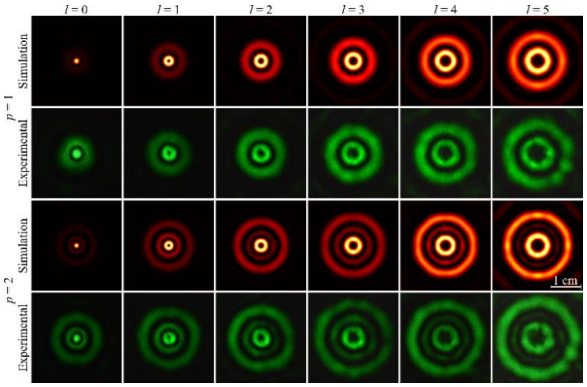
	$p=1$		$p=2$		
l	$r_1(w_0)$	Similarity	$r_1(w_0)$	$r_2(w_0)$	Similarity
0	0.35	0.9693	0.25	0.55	0.9617
1	0.45	0.9264	0.3	0.6	0.9236
2	0.55	0.9761	0.4	0.65	0.9385
3	0.6	0.9531	0.4	0.65	0.9025
4	0.65	0.9457	0.5	0.75	0.8763
5	0.65	0.8688	0.55	0.75	0.8669

نتایج تجربی

برای بررسی تجربی، چیدمانی مطابق شکل ۳ در آزمایشگاه پیاده‌سازی شد. باریکه حاصل از یک لیزر با طول موج $\lambda = 532\ \mathrm{nm}$ به صفحه یک تحریرگر فضایی نور (SLM) برخورد می‌کند که توری طراحی‌شده بر روی آن اعمال شده و باریکه گاوسی ورودی به باریکه‌ی لاگر–گاوسی با l و p–های مختلف تبدیل می‌شود. الگوهای پراش حاصل پس از انتشار در فاصله‌ی $z = 4m$ روی پرده ظاهر شده و توسط دوربین Nikon D7200 ثبت شده‌اند.



شکل 3: چیدمان آزمایشگاهی تولید باریکه‌های لاگر–گاوسی با ضریب شعاعی غیرصفر. پهنای لکه باریکه گاوسی ورودی در صفحه SLM برابر با $w_0 = 0.53mm$ اندازه‌گیری شده است. در پایین شکل، باریکه ورودی، الگوهای پراش مرتبه‌های مختلف و نمایه توزیع شدت نمایش داده شده‌اند.



شکل 4: توزیع شدت باریکه‌های لاگر–گاوسی برای مقادیر $l = 0$ تا $l = 5$ و $p = 1$ و $p = 2$. سطرهای قرمز نتایج حاصل از شبیه‌سازی و سطرهای سبز رنگ تصاویر ثبت شده تجربی هستند.

بر اساس مقادیر بهینه‌ی جدول ۱، باریکه‌های لاگر–گاوسی برای بارهای توپولوژیک $l = 0$ تا $l = 5$ و شاخص‌های شعاعی $p = 1$ و $p = 2$ به صورت تجربی و شبیه‌سازی تولید و در شکل 4، نمایش داده شده‌اند. انطباق بالایی میان ساختار حلقه‌ها در هر دو حالت نظری و تجربی مشاهده می‌شود. با این حال، تحلیل الگوها نشان می‌دهد که با افزایش شاخص شعاعی و بار توپولوژیکی، میزان شباهت باریکه خروجی با حالت ایده‌آل کاهش می‌یابد و در مرتبه‌های بالا، شدت نور در حلقه بیرونی (حلقه سوم باریکه) بیشتر از مقدار پیش‌بینی‌شده در روابط لاگر–گاوسی ایده‌آل ظاهر می‌شود.

نتیجه گیری

در این پژوهش، تولید و بهینه‌سازی باریکه‌های لاگر–گاوسی مرتبه بالا با شاخص شعاعی غیرصفر، با استفاده از توری‌های چنگالی تعمیم‌یافته چندحلقه‌ای مورد بررسی قرار گرفت و موقعیت بهینه شعاع حلقه‌های فازی بر حسب پهنای باریکه ورودی برای مدهای مختلف استخراج گردید.

مرجع‌ها

[1] B. E. A. Saleh and M. C. Teich; *Fundamentals of Photonics*; 3rd edition, John Wiley & Sons, (2019) 110-145.
[2] D. L. Andrews; *Structured Light and Its Applications: An Introduction to Phase-Structured Beams and Nanoparticles*; Academic Press, (2008) 35-62.
[3] P. Amiri, S. Rasouli, D. Hebri, and S. A. Ponomarenko; "Talbot-effect-based multiplication of Laguerre–Gaussian beams with non-zero radial indices: from theory to experimental realization"; *Optics Communications*, Vol. **574**, (2025) 131203.
[4] S. Rasouli, S. Fathollazade, and P. Amiri; "Simple, efficient and reliable characterization of Laguerre-Gaussian beams with non-zero radial indices in diffraction from an amplitude parabolic-line linear grating"; *Optics Express*, Vol. **29**, No. 19, (2021) 29661-29675.
[5] S. Fathollazade and S. Rasouli; "Analysis of beam parameters and obstacle size on the self-healing strength of radial carpet beams"; *Journal of Optics*, Vol. **27**, No. 5, (2025) 055604.

تعیین بارتوپولوژیکی باریکه‌های بسل-گاوسی گردابی با استفاده از لکه‌ی پواسون

فتح اله زاده، سمیه[۱]؛ شریفی، سید علی[۱]؛ رسولی، سیف‌اله[۱،۲]

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

[۲] مرکز تحقیقات اپتیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه، زنجان

چکیده

گردنورها یکی از مهم‌ترین دسته‌های باریکه‌های نوری ساختاریافته هستند که به دلیل داشتن تکانه زاویه‌ای مداری، توزیع شدت حلقه‌مانند و توزیع فاز چرخان، در سال‌های اخیر کاربردهای فراوانی در زمینه‌های مختلف پیدا کرده‌اند. یکی از پارامترهای اصلی این باریکه‌ها، بارتوپولوژیکی آن‌ها است. از آنجا که بارتوپولوژیکی مستقیماً از روی توزیع شدت قابل مشاهده نیست، یافتن روش‌هایی برای تشخیص این پارامتر از اهمیت بالایی برخوردار است در این پژوهش، روشی ساده و کم‌هزینه به صورت شبیه‌سازی و تجربی برای تعیین بارتوپولوژیکی باریکه‌های بسل-گاوسی گردابی با استفاده از یک توری دامنه‌ای شعاعی ارائه شده است. نتایج نشان می‌دهند که هنگام عبور باریکه‌ی بسل-گاوسی گردابی از توری شعاعی، در صورت برابر بودن بارتوپولوژیکی باریکه با تعداد پره‌های توری، یک لکه‌ی نوری در مرکز الگوی پراش میدان دور تشکیل می‌شود؛ در غیر این صورت، چنین لکه‌ای مشاهده نخواهد شد. این لکه‌ی شدتی که از تداخل بخش‌های هم‌فاز باقی مانده باریکه پس از عبور از توری شعاعی ایجاد می‌شود همان لکه‌ی پواسون است. از آنجا که شدت این لکه در انتشار در فضای آزاد کاهش می‌یابد، برای مشاهده‌ی بهتر آن از یک عدسی همگرا استفاده می‌کنیم. در صفحه‌ی کانونی عدسی، لکه‌ی مرکزی با شدت قابل‌توجه‌تری در صورت تطابق بارتوپولوژیکی با تعداد پره‌های توری نمایان می‌شود. نتایج به دست آمده از چیدمان آزمایشگاهی و همچنین شبیه‌سازی‌های عددی تطابق بسیار خوبی دارند.

واژه های کلیدی: *گردنور، بارتوپولوژیکی، باریکه‌ی بسل-گاوسی گردابی.*

Poisson spot-based determining of the topological charge of Bessel-Gaussian vortex beams

Fathollazade, Somaye[1]; Sharifi, Seyed Ali[1]; Rasouli, Saifollah[1,2]

[1] *Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan*
[2] *Optics Research Center, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan*

Abstract

Vortex beams are one of the most important classes of structured light beams, characterized by their Orbital angular momentum (OAM), ring-shaped intensity distribution, and helical phase pattern. In recent years, they have found widespread applications in various fields. A key parameter of these beams is their topological charge (TC). Since the TC cannot be directly observed from the intensity distribution, the development of methods for determining this parameter has always been of high importance. In this study, a simple and cost-effective method for determining the TC of Bessel-Gaussian Vortex beams (BGVBs) is proposed, using amplitude radial gratings. The results show that when a BGVB passes through the radial grating, an on-axis bright spot appears in the far-field diffraction pattern if the beam's TC matches the number of the grating spokes. Otherwise, no such spot is observed. This central intensity spot, formed by constructive interference of the in-phase residual parts of the beam after passing through the grating, corresponds to the Poisson spot. Since the intensity of this spot decreases in free space, a converging lens is used to observe it more effectively. In the focal plane of the lens, a bright spot with significant intensity is observed at the center of the intensity pattern if the TC matches the number of grating spokes. The results obtained from experimental setups as well as numerical simulations show a very good agreement.

***Keywords**: Vortex beams, Topological charge, Bessel-Gaussian Vortex Beams, Radial grating*

مقدمه

باریکه‌های بسل-گاوسی گردابی[۱]، یکی از مهم‌ترین دسته‌های باریکه‌های نوری ساختاریافته هستند که به دلیل خاصیت غیرپراشی و حمل تکانه زاویه‌ای مداری[۲]، توجه ویژه‌ای را به خود جلب کرده‌اند [۱]. در حال حاضر، روش‌های متعددی برای تولید این باریکه‌ها ارائه شده است، اما در این پژوهش از یک روش «تمام‌نگاشت صرفاً دامنه‌ای» مبتنی بر یک توری چنگالی حلقه نهفته[۳] استفاده می‌شود. این روش بر پایه اعمال توزیع فاز چرخشی درون یک توری خطی و ضرب آن در تابع عبور حلقه‌ای استوار است [۲]. یکی از پارامترهای کلیدی باریکه‌های گردابی، بارتوپولوژیکی آن‌ها است. در این کار، با استفاده از یک توری شعاعی دامنه‌ای، روشی ساده و کم‌هزینه برای تعیین بارتوپولوژیکی این باریکه‌ها ارائه می‌شود که به صورت تجربی و شبیه‌سازی امکان‌پذیر است. نتایج نشان می‌دهند که وقتی باریکه بسل-گاوسی گردابی از توری شعاعی با تعداد پره‌های مساوی با عدد بارتوپولوژیکی عبور می‌کند، در انتشار میدان دور، لکه‌ای شدتی موسوم به لکه‌ی پواسون در مرکز الگوی باریکه تشکیل می‌شود. این لکه ناشی از تداخل بخش‌های هم‌فاز باقی‌مانده از باریکه‌ی فرودی بعد از عبور از توری شعاعی است. از آن‌جایی که شدت این لکه در اثر انتشار در فضای آزاد کاهش می‌یابد، بنابراین برای مشاهده لکه با شدت بهتر، از یک عدسی همگرا استفاده می‌کنیم و در صفحه فوریه عدسی به بررسی ایجاد یا عدم ایجاد لکه می‌پردازیم. استفاده از باریکه‌هایی با خاصیت کانونی شوندگی خودکار مانند باریکه‌های ایری دایروی گردابی [۳]، می‌تواند نیاز به عدسی را از بین ببرد. با این حال، تولید این دسته از باریکه‌ها نسبت به باریکه‌های بسل-گاوسی گردابی به صورت تجربی چالش برانگیزتر است. در نهایت، علاوه بر تشخیص بارتوپولوژیکی گردنور با این روش، تولید یا عدم تولید این لکه می‌تواند به عنوان ابزاری برای رمزنگاری یک بیتی داده‌ها مورد استفاده قرار گیرد.

روش‌های محاسباتی و آزمایش

تابع عبور یک باریکه‌ی بسل-گاوسی گردابی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید[۲]:

$$\boldsymbol{\psi}_{\mathbf{0}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\theta}) = \boldsymbol{J_l}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{\boldsymbol{\omega_b}}\right)\mathbf{exp}(\boldsymbol{il\theta})\,\mathbf{exp}\left(\frac{\boldsymbol{r^2}}{\boldsymbol{\omega_0{}^2}}\right) \qquad (۱)$$

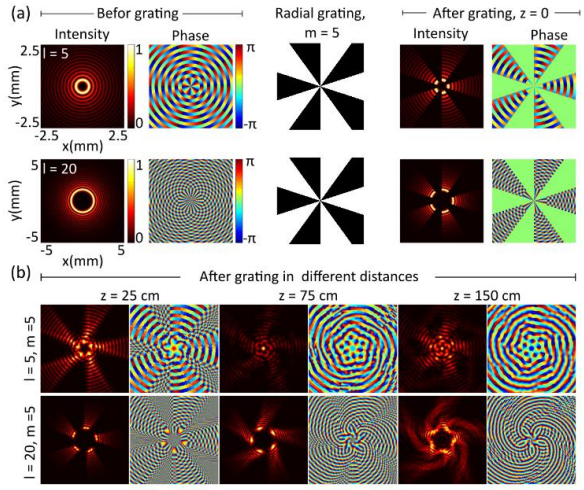
در این‌جا $J_l(.)$ تابع بسل مرتبه‌ی l، ω_0 پهنای پوش گاوسی، ω_b پارامتر مقیاس باریکه‌ی بسل و l بار توپولوژیکی باریکه است. تابع عبور یک توری شعاعی از رابطه‌ی

$$\boldsymbol{t}\,(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{0.5}\,(\mathbf{1} + \mathbf{sgn}(\mathbf{cos}\,(\boldsymbol{m}\,\boldsymbol{\theta}))) \qquad (۲)$$

به دست می‌آید که sgn تابع علامت و m بیانگر تعداد پره‌های توری شعاعی است [۴]. با عبور باریکه‌ی بسل-گاوسی گردابی از توری شعاعی تابع عبور باریکه دقیقاً بعد از توری در صفحه‌ی $z = 0$، $\psi(r,\theta,0) = t\,(\theta)\psi_0(r,\theta)$ است. برای شبیه‌سازی میدان منتشر شده در فاصله‌ی انتشاری z، با استفاده از روش انتشار طیف زاویه‌ای توزیع میدان باریکه‌ی منتشر شده از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید [۵]:

$$\psi(r,\theta,z) = \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}(\psi(r,\theta,0)).\mathrm{H}(f_x,f_y,z)\} \qquad (۳)$$

که در آن $\mathrm{H}(f_x,f_y,z) = exp(i\,k\,z)\,exp(i\pi\lambda z(f_x{}^2 + f_y{}^2))$ تابع انتقال فضای آزاد است.



شکل ۱ : الگوهای شدت و فاز باریکه‌های بسل-گاوسی گردابی با $l = 5$ و $l = 20$ در عبور از توری شعاعی با $m = 5$ و انتشار باریکه‌های حاصل در فواصل مختلف.

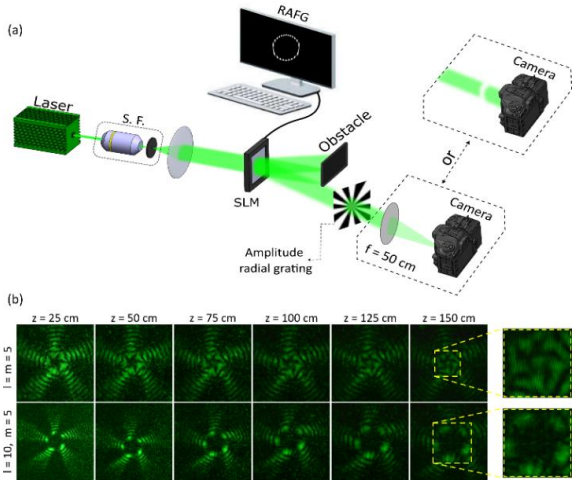
[۱] Bessel-Gaussian Vortex Beams

[۲] Orbital Angular Momentum

[۳] Ring Fork grating

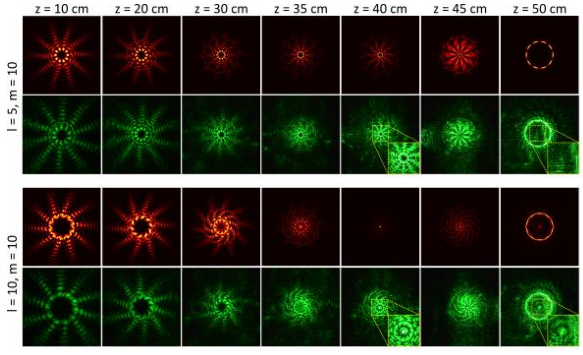
در شکل ۱ بخش (a)، ستون‌های اول و دوم به ترتیب الگوهای شدت و فاز دو باریکه‌ی بسل–گاوسی گردابی با بارهای توپولوژیکی $l = 5$ و $l = 20$ را نشان می‌دهند. در ستون سوم توری‌های شعاعی با تعداد پره‌ی $m = 5$ نمایش داده شده‌اند که در مسیر باریکه‌های ورودی قرار می‌گیرند. در ستون‌های چهارم و پنجم الگوهای شدت و فاز باریکه دقیقاً بعد از توری شعاعی نمایش داده شده‌اند. در بخش (b) از شکل ۱ الگوهای شدت و فاز باریکه‌ها در فواصل انتشاری مختلف بعد از توری شعاعی نمایش داده شده‌اند. همان‌گونه که از این شکل به وضوح دیده می‌شود برای الگوهای شدتی نمایش داده شده در ردیف اول از بخش (b) از آن‌جایی که بارتوپولوژیکی باریکه‌ی ورودی با تعداد پره‌های توری برابر هستند بعد از یک فاصله‌ی انتشاری مشخص به بعد در مرکز باریکه یک لکه‌ی شدتی ایجاد می‌شود، این درحالی است که همان‌گونه که در ردیف دوم این بخش دیده می‌شود در صورت عدم تطابق بارتوپولوژیکی باریکه با تعداد پره‌های توری شعاعی این لکه‌ی نوری ایجاد نمی‌شود.

چیدمان آزمایشگاهی مورد استفاده در این پژوهش در بخش (a) از شکل۲ نشان داده شده است. نور لیزر ND:YAG با طول موج ۵۳۲ نانومتر، پس از موازی و پهن شدن از SLM که تابع عبور تمام‌نگاشت دامنه‌ای توری چنگالی حلقه نهفته برای تولید باریکه‌ی بسل–گاوسی گردابی روی آن اعمال شده، عبور کرده و یکی از مراتب پراش آن از توری شعاعی با تعداد پره‌های مشخص عبور می‌کند. دو نوع مختلف تصویر از باریکه ثبت می‌شود. در نوع اول تصاویر شدتی از باریکه در فواصل مختلف انتشاری توسط دوربین ثبت می‌شوند. در نوع دوم از یک عدسی استفاده می‌کنیم و تصاویر شدتی را از یک فاصله‌ی مشخص تا کانون عدسی ثبت می‌کنیم. همان‌گونه که از نتایج تجربی به دست آمده در بخش (b) از شکل هم دیده می‌شود، در صورتی که تعداد پره‌های توری شعاعی با بارتوپولوژیکی باریکه‌ی بسل ورودی برابر است از یک فاصله‌ای به بعد یک لکه‌ی شدتی مشابه آن‌چه با شبیه‌سازی هم نشان داده بودیم نمایان می‌شود. این در حالی است که در صورت عدم تطابق این دو پارامتر، ردیف دوم بخش (b) از شکل ۲، نتایج تجربی هم به وضوح نشان می‌دهند که این لکه‌ی شدتی ایجاد نخواهد شد.



شکل۲ : (a) چیدمان آزمایشگاهی. (b) نتایج تجربی به دست آمده از پراش باریکه‌های بسل–گاوسی گردابی از توری شعاعی در فواصل انتشاری مختلف پس از توری شعاعی.

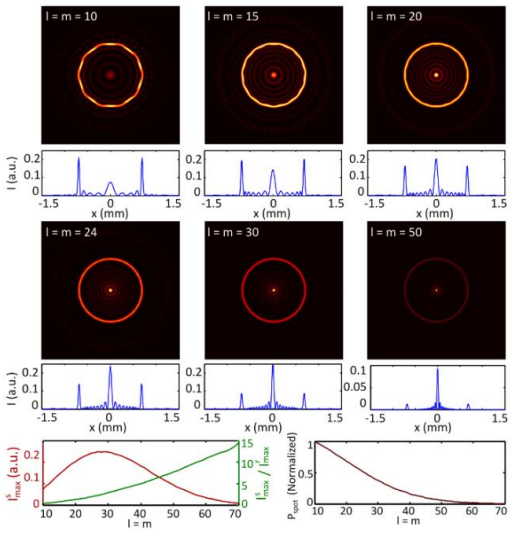
در شکل ۳ مقایسه‌ی نتایج تجربی (ردیف‌های زوج، الگوهای شدت سبز رنگ) و شبیه‌سازی (ردیف‌های فرد، الگوهای شدت قرمز رنگ) به دست آمده در حالتی که از یک عدسی و سپس دوربین در قسمت تصویر سازی چیدمان تجربی استفاده کردیم، نشان داده شده است. نتایج بیانگر این موضوع هستند که زمانی که از یک عدسی استفاده می‌کنیم، در صفحه‌ی فوریه یا صفحه ی کانونی عدسی یک حلقه‌ی شدتی ایجاد می‌شود که در صورت برابر بودن بارتوپولوژیکی باریکه با تعداد پره‌های توری شعاعی، در مرکز این حلقه یک لکه‌ی شدتی



شکل۳ : مقایسه‌ی توزیع شدت های به دست آمده در فواصل انتشاری مختلف از عدسی، به صورت شبیه‌سازی(ردیف های فرد) و تجربی(ردیف‌های زوج) در

عبور باریکه‌های بسل–گاوسی گردابی از توری شعاعی و استفاده از عدسی فوریه قبل از دوربین.

ایجاد می‌شود و در غیر این صورت در مرکز حلقه‌ی ایجاد شده این لکه مشاهده نمی‌شود. داده‌های تجربی و شبیه‌سازی انطباق خوبی باهم دارند. در شکل٤، الگوهای شدت به دست آمده برای باریکه‌های بسل–گاوسی گردابی با بارهای توپولوژیکی مختلف و عبور آن‌ها از توری‌های شعاعی با تعداد پره‌های برابر با بارتوپولوژیکی باریکه‌ی ورودی در صفحه‌ی فوریه‌ی عدسی نشان داده شده است. نمودارهای آبی رنگ پروفایل در امتداد خط مرکزی باریکه‌ها را نشان می‌دهند. در نهایت، در ردیف پنجم ستون اول، نمودار قرمز نشان می‌دهد که شدت ماکزیمم لکه‌ی مرکزی ایجاد شده در صفحه‌ی کانونی عدسی، با افزایش مقدار بارتوپولوژیکی و معادل با آن تعداد پره‌های توری شعاعی، ابتدا افزایش و سپس بعد از $l=m=30$ روند کاهشی می‌یابد. این درحالی است که همان‌گونه که از نمودار قرمز رنگ مشاهده می‌شود نسبت شدت ماکزیمم لکه‌ی شدتی، I^s_{max} به شدت ماکزیمم حلقه‌ی شدت، I^r_{max} همواره افزایشی است. در نمودار ستون دوم این ردیف هم نشان داده شده است با افزایش l و m توان لکه‌ی شدتی ایجاد شده در مرکز الگو کاهشی است.



شکل٤: مقایسه الگوهای شدت ایجاد شده در کانون عدسی در عبور باریکه‌های بسل–گاوسی گردابی مختلف از توری‌های شعاعی با تعداد پره‌های برابر با بارتوپولوژیکی باریکه ورودی. نمودارهای آبی رنگ نشان‌دهنده پروفایل شدتی باریکه‌ها در طول خط مرکزی آن‌ها است. در نمودارهای ردیف پنجم، به ترتیب مقایسه نمودارهای شدت ماکزیمم لکه شدتی و همچنین نسبت این شدت به شدت ماکزیمم حلقه ایجاد شده برای مقادیر مختلف بارتوپولوژیکی، در ستون اول، و همچنین مقایسه توان لکه شدتی ایجاد شده بر حسب مقادیر مختلف بارتوپولوژیکی باریکه ورودی، در ستون دوم، انجام شده است.

نتیجه گیری

در این پژوهش چگونگی تشخیص بارتوپولوژیکی باریکه‌ی بسل–گاوسی گردابی با استفاده از توری‌های شعاعی و ایجاد لکه‌ی پواسون نشان داده شده‌است. نتایج هم به صورت تجربی و هم به صورت شبیه‌سازی به خوبی نشان می‌دهند که در صورت تطابق بارتوپولوژیکی باریکه‌ی ورودی با تعداد پره‌های توری شعاعی، که در مسیر باریکه‌ی اولیه قرار داده می شود، در مرکز الگوی شدت یک لکه‌ی شدتی موسوم به لکه ی پواسون ایجاد می‌شود که در صورت عدم تطابق این دو پارامتر با هم این لکه را مشاهده نخواهیم کرد. این روش می‌تواند علاوه بر این‌که می‌تواند روشی برای تشخیص بارتوپولوژیکی گردنورها باشد می تواند به عنوان ابزار ساده و کارآمد برای رمزنگاری اطلاعات یک بیتی که مبتنی بر دو عدد صفر و یک هستند باشد. به این صورت که ایجاد شدن این لکه معادل با داده‌ی ۱ و عدم ایجاد شدن آن بیانگر داده‌ی صفر باشد.

مرجع‌ها

[1]. Yu, Tao, et al. "The generation and verification of Bessel-Gaussian beam based on coherent beam combining." *Results in Physics* 16 (2020): 102872.
[2]. S. Fathollazadeand; S. Rasouli; P. Amiri; A. A. Abdusattarovich; “Holographic generation of Bessel–Gaussian vortex beams using a ring-apertured fork grating and topological charge measurement via an astigmatic grating”; *Journal of Holography Applications in Physics* 6, Issue. 3 (2026) 31-51.
[3]. Liu, C., Liu, J., Niu, L., Wei, X., Wang, K., & Yang, Z; “Terahertz circular Airy vortex beams” Scientific reports 7, No. 1, (2017) 3891.
[4]. S. Rasouli, A. M. Khazaei, and D. Hebri, “Radial carpet beams: a class
[5]. of nondiffracting, accelerating, and self-healing beams,” Phys. Rev. A 97, 033844 (2018)
[6]. B. E. Saleh and M. C. Teich, *Fundamentals of Photonics* (Wiley, 2019).

تحلیل سازوکارهای افت عملکرد در سلول‌های خورشیدی مبتنی بر پروسکایت سه کاتیونه CsFAMA از طریق مشخصه‌یابی تجربی و مدل‌سازی عددی با SCAPS

کریمی مونه، پریسا[۱]؛ شریفی، نفیسه[۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان، دانشگاه کاشان، کاشان ۸۷۳۱۷ ایران

[۲] گروه آموزش فیزیک، دانشگاه فرهنگیان، صندوق پستی ۸۸۹-۱۴۶۶۵، تهران، ایران

چکیده

مطالعه حاضر به تحلیل عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی سه‌کاتیونه با ساختار $ITO/SnO_2/CsFAMA/CIS/Carbon$ با رویکرد ترکیبی تجربی–شبیه‌سازی عددی می‌پردازد. در گام نخست، پاسخ جریان–ولتاژ سلول در شرایط تجربی اندازه‌گیری و پارامترهای عملکردی استخراج شد. سپس مدل سلول در نرم‌افزار SCAPS-1D بر اساس داده‌های تجربی شبیه‌سازی و تنظیم گردید. پس از دستیابی به انطباق مناسب میان نتایج تجربی و شبیه‌سازی، منشأ افت عملکرد سلول از طریق بررسی چگالی نقص‌های حجمی در لایه جاذب CsFAMA و نقص‌های فصل مشترک $SnO_2/CsFAMA$ و CsFAMA/CIS مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج نشان داد که افزایش چگالی نقص‌ها موجب تشدید بازترکیب غیرتابشی و کاهش پارامترهای فتوولتائیکی سلول می‌شود. علاوه بر این، مشخص شد که نقص‌های حجمی نقش پررنگ‌تری نسبت به نقص‌های فصل مشترک دارند و سهم قابل توجهی در افت بازدهی مشاهده‌شده ایفا می‌کنند. تحلیل‌های انجام‌شده نشان می‌دهد که کاهش چگالی نقص‌ها و بهبود کیفیت فصل مشترک‌ها می‌تواند به کاهش تلفات بازترکیبی و ارتقای عملکرد سلول منجر شود. این مطالعه دیدگاه دقیق‌تری از عوامل مؤثر بر افت عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایتی سه‌کاتیونه ارائه می‌دهد.

کلید واژه: سلول های خورشیدی، پروسکایت سه‌کاتیونه، شبیه‌سازی SCAPS-1D، چگالی نقص‌ها

Analysis of Degradation Mechanisms in CsFAMA Triple-Cation Perovskite Solar Cells via Experimental Characterization and Numerical Modeling with SCAPS

Parisa Karimi Moone [1], Nafiseh Sharifi [2*]

[1] Department of Photonics and Plasma, Faculty of Physics, University of Kashan, Kashan 87317, Iran

[2] Department of Physics Education, Farhangian University, P. O. Box 14665-889, Tehran, Iran

** sharifi@cfu.ac.ir, parisa.mjkarimi@grad.kashanu.ac.ir*

Abstract

This study investigates the performance of a triple-cation perovskite solar cell with the structure $ITO/SnO_2/CsFAMA/CIS/Carbon$ using a combined experimental and numerical simulation approach. In the first step, the current–voltage response of the cell was measured under experimental conditions, and the performance parameters were extracted. Then, the cell model was simulated and adjusted in SCAPS-1D software based on the experimental data. After achieving good agreement between the experimental results and simulations, the origin of the cell performance degradation was evaluated by investigating the bulk defect density in the CsFAMA absorber layer and the interface defects at the SnO_2/CsFAMA and CsFAMA/CIS interfaces. The results showed that an increase in defect density leads to stronger non-radiative recombination and a reduction in the photovoltaic parameters of the cell. In addition, it was found that bulk defects play a more pronounced role than interface defects, contributing significantly to the observed efficiency losses. The performed analyses indicate that reducing the defect density and improving the quality of the interfaces can lead to a decrease in recombination losses and an enhancement of the cell performance. This study provides a clearer perspective on the factors affecting the performance degradation of triple-cation perovskite solar cells.

***Keywords**: Solar cells ،Triple-cation perovskite SCAPS-1D simulation ،Defect density*
PACS No.

مقدمه

در میان ساختارهای مختلف سلول های خورشیدی پروسکایتی، پروسکایت‌های سه‌کاتیونه مبتنی بر ترکیب CsMAFA به دلیل بهبود هم‌زمان پایداری ساختاری و عملکرد الکتریکی نسبت به نمونه‌های تک‌کاتیونه و دوکاتیونه توجه ویژه‌ای را به خود جلب کرده‌اند [۱]. در این ساختار، ترکیب هم‌زمان کاتیون‌های FA^+، MA^+ و Cs^+ موجب کاهش تنش شبکه‌ای، بهبود کیفیت بلوری و کاهش چگالی تله‌های الکترونی شده و در نهایت به افزایش کارایی تبدیل انرژی و بهبود پارامترهای کلیدی مانند J_{sc}، V_{oc}، FF و PCE منجر می‌شود.[۲]. در این مطالعه، ابتدا سلول خورشیدی پروسکایتی سه‌کاتیونه با ساختار FTO/SnO_2/CsMAFA/CIS/Carbon به‌صورت تجربی مورد بررسی قرار گرفت و پارامترهای عملکردی آن استخراج شد [۳]. سپس ساختار در نرم‌افزار SCAPS-1D بر اساس داده‌های تجربی شبیه‌سازی شد. در ادامه، با تحلیل پارامترهایی نظیر چگالی نقص‌های حجمی، نقص‌های فصل مشترک و نرخ بازترکیب حامل‌ها، عوامل اصلی محدودکننده عملکرد و منشأ افت بازدهی در ساختار مورد بررسی قرار گرفت.

مشخصه‌یابی تجربی و مدل‌سازی عددی

در این پژوهش، از ITO به عنوان رسانای شفاف استفاده شد و سپس لایه انتقال‌دهنده الکترون[SnO_2 ۴]، پس از تهیه محلول و فیلتراسیون جهت حذف ذرات درشت، به روش spin-coating لایه‌نشانی و در ادامه در دمای ۱۵۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۳۰ دقیقه تحت عملیات حرارتی قرار گرفت. در ادامه، لایه جاذب پروسکایتی سه‌کاتیونی CsMAFA با ترکیب $Cs_{0.05}(MA_{0.17}FA_{0.83})_{0.95}Pb(I_{0.83}Br_{0.17})_3$ به روش spin-coating لایه‌نشانی شد [۵]. برای بهبود استخراج و انتقال حامل‌های حفره، لایه انتقال‌دهنده حفره CIS نیز به روش spin-coating در دو مرحله متوالی لایه‌نشانی و بازپخت شد [۶]. در نهایت، الکترود پشتی کربنی به روش دکتر بلید بر روی ساختار لایه‌نشانی شد و پس از خشک‌سازی، تماس الکتریکی با استفاده از فلز قلع برقرار گردید.

پس از مشخصه‌یابی تجربی سلول خورشیدی و استخراج پارامترهای فتوولتائیکی، ساختار متناظر در نرم‌افزار SCAPS-1D مدل‌سازی شد. بعد از دستیابی به انطباق مناسب میان نتایج تجربی و شبیه‌سازی، اثر نقص‌های حجمی لایه جاذب و نقص‌های فصل مشترک بر عملکرد سلول مورد بررسی قرار گرفت تا منشأ افت بازدهی ساختار شناسایی شود.

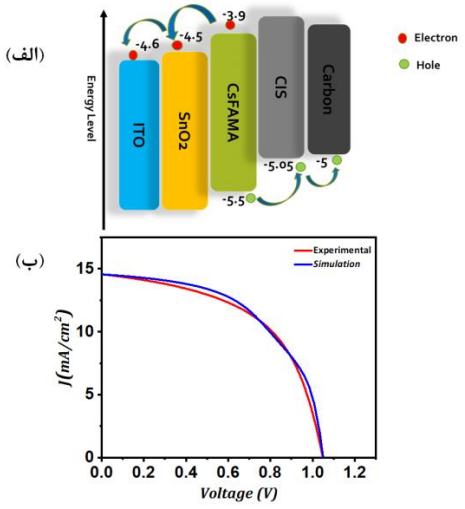
نتایج و بحث

بر اساس فیزیک نیمه‌رساناها، آرایش پله‌ای ترازها موجب همترازی مناسب لایه‌ها شده است؛ به‌طوری که لایه SnO_2 استخراج الکترون‌ها به ITO و لایه CIS انتقال حفره‌ها به کربن را تسهیل می‌کند. شکل ۱-الف ترازهای انرژی ساختار ITO/SnO_2/CsFAMA/CIS/Carbon را نشان می‌دهد. این ساختار با کاهش سد انرژی در مرزهای مشترک، مانع اتلاف انرژی ناشی از بازترکیب بارها می‌شود.

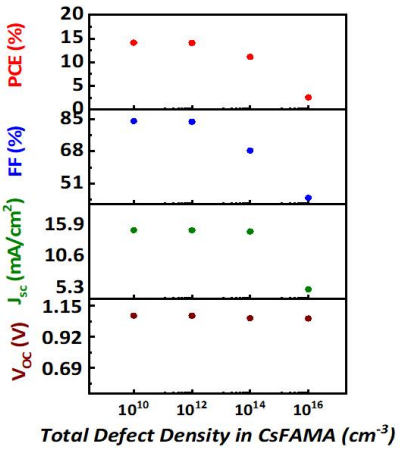
شکل ۱-ب، نمودار مشخصه J-V حاصل از اندازه‌گیری‌های تجربی را در مقایسه با نتایج شبیه‌سازی عددی در نرم‌افزار SCAPS-1Dتحت تابش استاندارد نشان می‌دهد. انطباق بسیار دقیق و نزدیکی که میان منحنی تجربی و منحنی شبیه‌سازی در شکل دیده می‌شود، تاییدکننده اعتبارسنجی صحیح شاخص‌های فیزیکی ورودی به نرم‌افزار است .

اثر چگالی نقص‌های حجمی لایه جاذب CsFAMA بر پارامترهای عملکردی سلول در شکل ۲ نمایش داده شده است. در ارزیابی تجربی اولیه (شکل ۱)، بازدهی سلول به دلیل وجود نقص‌های ساختاری، مقدار محدود ۸/۱۶ درصد را ثبت کرد که همین امر نیاز به ریشه‌یابی فیزیکی عوامل اتلاف را ایجاد نمود.

بر اساس نتایج شبیه‌سازی، مشخص است که کاهش چگالی نقص‌ها به کمتر از 10^{12} با بهبود کیفیت بلوری، پتانسیل افزایش PCE را تا نزدیک به ۱۴ درصد فراهم می‌کند. در مقابل، با افزایش چگالی نقص‌ها و عبور از مرز بحرانی 10^{14}، مراکز بازترکیب شاکلی–رید–هال (SRH) در گاف انرژی به‌شدت فعال می‌شوند.



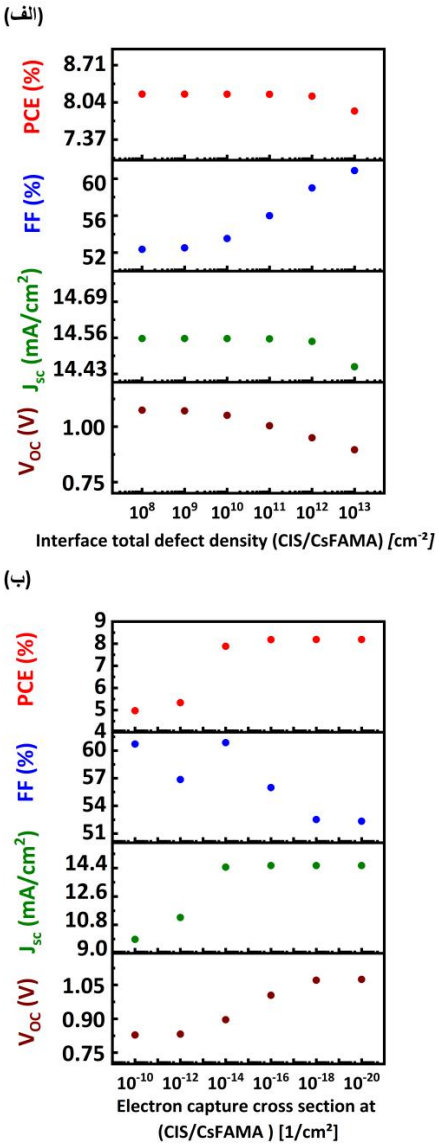
شکل ۱: الف) نمودار ترازهای انرژی لایه‌های مختلف ساختار سلول خورشیدی پروسکایتی ITO/SnO2/CsFAMA/CIS/Carbon ب) مقایسه منحنی‌های J–V حاصل از داده‌های تجربی آزمایشگاهی و شبیه‌سازی اولیه با نرم‌افزارSCAPS-1D



شکل ۲: اثر تغییرات چگالی نقص کل، در لایه جاذب CsFAMA بر پارامترهای خروجی سلول خورشیدی شامل Voc ، Jsc ،FF وPCE

این امر طول عمر حامل‌های بار را کاهش داده و مانع جمع‌آوری بهینه آن‌ها می‌شود؛ به‌طوری‌که در چگالی $۱۰^{۱۶}$، ضریب پرشدگی به زیر ۵۱ درصد و چگالی جریان Jsc به حدود ۵/۳ میلی‌آمپر بر سانتی‌متر مربع سقوط کرده و در نهایت بازدهی کل دستگاه را به کمتر از ۲/۵ درصد می‌رساند. این رفتار، سهم مستقیم نقص‌های حجمی را در محدود کردن عملکرد نمونه تجربی اثبات می‌کند.

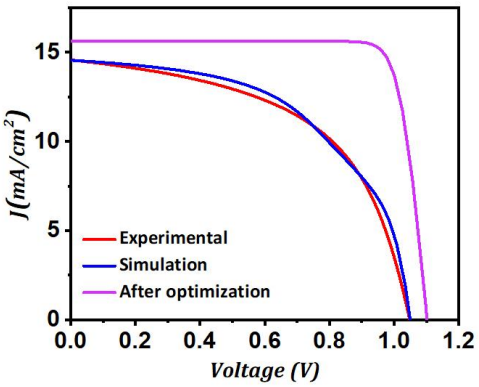
تاثیر ویژگی‌های فیزیکی تله‌های موجود در مرز اتصال CIS/CsFAMA بر پارامترهای عملکردی سلول در شکل ۳ نمایش داده شده است.



شکل ۳: الف تغییرات چگالی نقص کل در مرز CIS/CsFAMA ب تغییرات سطح مقطع به دام‌اندازی الکترون در مرزCIS/CsFAMA

در شکل ۳–الف، با افزایش چگالی نقص کل در این فصل مشترک و عبور از مرز $۱۰^{۱۲}$ بر سانتی متر مربع پارامترهای خروجی دچار افت می‌شوند؛ به‌طوری‌که در چگالی $۱۰^{۱۳}$ بر سانتی متر مربع مقدار V_{oc}به ۰/۷۷ ولت و PCE به ۷/۱۸ درصد کاهش می‌یابد، که نشان‌دهنده افزایش مراکز بازترکیب در اثر تجمع نقص‌هاست. از

سوی دیگر، شکل ۳–ب اثر قدرت به دام‌اندازی این تله‌ها را ارزیابی می‌کند. بر اساس اصول فیزیکی، با حرکت به سمت راست $۱۰^{-۱۴}$ نمودار و کوچک شدن سطح مقطع به دام‌اندازی الکترون‌ها از مرز بر سانتی متر مربع به سمت تله‌های بسیار ضعیف در محدوده $۱۰^{-۱۶}$ بر سانتی متر مربع تا $۱۰^{-۲۰}$ بر سانتی متر مربع ، احتمال انباشتگی حامل‌های بار در این مرز به‌شدت کاهش می‌یابد.



شکل ۴: J-V سلول خورشیدی پروسکایتی در حالت های تجربی، شبیه‌سازی و بهینه‌سازی

منحنی‌های جریان–ولتاژ سلول خورشیدی خروجی از نرم‌افزار SCAPS-1D در سه حالت تجربی، شبیه‌سازی اولیه و بهینه‌سازی نهایی در شکل ۴ مقایسه شده است. در حالت اولیه، انحنای مشخصه J–V نشان‌دهنده وجود مقاومت سری بالا و مقاومت موازی پایینی است که به دلیل حضور مراکز تله و بازترکیب‌های شدید فیزیکی رخ داده و فاکتور پرشدگی دستگاه را محدود کرده است. اما با اعمال همزمان مقادیر بهینه برای کاهش چگالی نقص‌های حجمی لایه جاذب و تله‌های سطحی، تغییر شگرفی در رفتار بارها مشاهده می‌شود. این اصلاح ساختاری در وهله اول باعث بهبود جریان و ولتاژ شده و در نهایت، بازدهی کل یا همان PCE از مقدار اولیه ۸/۱۹ درصد در نمونه شبیه سازی به ۱۴/۵۳ درصد افزایش یافت که توانایی بالای این آرایش فتوولتائیکی را پس از مهار مکانیسم‌های اتلاف اثبات می‌نماید.

نتیجه گیری

مقایسه نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی نقص‌های حجمی و سطحی نشان می‌دهد که نقص‌های داخلی لایه جاذب CsFAMA تأثیر تخریبی به مراتب شدیدتری بر عملکرد فتوولتائیکی سلول دارند. از نظر فیزیکی، افزایش چگالی نقص‌های حجمی باعث ایجاد مراکز بازترکیب شدید در عمق لایه جاذب شده و طول عمر حامل‌ها را پیش از رسیدن به مرزهای استخراج کاهش می‌دهد؛ به همین دلیل، افزایش این نقص‌ها باعث افت شدید عملکرد سلول شده و PCE را به زیر ۲/۵ درصد می‌رساند. این در حالی است که در بخش نقص‌های سطحی, حتی در بحرانی‌ترین حالت تله‌ها در فصل مشترک CIS/CsFAMA ، سلول مقاومت بیشتری نشان داده و PCE آن در مرز ۵ درصد حفظ می‌شود. از سوی دیگر، عدم تأثیرپذیری سلول از تغییرات مرز $CsFAMA/SnO_2$ اثبات می‌کند که تله‌های حجمی لایه جاذب، عامل اصلی و سهم اتلاف واقعی در محدود شدن بازدهی نمونه تجربی به مقدار ۸/۱۶ درصد بوده‌اند. این تحلیل کلیدی نشان می‌دهد که راهبرد اصلی برای جهش بازدهی این سلول، تمرکز بر بهبود کیفیت بلوری و کاهش نقص‌های داخلی لایه جاذب است.

سپاسگزاری

نویسندگان مقاله از جناب آقای دکتر نیما تقوی‌نیا جهت فراهم نمودن امکانات آزمایشگاهی برای پیشبرد بخش تجربی این پژوهش، کمال تشکر و قدردانی را دارند.

مرجع‌ها

[1] Saliba, M., Matsui, T., Seo, J. Y., Domanski, K., Correa-Baena, J. P., Nazeeruddin, M. K., ... & Grätzel, M. (2016). Cesium-containing triple cation perovskite solar cells: improved stability, reproducibility and high efficiency. Energy & environmental science, 9(6), 1989-1997.

[2] Gou, T., Li, Y., Lv, Z., Zhao, M., Dai, J., & Cao, F. (2024). Simulation and optimization of triple cation Perovskite solar cell using SCAPS-1D. *Micro and Nanostructures*, *189*, 207819.

[3] Papadatos, D., Sygkridou, D., & Stathatos, E. (2020). Carbon-based, novel triple cation mesoscopic perovskite solar cell fabricated entirely under ambient air conditions. *Materials Letters*, *268*, 127621.

[4] Xie, H., Yin, X., Liu, J., Guo, Y., Chen, P., Que, W., ... & Gao, B. (2019). Low temperature solution-derived TiO2-SnO2 bilayered electron transport layer for high performance perovskite solar cells. *Applied Surface Science*, *464*, 700-707.

[5] Elmourabit, F., Limouny, L., & Dlimi, S. (2025). Numerical simulation of a triple-cation halide perovskite solar cell achieving over 34% efficiency. *Results in Engineering*, *25*, 103919.

[6] Ruiz-Preciado, M. A., Gota, F., Fassl, P., Hossain, I. M., Singh, R., Laufer, F., ... & Paetzold, U. W. (2022). Monolithic two-terminal perovskite/CIS tandem solar cells with efficiency approaching 25%. *ACS energy letters*, *7*(7), 2273-2281.

مهندسی فصل مشترک لایه انتقال دهنده الکترون/ پروسکایت با استفاده از عامل اصلاح‌کننده سطحی سولفونیک اسیدی برای افزایش بازده سلول‌های خورشیدی پروسکایتی با الکترود کربنی

غیور، رضا*[۱]؛ واحدی، مازیار[۲]؛ قاسمی، فاطمه[۱]؛ تقوی نیا، نیما[۱و۳] *

[۱] مرکز علوم و فناوری نانو، پژوهشکده همگرا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران
[۲] دانشکده علوم و مهندسی مواد، دانشگاه صنعتی شریف، تهران
[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

چکیده

سلول‌های خورشیدی پروسکایتی با الکترود کربنی به دلیل ساختار ساده، هزینه ساخت پایین و پتانسیل مناسب برای تولید مقیاس‌پذیر، از گزینه‌های جذاب در فناوری فتوولتائیک محسوب می‌شوند. با این حال، عملکرد این سلول‌ها به شدت تحت تأثیر کیفیت فصل مشترک لایه انتقال‌دهنده الکترون و لایه پروسکایت قرار دارد. در این پژوهش، از 2-Acrylamido-2-methylpropane sulfonic acid (AMPS) به عنوان یک اصلاح‌کننده سطحی سولفونیک اسیدی برای مهندسی فصل مشترک لایه انتقال دهنده الکترون/پروسکایت استفاده شد. نتایج نشان داد که اصلاح سطحی با AMPS موجب بهبود کیفیت فصل مشترک، تسهیل استخراج الکترون و کاهش تلفات حامل‌های بار می‌شود. در نتیجه، سلول‌های اصلاح‌شده نسبت به نمونه مرجع عملکرد فتوولتائیکی بهتری نشان دادند و بازده تبدیل توان از ۱۵/۸۷ ٪ به ۱۸/۵۶ ٪ افزایش یافت. این نتایج نشان می‌دهد که اصلاح سطحی با AMPS راهکاری ساده و مؤثر برای بهبود کارایی سلول‌های خورشیدی پروسکایتی کربنی است.

واژه های کلیدی: سلول های خورشیدی پروسکایتی، مهندسی فصل مشترک، اصلاح کننده سطحی سولفونیک اسیدی، الکترود کربنی

Interfacial Engineering of Electron Transport Layer/Perovskite Interface Using a Sulfonic Acid Surface Modifier for Enhanced Performance of Carbon-Based Perovskite Solar Cells

Ghayoor, Reza[1*]; Vahedi, Maziar[2]; Ghasemi, Fatemeh[1]; Taghavinia, Nima[1,3*]

[1] *Center for Nanoscience and Nanotechnology, Institute for Convergence Science & Technology, Sharif University of Technology, Tehran*
[2] *Department of Materials Science and Engineering, Sharif University of Technology, Tehran*
[3] *Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran*

Abstract

Carbon-based perovskite solar cells have attracted considerable attention in photovoltaic technology due to their simple architecture, low fabrication cost, and promising potential for scalable production. However, the performance of these devices is strongly influenced by the quality of the interface between the electron transport layer and the perovskite absorber. In this study, 2-acrylamido-2-methylpropane sulfonic acid (AMPS) was employed as a sulfonic acid-based surface modifier to engineer the electron transport layer/perovskite interface. The results showed that AMPS surface treatment improved the interfacial quality, facilitated electron extraction, and reduced charge-carrier losses. Consequently, the modified devices exhibited enhanced photovoltaic performance compared with the reference cells, with the power conversion efficiency increasing from 15.87% to 18.56%. These findings indicate that AMPS surface modification is a simple and effective strategy for improving the efficiency of carbon-based perovskite solar cells.

***Keywords**: Perovskite Solar Cells, Interfacial Engineering, Sulfonic Acid Modifier, Carbon Electrode*

مقدمه

افزایش تقاضای جهانی برای منابع انرژی پاک و تجدیدپذیر، توسعه فناوری‌های فتوولتائیک با راندمان بالا و هزینه تولید پایین را به یکی از مهم‌ترین حوزه‌های پژوهشی در دهه اخیر تبدیل کرده است. در این میان، سلول‌های خورشیدی پروسکایتی به دلیل ضریب جذب نوری بالا، طول نفوذ زیاد حامل‌ها، قابلیت تنظیم گاف انرژی و امکان ساخت به روش‌های محلولی کم‌هزینه، به عنوان یکی از امیدبخش‌ترین نسل‌های سلول‌های خورشیدی مطرح شده‌اند[۱]. در ساختارهای متداول nip این افزاره ها، لایه انتقال‌دهنده الکترون [1] نقش کلیدی در استخراج انتخابی الکترون‌ها، جلوگیری از انتقال حفره‌ها و کاهش بازترکیب حامل‌های بار ایفا می‌کند[۲]. در میان مواد مختلف مورد استفاده به عنوان ETL، دی‌اکسید قلع (SnO_2) به دلیل تحرک الکترونی بالا، گاف انرژی وسیع، شفافیت نوری مناسب، فرآیندپذیری در دمای پایین و هم‌ترازی مطلوب ترازهای انرژی با لایه پروسکایت، به پرکاربردترین لایه انتقال‌دهنده الکترون در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی تبدیل شده است. علاوه بر این، SnO_2 در مقایسه با TiO_2 از پایداری نوری بالاتری برخوردار بوده و مشکلات ناشی از تخریب تحت تابش فرابنفش را تا حد زیادی کاهش می‌دهد[۲]. با وجود مزایای متعدد SnO_2، وجود نقص‌های ذاتی نظیر جای‌خالی‌های اکسیژن، گروه‌های هیدروکسیل سطحی و تله‌های الکترونی در سطح این لایه، همچنان یکی از عوامل اصلی محدودکننده عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایتی محسوب می‌شود. این نقص‌ها می‌توانند موجب افزایش بازترکیب غیرتابشی، کاهش ولتاژ مدار باز و در نهایت کاهش راندمان تبدیل توان شوند. مطالعات اخیر نشان داده‌اند که بخش عمده‌ای از تلفات انرژی در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی پیشرفته نه در حجم لایه پروسکایت، بلکه در فصل مشترک‌های میان پروسکایت و لایه‌های انتقال بار رخ می‌دهد[۳]. بنابراین کنترل و مهندسی این فصل مشترک‌ها یکی از مؤثرترین راهکارهای افزایش بازده و پایداری دستگاه به شمار می‌رود. در سال‌های اخیر، مهندسی فصل مشترک از طریق استفاده از مولکول‌های عاملی، لایه‌های خودآرا و ترکیبات آلی اصلاح‌کننده سطح به عنوان یک راهبرد مؤثر برای کاهش چگالی نقص‌ها و بهبود انتقال بار مورد توجه گسترده قرار گرفته است[۴]. به ویژه ترکیبات دارای گروه‌های عاملی اسیدی نظیر کربوکسیلیک اسید، فسفونیک اسید و سولفونیک اسید به دلیل توانایی برقراری برهم‌کنش شیمیایی قوی با سطح SnO_2 و همچنین غیرفعال‌سازی مراکز نقص در لایه پروسکایت، نتایج بسیار امیدوارکننده‌ای ارائه کرده‌اند. گزارش‌های اخیر نشان داده‌اند که گروه‌های سولفونیک اسیدی می‌توانند با اصلاح ترازهای انرژی، افزایش استخراج بار، بهبود رشد بلوری پروسکایت و کاهش بازترکیب غیرتابشی، عملکرد و پایداری سلول‌های خورشیدی پروسکایتی را به طور قابل توجهی ارتقا دهند[۵]. در این پژوهش، به منظور بهبود کیفیت فصل مشترک میان لایه انتقال‌دهنده الکترون SnO_2 و لایه جاذب پروسکایت، از یک عامل اصلاح‌کننده سطحی مبتنی بر گروه سولفونیک اسید با نام ۱ آمیدو-۲-متیل پروپان سولفونیک اسید (AMPS) استفاده شده است. انتظار می‌رود حضور این اصلاح‌کننده از طریق غیرفعال‌سازی نقص‌های سطحی، بهبود هم‌ترازی ترازهای انرژی، کاهش بازترکیب غیرتابشی و تسهیل استخراج الکترون‌ها، عملکرد فتوولتائیک سلول‌های خورشیدی پروسکایتی با الکترود کربنی را ارتقا دهد.

مواد و روش ها

زیرلایه‌های ITO ابتدا با استفاده از حمام اولتراسونیک و به ترتیب در محلول شوینده، آب دیونیزه (DI) و اتانول شسته شدند تا هرگونه آلودگی سطحی حذف شود. سپس لایه SnO_2 به روش لایه نشانی چرخشی [2] روی زیرلایه ITO با سرعت ۳۰۰۰ rpm به مدت ۳۰ ثانیه لایه نشانی شد. پس از لایه‌نشانی، نمونه‌ها به مدت ۳۰ دقیقه تحت عملیات حرارتی با دمای ۱۸۰ درجه سانتی گراد قرار گرفتند. قبل از اعمال لایه بین سطحی AMPS، زیرلایه ها ۱۰ دقیقه تحت تابش UV-Ozone قرار گرفتند تا سطح لایه فعال و هیدروفیلیزه شود. عامل اصلاح‌کننده سطحی سولفونیک اسیدی، با غلظت ۲ mg/mL با حلال آب DI تهیه شد (AMPS2) و بر

[1] Electron Transport Layer, ETL

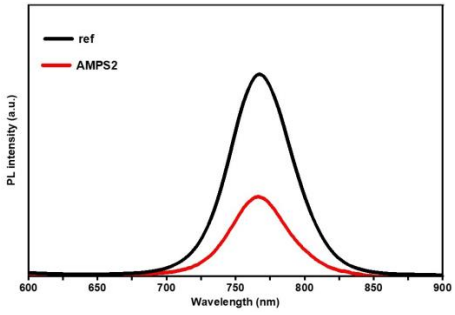
[2] Spin coating

روی سطح لایهSnO_2 با سرعت rpm ۴۰۰۰، به مدت ۳۰ ثانیه لایه نشانی شد. سپس نمونه‌ها به مدت ۱۰ دقیقه در دمای ۱۰۰°C آنیل شدند تا تثبیت شیمیایی و چسبندگی سطحی حاصل شود. لایه جاذب پروسکایت با فرمول $Cs_{0.08}FA_{0.8}MA_{0.12}Pb(I_{0.88}Br_{0.12})_3$ به روش لایه نشانی چرخشی دو مرحله‌ای روی ETL آماده شد. مرحله اول با سرعت rpm ۱۰۰۰ به مدت ۱۰ ثانیه و مرحله دوم با سرعت rpm ۵۰۰۰ به مدت ۲۰ ثانیه انجام گرفت. پس از لایه نشانی، لایه پروسکایت به مدت یک ساعت در دمای ۱۰۰°C آنیل شد تا کریستالیزاسیون کامل و تشکیل فیلم یکپارچه حاصل شود. برای لایه انتقال‌دهنده حفره، محلول $CuInS_2$ به روش لایه نشانی چرخشی با سرعت rpm ۲۰۰۰، ۳۰ ثانیه لایه نشانی شد و سپس به مدت ۱۰ دقیقه در دمای ۱۰۰ °C آنیل گردید تا فیلم یکنواخت و چسبنده تشکیل شود. در نهایت، الکترود کربنی با استفاده از روش بلید لایه‌نشانی شد و نمونه‌ها برای ۳۰ دقیقه در دمای ۷۰°C آنیل گردیدند تا لایه نهایی تثبیت شود.

سلول‌های ساخته‌شده با استفاده از شبیه‌ساز خورشیدی AM 1.5G و چگالی توان mW/cm^2 ۱۰۰ مورد اندازه‌گیری J–V قرار گرفتند تا عملکرد سلول ها مشخص شود.

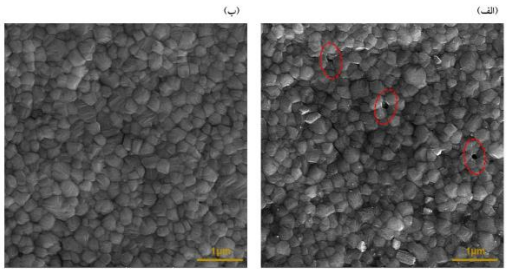
نتایج و بحث

برای بررسی اثر اصلاح سطحی بر انتقال بار در فصل مشترک ETL/پروسکایت، طیف فوتولومینسانس حالت پایا فیلم‌های پروسکایت اندازه‌گیری شد. همان‌طور که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، شدت PL نمونه اصلاح‌شده با AMPS نسبت به نمونه مرجع کاهش یافته است. با توجه به اینکه کاهش شدت PL حالت پایا لزوما به معنای کاهش بازترکیب غیرتابشی نیست، این رفتار در ساختار ETL/پروسکایت می‌تواند به خاموشی PL ناشی از انتقال و استخراج مؤثرتر الکترون‌ها از پروسکایت به لایه SnO_2 اصلاح‌شده نسبت داده شود. از این رو، داده‌های PL بیانگر بهبود فرآیند جداسازی و استخراج بار در فصل مشترک هستند.



شکل ۱: طیف‌های فوتولومینسانس نمونه مرجع و نمونه اصلاح‌شده ETL با AMPS.

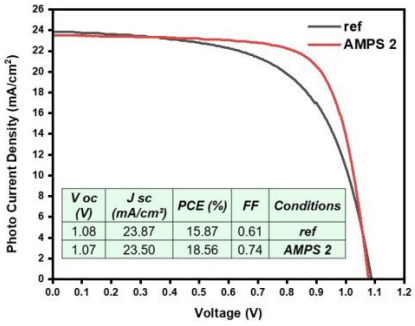
برای بررسی اثر اصلاح سطحی لایه انتقال‌دهنده الکترون بر مورفولوژی فیلم پروسکایت، تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) سطحی نمونه مرجع و نمونه اصلاح‌شده با AMPS مورد بررسی قرار گرفت. همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، فیلم پروسکایت در نمونه مرجع دارای مورفولوژی نسبتا ناهمگن بوده و سوراخ هایی در سطح آن قابل مشاهده است (نواحی مشخص شده). در مقابل، نمونه اصلاح‌شده با AMPS سطحی متراکم‌تر و یکنواخت‌تر نشان می‌دهد. در این نمونه، پوشش سطحی پیوسته‌تر بوده و تعداد نواحی ناقص یا حفره‌مانند کاهش یافته است. به نظر می‌رسد که فرآیند جوانه‌زنی و رشد لایه پروسکایت بر روی سطحSnO_2 اصلاح‌شده بهبود یافته است. این بهبود مورفولوژی می‌تواند ناشی از حضور گروه‌های عاملی قطبی در مولکول AMPS باشد که با سطح SnO_2 برهم‌کنش کرده و انرژی سطحی و کیفیت فصل مشترکETL/پروسکایت را بهبود می‌دهد.



شکل ۲: تصاویر SEM سطح پروسکایت لایه نشانی شده بر روی ETL(الف) اصلاح نشده و (ب) اصلاح شده با AMPS.

به‌منظور ارزیابی اثر اصلاح سطح لایه انتقال دهنده الکترون مبتنی بر SnO_2، محلول AMPS با غلظت $mg\ mL^{-1}$ ۲ بر روی سطح

SnO_2 اعمال شد و عملکرد فتوولتائیکی سلول‌های خورشیدی از طریق اندازه‌گیری منحنی‌های چگالی جریان–ولتاژ (J–V) مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاصل از نمونه مرجع (ref) و نمونه اصلاح‌شده با AMPS در شکل نشان داده شده است. مطابق داده‌های استخراج‌شده از منحنی‌های J–V (شکل ۳)، استفاده از AMPS موجب بهبود قابل توجه عملکرد دستگاه شد. در نمونه مرجع، مقادیر V_{oc} = 1.08 V، J_{sc} = 23.87 mA cm^{-2}، FF = 0.61 و PCE = 15.87% به دست آمد. پس از اصلاح سطح SnO_2با AMPS، اگرچه ولتاژ مدار باز تغییر محسوسی نشان نداد و مقدار آن در حدود ۱/۰۷ V باقی ماند، اما بازده تبدیل توان به ۱۸/۵۶ ٪ افزایش یافت که بیانگر بهبود حدود ۱۷٪ نسبت به نمونه مرجع است. مهم‌ترین عامل افزایش بازده، بهبود چشمگیر ضریب پرشدگی[3] از ۰/۶۱ به ۰/۷۴ بوده است. در مقابل، چگالی جریان اتصال کوتاه تنها تغییر اندکی از ۲۳/۸۷ به mA cm^{-2} ۲۳/۵۰ نشان داد. همچنین مقدار تقریبا ثابت V_{oc} بیان می‌کند که ترازهای انرژی و فرآیندهای تعیین‌کننده ولتاژ مدار باز تحت تاثیر چشمگیری قرار نگرفته‌اند. بنابراین، افزایش بازده عمدتا ناشی از کاهش تلفات مقاومتی و غیرتابشی در مرز مشترک SnO_2/پروسکایت است.



شکل ۳: منحنی‌های J–V و پارامترهای فتوولتائیکی استخراج‌شده برای سلول‌های پروسکایتی مبتنی بر SnO_2 مرجع و نمونه اصلاح‌شده با AMPS.

از آنجا که مولکول AMPS دارای گروه‌های عاملی قطبی نظیر گروه سولفونیک ($-SO_3H$) و آمیدی است، این گروه‌ها می‌توانند با نقص‌های سطحی موجود در SnO_2 برهم‌کنش کرده و بخشی از مراکز تله الکترونی را غیرفعال کنند. نمونه اصلاح‌شده در ناحیه نزدیک به نقطه توان بیشینه، افت جریان کمتری را نشان داده و شکل مربعی‌تری نسبت به نمونه مرجع دارد که مشخصه افزایش FF و بهبود کیفیت استخراج بار است. علاوه بر این، حضور گروه‌های عاملی قطبی AMPS می‌تواند موجب اصلاح انرژی سطحی SnO_2 و بهبود فرآیند جوانه‌زنی و رشد لایه پروسکایت بر روی ETL شود. در چنین شرایطی انتظار می‌رود فیلم پروسکایتی با یکنواختی بیشتر، پوشش سطحی بهتر و تعداد کمتری از مرز دانه‌های معیوب تشکیل شود. کاهش نقص‌های ساختاری در ناحیه نزدیک به فصل مشترک، مسیرهای بازترکیب را محدود کرده و انتقال بار را کارآمدتر می‌کند.

نتیجه گیری

در این پژوهش، اثر اصلاح سطح لایه انتقال الکترون SnO_2 با استفاده از افزودنی AMPS با غلظت ۲ mg mL^{-1} بر عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایتی با الکترود کربنی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج اندازه‌گیری‌های J–V نشان داد که اصلاح سطح SnO_2 منجر به بهبود چشمگیر عملکرد فتوولتائیکی دستگاه شده است، به‌طوری‌که بازده تبدیل توان از ۱۵/۸۷٪ در نمونه مرجع به ۱۸/۵۶٪ در نمونه اصلاح‌شده افزایش یافت. تحلیل نتایج بیانگر آن است که AMPS احتمالا از طریق غیرفعال‌سازی نقص‌های سطحی SnO_2، کاهش مراکز بازترکیب در فصل مشترک ETL / پروسکایت و بهبود فرآیند استخراج حامل‌های بار، موجب کاهش تلفات الکتریکی دستگاه شده است.

مرجع‌ها

[1] Y.Y.& G.L. Yu Han, Jiehao Fu, Zhiwei Ren, Jiangsheng Yu, Qiong Liang, Zhihang Xu, Xiyun Xie, Dongyang Li, Ruijie Ma, Menghua Cao, Yonggui Sun, Chen Yang, Jiaqi He, Xiaoming Chang, Kuan Liu, Patrick W. K. Fong, Jiaming Huang, Heng Liu, Zhike Liu, Dongfang Xu, Lei Che, *Nat. Energy* **10**, (2025).
[2] Q. Jiang, X. Zhang, and J. You, *Small* **14**, (2018).
[3] B. Thiyagarajan and K. Murugan, *Semiconductors* **60**, 555 (2026).
[4] Y. Li, D. Yao, Z. Tang, B. Jiang, C. Li, Y. Gao, N. Tian, J. Wang, G. Zheng, and F. Long, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **16**, 9388 (2024).
[5] H. Aziguli, T. Lu, H. Zhao, M. Liu, R. Li, Q. Wu, Y. Liu, and J. Hou, *Sol. RRL* **8**, (2024).

[3] Fill Factor

اندرکنش نیترات سرب با نانوذرات طلا کلوئیدی : پاسخ پلاسمونیک و جذب نوری غیرخطی

الناز زحمتکش[۱] ؛ سهیل شریفی[۱] ؛ حسین احمدزاده[۲]
[۱] دانشکده علوم دانشگاه فردوسی مشهد ، مشهد
[۲] گروه شیمی ،دانشکده علوم دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

چکیده

در این پژوهش، رفتار جذب خطی و غیرخطی نانوذرات طلا در حضور یون‌های فلزی نیترات سرب مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که در غلظت‌های کمتر از 0.5μM، تغییرات قابل توجهی در پاسخ جذب غیرخطی مشاهده می‌شود، در حالی که جذب خطی در همین بازه غلظتی تقریباً بدون تغییر باقی می‌ماند. این موضوع بیانگر حساسیت بالاتر پاسخ‌های اپتیک غیرخطی نسبت به برهم‌کنش با نانوذره است. همچنین اندازه‌گیری جذب غیرخطی می‌تواند به عنوان یک روش آشکارسازی حساس و کارآمد برای شناسایی یون‌های فلزی در غلظت‌های بسیار پایین مورد استفاده قرار گیرد.

واژه های کلیدی: *نانوذره طلا، سنسور، فلزات سنگین، محیط آبی، خاصیت اپتیکی، ضریب جذب غیرخطی*

Interaction of lead nitrate with colloidal gold nanoparticles: Plasmonic response and nonlinear optical absorption

Elnaz Zahmatkesh[1]; Soheil Sharifi[1] ; Hossein Ahmadzadeh [2]

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

Abstract

In this study, the linear and nonlinear absorption behavior of gold nanoparticles in the presence of lead nitrate metal ions was investigated. The results showed that at concentrations below 0.5μM, significant changes in the nonlinear absorption response are observed, while the linear absorption remains almost unchanged in the same concentration range. This indicates a higher sensitivity of nonlinear optical responses to the interaction with nanoparticles. Also, nonlinear absorption measurement can be used as a sensitive and efficient detection method for the identification of metal ions at very low concentrations.

***Keywords**: Gold nanoparticles, sensor, Heavy metals, Aqueous environment, Optical Properties, Nonlinear absorption coefficient*

مقدمه

یون‌های فلزات سنگین، یکی از آلاینده‌های اصلی محیط زیست، ویژگی های تجمع غیر قابل تجزیه و زنجیره زیستی را از خود نشان می‌دهند، که به محیط زیست آسیب می‌رسانند. همواره محققان به دنبال روشهایی برای آشکارسازی در غلظتهای پایینتر با حساسیت بالا هستند. این مقاله، حسگری مبتنی بر روشهای نوری را برای تشخیص یون های فلزات سنگین در غلظتهای پایین ارائه می دهد. پیشرفت در تحقیقات در مورد دستگاه های حسگر مبتنی بر فلورسانس، رنگسنجی، افزایش رامان سطحی و رزونانس پلاسمون برجسته شده است [2]. در سال‌های اخیر، دانشمندان عمدتاً بر پیشرفت حسگرهای مبتنی به نانوذرات طلا برای سنجش فلزات سنگین در نمونه‌های آب تمرکز کرده‌اند. اصطلاح "حسگر" مجموعه‌ای از ابزار ها را توصیف می‌کند که به تغییرات شیمیایی یا فیزیکی خاص در محیط اطراف خود واکنش نشان می‌دهند. اساساً، اصل عملکرد حسگر مبتنی بر نانوذرات طلا رنگ سنجی به فعالیت نوری وابسته به اثرات پلاسمونیک بستگی دارد[1] .

ویژگی های نوری نانوذرات طلا ناشی از پدیده خاصی به نام SPR است. به عنوان مثال، هنگامی که اندازه نانوذرات طلا قرمز رنگ در یک محلول کلوئیدی افزایش می‌یابد، تغییر در پیک SPR به سمت طول موج بزرگتر (انتقال به قرمز) مشاهده شد و با ظهور محلول آبی رنگ مشخص می‌شود. در نتیجه، اندازه ذرات بر موقعیت پیک SPR تأثیر می‌گذارد.

از سوی دیگر، حوزه اپتیک غیرخطی در پیشرفت‌های فناوری های فوتونیک نقش مهمی داشته و طیف وسیعی از کاربردها را تسهیل کرده است. برهمکنش بین ماده و نور شدید منجر به اثرات نوری غیرخطی، مانند شکست و جذب غیرخطی می شود. تحقیقات در طول چند دهه گذشته بر طراحی و سنتز طیف متنوعی از مواد با هدف بهبود ضرایب نوری غیرخطی متمرکز شده است. این شامل مولکول‌ها و پلیمرهای آلی، پلیمر های الکترواپتیکی و نانوذرات فلزی می‌شود. در میان نانوذرات فلزی، نانوذرات طلا به دلیل پایداری، زیست‌سازگاری، سهولت سنتز و پاسخ رزونانس پلاسمون سطحی موضعی (LSPR) به ویژه قابل توجه هستند[3]. LSPR پدیده‌ای است که زمانی رخ می‌دهد که الکترون‌های رسانش روی سطح نانوذرات فلزی با نور فرودی در طول موج های خاص، تشدید می شوند. این تشدید منجر به افزایش شدید میدان الکترومغناطیسی محلی در اطراف نانوذرات می‌شود که منجر به اثرات نوری خطی و غیرخطی قابل توجه می‌شود[3].

در این پژوهش، محلول نانوذرات طلا تهیه و اثر حضور یون سرب بر ویژگی های اپتیکی آن مورد بررسی قرار گرفت. بدین منظور، محلول های نیترات سرب با غلظت های مختلف به محلول نانوذرت طلا افزوده شد تا برهمکنش یون های فلزی با نانوذرات طلا و تغییرات ایجادشده در پاسخ اپتیکی سامانه مورد ارزیابی قرار گیرد. سپس نمونه های تهیه شده توسط طیفسنجی UV-VIS و دستگاه روبشگر-زد مورد مطالعه قرار گرفتند. نتایج اولیه نشان داد که حضور یون سرب موجب تغییر در رفتار اپتیکی و ویژگی های جذب نانوذرات طلا شده که می‌تواند ناشی از تغییرات پلاسمون سطحی موضعی و برهمکنش بین یون های فلزی و سطح نانوذرات باشد. این نتایج بیانگر پتانسیل نانوذرات طلا در توسعه حسگرهای اپتیکی حساس جهت آشکارسازی یون های فلزی سنگین در محیطهای آبی است.

مواد و روش ها

ابتدا نانوذره طلا با اندازه 20-25 نانومتر و غلظت 100ppm از شرکت Armina Engineering Co.، تهران و نمک نیترات سرب مورد استفاده از شرکت BETACELL، تهیه شدند.

در این مطالعه، برای بررسی پاسخ نوری نانوذرات طلا با غلظت 36ppm در حضور یون‌های فلزات سنگین، از محلول های آبی حاوی نیترات سرب با غلظت های 250µM و 50µM و 5µM و 0.5µM به‌عنوان نمونه هدف استفاده شد. محلول های اولیه با استفاده از نیترات سرب و آب دیونیزه تهیه شده و سپس در غلظت‌های مختلف برای انجام آزمون‌های طیفی رقیق‌سازی شدند. به‌عنوان محیط فعال نوری، از نانوذرات طلا در محیط آبی استفاده گردید که نقش اصلی در ایجاد پاسخ پلاسمونی و تغییر درسیگنال نوری را بر عهده دارد.

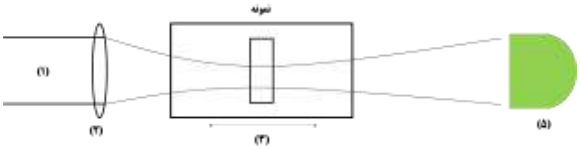
برای بررسی ویژگی‌های اپتیکی نمونه‌ها، از سه روش اصلی استفاده شد. ابتدا برای بررسی تغییرات طیف جذب نوری و موقعیت پیک پلاسمونی نانوذرات در حضور یون های سرب از دستگاه اسپکتروفتومتر با مشخصات Nano Ar 2015 استفاده شده است.

همچنین برای بررسی خواص جذب نوری غیرخطی نمونه‌ها، از دستگاه روبشگر-زد استفاده شد. در این آزمایش، لیزر پیوسته با طول موج 532nm و توان خروجی80mW به‌عنوان منبع نوری مورد استفاده قرار گرفت. پرتو لیزر پس از عبور از عدسی با فاصله کانونی 5cm بر روی نمونه متمرکز شد و نمونه در راستای محور انتشار پرتو (محور Z) جابه‌جا گردید.

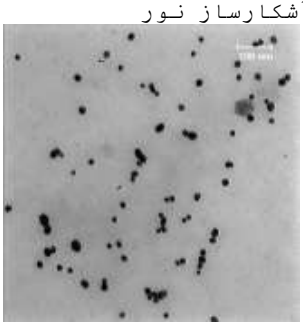
تغییرات شدت عبوری توسط آشکارساز نوری ثبت و نمودار های دریچه باز (Aperture Open) مورد تحلیل قرار گرفت. تمامی اندازه‌گیری‌ها در دمای محیط انجام شد.
علاوه بر این، برای بررسی مورفولوژی، اندازه و توزیع نانوذرات طلا، از دستگاه میکروسکوپ الکترونی عبوریTEM ساخت شرکت ZEISS آلمان مدل ABLE0912 استفاده شد.
تمام آزمایش‌ها در شرایط دمای محیط و با استفاده از آب دیونیزه به‌عنوان حلال انجام شدند تا اثرات محیطی به حداقل برسد.

نتایج و بحث

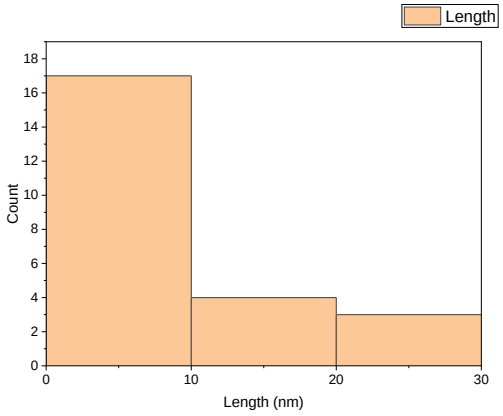
شکل (1) شماتیک دستگاه روبشگر-زد را نشان می دهد که از یک لیزرپیوسته با طول موج 532nm، یک عدسی بافاصله کانون 5cm ، یک جابجاگر نمونه، دیافراگم قابل تنظیم و یک آشکارساز نور تشکیل شده است.
شکل (2) تصویر TEM نانوذرات طلا نشان‌دهنده توزیع نسبتاً یکنواخت ذرات با اندازه نانومتری و شکل عمدتاً کروی است که بیانگر موفقیت فرآیند سنتز در کنترل مورفولوژی می‌باشد.
شکل (3) توزیع اندازه نانوذرات طلا از تصاویر TEM با استفاده از نرم‌افزار ImageJ استخراج شد. تابع توزیع اندازه ذرات در نرم‌افزار OriginPro رسم و تحلیل شد.
شکل (4) نمودارهای طیف جذب نانوذره طلا با غلظت نانوذره 36ppm در غلظتهای مختلف نمک نیترات سرب را در محدوده 200nm تا 800nm نشان می دهد.
شکل (5) نشان دهنده منحنی نرمال شده، دریچه باز دستگاه روبشگر-زد می باشد و مقدار ضریب جذب غیرخطی (β) محاسبه و در جدول شماره (1) قرار گرفته است.



شکل 1. طرح واره دستگاه روبشگر-زد: 1- لیزرپیوسته با طول موج 532nm 2- عدسی بافاصله کانون 5 سانتیمتر 3- جابجاگر نمونه 4- آشکارساز نور

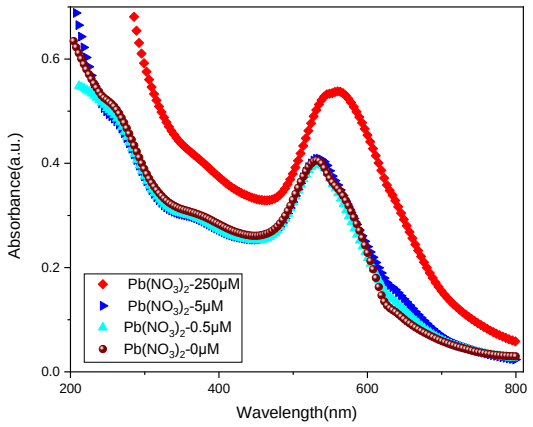


شکل 2: تصویر TEM نانوذرات طلا



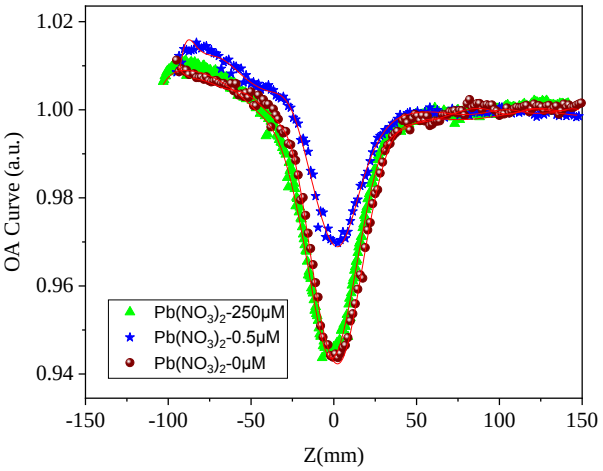
شکل3: تابع توزیع اندازه نانوذرات طلا استخراج‌شده از تصاویر TEM.

تعداد ذرات بررسی شده N=25 است و طبق نتایج: میانگین اندازه 11.79nm، انحراف معیار 10.88nm، کمینه 2.59nm و بیشینه 53.8nm بدست آمده است.



شکل 4: طیف جذب نانوذره طلا با غلظت 36ppm در غلظتهای مختلف نمک نیترات سرب 250μM و 50μM و 5μM و 0.5μM.

در این نمودار خاصیت پیک پلاسمونیک در 250μM تغییر کرده، هم پهن شدگی و هم جا به جایی را مشاهده می کنیم و افزایش جذب اتفاق افتاده است.



شکل 5: نمودارداریچه باز دستگاه روبشگر-زد نانوذره طلا در غلظت نانوذره 36ppm در غلظتهای مختلف نمک نیترات سرب 250μM و 0.5μM.

منحنی قرمز رنگ مربوط به نانوذره طلا با غلظت 36ppm می باشد، منحنی سبز رنگ مربوط به نمک نیترات سرب با غلظت 250μM می باشد و منحنی آبی رنگ مربوط به نمک نیترات سرب با غلظت 0.5μM می باشد. خطوط نرمال شده به رنگ قرمز مربوط به هر منحنی به رنگ قرمز رسم شده است.قابل توجه می باشد که درغلظت 250μM نمک نیترات سرب مقدار نمودار دریچه باز با نمودار مربوط به نانذرات خیلی نزدیک می باشد. پیشنهاد میدهیم که در غلظت پایین اثرات پلاسمونیک میتواند مطرح باشد اما در غلظتهای بالاتر عواملی مانند پراکندگی بر نمودار دریچه باز تاثیر می گذارد.

جدول 1: مقدار ضریب جذب غیر خطی و ضریب جذب نوری

نام محلول	$10^{-5} cm/W$	$\alpha - 532nm$
AuNPs-36ppm	5.8	0.409
AuNPs-36ppm-PbNi-0.25mM	5.6	0.537
AuNPs-36ppm-PbNi-0.0005mM	4.05	0.40

نتیجه گیری

نتایج بهدستآمده نشان میدهد که حضور یونهای سرب تأثیر قابلتوجهی بر پاسخ نوری غیرخطی نانوذرات طلا دارد. در طیف جذب، مشاهده پهنشدگی و جابهجایی پیک پلاسمونی همراه با افزایش شدت جذب در غلظت بالاتر نیترات سرب، بیانگر تغییر در برهمکنشهای بینذرهای است که به تقویت پدیده LSPRمنجر شده است. همچنین نتایج آزمایش روبشگر-زد در حالت دریچه باز نشاندهنده تغییر در رفتار جذب غیرخطی سیستم در حضور یونهای سرب بوده و وابستگی پاسخ غیرخطی به غلظت یون فلزی را تأیید میکند.

بنابراین، اندازهگیری جذب غیرخطی میتواند به عنوان یک روش آشکارسازی حساس و کارآمد برای شناسایی یونهای فلزی در غلظتهای بسیار پایین مورد استفاده قرار گیرد. این ویژگی، ظرفیت بالقوه نانوذرات را برای کاربرد در حسگرهای اپتیکی با حد تشخیص غلظت پایین برجسته میسازد.

مرجع ها

1. Gupta, S., George, N., Yadav, M., & Dwibedi, V. (2023). Optical detection of heavy metal contaminants: Advancements with bio-functionalized gold nanoparticles in environmental monitoring. Chemical Papers. Advance online publication. https://doi.org/10.1007/s11696-023-03145-z
2. Hu, T., Lai, Q., Fan, W., Zhang, Y., & Liu, Z. (2023). Advances in Portable Heavy Metal Ion Sensors. Sensors, 23(25), 4125. https://doi.org/10.3390/s23084125
3. Wang, S., Gharbi, M. A., & Yelleswarapu, C. S. (n.d.). Dynamic Control of Third-order Nonlinear Optical Properties of Gold

Nanoparticle/Liquid Crystal Composites under External Electric Fields. University of Massachusetts Boston.

بررسی ضریب جذب غیر خطی و پراکندگی نور شبه الاستیک درنانولوله‌های کربنی چنددیواره

فائزه قاسمی[۱] ؛ سهیل شریفی[۱]؛ میرزا محمدرضا شریف مقدم[۲]؛ آرمین ایمان پرست[۳]

[۱]گروه فیزیک،دانشکده علوم دانشگاه فردوسی مشهد ، مشهد
[۲] گروه زیست،دانشکده علوم دانشگاه فردوسی مشهد،مشهد
[۳] گروه فیزیک پزشکی دانشگاه علوم پزشکی مشهد،مشهد

چکیده

رفتار نوری غیرخطی، طیف‌های جذبی و پراکندگی نور شبه الاستیک نانولوله‌های کربنی چندجداره در محلول‌های الکل و هگزان با استفاده از روش‌های Z-scan، اسپکتروفتومتری و اسپکتروفلورومتری مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. نشان داده شده است که چنین نانولوله‌هایی مقادیر بالایی از ضریب جذب غیرخطی در حدود ۲,٤ × ۱۰-۴ cm/W برای مخلوط الکل و هگزان دارند. به دلیل کاهش ثابت دی‌الکتریک مؤثر محیط با افزایش مقدار هگزان، میدان الکتریکی محلی در نانولوله‌ها افزایش می‌یابد و در نتیجه، ضریب جذب غیرخطی ۷٪ افزایش می‌یابد. همچنین، تغییر نسبت حلال بر ضریب شکست محیط و کنتراست ضریب شکست نانولوله‌ها و حلال تأثیر می‌گذارد و بنابراین، شدت پراکندگی نور شبه الاستیک ٤۲٪ کاهش می‌یابد.

واژه های کلیدی: اپتیک غیرخطی، روبشگر زد ،ضریب جذب،نانولوله های کربنی چند دیواره .

Investigation of nonlinear absorption coefficient and quasi-elastic light scattering in multi-walled carbon nanotubes

Faezeh Ghasemi ; Soheil Sharifi [1] ,Mirza Mohammadreza Sharif Moghadam[2],Armin Imanparast[3]

[1] Department of Physics, University of Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran
[2]Department of Biology, University of Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran
[3] Department of Medical Physics, Mashhad University of Medical Sciences

Abstract

The nonlinear optical behavior, absorption spectra, and quasi-elastic light scattering of multiwalled carbon nanotubes in alcohol and hexane solutions have been studied using Z-scan, spectrophotometry, and spectrofluorometric methods. It has been shown that such nanotubes have high values of the nonlinear absorption coefficient about 2.4 × 10^{-4} cm/W for the mixture of alcohol and hexane. Due to the decrease in the effective dielectric constant of the medium with the increase in the amount of hexane, the local electric field at nanotubes is increased, and as a result, the nonlinear absorption coefficient is increased by 7%. Also, the change in solvent ratio affects the refractive index of the medium and the contrast in refractive index of nanotubes and the solvent, and thus, there is a decrease in intensity of quasi-elastic light scattering by 42%.

***Keywords**: Nonlinear optics, Z-scan, absorption coefficient, Multi-Walled Carbon nanotubes.*

مقدمه

نانولوله‌های کربنی برای اولین بار در سال ۱۹۹۱ کشف شدند. سپس ایجیما و ایچیهاشی در سال ۱۹۹۳، سنتز نانولوله‌های کربنی تکدیواره با قطر ۱ نانومتر را گزارش کردند [۱، ۲]. این نانولوله‌ها از ورقه‌های گرافیتی تشکیل شده‌اند که لایه‌های گرافیتی به‌صورت ساختارهای ششضلعی لوله‌شده ظاهر می‌شوند و اتم‌های کربن در رأس این ششضلعی‌ها قرار می‌گیرند. بسته

به تعداد لایه‌های کربن، نانولوله‌های کربنی می‌توانند از نوع تک‌دیواره (SWCNT) یا چنددیواره (MWCNT) باشند. نانولوله‌های کربنی خواص ویژه‌ای نظیر الاستیسیته بالا، رسانایی حرارتی زیاد، چگالی کم و بی‌اثری شیمیایی نسبی از خود نشان می‌دهند. به‌دلیل این خواص منحصربه‌فرد، نانولوله‌های کربنی نقش مهمی در زمینه‌های فناوری نانو، الکترونیک، اپتیک و علم مواد ایفا کرده‌اند [۳]. همچنین، این نانوساختارها به‌دلیل ساختار و قابلیت کنترل‌پذیری از طریق تغییر قطر، رفتارهای اپتیکی منحصربه‌فردی از جمله پاسخ‌های غیرخطی، پراکندگی و جذب نور از خود نشان می‌دهند.

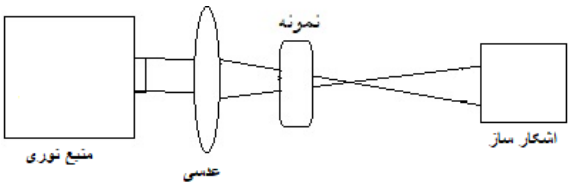
روش روبشگر-زد (Z-scan) ساده‌ترین روش برای اندازه‌گیری ضریب جذب غیرخطی است. دکتر شیخ‌بهایی و همکاران در سال ۱۹۸۹ این روش را معرفی کردند [۴]. در این مقاله، به‌منظور بررسی ضریب جذب غیرخطی نانولوله‌های کربنی چنددیواره در ترکیب با الکل و هگزان، از این روش استفاده شده است.

مواد و روش ها

نمونه‌ی نانولوله‌های کربنی چنددیواره با مشخصات Leaf, Houston, TX 77084, USA (کد ۳۳۰۲ Twing) خریداری شده است. این ترکیبات در محلول‌های غیرقطبی به‌راحتی حل شده و برای مدت زمان زیادی پایدار باقی می‌مانند. در این تحقیق، نانولوله‌های کربنی چنددیواره با درصد وزنی ۰٫۰۱٪ در محلول‌های الکل ۱۰۰٪ و الکل ۲۰٪-هگزان ۸۰٪ حل شده‌اند.

در این آزمایش از چهار دستگاه اندازه‌گیری شامل TEM، روبشگر-زد (Z-scan)، اسپکتروفتومتر و اسپکتروفلورومتر (spectrofluorometer) استفاده شده است. نمونه‌ی پودری MWCNT با ضخامت ۱۰ تا ۲۰ نانومتر، به‌منظور بررسی شکل و اندازه‌ی نانولوله‌های کربنی چنددیواره، توسط دستگاه TEM با مشخصات LEO 912AB تصویربرداری شده است. برای بررسی طیف جذب از دستگاه اسپکتروفتومتر با مشخصات Nano Ar 2015 استفاده گردید. همچنین، تحلیل پراکندگی نور با استفاده از دستگاه اسپکتروفلورومتر با مشخصات FP-6200 (Jasco) انجام شده است.

ضریب جذب غیرخطی نمونه در برابر پرتو لیزر فرودی با استفاده از دستگاه روبشگر-زد مجهز به لیزر حالت جامد پیوسته در طول موج ۵۳۲ نانومتر و توان ۸۰ میلی‌وات اندازه‌گیری شده است. پرتو گاوسی لیزر با استفاده از عدسی همگرا با فاصله‌ی کانونی مشخص (در اینجا ۵ سانتی‌متر) متمرکز می‌شود و نمونه توسط یک جابجاگر با گام‌های مساوی در اطراف کانون جابجا می‌گردد. شدت نور عبوری از نمونه در هر گام بر اساس موقعیت نمونه نسبت به کانون ثبت گردیده است (طرحواره ۱).



طرحواره۱:چیدمان دستگاه روبشگر-زد شامل لیزر- عدسی- آشکارساز می باشد.

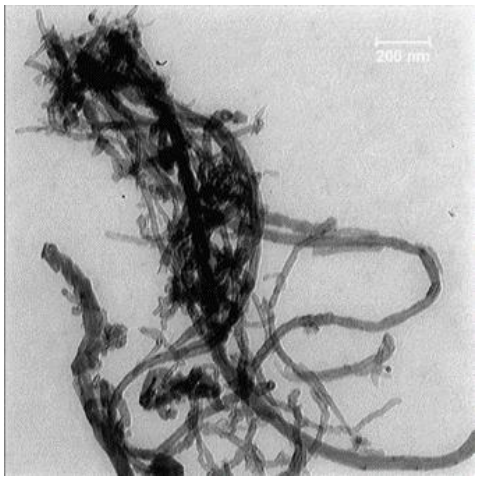
نتایج و بحث

شکل (۱) نتایج میکروسکوپ الکترونی TEM نانولوله‌های کربنی چنددیواره را نشان می‌دهد که قطری در حدود ۲۰۰ نانومتر دارد. شکل (۲) نشان‌دهنده‌ی طیف فلورسانس نانولوله‌های کربنی در طول موج برانگیختگی ۵۳۲ نانومتر است که با افزایش درصد غلظت الکل، شدت پراکندگی نور در سیستم افزایش می‌یابد. شکل (۳) منحنی نرمال‌شده‌ی عبور نور از دریچه‌ی باز دستگاه روبشگر-زد را نشان می‌دهد. منحنی دریچه‌ی باز با روابط زیر توصیف می‌شود:

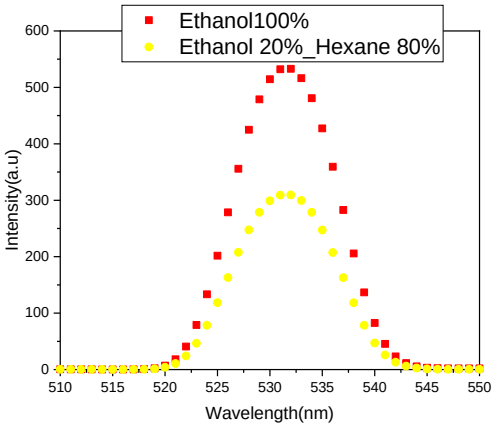
$$T_{OA} = \sum_{n=0} (-q_0)^n (n+1)^{-1.5} \qquad (۱)$$

$$q_0 = \beta I_0 L_{eff} (1+(\frac{z}{z_0})^2)^{-1} \quad (۲)$$

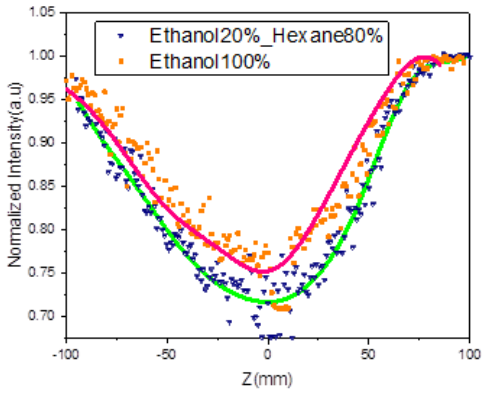
I_0 به عنوان شدت لیزر متمرکز، β به عنوان ضریب جذب غیرخطی، L_{eff} به عنوان ضخامت مؤثر و z_0 به عنوان طول ریلی می باشد،فرآیند به این صورت است که در ابتدا توزیع خروجی نوری به صورت تابعی ازمکان نمونه در صفحهz اندازه گیری میشود. افت انتقال نوری محاسبه و با استفاده از رابطه (۱) و (۲) مقدار β محاسبه و در جدول (۱) قرار گرفته است.با افزایش درصد غلظت الکل وهگزان β افزایش می یابد.شکل(٤)نشان دهنده طیف جذب نانولوله های کربنی در حلال های الکل و هگزان می باشد که این ترکیبات ،جذب یک روند کاهشی یکنواخت افزایشی با افزایش طول موج دارد .شکل(۵) β بر حسب نسبت سطح پراکندگی نور به جذب می باشد که نشان می دهد با افزایش نسبت سطح پراکندگی نور به جذب مقدار β کاهش می یابد.



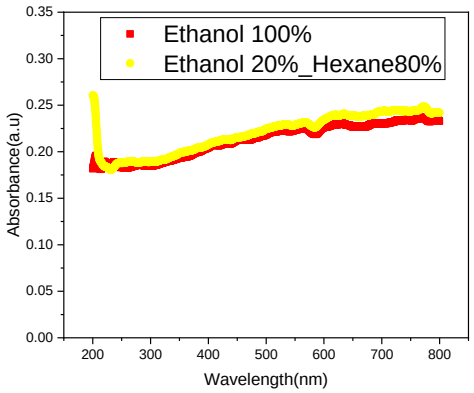
شکل۱:تصویر میکروسکوپ الکترونی TEM نانولوله های کربنی



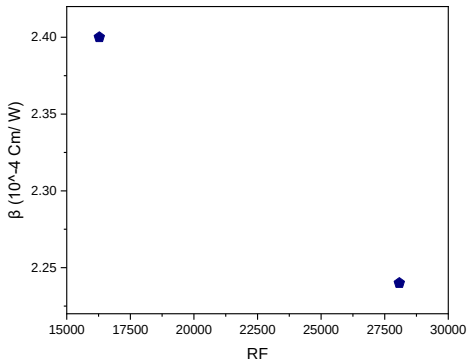
شکل۲:نمودار پراکندگی رایلی MWCNT با طول موج برانگیختگی ۵۳۲ نانومتر محلول در ترکیب با الکل والکل_ هگزان ۱۰۰ppm



شکل ۳: نمودار بهنجار شده محلول نانو لوله های کربنی ppm ۱۰۰در ترکیب با الکل والکل-هگزان. نقاط نتیجه آزمایش و خطوط فیت می باشد.



شکل۴: نمودار طیف جذب محلول نانولوله های کربنی ppm ۱۰۰در ترکیب با الکل والکل-هگزان



شکل۵: نمودارβبر حسب RF

جدول۱:مقادیر β و نسبت مساحت زیر سطح پراکندگی شبه الاستیک نور IISES و ضریب جذب (α) در ۵۳۲ nm ونسبت RF =IISES/α

نمونه	IISES	α	RF	β(Cm/W) ×۱۰$^{-۲}$
۱۰۰٪الکل+ محلول نانولوله کربنی ۱۰۰ppm	۶۱۷۷	۰/۲۲	۲۸۰۷۷/۲	۲/۲۴
۲۰٪الکل+۸۰٪هگزان+ محلول نانولوله کربنی ۱۰۰ppm	۳۵۸۲	۰/۲۲	۱۶۲۸۱/۸	۲/۴

با افزایش درصد هگزان در محلول، ثابت دی‌الکتریک مؤثر محیط کاهش می‌یابد که این امر موجب افزایش میدان الکتریکی موضعی مؤثر بر نانولوله‌ها و در نتیجه تقویت پلاریزاسیون غیرخطی و افزایش ضریب جذب غیرخطی به میزان ۷٪ می‌شود. از سوی دیگر، تغییر در ترکیب حلال، ضریب شکست محیط و اختلاف ضریب شکست نانولوله-حلال را دستخوش تغییر می‌کند که این موضوع ضریب شکست مؤثر را کاهش داده و در نتیجه شدت پراکندگی شبه‌الاستیک نور (IISES) به ضریب جذب به میزان ۴۲٪ کاهش می‌یابد. بنابراین، افزایش β و کاهش پراکندگی، هر دو ریشه در تغییرات ثابت دی‌الکتریک و ضریب شکست محیط ناشی از افزودن هگزان دارند.

نتیجه گیری

نتایج حاصل از آزمون روبشگر-زد نشان داد که نانولوله‌های کربنی چنددیواره در محلول‌های غیرقطبی مانند الکل، دارای ضریب جذب غیرخطی قابل‌توجهی هستند. با افزایش درصد هگزان تا ۸۰٪، ثابت دی‌الکتریک مؤثر محیط کاهش یافته و در نتیجه میدان الکتریکی موضعی مؤثر بر نانولوله‌ها تقویت می‌شود که این پدیده منجر به افزایش ۷٪ ضریب جذب غیرخطی (β) گردیده است. همچنین کاهش ثابت دی‌الکتریک و تغییرات متعاقب آن در ضریب شکست محیط، باعث کاهش دامنهٔ نوسانات ضریب شکست مؤثر و در نتیجه کاهش ۴۲٪ شدت پراکندگی شبه‌الاستیک نور شده است. به‌طور کلی، تغییرات مشاهده‌شده در خواص اپتیکی غیرخطی و پراکندگی، ریشه در تغییرات فیزیکی ثابت دی‌الکتریک و ضریب شکست محیط ناشی از ترکیب حلال‌ها دارد.

مرجع ها

[1] S. Iijima and T. Ichihashi, *"Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter*," Nature, vol. 363,
no. 6430, pp. 603–605, 1993, doi: 10.1038/363603a0
[2] S. Iijima, "*Helical microtubules of graphitic carbon*," vol. 354, pp. 56–58, 1991
[3] Carbon nanotube - *A review on Synthesis, Properties and plethora of applications in the field of biomedical science*
[4] M. Sheik-Bahae, A.A. Said, T.-H. Wei, D.J. Hagan, E.W.Van stryland, sensitive measurement of opticalnanlinearities using a single beam, Quantum Electronics,IEEE jornal of, **26** (1990) 760-769
[5] Z-scan Measurements Author: the photonics expert Dr. Rüdiger Paschotta (RP)

بررسی خواص نوری نانوذرات اکسید نقره و رزبنگال کپسوله‌شده در محیط امولسیون با هدف کاربرد در درمان فتودینامیک

سجاد صالح نیا[۱] ؛ سهیل شریفی[۱]؛ محمدرضا رشیدیان وزیری[۱]
[۱]گروه فیزیک، دانشکده علوم دانشگاه فردوسی مشهد ، مشهد

چکیده

در این پژوهش، خواص نوری خطی و غیرخطی نانوذرات اکسید نقره در حضور رنگینه حساس به نور رزبنگال و همچنین فرایند کپسوله‌سازی آن‌ها در محیط امولسیون (مایسل‌های معکوس) با هدف کاربرد در درمان فتودینامیک و محدودکننده‌های نوری مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان داد که حضور نانوذرات اکسید نقره باعث افزایش مقدار جذب و پراکندگی در محلول آبی رزبنگال همراه با خاموشی فلورسانس بر اثر فرایندهای انتقال انرژی یا بار می گردد. علاوه بر این، اندازه گیری های انجام شده با روش رویش-زد که نمونه امولسیون حاوی اکسید نقره دارای ضریب جذب غیرخطی cm/W $\beta = 2.34 \times 10^{-4}$ *است که افزایش قابل‌توجهی نسبت به پراکنده در آب نشان می‌دهد.*

واژه های کلیدی: *اکسید نقره، رزبنگال، امولسیون، فلورسانس، خواص نوری غیرخطی*

Investigation of the Optical Properties of an Emulsion-Encapsulated Silver Oxide and Rose Bengal for Photodynamic Therapy Applications

Sajjad Salehnia[1]; Soheil Sharifi[1]; Mohammad Reza Rashidian Vaziri[1];

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

Abstract

In this research, the linear and nonlinear optical properties of silver oxide nanoparticles in the presence of the photosensitive dye Rose Bengal, as well as their encapsulation process in an emulsion medium (reverse micelles) with the aim of application in photodynamic therapy and optical limiters, were studied.. The results showed that the presence of silver oxide nanoparticles increases the absorption and scattering in the aqueous solution of Rose Bengal , along with fluorescence quenching due to energy or charge transfer processes. Furthermore, the measurements performed using the Z-scan method revealed that the emulsion sample containing silver oxide exhibited a nonlinear absorption coefficient $\beta = 2.34 \times 10^{-4}$ cm/W, which shows a significant increase compared to the dispersed in water.

Keywords: Silver oxide, Rose Bengal, emulsion, Fluorescence, Nonlinear optical properties

مقدمه

به دلیل خواص منحصر به فرد نیمه رسانایی، نانوذرات اکسید نقره در سال های اخیر توجه گسترده ای را در زمینه های فوتوکاتالیستی، حسگرهای زیستی،صنایع دارویی و ادوات اپتوالکترونیک به خود جلب کرده اند [1]. اکسید نقره ماده ای است که به طور طبیعی یافت نمی شود و به روش های گوناگون مصنوعی مانند ترسیب شیمیایی، روش سل – ژل، سنتز به کمک امواج فراصوت و روش سبز تولید می شود [2]. اکسید نقره یک نیمه رسانای ذاتی است که مقدار گاف نواری آن به عوامل گوناگونی مانند روش تولید،اندازه نانوذره و نقص های بلوری بستگی دارد [3]. بر پایه منابع علمی،گاف نواری اکسید نقره در گستره ۱,۲ تا۲,۸ الکترون ولت گزارش شده است [4]. این ویژگی ساختاری ، اکسید نقره را برای جذب نور مرئی و کاربردهای فوتوکاتالیستی بسیار مناسب ساخته است [5].

رزبنگال بیشترین جذب را در طول موج ۵۴۸ نانومتر و بیش ترین گسیل فلورسانس را در طول موج ۵۷۰ نانومتردارد. تحت تابش نور مرئی، رزبنگال گونه های فعال اکسیژن تولید می کند که در تخریب سلول های سرطانی و باکتری ها بسیار موثر است. از همین رو، این رنگینه در درمان بیماری ها با روش درمان فتودینامیک (فتودینامیک تراپی)کاربرد گسترده ای دارد [6].

بررسی خواص نوری غیرخطی برای کاربردهایی مانند محدودکننده های نوری و سوئیچینگ نوری سریع، از اهمیت بالایی برخوردار است [7]. روش استاندارد برای اندازه

گیری ضریب جذب غیرخطی روش روبشگر-زد است که در آن نمونه در مسیر پرتو لیزر متمرکز حرکت داده می شود و گذردهی نوری در حالت دریچه باز(برای جذب) ثبت می گردد [8].

در پژوهش حاضر، از لیزر پیوسته با طول موج ۵۳۲ نانومتر استفاده شده است. این طول موج نزدیک به پیک جذب رزبنگال (۵۴۸ نانومتر) بوده و در عین حال جذب زمینه نانوذره اکسید نقره و حلال ها در آن اندک است.

با وجود پتانسیل بالای رزبنگال به عنوان یک حساس‌گر نوری در درمان فتودینامیک، چالش‌هایی نظیر تمایل به انباشتگی و ناپایداری در محیط‌های مختلف، کارایی آن را تحت تأثیر قرار می‌دهد. مطالعات اخیر نشان داده‌اند که ترکیب رزبنگال با نانوذرات (به ویژه نانوذرات فلزی و اکسیدهای فلزی) می‌تواند از طریق ایجاد اثرهای هم‌افزایی و تسهیل تولید گونه‌های فعال اکسیژن، اثربخشی این رنگینه را در نوردرمانی به شدت افزایش دهد [۹ و ۱۰]. با این حال، بررسی رفتار نوری غیرخطی سیستم‌های هیبریدی رزبنگال-اکسید نقره، به‌ویژه در محیط‌های محبوس مانند امولسیون‌ها که می‌توانند اثرات دی‌الکتریک موضعی را تغییر دهند، تاکنون به عنوان یک شکاف تحقیقاتی باقی مانده است. از این رو، هدف اصلی پژوهش حاضر، طراحی یک سامانه پایدار ترکیبی در محیط امولسیون و بررسی دقیق اثر کپسوله‌سازی بر خواص نوری این نانوذرات است. انتظار می‌رود که تثبیت این نانوذرات در محیط امولسیون، ضمن رفع مشکل کلوخه‌شدن نانوذرات، با بهینه‌سازی جذب خطی و فرایند خاموشی فلورسانس، پاسخی غیرخطی و قدرتمند ایجاد کند که نه تنها برای ساخت محدودکننده‌های نوری پیشرفته، بلکه برای توسعه تفرمولاسیون‌های پایدارتر و مؤثرتر در درمان فوتودینامیک کاربرد داشته باشد.

مواد و روش ها

مواد شیمیایی: نانوذرات اکسید نقره با خلوص ۹۹,۹ درصد از شرکت سیلوانو تهیه شد. این نانوذرات به دلیل ماهیت فیزیک و شیمیایی خود، پایداری مناسبی در محیط های آبی ندارند و تمایل شدیدی به انباشتگی (آگلومره شدن) از خود نشان می دهند. رزبنگال(Rose Bengal) با جرم مولکولی ۱۰۱۷,٦٤ گرم بر مول و درجه خلوص بالا از شرکت Sigma تهیه گردید. اتانول از شرکت پارس الکل و AOT ماده فعال سطحی(سدیم دی اکتیل سولفوسوکسینات) از شرکت Merck تهیه شد.

به منظور بررسی اثرات کپسوله‌سازی و حضور نانوذرات اکسید نقره، سه نوع نمونه به شرح زیر تهیه شد:

۱. محلول آبی رزبنگال با غلظت ۰,۰٦ میلی مولار
۲. محلول آبی Ag_2O
۳. محلول آبی رزبنگال با غلظت ۰,۰٦ میلی مولاربا Ag_2O ppm۱۴۰.
٤. نمونه کپسوله‌شده در امولسیون: روش امولسیون برای تثبیت نانوذرات Ag_2O و جلوگیری از کلوخه شدن آن‌ها به کار گرفته شد. در این روش، امولسیون معکوس (آب در روغن) با استفاده از فاز آبی حاوی نانوذرات، روغن هگزان و سورفکتانت AOT تهیه شد. به منظور کنترل اندازه قطرات آب (مایسل‌ها) در فاز روغن، نسبت مولی آب به سورفکتانت برابر با ۶۰ (x=60) و کسر جرمی آب نسبت به سورفکتانت ۰/۱ (mf=0.1)تنظیم گردید.

روشها: ویژگی‌های نوری غیرخطی با استفاده از چیدمان استاندارد روبشگر-زد اندازه‌گیری شد. در این چیدمان، از یک لیزر پیوسته (CW)با طول موج ۵۳۲ نانومتر و توان خروجی ۸۰ میلی‌وات به عنوان منبع تحریک نوری بهره گرفته شد.برای بررسی شکل، توزیع و اندازه نانوذرات Ag_2O پودری، از میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM) مدل LEO 920AB استفاده شد.

برای بررسی طیف جذب خطی نمونه ها در ناحیه مرئی-فرابنفش از دستگاه طیف سنج مدل Nano Ar 2015 استفاده شده است. برای بررسی پراکندگی نور و رفتار خاموشی فلورسانس، از دستگاه اسپکتروفلورومتر مدل FP-6200(Jasco) (ساخت شرکت Jasco، ژاپن) با طول موج برانگیختگی ۵۳۲ نانومتر استفاده شد.

نتایج و بحث:

شکل (۱)، تصویر میکروسکوپ الکترونی عبوری نانوذرات اکسید نقره را نشان می‌دهد. همان‌طور که در تصویر مشخص است، این نانوذرات به دلیل نسبت سطح به حجم و انرژی سطحی بالا، تمایل به کلوخه‌شدن دارند و خوشه‌های نامنظم و بزرگی با ابعاد بیش از ۳۰۰ نانومتر تشکیل داده‌اند. اگرچه در لبه‌های این توده می‌توان ذرات اولیه با ساختار تقریباً کروی را تشخیص داد، اما انباشتگی شدید آن‌ها مانع از پراکندگی مطلوب در حلال‌های معمولی می‌شود. این مشاهده تجربی، ضرورت استفاده از روش کپسوله‌سازی در محیط امولسیون (مایسل‌های معکوس) را برای جداسازی ذرات، جلوگیری از کلوخه‌شدن و دستیابی به یک سامانه اپتیکی پایدار را نشان می دهد.

در شکل (۲) نتایج اندازه گیری نمودار طیف جذب خطی نمونه های مختلف در محدوده ۲۰۰ تا ۸۰۰ نانومتر نشان داده شده است. محلول رزبنگال (۰,۰۶ میلی مولار) یک پیک جذب قوی در حدود ۵۶۰ نانومتر نشان داد ، با افزودن ۵۰۰ ppm نانوذرات اکسید نقره به این محلول، میزان جذب افزایش یافت، در حالی که موقعیت پیک تقریبا بدون تغییر باقی ماند. این افزایش جذب زمینه در ناحیه مرئی، عمدتاً ناشی از پراکندگی نور توسط نانوذرات معلق در محلول است و نشان می‌دهد که

ساختار مولکولی رزبنگال تخریب نشده است. در مقابل، نمونه امولسیون حاوی اکسید نقره (بدون رزبنگال) جذب بسیار ضعیفی در ناحیه مرئی داشت و فقط یک لبه جذب ضعیف درناحیه ۳۰۰-۴۰۰ نانومتر نشان داد که مربوط به جذب ذاتی انتقال الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش در نیمه‌رسانای Ag_2O است.

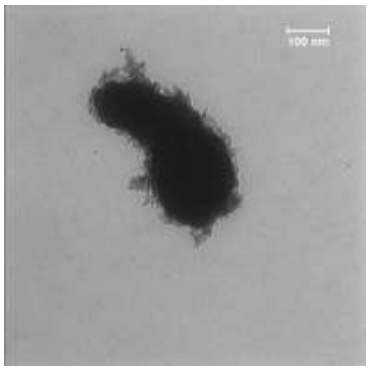
شکل (۳) نشان دهنده طیف های فلورسانس و پراکندگی الاستیک نمونه ها با طول موج برانگیختگی ۵۳۲ نانومتر است. همان طور که در نمودار مشخص است، رزبنگال خالص یک پیک فلورسانس قوی در حدود ۵۷۰ نانومتر نشان می دهد. اما با افزودن نانوذرات اکسید نقره (۵۰۰ ppm) به رزبنگال، شدت فلورسانس کاهش می یابد. این پدیده خاموشی فلورسانس نامیده می شود. وقوع خاموشی در این سامانه هیبریدی می‌تواند نشان‌دهنده انتقال بار یا انتقال انرژی غیرتشعشعی بین مولکول‌های برانگیخته رزبنگال و نانوذرات اکسید نقره باشد. این فرایند انتقال انرژی، دقیقاً همان سازوکاری است که در درمان فتودینامیک برای تولید گونه‌های فعال اکسیژن (ROS) مطلوب است [۱۱]. در نمونه امولسیون حاوی اکسید نقره (بدون رزبنگال)، هیچ فلورسانسی دیده نمی شود و فقط پراکندگی الاستیک پرتو لیزر فرودی وجود دارد.

شکل (۴) نشان دهنده منحنی بهنجار شده گذردهی در حالت دریچه باز دستگاه روبشگر-زد برای نمونه اکسید نقره پراکنده در آب و نمونه امولسیون است. کاهش گذردهی در کانون عدسی (موقعیت z=0)، نشان‌دهنده رفتار جذب اشباعی معکوس در نمونه‌ها است. منحنی گذردهی در حالت دریچه باز با روابط زیر توصیف می شود:

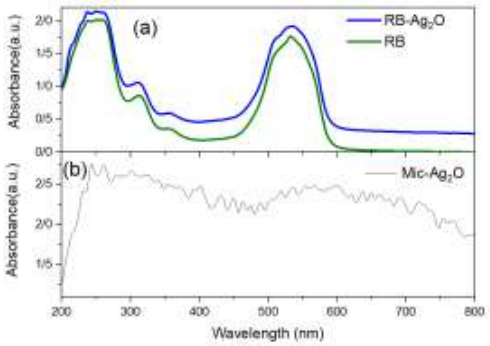
$$T(z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[-q_0(z,0)]^m}{(m+1)^{3/2}} \qquad (1)$$

$$q_0 = \beta I_0 L_{eff} (1 + (\frac{z}{z_0})^2)^{-1} \qquad (۲)$$

پارامتر های این روابط به ترتیب بیانگر T گذردهی نوری بهنجارشده، β ضریب جذب، I_0 شدت نور ورودی در کانون، L_{eff} ضخامت مؤثر نمونه و z_0طول ریلی می باشد، فرآیند به این صورت است که در ابتدا توزیع خروجی به صورت تابعی از مکان نمونه در امتداد محور z اندازه گیری می شود. با استفاده از برازش داده‌های تجربی بر روابط (۱) و (۲)، مقدار ضریب جذب غیرخطی β محاسبه و در جدول (۱) قرار گرفته است. با توجه به استفاده از لیزر موج پیوسته، رفتار جذب اشباعی معکوس مشاهده‌شده را نمی‌توان به جذب دو فوتونی همزمان نسبت داد. در این رژیم توانی، سازوکار فیزیکی غالب، «جذب حالت برانگیخته»[1] است. تابش پیوسته لیزر منجر به انتقال الکترون‌ها به ترازهای نقص و انباشتگی آن‌ها در این ترازهای با طول عمر بالا می‌شود. جذب فوتون‌های بعدی توسط این الکترون‌های برانگیخته و انتقال آن‌ها به ترازهای بالاتر، از آنجا که سطح مقطع جذب حالت برانگیخته بزرگتر از حالت پایه است، منجر به بروز پدیده جذب حالت برانگیخته می‌گردد. مقدار ضریب جذب غیر خطی β، در نانوذره کپسوله سازی شده در محیط امولسیون به مقدار $2.34 \times 10^{-4}\ cmW^{-1}$ افزایش می یابد. این افزایش پاسخ غیرخطی نسبت به محیط آبی، ریشه در اثرات حبس‌شدگی دی‌الکتریک دارد. به عبارت دیگر، کاهش ثابت دی‌الکتریک محیط پیرامون نانوذره در داخل ریزقطرات امولسیون (فاز هگزان)، منجر به تقویت میدان الکتریکی موضعی در سطح نانوذرات شده و در نتیجه، فرایند جذب فوتون‌ها و رفتار غیرخطی را تقویت می‌کند [۱۲].

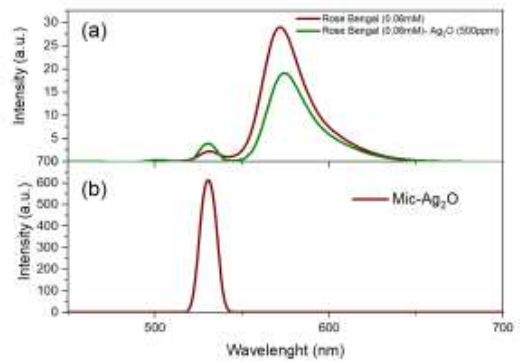


شکل۱:تصویر TEM نانوذرات اکسید نقره

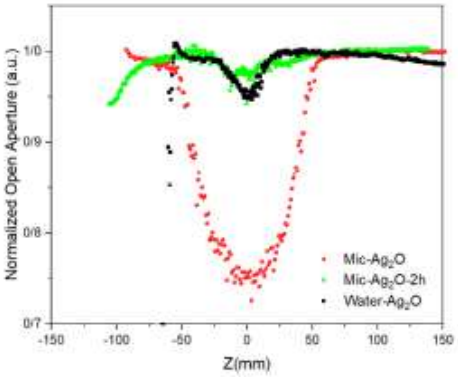


شکل۲: (a) نمودار آبی، طیف جذب نانوذره Ag2o(140ppm) محلول در رزبنگال 0.06 mM – (a) نمودار سبز، طیف جذب رزبنگال 0.06mM و (b) طیف جذب اکسید نقره با امولسیون هگزان , x=60 mf =0.1 140ppm

[1] Excited-State Absorption - ESA



شکل۳: نمودار شدت، فلورسانس و پراکندگی نور در نمونه (a) نمودار قرمز، رزبنگال 0.06mM و (a) نمودار سبز ، نانوذره Ag2o محلول در رزبنگال0.06 mM و(b)اکسید نقره با امولسیون هگزان 140ppm $mf = 0.1$ x=60 ,



شکل ۴:نمودار دریچه باز (OA) دستگاه روبشگر زد برای نمونه امولسیون اکسید نقره 140ppm mf =0.1 , x=60و نمونه اکسید نقره محلول در آب با غلظت ppm۱۴۰

جدول۱: مقادیر ضریب جذب غیرخطی (β) و ضریب شکست غیرخطی(n_2) در حلال های Mic-Ag_2O و Water-Ag_2O.

نام حلال	$\beta(\times \frac{10^{-4}cm}{w})$
Mic-Ag_2O	۲,۳۴
Mic-Ag_2O-2h	۱,۷۶
Water-Ag_2O	۱,۲۰

جمع بندی:

در این پژوهش، خواص اپتیکی خطی و غیرخطی نانوذرات اکسید نقره در حضور رنگینه حساس به نور رزبنگال و در محیط کپسوله‌شده امولسیونی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج تجربی حاصل از طیف‌سنجی خطی و روبش-زد نشان داد که کپسوله سازی به روش امولسیون می تواند به مقدار قابل توجهی خواص نوری غیرخطی این نانوذرات را افزایش دهد. این افزایش چشمگیر در ضریب جذب غیرخطی، ریشه در کاهش ثابت دی‌الکتریک محیط پیرامون نانوذره در فاز هگزان دارد که منجر به تقویت میدان الکتریکی موضعی در سطح نانوذرات می‌شود.

همچنین نشان داده شد که اضافه شدن اکسید نقره به محلول آبی رزبنگال باعث خاموشی فلورسانس رنگینه می گردد. که تأییدکننده وقوع فرایندهای انتقال بار یا انرژی غیرتشعشعی بین مولکول‌های رزبنگال و نانوذرات است. در مجموع، یافته‌های این تحقیق نشان می‌دهد که سامانه هیبریدی طراحی‌شده، علاوه بر حل چالش کلوخه‌شدن نانوذرات تجاری، پاسخ نوری مناسبی از خود نشان می‌دهد. این ویژگی‌ها، سامانه مذکور را به گزینه‌ای مطلوب برای کاربرد در ساخت محدودکننده‌های نوری پیشرفته و همچنین توسعه فرمولاسیون‌های پایدارتر و مؤثرتر در درمان فوتودینامیک تبدیل می‌کند.

مرجع ها

[1] Gungure, C. M., et al. (2024). Green synthesis of silver oxide nanoparticles... Materials Today: Proceedings, 85, 210-217.
[2] Fayyadh, A. A., et al. (2021). Synthesis and characterization of Ag/Ag_2 O nanoparticles with tunable optical properties. Iraqi Journal of Science, 62(6), 1805-1814.
[۳] Jiang, D., Shi, J., & Zhao, Y. (1994). Band gap of Ag_2 O determined by diffuse reflectance spectrum. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 55(11), 1309-1312.
[۴] Aziz, S. B., & Rasheed, M. A. (2021). Band gap engineering of p-type Ag_2 O semiconductor for optoelectronic applications. Optical Materials, 112, 110802.
[5]Salleh, A., et al. (2020). Silver oxide nanoparticles: synthesis, characterization and antimicrobial activity. Nano-Structures & Nano-Objects, 24, 100560.
[6] Majumder, S., & Roy, S. (2019). Rose Bengal: A versatile photosensitizer in biomedical applications. Journal of Photochemistry and Photobiology C, 40, 21-35.
[7] Chiu, K. C., et al. (2003). Fabrication and nonlinear optical properties of nanoparticle silver oxide films. Journal of Applied Physics, 94(3), 1996-2000.
[8] Sheik-Bahae, M., et al. (1990). Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam. IEEE Journal of Quantum Electronics, 26(4), 760-769.
[9] Sun, Pai, et al. "Silver nanoparticle-assisted photodynamic therapy for biofilm eradication." *ACS Applied Nano Materials* 5.6 (2022): 8251-8259.
[10] Li, Chengcheng, et al. "Self-assembled rose bengal-exopolysaccharide nanoparticles for improved photodynamic inactivation of bacteria by enhancing singlet oxygen generation directly in the solution." *ACS applied materials & interfaces* 10.19 (2018): 16715-16722.
[11] Belén, R. A. M., & José, R. J. (2016). Effect of Silver Nanoparticles on the Photophysics of Riboflavin: Consequences on the ROS Generation.
[12] Wang, S. X., Zhang, L. D., Su, H., Zhang, Z. P., Li, G. H., Meng, G. W., ... & Gao, T. (2001). Two-photon absorption and optical limiting in poly (styrene maleic anhydride)/TiO2 nanocomposites. *Physics Letters A*, *281*(1), 59-63.

اندازه‌گیری ضرایب شکست و جذب غیرخطی مرتبه سوم بلور BiB_3O_6 در طول موج ۴۰۰ نانومتر به روش روبش Z

لعلی ، سمیرا[۱]؛ پورقباد ، دلنیا[۱] ؛ قطبی، مسعود[۱]

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

چکیده

در این مقاله، خواص اپتیکی غیرخطی بلور BiB_3O_6 (BIBO) در طول موج ۴۰۰ نانومتر به روش روبش Z مورد بررسی قرار گرفت. تابش ۴۰۰ نانومتر از طریق تولید هارمونیک دوم (SHG) سیگنال نوسانگر پارامتری نوری (OPO) در داخل کاواک OPO تولید شد و اندازه‌گیری‌ها در حالت دیافراگم باز و بسته انجام گرفت. نتایج نشان داد که برای صفحه بلوری yz با قطبش $E \parallel x$ ، ضریب شکست غیرخطی و ضریب جذب غیرخطی به‌ترتیب برابر با $53 \times 10^{-16}\ \mathrm{cm^2/W}$ و $5.2 \times 10^{-10}\ \mathrm{cm/W}$ است. همچنین برای صفحه xz با قطبش $E \parallel y$ ، مقادیر متناظر به‌ترتیب $40 \times 10^{-16}\ \mathrm{cm^2/W}$ و $4.4 \times 10^{-10}\ \mathrm{cm/W}$ به‌دست آمد. مقایسه نتایج بیانگر وابستگی پاسخ اپتیکی غیرخطی BIBO به جهت بلوری و قطبش تابش فرودی است.

واژه های کلیدی: *روش روبش Z، ضریب شکست غیرخطی، ضریب جذب غیرخطی، بلور BIBO*

Measurement of Nonlinear Optical Coefficients of BiB_3O_6 Crystal at 400 nm Wavelength Using Z-Scan Technique

Samira, Lali [1]; Delnia, Pourghobad[1] Ghotbi, Masood[1]

[1] Department of Physics, Faculty of Physics, University of Kurdistan, Sanandaj, Iran

Abstract

In this study, the nonlinear optical properties of a BiB_3O_6 (BIBO) crystal at a wavelength of 400 nm were investigated using the Z-scan technique. A 400 nm laser beam was generated through second-harmonic generation (SHG) of the signal beam from an optical parametric oscillator (OPO) inside the OPO cavity, and the measurements were carried out using both open-aperture and closed-aperture Z-scan method. The results showed that for the yz crystal plane with E//x polarization, the nonlinear refractive index and nonlinear absorption coefficient were 53×10^{-16} cm²/W and 5.2×10^{-10} cm/W, respectively. For the xz crystal plane with E//y polarization, the corresponding values were 40×10^{-16} cm²/W and 4.4×10^{-10} cm/W, respectively. Comparison of the results indicates that the nonlinear optical response of the BIBO crystal depends on the crystal orientation and the polarization direction of the incident beam.

***Keywords**: z-scan method, Nonlinear refractive index, Nonlinear absorption coefficient, BIBO crystal*

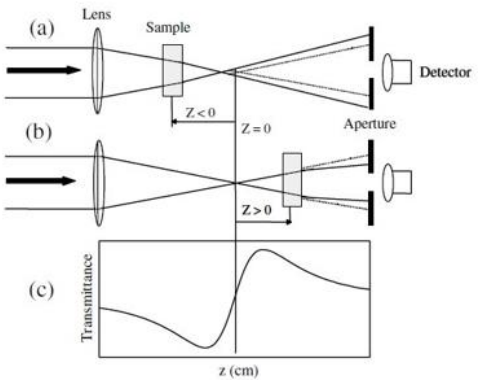
مقدمه

در پژوهش حاضر، خواص اپتیکی غیرخطی مرتبه سوم بلور BIBO در طول موج ۴۰۰ نانومتر مورد بررسی قرار گرفته است. تابش ۴۰۰ نانومتر از طریق تولید هارمونیک دوم سیگنال نوسانگر پارامتری نوری و در داخل کاواک آن تولید شد. سپس با استفاده از روش روبش Z در حالت‌های دیافراگم باز و بسته، ضرایب

شکست و جذب غیرخطی بلور استخراج و تحلیل شدند. نتایج این مطالعه می‌تولند در شـــناخت بهتر رفتار غیرخطی بلور BIBO در ناحیه آبی طیف و توسعه کاربردهای آن در ساختارهای فوتونیکی مبتنی بر پالس‌های فوق‌کوتاه مؤثر باشـد[۱]. مطالعه خواص اپتیکی غیرخطی مرتبه سوم مواد، به‌ویژه ضریب شکست غیرخطی (n_2) و ضریب جذب غیرخطی(β) ، در طراحی و توسعه سامانه‌های لیزری پرتوان و ادوات فوتونیکی اهمیت ویژه‌ای دارد. این پارامترها رفتار ماده را در حضـــور میدان‌های نوری شـــدید تعیین کرده و در پدیده‌هایی نظیر خودکانونی، خودواکانونی، جذب چندفوتونی و مدقفل‌شـدگی نقش اسـاسـی ایفا می‌کنند [۲]. روش روبش Z که توســط شــیخ‌بهایی و همکاران ارائه شـــد، یکی از دقیق‌ترین و متداول‌ترین روش‌های تجربی برای تعیین ضرایب اپتیکی غیرخطی مرتبه سوم محسوب می‌شود. این روش امکان اندازه‌گیری هم‌زمان ضریب شکست و ضریب جذب غیرخطی را با استفاده از چیدمان آزمایشگاهی نسبتاً ساده فراهم می‌سازد [۳]. در پژوهش حاضر، خواص اپتیکی غیرخطی مرتبه ســـوم بلور BIBO در طول موج ۴۰۰ نانومتر مورد بررســی قرار گرفته اســت. تابش ۴۰۰ نانومتر از طریق تولید هارمونیک دوم سیگنال نوسانگر پارامتری نوری و در داخل کاواک آن تولید شد. سپس با استفاده از روش روبش Z در حالت‌های دیافراگم باز و بسته، ضرایب شکست و جذب غیرخطی بلور استخراج و تحلیل شدند.

چیدمان آزمایشگاهی

روش‌های متعددی برای اندازه‌گیری ضـــرایب اپتیکی غیرخطی مواد ارائه شـــده‌اند که از جمله آن‌ها می‌توان به تداخل‌ســـنجی غیرخطی، اختلاط ســـه‌موجی، اختلاط چهـارموجی تبهگن، اندازه‌گیری اعوجاج باریکه و روش روبش z اشاره کرد[۳]. در این روش، نمونه در راســتای انتشــار باریکه لیزر و در مجاورت ناحیه کانونی جابه‌جا می‌شـود و تغییرات تراگسـیلندگی آن مورد بررسـی قرار می‌گیرد. همان‌گونه که در شـکل (۱) مشـاهده می‌شـود، پرتو لیزر پس از عبور از یک عدسی بر روی نمونه متمرکز شده و شدت نور عبوری در میدان دور توسط آشکارساز اندازه‌گیری می‌شود[۵]. همچنین، با قرار دادن دیافراگم در مقابل آشـکارسـاز می‌توان سـهم ضریب شکست غیرخطی و ضریب جذب غیرخطی را از یکدیگر تفکیک و محاسبه کرد. این رفتار موجب تغییر شـدت پرتو عبوری از دیافراگم می‌شـود. در بلور BIBO با ضریب شکست غیرخطی مثبت، نمونه مشابه یک عدسـی همگرا با فاصـله کانونی وابسـته به شدت رفتار می‌کند..



شـــکل ۱: رفتار نمونه را در روش روبش Z با دیافراگم بســـته برای مواد دارای ضـریب شـکسـت غیرخطی مثبت n_2 نشـان می‌دهد. هنگامی که نمونه پیش از کانون قرار دارد، اثر خودکانونی باعث کاهش شدت نور عبوری از دیافراگم و در نتیجه کاهش تراگسـیلندگی می‌شـود. با عبور نمونه از صـفحه کانونی، افزایش همگرایی پرتو سـبب افزایش شـدت نور عبوری از دیافراگم و در نتیجه افزایش تراگسیلندگی خواهد شد. [۳]

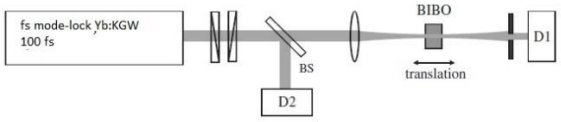
چیدمان آزمایش روش روبش z شامل یک سامانه نوسانگر پارامتری نوری بود که در آن تابش ۴۰۰ نانومتر از طریق تولید هارمونیک دوم سیگنال OPO در داخل کاواک تولید می‌شد. در این پژوهش، از یک دیافراگم با تراگسیلندگی حدود ۱۰٪ (S=0.1) و یک عدسی با فاصله کانونی ۷/۵ سانتی‌متر استفاده شد (شکل ۲). همچنین، برای تعیین شعاع کمر پرتو گاوسی در طول موج ۴۰۰ نانومتر از روش لبه تیغه استفاده شد. به‌منظور محاسبه ضریب شکست غیرخطی (n_2)، منحنی‌های تجربی روبش z درحالت دیافراگم بسته با روابط نظری برازش داده شدند و مقادیر این پارامتر استخراج گردید. به‌طور مشابه، با استفاده از داده‌های روبش Z در حالت دیافراگم باز، ضریب جذب غیرخطی (β) نیز تعیین شد. با استفاده از چیدمان نشان‌داده‌شده در شکل (۲) و روابط زیر، پارامترهای اپتیکی غیرخطی بلور BIBO محاسبه شدند[۴].

$$T(z) = 1 - \frac{4\Delta\Phi_0}{(x^2+9)(x^2+1)} \quad (۱)$$

$$\Delta\Phi_0 = \frac{\Delta T_{P-V}}{0/406(1-s)^{0/25}} \quad (۲)$$

$$x = \frac{Z}{Z_0} \qquad z_0 = \frac{\Delta z_{p-v}}{1/7} \quad (۳)$$

$$\Delta\Phi_0 = kn_2 I(0) L_{eff} \quad (۴)$$



شکل ۲: چیدمان آزمایشگاهی روبش z برای کریستال BIBO

نتایج و بحث

در این پژوهش، رفتار اپتیکی غیرخطی بلور BIBO در طول موج ۴۰۰ نانومتر با استفاده از روش روبش z مورد بررسی قرار گرفت. اندازه‌گیری‌ها برای دو آرایش مختلف بلوری شامل صفحات yz و xzانجام شد. در هر دو حالت، منحنی‌های روبش z در شرایط دیافراگم باز و بسته ثبت و با روابط نظری برازش داده شدند تا به‌ترتیب ضرایب جذب غیرخطی و شکست غیرخطی استخراج شوند. شکل (۲) و شکل (۳)، منحنی‌های روبش z با دیافراگم بسته را برای بلور BIBO در دوآرایش مورد مطالعه را نشان می‌دهد. نقاط نمایش‌دهنده داده‌های تجربی بوده و خطوط پیوسته حاصل برازش نظری هستند. به‌دلیل کوتاه بودن مدت‌زمان پالس‌های فمتوثانیه، برهم‌کنش نور و ماده پیش از ایجاد تغییرات گرمایی قابل‌توجه انجام می‌شود؛ بنابراین سهم اثرات گرمایی در نتایج اندازه‌گیری ناچیز بوده و ضرایب استخراج‌شده عمدتاً به پاسخ غیرخطی ذاتی بلور مربوط هستند. در هر دو آرایش، منحنی‌های روبش z رفتار مشخصه‌ی مواد دارای ضریب شکست غیرخطی مثبت را نشان دادند؛ به‌طوری‌که با حرکت نمونه در راستای محور انتشار، ابتدا کاهش و سپس افزایش تراگسیلندگی مشاهده شد. این رفتار بیانگر وقوع پدیده‌ی خودکانونی در بلور BIBO تحت تابش لیزر ۴۰۰ نانومتری است. برای بلور با صفحه‌ی yz و قطبش موازی محورx ، مقدار ضریب شکست و و ضریب جذب غیرخطی برابر با غیرخطی برابربا:

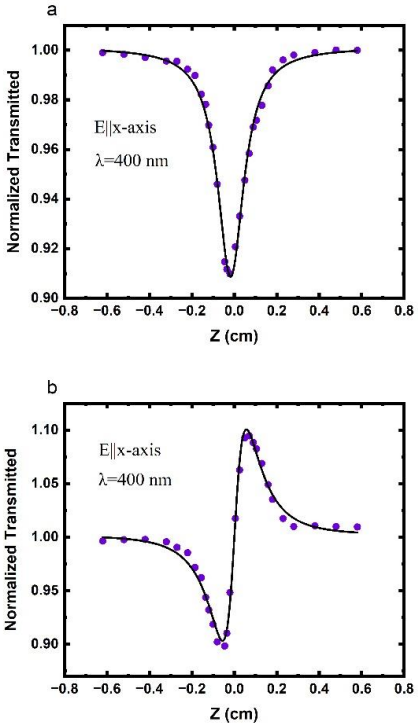
$$n_2 = 53 \times 10^{-16}(\frac{cm^2}{W})$$

$$\beta = 5.2 \times 10^{-10}(\frac{cm}{W})$$

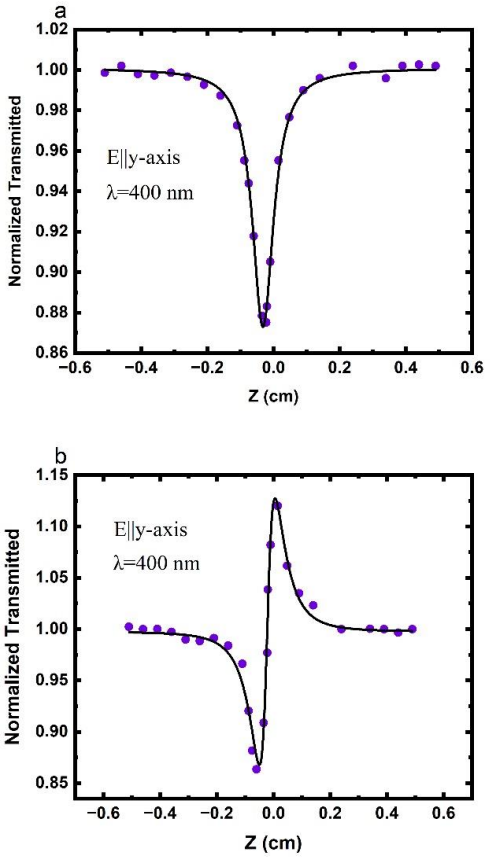
به‌دست آمد. منحنی روبش z با دیافراگم باز، وجود جذب غیرخطی قابل توجه را نشان داد. در آرایش xz و قطبش موازی محور y نیز مقادیر

$$\beta = 4.4 \times 10^{-10}(\frac{cm}{W}) \text{ و } n_2 = 40 \times 10^{-16}(\frac{cm^2}{W})$$

استخراج شدند. مقایسه نتایج دو جهت مورد بررسی نشان می‌دهد که پاسخ غیرخطی کریستال BIBO به جهت قطبش وابسته است که این موضوع ناشی از ناهمسانگردی ذاتی ساختار بلوری این ماده است.



شکل۳: (a) نمودار ضریب جذب و (b) نمودار ضریب شکست غیرخطی درصفحه‌ی yz



شکل٤ : (a) نمودار ضریب جذب و (b) نمودار ضریب شکست غیرخطی درصفحه‌ی xz

در مقاله پیشین، ضریب شکست غیرخطی کریستال BIBO با استفاده از روش روبش Z در طول موج ۵۱۵ و ۱۰۳۰ نانومتر اندازه‌گیری شد [٦]. در پژوهش حاضر، علاوه بر تغییر طول موج به ٤۰۰ نانومتر، ضریب جذب غیرخطی نیز اندازه‌گیری شده و رفتار غیرخطی کریستال در این ناحیه طیفی مورد بررسی قرار گرفته است.دراین پژوهش، خواص اپتیکی غیرخطی مرتبه سوم کریستال BIBO در طول موج ٤۰۰ نانومتر به روش روبش z مورد بررسی قرار گرفت. تابش ٤۰۰ نانومتر از طریق تولید هارمونیک دوم سیگنال نوسانگر پارامتری نوری فراهم شد و ضرایب شکست و جذب غیرخطی برای دو آرایش بلوری مختلف استخراج گردید. نتایج نشان داد که ضریب شکست غیرخطی در هر دو آرایش مثبت است، که بیانگر غالب بودن پدیده خودکانونی در این بلور تحت تابش ٤۰۰ نانومتر است. همچنین، مقادیر متفاوت ضرایب غیرخطی در صفحات yz وxz ، وابستگی پاسخ غیرخطی BIBO به جهت بلوری و قطبش تابش فرودی را آشکار ساخت . علاوه بر این، وجود جذب غیرخطی قابل توجه در هر دو صفحه‌ی کریستال نشان می‌دهد که برهم‌کنش نور و ماده در این ناحیه طیفی از پیچیدگی بیشتری برخوردار بوده و باید در طراحی سامانه‌های مبتنی بر این بلور مورد توجه قرار گیرد که می‌تواند در توسعه و بهینه‌سازی ادوات فوتونیکی، سامانه‌های تبدیل فرکانس، منابع نوری مبتنی بر OPO و فناوری‌های مرتبط با پالس‌های فوق‌کوتاه مورد استفاده قرار گیرد.

صفحه بلور	قطبش	n_2 (cm^2/W)	β (cm/W)
yz	E ∥ x	53×10^{-16}	5.2×10^{-10}
xz	E ∥ y	40×10^{-16}	4.4×10^{-10}

جدول۱: ضریب جذب و ضریب شکست غیر خطی بلور BIBO در طول موج ٤۰۰ نانومتر

مرجع‌ها

[1] Ghotbi, M., Esteban-Martin, A. and M. Ebrahim-Zadeh, " BiB_3O_6 femtosecond optical parametric oscillator" *Optics lett*, Vol. *31*, No. 21, pp. 3128-3130, 2006.

[2] M. Ghotbi, M. Ebrahim-Zadeh, A. Majchrowski, E. Michalski, and I. V. Kityk, "High-average-power femtosecond pulse generation in the blue using BiB_3O_6," Opt. Lett. 29, 2530-2532 , 2004.

[3] Sheik-Bahae, A. A., T. H. Said, and D. J. Wei. "Hagan, and EW van Stryland." *IEEE J. Quantum Electron* 26 ,760, 1990.

[4] M. Sheik-Bahae, A. Said, and E. Van Stryland, "High-sensitivity, single-beam n2 measurements," Opt. Lett. 14, 955-957 ,1989.

[5] Miller, S., F. Rotermund, G. Xu, F. Noack, V. Panyutin, and V. Petrov. "Polarization-dependent nonlinear refractive index of BiB3O6." *Optical Materials*, Vol. 30, no. 10, pp.1469-1472, 2008.

[٦] لعلی، سمیرا؛ پورقباد، دلنیا؛ شمس، مریم؛ قطبی، مسعود؛ «اندازه‌گیری ضریب شکست غیرخطی کریستال BiB_3O_6 به روش روبش«Z ؛ **مجموعه مقالات سی‌امین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و شانزدهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران**، دانشگاه دامغان، ۹–۱۱ بهمن ۱٤۰۲.

یک روش تبادل یونی ساده و به صرفه برای کاربردهای تقویت فلورسانس به وسیله فلز

العبید، زهران[۱]؛ حلاج، رحمان*[۲]؛ حسن زاده، عبدالله*[۱]؛
[۱] گروه فیزیک، دانشگاه کردستان، سنندج، ایران
[۲] گروه شیمی، دانشگاه کردستان، سنندج، ایران

چکیده

در این مقاله، ما یک روش تبادل یونی کم‌هزینه و آسان را برای افزایش شدت فلورسانس از طریق روش فلورسانس تقویت‌شده با فلز گزارش می‌دهیم. در ابتدا زیرلایه‌های شیشه‌ای تجاری تحت فرآیند تبادل یونی در حمام مذاب نیترات نقره در دمای ۳۵۰ درجه سانتیگراد، به مدت زمان ۱۰، ۲۰، ۳۰ و ۶۰ دقیقه قرار گرفتند. شدت نور طیف‌جذبی با افزایش زمان تبادل یونی افزایش یافت. علاوه بر این، یک نوار تشدید پلاسمون سطحی موضعی مشخص در زمان تبادل یونی ۳۰ دقیقه، بدون هیچ گونه عملیات اضافی مانند آنیل کردن، ظاهر شد. توپوگرافی و مورفولوژی سطح با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی بررسی شد. تصویر میکروسکوپ نیروی اتمی از زیرلایه تبادل یونی ۳۰ دقیقه‌ای، نانوساختارهای نقره هرمی شکل یکنواخت را نشان داد. برای ارزیابی عملکرد نمونه ها ، مولکول‌های فلورسنت اورانین بر روی زیرلایه‌های شیشه‌ای با تبادل یونی و خالی و با روش لایه نشانی چرخشی قرار داده شدند. بالاترین شدت فلورسانس برای بستر تبادل یونی به مدت ۳۰ دقیقه با ضریب افزایش ۶٫۵ برابر به دست آمد. این نتایج نشان میدهد که روش تبادل یونی پتانسیل قابل توجهی برای استفاده در دستگاه‌های اپتوالکترونیکی و حسگرهای زیستی دارد.

واژه‌های کلیدی: *شیشه تبادل یونی، اورانین، نانوساختارهای نقره، فلورسانس تقویت‌شده با فلز.*

Facile and Cost-effective Ion-exchanged Method for MEF Applications

Zahran Alobaid[1], Rahman Hallaj*[2], Abdollah Hassanzadeh*[1]

[1] *Department of Physics, University of Kurdistan, Sanandaj, Iran*
[2] *Department of Chemistry, University of Kurdistan, Sanandaj, Iran*

Abstract

In this paper, we report a low-cost and facile ion exchange method to enhance the fluorescence intensity via metal-enhanced fluorescence (MEF) technique. Initially, commercial glass substrates were subjected to ion exchange process in a molten bath of $AgNO_3$ at 350 °C, for time duration of 10, 20, 30, and 60 min. The absorbance intensity increased with increasing the ion exchange time. Furthermore, a distinct localized surface plasmon resonance (LSPR) band appeared at 30-min ion exchange time without any additional post-treatment such as annealing. Surface topography and morphology were investigated using atomic force microscopy (AFM). The AFM image of the 30-min ion-exchanged substrate revealed well-defined, uniform pyramid-like silver nanostructures. To evaluate performance of the samples, Uranine fluorescent molecules were applied to both ion-exchanged and bare glass substrates by spin-coating. The highest fluorescence intensity was obtained for 30-min ion-exchanged substrate with an enhancement factor reaching 6.5-fold. These results underscore that the current manufacturing method holds a significant potential for using prepared ion-exchanged substrates in optoelectronic devices and biosensors.

Keywords: *Ion-exchanged glass, Uranine, Ag nanostructures, Metal Enhanced Fluorescence (MEF).*

PACS No

مقدمه

فلورسانس به عنوان یک روش تشخیص نوری با موفقیت در طیف وسیعی از زمینه‌های تحقیقاتی، از جمله شیمی، تصویربرداری پزشکی و الکترونیک نوری به کار گرفته شده است [۲،۱]. با این وجود، کاربردهای مولکول‌های فلورسنت با مانع قابل توجهی روبرو هستند زیرا شدت لومینسانس بسیار کمی دارند. برای غلبه بر این مشکل، فلورسانس تقویت‌شده با فلز یک روش جایگزین امیدوارکننده است که از تشدید پلاسمون سطحی موضعی در نانوساختارهای فلزی برای تولید میدان الکترومغناطیسی فوق‌العاده قوی استفاده می‌کند. این میدان‌های الکترومغناطیسی

تقویت‌شده، زمینه را برای بکارگیری نانوساختارهای فلزی در حسگرهای شیمیایی/بیوشیمیایی، فوتوکاتالیز، انرژی خورشیدی و آشکارسازهای نوری فراهم می‌کنند [۳-۶]. در نتیجه، میدان‌های الکتریکی موضعی ناشی از تشدید پلاسمون سطحی می‌توانند سطح مقطع جذب و انتشار نور فلوروفورها را افزایش دهند [۷]. لازم به یادآوریست که فلورسانس تقویت‌شده با فلز از اهمیت زیادی برای به کارگیری در زیست شناسی و حسگری زیستی برخوردار است [۸-۱۰]. اما هنگامی که به مکانیسم اساسی تقویت فلورسانس در مجاورت سطوح فلزی دقیق تر نگاه شود، آشکار می‌شود که خاموشی فلورسانس در نزدیکی سطوح فلزی اغلب از طریق انتقال الکترون و/یا انتقال انرژی از فلوروفور برانگیخته به فلز رخ می‌دهد و در نتیجه سرعت واپاشی غیرتابشی را افزایش می‌دهد [۹]. شدت فلورسانس تا حد زیادی به فاصله واقعی بین فلوروفورها و فلز بستگی دارد. معمولاً، فلورسانس در فاصله نزدیک کمتر از ۵ نانومتر به وضوح خاموش می‌شود و در فاصله تقریبی ۱۵ نانومتربه صورت قابل توجهی افزایش می یابد [۱۱]. تهیه نانوخوشه‌های فلزی با استفاده از تبادل یونی و کاشت یونی در مرجع [۱۲] گزارش شده است. هر دو فرآیند برای تولید نانوخوشه‌های فلزی در ماتریس شیشه‌ای به خوبی شناخته شده‌اند. تهیه این شیشه‌ها با روش تبادل یونی، روشی ساده و مقرون به صرفه برای تولید نانوخوشه‌ها در مقیاس بزرگتر است. کاربرد شیشه‌های تبادل یونی شامل میکرولنزهای ، موجبرهای اپتیکی و سوئیچ های نوری است [۱۳]. هنگامی که شیشه درنمک‌های فلزی مذاب، مانند نیترات نقره، قرار میگیرد تبادل یونی صورت میگیرد. در این فرایند یون‌های نقره با جابجایی با یون‌های سدیم موجود در شیشه، به درون شیشه نفوذ می‌کنند و بعدا مانند مکان‌های هسته‌زایی در سطح شیشه برای نانوخوشه‌های فلزی عمل می‌کنند [۱۴، ۱۵]. در کار حاضر، ما تأثیر زمان فرآیند تبادل یونی را بر نانوساختارهای نقره تشکیل شده در سطح شیشه و بر افزایش شدت فلورسانس اورانین لایه نشانی شده بر روی زیرلایه‌های شیشه‌ای بررسی کردیم. بنابراین، هدف این مقاله گزارش یک روش ساده و مقرون به صرفه برای ساخت یک بستر پلاسمونیک برای کاربردهای فلورسانس تقویت‌شده با فلز است.

جزئیات آزمایش

مواد

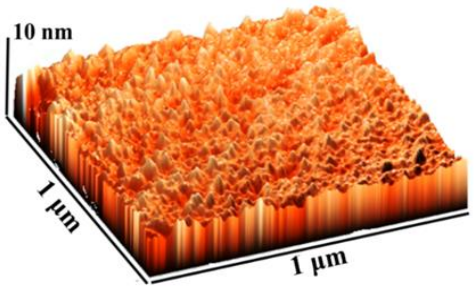
زیرلایه‌های شیشه‌ای تجاری، نیترات نقره ($AgNO_3$، خلوص >99%)، اتانول (C_2H_6O >96%)، استون (C_3H_6O HPLC grade)، محلول‌های پیرانا (H2SO4:H2O2، 3:1) از شرکت سیگما-آلدریچ تهیه شدند. اورانین یا سدیم فلورسین ($C_{20}H_{10}Na_2O_5$) از شرکت مرک تهیه شد. همه مواد بدون خالص‌سازی بیشتر، همانطور که دریافت شده بودند، استفاده شدند.

روش انجام آزمایش ها

شیشه تبادل یونی با غوطه‌ور کردن کامل زیرلایه‌های شیشه‌ای تجاری تمیز در حمام نمک مذاب نیترات نقره در دمای ۳۵۰ درجه سانتیگراد، به مدت زمان ۱۰، ۲۰، ۳۰ و ۶۰ دقیقه ساخته شد. سپس نمونه‌ها در هوا قرار داده شدند تا در دمای اتاق خنک شوند. نمونه‌ها چندین بار در آب دو باریونیزه در دمای اتاق شسته شدند، سپس در هوا خشک شده و در ظروف مخصوص نگه داری شدند. سطوح نمونه‌های آماده شده با ماده فلورسانس، با استفاده از دستگاه اسپین-کوتر، با ۵۰ میکرولیتر محلول اورانین با غلظت ۱۰ میکرومولار پوشانده شدند. توپوگرافی و زبری سطح نمونه‌ها توسط میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) مدل ND-MDT بررسی شد. طیف جذب نوری نمونه‌های شیشه تبادل یونی در دمای اتاق در محدوده طول موج ۳۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر با استفاده از اسپکتروفتومتر UV-Vis (SPECORD 250، Analytik Jena) اندازه‌گیری شد. اندازه‌گیری‌های فلورسانس توسط اسپکتروفتومتر فلورسانس (Cary Eclipse، Varian) در طول موج تحریک ۵۰۵ نانومتر انجام شد.

نتایج و بحث

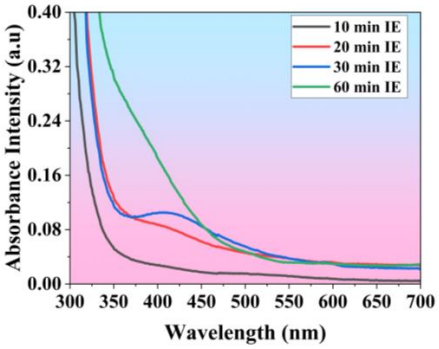
از آنجایی که بالاترین ضریب تقویت شدت فلورسانس از شیشه تبادل یونی ۳۰ دقیقه‌ای مشاهده شد، تصویربرداری میکروسکوپ نیروی اتمی بر روی سطح این نمونه انجام شد شکل ۱. به باور ما افزایش قابل توجه فلورسانس به توزیع یکنواخت نانوساختارهای نقره هرمی شکل با نوک‌های تیز بر روی سطح ماتریس شیشه مربوط می‌شود. این توزیع یکنواخت، میدان‌های الکتریکی محلی قوی ایجاد می‌کند که به نوبه خود، هم نرخ تحریک و هم نرخ انتشار مولکول‌های فلورسنت واقع در این میدان‌ها را افزایش می‌دهد [۱۶].



شکل ۱. تصویر میکروسکوپ نیروی اتمی از سطح شیشه تبادل یونی شده در ۳۰ دقیقه.

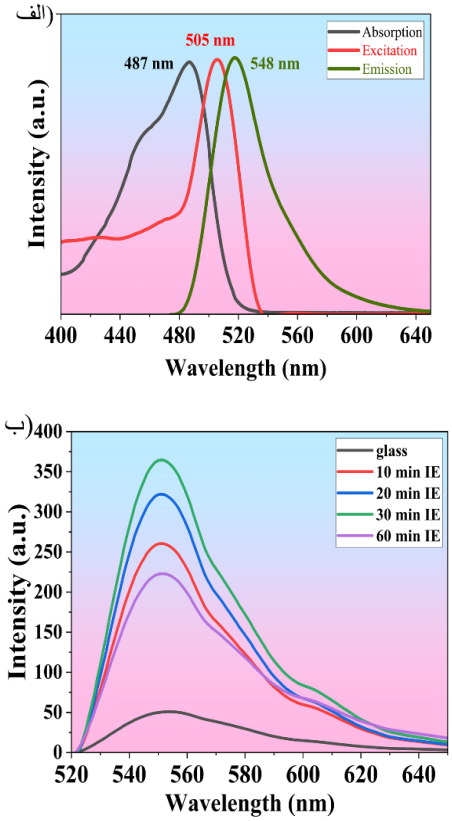
شکل ۲، شدت نور طیف جذبی نرمال‌شده نمونه‌های شیشه تبادل یونی‌شده را در زمان‌های مختلف ۱۰، ۲۰، ۳۰ و ۶۰ دقیقه نشان می‌دهد، که در آن طیف هر نمونه شیشه تبادل یونی‌شده از طیف شیشه خالی کم شده است تا سهم نانوساختارهای نقره مشاهده شود. بدیهی است که با افزایش زمان تبادل یونی، شدت نور به طور چشمگیری افزایش می‌یابد. علاوه بر این، یک پیک شانه‌ای واضح برای نمونه تبادل یونی‌شده به مدت ۱۰ و ۲۰ دقیقه ظاهر

می‌شود که مربوط به تشکیل یون‌های نقره یا نانوخوشه‌های نقره کوچک حاوی ۲ تا ۳۰ اتم، مورفولوژی نامنظم نانوخوشه‌های سطحی و فواصل نسبتاً زیاد بین خوشه‌ای است [۱۷]. در زمان تبادل یونی ۳۰ دقیقه، یک نوار تشدید پلاسمون سطحی موضعی در ۴۰۷ نانومتر مشاهده می‌شود. وجود این نوار را می‌توان به تشکیل نانوذرات نقره ناپیوسته با ویژگی‌های هرمی شکل نسبت داد که به طور یکنواخت‌تری در ماتریس شیشه‌ای و روی سطح آن پخش می‌شوند [۱۸]. هنگامی که زمان تبادل یونی به ۶۰ دقیقه افزایش می‌یابد، نوار تشدید پلاسمون سطحی موضعی و پیک شانه مانند ناپدید. این تغییر ممکن است به تراکم و ادغام نانوخوشه‌های نقره نسبت داده شود که احتمالاً منجر به تغییر رنگ قرمز در ویژگی‌های نوری می‌شود. چنین تغییر رنگی قرمز نشان دهنده افزایش تعداد و اندازه مراکز هسته‌زایی با افزایش زمان تبادل یونی، در مقایسه با نمونه‌های در مدت زمان کوتاه‌تر است [۱۷].



شکل ۲. شدت نور طیف جذبی نرمال‌شده نمونه‌های شیشه‌ای تبادل یونی شده در زمان‌های مختلف تبادل یونی.

طیف‌های جذب، برانگیختگی و گسیل مولکول فلورسنت اورانین که در شکل ۳الف رسم شده است. اورانین یا فلورسین سدیم، متعلق به دسته‌ای از رنگ‌های فلوروژنیک معروف به رنگ‌های زانتن است. در شکل ۳الف، طیف جذب اورانین، که در آب دیونیزه اندازه‌گیری شده است، ارائه شده است. این طیف دو پیک جذبی مشخص را نشان می‌دهد. پیک اول در طول موج کوتاه‌تر در ۴۴۵ نانومتر، که در آن مولکول فلورسنت از حالت پایه S0 به سطح ارتعاشی بالاتر حالت S2 برانگیخته می‌شود. پیک دوم در طول موج بلندتر ۴۸۷ نانومتر، که در آن مولکول از حالت S0 به پایین‌ترین سطح ارتعاشی حالت S1 برانگیخته می‌شود، که همان سطحی است که نور ساطع می‌کند. شکل ۳الف همچنین طول موج تحریک ۵۰۵ نانومتر و طیف فلورسانس اورانین در آب دیونیزه را نشان می‌دهد که دارای یک پیک مشخص در ۵۴۸ نانومتر با بازده کوانتومی بالا است. در نهایت، جابجایی استوکس را می‌توان به عوامل زیادی مانند تکامل طیف‌های فلورسانس که توسط آرامش ارتعاشی در حالت برانگیخته، اثرات آرامش قوی حلال در محیط آب قطبی و تثبیت حالت برانگیخته توسط توزیع مجدد بار کنترل می‌شود، نسبت داد [۱۹]. تجزیه و تحلیل طیف‌های فلورسانس اورانین در شکل ۳ب نشان می‌دهد که شدت فلورسانس ساطع شده از سطح شیشه تبادل یونی بیشتر از شیشه خالی بوده است. یافته‌های نشان داده شده در شکل ۳ب نشان می‌دهد که با افزایش زمان تبادل یونی، شدت فلورسانس افزایش یافته و بیشترین افزایش را در ۳۰ دقیقه (زمان تبادل یونی) است. هنگامی که زمان تبادل یونی به ۶۰ دقیقه افزایش می یابد، شدت فلورسانس به طور قابل توجهی کاهش می یابد. برای تفسیر این نتایج، می‌توان استنباط کرد که نانوساختارهای نقره با افزایش زمان تبادل یونی، روی/داخل سطح شیشه قرار می‌گیرند و در ۳۰ دقیقه زمان تبادل یونی به درجه بالایی از نظم ساختاری می‌رسند. در طول این فرآیند، نانوساختارهای حاصل دارای ویژگی‌های هرمی شکل مختلفی هستند که منجر به لبه‌های تیز و فاصله منظم بین ذرات می‌شود. این موارد به افزایش میدان الکتریکی موضعی کمک می‌کنند. این میدان الکتریکی با سطوح انرژی مرتبط با مولکول فلورسنت برهمکنش می‌کند و سرعت برانگیختگی و انتشار فلورسنت را افزایش می‌دهد [۱۶]. از سوی دیگر، در ۶۰ دقیقه، فاصله بین ذرات به دلیل ادغام ذرات کوچک برای تشکیل ذرات بزرگتر کاهش می‌یابد. در نتیجه، شدت فلورسانس کاهش می‌یابد زیرا مولکول‌های فلورسنت کمتری در معرض میدان الکتریکی موضعی قرار می‌گیرند که به دلیل تغییر شکل در نانوساختارهای حاصل است.



شکل ۳. الف) طیف‌های جذب، تحریک و نشر اورانین با غلظت تقریبی ۱۰ میکرو مولار، حل شده در آب دیونیزه، ب) طیف‌های فلورسانس نمونه‌های شیشه‌ای پوشش داده شده با اورانین و سطوح تبادل یونی شده.

نتیجه‌گیری

در کار حاضر، فرآیند تبادل یونی بر روی زیرلایه‌های شیشه‌ای تجاری برای افزایش شدت فلورسانس مولکول‌های فلورسانس اورانین انجام شد. نتایج طیف‌های جذبی نشان داد که شدت نور نرمال‌شده نمونه‌های تهیه‌شده با افزایش زمان تبادل یونی افزایش یافته است، همچنین یک نوار تشدید پلاسمون سطحی موضعی واضح در زمان تبادل یونی ۳۰ دقیقه مشاهده شد که مربوط به تشکیل نانوساختارهای نقره حاصل از فرآیند تبادل یونی بدون هیچ گونه عملیات اضافی مانند آنیل کردن است. از سوی دیگر، نمونه تبادل یونی ۳۰ دقیقه‌ای بالاترین شدت فلورسانس را در مقایسه با سایر نمونه‌ها نشان داد که می‌توان آن را به تشکیل توزیع مشخص نانوساختارهای نقره نسبت داد. علاوه بر این، ضریب افزایش این نمونه تبادل یونی تقریباً به ۶٫۵ برابر رسید.

مراجع

[۱] B. N. G. Giepmans, S. R. Adams, M. H. Ellisman, and R. Y. Tsien, "The fluorescent toolbox for assessing protein location and function," Science, vol. 312, no. 5771, pp. 217–224, Apr. 14, 2006. doi: 10.1126/science.1124618.

[۲] S. Weiss, "Fluorescence spectroscopy of single biomolecules," Science, vol. 283, no. 5408, pp. 1676–1683, Mar. 12, 1999. doi: 10.1126/science.283.5408.1676.

[۳] P. Holzmeister, G. P. Acuna, D. Grohmann, and P. Tinnefeld, "Breaking the concentration limit of optical single-molecule detection," Chem. Soc. Rev., vol. 43, no. 4, pp. 1014–1028, Feb. 21, 2014. doi: 10.1039/c3cs60207a.

[٤] X. Wang, S. Li, P. Zhang, F. Lv, L. Liu, L. Li, and S. Wang, "An optical nanoruler based on a conjugated polymer-silver nanoprism pair for label-free protein detection," Advanced Materials, vol. 27, no. 39, pp. 6040–6045, Oct. 2015, doi: 10.1002/adma.201502880.

[٥] K. Hu, H. Chen, M. Jiang, F. Teng, L. Zheng, and X. Fang, "Broadband photoresponse enhancement of a high-performance t-Se microtube photodetector by plasmonic metallic nanoparticles," Advanced Functional Materials, vol. 26, no. 36, pp. 6641–6648, Sep. 2016, doi: 10.1002/adfm.201602408.

[٦] J. Yang, Y. Guo, W. Lu, R. Jiang, and J. Wang, "Emerging applications of plasmons in driving CO_2 reduction and N_2 fixation," Adv. Mater., vol. 30, no. 48, p. 1802227, Nov. 2018, doi: 10.1002/adma.201802227.

[۷] C. D. Geddes and J. R. Lakowicz, "Metal-enhanced fluorescence," Journal of Fluorescence, vol. 12, no. 2, pp. 121–129, Jun. 2002, doi: 10.1023/A:1016875709579.

[۸] J. J. Giner-Casares and L. M. Liz-Marzán, "Plasmonic nanoparticles in 2D for biological applications: Toward active multipurpose platforms," Nano Today, vol. 9, no. 3, pp. 365–377, Jun. 2014, doi: 10.1016/j.nantod.2014.05.004.

[۹] P. Anger, P. Bharadwaj, and L. Novotny, "Enhancement and quenching of single-molecule fluorescence," Physical Review Letters, vol. 96, no. 11, Art. no. 113002, Mar. 2006, doi: 10.1103/PhysRevLett.96.113002

[۱۰] E. Matveeva, Z. Gryczynski, J. Malicka, I. Gryczynski, and J. R. Lakowicz, "Metal-enhanced fluorescence immunoassays using total internal reflection and silver island-coated surfaces," Analytical Biochemistry, vol. 334, no. 2, pp. 303–311, Nov. 2004, doi: 10.1016/j.ab.2004.08.034.

[۱۱] Y.-Q. Li, L.-Y. Guan, H.-L. Zhang, J. Chen, S. Lin, Z.-Y. Ma, and Y.-D. Zhao, "Distance-dependent metal-enhanced quantum dots fluorescence analysis in solution by capillary electrophoresis and its application to DNA detection," Analytical Chemistry, vol. 83, no. 11, pp. 4103–4109, Jun. 2011, doi: 10.1021/ac200224y.

[۱۲] A. Quaranta, E. Cattaruzza, and F. Gonella, "Modelling the ion exchange process in glass: Phenomenological approaches and perspectives," *Materials Science and Engineering: B*, vol. 149, no. 2, pp. 133–139, Mar. 2008, doi: 10.1016/j.mseb.2007.11.016.

[۱۳] X. C. Yang, Z. W. Dong, H. X. Liu, J. X. Xu, and S. X. Qian, "Effects of thermal treatment on the third-order optical nonlinearity and ultrafast dynamics of Ag nanoparticles embedded in silicate glasses," Chemical Physics Letters, vol. 475, nos. 4–6, pp. 256–259, Jun. 2009, doi: 10.1016/j.cplett.2009.05.055.

[۱٤] A. Miotello, G. De Marchi, G. Mattei, P. Mazzoldi, and A. Quaranta, "Clustering of silver atoms in hydrogenated silver-sodium exchanged glasses," *Appl. Phys. A*, vol. 70, pp. 415–419, 2000, doi: 10.1007/s003390000433.

[۱٥] E. Borsella, F. Gonella, P. Mazzoldi, A. Quaranta, G. Battaglin, and R. Polloni, "Spectroscopic investigation of silver in soda-lime glass," Chem. Phys. Lett., vol. 284, no. 5–6, pp. 429–434, Mar. 1998, doi: 10.1016/S0009-2614(97)01445-0.

[۱٦] S. Berneschi, C. D'Andrea, F. Baldini, M. Banchelli, M. de Angelis, S. Pelli, R. Pini, D. Pugliese, N. G. Boetti, D. Janner, D. Milanese, A. Giannetti, and P. Matteini, "Ion-exchanged glass microrods as hybrid SERS/fluorescence substrates for molecular beacon-based DNA detection," Analytical and Bioanalytical Chemistry, vol. 413, no. 24, pp. 6171–6182, Oct. 2021, doi: 10.1007/s00216-021-03418-0.

[۱۷] I. Piwoński, K. Spilarewicz-Stanek, A. Kisielewska, K. Kadzioła, M. Cichomski, and J. Ginter, "Examination of Ostwald ripening in the photocatalytic growth of silver nanoparticles on titanium dioxide coatings," Applied Surface Science, vol. 373, pp. 38–44, Jun. 2016, doi: 10.1016/j.apsusc.2016.01.131.

[۱۸] P. K. Jain, K. S. Lee, I. H. El-Sayed, and M. A. El-Sayed, "Calculated absorption and scattering properties of gold nanoparticles of different size, shape, and composition: Applications in biological imaging and biomedicine," J. Phys. Chem. B, vol. 110, no. 14, pp. 7238–7248, Apr. 2006, doi: 10.1021/jp057170o.

[۱۹] H. Langhals, "Fluorescence and fluorescent dyes," Physical Sciences Reviews, vol. 5, no. 8, Art. no. 20190100, Aug. 2020, doi: 10.1515/psr-2019-0100.

اصلاح سطح لایه انتقال‌دهنده حفره $CuInS_2$ به کمک پوشش نازک طلا جهت افزایش بازده سلول‌های خورشیدی پروسکایتی با الکترود کربنی

قاسمی، فاطمه[۱]؛ غیور، رضا[۱]؛ حیدری رامشه، مریم[۲*]؛ تقوی نیا، نیما[۱و۳*]

[۱] مرکز علوم و فناوری نانو، پژوهشکده همگرا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران
[۲] دانشکده علوم و مهندسی مواد، دانشگاه تهران، تهران
[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

چکیده

سلول‌های خورشیدی پروسکایتی مبتنی بر الکترود کربنی به دلیل هزینه ساخت پایین و پایداری مناسب، گزینه‌ای امیدوارکننده برای توسعه فناوری‌های فتوولتائیک نسل جدید محسوب می‌شوند. با این حال، مقاومت تماسی و انتقال ناکارآمد حامل‌ها در فصل مشترک لایه انتقال‌دهنده حفره و الکترود کربنی می‌تواند عملکرد این ساختارها را محدود کند. در این پژوهش، اثر استفاده از یک لایه نازک طلا با ضخامت حدود ۳۵ نانومتر رسوب‌داده‌شده به روش PVD بر روی لایه انتقال‌دهنده حفره $CuInS_2$ در ساختار $ITO/TiO_2/SnO_2/Perovskite/CuInS_2/Au/Carbon$ مورد بررسی قرار گرفت. نتایج اندازه‌گیری‌های جریان–ولتاژ تحت تابش استاندارد AM 1.5G نشان داد که اعمال لایه Au موجب بهبود قابل توجه عملکرد دستگاه به ویژه جریان اتصال کوتاه شده است؛ به‌طوری‌که بازده تبدیل توان از ۱۶/۴۹ ٪ در نمونه مرجع به ۱۸/۲۷٪ افزایش یافت. این نتیجه بیانگر بهبود استخراج حامل‌ها و کاهش تلفات ناشی از بازترکیب و تجمع بار در فصل مشترک است. نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که مهندسی تماس $CuInS_2/Carbon$ از طریق یک لایه فلزی فوق‌نازک، راهکاری مؤثر برای ارتقای عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایتی کربنی محسوب می‌شود.

واژه های کلیدی: *سلول های خورشیدی پروسکایتی، مهندسی فصل مشترک، لایه انتقال دهنده حفره، الکترود کربنی*

Surface Modification of the $CuInS_2$ Hole Transport Layer Using a thin Gold Coating for Enhanced Performance of Carbon-Based Perovskite Solar Cells

Ghasemi, Fatemeh[1]; Ghayoor, Reza[1]; Heidari Ramsheh, Maryam[2*]; Taghavinia, Nima[1,3*]

[1] *Center for Nanoscience and Nanotechnology, Institute for Convergence Science & Technology, Sharif University of Technology, Tehran*
[2] *Department of Materials Science and Engineering, University of Tehran, Tehran*
[3] *Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran*

Abstract

Carbon-based perovskite solar cells (C-PSCs) have emerged as promising candidates for next-generation photovoltaic technologies owing to their low fabrication cost and superior stability. However, contact resistance and inefficient charge transport at the interface between the hole transport layer (HTL) and the carbon electrode can limit device performance. In this work, the effect of a thin gold (Au) layer with a thickness of approximately 35 nm, deposited by physical vapor deposition (PVD), on the $CuInS_2$ hole transport layer was investigated in the device architecture of $ITO/TiO_2/SnO_2/Perovskite/CuInS_2/Au/Carbon$. Current density–voltage (J–V) measurements under standard AM 1.5G illumination revealed that the introduction of the Au interlayer significantly enhanced device performance, particularly the short-circuit current density. As a result, the power conversion efficiency (PCE) increased from 16.49% for the reference device to 18.27% for the Au-modified device. This improvement is attributed to enhanced charge extraction and reduced charge recombination and accumulation at the $CuInS_2$/carbon interface. The results demonstrate that engineering the $CuInS_2$/carbon

contact using an ultrathin metallic interlayer is an effective strategy for improving the performance of carbon-based perovskite solar cells.

***Keywords**: Perovskite Solar Cells, Interfacial Engineering, Hole Transport Layer (HTL), Carbon Electrode*

مقدمه

سلول‌های خورشیدی پروسکایتی طی یک دهه گذشته به دلیل ضریب جذب نوری بالا، طول نفوذ زیاد حامل‌ها، قابلیت تنظیم گاف انرژی و امکان ساخت به روش‌های محلولی کم‌هزینه، به یکی از مهم‌ترین فناوری‌های فتوولتائیک نسل جدید تبدیل شده‌اند. پیشرفت سریع این فناوری منجر به دستیابی به بازده‌هایی در محدوده بیش از ۲۶٪ شده است که آن را در جایگاهی رقابتی با فناوری‌های متداول سیلیکونی قرار می‌دهد. در این ساختارهای با بازدهی بالا، استفاده از مواد انتقال‌دهنده حفره آلی نظیر Spiro-OMeTAD و الکترودهای فلزی گران‌قیمت مانند طلا، بخش قابل توجهی از هزینه نهایی دستگاه را تشکیل می‌دهد و علاوه بر آن، نفوذ یون‌های فلزی و تخریب مواد آلی می‌تواند پایداری دستگاه را تحت تأثیر قرار دهد[۱]. به همین دلیل، سلول‌های خورشیدی پروسکایتی مبتنی بر الکترود کربنی به عنوان جایگزینی کم‌هزینه و پایدار مورد توجه گسترده قرار گرفته‌اند. الکترودهای کربنی علاوه بر هزینه پایین، از پایداری شیمیایی و حرارتی مناسبی برخوردار بوده و با روش‌های چاپی و مقیاس‌پذیر سازگار هستند. با وجود مزایای متعدد ساختارهای کربنی، عملکرد این سلول‌ها به شدت به کیفیت فصل مشترک‌های انتقال بار وابسته است. مطالعات اخیر نشان داده‌اند که مقاومت تماسی بالا، عدم تطابق ترازهای انرژی و تجمع حامل‌ها در فصل مشترک لایه انتقال‌دهنده حفره و الکترود کربنی از مهم‌ترین عوامل محدودکننده بازده در این ساختارها هستند[۲]. ازاین‌رو، مهندسی فصل مشترک به یکی از راهبردهای کلیدی برای بهبود استخراج حامل‌ها، کاهش بازترکیب و افزایش بازده تبدیل توان تبدیل شده است[۳]. در میان مواد غیرآلی مورد استفاده به عنوان لایه انتقال‌دهنده حفره نیز $CuInS_2$ (CIS) به دلیل تحرک مناسب حامل‌ها، پایداری شیمیایی بالا، هزینه نسبتا پایین و سازگاری با فرآیندهای محلولی، به عنوان یک گزینه امیدوارکننده برای جایگزینی مواد آلی متداول مطرح شده است. با این حال، عملکرد سلول‌های مبتنی بر CIS هنوز تحت تأثیر مقاومت انتقال بار و تماس ناکامل در مرز مشترک HTL و الکترود قرار دارد[۴]. یکی از راهکارهای مؤثر برای بهبود انتقال بار در فصل مشترک‌های فتوولتائیک، استفاده از لایه‌های فلزی نازک به عنوان لایه میانی است. این لایه‌ها می‌توانند با بهبود تماس الکتریکی، کاهش مقاومت سری، تسهیل انتقال حامل‌ها و اصلاح ترازهای انرژی، عملکرد دستگاه را ارتقا دهند[۵]. به‌ویژه طلا به دلیل رسانایی الکتریکی بالا، پایداری شیمیایی مناسب و تابع کار زیاد، گزینه‌ای مناسب برای مهندسی تماس پشتی در سلول‌های خورشیدی محسوب می‌شود. در این پژوهش، اثر اعمال یک لایه نازک طلا با ضخامت ۴۰–۳۰ نانومتر که به روش تبخیر فیزیکی بخار[1] بر روی لایه انتقال دهنده حفره معدنی $CuInS_2$ رسوب داده شده است، مورد بررسی قرار گرفت. هدف اصلی این مطالعه، بهبود انتقال حامل‌ها در فصل مشترک $CuInS_2$/Carbon و ارزیابی تأثیر آن بر عملکرد فتوولتائیک سلول‌های خورشیدی پروسکایتی کربنی است. نتایج نشان می‌دهد که مهندسی این فصل مشترک از طریق یک لایه فلزی فوق‌نازک می‌تواند راهکاری ساده و مؤثر برای افزایش بازده در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی مبتنی بر الکترود کربنی باشد.

مواد و روش ها

در این پژوهش از زیرلایه‌های ITO به‌عنوان الکترود شفاف استفاده شد. پیش از لایه‌نشانی، زیرلایه‌ها به منظور حذف آلودگی‌های سطحی طی مراحل متوالی در حمام اولتراسونیک در حلال‌های مختلف تمیز شدند. ابتدا زیرلایه‌ها به مدت ۱۵ دقیقه در آب دی‌یونیزه و سپس به مدت ۱۵ دقیقه در اتانول قرار داده شدند. پس از آن، نمونه‌ها خشک شدند تا از باقی‌ماندن حلال روی سطح جلوگیری شود. برای تشکیل لایه انتقال الکترون، از روش اسپری پایرولیز[2] جهت لایه‌نشانی TiO_2 متراکم استفاده شد. محلول پیش‌ماده بر روی زیرلایه‌های گرم‌شده در دمای ۲۵۰ درجه

[1] Physical Vapor Deposition (PVD)
[2] Spray Pyrolysis

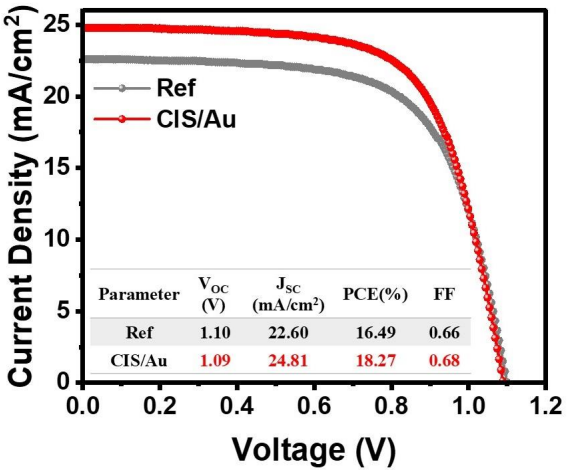
سانتی‌گراد اسپری گردید تا لایه‌ای یکنواخت و متراکم تشکیل شود. بلافاصله پس از لایه‌نشانی، نمونه‌ها به مدت ۲۰ ثانیه تحت تابش لامپ هالوژن قرار گرفتند تا فرآیند سینتر اولیه و بهبود اتصال بین ذرات تسریع شود. سپس لایه SnO_2 به روش لایه نشانی چرخشی[3] روی زیرلایه با سرعت ۴۰۰۰ rpm به مدت ۳۰ ثانیه لایه نشانی شد. به منظور بهبود ترشوندگی سطح و حذف بقایای آلی احتمالی، زیرلایه‌های دارای لایه TiO_2 به مدت ۲۰ دقیقه تحت تیمار UV-ozone قرار گرفتند. این مرحله موجب افزایش انرژی سطحی و بهبود کیفیت لایه‌نشانی لایه‌های بعدی گردید. لایه جاذب پروسکایت با فرمول $Cs_{0.08}FA_{0.8}MA_{0.12}Pb(I_{0.88}Br_{0.12})_3$ به روش لایه نشانی چرخشی دو مرحله‌ای روی ETL لایه نشانی شد. مرحله اول با سرعت ۱۰۰۰ rpm به مدت ۱۰ ثانیه و مرحله دوم با سرعت ۵۰۰۰ rpm به مدت ۲۰ ثانیه انجام گرفت. پس از لایه نشانی، لایه پروسکایت به مدت یک ساعت در دمای ۱۰۰°C آنیل شد تا کریستالیزاسیون کامل و تشکیل فیلم یکپارچه حاصل شود. برای لایه انتقال‌دهنده حفره، محلول $CuInS_2$ به روش لایه نشانی چرخشی با سرعت ۲۰۰۰ rpm، ۳۰ ثانیه لایه نشانی شد و سپس به مدت ۱۰ دقیقه در دمای ۱۰۰ °C آنیل گردید تا فیلم یکنواخت و چسبنده تشکیل شود. برای بهبود انتقال بار و کاهش مقاومت تماسی در فصل مشترک لایه جاذب، یک لایه نازک طلا به روش تبخیر فیزیکی در خلا بر روی لایه $CuInS_2$ لایه‌نشانی شد. این فرآیند در شرایط خلا بالا (در محدوده حدود 10^{-6} mbar) انجام گرفت تا از آلودگی و اکسیداسیون سطحی جلوگیری شود و یک لایه یکنواخت و با خلوص بالا حاصل گردد. در نهایت، الکترود کربنی با استفاده از روش بلید لایه‌نشانی شد و نمونه‌ها برای ۳۰ دقیقه در دمای ۷۰°C آنیل گردیدند تا لایه نهایی تثبیت شود.

سلول‌های ساخته‌شده با استفاده از شبیه‌ساز خورشیدی AM 1.5G و چگالی توان ۱۰۰ mW/cm^2 مورد اندازه‌گیری J–V قرار گرفتند تا عملکرد سلول ها مشخص شود.

[3] Spin coating

نتایج و بحث

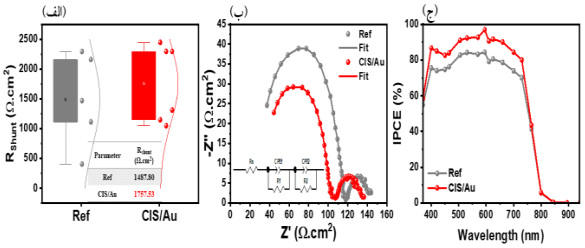
همان‌طور که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، اعمال لایه میانی طلا با ضخامت تقریبی ۳۵ نانومتر منجر به بهبود چشمگیر بازده تبدیل توان از ۱۶/۴۹٪ در نمونه مرجع به ۱۸/۲۷٪ در نمونه اصلاح‌شده گردیده است. این ارتقای قابل توجه در کارایی فتوولتائیک، عمدتا ناشی از افزایش محسوس چگالی جریان اتصال کوتاه از ۲۲/۶۰ $mA.cm^{-2}$ به ۲۴/۸۱ $mA.cm^{-2}$ و همچنین بهبود فاکتور پرشدگی از ۰/۶۶ به ۰/۶۸ است. در مقابل، ولتاژ مدار باز تغییر چندانی نکرده که نشان می‌دهد لایه فوق‌نازک فلزی آسیب ساختاری یا افت در ترازهای شبه‌فرمی جاذب پروسکایت ایجاد نکرده است.



شکل ۱: منحنی‌های J–V دستگاه‌های مرجع و اصلاح‌شده با لایه واسط CIS/Auو پارامترهای فتوولتائیکی متناظر.

بهبود هم‌زمان J_{sc} و FF را می‌توان بر اساس مکانیسم‌های مهندسی ترازهای انرژی و بهبود فیزیک تماس در مرزهای مشترک تبیین کرد. الکترودهای کربنی به دلیل ماهیت متخلخل و ناهمواری‌های میکروسکوپی خود، معمولا نمی‌توانند تماس الکتریکی کاملا ایده‌آلی با لایه‌های انتقال حامل زیرین برقرار کنند. لایه نشانی یک لایه فوق‌نازک و یکنواخت از طلا به روش PVD، با پر کردن این ریزحفره‌ها، یک تماس اهمی بهبودیافته را در مرز مشترک ایجاد می‌کند. طلا به دلیل تابع کار بالا (Wf~ 5.1 eV)، هم‌ترازی

انرژی بسیار مناسبی را بین باند ظرفیت و تراز فرمی الکترود کربن تسهیل کرده و سد پتانسیل در برابر استخراج و جمع‌آوری حفره‌ها را به حداقل می‌رساند. با کاهش این سد انرژی تماسی و پتانسیل شاتکی، انتقال بار تسهیل شده و مهار بازترکیب صورت می‌گیرد. شکل ۲ نتایج مربوط به تحلیل آماری مقاومت شانت (Rsh)، نمودارهای نایکوییست آزمون طیف‌سنجی امپدانس الکتروشیمیایی (EIS) و طیف‌های بازده کوانتومی خارجی (IPCE) سلول‌های مرجع و سلول‌های اصلاح‌شده با لایه نازک طلا را نشان می‌دهد.



شکل ۲: نتایج آنالیزهای الکتریکی سلول‌های خورشیدی پروسکایتی مرجع و دارای لایه نازک Au: (الف) مقاومت شانت (Rsh)، (ب) نمودارهای نایکوییست EIS و مدار معادل، و (ج) طیف‌های IPCE.

مقادیر مقاومت شانت از منحنی‌های چگالی جریان–ولتاژ (J–V) در ناحیه نزدیک به اتصال کوتاه (V≈0) استخراج شده و توزیع آماری آن‌ها با استفاده از چندین سلول مستقل مورد ارزیابی قرار گرفته است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، سلول‌های دارای لایه نازک طلا مقدار میانگین بالاتری برای مقاومت شانت دارند که بیانگر کاهش جریان‌های نشتی و بهبود عملکرد سلول‌ها است. این نتایج نشان می‌دهد که لایه بسیار نازک طلا تماس الکتریکی بین لایه انتقال‌دهنده حفره $CuInS_2$ و الکترود کربنی را به‌طور مؤثری بهبود داده است. نتایج آزمون EIS نیز این موضوع را تأیید می‌کند. کاهش قطر نیم‌دایره‌های نمودار نایکوییست در سلول اصلاح‌شده با طلا نشان‌دهنده کاهش مقاومت انتقال بار در فصل مشترک و استخراج مؤثرتر حفره‌ها است. بهبود تماس الکتریکی در فصل مشترک $CuInS_2$/Au/Carbon انتقال حامل‌های بار را تسهیل کرده و با کاهش تجمع بار در این ناحیه، موجب افزایش ضریب پرشدگی (FF) و چگالی جریان اتصال کوتاه (Jsc) شده است. طیف‌های IPCE نیز با نتایج حاصل از آزمون‌های فتوولتائیکی کاملاً همخوانی دارند. سلول اصلاح‌شده با طلا در بخش عمده‌ای از ناحیه مرئی، به‌ویژه در بازه طول موج ۵۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر، بازده کوانتومی خارجی بالاتری نسبت به نمونه مرجع نشان می‌دهد که بیانگر جمع‌آوری مؤثرتر حامل‌های نوری تولیدشده است. افزایش مقادیر IPCE با افزایش چگالی جریان اتصال کوتاه (Jsc) به‌دست‌آمده از منحنی‌های J–V مطابقت داشته و تأیید می‌کند که بهبود عملکرد سلول عمدتاً ناشی از بهبود استخراج و جمع‌آوری حامل‌ها است.

نتیجه گیری

هدف اصلی این پژوهش، بهبود مهندسی فصل‌مشترک‌ها و کاهش تلفات ناشی از مقاومت تماسی و بازترکیب حامل‌ها در سلول های خورشیدی پروسکایتی با الکترود کربنی بود. نتایج نشان داد که وارد کردن لایه نازک طلا بین CIS (لایه انتقال دهنده حفره) و الکترود کربنی، نقش کلیدی در بهبود هم‌ترازی ترازهای انرژی و افزایش کارایی استخراج حامل‌های بار ایفا می‌کند. این بهبود منجر به افزایش محسوس مقاومت شانت و افزایش راندمان تبدیل انرژی در مقایسه با ساختارهای بدون لایه واسط فلزی شد. از منظر فناوری، جایگزینی الکترودهای فلزی گران‌قیمت با الکترود کربنی پایدار، در کنار استفاده هدفمند از یک لایه واسط فلزی بسیار نازک، نشان می‌دهد که می‌توان بدون افزایش قابل توجه هزینه، به بهبود قابل توجه عملکرد الکترونیکی دست یافت.

مرجع‌ها

[1] J.Z. Mbese, *Energies* **18**, 2374 (2025).
[2] Long Luo, J. Gu, Y. Shen, S. Li, S. Chen, Y. Yang, B. Li, Y. Rong, X. Li, and J. Ding, *Renew. Sustain. Energy Rev*. **226**, 116474 (2026).
[3] M. Brown and D. Li, Front. *Energy Res*. **12**, (2024).
[4] X. Bai, H. Tang, Q. Yang, Y. Wang, and A.M. Shokri, *Mater. Chem. Phys*. **304**, 127829 (2023).
[5] H. Xie, J. Lei, Z. Zhu, X. Xu, D. Li, J. Xu, Y. Pan, and X. Yin, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **17**, 33271 (2025).

تحلیل نظری و شبیه‌سازی PIC میدان‌های دنباله ناشی از پرتوهای الکترونی نسبیتی با توزیع Gaussianدوبعدی در پلاسمای مغناطیده

مولوی چوبینی ، علی اصغر[۱و۲] ؛ شاه منصوری، مهران[۱]

[۱] گروه فیزیک اتمی-مولکولی، دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا، تهران، ایران

[۲] دانشکده فیزیک دانشگاه تهران ، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران، ایران

چکیده

این مطالعه، بررسی نظری و عددی میدان‌های دنباله تولید شده توسط یک باریکه الکترون دوبعدی گاوسی فوق نسبیتی که در یک پلاسمای مغناطیده سرد منتشر می‌شوند را ارائه می‌دهد. یک فرمولبندی تابع گرین سه‌بعدی مبتنی بر معادلات خطی‌شده ماکسول-سیال برای استخراج میدان‌های دنباله طولی و عرضی در هر دو فضای فیزیکی و تبدیل‌شده با هنکل توسعه داده شده است. شبیه‌سازی‌های سه‌بعدی الکترومغناطیسی ذره-در-سلول با استفاده از کد EPOCH برای اعتبارسنجی مدل تحلیلی انجام شده است. نتایج نشان می‌دهد که میدان مغناطیسی خارجی به طور قابل توجهی محصورشدگی عرضی و محلی‌سازی میدان‌های دنباله را افزایش می‌دهد، همچنین ویژه مدهای هیبریدی با فرکانس بالا را القا می‌کند.

واژه های کلیدی: *پلاسمای مغناطیده، تابع گرین، bunch گاوسی، شبیه‌سازی PIC ، شتاب‌دهنده پلاسمایی.*

Theoretical Analysis and PIC Simulations of دنباله‌s Driven by Bi-Gaussian Relativistic Electron Beams in Magnetized Plasmas

Molavi Choobini, Ali Asghar[1,2]; Shahmansouri, Mehran[2]

[1] Department of Atomic and Molecular Physics, Faculty of Physics, Alzahra University, Tehran, Iran

[2] Department of Physics, University of Tehran, Tehran, Iran

Abstract

This study presents a theoretical and numerical investigation of wakes generated by an ultrarelativistic Bi-Gaussian electron bunch propagating in a cold magnetized plasma. A fully causal three-dimensional Green's function formalism based on the linearized Maxwell–fluid equations is developed to derive the longitudinal and transverse wakes in both physical and Hankel-transformed spaces. Fully electromagnetic three-dimensional Particle-In-Cell simulations using the EPOCH code are performed to validate the analytical model. The results demonstrate that external magnetization significantly enhances transverse confinement, increases wake localization, and induces high-frequency hybrid eigenmodes.

***Keywords**: Magnetized plasma, Green's function, Bi-Gaussian bunch, PIC simulation, Plasma wake acceleration.*
PACS No. 52.40.Mj, 52.65.Rr

مقدمه

شتاب‌دهنده‌های مبتنی بر پلاسما، شامل شتاب‌دهنده‌های میدان دنباله (دنباله) لیزری و شتاب‌دهنده‌های میدان دنباله پلاسمایی، در سال‌های اخیر توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده‌اند [۱و۲]. این سامانه‌ها با بهره‌گیری از پاسخ جمعی الکترون‌های پلاسما در برابر پالس‌های لیزری قوی یا باریکه های نسبیتی، قادر به تولید میدان‌های شتاب‌دهنده‌ای در مقیاس گیگاولت بر متر هستند که چندین مرتبه بزرگ‌تر از گرادیان‌های قابل دستیابی در شتاب‌دهنده‌های متداول می‌باشد [۳]. در پیکربندی شتابدهنده پلاسمایی، یک باریکه الکترونی نسبیتی به‌عنوان محرک از میان پلاسما عبور کرده و با جابه‌جایی الکترون‌های پلاسما، ناحیه‌ای از جداسازی بار ایجاد می‌کند که منجر به تحریک امواج دنباله قوی می‌شود. پیشرفت‌های تجربی اخیر، از جمله افزایش همزمان انرژی و درخشندگی پرتو الکترونی و دستیابی به شتاب‌دهی با حفظ کیفیت پرتو، قابلیت بالای سامانه‌ها را برای کاربردهای شتاب‌دهی پیشرفته نشان داده‌اند [٤]. با این وجود، کنترل ساختار میدان دنباله، پایداری دینامیکی باریکه و بهینه‌سازی نیروهای کانونی‌کننده همچنان از مهم‌ترین چالش‌های فیزیکی این سامانه‌ها محسوب

می‌شوند. یکی از رویکردهای مؤثر برای اصلاح و کنترل این ساختارها اعمال میدان مغناطیسی خارجی محوری به پلاسما است. حضور میدان مغناطیسی باعث تغییر پاسخ دی‌الکتریک پلاسما و ایجاد جفت‌شدگی میان دینامیک طولی و عرضی الکترون‌های پلاسما از طریق حرکت سیکلوترونی می‌شود. در نتیجه، مد هیبریدی الکترومغناطیسی جدیدی در پلاسما ظاهر می‌شوند که می‌توانند ساختار میدان‌های دنباله، نیروهای کانونی‌کننده و پایداری انتشار پرتو را تغییر دهند. اگرچه مطالعات متعددی به بررسی دنباله در پلاسماهای مغناطیده پرداخته‌اند، بسیاری از مدل‌های موجود بر تقریب‌های الکترواستاتیکی، باریکه های نقطه‌ای یا توصیف‌های شبه‌ساکن محدود شده‌اند. در بسیاری از این مدل‌ها، جفت‌شدگی کامل الکترومغناطیسی ناشی از میدان مغناطیسی خارجی و اثر اندازه محدود باریکه به‌صورت همزمان در نظر گرفته نشده است. در این پژوهش، یک چارچوب نظری خودسازگار بر پایه تابع گرین سه‌بعدی از معادلات ماکسول–سیالات خطی‌شده در پلاسمای سرد مغناطیده توسعه داده می‌شود. این فرمول‌بندی، پاسخ کامل الکترومغناطیسی پلاسما را با در نظر گرفتن تانسور دی‌الکتریک مغناطیده توصیف کرده و جفت‌شدگی میان جداسازی بار طولی و حرکت عرضی سیکلوترونی را در بر می‌گیرد. به‌منظور مدل‌سازی پرتو محرک، توزیع بار گاوسی دوبعدی در نظر گرفته شده است که تطابق مناسبی با باریکه های مورد استفاده در سامانه‌های شتاب‌دهی مدرن دارد. برای حل معادلات میدان، از نمایش طیفی مبتنی بر تبدیل هانکل–فوریه استفاده می‌شود که به دلیل تقارن محوری سامانه، امکان استخراج روابط تحلیلی دقیق برای میدان‌های طولی و عرضی را فراهم می‌سازد. همچنین، رژیم باریکه کوتاه که در بسیاری از سامانه‌های دنباله عملیاتی اهمیت ویژه‌ای دارد، به‌صورت جداگانه بررسی شده و روابط ساده‌شده میدان‌های دنباله در این رژیم استخراج می‌گردد.

فرمولبندی

در شتاب‌دهنده‌های پلاسمامحور، توصیف دقیق توزیع بار پرتو و میدان‌های دنباله تولیدشده در پلاسما اهمیت بنیادی دارد. در چارچوب خطی پلاسمای سرد مغناطیده، میدان‌های الکترومغناطیسی ناشی از عبور یک بانچ نسبیتی را می‌توان با استفاده از توابع گرین و تبدیل هانکل به‌صورت تحلیلی محاسبه کرد. این روش امکان بررسی وابستگی میدان‌های دنباله به پارامترهای پرتو، چگالی پلاسما و میدان مغناطیسی خارجی را فراهم می‌سازد. برای این منظور، توزیع بار بانچ الکترونی به‌صورت یک توزیع گاوسی در مختصات شعاعی و طولی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\rho_b(r,\xi)=\rho_0\exp\left[-\frac{r^2}{2\sigma_r^2}\right]\exp\left[-\frac{\xi^2}{2\sigma_z^2}\right] \qquad (۱)$$

که در آن ρ_0 چگالی بیشینه بار، σ_r شعاع عرضی بانچ، σ_z طول بانچ، $\xi=z-v_bt\approx z-ct$ مختصه مستقل و r شعاع استوانه است. در مدل خطی پلاسمای سرد مغناطیده، میدان‌های دنباله از حل معادلات ماکسول کوپل‌شده با معادلات سیال الکترونی حاصل می‌شوند. میدان دنباله شعاعی در اثر رانده‌شدن الکترون‌های پلاسما از محور انتشار توسط باریکه نسبیتی و ایجاد جداسازی بار تشکیل می‌شود. این جداسازی بار گرادیان پتانسیل شعاعی ایجاد کرده و میدان شعاعی متناظر را به وجود می‌آورد. پاسخ سیستم به یک منبع نقطه‌ای توسط توابع گرین مشخص می‌شود و میدان نهایی از کانولوشن توزیع بار با این توابع به‌دست می‌آید. میدان الکتریکی طولی، میدان شعاعی و میدان مغناطیسی سمتی از رابطه های زیر محاسبه می‌شوند:

$$E_z(r_\perp,\xi)=\int_{-\infty}^{\xi}d\xi'\int\rho_b(r_\perp',\xi')G_z(r_\perp,r_\perp';\xi-\xi';B_0)d^2r_\perp' \qquad (۲)$$

$$E_r(r_\perp,\xi)=\int_{-\infty}^{\xi}d\xi'\int\rho_b(r_\perp',\xi')G_r(r_\perp,r_\perp';\xi-\xi';B_0)d^2r_\perp' \qquad (۳)$$

$$B_\theta(r_\perp,\xi)=\int_{-\infty}^{\xi}d\xi'\int\rho_b(r_\perp',\xi')G_\theta(r_\perp,r_\perp';\xi-\xi';B_0)d^2r_\perp' \qquad (٤)$$

در حالت کلی با استفاده از تبدیل هنکل میدان های دنباله طولی و شعاعی به صورت زیر محاسبه می شوند:

$$E_z(r,\xi)=\int_0^{+\infty}\int_{-\infty}^{\xi}\rho_b(k_\perp,\xi')G_z(k_\perp;\xi-\xi')J_0(k_\perp,r)k_\perp d\xi' dk_\perp \qquad (۵)$$

$$E_r(r,\xi)=\int_0^{+\infty}\int_{-\infty}^{\xi}\rho_b(k_\perp,\xi')G_r(k_\perp;\xi-\xi')J_1(k_\perp,r)k_\perp d\xi' dk_\perp \quad (٦)$$

و در حالت خاص $\sigma_z << \lambda_p$ برای این میدان ها داریم:

$$E_z(r,\xi)\approx \frac{Q}{(2\pi)^{3/2}\sigma_r^2}\int_0^{+\infty}G_z(k_\perp,\xi)J_0(k_\perp,r)k_\perp e^{-\frac{k_\perp^2\sigma_r^2}{2}}dk_\perp \quad (٧)$$

$$E_r(r,\xi)\approx \frac{Q}{(2\pi)^{3/2}\sigma_r^2}\int_0^{+\infty}G_r(k_\perp,\xi)J_1(k_\perp,r)k_\perp e^{-\frac{k_\perp^2\sigma_r^2}{2}}dk_\perp \quad (٨)$$

شبیه سازی و نتایج

به‌منظور اعتبارسنجی نتایج تحلیلی حاصل از فرمول‌بندی تابع گرین و بررسی دقیق رفتار غیرالکترواستاتیکی میدان‌های دنباله در پلاسمای مغناطیده، شبیه‌سازی‌های عددی ذره در سلول (PIC) با استفاده از کد EPOCH انجام شده‌اند. در این شبیه‌سازی‌ها، یک بانچ الکترونی فوق‌نسبیتی با توزیع چگالی گاوسی دوبعدی به‌صورت محوری متقارن تعریف شده و پارامترهای طولی و عرضی آن شامل σ_z و σ_r مطابق مدل تحلیلی انتخاب شدند تا امکان مقایسه مستقیم بین نتایج نظری و شبیه‌سازی فراهم گردد. میدان مغناطیسی خارجی یکنواخت در راستای محور انتشار اعمال شد تا اثرات سیکلوترونی و جفت‌شدگی مدهای الکترومغناطیسی هیبریدی در دینامیک دنباله بررسی شود. ابعاد دامنه شبیه‌سازی به‌گونه‌ای انتخاب شدند که چندین طول موج پلاسما را در راستای طولی و چندین شعاع پلاسما را در راستای عرضی پوشش دهند. همچنین اندازه سلول شبکه و گام زمانی مطابق شرط CFL[1] تنظیم شدند تا پایداری عددی و دقت حل میدان‌های الکترومغناطیسی تضمین گردد.

شکل ۱ رفتار میدان‌های دنباله طولی و عرضی تولیدشده توسط بانچ الکترونی گاوسی را در حضور میدان مغناطیسی خارجی محوری نشان می‌دهد. در ناحیه ابتدایی دنباله، دامنه میدان طولی E_z برای همه مقادیر B_0 تقریباً یکسان باقی می‌ماند، زیرا پاسخ اولیه پلاسما عمدتاً توسط جداسازی بار الکترواستاتیکی کنترل می‌شود. با این حال، با افزایش فاصله ξ و میدان مغناطیسی موجب تغییر فاز نوسانات دنباله و تقویت مؤلفه‌های هیبریدی الکترومغناطیسی می‌شود که نتیجه آن افزایش دامنه نوسانات منفی و ظهور ساختارهای نوسانی ثانویه است. برای میدان‌های مغناطیسی قوی‌تر، ساختار دنباله از حالت الکترواستاتیکی به رژیم قویا مغناطیسی ترکیبی گذار می‌کند. این رفتار ناشی از جفت‌شدگی بین نوسانات پلاسما و حرکت سیکلوترونی الکترون‌ها است که فرکانس‌های مد سیستم را تغییر داده و سبب ایجاد نوسانات با فرکانس بالاتر می‌شود. نمودارداخلی، مربوط به میدان شعاعی، نشان می‌دهد که افزایش میدان مغناطیسی خارجی موجب تقویت شدید نیروهای عرضی می‌شود. دامنه E_r تقریباً به‌صورت غیرخطی با B_0 افزایش یافته و در $B_0 = 2\ \mathrm{T}$ چندین برابر حالت غیرمغناطیده می‌شود. این موضوع نشان‌دهنده افزایش کارایی کانونی عرضی در پلاسمای مغناطیده است که برای حفظ کیفیت پرتو، کاهش رشد تابشی و بهبود پایداری انتشار اهمیت اساسی دارد. همچنین مشاهده می‌شود که میدان شعاعی در فواصل بزرگ‌تر شعاعی سریعاً کاهش می‌یابد که مشخصه طبیعی وابستگی بین پاسخ پلاسمایی و پروفایل گاوسی است. این رفتار بدون ناپیوستگی نسبت به بانچ های با لبه های سخت، از تحریک مدهای مرتبه بالاتر جلوگیری کرده و دنباله پایدارتری ایجاد می‌کند. میدان دنباله شعاعی مسئول ایجاد نیروی کانونی‌کننده بر ذرات شاهد است و نقش مهمی در کاهش واگرایی باریکه، حفظ کیفیت پرتو و افزایش پایداری انتشار دارد. در شتاب‌دهنده‌های پلاسما، این میدان یکی از عوامل اصلی در بهبود فرآیند شتاب‌دهی محسوب می‌شود.

شکل ۲ توزیع دوبعدی میدان دنباله طولی را نشان می‌دهد. ساختار میدان دارای تقارن محوری مشخصی بوده و رفتار آن مستقیماً از وابستگی بین توزیع فضایی بانچ و پاسخ جمعی پلاسما ناشی می‌شود. بیشترین دامنه میدان در ناحیه مرکزی شعاعی مشاهده می‌شود، جایی که چگالی بار بانچ بیشینه است و تحریک

[1] Courant-Friedrichs–Lewy (CFL)

نوسانات پلاسمایی بیشترین شدت را دارد. با افزایش فاصله شعاعی، دامنه میدان به‌صورت پیوسته کاهش می‌یابد و منجر به محدودسازی مدهای عرضی مرتبه بالا شده و دنباله پایدارتر نسبت به پروفایل‌های با لبه های سخت، تولید می‌کند.

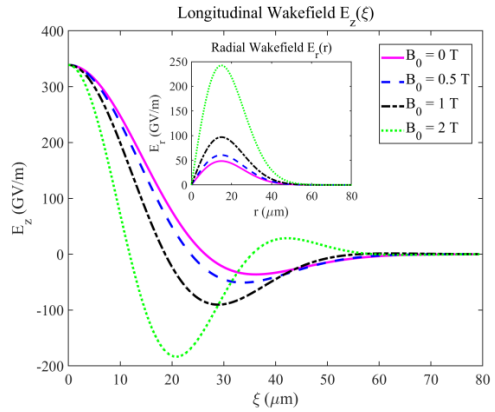
شکل ۳ توپولوژی سه‌بعدی نیروی کانونی کننده عرضی دنباله را برای مقادیر مختلف میدان مغناطیسی خارجی نشان می‌دهد و تحول ساختار میدان از رژیم تقریباً الکترواستاتیکی به رژیم میدان مغناطیسی قوی را به‌وضوح آشکار می‌سازد. در حالت غیرمغناطیده ساختار دنباله عمدتاً تک‌مدی است. نیروی کانونی کننده در اطراف محور بانچ بیشینه بوده و به‌سرعت در جهت شعاعی کاهش می‌یابد که در آن دینامیک پلاسما توسط جداسازی بار الکترواستاتیکی کنترل می‌شود. با اعمال میدان مغناطیسی خارجی، جفت‌شدگی بین نوسانات پلاسما و حرکت سیکلوترونی الکترون‌ها ظاهر شده و ساختار به‌صورت قابل‌توجهی تغییر می‌کند. در $B_0 = 2T$ تمرکز عرضی ساختار تقویت شده و محلی سازی میدان در نزدیکی محور افزایش می‌یابد. این رفتار نشان‌دهنده محدودشدگی مغناطیسی الکترون‌های پلاسما و افزایش نیروی بازگرداننده عرضی است. برای میدان‌های قوی‌تر مدهای هیبریدی پلاسما–سیکلوترونی ظاهر می‌شوند و ساختار دنباله وارد رژیمقویا مغناطیسی می‌شود. ظهور نوسان های متوالی وموجدار در راستای طولی نشانه تحریک مدهای فرکانس‌بالا و تغییر رابطه پاشندگی سیستم است.

نمودار ٤ وابستگی فرکانس مد هیبریدی را به میدان مغناطیسی خارجی نرمال‌شده برای چندین چگالی پلاسمایی مختلف نشان می‌دهد. در پلاسمای مغناطیده، فرکانس مد هیبریدی از جفت‌شدگی بین نوسانات الکترواستاتیکی پلاسما و حرکت سیکلوترونی الکترون‌ها ناشی می‌شود. بنابراین با افزایش میدان مغناطیسی خارجی و در نتیجه افزایش ω_c، فرکانس مد هیبریدی نیز افزایش می‌یابد. روند تقریباً خطی مشاهده‌شده در میدان‌های مغناطیسی بزرگ‌تر نشان می‌دهد که در این رژیم سهم دینامیک سیکلوترونی بر پاسخ پلاسما غالب می‌شود. همچنین مشاهده می‌شود که برای چگالی‌های بالاتر پلاسما، مقدار اولیه فرکانس هیبریدی نیز بزرگ‌تر است. این رفتار ناشی از وابستگی مستقیم فرکانس پلاسما به چگالی الکترونی ($\omega_p \propto \sqrt{n_0}$) است. در مقادیر بزرگ ω_c / ω_p، مدهای هیبریدی به ناحیه فرکانس‌های چندین THzوارد می‌شوند که بیانگر امکان تحریک ساختارهای دنباله پرفرکانس و قویا محصورشده در پلاسمای مغناطیده است. این ویژگی می‌تواند برای تولید میدان‌های دنباله پایدارتر و تقویت شتاب‌دهی الکترونی در نسل آینده شتاب‌دهنده‌های پلاسمایی بسیار مفید باشد.

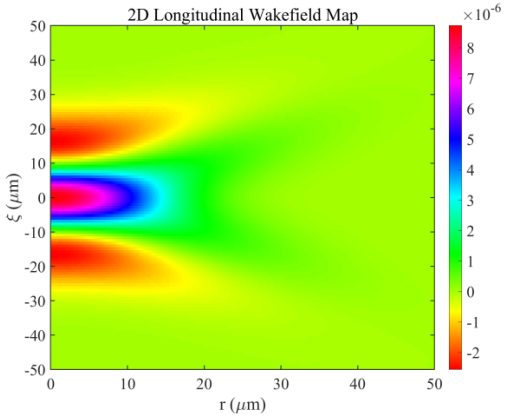
شکل ۵ نقشه فاز دوبعدی میدان دنباله طولی را در فضای (r, ξ) نشان می‌دهد و اطلاعاتی درباره ساختار موجی، همدوسی فضایی و تحول فاز دنباله در پلاسمای مغناطیده ارائه می‌کند. این الگو نشان می‌دهد که فاز میدان به‌صورت ساختارهای موجی خمیده و منظم در فضای شعاعی گسترش یافته است. این رفتار بیانگر آن است که ثابت انتشار مدهای دنباله به مختصات شعاعی وابسته بوده و میدان مغناطیسی باعث جفت‌شدگی بین دینامیک طولی و عرضی میدان شده است. همچنین در ناحیه محور مرکزی ساختار فاز یکنواخت‌تر است که نشان‌دهنده همدوسی بالاتر دنباله در مرکز بانچ می‌باشد. این ناحیه بیشترین شتاب‌دهی و قوی‌ترین نیروهای کانونی کننده در شتاب‌دهنده‌ها ایجاد می کند. همچنین با افزایش فاصله شعاعی، خطوط هم‌فاز خمیده می‌شوند و گرادیان فاز افزایش می‌یابد که ناشی از تغییر سرعت فاز مدهای هیبریدی در اثر میدان مغناطیسی خارجی و تغییر رابطه پاشندگی پلاسما است.

نتیجه گیری

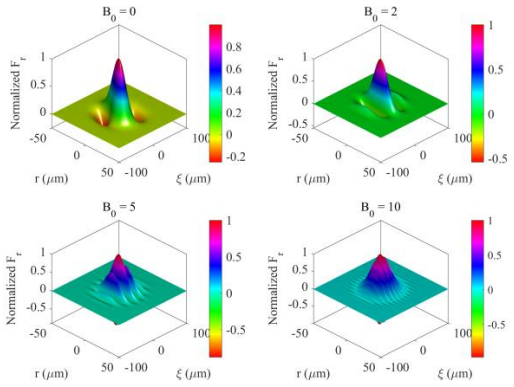
در این پژوهش، میدان‌های دنباله ناشی از بانچ الکترونی دو–گاوسی در پلاسمای مغناطیده به‌صورت نظری و عددی بررسی شد. مدل تحلیلی توسط شبیه‌سازی‌های سه‌بعدی PIC تایید شد. نتایج نشان دادند که میدان مغناطیسی خارجی موجب تقویت نیروهای کانونی کننده، افزایش محلی سازی میدان‌ها و ظهور مدهای هیبریدی می‌شود. این نتایج بیانگر نقش مؤثر میدان دنباله شعاعی در بهبود کانونش باریکه و افزایش کارایی سامانه‌های شتاب‌دهی مبتنی بر پلاسما هستند.



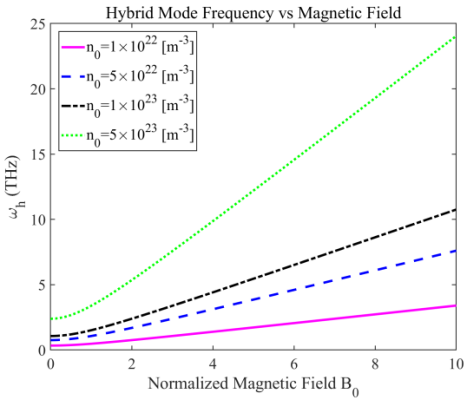
شکل۱ : تغییرات میدان دنباله طولی روی محور پرتو و میدان دنباله شعاعی عرضی برای میدان‌های مغناطیسی خارجی مختلف.



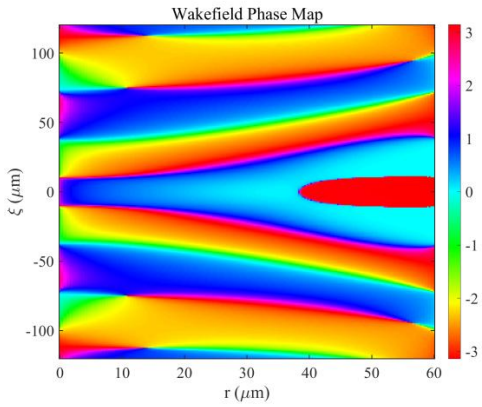
شکل۲ : توزیع فضایی دوبعدی میدان دنباله طولی تولید شده توسط یک پرتو الکترونی نسبیتی دوگاوسی در پلاسمای مغناطیده.



شکل۳ : توپولوژی سه‌بعدی نیروی تمرکز عرضی نرمال‌شده $F(r,\xi)$ برای میدان‌های مغناطیسی خارجی مختلف.



شکل٤ : تغییر فرکانس مد الکترومغناطیسی هیبریدی با میدان مغناطیسی خارجی نرمال شده برای چگالی‌های مختلف پلاسما.



شکل۵ : توزیع فاز فضایی میدان دنباله طولی در صفحه (r,ξ).

مرجع‌ها

[1] Zhang, C., et al. “Plasma-دنباله accelerator simultaneously boosts electron beam energy and brightness.” *Nature Communications*, vol. 16, 10719, 2025.
[2] Wood, J. C., et al. “Bright electron bunches from a plasma-دنباله accelerator with a steep density down-ramp.” *Nature Communications*, 1588, 2026.
[3] Liberman, A., et al., “Direct observation of a دنباله generated with structured light.” *Nature Communications*, 10957, 2025.
[4] Lindstrøm, C. A., et, al., “Beam-driven plasma-دنباله acceleration.” *arXiv preprint*, 2025.

فیلم‌های نانوکامپوزیت مغناطیسی بر پایهPVA

سیامند صالح خسرو[1و2]، عبدالله حسن زاده [1] ، رحمان حلاج[1]، شجاع الدین بکرعزیز[3]

[1] دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان ، خیابان پاسداران ، سنندج، ایران

[2] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه چرموو ، خیابان پیشوا، چمچمال، سلیمانیه، ۴۶۰۲۳، اقلیم کردستان، عیراق

[3] مرکز تحقیق و توسعه، دانشگاه سلیمانیه، محل قلیاسان، ۴۶۰۰۱ سلیمانیه، اقلیم کردستان، عیراق

چکیده

یک لایه نانوکامپوزیت مغناطیسی با هسته و پوسته از جنس اکسید آهن مغناطیسی، نقره (Fe_3O_4@Ag) / پلی‌وینیل الکل (PVA) با استفاده از تکنیک هم رسوبی شیمیایی و به دنبال آن روش قطرنشانی با موفقیت تهیه شد. لایه‌های نانوکامپوزیت Fe_3O_4@Ag از جنس PVA با افزودن (1، 3، 5 و 7 درصد وزنی) Fe_3O_4@Ag به ماتریس PVA ساخته شدند. ساختار و کیفیت لایه‌های نانوکامپوزیت سنتز شده با استفاده از طیف‌سنجی پراش انرژی اشعه ایکس (EDX) و مغناطیس‌سنج نمونه ارتعاشی (VSM) مشخص شد. نتایج، ادغام موفقیت‌آمیز هسته و پوسته از جنس Fe_3O_4@Ag در ماتریس PVA را تأیید کرد. اندازه‌گیری‌های مغناطیسی، رفتار سوپرپارامغناطیسی با وادارندگی و پسماند کم، مطابق با ذرات پارامغناطیس، را نشان دادند. سادگی فرآیند سنتز و شرایط واکنش ملایم، پتانسیل این نانوکامپوزیت را به عنوان یک نانوکاتالیست کارآمد برای کاربردهای مختلف صنعتی برجسته می‌کند.

واژه های کلیدی: *سنتز هسته–پوسته Fe3O4@Ag؛ نانوکامپوزیت‌های PVA؛ سوپرپارامغناطیس؛ خواص مغناطیسی.*

PVA Based Magnetic Nanocomposite films

Siyamand S. Khasraw [a,b], Abdollah Hassanzadeh [a] Rahman Hallaj [a], Shujahadeen B Aziz [c]

[a] *Department of Physics, Faculty of Science, University of Kurdistan, Sanandaj, Kurdistan, Iran.*
[b] *Department of Physics, College of Science, Charmo University, Peshawa Street, Chamchamal, Sulaymaniyah, 46023, Kurdistan Region, Iraq.*
[c] *Turning Trash to Treasure Laboratory (TTTL), Research and Development Center, University of Sulaimani, Qlyasan Street, 46001 Sulaymaniyah, Kurdistan Region, Iraq.*

Abstract

A core shell of magnetic iron oxide, silver (Fe_3O_4@Ag) /polyvinyl alcohol (PVA) magnetic nanocomposite film were successfully prepared using a chemical co-precipitation technique followed by the casting method. Fe_3O_4@Ag core shell @ PVA films were made by the addition of (1, 3, 5, and 7 wt.%) Fe_3O_4@Ag core shell into the PVA matrix. The structure and quality of the synthesized nanocomposite films were characterized using Energy Dispersive X-ray spectroscopy (EDX) and Vibrating Sample Magnetometer (VSM). The results confirmed the successful incorporation of Fe_3O_4@Ag core shell into the PVA matrix. Magnetic measurements demonstrated superparamagnetic behavior with low coercivity and remanence, consistent with paramagnetic particles. The simplicity of the synthesis process and the mild reaction conditions highlight the potential of this nanocomposite as an efficient nano catalyst for various industrial applications.

Keywords: *Fe_3O_4@Ag core shell; PVA nanocomposites; Superparamagnetic; Magnetic properties.*

مقدمه

پلی وینیل الکل (PVA) یک پلیمر مصنوعی بی‌رنگ، بی‌بو و آبدوست و محلول در آب است. PVA بسیار انعطاف پذیری است و به عنوان یک مانع مؤثر در برابر اکسیژن و بو عمل می‌کند [1،2]. PVA وزن مولکولی بین 30000 تا 200000 گرم بر مول دارد و معمولاً به رنگ سفید ظاهر می‌شود. این یک پلیمر غیرسمی، زیست سازگار، بی‌بو و مقاوم در برابر حرارت است [3]. ساختار نیمه بلوری PVA نتیجه گروه‌های هیدروکسیل درون زنجیره‌های پلیمری است که پیوندهای هیدروژنی درون و بین مولکولی تشکیل می‌دهند [4]. بنابراین، برهمکنش‌های فیزیکوشیمیایی با افزودنی‌ها توسط گروه‌های عاملی هیدروکسیل در اسکلت PVA هدایت می‌شوند [5].از PVA عنوان یک افزودنی برای افزایش چسبندگی و سیالیت ملات و سیمان و همچنین کاهش زمان خشک شدن سطوح بتنی استفاده شود [6، 7]. در علم مواد، بر اساس نحوه برهمکنش یک ماده با میدان

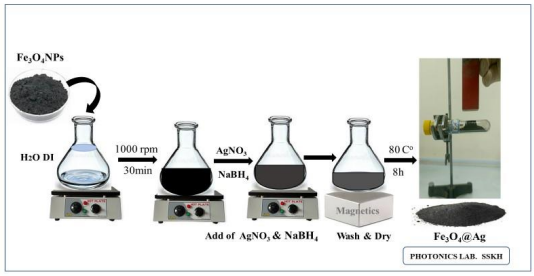
مغناطیسی خارجی به چند دسته طبقه بندی می شود. مواد به طور معمولی به عنوان دیامغناطیس، پارامغناطیس، فرومغناطیس، ضد فرومغناطیسی یا فرومغناطیسی طبقه بندی می شوند. مواد فرومغناطیسی به دلیل جذب قوی به آهنرباهای دائمی از اهمیت ویژه ای برخوردار هستند. کبالت (Co)، نیکل (Ni) و آهن (Fe) رایج ترین مواد فرومغناطیسی هستند. نانوذرات مغناطیسی (Fe_3O_4NPs) در طیف وسیعی از کاربردها در ذخیره‌سازی انرژی، دستگاه‌های ذخیره‌سازی داده‌ها، جداسازی مغناطیسی، سنجش و پردازش کاتالیزور کاربرد گسترده‌ای پیدا کرده‌اند [10،11]. نانوذرات مغناطیسی به شکل هسته–پوسته(Fe_3O_4@Ag) علاوه بر خواص مغناطیسی، دارای زیست سازگاری بالایی هستند. ساختارها (هسته اکسید آهن مغناطیسی با پوسته نقره ای) از جمله مواد مغناطیسی هستند که بسیار مورد توجه هستند [8،10].

متداول ترین روش برای افزایش رسانایی یک پلیمر و تولید پلیمرهای رسانا برای صنعت الکترونیک، استفاده از پرکننده های معدنی بسیار رسانا در ماتریس پلیمری است [12]. نانوکامپوزیت هسته Fe_3O_4@Ag @ PVA کاندید خوبی برای چنین هدفی است و با استفاده از روش ریخته‌گری حلال ساخته شده است. افزودن Fe_3O_4@Ag به عنوان پرکننده به ماتریس PVA خواص مغناطیسی را افزایش داد. این ویژگی‌های بهبود یافته، نانوکامپوزیت هسته Fe_3O_4@Ag @ PVA را به یک نامزد قابل توجه برای کاربردهای زیست پزشکی، دارورسانی و حسگرهای زیستی تبدیل می‌کند.

آزمایشگاه

سنتز پودر مغناطیسی Fe_3O_4@Ag

شکل 1 فرآیند سنتز پودر مغناطیسی Fe_3O_4@Ag را نشان می‌دهد. نانوذرات اکسید آهن مغناطیسی (Fe_3O_4) با استفاده از روش هم رسوبی شیمیایی سنتز شدند. سپس 200 میلی‌لیتر آب دیونیزه به نانوذرات اکسید آهن مغناطیسی (Fe_3O_4) اضافه شد. در مرحله بعد، 0.11 گرم نمک $AgNO_3$ و 0.31گرم $NaBH_4$ در 200 میلی‌لیتر آب دیونیزه حل شدند. تحت شرایط رفلاکس در حضور هوای اتاق و همزدن مکانیکی با سرعت 1000 دور در دقیقه. پس از هم زدن محلول به مدت 30 دقیقه و در دمای اتاق، به آرامی به محلول Fe_3O_4@Ag اضافه شد و به مدت 30 دقیقه در همان دما هم زده شد. در نهایت، رسوب خاکستری تیره تشکیل شد که سپس با کمک آهنربا از مخلوط جدا و با آب دیونیزه شسته شد. در مرحله آخر، نمونه به مدت 4 ساعت در یک آون حرارتی با دمای 80 درجه سانتیگراد خشک شد. شکل.1 Fe_3O_4@Ag را نشان می‌دهد که ساختارهای خطی به طول سانتی‌متر را در امتداد خطوط میدان مغناطیسی آهنربا تشکیل می‌دهند.



شکل.1 سنتز پودر مغناطیسی هسته–پوسته Fe_3O_4@Ag.

تهیه محلول PVA

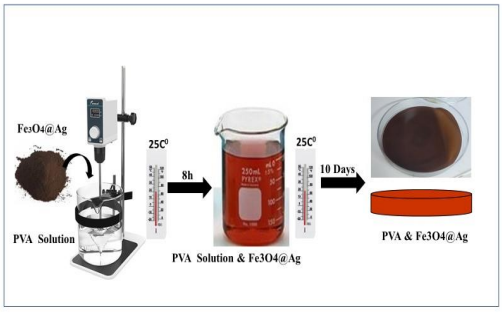
برای تهیه محلول PVA، 5 گرم پودر PVA به 150 میلی‌لیتر آب مقطر اضافه شد، سپس مخلوط حاصل حرارت داده شد و به شدت هم زده شد تا تمام PVA در عرض 5 ساعت حل شود. با افزایش دما، محلول چسبنده می‌شود و تمایل به تشکیل توده افزایش می‌یابد. پس از پخش کامل پودر، مخلوط تا حل شدن پلیمر حرارت داده می‌شود(80 تا 90 درجه سانتیگراد). فرآیند تهیه محلول PVA تا زمانی که PVA به طور کامل در دمای ذکر شده حل شود، ادامه می‌یابد شکل.2 را نیشان میدهند، زمان لازم برای تهیه محلول به درجه ماده و کارایی سیستم همزن بستگی دارد.



شکل.2 آماده‌سازی محلول (PVA)

عامل‌دار کردن سطحی فیلم‌ها (PVA و Fe_3O_4@Ag)

فیلم‌های مورد نظر شامل Fe_3O_4@Ag و PVA با استفاده از روش ریخته‌گری حلال تهیه شدند. فیلم‌های Fe_3O_4@Ag و PVA با اضافه کردن (0، 1، 3، 5 و 7 درصد وزنی) Fe_3O_4@Ag به ازای هر 30 میلی‌لیتر محلول PVA تهیه شده در آب دیونیزه تهیه شدند. برای اطمینان از همگنی بودن محلول تهیه شده به مدت 8 ساعت وبطورمداوم همرددە می شود. محلول همگن حاصل روی پتری دیش‌های با قطر 8 سانتی‌متر ریخته شد و در دمای اتاق تا زمان تشکیل فیلم مورد نظر در هوا خشک شد و سپس فیلم از صفحات جدا شد. ضخامت فیلم با حجم محلول اضافه شده کنترل شد. فیلم‌های کامپوزیتی حاصل به رنگ خاکستری تیره بودند. شکل 3 مراحل تهیه فیلم نانوکامپوزیت پلی‌وینیل الکل مغناطیسی (Fe_3O_4@Ag با PVA) را با استفاده از تکنیک ریخته‌گری محلول نشان می‌دهد. فیلم‌های نانوکامپوزیت Fe_3O_4@Ag تهیه‌شده با PVA به ترتیب برای Fe_3O_4@Ag حاوی PVA در غلظت‌های 0، 1، 3، 5 و 7 درصد وزنی با FA0، FA1، FA2، FA3 و FA4 برچسب‌گذاری شدند.

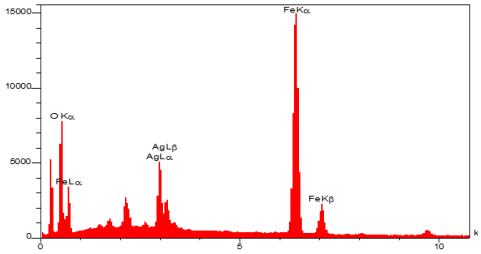


شکل 3. طرح تهیه فیلم نانوکامپوزیت (Fe_3O_4@Ag@PVA) از طریق تکنیک ریخته‌گری محلولی.

نتایج و بحث

طیف سنجی اشعه ایکس پراکنده انرژی (EDX)

طیف EDX ، سنتز موفقیت آمیز نانوذرات Fe_3O_4 و نانوذرات پوسته هسته Fe_3O_4@Ag را نشان می دهند . این طیف سه قله مشخصه اصلی را نشان می دهد. پیک تقریباً 0.55 keV مربوط به K_α اکسیژن (O)، پیک در 3.05 keV و 3.2 keV مربوط به انتقال های L_α و L_β نقره (Ag) و پیک های تیز در 0.75 keV ، 6.35 keV و 7.15 keV ، ترانس $L\alpha$، K_α ، K_β مربوط به Fe است. عدم وجود پیک های اضافی خلوص بالای هسته مگنتیت ، به ترتیب را تایید می کند. وجود یک پیک جدید متمایز که در حدود 3.05 مشاهده می شود، به عنوان قله L_α نقره شناخته می شود. این پیک تأیید می کند که نقره با موفقیت بر روی سطح اکسید آهن تثبیت شده است.

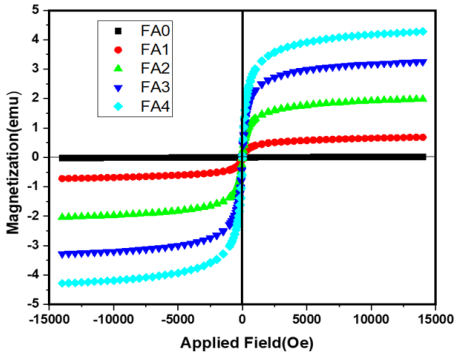


شکل 4. طیف‌های EDX برای هسته-پوسته Fe_3O_4@Ag سنتز شده.

اندازه‌گیری‌های مغناطیس‌سنج نمونه ارتعاشی (VSM)

از تکنیک VSM برای اندازه‌گیری خواص مغناطیسی فیلم‌های PVA وFe_3O_4@Ag تهیه‌شده استفاده می‌شود. خواص مغناطیسی فیلم‌ها با افزودن (0، 1، 3، 5 و7% وزنی) در دمای اتاق با استفاده از حلقه‌های هیسترزیس با میدان مغناطیسی جاروب‌شده از 15- kOe تا 15 kOe مشخص شد (شکل 5). نتایج برای همه نمونه‌های مورد مطالعه، رفتار سوپرپارامغناطیسی، با مغناطش غیرخطی و برگشت‌پذیر و بدون هیسترزیس را نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود، فیلم نانوکامپوزیتی بارگذاری شده با 7٪ وزنی Fe_3O_4@Ag@PVA به FA4 به دلیل بالاترین مقدار ناهمسانگردی، بالاترین وادارندگی را نشان داد و باعث مقاومت قابل توجهی در برابر تغییرات جهت‌دار در مغناطش شد. علاوه بر این، موقعیت‌یابی و توزیع هسته-پوسته Fe_3O_4@Ag در ماتریس PVA نقش مهمی ایفا می‌کند. نانوذرات با توزیع یکنواخت و جهت‌گیری مناسب می‌توانند با افزایش ناهمسانگردی، نیروی وادارندگی را افزایش دهند. دلیل اصلی افزایش خواص مغناطیسی PVA ، توانایی برهمکنش با Fe_3O_4@Ag از طریق پیوند هیدروژنی است. این امر

Fe_3O_4@Ag را در ماتریس PVA تثبیت می‌کند، تجمع را کاهش می‌دهد و خواص مغناطیسی را افزایش می‌دهد.



شکل 5. تغییرات مغناطش با اعمال میدان مغناطیسی، برای PVA خالص و PVA بارگذاری شده با غلظت‌های مختلف Fe_3O_4@Ag.

نتیجه‌گیری

لایه‌های نانوکامپوزیتی PVA اصلاح شده با غلظت‌های مختلف Fe_3O_4@Ag با استفاده از روش ریخته‌گری حلال تهیه شدند. برای توصیف تشکیل نانوکامپوزیت‌ها، از تکنیک‌های EDX و VSM استفاده شد. وجود پیک‌های Fe، O و Ag در نتایج EDX تأیید می‌کند که نقره با موفقیت روی سطح اکسید آهن تثبیت شده است. نتایج VSM رفتار سوپرپارامغناطیسی، با وادارندگی بسیار کم و مغناطش پسماند بسیار کم، که مشخصه نانوذرات پارامغناطیس را نشان داد.با دلیل داشتن خواص مغناطیسی به دلیل Fe_3O_4 و زیست سازگاری بالا و پایداری شیمیایی PVA، کاربردهای فوق العاده گسترده ای در علم مواد، پزشکی و صنعت دارد.

مرجع‌ها

[1] I. Saini, A. Sharma, R. Dhiman, S. Aggarwal, S. Ram, P.K. Sharma, Grafted SiC nanocrystals: For enhanced optical, electrical and mechanical properties of polyvinyl alcohol. J. Alloys Compd. 714 (2017) 172–180. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.04.183

[2] Z.W. Abdullah, Y. Dong, I.J. Davies, S. Barbhuiya, PVA, PVA blends, and their nanocomposites for biodegradable packaging application.Polym.-Plast.Technol.Eng.56(2017)1307–1344. https://doi.org/10.1080/03602559.2016.1275684

[3] M. Aslam, M.A. Kalyar, Z.A. Raza, Polyvinyl alcohol: A review of research status and use of polyvinyl alcohol based nanocomposites. Polym.Eng.Sci.58(2018)2119–2132. https://doi.org/10.1002/pen.24855

[4] R.T. Abdulwahid, O.G. Abdullah, S.B. Aziz, S.A. Hussein, F.F. Muhammad, M.Y. Yahya, The study of structural and optical properties of PVA:PbO_2 based solid polymer nanocomposites. J. Mater.Sci.Mater.Electron.27(2016)12112-12118. https://doi.org/10.1007/s10854-016-5363-y

[5] R.J. Fong, A. Robertson, P.E. Mallon, R.L. Thompson, The impact of plasticizer and degree of hydrolysis on free volume of poly(vinyl alcohol)films.Polymers10(2018)1036. https://doi.org/10.3390/polym10091036

[6] D. Qureshi, A. Sahoo, B. Mohanty, A. Anis, V. Kulikouskaya, K. Hileuskaya, V. Agabekov, P. Sarkar, S.S. Ray, S. Maji, K. Pal, Fabrication and characterization of poly (vinyl alcohol) and chitosan oligosaccharide-based.blendfilms.Gels7(2021)55. https://doi.org/10.3390/gels7020055

[7] T.S. Gaaz, A.B. Sulong, M.N. Akhtar, A.A.H. Kadhum, A.B. Mohamad, A.A. Al-Amiery, Properties and applications of polyvinyl alcohol, halloysite nanotubes and their nanocomposites. Molecules20(2015)22833-22847. https://doi.org/10.3390/molecules201219884

[8] S.S. Khasraw, S. Ghaderi, S.R. Saeed, R. Hallaj, A. Hassanzadeh, Observation of nanodomains and nanostripes in the Langmuir-Blodgett monolayers of Fe_3O_4 magnetic nanoparticles. Mater. Sci. Eng.B273(2021)115402. https://doi.org/10.1016/j.mseb.2021.115402

[9] S. Nigam, K.C. Barick, D. Bahadur, Development of citrate-stabilizedFe_3O_4 nanoparticles: Conjugation and release of doxorubicin for therapeuticapplications. J. Magn. Magn. Mater. 323 (2011) 237–243. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2010.09.009

[10] W.H.M. Abdelraheem, M. Sayed, A.M. Abu-Dief, Engineered magnetic nanoparticles for environmental remediation. Fundamentals and Industrial Applications of Magnetic Nanoparticles. Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials (2022) p. 499–524. https://doi.org/10.1016/B978-0-12-822819-7.00001-6

[11] B.H. Xie, X. Huang, G.J. Zhang, High thermal conductive polyvinyl alcohol composites with hexagonal boron nitride microplatelets as fillers. Compos. Sci. Technol. 85 (2013) 98-103. https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2013.06.010

[12] B.H. Xie, X. Huang, G.J. Zhang, High thermal conductive polyvinyl alcohol composites with hexagonal boron nitride microplatelets as fillers. Compos. Sci. Technol. 85 (2013) 98-103. https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2013.06.010

بازیابی اطلاعات با استفاده از حالت‌های همدوس فاز-متقارن در ارتباطات کوانتومی

همتی، فاطمه؛ هنرآسا، غلامرضا

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز، بلوار مدرس ، شیراز، ایران

چکیده

روش کمترین خطا و روش بازشناسی بدون ابهام دو روشی هستند که برای بررسی ارتباطات کوانتومی مبتنی بر حالت های همدوس مورد استفاده قرار می گیرند. راهبرد بازیابی اطلاعات روشی است که نتایج نامعّین را کنار نمی‌گذارد، بلکه با اعمال تشخیص کمترین خطا روی حالت های شکست، همواره نتایج قطعی ارائه می‌دهد. نتایج عددی برای حالت‌های همدوس فاز-متقارن نشان می‌دهد که راهبرد بازیابی اطلاعات برتر از روش بازشناسی بدون ابهام است و همچنین تأکید می‌کند که اختلال وارد بر حالت ورودی، به‌عنوان کران پایینی در احتمال خطای بازیابی عمل می‌کند.

واژه های کلیدی: ***حالت های همدوس فاز-متقارن، بازیابی اطلاعات ، کران پایین خطای بازیابی.***

Information Recycling Using Phase-Symmetric Coherent States in Quantum Communications

Hemmati, Fatemeh; Honarasa, Gholamreza

Department of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz, Iran

Abstract

The minimum-error discrimination and the unambiguous discrimination methods are two methods used to investigate quantum communications based on coherent states. The information recycling strategy does not discard inconclusive outcomes; instead, by performing minimum-error discrimination on the failure states, it always provides conclusive results. Numerical results for phase-symmetric coherent states show the superiority of information recycling over unambiguous discrimination, and also emphasize the role of the disturbance of the input state as a lower bound on the error probability of recycling.

***Keywords**: Phase-Symmetric Coherent States, Information Recycling, Lower Bound of recovery error.*

PACS No. 42

مقدمه

در ارتباطات کوانتومی با متغیر پیوسته، حالت‌های همدوس به دلیل سازگاری با سیستم‌های مخابراتی کلاسیک، نقش پررنگی در انتقال و پردازش اطلاعات دارند [۱،۲]. کارایی این سیستم‌ها درعمل به تولنایی گیرنده در تمایز میان مجموعه ای از حالت‌های همدوس بستگی دارد. اما همین‌جا مشکل اصلی ظاهر می‌شود: هرچه دامنه حالت‌ها کوچک‌تر باشد (یعنی میانگین تعداد فوتون کمتر)، همپوشانی میان آنها بیشتر شده و تشخیص قطعی و بدون خطا به طور همزمان غیرممکن می‌گردد. دو راهبرد استاندارد برای غلبه براین دشواری وجود دارد: روش کمترین خطا (MED[1]) که همیشه یک نتیجه (هرچند خطادار) می‌دهد [۳]، و روش بازشناسی بدون ابهام (UD[2]) که نتیجه بدون خطا فراهم می کند ولی گاهی به نتیجه نمی رسد [٤،٥].

در شرایطی که میانگین تعداد فوتون پایین است (مثلاً در کاربرد های دوربرد CV-QKD)، احتمال نرسیدن به نتیجه در روش UD به شدت افزایش می‌یابد و این روش عملاً غیرعملیاتی می‌شود [٦]. اخیراً نشان داده شده است که برای N حالت همدوس فاز-متقارن با N>۲، حتی وقتی UD به نتیجه نمی‌رسد (یعنی حالت‌های

[1] *Minimum-Error Discrimination*

[2] Biguous Discrimination

شکست)، همچنان اطلاعات مفیدی درباره حالت اولیه در آن ها باقی می‌ماند [۷].

راهبرد ترکیبی بازیابی اطلاعات (IR) نتایج نامعیّن را نگه داشته و با بهره‌گیری از یک مرحله MED اضافی، آنها را بازیابی می‌کند. این روش همواره نتیجه‌ای قطعی ارائه می‌دهد و در عین حال، امکان شناسایی زیرمجموعه‌ای از نتایج کاملاً بدون خطا (با کمک یک سامانه کمکی) را فراهم می‌آورد.

در این مقاله، ضمن مرور کلی بر رهیافت بازیابی اطلاعات (IR)، به بررسی میانگین احتمال تشخیص صحیح این روش در مقایسه با روش بازشناسی بدون ابهام (UD) می‌پردازیم. این مقایسه به طورخاص برای نقطه $\alpha^2 = ۱.۲$ (میانگین تعداد فوتون ها) انجام شده است. همچنین نشان می‌دهیم که اختلال تحمیل‌شده به حالت ورودی در فرآیند جداسازی، به عنوان یک کران پایینی قابل اتکا برای خطای مرحله بازیابی عمل می‌کند.

روابط تحلیلی و محاسبات عددی

در این بخش، به روابط تحلیلی مورد نیاز برای تشخیص Nحالت همدوس متقارن فازی می پردازیم. فرض می کنیم همه حالت ها را بتوان با احتمال پیش بینی برابر آماده کرد.

مجموعه حالت‌های همدوس در پایه حالت‌های عددی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$|\alpha_k\rangle = e^{-\frac{\alpha^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \alpha^n \omega^{kn}/\sqrt{n!}\ \ |n\rangle\,, \qquad (۱)$$

که در آن $\omega = \exp(2\pi i/N)$ است. با استفاده از یک پایه متعامد کمکی $|\emptyset j\rangle$، می‌توان حالت‌های (۱) را به شکل زیر بازنویسی کرد [۷]:

$$|\alpha_k\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} c_j\, \omega^{k_j}\ |\emptyset j\rangle \qquad (۲)$$

که ضرایب c_j از رابطه زیر بدست می آیند [۸]:

$$c_j^2 = \frac{1}{N}\sum_{l=0}^{N-1} \omega^{-jl} e^{\alpha^2(\omega^l - 1)} \qquad (۳)$$

در روش بازشناسی بدون ابهام بهینه (UD)، حداکثر احتمال موفقیت (یعنی دریافت نتیجه بدون خطا) برابر است با [۷،۸]:

$$P_s = N c_{min}^2 \qquad (٤)$$

که در آن c_{min} کوچکترین مقدار در میان ضرایب $\{c_j\}$ می باشد. هرچه c_{min} کوچکتر باشد، احتمال موفقیت UD کاهش می‌یابد. با این حال در رهیافت IR حالت های شکست (یعنی نتایج نامعین UD) نادیده گرفته نمیشوند؛ در عوض، آنها با استفاده از یک مرحله MED اضافی بازیابی می‌گردند. برای این منظور، ضرایب جدید b_j به صورت زیر تعریف می‌شوند[۹]:

$$b_j = \sqrt{\frac{c_j^2 - P_s/N}{1-P_s}} \qquad (٥)$$

این ضرایب نشان می‌دهند که حالت‌های شکست همچنان اطلاعاتی از حالت اولیه را در خود حفظ کرده‌اند. میانگین احتمال تشخیص صحیح برای این حالت های شکست به صورت زیر محاسبه می‌شود[۳،۱۰]:

$$P_c^{MED,\beta} = \frac{1}{N}\left(\sum_{j=0}^{N-1} b_j\right)^2 \qquad (٦)$$

در نتیجه، احتمال تشخیص صحیح کل در روش IR برابراست با[۷]:

$$P_c^{IR} = P_s + (1-P_s)P_c^{MED,\beta} \qquad (۷)$$

درشکل ۱ نشان می‌دهیم که به ازای N> ۲ ، همواره $P_s < 1$ برقرار است، از این روجمله $(1-P_s)P_c^{MED,\beta}$ همواره مثبت است. به همین دلیل، منحنی های IR بالای منحنی UD قرار میگیرند،که این برتری استراتژی بازیافت اطلاعات را آشکار می‌کند. شایان ذکر است تنها استثنا N=۲ است. در این حالت، مجموعه تنها از دو حالت همدوس تشکیل شده و فضای هیلبرت متناظر نیز دوبعدی است. در فرآیند بازشناسی بدون ابهام (UD)، مؤلفه متناظر با نتیجه موفقیت از فضای حالت حذف می‌شود و در نتیجه زیرفضای شکست تنها یک بعد خواهد داشت. از آنجا که هر دو حالت شکست در این زیرفضای یک‌بعدی قرار می‌گیرند، به یک بردار واحد فرو می‌ریزند و بنابراین کاملاً غیرقابل تمایز می‌شوند. در نتیجه، هیچ اطلاعات متمایزکننده‌ای در حالت‌های شکست باقی نمی‌ماند تا در مرحله دوم اندازه‌گیری استخراج شود. از این‌رو، اعمال اندازه‌گیری حداقل خطا (MED) پس از شکست UD هیچ بهبودی در احتمال تشخیص صحیح ایجاد نمی‌کند [۷].

پس از برتری IRدر شکل ۱، اکنون به تحلیل کران پایینی خطای مرحله بازیابی می‌پردازیم . برای این

منظـــور، ابتـــدا[3]حـــد هلســـتروم(بهتـــرین عملکـــرد در روش MED) را معرفی می‌کنیم [۳،۱۰]:

$$P_c^{MED} = \frac{1}{N}\left(\sum_{j=0}^{N-1} c_j\right)^2 \quad (۸)$$

با استفاده از عملگرهای کراوس، همپوشانی میان حالت ورودی و حالت شکست به شکل زیر محاسبه می‌شود[۹]:

$$\langle\beta_k|\alpha_k\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} c_j b_j \quad (۹)$$

اختلال وارد بر حالت ورودی با کمیت $1-F$ مشخص می‌شود، که در آن $F = |\langle\beta_k|\alpha_k\rangle|^2$، در ناحیه دامنه کوچک(یعنی میانگین تعداد فوتون پایین) مقدار F تقریباً برابر می‌شود با [۷]:

$$F \approx \frac{1}{1-P_s}\left[1-\frac{N+1}{2N}P_s\right]^2 \quad (۱۰)$$

لازم به ذکر است که رابطه(۱۰) یک تقریب در ناحیه دامنه‌ی کوچک ($\alpha^2 \ll 1$) است و برای دامنه‌های بزرگ، وفاداری باید با استفاده از رابطه دقیق $F = |\langle\beta_k|\alpha_k\rangle|^2$ محاسبه شود؛ با این حال، در ناحیه‌ای که روش UD دچار شکست مکرر می‌شود (میانگین فوتون پایین)، این تقریب به‌خوبی برقرار است.

بنابراین احتمال خطای مرحله بازیابی (پس از اجرای MED روی حالت‌های شکست) به‌سادگی از رابطه(٦) حاصل می‌شود:

$$P_e^{MED,\beta} = 1 - P_c^{MED,\beta} \quad (۱۱)$$

نتیجه کلیدی نشان داده شده در شکل ۲، نابرابری زیر است که کران پایین احتمال خطای مرحله بازیافت را بر حسب دقت و حد هلستروم بیان می‌کند:

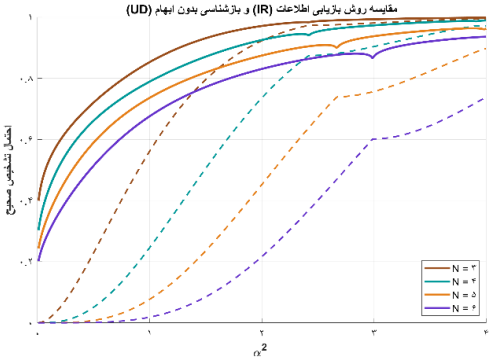
$$P_e^{MED,\beta} \geq 1 - \frac{F}{P_c^{MED}} \quad (۱۲)$$

نابرابری (۱۲) نشان می‌دهد که کران پایین خطای بازیابی به طور همزمان به اختلال $1-F$ و حد هلستروم P_c^{MED} وابسته است. در شکل ۲ نیز مشاهده می‌شود که خطای مرحله بازیابی $P_e^{MED,\beta}$ همواره از مقدار $1-\frac{F}{P_c^{MED}}$ بزرگتر یا مساوی است . با افزایش دامنه(میانگین تعداد فوتون ها) $P_c^{MED} \to 1$، و این نابرابری به $P_e^{MED} \geq 1-F$ نزدیک می شود. بنابراین اختلال همراه با حد هلستروم، کران پایین عملی احتمال خطای مرحله بازیابی را تعیین می‌کند.

تحلیل نتایج

در این بخش، نتایج حاصل از پیاده‌سازی عددی مرتبط با روابط تحلیلی قسمت قبل، در قالب نمودارها و یک جدول عددی ارائه می‌گردد.

شکل ۱ میانگین احتمال تشخیص صحیح را در روش بازیابی اطلاعات (IR) (خطوط پیوسته)، در مقایسه با روش بازشناسی بدون ابهام (UD) (خطوط نقطه‌چین) به عنوان تابعی از تعداد میانگین فوتون(α^2) برای N= ۳،٤،٥،٦ نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که در همه مقادیرN، منحنی‌های IR بالای منحنی‌های UD قرار می‌گیرند. با افزایش N ، شکاف بین دو منحنی افزایش می‌یابد که نشان‌دهنده عملکرد بهتر استراتژی IR در سیستم‌هایی با تعداد حالت‌های بیشتر است. علاوه بر این، در دامنه های بزرگ (α^2) هر دو روش به احتمال یک میل می‌کنند (حالت‌ها تقریباً متعامد) و در دامنه بسیار کوچک (α^2) به صفر نزدیک می‌شوند. نقاط خم متناظر با شرایطی هستند که در آنها کوچکترین ضریب c_{min} بیش از یک بار تکرار شده است. در این نقاط، بعد فضای حالت‌های شکست کاهش می یابد و رفتار منحنی ها یک ناپیوستگی جزئی در شیب نشان می‌دهد[۷].



شکل 1: مقایسه P_c^{IR} (خطوط پیوسته) و P_s (خطوط نقطه‌چین) برحسب α^2 برای N= ۳،٤،٥،٦.

[3] Helstrom Bound

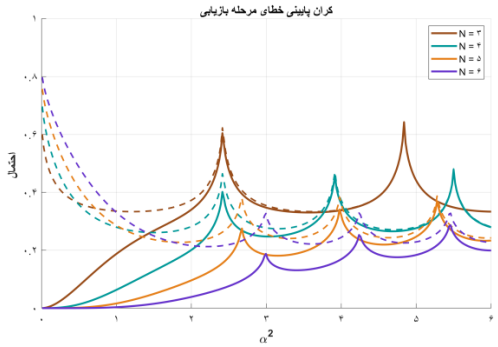
در ادامه و در جدول ۱ مقادیر عددی P_c^{IR} و P_s را برای $\alpha^2 =$ ۱.۲ (میانگین تعداد فوتون) در N= ۳،٤،٥،٦ نشان میدهیم.

جدول1 : مقادیر عددی P_s و P_c^{IR} برای $\alpha^2 = 1.2$

N	P_s	P_c^{IR}
۳	۰.٦٦٨۳	۰.۸۸۹٤
٤	۰.۳٤٦٦	۰.۸۲٥۰
٥	۰.۱۲۹٤	۰.۷۷۳٦
٦	۰.۰۳۷۲	۰.۷۱۹٦

نتایج عددی ارائه‌شده در جدول ۱ نشان می‌دهد که در $\alpha^2 =$ ۱.۲، استراتژی IR به طور قابل توجهی از UD بهتر عمل می‌کند. به عنوان مثال، در N=۳، بهبود تقریباً ۳۳٪ است. این مزیت با افزایش تعداد حالت‌ها(N) به سرعت افزایش می‌یابد. این ویژگی، روش IR را برای کاربردهای عملی در سیستم‌های CV-QKD بسیار مناسب می‌سازد.

پس از بررسی برتری روش IR نسبت به UD در شکل ۱ و تأیید عددی آن در جدول ۱، اکنون در شکل ۲ به تحلیل کران پایینی خطای مرحله بازیابی می‌پردازیم.



شکل2: احتمال خطای مرحله بازیابی $P_e^{MED,\beta}$ (خطوط نقطه‌چین) و اختلال $1 - F$ (خطوط پیوسته) برای N= ۳،٤،٥،٦.

در شکل ۲ مشاهده می‌شود که در همه مقادیر N، منحنی خطای بازیابی همواره بالای منحنی اختلال قرار دارد، به این معنا که خطای مرحله بازیابی هرگز از اختلال تحمیل‌شده کوچک‌تر نیست. این رفتار بیانگر رابطه نابرابری (معادله۱۲) است. با افزایش میانگین تعداد فوتون ($\alpha^2 \to \infty$)، حالت‌های همدوس تقریباً متعامد می‌شوند؛ در این شرایط، هم اختلال و هم خطای بازیابی به صفر میل می‌کنند و فاصله میان دو منحنی به تدریج از بین می‌رود. در دامنه‌های بزرگ، خطای بازیابی به اختلال نزدیک می‌شود که نشان‌دهنده صحت کران به‌دست‌آمده است. نقاط تیز که در منحنی‌ها دیده می‌شوند، ناشی از تعدد ضریب c_{min} است ،که در این نقاط فضای حالت‌های شکست کاهش بعد می‌یابد. این کاهش بعد، تمایز میان حالت‌های شکست را با مشکل مواجه می‌کند و در نتیجه افت ناگهانی (یا افزایش ناگهانی خطا) در عملکرد بازیابی مشاهده می‌گردد. این پدیده در مقاله [۷] به تفصیل تحلیل شده است.

نتیجه گیری

در این پژوهش راهبرد بازیابی اطلاعات (IR) برای بازشناسی حالت‌های همدوس فاز-متقارن پیاده‌سازی و با روش بازشناسی بدون ابهام (UD) مقایسه شد. نتایج عددی نشان داد که (IR) همواره دقت تشخیص را بهبود می بخشد واختلال ناشی از فرایند جداسازی، کران پایینی قابل اتکایی برای خطای مرحله بازیابی فراهم می کند. این رویکرد با ارائه نتایج قطعی و امکان شناسایی نتایج بدون خطا، گزینه‌ای مناسب برای گیرنده های نسل بعد در ارتباطات کوانتومی با متغیر پیوسته است.

مرجع‌ها

[1] B. Huttner, N. Imoto, N. Gisin, and T. Mor; “Quantum cryptography with coherent states”; *Phys. Rev. A* ***51***, 1863 (1995).
[2] Y. Zhang, Y. Bian, Z. Li, S. Yu, and H. Guo; “Continuous-variable quantum key distribution system: Past, present, and future”; *Appl. Phys. Rev.* ***11***, 011318 (2024).
[3] C. W. Helstrom; “Quantum *detection and estimation theory”; J. Stat. Phys.* ***1***, 231 (1969).
[4] I. Ivanovic; “How to differentiate between non-orthogonal states”; *Phys. Lett. A* ***123***, 257 (1987).
[5] D. Dieks; “Overlap and distinguishability of quantum states”; *Phys. Lett. A* ***126***, 303 (1988).
[6] M. N. Notarnicola, M. Jarzyna, S. Olivares, and K. Banaszek; “Optimum discrimination of phase-symmetric coherent states with a hybrid receiver”; *New J. Phys.* ***25***, 103014 (2023).
[7] L. F. Melo, J. A. Bergou, and A. B. Tacla; “Information recycling in coherent state discrimination”; *Physical Review A* ***113***, 022407 (2026).
[8] A. Chefles and S. M. Barnett; “Optimum unambiguous discrimination between linearly independent symmetric states”; *Phys. Lett. A* ***250***, 223 (1998).
[9] M. A. Solís-Prosser, A. Delgado, O. Jiménez, and L. Neves; “Optimal unambiguous discrimination of pure qudit states”; *Physical Review A* ***93***, 012337 (2016).
[10] M. Ban, K. Kurokawa, R. Momose, and O. Hirota; “Optimum measurements for discrimination among symmetric quantum states and parameter estimation”; *Int. J. Theor. Phys.* ***36***, 1269 (1997).

اندازه‌گیری مبتنی بر شدت بار توپولوژیکی باریکه‌های ایری دایروی چرخان با استفاده از توری‌های دامنه‌ای شعاعی

شریفی، سید علی[۱]؛ فتح‌اله‌زاده، سمیه[۱]؛ رسولی، سیف‌اله[۱،۲]

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

[۲] مرکز تحقیقات اپتیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه، زنجان

چکیده

باریکه‌های ایری دایروی چرخان، به دلیل دارا بودن تکانه‌ی زاویه‌ای مداری و ویژگی‌هایی منحصربه‌فرد نظیر انتشار با شتاب عرضی و خودکانونی‌شوندگی، در سال‌های اخیر مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفته‌اند. در این پژوهش، روشی ساده و عددی برای تعیین بار توپولوژیکی این نوع باریکه‌ها با بهره‌گیری از توری‌های دامنه‌ای شعاعی ارائه شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد، تطابق بار توپولوژیکی باریکه با تعداد پره‌های توری منجر به تشکیل لکه شدتی در صفحه کانونی (ناشی از تداخل سازنده نقاط هم‌فاز باریکه با هم دیگر) می‌شود، در حالی که عدم تطابق فاز باعث تداخل ویرانگر و حذف شدت مرکزی می‌گردد. این اثر با تحلیل لکه پواسون قابل توجیه است.

واژه های کلیدی: *باریکه‌های ایری دایروی چرخان، تکانه‌ی زاویه‌ای مداری، خودکانونی شدن، بار توپولوژیکی، توری دامنه‌ای شعاعی، لکه‌ی پواسون.*

Intensity-based measurement of the topological charge of circular Airy vortex beams using radial amplitude gratings

Sharifi, Seyed Ali[1]; Fathollazade, Somaye[1]; Rasouli, Saifollah[1,2]

[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan
[2]Optics Research Center, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan

Abstract

Circular Airy vortex beams have recently attracted significant attention due to their orbital angular momentum and unique features such as curved-path propagation and self-focusing. In this study, a simple numerical method is proposed for determining the topological charge of such beams using radial amplitude gratings. Simulation results show that when the beam's topological charge matches the number of grating spokes, a high-intensity focal spot is formed due to constructive interference of the beam's in-phase components. In contrast, phase mismatch leads to destructive interference and suppression of the central intensity. This phenomenon can be well explained by analyzing the Poisson spot.

***Keywords**: Circular Airy vortex beams, Orbital angular momentum (OAM), Self-focusing, Topological charge, Radial amplitude grating, Poisson spot.*

مقدمه

باریکه‌های نوری چرخان (گردنورها)[۱] به دلیل دارا بودن تکانه زاویه‌ای مداری[۲] و ویژگی‌های منحصربه‌فردی مانند توزیع حلقه‌ای شدت و فاز چرخشی، کاربردهای گسترده‌ای در فناوری‌های نوین یافته‌اند [۱،۲]. این باریکه‌ها در حوزه‌هایی مانند تله‌اندازی نوری [۳]، ارتباطات نوری فضای آزاد و پردازش اطلاعات کوانتومی مورد استفاده قرار می‌گیرند [۴،۵]. در میان انواع گردنورها،

[۱] Vortex beams

[۲] Orbital Angular Momentum (OAM)

باریکه‌های ایری دایروی چرخان[۳] به دلیل ویژگی‌های خاصی مانند انتشار انحنادار و توانایی خودکانونی‌شدن، اخیراً توجه محققان را به خود جلب کرده‌اند [۱۰]. یکی از پارامترهای کلیدی این باریکه‌ها، بار توپولوژیکی است که نقش تعیین‌کننده‌ای در خواص آنها دارد. با این حال، اندازه‌گیری این کمیت به روش‌های ساده همواره چالشی مهم در مطالعات اپتیک بوده است. روش‌های متداول اندازه‌گیری بار توپولوژیکی مانند تداخل‌سنجی [۶]، پراش [۷و۸] و همچنین روش‌های مبتنی بر تحلیل الگوی شدت [۵،۹]، عمدتاً محدود به بررسی باریکه‌های لاگر-گاوسی بوده‌اند. در این پژوهش، روشی ساده و کم‌هزینه مبتنی بر توری دامنه‌ای شعاعی برای اندازه‌گیری بار توپولوژیکی باریکه‌های ایری دایروی چرخان ارائه شده است. بر اساس نتایج شبیه‌سازی‌های انجام شده، هنگامی که بار توپولوژیکی باریکه با تعداد پره‌های توری برابر باشد، در صفحه کانونی یک لکه پرنور تشکیل می‌شود. این پدیده ناشی از تداخل سازنده اجزای هم‌فاز باریکه بوده و با مفهوم لکه پواسون قابل توجیه است. در مقابل، در حالت عدم تطابق، تداخل ویرانگر بین اجزای ناهم‌فاز منجر به حذف شدت مرکزی می‌گردد.

روابط و مفاهیم نظری

تابع توزیع میدان باریکه ایری دایروی چرخان در مختصات قطبی (r, φ, z) به صورت زیر توصیف می‌شود :

$$U(r,\varphi,z=0) = A\exp\left(a\frac{b-r}{w}\right)Ai\left(\frac{b-r}{w}\right)e^{il\varphi}, \qquad (۱)$$

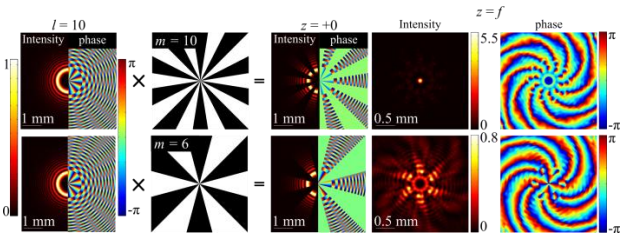
که در آن $Ai(.)$ تابع ایری، A دامنه میدان نور، a ضریب افت نمایی که محدود کننده‌ی تعداد رینگ‌های اطراف حلقه‌ی مرکزی است، b شعاع اولین رینگ باریکه‌ی ایری، w پهنای باریکه و l بار توپولوژیکی است. توری دامنه‌ای شعاعی با تابع انتقال زیر بیان می‌شود

$$t(\varphi) = \frac{1}{2}\left(1 + sgn(\cos(m\varphi))\right), \qquad (۲)$$

که m تعداد پره‌های توری را نشان می‌دهد. میدان خروجی پس از عبور از توری و انتشار به فاصله z با استفاده از روش انتشار طیف زاویه‌ای محاسبه می‌شود که در آن تبدیل فوریه میدان ورودی ضرب در تابع توری، در تابع انتقال فضای آزاد ضرب و سپس تبدیل فوریه معکوس می‌شود. این روش امکان تحلیل دقیق الگوی پراش باریکه را در صفحه خروجی فراهم می‌کند.

$$U(r',\varphi',z) = \frac{k}{2\pi z}e^{\frac{ik}{2z}r'^2}\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi}U(r,\varphi,z=+0)\exp\left(\frac{ik}{2z}r^2 - \frac{ik}{z}rr'\cos(\varphi-\varphi')\right)rdrd\varphi \qquad (۳)$$

در این رابطه +۰ بیانگر صفحه‌ی انتشاری دقیقاً بعد از توری شعاعی است. تابع توزیع شدت باریکه در فاصله‌ی انتشاری z از حاصل ضرب $U(r', \varphi', z)$ *درمزدوج مختلط این میدان به دست می‌آید*. ستون اول شکل۱ الگوی شدت و فاز باریکه‌ی ایری دایروی با بارتوپولوژیکی l = ۱۰ قبل از برخورد به توری شعاعی را نشان می‌دهد. در ستون دوم، ردیف اول توری دامنه‌ای شعاعی باینری با تعداد پره‌ی برابر با بارتوپولوژیکی باریکه (m = ۱۰) و در ردیف دوم تعداد پره‌ی نابرابر (m = ٦) نشان داده شده است. ستون سوم الگوی شدت و فاز باریکه دقیقا بعد از عبور باریکه از توری را نشان می‌دهد و در نهایت ستون های چهارم و پنجم هم الگوهای شدت و فاز باریکه در صفحه‌ی کانون باریکه را نشان می‌دهد. در تمامی تصاویر طول موج نور فرودی۵۳۲ نانومتر در نظر گرفته شده است.



شکل۱: عبور باریکه‌ی ایری دایروی چرخان از توری‌های شعاعی با تعداد پره‌های برابر و غیر برابر با بار توپولوژیکی باریکه‌ی ورودی.

همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود، هنگامی که بار توپولوژیکی باریکه ورودی (l) با تعداد پره‌های توری شعاعی (m) برابر باشد، در صفحه کانونی یک لکه نوری پرشدت تشکیل می‌شود. در

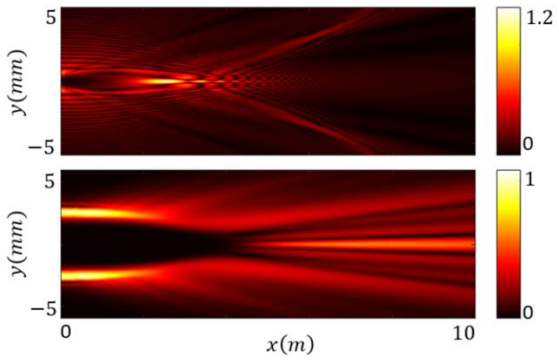
[۳] Circular Airy vortex beam

مقابل، همان‌گونه که در ردیف دوم مشخص است، در حالتی که این دو مقدار نابرابر باشند، هیچ توزیع شدتی در مرکز باریکه ایجاد نمی‌شود. این رفتار ناشی از تفاوت در الگوی فاز باریکه پس از عبور از توری است. در حالت نابرابری ($l \neq m$)، تمام نقاط باریکه در فاز مخالف یکدیگر قرار دارند که منجر به تداخل ویرانگر در مرکز می‌شود. در حالی که برای زمانی که بارتوپولوژیکی باریکه و تعداد پره های توری شعاعی باهم برابرند، یعنی ($l = m$)، نقاط هم‌فاز نیز حضور دارند که باعث ایجاد تداخل سازنده و در نتیجه تشکیل لکه پرنور در مرکز می‌گردد. این پدیده که منجر به تشکیل لکه پرنور مرکزی می‌شود، در واقع همان اثر پواسون[٤] است که در شرایط تطابق بار توپولوژیکی و تعداد پره‌های توری رخ می‌دهد.

بررسی پارامترهای باریکه‌ی فرودی و توری شعاعی

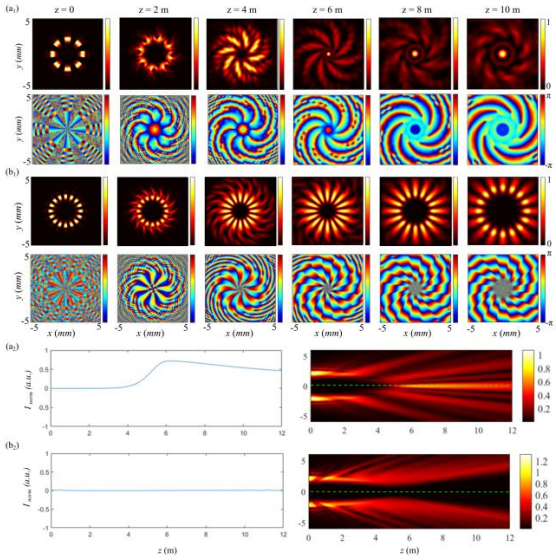
در این بخش به بررسی تاثیر پارامترهای باریکه‌ی فرودی و توری شعاعی بر لکه‌ی کانونی ایجاد شده می‌پردازیم. همانطور که در شکل (۲) مشاهده می‌شود، با افزایش شعاع رینگ مرکزی و همچنین افزایش ضریب افت نمایی، زمانی که $m = l = ۸$ موقعیت لکه‌ی کانونی در صفحه‌ای دورتر نسبت به صفحه‌ی اولیه‌ی باریکه ایجاد می‌شود و ساختار لکه‌ی نوری تشکیل‌شده در ناحیه‌ی کانونی از حالت ناپایدار و دارای نوسانات، به شکلی یکنواخت و پیوسته تبدیل می‌شود. در این شرایط، به‌دلیل هم‌راستایی بهتر جبهه‌های موج و کاهش اغتشاشات فازی ناشی از اجزای جانبی باریکه، تداخل سازنده‌ی بین مؤلفه‌های میدان تقویت شده و در نتیجه، لکه‌ای با شدت مداوم و بدون نوسان در مرکز تشکیل می‌شود. در شکل زیر، الگوی پراش یک باریکه‌ی ایری دایروی چرخان با بار توپولوژیکی ۸ زمانی که از توری‌های شعاعی با تعداد پره‌ی ۸ و ١٦ عبور می‌کند، نمایش داده شده است. سایر مشخصه های باریکه مانند شکل ۲ در نظر گرفته شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در امتداد محور انتشار(z) ، لکه‌ی نوری حاصل دارای ساختاری پیوسته بوده و نوسانات شدتی قابل‌توجهی در آن دیده نمی‌شود.

[٤] Poisson spot



شکل۲: تأثیر پارامترهای ضریب افت نمایی، a و شعاع رینگ مرکزی، b بر روی پیوستگی لکه‌ی کانونی ایجاد شده در حالت $m = l =$ ۱۰ . پارامترهای باریکه‌ی اول عبارتند از: $a =$ ۰.۰۵ ،$b =$ ۰.۵ mm و برای باریکه‌ی دوم عبارتند از: a=۰.۵ و b=۲.۵ mm

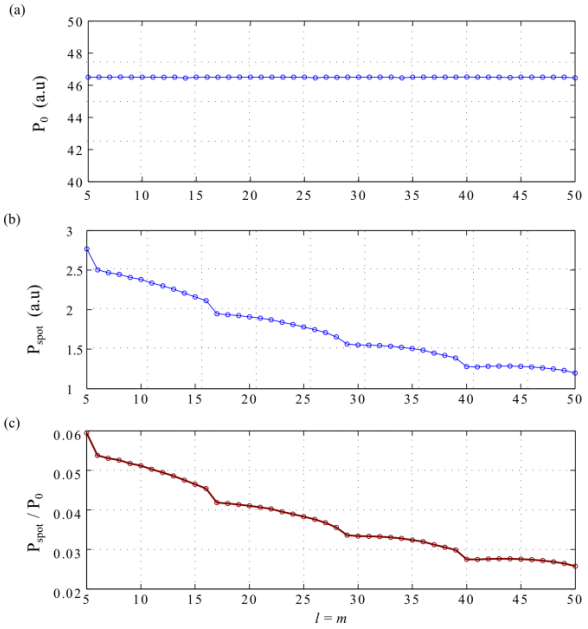
علاوه بر این، افت شدت در طول مسیر انتشار بسیار ناچیز است، که نشان‌دهنده‌ی پایداری باریکه و حفظ انرژی در امتداد مسیر می‌باشد. در این شکل



شکل۳: الگوی پراش و تغییرات شدت و فاز باریکه‌ی ایری دایروی چرخان در طول محور انتشار (z) و نمودار شدت عرضی باریکه در امتداد خط چین سبز رنگ، بخش‌های (a_2 و a_1) نشان دهنده حالت برابر برای گام توری و بار توپولوژیکی باریکه، بخش‌های (b_2 و b_1) برای حالت نابرابر است.

تغییرات شدت و فاز باریکه در بازه‌ی انتشاری صفر تا ۱۰ متر به تصویر کشیده شده و نحوه‌ی گسترش باریکه در راستای z

به‌وضوح قابل مشاهده است. همچنین، نمودار شدت عرضی باریکه در امتداد خط چین سبز رنگ ارائه شده است، که بیانگر رفتار کانونی باریکه در طول انتشار است. در نهایت در شکل ٤ نتایج حاصل از بررسی عددی توان باریکه، برای حالتی که تعداد پره‌های توری شعاعی با بار توپولوژیکی باریکه برابر است، نشان داده شده است. این بررسی در بازه‌ای از بار توپولوژیکی ۵ تا ۵۰ انجام شده است. در نمودار(a) ، توان کل باریکه در صفحه‌ی کانونی نمایش داده شده است. نمودار (b) به نمایش توان مربوط به لکه‌ی نوری مرکزی اختصاص دارد، و در نمودار (c) نسبت توان لکه‌ی مرکزی به توان کل باریکه ارائه شده است. این سه نمودار در مجموع رفتار انرژی باریکه را در شرایط تطابق هندسی بین توری و ساختار فازی باریکه تحلیل می‌کنند. نتایج نشان می دهد که با افزایش بار توپولوژیکی توان لکه‌ی ایجاد شده روندی کاهشی دارد که ناشی از کوچک شدن ابعاد لکهی ایجاد شده است.



شکل٤: تغییرات توان باریکه در حالت برابری بار توپولوژیکی و تعداد پره‌های توری شعاعی.

نتیجه گیری

در این پژوهش، یک روش ساده، کارآمد و قابل پیاده‌سازی برای اندازه‌گیری بار توپولوژیکی باریکه‌های ایری دایروی چرخان مبتنی بر توری دامنه‌ای شعاعی معرفی و تحلیل شد. نتایج عددی نشان دادند که تطابق میان بار توپولوژیکی باریکه و تعداد پره‌های توری منجر به ایجاد یک لکه‌ی پرشدت و متمرکز در صفحه‌ی کانونی می‌شود. این پدیده ناشی از تداخل سازنده بین مؤلفه‌های فازی باریکه بوده و با مفهوم لکه‌ی پواسون قابل توضیح است. در مقابل، ناهماهنگی بین این دو پارامتر باعث تداخل مخرب و در نتیجه حذف شدت مرکزی می‌شود. همچنین، تحلیل تأثیر پارامترهای هندسی باریکه نشان داد که کاهش تعداد حلقه‌های جانبی و افزایش شعاع حلقه‌ی مرکزی منجر به پیوستگی و پایداری بیشتر لکه‌ی کانونی در راستای انتشار z می‌شود.

مرجع‌ها

[۱] A. M. Yao and M. J. Padgett; “Orbital angular momentum: origins, behavior and applications”; *Advances in Optics and Photonics* **3**, No. 2 (2011) 161–204.
[۲] H. Rubinsztein-Dunlop, A. Forbes, M. V. Berry, M. R. Dennis, D. L. Andrews, M. Mansuripur, C. Denz, C. Alpmann, P. Banzer, T. Bauer, E. Karimi, L. Marrucci, M. Padgett, M. Ritsch-Marte, N. Litchinitser, N. Bigelow, C. Rosales-Guzmán, A. Belmonte, J. Torres, T. Neely, M. Baker, R. Gordon, A. Stilgoe, J. Romero, A. White, R. Fickler, A. Willner, G. Xie, B. McMorran, and A. Weiner; “Roadmap on structured light”; *Journal of Optics* **19**, No. 1 (2016) 013001.
[۳] M. Padgett and R. Bowman; “Tweezers with a twist”; *Nature Photonics* **5**, No. 6 (2011) 343–348.
[٤] D. G. Grier; “A revolution in optical manipulation”; *Nature* **424**, No. 6950 (2003) 810–816.
[٥] Hebri, D., Rasouli, S., & Yeganeh, M ; “Intensity-based measuring of the topological charge alteration by the diffraction of vortex beams from amplitude sinusoidal radial gratings”. *Journal of the Optical Society of America B* **35**, No. 4 (2018) 724-730.
[٦] B. Khajavi, J. R. G. Ureta, and E. J. Galvez; “Determining vortex-beam superpositions by shear interferometry”; *Photonics* **5**, No. 3 (2018) 16.
[٧] Amiri, P., Mardan Dezfouli, A., & Rasouli, S; “Efficient characterization of optical vortices via diffraction from parabolic-line linear gratings.” *Journal of the Optical Society of America B 37,* No. 9 (2020) 2668-2677.
[٨] Rasouli, S., Fathollazade, S., & Amiri, P; “Simple, efficient and reliable characterization of Laguerre-Gaussian beams with non-zero radial indices in diffraction from an amplitude parabolic-line linear grating” *Optics Express* **29**, No. 19 (2021) 29661-29675.
[۹] Khodadadi Karahroudi, M., & JafarFard, M. R; “Detection and classification of radial carpet beams propagating through an underwater medium.” *Journal of the Optical Society of America B* **40**, No. 11 (2023) 3006-3014.
[۱۰] Liu, C., Liu, J., Niu, L., Wei, X., Wang, K., & Yang, Z; “Terahertz circular Airy vortex beams” *Scientific reports* **7**, No. 1, (2017) 3891.

دیش متمرکزکننده خورشیدی مخروطی شکل

فولادوند، م. ابراهیم؛ کرمی، رسول
گروه فیزیک دانشکده علوم پایه دانشگاه زنجان، کیلومتر ۵ جاده تبریز، کد پستی ۴۵۳۷۱-۳۸۷۹۱

چکیده
ما یک متمرکزکننده خورشیدی مخروطی شکل طراحی کرده و ساخته‌ایم. این متمرکزکننده از ورق آهن گالوانیزه ساخته شده و با کمک دستگاه خم‌کن ورق (نورد) به شکل مخروط درآمده است. سطح درونی مخروط با چسباندن یک لایه نازک پلاستیکی آینه‌ای، بازتابنده شده است. اگر محور متمرکزکننده مخروطی در راستای پرتو خورشید قرار گیرد، پرتوهای بازتابیده از محور مخروط می‌گذرند و در نتیجه یک ناحیه کانونی خطی تشکیل می‌شود. طول این ناحیه کانونی خطی به زاویه رأس مخروط و شعاع دهانه مخروط بستگی دارد. یک لوله جاذب گرما در امتداد محور قرار داده شده که می‌تواند انرژی پرتوهای نور را به صورت گرما به مایع درون لوله (در اینجا آب) ترابرده و آن را گرم کند. بازده این آب گرم کن خورشیدی نیز اندازه گیری شده است.

واژه‌های کلیدی: *متمرکزکننده خورشیدی- دیش- مخروط- لوله جاذب - تمرکز خطی*

Conical solar concentrator

Foulaadvand, M. Ebrahim; Karami, Rasoul

Department of Physics, Faculty of Science, University of Zanjan, Zanjan,

Abstract

We have designed and constructed a conical solar concentrator. The concentrator has been made from galvanized iron sheet and was formed into a conical shape with a bending machine. The inner surface of the cone became reflective by sticking a thin plastic mirror-like layer. If the conical concentrator's optical axis is aligned along the Sun beam, the incident sunlight will be reflected and crosses the cone's axis. Consequently, a line-focus area is formed. The length of line-focal area crucially depends on the cone's apex angle. An absorber is placed along the axis and can heat the inside liquid (here water.

***Keywords**: solar concentrator, cone, dish, absorber tube, line-focus*

PACS No 40-42-44

پیش گفتار
افزایش درخواست برای انرژی و نگرانی‌های جهانی در مورد پیامدهای زیست‌محیطی سوخت‌های فسیلی، اهمیت بهره‌گیری از چشمه‌های انرژی تجدیدپذیر به‌ویژه انرژی خورشیدی را بیش از پیش آشکار کرده است. انرژی خورشید به‌دلیل دسترسی گسترده، پاک‌بودن و هزینه بهره‌برداری پایین، یکی از مهم‌ترین گزینه‌ها برای تولید انرژی گرمایی و الکتریکی در مقیاس‌های گوناگون به میان می‌آید. یک دسته مهم از فناوری های انرژی خورشیدی سامانه های تمرکزی نورهستند. در این سامانه‌ها، بهبود کارایی به میزان تمرکز تابش خورشید و افزایش چگالی انرژی در ناحیه کانونی وابسته است. گرمای به‌دست آمده از تمرکز تابش خورشید در کاربردهای گسترده‌ای مانند تولید برق، تولید بخار و گرما، فرایندهای صنعتی، گندزدایی و سمزدایی پساب، نمک‌زدایی آب و نیز تولید هیدروژن سوختی به کار می‌رود[1].
معمولاً متمرکزکننده‌های خورشیدی درهندسه‌های گوناگونی مانند کروی، شلجمی و فرنل طراحی می‌شوند که هر یک برتری‌ها و کاستی‌های خود را دارند [2]. دیش‌های شلجمی اگرچه توانایی تمرکز نقطه‌ای بالایی دارند، اما فرآیند ساخت آن‌ها پیچیده و پرهزینه بوده و در بسیاری از موارد نیازمند سامانه‌های ردیاب خورشیدی دقیق هستند. در این نوشته ما متمرکزکننده مخروطی را بررسی می‌کنیم [3-4]. این نوع

متمرکزکننده‌ها به‌دلیل ساختار ساده و هزینه ساخت پایین‌تر، می‌توانند به‌عنوان گزینه‌ای اقتصادی برای تولید گرما در بسیاری از کاربردهای گرمایی مطرح شود.

ویژگی مهم دیش متمرکز کننده مخروطی، امکان تمرکز تابش خورشید در امتداد یک کانون خطی است. تمرکز خطی امکان به‌کارگیری جذب‌کننده‌های خطی را فراهم می‌کند که در بسیاری از سامانه‌های گرمایی بازده بیشتری نسبت به جاذب‌های نقطه‌ای دارند. همچنین توزیع یکنواخت‌تر انرژی در طول خط کانونی موجب کاهش تنش‌های گرمایی و افزایش عمر اجزای بخش جاذب گرما می‌شود. با وجود مزایای گفته شده، مطالعات کم شماری بر طراحی و ارزیابی تجربی/نظری متمرکزکننده‌های مخروطی با کانون خطی انجام شده. از این رو ارائه یک متمرکزکننده خورشیدی مخروطی با ساخت ساده، هزینه کم و بازده گرمایی بالا می‌تواند کمک مهمی در بهبود فناوری‌های خورشیدی گرمایی داشته باشد.

در این پژوهش یک متمرکزکننده خورشیدی مخروطی با کانون خطی طراحی و ساخته شده و کارکرد آن به‌صورت نظری و تجربی بررسی گردیده است. در ادامه نخست ریاضیات تمرکز نور را بررسی کرده و سپس طراحی هندسی و مراحل ساخت دیش و جاذب گرما ارائه می‌شوند. در پایان نتایج آزمایشگاهی و تحلیل آنها بیان می‌گردند.

ریاضیات تمرکز نور در متمرکزکننده مخروطی

مخروطی به شعاع دهانه R، ارتفاع H و نیم زاویه رأس α در نظر بگیرید. محور مخروط را در راستای z می‌گیریم و رأس آن را در مبدأ مختصات می‌گذاریم. از هندسه داریم: $R = H \tan \alpha$. معادله سطح جانبی مخروط عبارت است از:

$$z^2 = (x^2+y^2)\cot^2\alpha \qquad (۱)$$

یک پرتو فرودی به مخروط را که همسو با محور فرود می آید در نظر بگیرید. فاصله نقطه برخورد پرتو با سطح مخروط از محور آن را r و زاویه سمتی نقطه برخورد را φ بگیرید. بردار یکه عمود بر سطح در نقطه برخورد پرتو با سطح مخروط می‌شود:

$$\mathbf{n} = (\cos\varphi\cos\alpha, \sin\varphi\cos\alpha, -\sin\alpha) \qquad (۲)$$

برداریکه راستای پرتو ورودی را با $\mathbf{s} = (0, 0, -1)$ نشان می‌دهیم. این پرتو پس از برخورد به جداره درونی مخروط بازتاب پیدا می‌کند. بردار یکه درراستای پرتو بازتابی از سطح را با **t** نشان می‌دهیم. از قانون بازتاب اسنل داریم:

$$\mathbf{t} = \mathbf{s} - 2(\mathbf{s}\cdot\mathbf{n})\,\mathbf{n}$$

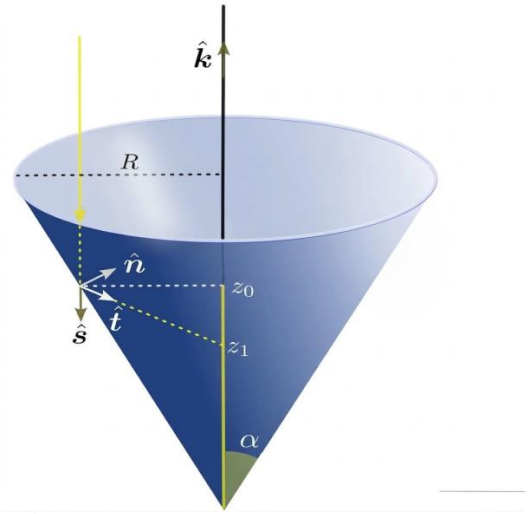
با جای‌گذاری **s** و **n** داریم:

$$\mathbf{t} = (-\sin2\alpha\cos\varphi, -\sin2\alpha\sin\varphi, -\cos2\alpha) \qquad (۳)$$

با کمی محاسبه می‌توان z_1 ارتفاع نقطه برخورد پرتو بازتابی با محور را بصورت $z_1 = r/\sin(2\alpha)$ به‌دست‌آورد. با توجه به اینکه r می‌تواند بین صفر (رأس مخروط) تا R (دهانه مخروط) مقدار بگیرد بیشینه z_f برابر با $L=R/\sin(2\alpha)$ است که در واقع درازای خط کانونی است. با توجه به معادله سطح مخروط می‌توان R را بر حسب H ارتفاع مخروط نوشت. در این صورت درازای خط کانونی می‌شود:

$$L=H/2\cos^2\alpha \qquad (۳)$$

نکته جالب این است که چنان چه زاویه نیم رأس α کوچک‌تر از ۴۵ درجه باشد خط کانونی درون مخروط می‌افتد: L> H.



شکل ۱: مخروط متمرکز کننده و پرتو ورودی و بازتابی از آن

طراحی و ساخت متمرکزکننده مخروطی

در شکل (۲) به صورت گام به گام مراحل ساخت مخروط نشان داده شده است. بدنه اصلی آن را از جنس ورق فلزی آهن گالوانیزه که پاد زنگ است گرفتیم. ضخامت ورق را نازک گرفتیم (یک میلی متر) تا قابلیت شکل‌دهی مناسب داشته باشد. برای دستیابی به هندسه مخروط، نخست ورق گالوانیزه برابر الگوی بازشده مخروط بر پایه روابط هندسی میان قطر قاعده، ارتفاع و زاویه رأس با دستگاه برش داده شد. سپس، ورق برش‌خورده با دستگاه نورد به‌تدریج گرد محور تقارن خم شد تا شکل مخروطی پدید آید. در ادامه لبه‌های ورق با جوشکاری نقطه‌ای به یکدیگر متصل گردید تا ساختار مخروط تثبیت شود.

این مرحله از اهمیت بالایی برخوردار است، زیرا هرگونه عدم تقارن یا انحراف در بدنه می‌تواند دقت تمرکز پرتوهای بازتابی را کاهش دهد. پس از شکل‌دهی بدنه، سطح درونی دیش برای چسباندن لایه بازتابنده آماده‌سازی شد. سپس ورق آینه‌ای پلاستیکی با ضخامت ۱/۵ میلی‌متر، پس از برش دقیق مطابق الگوی هندسی، با به‌کارگیری چسب مقاوم در برابر گرما روی سطح درونی دیش مخروطی چسبانیده شد تا سطح آیینه‌ای گردد. یکنواختی سطح بازتابی نقش مهمی در افزایش بازده تمرکز تابش خورشیدی بازی می‌کند. در ادامه، لبه بیرونی دیش به یک حلقه نگهدارنده متصل شد تا سازه استواری مکانیکی لازم را داشته باشد. در انتهای مخروط سوراخی به قطر پنج سانتی‌متر بریده شد تا لوله جاذب از آنجا به درون مخروط برده شود. قطر دهانه مخروط را برابر $D=40\ cm$ و نیم زاویه رأس α را برابر۴۵ درجه گرفتیم. درازای خط کانونی برابر$L=20\ cm$ شد.

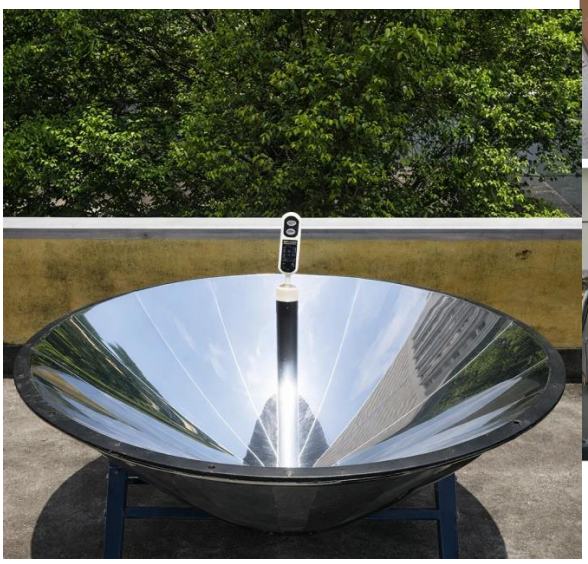


شکل ۲: ساخت متمرکزکننده خورشیدی مخروطی با کانون خطی

نصب لوله جاذب گرمای نور متمرکز شده

پس از ساخت دیش، محل دقیق خط کانونی با به‌کارگیری آزمون تابش خورشید تعیین شد. محور دیش را در راستای پرتو خورشید گرفتیم و خط کانونی روی یک ورق کاغذی لوله شده نارنجی رنگ شناسایی شد (شکل ۳ (آ) را ببینید). برای جذب گرمای نور دو نوع لوله شیشه‌ای و فولادی (استیل ۳۰۴) حامل آب در امتداد خط کانونی کار گذاشته شد. سپس لوله استیلی را با رنگ سیاه مات نسوز رنگ‌آمیزی کردیم تا ضریب جذب بالا رود. با توجه به تغییرات موقعیت خورشید در طول آزمایش، دیش به‌صورت دستی خورشید را ردیابی می‌کرد تا همواره محور آن در راستای پرتوهای ورودی نور خورشید باشد. یک دماسنج دیجیتالی درون لوله گذاشتیم تا دمای لحظه‌ای آب را نشان دهد. در بخش بالای لوله روزنه‌ای برای خروج بخار تعبیه شد. شکل ۳ (ب) را ببینید. دمای آب درون لوله در طول آزمایش ثبت شد. گفتنی است بخش زیادی از گرمای کانونی شده از راه همرفت و تا حدی تابشی به محیط پیرامون ترابرده و تلف می‌شود که به کاهش بازده گرمایی می‌انجامد.



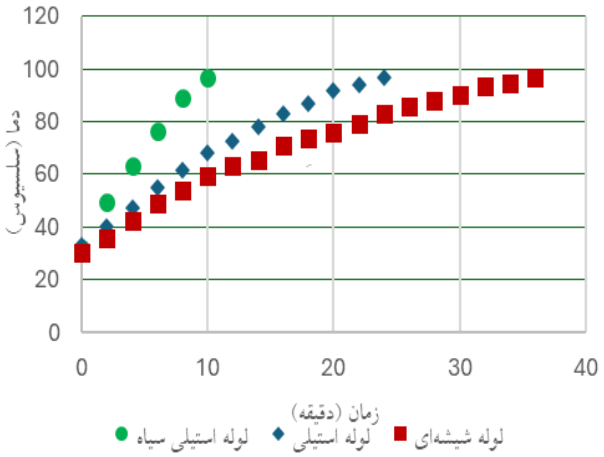


شکل ۳: آ) تنظیم کانون خطی با کمک لوله تست مقوایی
ب) تنظیم لوله استیل سیاه رنگ در محل کانون و اندازه‌گیری دما

نتایج آزمایشی

شکل ٤ نمودار تغییرات دمای آب درون سه نوع لوله را که در کانون متمرکزکننده نصب شدند، بر حسب زمان نشان می‌دهد. این اندازه گیری در شهر تهران و در میانه فروردین ۱۴۰۵ هنگام نیمروز انجام گردید. در هر آزمایش درون لوله ۱۲۰ سی سی آب ریختیم تا به جوش آید. در تهران آب در دمای

حدود ۹۶/۵ درجه سلسیوس به جوش می‌آید. اندازه گیری‌ها نشان داد در شرایط یکسان، زمان جوش آمدن آب برای لوله شیشه‌ای حدود ۳۶ دقیقه، برای لوله استیل براق حدود ۲۴ دقیقه و برای لوله سیاه رنگ حدود ۹ دقیقه است. کارکرد خوب لوله استیل سیاه به دلیل ضریب جذب نور بالای آن است. برای به دست آوردن بازده سامانه با لوله استیلی سیاه، نخست اندازه گرمای لازم برای رسانیدن ۱۲۰ گرم آب ۳۲ درجه به نقطه جوش را به دست می‌آوریم:



شکل ۴: نمودار تغییرات دما برحسب زمان (دقیقه) برای سه نوع لوله

$$Qu= mc\Delta\theta = ۰/۱۲\times۴۲۰۰\times۶۴= ۳۲۲۵۶J \qquad (۵)$$

چنانچه میانگین شدت تابش خورشید را I=۱۰۰۰ وات بر متر مربع بگیریم در مدت ۹ دقیقه انرژی تابشی رسیده به دهانه دیش به مساحت دهانه A می‌شود:

$$Qin= A\times I\times t= ۰/۱۲\times۱۰۰۰\times۹\times۶۰= ۶۷۵۰۰\ J \qquad (۶)$$

بازدهی دیش η می‌شود:

$$\eta = Q_u/ Q_{in} =۴۹٪ \qquad (۷)$$

نتیجه‌گیری

ما یک سامانه متمرکزکننده نور خورشید مخروطی با کانون خطی در محور آن طراحی کرده و ساختیم. سه نوع لوله در کانون متمرکز کننده قرار دادیم و درون آنها آب ریختیم. سپس گرمای مفید داده شده به آب را با اندازه گیری زمان رسیدن آب به نقطه جوش بدست آوردیم. در طول آزمایش دیش به صورت دستی خورشید را ردیابی میکرده. نتایج نشان می‌دهد که لوله جاذب استیل رنگ سیاه شده بیشترین بازدهی را دارد. کیفیت تمرکز نور هم در حد خوبی بود. این سامانه بازده حدود ۵۰ درصد دارد و می‌تواند گرمای خوبی را جمع‌آوری کند.

سپاس‌گزاری

از راهنمایی‌های ارزنده استاد ارجمند آقای دکتر امیر آقامحمدی (دانشگاه الزهرا تهران) صمیمانه سپاس‌گزاری می‌کنیم.

مراجع:

[1] C. Elango and N. Gunasekaren; Thermal models of solar still, *Ren. Energy Reviews* **47**, 856 (2015)

[2] M. E. Foulaadvand, A. Aghamohammadi, P. Karimi, & H. Borzouei, Flux profle at focal area of concentrating solar dishes, *Scientific Report* **11**, 24474 (2021)

[3] Alsalame, H.A.M.; Sik, K.K.; Lee, G.H. Comparative Numerical and Experimental Analyses of Conical Solar Collector and Spot Fresnel Concentrator. Energies 2024, **17**, 5437. ttps://doi.org/10.3390/en17215437

[4] Gwi Hyun Lee, Construction of conical solar concentrator with performance evaluation, Energy Procedia **153** (2018) 137–142

کنفرانس فیزیک ایران

دانشگاه قم – ۲ الی ۵ شهریور ۱۴۰۵

مجموعه مقالات شاخه

سامانه‌های پیچیده، ماده چگال نرم و بیوفیزیک

www.psi.ir/f/physics1405

بررسی مدل کوراموتو با اعمال نیروی میخکوبی در شبکه‌ی تصادفی

یداللهی فارسانی ، فاطمه ؛ شهبازی، فرهاد

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

در این مطالعه، مدل کوراموتو با اعمال نیروی میخکوبی با ضرایب مختلف بر رفتار نوسانگرها در شبکه‌ی تصادفی تحلیل شد. سه نوع رفتار با افزایش ضریب نیروی میخکوبی مشاهده می‌شود: همگامی کامل که در آن تمام نوسانگرها همزمان با یکدیگر حرکت می‌کنند و نشان دهنده‌ی چرخه‌ی حدی است. بعد از آن همگامی کامل از بین می‌رود و حالت نوسانی مشاهده می‌شود که نیز این ناحیه نشان دهنده‌ی چرخه‌ی حدی با دو دوره‌ی تناوب است و در نهایت سیستم در حالت یخزده قرار می‌گیرد، در واقع نقطه ثابت پایدار مشاهده می‌شود.

واژه های کلیدی: *مدل کوراموتو، نیروی میخکوبی، چرخه حدی،حالت یخزده .*

Kuramoto model with a pinning force in a random network

Yadolldhi Farsani, Fatemeh; Farhad, Shahbazi

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan,

Abstract

In this study, the Kuramoto model with a pinning force applied at different strengths is analyzed on a random network. Three types of behavior are observed as the pinning-force coefficient increases: complete synchronization, in which all oscillators evolve simultaneously and a limit cycle emerges; subsequently, complete synchronization disappears and an oscillatory state is observed, which also corresponds to a limit cycle with two periods; and finally, the system enters a frozen state, where a stable fixed point appears.
***Keywords**: Kuramoto model, pinning force, limit cycle, frozen state.*

PACS No. 5.89

مقدمه

پدیده همگام‌سازی یکی از موضوعات مهم در جامعه علمی است و زمانی رخ می‌دهد که مجموعه‌ای از نوسانگرها تحت تأثیر جفت‌شدگی، پس از مدتی در یک فرکانس مشترک قفل می‌شوند [۱]. نمونه‌های متعددی از همگام‌سازی در طبیعت دیده می‌شود، مانند چشمک‌زدن جمعی کرم‌های شب‌تاب، آواز جیرجیرک‌ها وسلول‌های ضربان‌ساز قلب. این پدیده در فیزیک و مهندسی نیز کاربردهای گسترده‌ای دارد، از جمله در شبکه‌های قدرت، اتصالات جوزفسون و آرایه‌های لیزری[۲].

یک رویکرد موفق به مسئله همگام‌سازی ، مدلسازی هر عنصر به عنوان یک نوسانگر فازی است . در میان مدل‌های بسیاری که برای توصیف همگام‌سازی پیشنهاد شده‌اند، مدل کوراموتو یک الگوی ساده است. اگرچه مدل کوراموتو مرتبه اول مزایا و کاربردهای زیادی دارد، اما در مقایسه با مشاهدات تجربی، به حالت همگام‌سازی جزئی خیلی سریع نزدیک می‌شود و برای دستیابی به همگام‌سازی کامل به قدرت جفت‌شدگی نسبتاً زیادی نیاز دارد. برای حل چنین مشکلاتی، مدلی با تطبیق فرکانس معرفی شد که در آن هم فاز و هم فرکانس در طول زمان تکامل می‌یابند و همگام‌سازی به دلیل اینرسی کند می‌شود [۲].

بر روی مدل کوراموتو مطالعات بسیاری انجام شده است. یکی از راه‌های توسعه‌ی این مدل اضافه کردن نیروی میخکوبی است و ما می‌توانیم دینامیک غنی‌تری مشاهده کنیم [۳]. همچنین با اضافه کردن نیروی میخکوبی به مدل کوراموتو مرتبه دوم معادلات این

مدل مشابه معادلات اتصالات جوزفسون می‌شود. درواقع نیروی میخکوبی مشابه بخش سینوسی در مدل جوزفسون است که از جریان بحرانی ناشی می‌شود.[٤].

مدل دینامیکی

مدل کوراموتو مرتبه‌ی دوم در حضور نیروی میخکوبی به صورت زیر است [٤و٢].

$$m\ddot{\theta}_i = -\gamma\dot{\theta}_i + I_i + \frac{\lambda}{k_i}\sum_{j=1}^{N} A_{ij}\sin(\theta_j - \theta_i) - \beta sin\theta_i \quad (۱)$$

این مدل تکامل فاز θ_i برای نوسانگر iام را نشان می‌دهد که λ قدرت جفت‌شدگی، N تعداد نوسانگرها، I_i فرکانس ذاتی هر نوسانگر، α پارامتر میرایی و m ضریب لختی (اینرسی) است. همچنین $sin\,\theta_i$ نیروی میخکوبی و β ضریب آن است.

اگر سیستم را به صورت یک تک نوسانگر در نظر بگیریم [٢] معادله ۱ به صورت زیر است:

$$\frac{d^2\theta}{d^2\tau} + \alpha\frac{d\theta}{d\tau} + \sin\theta = \omega \quad (۲)$$

که $\omega = \frac{I}{\beta}$ فرکانس ذاتی نرمال شده است. همچنین $\tau = \sqrt{\frac{\beta}{m}} \times t$ زمان مقیاس‌بندی شده و $\alpha = \frac{1}{\sqrt{m\beta}}$ پارامتر میرایی است. این مدل مشابه اتصالات جوزفسون است. اگر $y = \frac{d\theta}{d\tau}$ در نظر بگیریم سیستم به صورت زیر می‌شود:

$$\dot{y} = \omega - \sin\theta - \alpha y \quad ,\quad y = \frac{d\theta}{d\tau} \quad (۳)$$

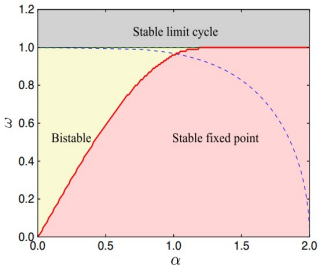
نقاط ثابت به صورت $y^* = 0$ و $\sin\theta^* = \omega$ هستند. وقتی $\omega > 1$ هیچ نقطه ثابتی وجود ندارد و برای $\omega < 1$، دو نقطه ثابت وجود دارد، یکی مربوط به یک نقطه زینی و دیگری یک نقطه پایدار است، همانطور که توسط تحلیل ژاکوبین تعیین می‌شود.

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\cos(\theta^*) & -\alpha \end{pmatrix} \quad (٤)$$

این ماتریس دو ویژه مقدار دارد.

$$\sigma_{1,2} = \frac{-\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 - 4\cos(\theta^*)}}{2} \quad (۵)$$

ماتریس ژاکوبین منجر به $\tau = \alpha < 0$ و $\Delta = \cos\theta^*$ می‌شود. وقتی $\Delta>0$ باشد، سیستم یک نقطه پایدار را نشان می‌دهد اگر $\tau^2 - 4\Delta = \alpha^2 - 4\sqrt{1-\omega^2} > 0$ باشد، که زمانی رخ می‌دهد که میرایی به اندازه کافی قوی باشد یا زمانی که ω به یک نزدیک شود. در غیر این صورت، تعادل مربوط به یک مارپیچ پایدار است که در شکل ۱ با خط‌چین آبی مشخص شده است. در $\omega = 1$، گره پایدار با نقطه زینی ادغام می‌شود و منجر به انشعاب گره زینی می‌شود. می‌توان نشان داد که برای $\omega > 1$ چرخه حدی وجود دارد. بسته به مقادیر α و ω، همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده است، سه نوع انشعاب می‌تواند رخ دهد. برای مقادیر کوچک α، با شروع از $\omega > 1$، چرخه‌ی حدی وجود دارد. با کاهش تدریجی ω، چرخه‌ی حدی از طریق یک انشعاب هموکلینیک در مقدار بحرانی $\omega_c < 1$ ناپدید می‌شود، جایی که چرخه‌ی حدی با نقطه زینی ادغام می‌شوند. این خط انشعاب، ناحیه دوپایدار را از ناحیه نقطه ثابت پایدار جدا می‌کند. برای α بزرگ، هنگامی که ω به تدریج از مقادیر بالاتر از یک کاهش می‌یابد، چرخه‌ی حدی از طریق یک انشعاب با دوره تناوب ناوردا ناپدید می‌شود و منجر به ظهور نقاط ثابت می‌شود. برعکس، با شروع از یک نقطه ثابت پایدار در α کوچک و افزایش آهسته ω، دو نقطه ثابت با هم ادغام شده و از طریق یک انشعاب گره زینی در مقدار بحرانی $\omega_c = 1$ ناپدید می‌شوند.



شکل ۱ : نمودار دوشاخگی یک تک نوسانگر [٢].

به منظور بررسی همگامی از پارامتر نظم که به صورت زیر است، استفاده شد.

$$\rho e^{i\Psi(t)} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} e^{i\theta_j(t)} \quad (٦)$$

ρ=۰ یعنی همگامی وجود ندارد و ρ=۱ یعنی همگامی کامل و ۰<ρ<۱ یعنی قفل شدگی فاز داریم. دو حالت متفاوت وجود دارد که می‌توانند منجر به ρ=۱ شوند. اولین حالت یک حالت دینامیکی است که در آن نوسانگرها پالس‌های همگام را شلیک می‌کنند، این وضعیت مربوط به همگام‌سازی کامل است. حالت دیگر یک حالت

یخزده است که در آن همه‌ی نوسانگرها در نقطه تعادل خود در حالت استراحت هستند. همچنین می‌توانیم برای بررسی همگامی از پارامتر نظم معرفی شده توسط شیناماتو و کوراموتو که به صورت زیر است، استفاده کنیم.

$$\zeta = < \left| \rho(t) e^{i\Psi(t)} - < \rho(t) e^{i\Psi(t)} > \right| >. \quad (۷)$$

این پارامتر زمانی غیر صفر است که همگامی کامل نداشته باشیم. برای تمایز بین همگامی استاتیک از همگامی دینامیکی، از معیاری به نام جریان J استفاده می‌کنیم. جریان معیاری برای فعالیت نوسانگرها است.

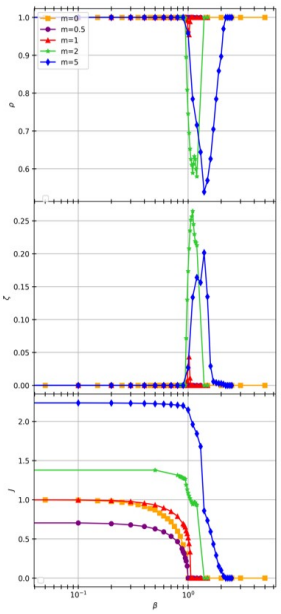
$$J = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} < \dot{\phi}_k(t) >. \quad (۸)$$

جریان غیر صفر، وضعیتی را توصیف می‌کند که در آن نوسانگرها در حال حرکت هستند (الزاما هماهنگ نیستند) و زمانی که در حالت استراحت هستند مقدار این پارامتر صفر است[۵]. به عبارت دیگر در صورتی که مقدار پارامتر نظم دارای مقدار باشد اما جریان صفر باشد گوییم سیستم در حالت یخزده است.

ما سیستم را برای ۱۰۰۰ نوسانگر یکسان با میرایی α=۱، قدرت جفت‌شدگی λ=۱ با اینرسی‌های مختلف و نیروی میخکوبی یعنی βهای مختلف، برای الگوریتم واتس_استروگاتس با احتمال بازآرایی p=۱ و با میانگین درجه راس ۱۰ مورد بررسی قرار دادیم.

نتایج

شکل۲ نمودارهای ρ ،ζ و J را به عنوان توابعی از نیروی میخکوبی β برای مقادیر مختلف اینرسی m نشان می‌دهد. برای $\beta < 1$، همگامی یک است. از آنجایی که نمودار J مقداری غیر صفر دارد، این نشان دهنده وجود تحرک در سیستم و وجود یک چرخه حدی است. برای $1 < \beta < \beta_c$، ناحیه‌ای وجود دارد که در آن همگام‌سازی دستخوش تغییرات می‌شود و نمودار ζ نشان می‌دهد که برای مقادیر خاصی از β دامنه نوسان به حداکثر می رسد، سپس کاهش می‌یابد. طبق نمودار J، سیستم در این ناحیه تحرک دارد که ممکن است مربوط به وجود چرخه حدی در سیستم باشد. عرض این ناحیه با افزایش m افزایش می‌یابد. برای $\beta > \beta_c$، نمودار ρ مقدار یک را نشان می‌دهد، در حالی که J=۰ است که نشان‌دهنده عدم وجود تحرک در سیستم است و سیستم به نقطه ثابت پایدار خود نزدیک می‌شود، به این معنی که سیستم یخزده است. علاوه بر این، مقدار بحرانی β_c با m افزایش می‌یابد. همانطور که در شکل۱ نشان داده شده است، با افزایش α، ناحیه دوپایدار ناپدید می‌شود. در نتیجه، ω_c به ۱ نزدیک می‌شود و برای مقادیر بزرگتر α، این نقطه بحرانی از بین می‌رود. به عبارت دیگر، افزایش α منجر به افزایش ω_c می‌شود. در معادلات ما، $\alpha = \frac{1}{\sqrt{m\beta}}$ است و با افزایش m، α کاهش می‌یابد؛ بنابراین، ω_c کاهش می‌یابد. از آنجایی که $\omega_c - \frac{1}{\beta_c}$ است، β_c نیز به همین ترتیب افزایش می‌یابد که در شکل۲ نیز مشهود است. مقادیر β_c برای mهای مختلف در جدول۱ ارائه شده است.



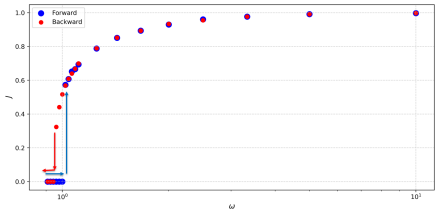
شکل۲ : نمودارهای پارامتر نظم $\zeta\rho$ و جریان J به عنوان توابعی از مقادیر مختلف β برای مدل کوراموتو با مقادیر اینرسی مختلف ۰/۵ ، ۱، ۲ و ۵.

جدول۱ : مقادیر بحرانی β_c و ω_c برای مدل کوراموتو با مقادیر اینرسی مختلف ۰/۵ ، ۱، ۲ و ۵.

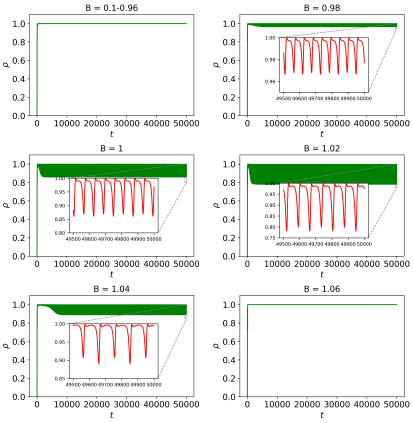
	m=۰	m=۰/۵	m=۱	m=۲	m=۵
β_c	۰	۰	۱/۰۶	۱/۴	۲/۲
ω_c	۰	۰	۰/۹۴	۰/۷۱	۰/۴۵

شکل۳ نمودار J در مقابل ω را برای m=۱ نشان می‌دهد که یک رژیم پسماند را آشکار می‌کند. همانطورکه نشان داده شده

است، با افزایش ω، سیستم در ابتدا تا β=۱ هیچ جریانی نشان نمی دهد، به این معنی که غیرفعال و در حالت یخزده باقی می‌ماند یعنی سیستم در حالت نقطه ثابت پایدار است. سپس، سیستم ناگهان جهش و شروع به نشان دادن جریان می‌کند. با کاهش ω، جریان به تدریج کاهش می‌یابد. با این حال، هنگامی که β=۱ است، جریان همچنان وجود دارد و تا ω_c ادامه می‌یابد. پس از آن، ناگهان به صفر برمی‌گردد. این تفاوت منجر به تشکیل یک حلقه پسماند می شود. این حلقه ناحیه دوپایداری را نشان می‌دهد. با این حال، وجود یک چرخه‌ی حدی هنوز تأیید نشده است. بنابراین، سیستم نیاز به بررسی بیشتر دارد.

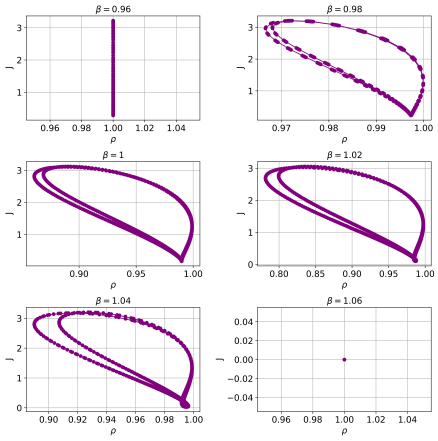


شکل۳ : نمودار رفت و برگشت جریان J برحسب ω. دایره‌های قرمز و دایره‌های آبی به ترتیب حرکت رو به جلو و رو به عقب هستند.



شکل٤ : نمودارهای پارامتر نظم ρ برحسب مقادیر مختلف β برای m=۱

برای بررسی بیشتر ابتدا نمودار پارامتر نظم به ازای βهای مختلف را بررسی شد. همانطور که در شکل٤ مشاهده می‌شود تا β<۰/۹۸ سیستم همگام است. سپس برای ۰/۹۶< β<۱/۰٦ سیستم حالت نوسانی دارد که در شکل ۲ نیز مشاهده شد و بعد از آن در حالت یخزده قرار می‌گیرد. برای بررسی چرخه‌ی حدی نمودار جریان بر حسب پارامترنظم بررسی شد. همانطورکه در شکل۵ مشاهده می‌شود حرکت دوره ای دیده می‌شود. پس می‌توان گفت در سیستم چرخه‌ی حدی با دو دوره‌ی تناوب وجود دارد و برای β>۱/۰٤ نیز نقطه ثابت مشاهده می‌شود.



شکل۵ : نمودارهای جریان J برحسب پارامتر نظم ρ برای مقادیر مختلف β و m=۱

نتیجه گیری

با تغییر ضریب نیروی میخکوبی شاهد سه ناحیه هستیم. برای $\beta < 1$ سیستم در حالت چرخه‌ی حدی قرار دارد. برای $1 < \beta < \beta_c$ سیستم در ناحیه‌ی دوپایداری قرار دارد که بسته به شرایط اولیه یا در حالت نقطه ثابت یا چرخه‌ی حدی قرار می‌گیرد که مقدار β_c به میزان اینرسی m بستگی دارد. برای $\beta > \beta_c$ سیستم در نقطه ثابت پایدار خود قرار می‌گیرد.

مرجع‌ها

[۱] M. Bennett, M. F. Schatz, H. Rockwood and K. Wiesenfeld; "Huygens's clocks"; Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, **2002** (2002) 563–579.

[۲] F. A. Rodrigues, T. K. D. Peron, P. Ji, and J. Kurths; "The Kuramoto model in complex networks"; Physics Reports, **610** (2016)

[۳] J. A. Acebrón, L. L. Bonilla, C. J. Pérez Vicente, F. Ritort and R. Spigler; "The Kuramoto model: A simple paradigm for synchronization phenomena"; *Reviews of Modern Physics*, **77** (2005) 137-185

[٤] A. Mishra, S. Ghosh, S. Kumar Dana, T. Kapitaniak, and C. Hens; "Neuron-like spiking and bursting in Josephson junctions: a review"; *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, **31**(5) (2021)

[٥] C. J. Tessone, A. Scire, R. Toral and P. Colet; "Theory of collective firing induced by noise or diversity in excitable media"; *Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, **75** (2007) 016203

اثر مهار در همگامی مدل کوراموتوی مرتبه‌ی دوم در شبکه های پیچیده

همت‌یار طباطبایی ، یحیی[۱] ؛ شهبازی، فرهاد[۲]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان ، خیابان استقلال، میدان استقلال ، اصفهان

چکیده

در سال‌های اخیر، پدیده‌ی همگامی در سیستم‌های نوسانگر به‌طور گسترده با استفاده از مدل کوراموتوی مرتبه اول مورد مطالعه قرار گرفته است. در این مقاله، تأثیر مهار بر پدیده‌ی همگامی در مدل کوراموتوی مرتبه دوم در شبکه‌های پیچیده بررسی می‌شود. برخلاف مدل مرتبه اول، مدل کوراموتوی مرتبه دوم با در نظر گرفتن ضریب لختی و عامل میرایی، توصیف واقع‌بینانه‌تری از دینامیک نوسانگرها ارائه می‌دهد. نوسانگرها به دو گروه تحریکی– مهاری با فرکانس ذاتی یکسان تقسیم شده و دینامیک آن‌ها بر روی شبکه‌های تصادفی، جهان‌کوچک مطالعه می‌شود. نتایج عددی نشان می‌دهد که حضور لختی و میرایی نقش مهمی در شکل‌گیری و پایداری همگامی ایفا کرده و رفتار سیستم را نسبت به مدل مرتبه اول به‌طور قابل‌توجهی تغییر می‌دهد. همچنین مشخص می‌شود که ساختار شبکه و سهم نوسانگرهای مهاری تأثیر اساسی بر گذارهای همگامی دارند. این نتایج بر اهمیت در نظر گرفتن اثرات مرتبه دوم در مطالعه‌ی همگامی شبکه‌های پیچیده تأکید می‌کند.

Effect of Inhibition on Synchronization in the Second-Order Kuramoto Model on Complex Networks

Hematyar Tabatabaei, Yahya[۱]; Shahbazi, Farhad[۲]

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

Abstract

Synchronization phenomena in systems of coupled oscillators have been extensively studied using the first-order Kuramoto model. In this paper, we investigate the effects of inhibition on synchronization in the second-order Kuramoto model on complex networks. Unlike the first-order model, the second-order Kuramoto model incorporates inertia and damping, providing a more realistic description of oscillator dynamics. The oscillators are divided into excitatory–inhibitory groups with identical intrinsic frequencies, and their dynamics are studied on random and small-world networks. Numerical results show that inertia and damping play a crucial role in the emergence and stability of synchronization and significantly modify the system behavior compared to the first-order model. We further demonstrate that both network topology and the fraction of inhibitory oscillators strongly influence synchronization transitions. These findings highlight the importance of second-order effects in understanding synchronization in complex networks.

PACS No 5.89

مقدمه

مطالعه‌ی رفتار جمعی در سامانه‌هایی متشکل از اجزای برهم‌کنش‌کننده با دینامیک غیرخطی، یکی از موضوعات بنیادین در علم سیستم‌های پیچیده به‌شمار می‌رود. در چنین سامانه‌هایی، برهم‌کنش‌های موضعی میان اجزا می‌توانند به ظهور الگوهای منسجم در مقیاس کلان منجر شوند؛ پدیده‌ای که در حوزه‌های گوناگونی از فیزیک و شیمی گرفته تا زیست‌شناسی و علوم اجتماعی مشاهده می‌شود. یکی از بارزترین جلوه‌های این رفتار جمعی، پدیده‌ی همگامی در جمعی از نوسانگرهای خودنگهدار است. نمونه‌های شناخته‌شده‌ای از این پدیده در طبیعت شامل چشمک‌زدن هماهنگ

کرم‌های شب‌تاب، حرکت جمعی پرندگان و ماهی‌ها، فعالیت هماهنگ نورون‌ها در شبکه‌های عصبی و ضربان سلول‌های قلبی هستند [۱]. در میان مدل‌های مختلفی که برای توصیف همگامی پیشنهاد شده‌اند، مدل کوراموتو به دلیل سادگی و قابلیت تحلیل‌پذیری بالا جایگاه ویژه‌ای دارد [۲].

با وجود موفقیت‌های مدل کوراموتوی مرتبه اول، این مدل همواره قادر به توصیف دقیق دینامیک سامانه‌های واقعی و زیستی نیست. به‌ویژه، نبود اثرات لختی و میرایی باعث می‌شود که فرآیند همگامی در این مدل سریع‌تر از آنچه در بسیاری از سامانه‌های طبیعی مشاهده می‌شود، رخ دهد. برای رفع این محدودیت، مدل کوراموتوی مرتبه دوم به‌عنوان تعمیمی از مدل مرتبه اول معرفی شد که در آن، با افزودن ضریب لختی و عامل میرایی، توصیف واقع‌بینانه‌تری از دینامیک نوسانگرها ارائه می‌شود.

از سوی دیگر، مطالعات اخیر نشان داده‌اند که ناهمگونی در نوع برهم‌کنش‌ها می‌تواند تأثیر چشمگیری بر همگامی داشته باشد. در بسیاری از سامانه‌های واقعی، برهم‌کنش‌ها صرفاً تقویتی نیستند و حضور عناصر مهاری یا ناسازگار امری اجتناب‌ناپذیر است. برای مثال، در شبکه‌های عصبی، نورون‌های مهاری در کنار نورون‌های تحریکی نقش اساسی در تنظیم فعالیت جمعی ایفا می‌کنند، و در سامانه‌های اجتماعی، افراد ناسازگار می‌توانند از شکل‌گیری اجماع جلوگیری یا آن را تعدیل کنند. بررسی اثر این‌گونه برهم‌کنش‌های متضاد در چارچوب مدل کوراموتو، به درک عمیق‌تری از مکانیزم‌های همگامی منجر شده است.

در این مقاله، به بررسی عددی تأثیر مهار بر پدیده‌ی همگامی در مدل کوراموتوی مرتبه دوم بر روی شبکه‌های پیچیده می‌پردازیم. نوسانگرها به دو گروه تحریکی- مهاری تقسیم شده و دینامیک آن‌ها بر روی شبکه‌های تصادفی، جهان‌کوچک مطالعه می‌شود. هدف اصلی این پژوهش، بررسی نقش هم‌زمان ساختار شبکه، اثرات مرتبه دوم و ناهمگونی در نوع برهم‌کنش‌ها در شکل‌گیری و پایداری همگامی است.

مدل و روش

با در نظر گرفتن شبکه ای از نوسانگر های فاز، دینامیک کوراموتوی مرتبه دو به شکل زیر معرفی می‌شود[۳]:

$$m\ddot{\theta}_i = -\alpha\dot{\theta}_i + \Omega_i + \frac{K}{k_i}\sum_{j=1}^{N} A_{ij}sin(\theta_j - \theta_i) \quad (۱)$$

که در آن α ضریب میرایی، m لختی و K ثابت جفت‌شدگی است. Ω_i فرکانس ذاتی نوسانگر i ام می‌باشد که در این پژوهش برای همه نوسانگرها صفر در نظر گرفته شده است. برای ساده سازی و بررسی راحت تر، با تغییر متغیر $\lambda = \frac{-\alpha}{\sqrt{mK}}$ و بازمقیاس زمان به صورت $\tau = Kt$، می‌توان این رابطه را به صورت زیر در نظر گرفت:

$$\ddot{\theta}_i = \lambda\dot{\theta}_i + \frac{1}{k_i}\sum_{j=1}^{N} A_{ij}sin(\theta_j - \theta_i). \quad (۲)$$

با تقسیم اجزاء شبکه به نوسانگر های مهاری – تحریکی می توان مدل کوراموتوی مرتبه دوم را به صورت زیر نوشت:

$$\ddot{\theta}_i = \lambda\dot{\theta}_i + \frac{1}{k_i}\sum_{j=1}^{N} A_{ij}Q_j^s sin(\theta_j^s - \theta_i), \quad (۳)$$

که در آن Q شدت جفت‌شدگی پیوندهای مهاری و $s = i, e$ مشخص کننده نوسانگرهای مهاری$(Q_j^i = -1)$ یا تحریکی$(Q_j^e = +1)$ است.

همچنین در ادامه بررسی رفتار گروهی سامانه در هر زمان از پارامتر نظم کوراموتو استفاده می‌کنیم :

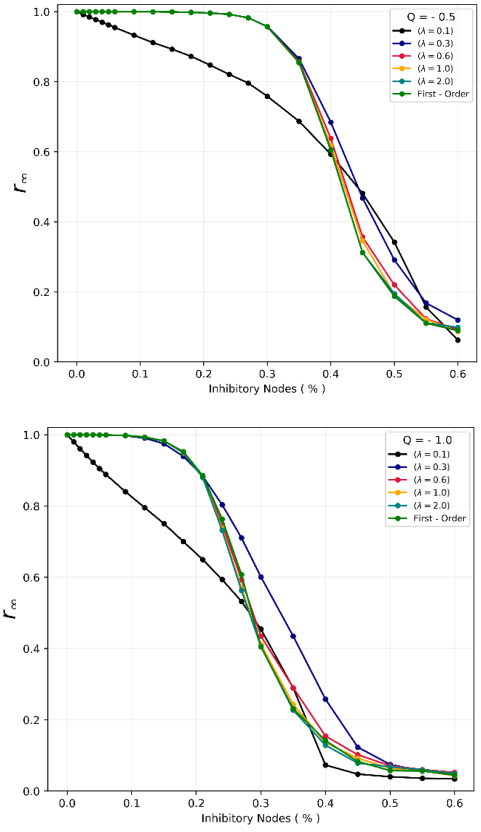
$$r_{(t)} = \frac{1}{N}\left|\sum_{j=1}^{N} e^{i\theta_j(t)}\right|, \quad (۴)$$

که می‌تواند مقادیری بین صفر و یک را داشته باشد که به ترتیب معرف حالت کاملا بی نظم (ناهمگام کامل) و حالت همگام کامل است . شبکه هایی که در این مقاله بررسی شده اند ، شبکه های کامل، جهان کوچک، تصادفی هستند . شبکه جهان کوچک با استفاده از الگوریتم واتس و استروگاتس ساخته می‌شود. در این روش ابتدا یک حلقه منظم ساخته شده و سپس بازآرایی یال ها را با احتمال p شروع می کنیم . اگر $۰,۰۱ < p < ۰,۰۵$ باشد، شبکه تولید شده

جهان کوچک است. همچنین برای انجام محاسبات عددی ، شبکه‌ای با ۱۰۰۰ رأس و میانگین درجه رأس ۱۰، در نظر گرفته شده‌است.

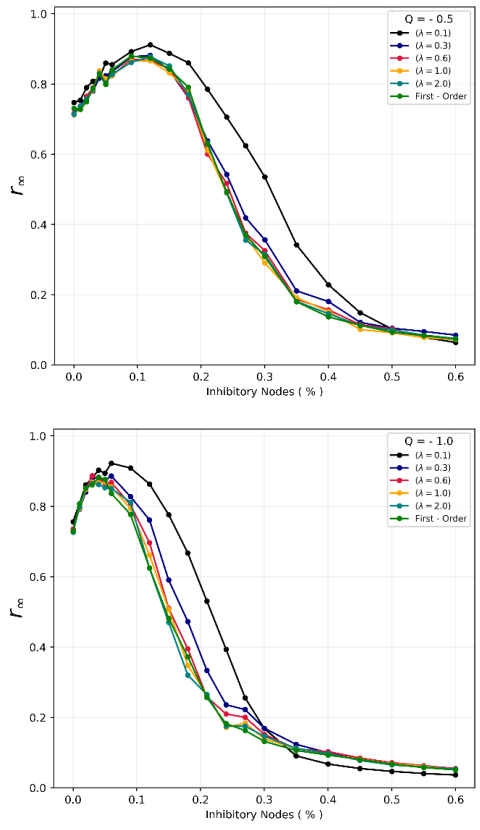
نتایج و بحث

ما در این مقاله به بررسی رفتار سامانه‌ای متشکل از نوسانگرهای تحریکی - مهاری در چارچوب دینامیک کوراموتوی مرتبه دوم می‌پردازیم. پیش‌تر نشان داده شده است که در شبکه‌های تصادفی، افزایش سهم نوسانگرهای مهاری فراتر از یک مقدار بحرانی منجر به تضعیف همگامی شده و پارامتر نظم شبکه، پس از نشان‌دادن نوعی مقاومت اولیه، روند کاهشی به خود می‌گیرد. همچنین دیده شده است که در شبکه‌های جهان کوچک، وجود درصد مشخصی از نوسانگرهای مهاری می‌تواند موجب افزایش سطح همگامی شود؛ به‌عبارت دیگر، حضور یک اختلال کنترل‌شده قادر است همگامی شبکه را تقویت کند.



شکل۱ : پارامتر نظم نهایی بر حسب مهار در شدت های مختلف مهار و همچنین λ های متفاوت در شبکه تصادفی با ۱۰۰۰ رأس و متوسط درجه رأس ۱۰. نتایج، میانگین‌گیری شده روی ۱۰۰ شرایط اولیه‌ی مختلف می‌باشند.

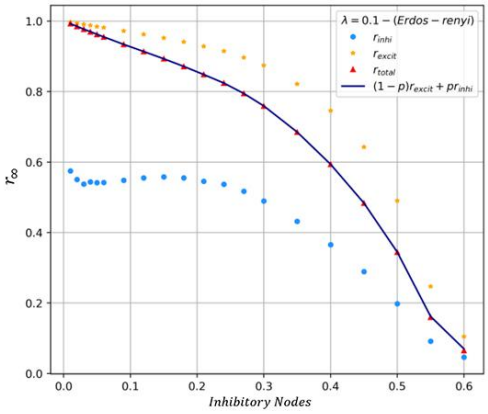
در این مقاله، در گام نخست تلاش می‌کنیم از این نتایج به‌عنوان ابزاری برای بررسی حد گذار مدل کوراموتوی مرتبه اول به مدل مرتبه دوم استفاده کنیم. در شکل ۱، تأثیر مهار تا ۶۰٪ بر دینامیک مدل کوراموتوی مرتبه دوم نمایش داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، به نظر می‌رسد کاهش λ در ابتدا تاثیر چندانی ندارد اما با در نظر گرفتن $\lambda = ۰,۱$ می‌توان دینامیک سامانه را در چارچوب مدل مرتبه دوم توصیف کرد؛ با تعریف پارامتر λ بر اساس لختی و میرایی و جفت شدگی نوسانگرها، کاهش آن، متناظر با افزایش اثر لختی و کاهش نقش میرایی است. از آنجا که بررسی دینامیک سامانه با تغییر یک پارامتر ساده‌تر است، در ادامه‌ی این مطالعه از مقدار ثابت و قابل اتکایی برای λ (برای مثال $\lambda = ۰,۱$) استفاده خواهیم کرد.



شکل۲ : پارامتر نظم نهایی بر حسب مهار در شدت های مختلف مهار و همچنین λ های متفاوت در شبکه جهان‌کوچک با ۱۰۰۰ رأس و متوسط درجه رأس ۱۰. نتایج، میانگین‌گیری شده روی ۱۰۰ شرایط اولیه‌ی مختلف می‌باشند.

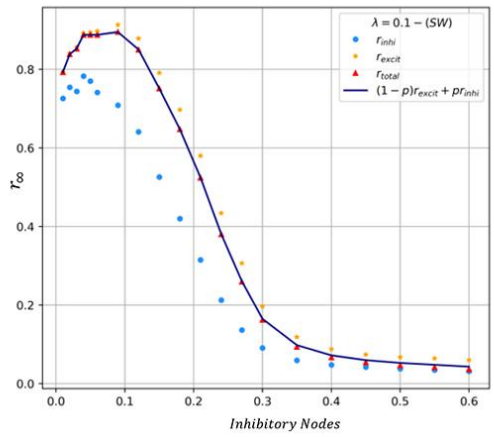
شکل ۲ نتایج مدل کوراموتوی مرتبه دوم با نوسانگرهای تحریکی - مهاری را بر روی شبکه‌ی جهان‌کوچک نشان می‌دهد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، افزایش سطح همگامی در ازای حضور درصد مشخصی از نوسانگرهای مهاری، در چارچوب مدل کوراموتوی مرتبه دوم نیز قابل مشاهده است. پیش‌تر نیز، مطالعاتی به بررسی تأثیر جفت‌شدگی‌های ناهمگن بر همگامی مدل کوراموتوی مرتبه اول در شبکه‌های تصادفی و جهان‌کوچک انجام شده است[٤].

همچنین می‌توان علاوه بر رفتار مجموعه نوسانگرها، وضعیت آن‌ها را در گروه‌های خود بررسی کرد. به این منظور نمودار پارامتر نظم را می‌توان برای هر گروه به صورت جداگانه رسم نمود.



شکل۳ : پارامتر نظم نهایی کل و گروه مهاری و تحریکی به صورت جداگانه بر حسب مهار در شبکه تصادفی با ۱۰۰۰ رأس و متوسط درجه رأس ۱۰، به ازای $Q = -۰,۵$. نتایج، میانگین‌گیری شده ۱۰۰ شرایط اولیه‌ی مختلف می‌باشند.

یکی از برجسته‌ترین تفاوت‌ها نسبت به مدل مرتبه اول، هم‌فاز نبودن گروه مهاری با یکدیگر است. همانطور که در شکل ۳ دیده می‌شود، گرچه دو گروه مهاری و تحریکی در فاز میانگین برابر قرار دارند، اما همگام نبودن گروه مهاری در بین خود باعث افت سریع پارامتر نظم کل شبکه می‌شود. به طور مشابه در شبکه جهان‌کوچک نیز گروه مهاری وضعیت همگامی کمتری نسبت به گروه تحریکی از خود نشان می‌دهند. به نظر می‌رسد وجود عامل لختی، مانع از همگام شدن گروه مهاری با اعضای خود می‌شود.



شکل٤ : پارامتر نظم نهایی کل و گروه مهاری و تحریکی به صورت جداگانه بر حسب مهار در شبکه جهان‌کوچک با ۱۰۰۰ رأس و متوسط درجه رأس ۱۰، به ازای $Q = -۱,۰$. نتایج، میانگین‌گیری شده ۱۰۰ شرایط اولیه‌ی مختلف می‌باشند.

نتیجه گیری

مدل کوراموتوی مرتبه دوم، همانند مدل مرتبه اول، رفتارهای کیفی مشابهی را در ارتباط با همگامی شبکه نوسانگرهای مهاری – تحریکی نشان می‌دهد؛ با این حال، تفاوت‌هایی نیز میان این دو مدل وجود دارد. برای نمونه، مقاومت شبکه‌ی تصادفی در برابر افت همگامی به ازای مهار در شبکه، در مدل مرتبه اول بیشتر است. همچنین وجود عامل لختی مانع از همگام شدن گروه مهاری در بین اعضای گروه خود می‌شود. به نظر می‌رسد که حضور عامل لختی در سامانه می‌تواند به‌عنوان عاملی مؤثر در افزایش بی‌نظمی و ناپایداری دینامیک شبکه عمل کند.

مرجع‌ها

[۱] Manrubia, S. C., & Mikhailov, A. S. (۲۰۰٤). *Emergence of dynamical order: synchronization phenomena in complex systems*. World Scientific.

[۲] Kuramoto, Y. (۱۹۷٥). International symposium on mathematical problems in theoretical physics. *Lecture notes in Physics*, *30*, ٤۲۰.

[۳] Ermentrout, B. (۱۹۹۱). An adaptive model for synchrony in the firefly Pteroptyx malaccae. *Journal of Mathematical Biology*, *29*(٦), ٥۷۱-٥۸٥.

[٤] Nikfard, T., Tabatabaei, Y. H., & Shahbazi, F. (۲۰۱۹). Contrariety and inhibition enhance synchronization in a small-world network of phase oscillators. *arXiv preprint arXiv:1908.00319*.

استنتاج احتمالاتی برای تخمین پارامتر قدرت جفت‌شدگی مدل کوراماتو روی شبکه تصادفی با استفاده از شبکه عصبی تخمین‌زننده چگالی احتمال

علی محمدپور[۱]، میثم هاشمی[۲]، ابوالفضل ضیائی‌مهر[۲]، مینا زارعی[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه تحصیلات تکمیلی در علوم پایه زنجان

[۲]دانشگاه اکس–مارسی، مؤسسه ملی سلامت و پژوهش‌های پزشکی، مؤسسه علوم اعصاب سامانه‌ها، فرانسه

چکیده

شناخت کامل از ساختار یک شبکه پیچیده بطور معمول سخت و پیچیده است. بطور مثال در بسیاری از موارد نمی‌توان پارامترهای مدل کوراماتو مانند قدرت جفت‌شدگی را بطور مستقیم برای یک شبکه واقعی بدست آورد. در بسیاری از موارد تنها سری‌های زمانی حاصل از دینامیک شبکه مانند فاز نوسانگرها برحسب زمان، از شبکه موجود است. در این پژوهش سعی شده است با رویکرد استنتاج بیزی در آمار و استفاده از شبکه عصبی تخمین‌زننده چگالی احتمال، تخمینی درباره توزیع آماری پارامترهای جفت‌شدگی مدل کوراماتو با استفاده از سری‌های فازی شبکه ارائه شود. شبکه مورد استفاده در این پژوهش، یک شبکه تصادفی است. نتایج نشان داد که با استفاده از دو ویژگی اتصال عملکردی و اتصال عملکردی زمانی، می‌توان با با دقت خوبی توزیع آماری پارامتر جفت‌شدگی را برای شبکه تصادفی تخمین زد.

واژه‌های کلیدی: مدل کوراماتو، قدرت جفت‌شدگی، استنتاج بیزی،شبکه عصبی تخمین‌زننده چگالی احتمال، اتصال عملکردی، اتصال عملکردی زمانی

Probabilistic Inference for Estimating the Coupling Strength Parameter of the Kuramoto Model on Random Networks Using Neural Density Estimation

Ali Mohammadpour[1], Meysam Hashemi [2], Abolfazl Ziaeemehr[2], Mina Zarei[1]

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

[2] Institut de Neurosciences des Systèmes Aix-Marseille Université, France

A complete characterization of the structure of complex networks is generally difficult and challenging. For instance, in many cases, the parameters of the Kuramoto model, such as the coupling strength, cannot be directly obtained for real-world networks. Often, the only available data consist of time series generated by the network dynamics, such as the temporal evolution of oscillator phases. In this study, a probabilistic inference framework based on Bayesian inference is employed to estimate the statistical distribution of the coupling parameters of the Kuramoto model using phase time series of the network. This is achieved by utilizing a neural density estimator. The network considered in this research is a random network. The results demonstrate that by using two features—functional connectivity and functional connectivity dynamic—it is possible to accurately estimate the statistical distribution of the coupling strength parameter for random networks.

Keywords: Kuramoto model, coupling strength, Bayesian inference, neural density estimator, functional connectivity, functional connectivity Dynamic

مقدمه

مغز یک سامانه پیچیده است که از تعداد بسیار زیادی نورون با دینامیک‌های غیر خطی تشکیل شده است. همگامی دینامیک نورون‌ها در یک ناحیه از مغز، نشاندهنده فعالیت آن ناحیه از مغز است. همچنین در برخی از موارد، همگامی نورون‌ها می‌تواند نشان‌دهنده وجود بیماری‌هایی مانند صرع یا پارکینسون باشد. در بررسی همگامی نورون‌ها می‌توان از روش‌های تجربی و نظری مانند استفاده از مدل کوراماتو استفاده کرد.

تعیین پارامترهای مدل کوراماتو برای شبکه‌های واقعی مانند مغز، همواره با مشکل روبرو بده است. می‌توان با رویکرد استنتاج آماری و استفاده از روش‌هایی مانند بیشینه کردن توزیع درستنمایی برای ویژگی‌های آماری نسبت داده‌شده به سری‌های زمانی مدل کوراماتو به ازای پارامترهای این مدل مانند قدرت جفت‌شدگی، پارامترهای مدل را تخمین زد. اما به دلیل تلفات حیوانی، ایجاد هزینه اضافه و... بطور معمول نمی‌توان از این روش‌ها استفاده کرد[۱].در واقع بهینه این است که توزیع‌هایی آماری یا توزیع پسین برای پارامترهای مدل با توجه به سری‌های زمانی تولیدشده از آزمایش یا شبیه‌سازی در نظر گرفته شود. برای محاسبه توزیع پارامترهای مدل از رویکرد احتمالاتی بیزی یا قضیه بیز استفاده می‌شود. استفاده عملی مستقیم از قضیه بیز در بسیاری از موارد ممکن نیست. نشان داده خواهد شد که می‌توان با استفاده از سری‌های زمانی شبیه‌سازی شده به ازای پارامترهای مختلف مدل کوراماتو و با مجموعه روش‌هایی موسوم به جریان‌های نرمالساز[1] و شبکه عصبی تخمین‌زننده چگالی احتمال[2]، تخمین‌هایی با دقت بالا برای پارامترهای مدل کوراماتو بدست آورد.

روش‌ها

یکی از مدل‌هایی که یک توصیف ریاضی برای پدیده همگامی در سامانه‌های پیچیده ارائه می‌دهد، مدل کوراماتو است. فرض می‌شود در یک سامانه پیچیده، هر گره یک نوسانگر است که فاز آن تحول زمانی خود را دارد. این نوسانگرها توسط یال‌های شبکه با یکدیگر جفت می‌شوند. توصیف ریاضی این مدل برای N نوسانگر بصورت

$$\frac{d\varphi_i(t)}{dt} = \omega_i + K\sum_{j=1}^{N} A_{ij}\sin(\varphi_j(t) - \varphi_i(t)), \qquad 1$$

است. $\varphi_i(t)$ و ω_i بترتیب فاز و فرکانس ذاتی نوسانگر i در زمان t است. A_{ij} مولفه (i,j) ماتریس مجاورت است که نشان می‌دهد که آیا دو نوسانگر i و j با هم جفت شده اند یا خیر. K قدرت جفت‌شدگی است که نشان‌دهنده میزان ارتباط و برهمکنش میان دو نوسانگر است. با بررسی سری‌های زمانی فازی نوسانگرها، می‌توان به نحوه همگامی در شبکه پی برد[۲].

رویکرد احتمالاتی بیزی، رویکردی در استنتاج آماری است که در آن احتمال به عنوان درجه باور نسبت به پارامترها تعریف می‌شود و نه به عنوان نسبت تکرار یک رویداد خاص به تعداد دفعات زیاد آزمایش. در واقع در این رویکرد، پارامترهای جامعه آماری ثابت فرض نمی‌شوند و برای هر پارامتر با توجه به داده‌های نمونه یک احتمال در نظر گرفته می‌شود. به عنوان نمونه پارامتر در این قضیه می‌تواند قدرت جفت‌شدگی و داده‌ها سری‌های زمانی حاصل از مدل کوراماتو باشد. در بسیاری از موارد، استفاده از مستقیم از قضیه بیز برای بدست آوردن شکل تحلیلی توزیع پسین، می‌تواند پیچیده یا غیرممکن باشد. در روش‌هایی مانند مونت‌کارلوی زنجیره مارکوف[3]، سعی می‌شود با نمونه‌گیری از یک زنجیره مارکوف، از توزیع پسین بصورت غیر مستقیم نمونه‌برداری شود. ایراد اساسی این روش در این است که بافزایش بعد پارامترها، نفرین ابعاد پیش می‌آید[۳]. روش‌های جریان‌های نرمالساز این محدودیت را کاهش می‌دهد. ایده کلی این دسته از روش‌ها این است که یک توزیع ساده مانند توزیع گاوسی با استفاده از یک یا مجموعه ای از نگاشت‌ها، به یک توزیع پیچیده مانند توزیع پسین مرتبط شود. با نمونه‌برداری از توزیع ساده می‌توان توزیع پیچیده را ایجاد کرد. بنابراین با پیدا کردن تبدیل مناسب می‌توان به توزیع پیچیده دسترسی پیدا کرد. تابع نگاشت دارای یکسری پارامتر مجهول است. اگر نمونه‌هایی محدود از توزیع پیچیده موجود باشد، می‌توان با توجه به نمونه‌های موجود، پارامترهای تابع نگاشت به ازای هر نمونه دلخواه از توزیع پیچیده را مشخص کرد. برای ربط دادن نمونه‌های دلخواه به پارامترهای تابع نگاشت، از یک شبکه عصبی مصنوئی استفاده می‌شود. ورودی شبکه عصبی اعضای بردار نمونه از توزیع پیچیده و خروجی شبکه، پارامترهای تابع نگاشت است. وزن‌های این شبکه عصبی به گونه‌ای تعیین می‌شوند که واگرایی کولبک لایبلر میان توزیع پیچیده واقعی و توزیع پیچیده تخمینی، روی نمونه‌های موجود از توزیع پیچیده، کمینه شود. شبکه عصبی نامبرده‌شده، شبکه عصبی تخمین‌زننده چگالی احتمال نام دارد[۴]. یکی از روش‌های جریان‌های نرمالساز، جریان‌های خودبازگشتی ماسک‌دار است.در این روش، نمونه‌های ورودی بصورت ترتیبی پردازش

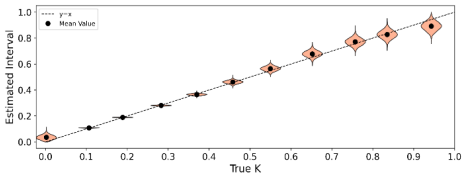
[1] Normalizing flows
[2] Neural density estimator

[3] Markov Chain Monte Carlo (MCMC)

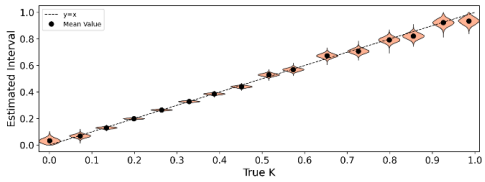
می‌شوند بطوری که خروجی شبکه عصبی برای هر مولفه از یک نمونه، تنها به مولفه‌های قبلی وابسته است. یک تبدیل وارون‌پذیر یاد گرفته می‌شود که داده‌ها را از یک توزیع ساده به توزیع پیچیده نگاشت کند[۵]. کتاب‌خانه استنتاج شبیه‌سازی محور[۴] یک کتاب‌خانه توسعه‌داده شده توسط زبان برنامه‌نویسی پایتون است و هدف آن تخمین توزیع پسین برای زمانی است که توزیع درستنمایی در دسترس نیست. در واقع فرض بر این است که برای یک جامعه آماری به ازای تعدادی از پارامترهای جامعه، ویژگی‌های متناظر با این پارامترها موجود است. به عنوان نمونه در مدل کوراموتو، قدرت جفت‌شدگی می‌تواند به عنوان یک پارامتر، که هدف تعیین توزیع پسین برای آن است، در نظر گرفته شود. در واقع در هر قدرت جفت‌شدگی متفاوت، سری‌های زمانی متفاوتی برای فاز نوسانگرهای سامانه ایجاد می‌شود. می‌توان به این سری‌های زمانی متفاوت، یک یا چند ویژگی آماری نسبت داد. کتاب‌خانه SBI برای تخمین توزیع پسین، از روش‌های جریان‌های نرمال‌ساز استفاده می‌کند. بصورت پیشفرض کتاب‌خانه از روش MAF برای تخمین توزیع پسین استفاده می‌کند. برای بررسی کیفیت تخمین توزیع پسین، از دو کمیت فشردگی[۵] و امتیاز استاندارد یا امتیاز زد[۶] استفاده می‌شود. کمیت فشردگی نشان‌دهنده این است که توزیع پسین تخمین زده شده، چه میزان عدم قطعیت کمتری نسبت به توزیع پیشینه دارد. کمیت امتیاز استاندارد نشان می‌دهد که تفاوت میانگین توزیع پسین و مقدار واقعی پارامتر به چه میزان در محدوده انحراف معیار توزیع هستند.

نتایج

شبکه استفاده شده در این پژوهش یک شبکه اردوش-رنی به تعداد ۱۰۰ نوسانگر و احتمال وجود یال بین یک جفت گره در شبکه، ۰.۵ است. فاز اولیه گره‌ها از یک توزیع یکنواخت بین ۰ تا 2π تبعیت می‌کند. فرکانس اولیه برای گره‌ها نیز از یک توزیع گاوسی با میانگین ۷ و واریانس ۴ پیروی می‌کند. قدرت جفت‌شدگی میان نوسانگرها برای همه جفت گره‌ها ثابت و یک عدد بین ۰ و ۱ است. در واقع در هر شبیه‌سازی از توزیع یکنواخت بازه ۰ تا ۱، یک مقدار برای قدرت جفت‌شدگی تعیین می‌شود. در هر قدرت جفت‌شدگی، هر نوسانگر یک سری زمانی فازی مربوط به خود را تولید می‌کند. در این پژوهش، ویژگی‌های آماری نسبت داده‌شده به سری‌های زمانی، میانگین اعضای بالامثلثی ماتریس FC و FCD است که در هر شبیه‌سازی مقدار متفاوتی به خود می‌گیرد. قدرت جفت‌شدگی نسبت به این دو ویژگی تمایزپذیر است. تعداد تبدیل‌های تابع نگاشت ۵، تعداد لایه‌های مخفی ۲ و تعداد نورون‌ها در هر لایه مخفی ۵۰ عدد است. تابع فعالیت نیز تابع رلو است. در این مسئله ۱۰۰۰ شبیه‌سازی برای قدرت جفت‌شدگی‌های متفاوت انجام شده است که همانطور که ذکر شد، از یک توزیع پیشینه یکنواخت بین ۰ تا ۱ می‌آیند. با استفاده از نمودارهای ویولون می‌توان میانگین توزیع پسین برای هر تخمین و مقادیر واقعی قدرت جفت‌شدگی را در یک نمودار نمایش داد. در این نوع نمودار دور نقاط هاله‌هایی ویولون شکل وجود دارد که درازای آن‌ها نشان‌دهنده عدم قطعیت در توزیع پسین است. همچنین انحراف نقاط از خط همانی نشان دهنده دور بودن میانگین توزیع‌ها از مقادیر واقعی پارامتر است. نمودارهای ویولون برای ۱۵ شبیه‌سازی برای دو حالت که میانگین اعضای FC و FCD هرکدام بصورت جدا به عنوان ویژگی نسبت داده‌شده به سری‌های زمانی در نظر گرفته شده بود، رسم شد. در شکل ۱ این نتایج ثبت شده است.



(الف)



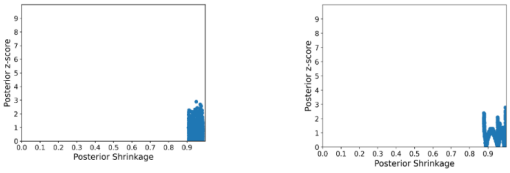
(ب)

شکل۱: نمودار ویلون برای تعدادی شبیه‌سازی برای زمانی که (الف) میانگین اعضای FC (ب) میانگین اعضای FCD . محور افقی مقدار واقعی و محور عمودی میانگین توزیع پسین است.

در شکل ۱، در هر دو حالت چینش ویژگی، چگالی احتمال در نزدیکی مقدار واقعی پارامتر، متراکم است. البته در حالت ب میزان تراکم بیشتر است. مشاهده می‌شود که در رژیم‌های پایین قدرت جفت‌شدگی، یعنی حدودا ۰ تا ۰.۱، قدرت تخمین پارامتر بالا است. علت این است که تمایزپذیری پارامتر قدرت جفت‌شدگی در این ناحیه نسبت به دو ویژگی

[4] Simulation-Based Inference (SBI)
[5] Shrinkage
[6] Z-score

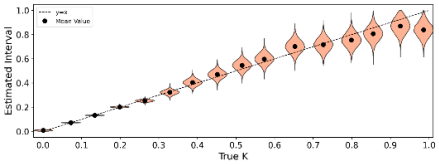
میانگین FC و FCD بالا است. در قدرت‌های جفت‌شدگی بزرگتر، تمایزپذیری قدرت جفت‌شدگی برای هر دو ویژگی به خصوص میانگین اعضای FC کاهش می‌یابد. نمایش کمیت‌های فشردگی و امتیاز استاندارد در یک دستگاه مختصات و بررسی محدوده آن‌ها معیار خوبی برای بررسی کیفیت تخمین‌ها بصورت عددی است. در شکل ۲ این نمایش برای دو حالت انتخاب ویژگی به نمایش در آمده است.



(ب) (الف)

شکل۲: نمایش فشردگی و امتیاز استاندارد توزیع پسین برای شبیه‌سازی‌ها برای زمانی که (الف) میانگین اعضای FC (ب) میانگین اعضای FCD. محور افقی مقدار فشردگی و محور عمودی امتیاز استاندارد توزیع پسین است.

مشاهده می‌شود برای هر سه حالت چینش ویژگی در شکل ۲، فشردگی و امتیاز استاندارد در محدوده معقولی از مقادیر قرار دارند. مشاهده شد. با افزایش تعداد نوسانگرها، تمایز پذیری قدرت جفت‌شدگی نسبت به هر دو ویژگی کاهش پیدا می‌کند. برای نمونه نمودار ویلون برای چند شبیه‌سازی زمانی که ویژگی میانگین اعضای FCD به عنوان ویژگی انتخابی در نظر گرفته می‌شود و تعداد نوسامگرها ۳۵۰ است، بصورت زیر است.



شکل۳ نمودار ویولون برای چند شبیه‌سازی با ویژگی انتخاب میانگین اعضای FCD با تعداد نوسانگر ۳۵۰ عدد. مشاهده می‌شود که عدم قطعیت تخمین با افزایش تعداد نوسانگرها بخصوص در قدرت‌های جفت‌شدگی ۰.۱ بعد، افزایش می‌یابد.

بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش تعداد نوسانگرها در مدل کوراماتو، دقت تخمین توزیع پسین پارامتر قدرت جفت‌شدگی مخصوصا در رژیم‌های بزرگ برای آن، کاهش پیدا می‌کند.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش مشخص شد که با استفاده از شبکه عصبی تخمین‌زننده چگالی احتمال، می‌توان به چگونگی فرم توزیع پسین پارامترهای مدل کوراماتو رسید. مشاهده شد که استفاده از دو ویژگی اتصال عملکردی و اتصال عملکردی زمانی، تخمین‌های قابل قبولی از قدرت جفت‌شدگی می‌دهند. در رژیم‌های پایین قدرت جفت‌شدگی، ویژگی اتصال عملکردی قدرت تخمین بالاتری از ویژگی اتصال عملکردی زمانی دارد و در رژیم بالا ویژگی اتصال عملکردی زمانی قدرت تخمین بالاتری دارد. همچنین قدرت تخمین هردو ویژگی با افزایش تعداد نوسانگرها، کاهش پیدا می‌کند.

ارجاعات

[1] Cox, D. R. (2006). *Principles of Statistical Inference*. Cambridge: Cambridge University.

[2] Kuramoto, Y. (1975). *Self-entrainment of a population of coupled nonlinear oscillators, Kyoto University*

[3] Geman, S., & Geman, D. (1984). Markov Chain Monte Carlo Methods: Computation and Inference.

[4] Papamakarios, G., Nalisnick, E., Rezende, D. J., Mohamed, S., & Lakshminarayanan, B. (2021). *Normalizing flows for probabilistic modeling and inference*. Journal of Machine Learning Research, 22, 1–64

[5] Papamakarios, G., Pavlakou, T., & Murray, I. (2017). Masked autoregressive flow for density estimation. *Advances in Neural Information Processing System*

ویژگی‌های انحراف بزرگ درخت‌های پوشای کمینه برای گراف‌های تصادفی

ساریخانی ، مهدی[1] ؛ هارتمان، الکساندر[2]

[1] بخش فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز، شیراز
[2] دانشکده فیزیک، دانشگاه اولدنبورگ، آلمان

این مقاله برای چاپ به مجله Physical Review E ارسال شده است و هدف از ارسال آن به این کنفرانس، تنها ارائه آن می‌باشد.

چکیده

ما ویژگی‌های انحراف بزرگ درخت‌های پوشای کمینه را برای دو مجموعه از گراف‌های تصادفی با N رأس بررسی می‌کنیم. ابتدا گراف‌های کامل را در نظر می‌گیریم. سپس گراف‌های تصادفی اردوش–رنیی (ER) با احتمال یال p=c/N را مطالعه می‌کنیم که شرط همبندی بر آن‌ها اعمال شده است. با استفاده از نمونه‌برداری زنجیره مارکوف در چارچوب انحراف بزرگ، توانستیم توزیع وزن درخت پوشای کمینه را تا چگالی‌های احتمالی به کوچکی 10^{-300} به‌دست آوریم. برای گراف کامل، پیش‌بینی‌های تحلیلی مربوط به مقدار امید ریاضی تأیید می‌شوند. برای هر دو مجموعه، اصل انحراف بزرگ برقرار است. برای گراف‌های ER همبند، تغییر چشمگیری در توزیع‌ها در مقدار c=1 مشاهده می‌کنیم، که آستانه‌ی تراوش برای گراف ER است.

واژه‌های کلیدی: *انحراف بزرگ، گراف تصادفی، درخت پوشای کمینه.*

Large Deviation Properties of Minimum Spanning Trees for Random Graphs

Sarikhani, Mahdi[1]; Hartmann, Alexander K.[2]

[1] *Department of Physics, College of Sciences, Shiraz University, Shiraz*
[2] *Institute of Physics, University of Oldenburg, Germany*

Abstract

We study the large-deviation properties of minimum spanning trees for two ensembles of random graphs with N nodes. First, we consider complete graphs. Second, we study Erdős–Rényi (ER) random graphs with edge probability p=c/N conditioned to be connected. By using large-deviation Markov chain sampling, we are able to obtain the distribution P(W) of the spanning-tree weight W down to probability densities as small as 10^{-300}. For the complete graph, we confirm analytical predictions with respect to the expectation value. For both ensembles, the large deviation principle is fulfilled. For the connected ER graphs, we observe a remarkable change of the distributions at the value of c=1, which is the percolation threshold for the original ER ensemble.
***Keywords**: Large Deviation, Random Graph, Minimum Spanning Tree*

PACS No.

مقدمه

این مقاله خلاصه‌ای از مقاله [1] ارسال شده به ژورنال Physical Review E برای چاپ است. گراف‌ها و شبکه‌ها [2-4] در مدل‌سازی سامانه‌هایی مانند شبکه‌های انرژی، انتشار بیماری‌ها یا شبکه‌های اجتماعی کاربرد دارند. گراف‌ها را می‌توان به شیوه‌های گوناگون تحلیل کرد. در اینجا، ما درخت‌های پوشا را در نظر می‌گیریم، اگر یال‌های گراف وزن داشته باشند، آنگاه درخت پوشای کمینه، درخت پوشایی است که مجموع وزن یال‌های آن کمینه باشد.

درخت‌های پوشا کاربردهای عملی و پژوهش بسیاری همچون راه‌اندازی شبکه‌های حمل‌ونقل [5]، خوشه‌بندی داده‌ها [6]، شناسایی جامعه‌ها [7] دارند. درخت‌های پوشا توجه ریاضی‌دانان را نیز به خود جلب کرده‌اند، جایی که ما از برخی از کارها [8-12] برای مقایسه با نتایج خود در ادامه استفاده می‌کنیم.

در این کار، ما به‌صورت عددی توزیع وزن درخت‌های پوشای کمینه $P(W)$ را برای دو مجموعه‌ی تصادفی بررسی می‌کنیم. اولین مجموعه شامل گراف‌های کامل است که وزن یال‌ها به‌طور تصادفی، مستقل و هم‌توزیع (iid) به‌صورت یکنواخت در بازه‌ی $[0,1]$ توزیع شده‌اند. برای این حالت، مقدار امید ریاضی W در حد تعداد زیاد N شناخته شده است [14]، همچنین احتمال انحراف از این مقدار با N به‌صورت نمایی کاهش می‌یابد. اما جزئیات مربوط به توزیع ناشناخته است. دومین مجموعه شامل گراف‌های تصادفی اردوش–رنیی (ER) است که شرط همبندی بر آن‌ها اعمال شده و دوباره وزن‌ها به‌صورت iid یکنواخت در $[0,1]$ توزیع شده‌اند. در اینجا، تا جایی که می‌دانیم، هیچ اطلاعاتی درباره‌ی توزیع $P(W)$ وجود ندارد. برای نمونه‌برداری از گراف‌های تصادفی، ما از روش زنجیره مارکوف مونت‌کارلو در چارچوب انحراف بزرگ [13,14] استفاده می‌کنیم، که به ما امکان دسترسی به دم‌های توزیع تا احتمال‌های بسیار کوچک مانند 10^{-300} را می‌دهد. این توانایی برای بررسی اصل موسوم به انحراف بزرگ [15,16] سودمند است.

مدل‌ها

یک درخت پوشا $T=(V,E_T)$ برای گراف $G=(V,E)$ شامل مجموعه‌ی V از رأس‌ها و یک زیرمجموعه‌ی بی‌دور E_T از E است که همه‌ی رأس‌ها را به هم متصل می‌کند. وزن کل یال‌های یک درخت پوشا برابر است با

$$\tilde{W}\equiv\tilde{W}(T)=\sum_{\{i,j\}\in E_T} w_{i,j} \qquad (1)$$

درخت پوشای کمینه‌ی یک گراف، درخت پوشایی است که وزن $\tilde{W}$ در آن کمینه باشد؛ وزن کمینه را با W نشان می‌دهیم. توجه کنید که در حالت کلی درخت پوشای کمینه یکتا نیست، اما برای مجموعه‌هایی که ما در اینجا بررسی می‌کنیم این‌گونه است.

در اینجا ما مجموعه‌هایی از گراف‌های همبند را بررسی می‌کنیم که وزن یال‌ها به‌طور تصادفی انتخاب شده‌اند. این بدان معناست که وزن درخت پوشای کمینه یک متغیر تصادفی است و با یک توزیع احتمال با چگالی $P(W)$ توصیف می‌شود. هدف این مقاله به‌دست آوردن $P(W)$، از جمله دم‌های کم‌احتمال آن است.

اولین مجموعه‌ای که بررسی می‌کنیم شامل گراف‌های کامل وزن‌دار است. برای این مجموعه، مقدار امید ریاضی $\langle W\rangle_N$ به‌صورت تحلیلی در حد $N\to\infty$ به‌دست آمده است [9]:

$$\langle W\rangle_N \to \zeta(3)/D,\quad \zeta(3)=\sum_{k=1}^{\infty} 1/k^3 = 1.202\ldots \qquad (2)$$

در مورد دم‌ها نشان داده شده است که انحراف‌ها از مقدار معمول به‌صورت نمایی با اندازه‌ی گراف کاهش می‌یابند [11].

دومین مجموعه، مجموعه‌ای از گراف‌های تصادفی اردوش-رنیی (ER) است. برای مطالعه‌ی درخت‌های پوشا، لازم است گراف‌ها همبند باشند. بنابراین همبندی گراف‌های با استفاده از جستجوی عمق-اول [17] بررسی شده‌اند. توجه کنید که برای مقادیر کوچک c، گراف‌های ER معمولاً همبند نیستند. بنابراین، روش زنجیره مارکوف مونت‌کارلو برای تولید گراف‌های ER همبند به کار می‌رود.

در نظریه‌ی انحراف بزرگ، احتمال $P(X)$ برای کمیت تصادفی X مورد بررسی قرار می‌گیرد. دم‌های $P(X)$ انحراف‌های بزرگ از مقادیر معمول X را توصیف می‌کنند. در اینجا ما $X=W$ و کمیت شدتی $w=W/(N-1)$ را در نظر می‌گیریم. اغلب این انحراف‌ها برای مقادیر بزرگ N به‌صورت نمایی با افزایش N کوچک می‌شوند:

$$P(W)\simeq e^{-N\Phi(w)} \qquad (3)$$

که در آن تابع نرخ $\Phi(w)$ معمولاً به یک کمیت شدتی وابسته است. این شکل از توزیع‌ها وابستگی بسیار مشخصی به اندازه‌ی سامانه N دارند. هنگامی اصل انحراف بزرگ برقرار است که به‌طور تقریبی تابع توزیع شکل رابطه‌ی 3 را داشته باشد و تابع نرخ تجربی

$$\Phi_N(w)\equiv -\frac{1}{N}\ln P(wN) \qquad (4)$$

هنگامی که $N\to\infty$ به $\Phi(w)$ همگرا شود.

الگوریتم‌ها

یک درخت پوشای کمینه را می‌توان به‌طور مناسب با استفاده از الگوریتم پرایم [5,17] محاسبه کرد.

برای برآورد توزیع $P(W)$ در ناحیه‌ی با احتمال زیاد، نمونه‌برداری مستقیم روشی سرراست است. با این حال، در این نمونه‌برداری، $P(W)$ تنها در ناحیه‌ای قابل اندازه‌گیری است که در آن $P(W)$ نسبتاً بزرگ باشد، حدود $P(W)>1/K$. متأسفانه، هنگامی که از قله‌ی تابع توزیع فاصله می‌گیریم، با افزایش اندازه‌ی سامانه N، تابع توزیع معمولاً به‌صورت نمایی کاهش می‌یابد. بنابراین، حتی برای اندازه‌های متوسط سامانه، تابع توزیع در بخش عمده‌ای از گستره‌ی خود ناشناخته باقی می‌ماند.

برای برآورد $P(W)$ در گستره‌ی وسیع‌تری از وزن درخت‌های پوشای کمینه، ما از رویکرد متفاوتی استفاده می‌کنیم [13,14,18]. ایده‌ی اصلی آن است که گراف‌ها با یک چگالی اصلاح‌شده تولید شوند که شامل یک عامل نمایی $exp(-W(G)/\theta)$ اضافی باشد، که در آن θ یک پارامتر شبیه به دما است و وزن را کنترل می‌کند.

برای نمونه‌برداری مطابق با وزن‌هایی که با عامل نمایی اصلاح شده‌اند، شبیه‌سازی‌های استاندارد زنجیره مارکوف مونت‌کارلو انجام می‌دهیم. در گام t، یک نمونه‌ی گراف $G(t)$ داریم. با استفاده از الگوریتم متروپولیس-هاستینگز [21-19]، در هر گام t، یک گراف کاندید G^* از گراف جاری $G(t)$ ساخته می‌شود. اگر گراف کاندید G^* همبند باشد، وزن درخت پوشای کمینه‌ی آن $W(G^*)$ محاسبه می‌شود. گراف کاندید با احتمال متروپولیس پذیرفته می‌شود $(G(t+1)=G^*)$:

$$p= min\{1, e^{-[W(G^*)-W(G(t))]/\theta}\} \quad (5)$$

در صورتی که گراف کاندید رد شود، گراف جاری حفظ می‌شود، یعنی $G(t+1) = G(t)$.

پارامتر دما θ به ما امکان می‌دهد نمونه‌برداری را به سمت گراف‌هایی با وزن‌های بزرگ‌تر یا کوچک‌تر درخت پوشای کمینه هدایت کنیم. دمای بی‌نهایت منجر به پذیرش همه‌ی پیکربندی‌ها می‌شود، که دسترسی به مقادیر معمول را فراهم می‌کند. مقدار مثبت (منفی) θ به ما اجازه می‌دهد گراف‌هایی با وزن‌های کوچک‌تر (بزرگ‌تر) از مقدار معمول درخت پوشای کمینه نمونه‌برداری کنیم.

در حد زنجیره‌های مارکوف با طول بی‌نهایت، توزیع گراف‌ها از احتمال زیر پیروی خواهد کرد:

$$Q_\theta(G)=\frac{1}{Z(\theta)} e^{-W(G)/\theta} Q(G) \quad (6)$$

که در آن $Q(G)$ همان احتمال اصلی گراف در مجموعه‌ی خود است و $Z(\theta)$ یک ثابت بهنجارش ناشناخته می‌باشد. توزیع احتمال برای W در دمای θ به‌صورت زیر داده می‌شود:

$$P(W)=e^{W/\theta} Z(\theta) P_\theta(W) \quad (7)$$

بنابراین، توزیع $P(W)$ را می‌توان از $P_\theta(W)$ در دماهای متناهی، تا یک ثابت بهنجارش $Z(\theta)$، برآورد کرد. توجه کنید که برای یک نمونه‌ی متناهی از گراف‌ها، هر دمای انتخاب‌شده θ منجر به مشاهده‌ی مقادیر W در یک بازه‌ی مشخص می‌شود و بنابراین امکان برآورد $P(W)$ در همان ناحیه را فراهم می‌کند. در هر حال، دماهای با قدر مطلق بزرگ منجر به نمونه‌برداری از توزیع نزدیک به مقدار معمول می‌شوند، در حالی که دماهای با قدر مطلق کوچک برای دسترسی به دم‌های توزیع به کار می‌روند.

ثابت‌های بهنجارش $Z(\theta)$ را می‌توان با مقایسه‌ی هیستوگرام‌های مربوط به دماهای مجاور محاسبه کرد. در ناحیه‌ی هم‌پوشانی، ثابت‌های بهنجارش نسبی با این شرط به‌دست می‌آیند که هیستوگرام‌های بازمقیاس‌شده در محدوده‌ی خطا با یکدیگر منطبق شوند.

نتایج

ما شبیه‌سازی‌هایی را برای گراف‌های کامل و گراف‌های ER همبند با درجات مختلف اتصال c و برای تعداد متفاوتی از رأس‌ها در بازه‌ی $N\leq512$ انجام داده‌ایم. برای هر دو مجموعه، وزن‌ها به‌طور یکنواخت در بازه‌ی $[0,1]$ توزیع شده‌اند.

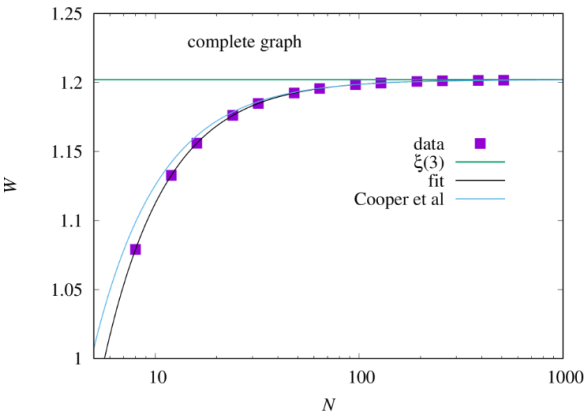
وزن میانگین درخت پوشای کمینه برای گراف کامل به‌عنوان تابعی از اندازه‌ی گراف در شکل 1 نشان داده شده است. همگرایی به نتیجه‌ی تحلیلی رابطه‌ی 2 به‌خوبی قابل مشاهده است و شبیه‌سازی‌های ما را تأیید می‌کند.

تابع نرخ رابطه‌ی 4 برای تعداد مختلفی از رأس‌ها در شکل 2 نشان داده شده است. برای مقادیر کوچک N، برخی اثرات اندازه‌ی محدود قابل مشاهده‌اند، اما منحنی‌ها دست‌کم برای مقادیر W تا حدود 6، برای $N\geq128$ روی یکدیگر منطبق می‌شوند. این بدان معناست که همگرایی تابع نرخ تجربی به یک تابع نرخ حدی با

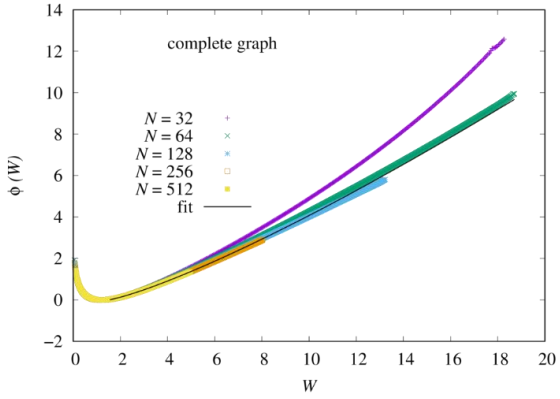
داده‌ها سازگار است. با این حال، نمی‌توانیم درباره‌ی شکل کلی چیز زیادی بگوییم، اما بخش راست تابع توزیع با یک قانون توانی

$$\tilde{\phi}(W)=l(W-W_0)^{\beta} \quad (8)$$

با نمای $\beta=1.22(2)$ سازگار است.



شکل 1: وزن میانگین درخت پوشای کمینه W به‌عنوان تابعی از تعداد رأس‌ها N برای گراف کامل. خط افقی مقدار حدی به‌دست‌آمده به‌صورت تحلیلی را نشان می‌دهد (رابطه‌ی 2). منحنی پیوسته‌ی بالایی رابطه‌ی کوپر و همکاران [12] را نمایش می‌دهد. منحنی پیوسته‌ی پایینی برازش به یک رابطه‌ی توانی را نشان می‌دهد.



شکل 2: تابع‌های نرخ $\phi(W)$ برای گراف کامل با مقادیر مختلف تعداد رأس‌ها N. خط نشان‌دهنده‌ی نتیجه‌ی برازش داده‌ها برای $N=256$ به قانون توانی رابطه‌ی 8 است.

برای گراف کامل، ساختار گراف ثابت است، بنابراین این تحقق‌های نادر از درخت‌های پوشای کمینه باید ناشی از وزن‌های خاص یال‌ها باشد. در بررسی‌ها، ما به این نتیجه رسیدیم که اساساً کوچک‌ترین وزن‌های موجود در گراف در ساخت درخت پوشای کمینه مشارکت دارند. از سوی دیگر، هر گراف کامل یال‌های بسیار بیشتری دارد که بیشتر آن‌ها در درخت پوشا مشارکت نمی‌کنند.

توجه کنید که برای $N=512$ چنین بازه‌ی بزرگی برای مقادیر $W\in[0,9]$ تنها با استفاده از رویکرد انحراف بزرگ قابل دسترسی است. با نمونه‌برداری مستقیم، مثلاً با 10^6 نمونه، تنها می‌توان مقادیر را در حدود بازه‌ی $W\in[1,1.5]$ مشاهده و اندازه‌گیری کرد.

برای مجموعه‌ی ER همبند، رفتار می‌تواند غنی‌تر باشد، زیرا نه‌تنها وزن یال‌ها بلکه ساختار گراف نیز تغییر می‌کند. از آنجا که مجموعه‌ی ER همبند و تنک است، تعداد یال‌های موجود برای ساخت یک درخت پوشا بسیار کمتر و از مرتبه‌ی N است. بنابراین، دو برابر کردن اندازه‌ی گراف اساساً وزن درخت پوشا را نیز دو برابر می‌کند. این موضوع به‌خوبی در شبیه‌سازی‌های ما مشاهده شد.

برای بررسی توزیع‌های واقعی، تابع‌های نرخ $\phi(w)$ را در نظر می‌گیریم که در آن $w=W/(N-1)$ وزن درخت پوشا به‌ازای هر یال است. نتیجه برای $c=0.5$ در شکل 3 نشان داده شده است. تابع‌های نرخ تجربی برای اندازه‌های مختلف تقریباً بر روی یکدیگر منطبق می‌شوند، بنابراین می‌توان انتظار داشت که در حد گراف‌های بزرگ، همگرایی به یک تابع نرخ حدی رخ دهد و ویژگی انحراف بزرگ برقرار باشد.

همان‌طور که پیش‌تر اشاره شد، محدودیت به گراف‌های همبند بدین معناست که در اینجا برای $c=0.5$ اساساً گراف‌هایی با $N-1$ یال داریم، به‌گونه‌ای که تقریباً همه‌ی یال‌ها در درخت پوشا مشارکت می‌کنند. بنابراین، وزن درخت پوشا تقریباً به‌سادگی برابر با مجموع $N-1$ عدد تصادفی مستقل و یکنواخت در بازه‌ی $[0,1]$ است.

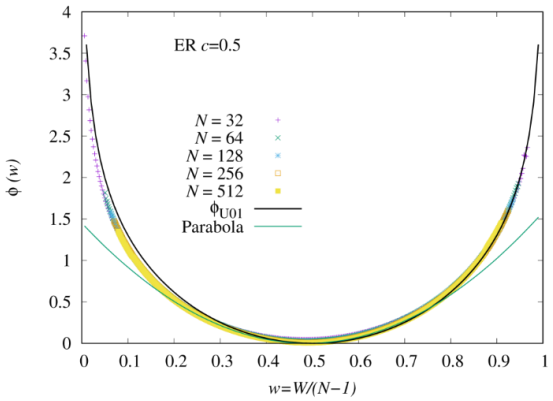
بر اساس قضیه‌ی حد مرکزی، انتظار داریم که بخش معمول، توزیع گاوسی داشته باشد. این موضوع به‌طور آشکار در شکل تابع نرخ قابل مشاهده است. در واقع، برازش به یک سهمی از نوع

$$\tilde{\phi}(w)=l(w-w_0)^2 \quad (9)$$

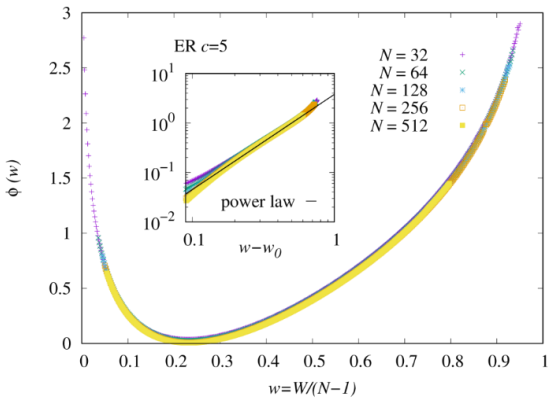
در بازه‌ی $w\in[0.3,0.7]$ برازش خوبی به‌دست می‌دهد.

برای مقایسه‌ی دم‌ها نیز می‌توان تابع نرخ میانگین $N-1$ عدد تصادفی مستقل و یکنواخت $U(0,1)$ را محاسبه کرد. با استفاده از قضیه‌ی گارتنر-الیس [16] می‌توان تابع نرخ را برای $U(0,1)$ به

شکل تبدیل لژاندر تابع $\lambda(k)=\ln((e^k-1)/k)$ نوشت. نتیجه این تبدیل را که ϕ_{U01} نامیده‌ایم، در شکل 4 نشان داده شده است. توافق بسیار خوبی با داده‌های عددی مشاهده می‌شود.



شکل 3: تابع‌های نرخ $\phi(W)$ برای گراف ER همبند با $c=0.5$ و مقادیر مختلف تعداد رأس‌ها N. خط سیاه تابع نرخ ϕ_{U01} برای میانگین $N-1$ عدد تصادفی مستقل و یکنواخت در بازه‌ی $[0,1]$ نشان می‌دهد. خط سبز نتیجه‌ی برازش داده‌ها برای $N=512$ در ناحیه‌ی با احتمال بالا به یک سهمی مطابق رابطه‌ی 9 را نمایش می‌دهد.



شکل 4: تابع‌های نرخ $\phi(W)$ برای گراف ER همبند با $c=5$ و مقادیر مختلف تعداد رأس‌ها N. در شکل داده‌ها با مقیاس log-log نیز نمایش داده شده‌اند. خط نشان‌دهنده‌ی نتیجه‌ی برازش داده‌ها برای $N=512$ به یک قانون توانی مطابق رابطه‌ی 8 است.

برای مقادیر بزرگ‌تر c، شکل توزیع تغییر می‌کند. در شکل 4، تابع‌های نرخ برای مقدار $c=5$ که بررسی کرده‌ایم نشان داده شده است. این تابع به‌وضوح نامتقارن است. برای مقادیر بزرگ‌تر N، وابستگی قابل توجه‌ی به اندازه‌ی محدود مشاهده نمی‌شود، که نشان می‌دهد همگرایی در حد $N\to\infty$ وجود دارد و بنابراین اصل انحراف بزرگ در اینجا نیز برقرار است. در ناحیه‌ی میانی $w\in[0.3,0.7]$، داده‌ها را به یک قانون توانی مطابق رابطه‌ی 8 برازش کرده‌ایم که منجر به نمای $\beta=1.92(2)$ شده است. این مقدار نزدیک به 2 است، اما تفاوت قابل توجه‌ی دارد. این موضوع با این واقعیت سازگار است که برای مقادیر کوچک c، شکل سهمی با $\beta=2$ به‌دست آمد، در حالی که برای گراف‌های کامل متناظر با $c\to\infty$، نمای بسیار کوچک‌تری مشاهده شد.

مرجع‌ها

[1] M. Sarikhani and A. K. Hartmann, "*Large deviation properties of minimum spanning trees for random graphs*." arXiv, 2025. https://arxiv.org/abs/2512.13418v1
[2] R. Albert and A.-L. Barabási, "Statistical mechanics of complex networks," *Reviews of Modern Physics* **74**(1) (2002): 47–97.
[3] M. E. J. Newman, "The Structure and Function of Complex Networks," *SIAM Review* **45**(2) (2003): 167–256.
[4] M. Newman, *Networks*, 2nd ed. (Oxford University Press, 2018).
[5] R. C. Prim, "Shortest Connection Networks And Some Generalizations," *Bell System Technical Journal* 36(6) (1957): 1389–1401.
[6] J. C. Gower and G. J. S. Ross, "Minimum Spanning Trees and Single Linkage Cluster Analysis," *Applied Statistics* **18**(1) (1969): 54.
[7] J. Wu et al., "Minimum spanning trees for community detection," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **392**(9) (2013): 2265–2277.
[8] T. I. Fenner and A. M. Frieze, "On the connectivity of randomm-orientable graphs and digraphs," *Combinatorica* **2**(4) (1982): 347–359.
[9] A. M. Frieze, "On the value of a random minimum spanning tree problem," *Discrete Applied Mathematics* **10**(1) (1985): 47–56.
[10] S. Janson, "The minimal spanning tree in a complete graph and a functional limit theorem for trees in a random graph," *Random Structures & Algorithms* **7**(4) (1995): 337–355.
[11] A. D. Flaxman, "The Lower Tail of the Random Minimum Spanning Tree," *The Electronic Journal of Combinatorics* **14**(1) (2007): N3.
[12] C. Cooper et al., "On the Length of a Random Minimum Spanning Tree," *Combinatorics, Probability and Computing* **25**(1) (2016): 89–107.
[13] J. A. Bucklew, *Introduction to Rare Event Simulation* (Springer New York, 2004).
[14] A. K. Hartmann, "Large-deviation properties of largest component for random graphs," *The European Physical Journal B* **84**(4) (2011): 627–634.
[15] F. den Hollander, *Large deviations* (American Mathematical Society, 2000).
[16] H. Touchette, "The large deviation approach to statistical mechanics," *Physics Reports* **478**(1–3) (2009): 1–69.
[17] T. H. Cormen, et al., *Introduction to algorithms*, 3. ed. (MIT Press, 2009).
[18] A. K. Hartmann, "Sampling rare events: Statistics of local sequence alignments," *Physical Review E* **65**(5) (2002): 056102.
[19] N. Metropolis et al., "Equation of State Calculations by Fast Computing Machines," *The Journal of Chemical Physics* **21**(6) (1953): 1087–1092.
[20] W. K. Hastings, "Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications," *Biometrika* **57**(1) (1970): 97–109.
[21] David P. Landau and Kurt Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, 4th ed. (Cambridge University Press, 2014).

یادگیری خودنظارتی متغیرهای ترمودینامیکی مدل آیزینگ با استفاده از خودکدگذار پوششی

مالکی ، مرتضی؛ قدرت، ملیحه
دانشکده فیزیک دانشگاه تربیت مدرس، تهران

چکیده

درک مکانیزم داخلی مدل‌های یادگیری عمیق در یادگیری خواص فیزیکی سیستم‌ها، یک چالش باز در هوش مصنوعی قابل تفسیر است. در این پژوهش، ما نشان می‌دهیم که یک خودکدگذار پوششی (Masked AutoEncoder) که روی داده‌های مدل آیزینگ آموزش دیده است، بدون هیچ‌گونه نظارتی مفاهیم کلیدی فیزیک آماری را می‌آموزد. با تحلیل فضای نهان مدل، نشان می‌دهیم که مدل توانسته است متغیرهای ترمودینامیکی را تفکیک کند: اولین مولفه اصلی رفتار پارامتر نظم (مغناطش M) و دومین مولفه اصلی رفتار انرژی سیستم (E) را کدگذاری کرده است و مولفه سوم با گرمای ویژه بیشترین همبستگی را دارد.

واژه های کلیدی: *متغیرهای ترمودینامیکی، خودکدگذار پوششی، مدل آیزینگ، تحلیل مولفه‌های اصلی، گذار فاز، یادگیری عمیق*

Self-supervised Learning of Thermodynamic Variables of the Ising Model Using Masked AutoEncoder

Maleki, Morteza; Ghodrat, Malihe

Department of Physics, Tarbiat Modeares University, Tehran,

Abstract

Understanding the internal mechanism of deep learning models in learning the physical properties of systems is an open challenge in interpretable artificial intelligence. In this work, we show that a masked AutoEncoder trained on Ising model data learns key concepts of statistical physics without any supervision. By analyzing the latent space of the model, we show that the model is able to separate thermodynamic variables: the first principal component (PC1) encodes the behavior of the order parameter (M) and the second principal component (PC2) encodes the behavior of the energy of the system (E), and the third component or specific heat is the most correlated.

***Keywords**: Thermodynamic variables, masked autoencoder, Ising model, principal component analysis, phase transition, deep learning*

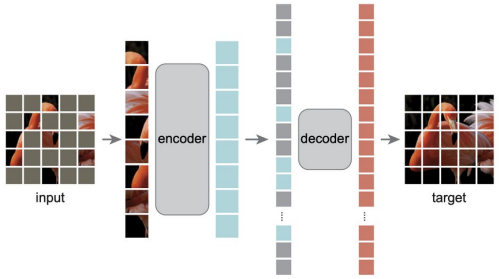
PACS No.

مقدمه

گذار فاز پدیده‌ای بنیادین در سیستم‌های بس ذره‌ای است که در آن تقارن سیستم به طور ناگهانی تغییر می‌کند. در فیزیک آماری سنتی، مطالعه این پدیده‌ها نیازمند تعریف هامیلتونی (مانند مدل آیزینگ [1]) یا استفاده از شبیه‌سازی‌های مونت‌کارلو برای استخراج کمیت‌هایی نظیر مغناطش M، انرژی E و ظرفیت گرمایی است. اما آیا می‌توان این کمیت‌ها را صرفاً با مشاهده پیکربندی‌های خام سیستم و بدون دانستن معادلات فیزیکی استخراج کرد؟ پیش‌تر، روش‌های یادگیری ماشین نظارتی و بدون نظارت برای شناسایی فازها پیشنهاد شده‌اند [2]، [3]،[4]،[5]،[6] و [7]، در سال‌های اخیر، مدل‌های یادگیری عمیق و به ویژه معماری‌های ترنسفورمر برای تصاویر[1] [10] توانایی خیره‌کننده‌ای در یادگیری الگوهای پیچیده تصویری از خود نشان داده‌اند.

1 Vision Transformers

مدل‌های خودکدگذارهای پوششی [2] [8] که با حذف بخش‌هایی از داده‌ی ورودی و تلاش برای بازسازی آن‌ها آموزش می‌بینند (شکل ۱)، مجبورند برای موفقیت در این وظیفه، ساختار آماری داده‌ها را درک کنند. پژوهش‌های اخیر نشان داده‌اند که این مدل‌ها قادر به ثبت همبستگی‌های فضایی **فراتر از مرتبه اول** آماری هستند [2]. در این مقاله، ما فضای ویژگی‌های یاد گرفته شده توسط MAE را تحلیل می‌کنیم. برخلاف روش‌های یادگیری نظارتی که مدل را مجبور به پیش‌بینی دما می‌کنند، مدل ما هیچ برچسبی دریافت نمی‌کند. ما نشان می‌دهیم که مدل برای کمینه‌سازی خطای بازسازی، ناچار است مانیفولدی را در فضای نهان بسازد که محورهای اصلی آن بر متغیرهای ترمودینامیکی منطبق هستند. ما تمرکز ویژه‌ای بر توانایی مدل در تفکیک انرژی (مرتبه اول) از نوسانات انرژی یا ظرفیت گرمایی (مرتبه دوم) خواهیم داشت



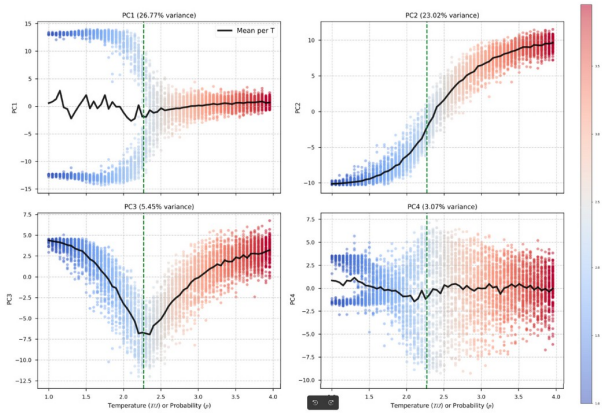
شکل۱: طرحواره‌ای از یک مدل خودکدنگار پوششی

مدل و روش شناسی

تولید داده و مدل: داده‌های آموزشی شامل پیکربندی‌های اسپینی مدل آیزینگ دوبعدی روی شبکه $L \times L$ است که در بازه دمایی گسترده‌ای تولید شده‌اند. مدل مورد استفاده یک MAE استاندارد است که ۷۵ درصد از پیکسل‌های ورودی را ماسک می‌کند و تنها با تابع هزینه بازسازی (MSE) آموزش می‌بیند [2].

خودکدگذار پوششی (MAE): یک مدل یادگیری عمیق خود-نظارتی است که با حل نوعی معما شبیه به پر کردن جاهای خالی، ساختار داده‌ها را یاد می‌گیرد. این مدل با حذف (ماسک کردن) تصادفی بخش بزرگی از ورودی (مثلاً ۷۵٪ از پیکسل‌های یک تصویر یا اسپین‌های یک شبکه)، شبکه عصبی را وادار می‌کند تا قسمت‌های حذف‌شده را تنها با تکیه بر بخش‌های قابل مشاهده بازسازی کند. برای موفقیت در این فرآیند، مدل نمی‌تواند صرفاً داده‌ها را حفظ کند، بلکه ناچار است ساختار آماری بنیادین و روابط درونی داده‌ها (مانند قوانین فیزیکی یا همبستگی‌های فضایی) را استخراج کرده و این دانش را در یک نمایش داخلی فشرده به نام فضای نهان[3] ذخیره کند.

تحلیل فضای نهان: برای تفسیر آنچه مدل آموخته است، ما بردارهای ویژگی خروجی یا میانگین را استخراج کردیم. با اعمال تحلیل مؤلفه‌های اصلی[4] (PCA)، جهت‌های اصلی واریانس در فضای ویژگی شناسایی شدند. سپس همبستگی پیرسون [5] میان این مؤلفه‌ها و کمیت‌های فیزیکی واقعی محاسبه شد تا معنای فیزیکی هر بعد آشکار شود.



شکل۲: مولفه‌های تحلیل مولفه‌های اصلی نسبت به دما (بدون میانگین گیری) برای سیستم سایز L=32

نتایج و تحلیل فیزیکی

2 Masked AutoEncoder

3 Latent Space

4 Principle Component Analysis

5 Pearson Correlation

تجزیه متغیرهای ترمودینامیکی در فضای نهان:
تحلیل PCA نشان می‌دهد که مدل MAE اطلاعات فیزیکی را به صورت ساختاریافته در ابعاد مختلف فضای ویژگی ذخیره کرده است (شکل۲). مولفه‌های اصلی به صورت کیفی بخش‌های زیر را نشان می‌دهند:

- **مولفه‌ی اصلی اول** (پارامتر نظم - شکست تقارن): این نمودار نشان می‌دهد که PC1 همبستگی خطی کاملی با قدرمطلق مغناطش دارد. نمودار شکستگی تقارن را در دمای زیر بحرانی نشان می‌دهد که مدل دو حالت پایه مغناطیسی (اسپین‌های بالا و پایین) را در شاخه‌های مجزا قرار داده است. در فاز نامنظم، این مقدار به صفر میل می‌کند که نشان‌دهنده درک مدل از تقارن Z_2 است.
- **مولفه‌ی اصلی دوم (انرژی درونی سیستم):** این مولفه رابطه خطی با انرژی درونی دارد. این ویژگی مدل MAE می‌باشد و در یک خودکدگذار استاندارد انرژی دیده نمی‌شود. اما در این مدل یکی از ملزومات بازسازی پیکربندی داده شده بهر گیری از برهمکنش‌ها و رابطه با دیگر اسپین‌ها می‌باشد.

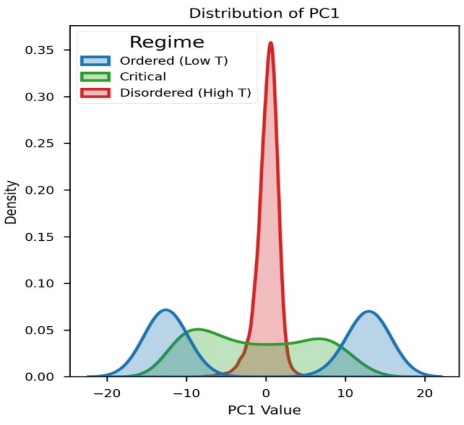
- **مولفه‌ی اصلی سوم (ظرفیت گرمایی ویژه):** یکی از یافته‌های کلیدی این پژوهش در این مولفه نهفته است. در فیزیک آماری، ظرفیت گرمایی (C_v) متناسب با واریانس (نوسانات) انرژی سیستم است:

$$C_v \propto \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \quad (1)$$

تحلیل ما نشان می‌دهد که در حالی که مولفه‌ی PC2 مقدار میانگین انرژی را کدگذاری می‌کند، PC3 نوسانات حول این میانگین را به عنوان یک مولفه‌ی مستقل حساب کرده است.
در شکل ۳ (نمودار توزیع‌ها)، مشاهده می‌شود که توزیع PC1 در فاز بحرانی (رنگ سبز) بسیار پهن‌تر از سایر فازهاست. این پهن‌شدگی دقیقاً متناظر با انتظار برای گذار از دو قله‌ای به تک قله‌ای در دمای بحرانی است.

تایید کمی همبستگی‌ها

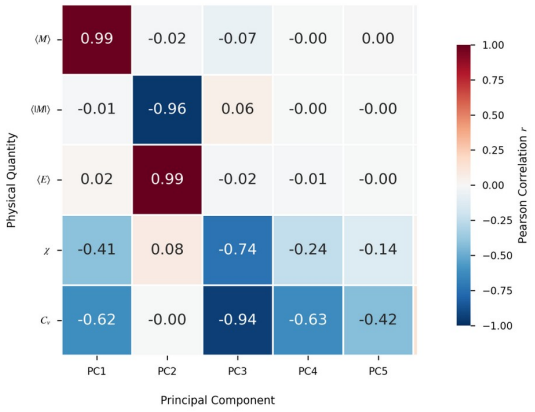
برای تایید کمی مشاهدات کیفی، ماتریس همبستگی پیرسون میان مؤلفه‌های اصلی استخراج شده از فضای نهان و کمیت‌های فیزیکی واقعی محاسبه شد (شکل ۴) . تحلیل‌ها حاکی از آن است که اولین مؤلفه اصلی (PC1) دارای همبستگی خطی تقریباً کامل ($r \approx 1.0$) با قدرمطلق مغناطش ($|M|$) است؛ این امر تأیید می‌کند که مدل توانسته است فازهای منظم و نامنظم را بر اساس شکست تقارن تفکیک کند. علاوه بر این، مؤلفه دوم (PC2) همبستگی بسیار بالایی با انرژی داخلی سیستم (E) نشان می‌دهد، بدین معنا که سطح انرژی هر پیکربندی به عنوان یک ویژگی مستقل و مجزا توسط شبکه عصبی استخراج شده است. همچنین نمودار همبستگی نشان می‌دهد که PC2 همبستگی بالایی با انرژی (۰/۹۹) و در عین حال همبستگی بالایی با قد مطلق مغناطش دارد (۰/۹۶-) که این تأیید می‌کند که مدل رابطه فیزیکی را به درستی آموخته است: حالت‌های منظم‌تر متناظر با پیکربندی‌های کم‌انرژی‌تر هستندو همین همبستگی را می‌توان میان کمیت‌های انرژی و قدر مطلق مغناطش واقعی مشاهده کرد.



شک
ل۳: چگالی تابع توزیع فضای نهان فراگرفته توسط MAE برای پیکربندی‌های مدل آیزنیگ (رنگ بندی بر حسب دماهای هر فاز)

شاید جالب‌توجه‌ترین نتیجه این تحلیل، مشاهده "ما یک همبستگی قوی (با قدرمطلق ۰/۹۴) میان PC3 و ظرفیت گرمایی C_v مشاهده کردیم. علامت منفی صرفاً ناشی از جهت‌گیری قراردادی بردارهای ویژه در روش PCA است و تأثیری بر تفسیر فیزیکی مبنی بر اینکه PC3 نوسانات حرارتی را کدگذاری می‌کند، ندارد. از آنجا که ظرفیت گرمایی متناسب با واریانس

انرژی است، این همبستگی بالا اثبات می‌کند که مدل فراتر از یادگیری مقادیر میانگین (مانند انرژی در PC2)، موفق به کدگذاری «نوسانات مرتبه دوم» سیستم نیز شده است. این نوسانات که در نقطه بحرانی واگرا می‌شوند، اکنون به عنوان یک ویژگی مستقل در فضای نهان مدل قابل شناسایی هستند که نشان‌دهنده عمق درک بدون نظارت مدل از قوانین آماری حاکم بر سیستم است.



شکل ۴: ماتریس همبستگی پیرسون میان مؤلفه‌های اصلی استخراج شده از فضای نهان و کمیت‌های فیزیکی واقعی محاسبه شد

بحث و نتیجه گیری

در این پژوهش ما نشان دادیم که مدل MAE برای بازسازی اسپین‌های پوشانده شده به قوانین فیزیکی همگرا می‌شود که منجر به یادگیری متغیرهای ترمودینامیکی می‌شود. برخلاف خودکدگذارهای معمولی که اغلب بر فشرده‌سازی واریانس تمرکز دارند[9]، مدل MAE متغیرهای حالت ترمودینامیکی — شامل پارامتر نظم، انرژی و نوسانات بحرانی— را در مؤلفه‌های اصلی متعامد یاد می‌گیرد. ظهور ظرفیت گرمایی در PC3 از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است، زیرا اثبات می‌کند که مدل فراتر از یادگیری مقادیر میانگین انرژی، موفق به درک **نوسانات مرتبه دوم** شده است. این قابلیت استخراج قوانین ماکروسکوپیک از مشاهدات میکروسکوپیک بدون هیچگونه نظارت، پیشنهاد می‌کند که مدل‌های مولد عمیق می‌توانند به عنوان موتورهای قدرتمند کشف فیزیک در سیستم‌های پیچیده‌ای که هامیلتونی یا پارامتر نظم آن‌ها ناشناخته است، عمل کنند.

در این پژوهش نشان دادیم که مدل MAE ویژگی‌های زیر را برای توانایی بازتولید اسپین‌های پوشانده شده در فضای نهان خود فرا می‌گیرد:

۱. پارامتر نظم (PC1) را برای تشخیص جهت‌گیری کلی دامنه‌ها،

۲. انرژی (PC2) را برای درک میزان بی‌نظمی موضعی،

۳. و ظرفیت گرمایی (PC3) را برای مدل‌سازی نوسانات و عدم قطعیت در نواحی بحرانی یاد گرفته است.

مرجع‌ها

[1] Ising, E. (1925). Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus, Zeitschrift für Physik, **31**(1), 253-258.
[2] Arai, S., Ohzeki, M., & Tanaka, K. (2018). Deep neural network detects quantum phase transition. *Journal of the Physical Society of Japan*, ***87***(3), 033001.
[3] Wetzel, S. J. (2017). Unsupervised learning of phase transitions: From principal component analysis to variational autoencoders. *arXiv preprint arXiv:1703.02435*.
[4] Ng, K. K., & Yang, M. F. (2023). Unsupervised learning of phase transitions via modified anomaly detection with autoencoders. *Physical Review B*, ***108***(21), 214428.
[5] Yevick, D. (2022). Variational autoencoder analysis of Ising model statistical distributions and phase transitions. *The European Physical Journal B*, ***95***(3), 56.
[6] Luchnikov, I. A., Ryzhov, A., Stas, P. J., Filippov, S. N., & Ouerdane, H. (2019). Variational autoencoder reconstruction of complex many-body physics. *Entropy*, ***21***(11), 1091.
[7] Kashiwa, K., Kikuchi, Y., & Tomiya, A. (2019). Phase transition encoded in neural network. *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, *2019*(8), 083A04.
[8] He, K., Chen, X., Xie, S., Li, Y., Dollár, P., \& Girshick, R. (2022) Masked Autoencoders Are Scalable Vision Learners.
[9] Bisulco, A., Balestriero, R., Ramesh, R., & Chaudhari, P. (2025). From linearity to non-linearity: How masked autoencoders capture spatial correlations. *arXiv preprint arXiv:2508.15404*.
[10] Dosovitskiy, A., Beyer, L., Kolesnikov, A., Weissenborn, D., Zhai, X., Unterthiner, & Houlsby, N. (2021). An Image is Worth 16x16 Words: Transformers for Image Recognition at Scale.

شواهد رفتار غیرمعمول در ناحیه غیرمغناطیسی مدل بلوم–کاپل در شبکه مربعی دو بعدی با بهره‌گیری از شبیه سازی مونته کارلو

کیخسروی، کیانوش[۱]

[۱] *دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شریف*

چکیده

مدل بلوم–کاپل یکی از ساده ترین مد ل های فیزیک آماری است که دو نوع گذار فاز متمایز را نشان می‌دهد. این ویژگی توجه بسیاری از پژوهشگران را به خود جلب کرده، در حالی که همزمان موجب نادیده گرفتن ناحیه غیرمغناطیسی این مدل شده است. در این مطالعه تلاش کرده‌ایم این خلأ را با بررسی ناحیه غیرمغناطیسی از طریق شبیه سازی مبتنی بر روش مونته کارلو حمام گرمایی جبران کنیم. نتایج ما شباهت قابل توجهی میان رفتار کمیت های فیزیکی در این ناحیه و رفتار آن ها در گذار فاز فرومغناطیسی به پارامغناطیسی نشان می‌دهد. علاوه بر این، با معرفی یک پارامتر نظم جدید، تغییرات نظم با افزایش دما آشکار می‌شوند.

واژه های کلیدی: *مدل بلوم–کاپل، مدل های مغناطیسی، شبیه سازی مونته کارلو، گذار فاز، فاز غیرمغناطیسی، پارامتر نظم*

Evidence for Unusual Behavior in the Non-Magnetic Region of the Two-Dimensional Blume–Capel Model on a Square Lattice Using Monte Carlo Simulation

Keikhosravi, Kianoush[1]

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

Abstract

The Blume-Capel model is one of the simplest models in statistical physics, exhibiting two distinct types of phase transitions. This feature has attracted considerable attention from researchers while simultaneously leading to the neglect of the non-magnetic region of the model. In this study, we attempt to address this gap by investigating the non-magnetic region through simulations based on the Monte Carlo heat-bath method. Our results reveal a strong similarity between the behavior of physical quantities in this region and their behavior during the ferromagnetic-to-paramagnetic phase transition. Furthermore, by introducing a new order parameter, Changes in order with increasing temperature become evident.

***Keywords**: Blume-Capel model, Magnetic models, Monte Carlo simulations, Phase transition, Non-magnetic phase, Order parameter*

PACS No. 64

مقدمه

مدل بلوم–کاپل یکی از ساده ترین مدل های سه حالته فیزیک آماری است که در آن دو نوع تغییر فاز مرتبه یک و پیوسته مشاهده می‌شود. هامیلتونی این مدل به شکل زیر است.

$$H = -J\sum_{<i,j>} s_i s_j - h\sum_i s_i + D\sum_i s_i^2 \qquad (۱)$$

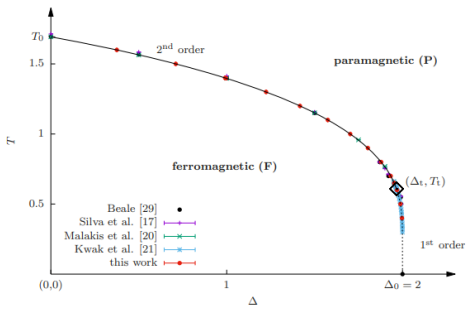
در این معادله J ثابت برهمکنش، h میدان مغناطیسی و D ناهمسانگردی تک‌محور است. همچنین جمع نخست روی همسایه های مرتبه نخست و هر اسپین می‌تواند یکی از سه مقدار ۰، ۱ و ۱– را اختیار کند.

این مدل نخست توسط بلوم برای توضیح تغییر فاز مغناطیسی مرتبه یک در اورانیوم دی اکسید معرفی شد[1] و سپس کاپل با روش تقریب میدان مولکولی راه‌حلی برای این مدل ارائه داد. [2] او نشان داد در این مدل دو حالت پایه فرومغناطیسی، که در آن نظم مغناطیسی مشاهده می‌شود و اسپین ها هم جهت می‌شوند، و حالت دیگری که در آن نظم مغناطیسی وجود ندارد و اسپین ها حالت خنثی را برمی‌گزینند وجود دارد. به این حالت پایه، حالت غیرمغناطیسی می‌گوییم. او همچنین توانست در دمای متناهی دو نوع گذر فاز مرتبه اول و پیوسته بین فاز فرومغناطیسی و فاز پارامغناطیسی که در آن اسپین ها آرایش تصادفی دارند، شناسایی کند. به نقطه ای در سیمای فاز که در آن نوع گذر فاز تغییر می‌کند، نقطه سه‌بحرانی می‌گویند. همچنین، با توجه به عدم تغییر مغناطش در دمای متناهی برای حالت غیرمغناطیسی، نتیجه گرفت هیچ گذر فازی در این ناحیه از سیمای فاز وجود ندارد.

در سال های پس از معرفی این مدل، پژوهش های متعددی هم با روش های محاسباتی[3-4] و هم نظری، چه تقریبی[5] و چه دقیق[6]، درباره این مدل انجام شد و نتایج مهمی درباره سیمای فاز این مدل به دست آمد. یکی از مهم ترین این نتایج تفاوت نماهای بحرانی نقطه سه‌بحرانی با نما های بحرانی گذار فاز پیوسته است که نشانگر تفاوت رده همگانی این نقطه با رده همگانی مدل آیزینگ است. با معرفی روش گروه بازبهنجارش، بخش عمده‌ای از مطالعات نظری پیرامون مدل بلوم–کاپل بر پایه این رویکرد شکل گرفت. از آنجا که توان اصلی این روش در تعیین موقعیت گذار فاز و محاسبه نماهای بحرانی نهفته است، تمرکز پژوهش‌ها بر شناسایی دقیق نقطه سه‌بحرانی و نما های بحرانی آن قرار داشت.[7]

پژوهش‌های یادشده موجب تثبیت ویژگی‌های بنیادی این مدل شدند. در دهه‌های اخیر، مطالعات مرتبط با این مدل عمدتاً بر پایه هامیلتونی‌های تغییر یافته[8-9]، شبکه‌های گوناگون[10] و روش‌های محاسباتی نوین صورت گرفته است.[11-12]

سیمای فاز این مدل در میدان مغناطیسی صفر و روی شبکه دو بعدی مربعی باشند به شکل زیر است.



شکل ۱: سیمای فاز مدل بلوم–کاپل دو بعدی روی شبکه مربعی با میدان مغناطیسی صفر. Δ همان ناهمسانگردی و ثابت برهمکنش واحد در نظر گرفته شده است.[13]

همان‌طور که پیش از این اشاره شد، تمرکز عمده پژوهش‌ها بر بررسی ناحیه فرومغناطیسی و گذار فازی مرتبط با آن بوده است، در حالی که ناحیه غیرمغناطیسی کمتر مورد توجه قرار گرفته. این امر را می‌توان ناشی از نقش مغناطش به عنوان پارامتر نظم، پیشینه تاریخی مدل (از جمله دیدگاه کاپل که نخستین حل نظری را ارائه کرده و وقوع گذار در این ناحیه را منتفی دانسته است)، و همچنین تمرکز بر نقطه سه‌بحرانی دانست.

در حالت پایه غیرمغناطیسی، همه اسپین ها، تحت تاثیر ثابت جفت شدگی ناهمسانگردی، مقدار خنثی را اختیار میکنند و در دمای بسیار بالا، به دلیل یکسان شدگی تقریبی همه پیکر بندی ها از نظر احتمال وقوع، آرایش تصادفی میگیرند. این از بین رفتن نظم شباهت بسیاری به گذار فاز فرومغناطیسی دارد و یکی از اصلی ترین مولفه های گذار فاز است. بدیهی است که مغناطش نمیتواند پارامتر نظم خوبی برای نمایندگی از این نظم باشد بنابراین با الهام گرفتن از دیگر مطالعات این مدل که شرایط دیگری را در نظر گرفته اند و پارامتر نظم متفاوتی داشته اند[14]، مجموع مجذور اسپین ها را به عنوان پارامتر نظم در نظر می‌گیریم.

$$q = \frac{1}{N}\sum_i s_i^2 \qquad (۲)$$

مولفه دیگری که اهمیت بسیاری در گذار فاز دارد، تغییر همزمان و ناگهانی کمیت های فیزیکی مهم، مانند انرژی و آنتروپی، در نقطه گذار فاز است.[15]

برای مشاهده رفتار این کمیات و پارامتر نظم جدید با افزایش دما از صفر، از شبیه سازی بهره می‌بریم. نخست روش محاسباتی

خود را توضیح می‌دهیم سپس نتایج این شبیه سازی را ارائه میکنیم و در آخر به جمع بندی میپردازیم.

روش محاسباتی

برای شبیه‌سازی از روش مونته‌کارلو حمام گرمایی در شبکه مربعی دوبعدی با طول ۵۰ و شرایط مرزی تناوبی استفاده شد. بروزرسانی‌ها به دو صورت تک‌اسپینی و خوشه‌ای انجام شدند.

برای بروزرسانی تک اسپینی، یک اسپین به صورت تصادفی انتخاب شده و دو مقدار دیگری که این اسپین میتواند اختیار کند به عنوان نامزد تغییر انتخاب می‌شوند، سپس مقدار تغییر انرژی در صورت جایگزینی مقدار فعلی اسپین با اسپین نامزد برای هر نامزد محاسبه می‌شود. سپس سه احتمال به صورت زیر محاسبه میشوند.

اگر احتمال تغییر نکردن مقدار اسپین را p_1، احتمال تغییر مقدار اسپین به نامزد اول را p_2 و احتمال تغییر مقدار اسپین به نامزد دوم را p_3 در نظر بگیریم روابط زیر را خواهیم داشت.

$$\frac{p_2}{p_1} = e^{\beta(E_1-E_2)} \qquad (۳)$$

$$\frac{p_3}{p_1} = e^{\beta(E_1-E_3)} \qquad (۴)$$

$$p_1 + p_2 + p_3 = 1 \qquad (۵)$$

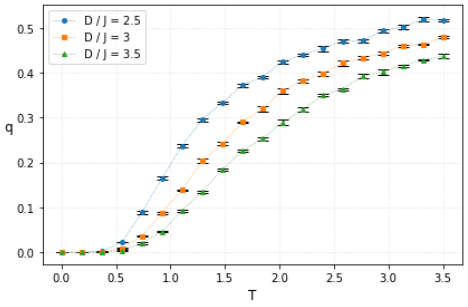
که در این معادلات β همان معکوس دما(ثابت بولتزمان واحد در نظر گرفته شده است)، E_1 انرژی پیکربندی اولیه، E_2 انرژی پیکربندی در صورت انتخاب نامزد اول و E_3 انرژی پیکربندی در صورت انتخاب نامزد دوم هستند. با حل این معادلات، که فرآیندی ساده است، سه احتمال به دست می‌آیند و با تولید یک عدد تصادفی بین این حالات انتخاب صورت میگیرد.

برای بروزرسانی گروهی، نخست یک اسپین به صورت تصادفی انتخاب میشود و مقدار آن به عنوان مقدار مرجع در نظر گرفته می‌شود و خوشه ای متشکل از این اسپین ایجاد می‌شود، سپس با نگاه به همسایه های آن اسپین، هر همسایه که مقداری برابر با مقدار مرجع داشته باشد، با این خوشه اضافه می‌شود. با تکرار این فرآیند و نگاه به همسایه های اعضای جدید خوشه، به خوشه ای میرسیم که در آن مجموعه ای از اسپین های همسایه با مقدار برابر قرار دارند و هیچ همسایه دیگری برای اعضای خوشه نمیتوان پیدا کرد که مقدار مرجع داشته باشد ولی عضو این خوشه نباشد. سپس مانند بروزرسانی تک اسپینی، دو نامزد دیگر برای مقادیر اسپین این خوشه در نظر گرفته می‌شود و تغییرات انرژی در صورت جایگزینی محاسبه شده و احتمال های عدم تغییر مقدار، تغییر مقدار به نامزد اول و تغییر مقدار به نامزد دوم به دست آمده و با تولید یک عدد تصادفی بین این حالات انتخاب صورت میگیرد.

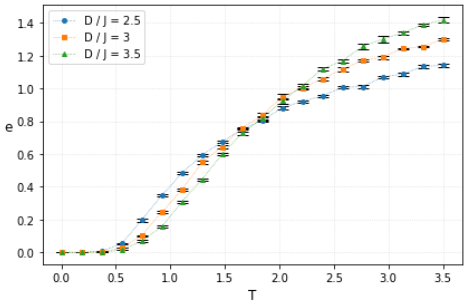
نحوه محاسبه مغناطش و پارامتر نظم جدید و انرژی، از روی هامیلتونی، واضح است. برای به دست آوردن سایر کمیت های فیزیکی از روابط معمول فیزیک آماری استفاده میکنیم.

نتایج

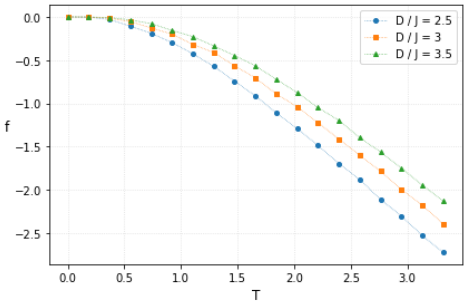
با انجام شبیه سازی برای شبکه دو بعدی مربعی با طول ۵۰ و میدان مغناطیسی صفر و ثابت بولتزمان واحد، برای دما های بالاتر از صفر به نمودار های زیر برای کمیت های فیزیکی می‌رسیم.



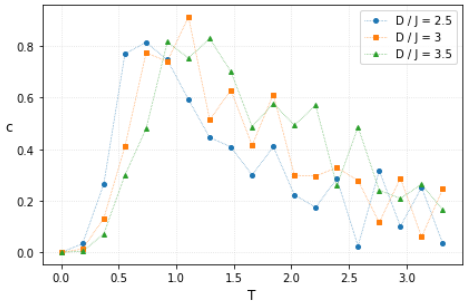
شکل۲: نمودار پارامتر نظم جدید بر حسب دما برای نسبت های متفاوت ناهمسانگردی به ثابت برهمکنش در ناحیه غیر مغناطیسی



شکل۳: نمودار انرژی به ازای هر اسپین بر حسب دما برای نسبت های متفاوت ناهمسانگردی به ثابت برهمکنش در ناحیه غیر مغناطیسی



شکل ٤: نمودار انرژی آزاد به ازای هر اسپین بر حسب دما برای نسبت های متفاوت ناهمسانگردی به ثابت برهمکنش در ناحیه غیر مغناطیسی



شکل ٥: ظرفیت گرمایی ویژه بر حسب دما برای نسبت های متفاوت ناهمسانگردی به ثابت برهمکنش در ناحیه غیر مغناطیسی

جمع بندی

در این پژوهش تاریخچه‌ی مدل بلوم–کاپل و ویژگی‌های اصلی آن مرور شد و نشان داده شد که در سیمای فاز شبکه‌ی مربعی دوبعدی، دو حالت پایه‌ی فرومغناطیسی و غیرمغناطیسی و دو نوع گذار فاز در ناحیه‌ی فرومغناطیسی وجود دارند. بررسی رفتار حالت غیرمغناطیسی با تعریف پارامتر نظم جدید (مجموع مجذور اسپین‌ها) و شبیه‌سازی مبتنی بر روش مونته‌کارلو حمام گرمایی انجام شد. نتایج نشان دادند که کمیت‌های ترمودینامیکی در این فاز وابستگی دمایی مشابهی با گذار فرومغناطیسی–پارامغناطیسی دارند و این موضوع احتمال وجود گذار فاز در ناحیه‌ی غیرمغناطیسی را مطرح می‌کند. هرچند اثرات اندازه‌ی محدود می‌توانند چنین رفتاری ایجاد کنند، شباهت سیستماتیک تغییرات مشاهده‌شده و گذار فاز فرومغناطیسی، انگیزه‌ای برای مطالعات دقیق‌تر فراهم می‌سازد. در نهایت، پیشنهاد می‌شود بررسی‌های آینده با تمرکز بر رفتار مقیاسی و تعیین نقاط گذار و نماهای بحرانی، وجود یا عدم وجود گذار در این ناحیه را به‌طور قطعی روشن کنند.

سپاسگزاری

از جناب آقای دکتر شاهین روحانی به‌خاطر راهنمایی‌ها و پشتیبانی‌های ارزشمند و بی دریغشان سپاسگزارم. همچنین از کمک‌ها و پیشنهادهای آقایان علی شاهین و مجید طباخیان قدردانی می‌نمایم.

مرجع‌ها

[1] Blume, M. (1966). Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO_2. *Physical Review*, **141**(2), 517.
[2] H.W. Capel, On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting, *Physica*, **32**(5), 966, https://doi.org/10.1016/0031-8914(66)90027-9.
[3] Arora, B. L., and D. P. Landau. 1973. "Monte Carlo Studies of Tricritical Phenomena." *AIP Conference Proceedings* **10**: 870. https://doi.org/10.1063/1.2947039.
[4] Landau, D. P., & Swendsen, R. H. (1981). Tricritical universality in two dimensions. *Physical Review Letters*, **46**(22), 1437–1440. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.46.1437
[5] D. M. Saul, M. Wortis and D. Stauffer. "Tricritical Behavior of the Blume-Capel Model." *Physical Review B* **9**, no. 11 (June 1974): 4964-4980. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.9.4964.
[6] Burkhardt, Theodore W. 1976. "Application of Kadanoff's Lower-Bound Renormalization Transformation to the Blume-Capel Model." *Physical Review B* **14** (3): 1196–1201.
[7] Beale, P. D. 1986. "Finite-Size Scaling Study of the Two-Dimensional Blume-Capel Model." *Physical Review B* **33** (3): 1717–1720. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.33.1717.
[8] Gulpinar, G., Vatansever, E., & Agartioglu, M. (2012). Effective-field theory with the differential operator technique for a kinetic Blume–Capel model with random diluted single-ion anisotropy. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **391**(13), 3574.
[9] Ertaş, M., & Keskin, M. (2014). Dynamic phase diagrams of the Blume–Capel model in an oscillating field by the path probability method. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **411**, 42–52. https://doi.org/10.1016/j.physa.2014.06.001
[10] Malakis, A., Berker, A. N., Hadjiagapiou, I. A., & Fytas, N. G. (2009). Strong violation of critical phenomena universality: Wang-Landau study of the two-dimensional Blume-Capel model under bond randomness. *Physical Review E*, **79**(1), 011125. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.79.011125
[11] Silva, C. J., Caparica, A. A., & Plascak, J. A. (2006). Wang-Landau Monte Carlo simulation of the Blume-Capel model. *Physical Review E*, **73**(3), 036702. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.73.036702
[12] Du, A., Yü, Y. Q., & Liu, H. J. (2003). Expanded Bethe–Peierls approximation for the Blume–Capel model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **320**, 387.
[13] Zierenberg, J., Fytas, N.G., Weigel, M. *et al.* Scaling and universality in the phase diagram of the 2D Blume-Capel model. *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **226**, 789–804 (2017). https://doi.org/10.1140/epjst/e2016-60337-x
[14] Kaufman, Miron, and Michael Kanner. 1990. "Random-field Blume-Capel Model: Mean-field Theory." *Physical Review B* **42** (4): 2378–82. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.42.2378
[15] Nishimori, Hidetoshi, and Gerardo Ortiz. Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena. *Oxford Graduate Texts. Oxford: Oxford University Press*, 2011.

اثر حالت های سنگین در شبکه های اجتماعی متوازن بر اساس نظریه هایدر

قریب بلوک ، علی [۱]؛اصانلو،فاطمه[۱] ؛کلاه چی ، محمد رضا[۱]
[۱]دانشکده فیزیک،دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

چکیده

در چارچوب نظریهٔ تعادل هایدر، حالت‌های تعادلی شبکه‌های اجتماعی با انرژی حداقل معمولاً به دو دستهٔ کلاسیک تقسیم می‌شوند: شبکه‌های کاملاً دوستانه (هم‌علامت) و شبکه‌های دوقطبی، که در آن‌ها گره‌ها به دو گروه تقسیم شده‌اند، روابط درون‌گروهی دوستانه و روابط بین‌گروهی دشمنی‌آمیز هستند. علاوه بر این، ساختارهای سه‌دسته‌ای مجزا نیز وجود دارند که هرچند از نظر انرژی کمینهٔ سراسری نیستند، ولی به‌عنوان حداقل‌های موضعی در فضای انرژی ظاهر می‌شوند. در این مقاله، ابتدا شرایط لازم و کافی برای پایداری چنین ساختارهای سه‌دسته‌ای مجزا را بررسی می‌کنیم. سپس، فراتر از معیار سنتی انرژی، یک پارامتر تمایز مبتنی بر اختلاف موجود در این ساختارها معرفی می‌شود.ما نشان می‌دهیم که این پارامتر، حتی در مواردی که تفاوت‌های انرژی بین ساختارهای نظری و داده‌های واقعی بسیار جزئی و غیرقابل تشخیص باشند، می‌تواند معیاری حساس و کارآمد برای تمایز و ارزیابی حداقل‌های موضعی سه‌دسته‌ای باشد. این رویکرد، درک عمیق‌تری از ساختارهای پیچیده در شبکه‌های اجتماعی و سیستم‌های مبتنی بر تعادل را ممکن می‌سازد.

واژه های کلیدی: نظریه هایدر، حداقل انرژی، حالت سنگین، پارامتر تمایز

Effect of jammed states in balanced social networks based on Heider's Theory

Gharib Bolok , Ali[1];Osanloo,Fatemeh[1];Kolahchi, Mohammad Reza[1]
[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences, Zanjan

Abstract

In Heider's balance theory, balanced social networks only occur with two structurally different states: fully friendly (all-positive) networks and bipolar networks, where nodes split into two groups with friendly intra-group and antagonistic inter-group links. Additionally, three disjoint clique configurations exist; though not with global energy minima, they appear as local minima in the energy landscape. This paper first establishes the necessary and sufficient conditions for the stability of such three-clique structures. Then, moving beyond traditional energy-based criteria, we introduce a difference parameter derived from the size of the cliques. We show that this parameter effectively discriminates three disjoint clique local minima even when energy difference between theoretical model and empirical data is too small for energy to reveal it.

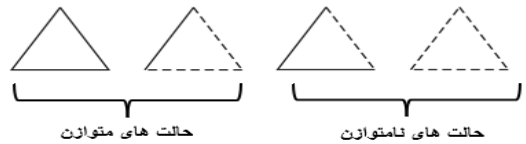
***Keywords**: Heider's theory, energy minimum, jammed state, difference parameter*

مقدمه

در نظریه هایدر[۱]، روابط بین افراد بر اساس دو نوع ارتباط بنیادین دوستی و دشمنی مدل‌سازی می‌شوند. ساختار کلی شبکه‌های اجتماعی در این چارچوب، بر پایه روابط سه گانه افراد با یکدیگر بنا شده است. بر اساس این نظریه، یک شبکه که شامل سه فرد است می تواند روابط زیر را با یکدیگر برقرار کند:

- دوستِ دوستِ من، دوستِ من است.
- دوستِ دشمنِ من، دشمنِ من است.
- دشمنِ دوستِ من، دشمنِ من است.
- دشمنِ دشمنِ من، دوستِ من است.

در سال ۱۹۵۶، کارترایت و هراری[۲] با الهام‌گیری از نظریهٔ تعادل اجتماعی که قبلاً توسط فریتز هایدر[۱] مطرح شده بود، ساختاری ریاضی برای این نظریه تدوین کردند و آن را در چارچوب نظریهٔ گراف‌ها قرار دادند. آن‌ها روابط بین افراد را به‌صورت یک گراف علامت‌دار مدل‌سازی نمودند: روابط دوستی را با یال‌های مثبت (یا در ماتریس مجاورت، درایه‌های مثبت) و روابط دشمنی را با یال‌های منفی (یا در ماتریس مجاورت، درایه‌های منفی) نشان دادند. در این مدل، یال مثبت معمولاً به‌صورت خط پیوسته و یال منفی به‌صورت خطچین تصویر می‌شوند. این رویکرد پایه‌های ریاضی نظریهٔ گراف‌های علامت‌دار را فراهم آورد و امکان تحلیل ساختارهای اجتماعی پیچیده را از دیدگاه ریاضیات گسسته میسر ساخت.بر اساس این تعاریف ریاضی می توان دو نوع حالت را که شامل مثلث های متوازن و نامتوازن است در نظر گرفت که در شکل۱ به نمایش گذاشته شده است.



شکل۱: پیکربندی‌های متوازن و نامتوازن اجتماعی یک مثلث. خط نشان‌دهنده روابط دوستانه (+) و خطچین نشان‌دهنده روابط دشمن‌وار (−) هستند.

مارول و همکاران[۳] در سال ۲۰۰۹ توانستند مفهوم «انرژی» را برای گراف‌های علامت‌دار تعریف کنند. این تعریف مستقیماً از ساختار روابط سه‌گانهٔ بین افراد به‌ویژه وجود مثلث‌های متوازن و نامتوازن در شبکه ناشی می‌شود. در این رویکرد، هر مثلث متوازن (یعنی مثلثی که حاصلضرب علامت‌های یال‌های آن مثبت باشد) به‌عنوان حالتی پایدار با انرژی ۱- در نظر گرفته می‌شود، درحالی‌که مثلث‌های نامتوازن (با حاصلضرب منفی) نشان‌دهندهٔ ناپایداری با انرژی ۱+ هستند که در شکل۱ انواع آن ها رسم شده است. انرژی گراف علامت‌دار بر اساس روابط سه گانه بین افراد تعریف شده و از رابطهٔ (۱) پیروی می‌کند.

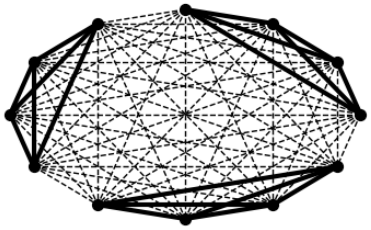
$$E = -\frac{1}{\binom{N}{3}}\sum_{i,j,k} e_{ij}e_{jk}e_{ki} \qquad (1)$$

در رابطه (۱) e_{ij}، رابطه دوستی (+) یا دشمنی (-) بین گره های i و j است.همچنین N تعداد کل گره های موجود در شبکه است.

رابطه (۱) برای گراف های علامتدار زمانی کمینه های انرژی را دارد که تعداد مثلث های متوازن بیشتر از مثلث های نامتوازن باشد.به طور کلی در شبکه دو نوع کمینه انرژی را می توان مشاهده کرد که ما در ادامه ابتدا تعریفی از این نوع کمینه ها خواهیم گفت و پس از آن به بیان مدلی برای رشد کمینه های انرژی خواهیم پرداخت و در آخر اثر کمینه های موضعی یا به اصطلاح حالت های سنگین را در داده های واقعی مشاهده خواهیم کرد.

در گراف‌های علامت‌دار، کمینه‌های انرژی با انرژی ۱− به دو دستهٔ متمایز تقسیم می‌شوند: حالت «دوقطبی» و حالت «بهشت»[۲]. در حالت دوقطبی، گره‌ها به دو گروه تقسیم می‌شوند به‌گونه‌ای که تمام روابط درون‌گروهی مثبت (دوستی) و تمام روابط بین‌گروهی منفی (دشمنی) هستند؛ درحالی‌که در حالت بهشت، تمام یال‌ها مثبت است.این حالت ها فقط شامل مثلث های متوازن هستند و هیچ مثلث نامتوازنی در این نوع از گراف ها وجود ندارد.

در گراف‌های علامت‌دار، حالت‌های گیرکرده به‌عنوان حداقل‌های موضعی انرژی تعریف می‌شوند [٤]. این حالت‌ها به‌دلیل داشتن یک شرط ساختاری اضافی، نقشی ویژه در پویایی شبکه ایفا می‌کنند؛ بنابراین، آن‌ها را «حالت‌های سنگین» می‌نامیم. برخلاف حالت‌های متوازن که تنها شامل مثلث‌های متوازن هستند، در حالت‌های سنگین ترکیبی از مثلث‌های متوازن و نامتوازن دیده می‌شود. در چنین حالت‌هایی، هرگونه تغییر در علامت یک یال چه از مثبت به منفی و چه بالعکس منجر به افزایش انرژی کل سیستم می‌شود. در عین حال، تعداد مثلث‌های متوازن در این حالت‌ها بیشتر از مثلث‌های نامتوازن است. چنین حالت‌هایی تنها برای شبکه‌هایی با تعداد گره‌های $N=9$ و $N\geq 11$ ظاهر می‌شوند[٤]. حالت های سنگین پیکربندی خاصی از گراف را می توانند شامل شوند مثلا با سه دسته مجزا و دوازده عضو که در شکل ۲می بینیم .



شکل۲: این پیکربندی حالت سنگین خاصی را با سه گروه مجزا و با ۱۲ راس یا عضو نشان می دهد.

مدل رشد گراف

در مقاله‌ی قریب و همکاران (۲۰۲۵)[٥]، یک مدل رشدی برای تولید حالت‌های سنگین در گراف‌های علامت‌دار ارائه شده است که امکان گسترش یک حالت سنگین با اندازه N به یک حالت سنگین با اندازه N+۱ را فراهم می‌کند. در این مدل، گره جدیدی که به شبکه افزوده می‌شود، باید الگوی اتصالات خود را از یکی از گره‌های موجود در شبکهٔ اولیه به ارث ببرد. این روش تضمین می‌کند که پس از الحاق گره جدید، کل سیستم همچنان در یک کمینه موضعی انرژی یعنی در یک حالت سنگین باقی بماند. همچنین اثبات شده است که اگر حالت سنگین فقط از گروه های مجزا تشکیل شده باشد تعداد این گروه ها لزوما سه است [٥].

حال در این مقاله پارامتری را تعریف خواهیم کرد تا به مقایسه داده های واقعی و حالت های سنگین با گروه های مجزا بپردازد. تمایز را به عنوان اینکه چقدر اختلاف بین حالت های سنگین و داده های واقعی وجود دارد در نظر میگیریم.ما در اینجا سه گروه جدا از هم داریم که از کوچک به بزرگ مرتب شده اند و برای حالت های تعریف شده از مدل[٥] m_1, m_2, m_3 و برای حالت های تعریف شده از داده های واقعی m'_1, m'_2, m'_3 است.در اینجا اندازه شبکه برای مدل و داده های واقعی یکسان است و از رابطه زیر پیروی می کند.

$$M = m_۱ + m_۲ + m_۳ = m'_۱ + m'_۲ + m'_۳ \qquad (2)$$

حال نسبت اختلاف بین این دو حالت را به صورت زیر محاسبه خواهیم کرد

$$P_۱ = |m'_۱ - m_۱|, P_۲ = |m'_۲ - m_۲|, P_۳ = |m'_۳ - m_۳| \qquad (3)$$

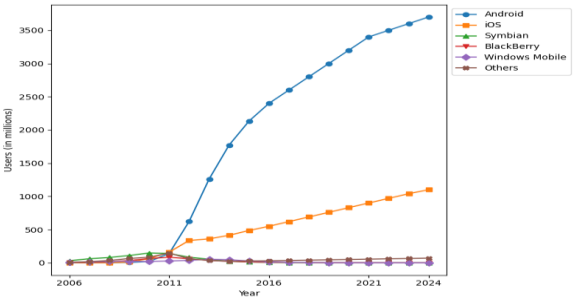
$$P = \frac{P_۱ + P_۲ + P_۳}{M} \qquad (4)$$

این نسبت که به عدد یک بهنجار شده است به این معناست که هرچه مقدار آن بیشتر باشد، نشان‌دهندهٔ فاصلهٔ بیشتر بین

داده‌های واقعی و ساختارهای پیش‌بینی‌شده توسط مدل است و بالعکس. این پارامتر تمایز به‌ویژه در مواردی کاربردی است که در نمودار انرژی محاسبه‌شده از رابطهٔ (۱) اختلاف انرژی بین دو ساختار سه‌دسته‌ای (یکی مربوط به مدل و دیگری به داده‌های واقعی) بسیار جزئی باشد، به‌طوری‌که به‌ظاهر تفاوت معناداری بین آن‌ها دیده نشود. در چنین شرایطی، محاسبهٔ این پارمتر تمایز امکان تشخیص یک تفاوت ساختاری بارز را فراهم می‌آورد که در حالتی که بررسی صرفاً برحسب انرژی باشد نادیده گرفته می‌شود.
در بخش نتایج از این پارامتر تمایز اختلاف میان حالت های سنگین مختلف برای مدل و داده های واقعی استفاده خواهیم کرد.

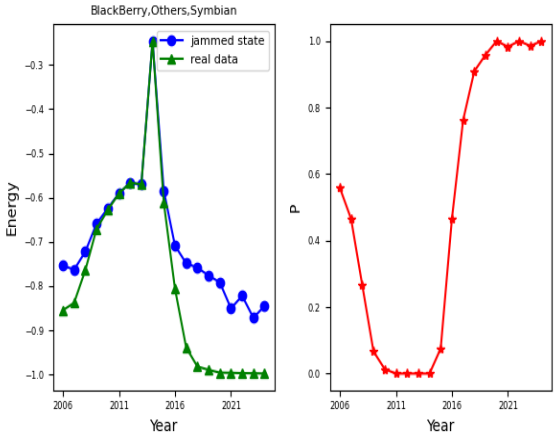
نتایج

در بخش پیشین، موفق شدیم یک پارامتر تمایز برای تحلیل حالت‌های سنگین سه‌تایی مجزا معرفی کنیم. در ادامه، داده‌های واقعی تعداد کاربران سیستم‌عامل‌های مختلف در جهان آورده شده است که روند تغییرات آن‌ها بر اساس سال‌های متوالی نمایش داده شده است [٦].

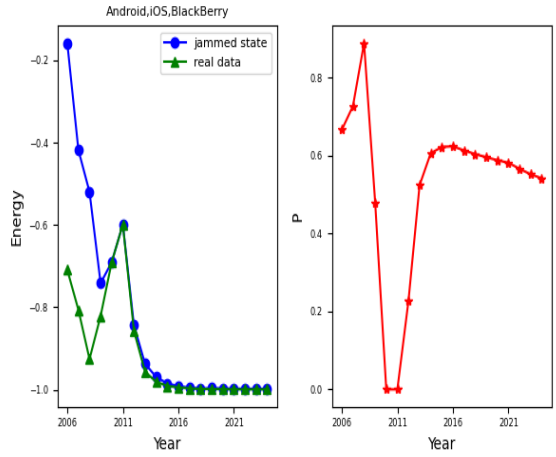


شکل۳: تعداد کاربران سیستم‌عامل‌های موبایل بر اساس سال [٦].

در این مقاله، به تحلیل داده‌های واقعی مربوط به سیستم‌عامل‌های موبایل پرداخته‌ایم. سیستم‌عامل‌های موبایل به‌عنوان هستهٔ نرم‌افزاری دستگاه‌های همراه، نقشی محوری در شکل‌دهی به تجربهٔ کاربری ایفا می‌کنند. همان‌گونه که در نمودار مشاهده می‌شود، از سال ۲۰۱۰ به این سو، کاربران جهانی به‌طور گسترده‌ای به دو سیستم‌عامل iOS و Android روی آورده‌اند. این جابه‌جایی عمدتاً ناشی از انعطاف‌پذیری بالاتر، تنوع گستردهٔ امکانات، و اکوسیستم غنی‌تری است که این دو پلتفرم در مقایسه با سایر سیستم‌عامل‌های موبایل فراهم می‌کنند.همچنین، به‌منظور تطابق بیشتر معیارهای مورد استفاده با مدل مرجع مدنظر[٥] ، شبکهٔ مورد بررسی در این پژوهش نیز ساختاری سه‌گانه دارد و سیستم‌عامل‌های موبایل را در سه دستهٔ مجزا در نظر می‌گیریم.علت بررسی سه دسته مجزا به جای دو دسته مجزا این است که حالت های سنگین در سه دسته مجزا پدیدار می شوند.درادامه،برای سیستم عامل های مورد نظر، نمودار انرژی را هم برای داده‌های واقعی [٦] و هم برای پیش‌بینی‌های مدل [٥] با استفاده از رابطهٔ (۱) محاسبه و رسم کرده‌ایم. همزمان، نمودار پارامتر تمایز که بر اساس رابطهٔ (٤) تعریف شده است را نیز در کنار آن ارائه داده ایم تا امکان مقایسهٔ جامع‌تری بین ساختارهای واقعی و مدل فراهم شود.ما این کار را برای ۲ گروه سه تایی از سیستم عامل ها به صورت تصادفی انجام دادیم.



شکل٤: در سمت چپ نمودار انرژی سه سیستم عامل بر حسب سال.در سمت راست محاسبه پارمتر تمایز بر حسب سال.



شکل٥: در سمت چپ نمودار انرژی سه سیستم عامل بر حسب سال.در سمت راست محاسبه پارامتر تمایز بر حسب سال.

همان‌طور که در شکل‌های ۴ و ۵ مشاهده می‌شود، در این مرحله ابتدا موفق شدیم نمودار انرژی را برای سه سیستم عامل انتخابی رسم کنیم. بررسی دقیق این نمودارها نشان می‌دهد که اختلاف انرژی بین ساختارهای پیش‌بینی‌شده توسط مدل و داده‌های واقعی بسیار جزئی است و تنها در مرتبهٔ صدم قرار دارد. این موضوع ممکن است در نگاه اول چنین تصوری ایجاد کند که مدل به‌خوبی داده‌های واقعی را بازتولید کرده است. با این حال، همان‌گونه که در نمودار سمت راست هر شکل (مربوط به پارامتر تمایز محاسبه‌شده از رابطهٔ٤) آشکار

می‌شود، دو مجموعهٔ داده یکی مبتنی بر مدل و دیگری بر پایهٔ مشاهدات واقعی اختلافی قابل توجه دارند. این یافته بسیار چشمگیر است، زیرا چنین تفاوت معناداری در تحلیل صرفاً مبتنی بر انرژی به‌طور کامل پنهان می‌ماند و تنها با به‌کارگیری این پارامتر تمایز، امکان تشخیص آن فراهم می‌شود. علاوه بر این، این پارامتر تمایز می‌تواند به عنوان معیاری کاربردی برای شرکت‌های تولیدکنندهٔ دستگاه‌های تلفن همراه محسوب شود تا بتوانند با اتکا به آن، مناسب‌ترین سیستم عامل را برای محصولات خود انتخاب کنند. برای مثال، همان‌گونه که در شکل‌های ۴ و ۵ مشاهده می‌شود، میان مقادیر این پارامتر تمایز در دو سناریوی مورد بررسی اختلافی قابل توجه—در حدود ۴۰ درصد—وجود دارد. بنابراین، شرکتی که قصد ورود به بازار گوشی‌های هوشمند را دارد، می‌تواند بر اساس این یافته‌ها، انتخاب خود را میان سیستم‌عامل‌های رایج مانند Android، iOS یا BlackBerry هدایت کند و تصمیمی آگاهانه‌تر بر اساس عملکرد نسبی هر پلتفرم بگیرد.

نتیجه گیری

در این مقاله، با استفاده از شبکه‌های ساخته‌شده بر پایهٔ مثلث‌های هایدر، به بررسی سیستماتیک حالت‌های سنگین پرداختیم؛ به‌ویژه آن دسته از حالت‌ها که شامل سه دستهٔ مجزا هستند. همان‌گونه که پیش‌تر نیز نشان داده شده، وجود چنین حالت‌های سنگین فقط برای سه دسته مجزا میسر است و لذا تمرکز ما بر روی ساختارهای سه‌دسته‌ای به‌عنوان تنها ساختارهای حالت سنگین معنا دارد.

در این راستا، یک پارامتر تمایز معرفی کردیم که قادر است تفاوت بین ساختارهای سنگین پیش‌بینی‌شده توسط مدل و آن‌هایی که از داده‌های واقعی استخراج می‌شوند را به‌صورت کمّی و قابل‌تفسیر بیان کند. برخلاف معیارهای سنتی مبتنی بر انرژی که در برخی موارد به‌ویژه زمانی که اختلاف انرژی در مرتبه بسیار کوچکی قرار دارد و ناتوان در تشخیص تفاوت‌های ساختاری است، این پارامتر تمایز امکان شناسایی تفاوت بین داده واقعی و مدل را فراهم می‌آورد.

نتایج به‌دست‌آمده از اعمال این پارامتر بر داده‌های واقعی سیستم عامل های موبایل نشان می‌دهد که حتی در مواردی که انرژی مدل و داده‌های واقعی تقریباً منطبق به‌نظر می‌رسند، همچنان می‌توان تفاوت‌های معناداری با استفاده از این معیار جدید شناسایی کرد. این امر گواهی بر توان بالای این پارامتر در تشخیص جزئیات پنهان در ساختارهای داده‌محور است و آن را به یک ابزار مکملِ ارزشمند در کنار تحلیل‌های انرژی‌محور تبدیل می‌کند.

سپاسگزاری

این پژوهش با حمایت دانشکدهٔ فیزیک دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایهٔ زنجان انجام شده و برای ارائه در *سیزدهمین کنفرانس فیزیک آماری ماده چگال نرم و سیستم های پیچیده*، که در تاریخ ۲۰ بهمن ۱۴۰۴ در *دانشگاه صنعتی شریف* برگزار خواهد شد، آماده گردیده است.

مرجع‌ها

[۱] F. Heider, “Attitudes and cognitive organization”, *The Journal of Psychology* ۲۱ (۱۹٤٦) ۱۰۷–۱۱۲.

[۲] D. Cartwright and F. Harary, “Structural balance: a generalization of heider’s theory.”, *Psychological Review* ٦۳ (۱۹٥٦) ۲۷۷.

[۳] S. A. Marvel, S. H. Strogatz and J. M. Kleinberg, “Energy landscape of social balance”, *Physical Review Letters* ۱۰۳ (۲۰۰۹) ۱۹۸۷۰۱.

[٤] T. Antal, P. L. Krapivsky and S. Redner, “Dynamics of social balance on networks”, *Physical Review EStatistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics* ۷۲ (۲۰۰٥) ۰۳٦۱۲۱.

[٥] Gharib, A., Janalizadeh, A., Jafari, Z., Osanloo, F., & Kolahchi, M. R. (۲۰۲٥). Structure of jammed states toward social balance. *International Journal of Modern Physics C*, ۲٦٥۰۰۱۷.

[٦] Yahoo Finance. (۲۰۲٥). *Historical data*. Retrieved November ۸, ۲۰۲٥, from https://finance.yahoo.com/

تجزیهٔ فضای مارکف فرایند موران در گراف حلقه

حسنی، مریم؛ آقابابائی سامانی، کیوان

دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

اندازهٔ فضای مارکف فرایند موران در شبکه‌های پیچیده رابطه‌ای نمایی با اندازهٔ شبکه دارد. به‌همین دلیل کاهش ابعاد یا تجزیهٔ فضای مارکف می‌تواند تأثیر قابل‌ملاحظه‌ای در کاهش زمان محاسبات کمیت‌هایی مثل احتمال تثبیت و زمان تثبیت داشته باشد. در این مقاله در ادامهٔ جست‌وجو برای یافتن روش‌هایی برای کاهش ابعاد یا تجزیهٔ فضای مارکف در شبکه‌های دوبخشی، دینامیک موران روی گراف حلقه را مطالعه کرده‌ایم و تفاوت ساختار فضای مارکف آن را با فضای مارکف گراف خط بررسی کرده‌ایم. در گراف حلقه امکان کاهش ابعاد فضای مارکف به‌اندازهٔ گراف خط وجود ندارد ولی تجزیهٔ این فضا به زیرفضاهای کوچک‌تر همچنان به افزایش سرعت محاسبات کمک می‌کند.

واژگان کلیدی: *فرایند موران، زنجیرهٔ مارکف، زمان تثبیت، احتمال تثبیت، گراف خط*

Markov space decomposition of the Moran process on cycle graph

Hasani, Maryam; Aghababaei Samani, Keivan

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

The size of the Markov space of the Moran process in complex networks has an exponential relationship with the size of the network. Dimension reduction or decomposing the Markov space may reduce computation complexity for obtaining quantities such as fixation probability and fixation time. In this article, continuing the search for methods for dimension reduction or decomposition of the Markov space in bipartite networks, we investigate the Moran dynamics on the ring graph and examine the difference in the structure of its Markov space with the Markov space of the line graph. In the cycle graph, it is not possible to reduce the dimension of the Markov space as much as that for the line graph, but decomposition of Markov space into smaller subspaces still helps to increase the speed of computation.

Keywords*: Moran Process, Markov chain, fixation time, fixation probability, linear graph*

مقدمه

فرایند موران، یکی از روش‌های مدل‌سازی برهم‌کنش و تحول زمانی گونه‌ها در یک جمعیت است که در آن گونه‌ها به دو دستهٔ مقیم و مهاجم تقسیم می شوند و در هر گام‌زمانی یکی از اعضای جمعیت مطابق این مدل دستخوش تغییر می‌شود. در این مدل دو کمیت اساسی احتمال تثبیت و زمان تثبیت گونه‌های مهاجم مورد توجه قرار می‌گیرد. استفاده از زنجیره‌های مارکف یکی از روش هایی است که به کمک آن می‌توان بستگی این کمیت‌ها به ساختار شبکه را بررسی کرد[1]. در برخی از شبکه‌ها با کمک تقارن‌های موجود در ساختار می‌توان بعد فضای مارکف متناظر در شبکه‌ای با N رأس را به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای کاهش داد[2].

در این پژوهش ما مطالعات خود را به شبکه‌های دوبخشی محدود می‌کنیم و می‌کوشیم فضای مارکف متناظر با فرایند موران را به

زیرفضاهایی با ابعاد کوچک‌تر تقسیم کنیم، به‌طوری که بستگی اندازهٔ هر زیرفضا به اندازهٔ شبکه، از یک رابطهٔ توانی پیروی کند[3]. در بخش‌های بعدی ضمن ارائهٔ ایده و نقشهٔ راه کلی، نتایج به‌دست آمده برای یک گراف دوبخشی ساده، یعنی گراف خطی، را ارائه خواهیم کرد [3] و با استفاده از این یافته ها به بررسی فرآیند موران بر روی گراف حلقه می پردازیم..

فضای مارکف فرایند موران

در مدل‌سازی فرایند موران بر روی یک شبکه اطلاعات ساختاری آن در ماتریس همسایگی گنجانده شده است. هر رأس در این شبکه می‌تواند در یکی از دو حالت مقیم یا مهاجم باشد. حالت کلی شبکه با یک آرایه دودویی که بیانگر توزیع مقیم‌ها و مهاجم‌ها است، نمایش داده می‌شود و تعداد کل حالت‌های ممکن شبکه محدود است.

فرآیند موران به صورت یک زنجیره مارکف گسسته مدل‌سازی می‌شود که در هر گام زمانی، حداکثر حالت یک رأس تغییر می‌کند. بنابراین، انتقال بین حالات فقط زمانی رخ می‌دهد که دو حالت از نظر تعداد رأس‌های متفاوت، حداکثر یک واحد فاصله داشته باشند. این شرط، ساختار ماتریس گذار زنجیره مارکف را که عناصر این ماتریس، احتمالات انتقال از یک حالت به حالت دیگر را بر اساس سازواری رأس‌ها مشخص می‌کنند؛ تعیین می‌کند[3].

شبکه‌های دوبخشی

شبکه های دو بخشی به دلیل ساختار دوگانه خود، ابزاری کاربردی برای شبیه‌سازی جمعیت‌هایی است که دارای دو گروه مجزا با نقش‌های متفاوت (مانند رقابت مقیم‌ها و مهاجم‌ها) هستند[4].

به طور نمونه، با تبدیل نقش‌های مقیم و مهاجم به یکدیگر حالت جدیدی ایجاد می گردد که خود عضوی از فضای حالات این فرایند است. همچنین، در فضای مارکف این فرآیند، علاوه بر دو حالت جاذب (تثبیت و انقراض)، شبکه‌های دوبخشی حتماً دارای حالات دافع(حالاتی که نمی‌توان به آنها رسید) هستند [3].

گراف خطی

بررسی فرآیند موران بر روی شبکه‌هایی که امکان ارائهٔ یک حل دقیق برای آنها وجود دارد، از اهمیت بالایی برخوردار است.

چنین رویکردی امکان مشخص کردن ارتباط حیاتی میان دینامیک فرآیند و ساختار زیرین شبکه به صورت شفاف را به ما می‌دهد.

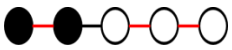
در اینجا گراف خطی زمینه‌ای است که به کمک ویژگی‌های تقارنی آن، می‌خواهیم نحوه کاهش فضای مارکف شبکه دوبخشی را مطالعه کنیم و به حل دقیقی برای آن دست یابیم.

طی بررسی‌های مختلف روی حالت‌های فضای مارکف این فرآیند، متوجه خاصیت های مشابه‌ای میان گروه‌هایی از حالت‌ها شدیم. در کل فضای مارکف مربوطه، تنها بین حالت‌هایی که این گروه‌ها را تشکیل می دهند، انتقال دوسویه وجود دارد. تقارن چنین سامانه‌هایی، جفت گروه‌هایی در این فضا تشکیل می‌دهد که حالات آن‌ها مکمل دودویی یک‌دیگرند.

حال اگر این حالات را با توجه به این ویژگی‌ها گروه‌بندی کرده و گروه‌ها را به ترتیب خاصی نام‌گذاری کرده و در ماتریس گذار قرار دهیم، آنگاه هر یک از این گروه‌ها بلوک‌هایی را تشکیل می‌دهند که با کنار هم قرارگیری آن‌ها در نهایت ماتریس کل سامانه به صورت بلوکه–بالامثلثی در می‌آید[3].

باید توجه داشت که به دلیل افزایش حالات فضای مارکف این فرایند با رشد اعضای شبکه، پیدا کردن روشی که به طور مستقیم بتواند در گروهبندی حالات و بطور دقیق‌تر چینش این گروه‌ها در ماتریس‌گذار کمک کند از اهمییت بالایی برخوردار است.

با استفاده از بررسی گراف‌های هر حالت که گروه‌ها را تشکیل می‌دهند، می‌توان دید که برای تمام آن‌ها مجموع تعداد یال های بین دو راس مشابه میزان یکسانی می باشد.

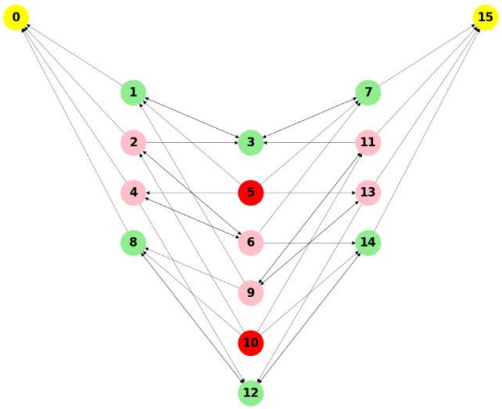


شکل1: مقدار مجموع تعداد یال ها بین گره‌های مشابه(در اینجا این مقدار برابر 3 است.)

این مقدار عددی بین 0 و $N-1$ می باشد و برای گروه‌هایی که حالات‌آن‌ها مکمل یکدیگرند، مقدار یکسانی است.

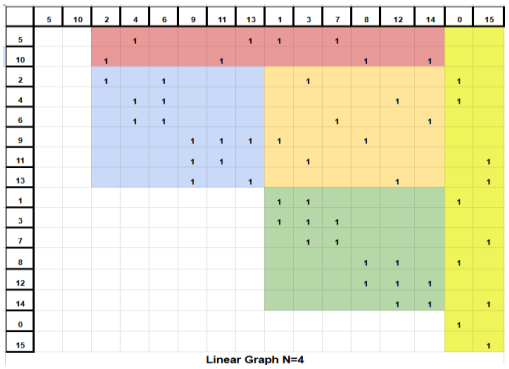
اکنون باید به نحوه قرارگیری آن ها در ماتریس گذار بپردازیم.

رفتار دیگری که در ساخت یک ماتریس بلوک–بالا مثلثی به ما کمک می‌کند، توجه به تنوع اتصالات در فضای مارکف این فرایند است.



شکل 2: فضای مارکف فرایند موران روی گراف خطی N=4

چینش بلوک‌ها نیز در ماتریس انتقال باید به نحوی باشد که از چپ به راست تنوع اتصال به سایر حالات از بلوک‌های دیگر کاهش بیابد. این مورد در حالتی که تعداد بالایی حالت با مقدار مشابه مجموع تعداد یال های بین دو راس مواجه می‌شویم، اهمییت به سزایی پیدا می‌کند. در نتیجه این ساده سازی، محاسبات مرتبط با این ماتریس‌گذار، عملا به محاسبات مربوط به بلوک‌های روی قطر کاهش می‌یابد و به‌این‌ترتیب هزینهٔ محاسبات به‌شدت کاهش می‌یابد[3].



شکل3: شکل کلی ماتریس گذار بلوکه–بالامثلثی فرایند موران روی گراف خطی N=4

گراف حلقه

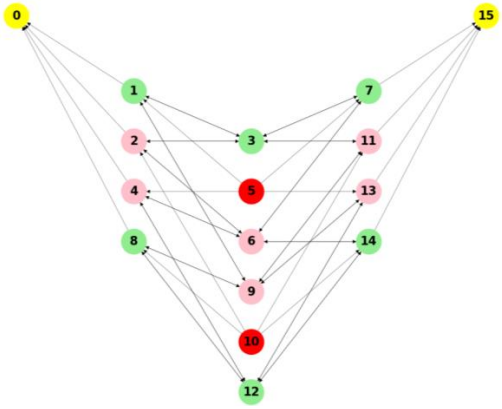
اکنون می‌خواهیم به کمک یافته‌های بخش قبل، فرایند موران را بر روی یک گراف حلقه بررسی کنیم.

یک گرافِ همبند که منظم و درجهٔ رئوس آن ۲ باشد، یک گرافِ حلقه است. گرافِ حلقه با N رأس را با C_n نشان می‌دهیم.

گرافی که با حذف یک یال از C_n به‌دست می‌آید، گرافِ خطی با N رأس است[5] . به عبارت دیگر، گراف حلقه را در واقع می‌توان همان گراف خطی دید که دو گره ابتدایی و انتهایی آن به یکدیگر متصل اند. یک گرافِ دو بخشی نمی‌تواند چرخهٔ فرد داشته باشد[6].

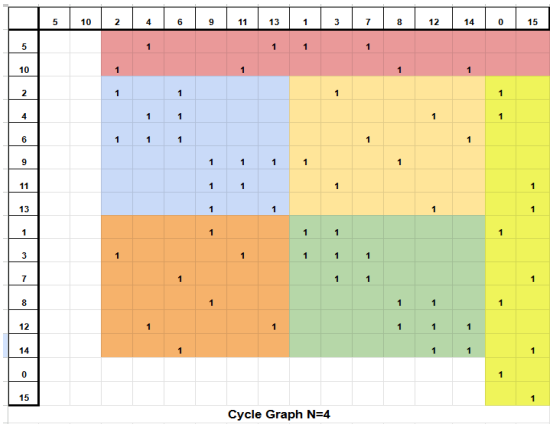
اتصال گره ابتدا و انتهایی این گراف، باعث می‌شود گراف حلقه با طول مسیر فرد دیگر یک گراف دو بخشی نباشد؛ زیر اکنون گره‌ای وجود دارد که عضوی از هر دو مجموعه است. ما در اینجا مطالعات خود را به گراف حلقهٔ دو بخشی محدود می‌کنیم.

با استفاده از رویکرد مقایسه‌ای میان دو گراف خطی و حلقه و همچنین بررسی تحولات ایجاد شده در سامانه در اثر تبدیل گراف خطی به حلقه ویژگی های قابل توجه‌ای را می‌توان مشاهده کرد. تحت چنین تبدیلی، تمامی اتصالات موجود در فضای مارکف به جز ارتباطات حالات با حالات جاذب و دافع، همگی دو سویه می‌شوند.



شکل4: فضای مارکف فرایند موران روی گراف حلقه N=4

همچنین، می‌توان فضای مارکف این سامانه را به صورت ارتباط دوسویه گروه‌هایی از حالات با یکدیگر دید که در واقع این گروه حالات همان مجموعه‌هایی بودند که بلوک‌های ماتریس انتقال گراف خطی را تشکیل می‌دادند، اما ارتباط یک سویه بین آن برقرار بود. چنین ارتباطی بین گروها باعث می‌شود که دیگر ماتریس انتقال به شکل بلوک–بالامثلثی در نیاید.



شکل5: شکل کلی ماتریس گذار بلوکی فرایند موران روی گراف حلقه $N=4$

البته از آنجایی که ماتریس همچنان به شکل بلوکی در می‌آید می توان از قضیه Schur complement استفاده کرد. در این روش برای محاسبه ماتریس اساسی از رابطه کلی زیر می‌توان استفاده کرد.

$$M = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} A^{-1} + A^{-1}B(D - CA^{-1}B)^{-1}CA^{-1} & -A^{-1}B(D - CA^{-1}B)^{-1} \\ -(D - CA^{-1}B)^{-1}CA^{-1} & (D - CA^{-1}B)^{-1}CA^{-1} \end{pmatrix}$$

که در آن A,B,C,D بلوک‌های وارون پذیر ماتریس M هستند.

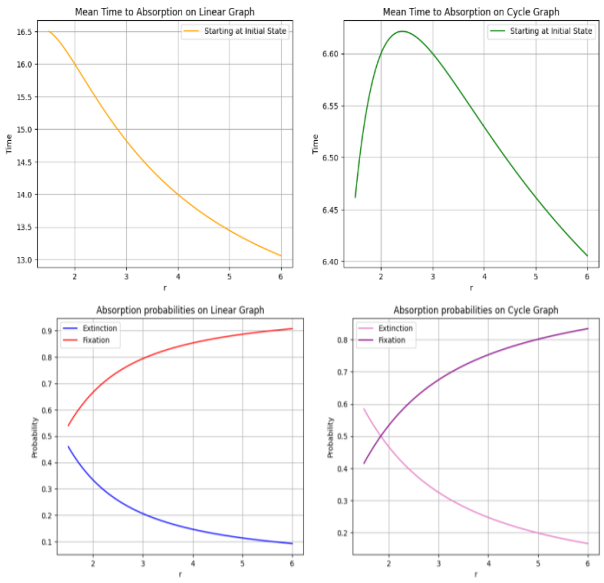
نتیجه‌گیری

با مقایسه فرآیند مورانی که روی گراف خط بررسی کردیم، وتعمیم برخی نتایج به گراف حلقه، توانستیم ابعاد فضای مارکف آن را با استفاده از گروه‌بندی حالاتی که خواص مشابه‌ای دارند از نمایی به خطی تبدیل کنیم.

به این شکل، ماتریس گذار سامانه به‌شکل مجموعه‌ای از بلوک‌ها درآمده که مطالعات بیشتر روی آن ساده‌تر می‌شود.

همچنین با استفاده از روش ماتریس اساسی می‌توانیم مقدار زمان میانگین جذب و احتمال جذب را نیز محاسبه کنیم.

این رهیافت هنوز در یک مرحله بتدایی است و امیدواریم بتوانیم این روش را برای گراف‌های دوبخشی دیگر به‌کار ببریم. همچنین، به‌نظر می‌رسد امکان تقریب مرتبه صفرم روش Schur در ساده سازی محاسبات بتواند کمک زیادی انجام دهد؛ اما هنوز نتیجه‌ٔ تحلیلی دقیقی دراین‌باره به‌دست نیاورده‌ایم.



شکل6:(الف) نمودار زمان جذب برای $N=4$ روی گراف حلقه(بالا سمت راست) و گراف خط(بالا سمت چپ). (ب) نمودار احتمال جذب برای $N=4$ روی گراف حلقه(بالا سمت راست) و گراف خط(پایین سمت چپ).

مرجع‌ها

[1] M.Askari and K Aghababaei Samani, "*Analytical calculation of average fixation time in evolutionary graphs*", *Phys. Rev. E* **92** (2015), 042707.
[2] M. Hajihashemi and K. Aghababaei Samani, "*Multi-strategy evolutionary games: A Markov chain approach*", *PLOS One* **17**, (2022) e0263979.
[3] M. Hassani and K. Aghababai Samani, *"Dimension reduction of Markov space of Moran process on bipartite networks,"* in Proc. 30th Conf. on Condensed Matter and Complex Systems, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences, May 30, 2025. [Online]. Available: https://iasbs.ac.ir/~condmat-meeting/m30/docs/Proceeding.pdf
[4]M. A. Nowak, "*Evolutionary dynamics: exploring the equations of life", H*arvard University Press (2006).
[5] R. J. Wilson**,** "*Introduction to Graph Theory"* (1996).Addison-Wesley Longman. ISBN 0-582-24993-7.
[6] R. Diestel, "*Graph Theory"*, **6th** ed. Springer,(2025).

بررسی رفتار بحرانی در سامانه‌های نورونی با نورون‌های تحریکی و مهاری

عطاللهی، سارا[۱] ؛ شهبازی، فرهاد[۱]
ولی زاده،علیرضا[۲]
[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان
[۲] دانشکده فیزیک، تحصیلات تکمیلی علوم پایه، زنجان

چکیده

مطالعه‌ی سیستم‌های عصبی به ویژه نورون‌ها و مدارهای عصبی به دلیل ویژگی‌های منحصر به فردی که از خود نشان می‌دهند در سال‌های اخیر توجه محققان را به خود معطوف کرده‌اند و مطالعاتی بر روی آن‌ها انجام شده است. در این مقاله با در نظر گرفتن دینامیک غیرخطی برای نورون‌ها (مدل RTM و WB) و همچنین انتخاب سیناپس شیمیایی برای شبکه، رفتار بحرانی شبکه را برای درصد نورون های مهاری مختلف بررسی کردیم. در نهایت، تابع چگالی احتمال زمان خاموشی، اندازه و دوره بهمن‌ها، نمودار جریان‌های سیناپسی خروجی، موازنه شبکه، روابط مقیاس بندی و سایر کمیت هایی که برای بررسی رفتار بحرانی در شبکه موثر هستند را به دست آوردیم.

واژه های کلیدی: *مدل RTM و WB ، اندازه و دوره بهمن‌ها، موازنه شبکه، روابط مقیاس بندی، جریان‌های سیناپسی خروجی.*

Investigation of critical behavior in neuronal systems with excitatory and inhibitory neurons

Ataollahi, Sarah[1]; Shahbazi, Farhad[1]
Valizade, Alireza[2]

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

Abstract

The study of nervous systems, especially neurons and neural circuits, have attracted the attention of researchers in recent years due to their unique characteristics. We investigated the critical behavior of the network for the different inhibition percentages by considering the nonlinear dynamics for neurons (RTM and WB model) and also the choice of chemical synapse for the network. In this regard, we obtained the probability density function of the size and duration of avalanches, the output synaptic excitatory and inhibitory currents, power of critical area and other quantities that are effective for investigating the critical behavior in the network.

***Keywords**: RTM and WB model, size and duration of avalanches, power of critical area, the output synaptic current.*

PACS No. 87.18.Sn

مقدمه

مطالعه سیستم‌های عصبی به ویژه نورون‌ها و مدارهای عصبی شاخه‌ای از علوم اعصاب است که در سال‌های اخیر توجه زیادی را به خود معطوف کرده است.[۲] آزمایشات انجام شده بر روی مغز حاکی از آن است که مغز عملکرد بحرانی دارد.[۱] در سیستم بحرانی افت وخیزها بسیار مهم هستند و نمی‌توان از آن‌ها صرف نظر کرد و به همین دلیل این سیستم‌ها پیش‌بینی پذیر نیستند. از این رو می‌توان عملکرد مغز را مشابه یک سیستم پیچیده تعبیر کرد. سیستم پیچیده در حالت کلی به سیستم‌هایی اطلاق می‌شود که دارای اجزاء زیاد و متفاوتی هستند که اجزاء با هم درارتباط هستند. از دیگر مشخصه‌های این سیستم‌ها می‌توان به برهمکنش کوتاه‌برد و همبستگی بلندبرد که منجر به ایجاد حالت‌های همگام در شبکه می‌شود اشاره کرد. این سیستم‌ها از پایداری بالایی برخوردار هستند. چنین سیستم‌هایی می‌توانند رفتار بحرانی، زیر بحرانی و فرابحرانی از

خود نشـــان دهند اما این ســیســتم ها به گونه ای خود را تنظیم میکنند که در ناحیه ی بحرانی قرار گیرند. همچنین بی مقیاس بودن و رفتار فرکتالی نشان از سلسله مراتبی بودن این سیستم‌ها دارد.

مطالعات علمی و آزمایش‌های انجام شده در دو دهه‌ی اخیر، هم نشان داد که سیستم‌های عصبی از خود رفتار بحرانی نشان می‌دهند[۴]. منظور از بحرانی بودن یعنی ســیســتم نه به طور کامل منظم و نه به طور کامل بی‌نظم است بلکه همواره تعادلی میان این دو حالت برقرار است. در این حالت هست است که عملکرد آن بهینه می‌شود.

درمقاله‌ی قبلی نتایج سیسنم را برای درصـد احتمال اتصـال‌های مختلف برای محدوده ۰.۰۵ تا ۱ مقایســه کردیم. ســیســتم در احتمال اتصال ۰.۱ رفتار بحرانی از خود نشان داد. به همین منظور در این مقاله به مطالعه‌ی یک ســامانه‌ی نورونی و بررســی رفتار بحرانی برای درصــد نورون های مهاری مختلف برای شـبکه با احتمال اتصال ۰.۱ پرداختیم. در این سامانه‌ها توزیع اندازه و دوره بهمن‌ها حائز اهمیت است. منظور از اندازه بهمن تعداد نورونی است که در محدوده‌ی بین دو زمان خاموشـــی، تیزه تولید کرده‌اند که این مدت زمان، دوره‌ی بهمن شناخته می شود. لازم به ذکر است گام‌های زمانی که هیچ نورونی تیزه تولید نکرده باشد، زمان خاموشی نامیده می‌شود.

روش‌های محاسباتی

برای انجام محاسبات ابتدا شبکه‌ای را در نظر گرفتیم که گره‌ها (نورون‌ها) با احتمال اتصال ۰.۱ با هم در ارتباط باشند. یال ها (سیناپس) جهت‌دار هستند که بسته به نوع نورون‌ها دارای قدرت‌های متفاوتی هستند. دینامیک در نظر گرفته شده برای نورون‌های تحریکی مدل RTM(reduced_trab_miles) و برای نورون‌های مهاری مدل WB(wang_buzsaki) در نظر گرفته شد. دینامیک در نظر گرفته شده به این صورت است[۳و۴]:

$$C\frac{dv}{dt} = I_{Na} + I_K + I_L + I_{ext} + I_{syn} \qquad (1)$$

در این رابطه v پتانسیل نورون‌ها و I_{Na} و I_K به ترتیب جریان‌های یونی هستند که از کانال‌ها عبور می‌کنند. I_L جریان نشتی (پخشی) از غشا می‌باشد. این جریان‌ها به صورت زیر تعریف می‌شوند[۲]:

$$I_x = g_x (v_x - v) \qquad (2)$$

$$x=Na,K,L$$

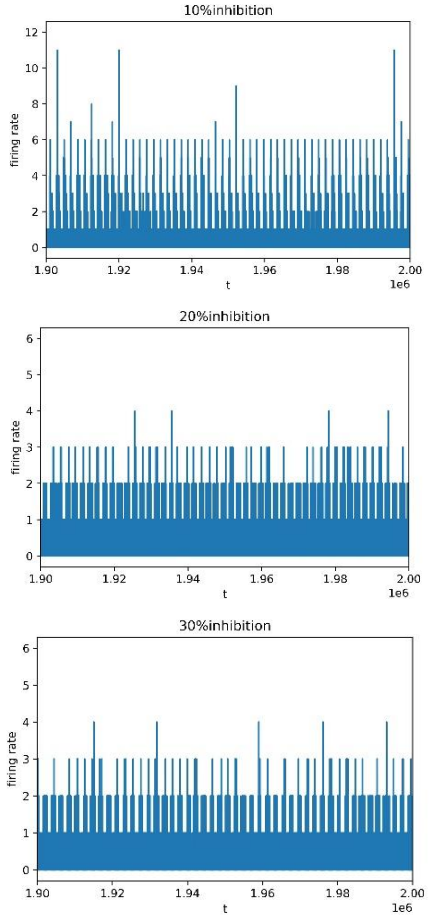
در این رابطه I_{ext} معرف جریان خارجی است که فقط به نورون‌های تحریکی وارد می‌شود. Isyn جریان سیناپسی وارد به هر نورون است که به صورت زیر در نظر گرفته شده است[۷]:

$$I_{syn}[i] = g\, s[j]\, (v_{rev} - v[i]) \qquad (3)$$

در این رابطه g قدرت سیناپس و S کسری از گیرنده‌ها را نشان می‌دهد که در این جریان شرکت داشته‌اند. خاطر نشان می‌سازد که S به پتانسیل نورون و زمان بستگی دارد. اطلاعات میان نورون‌ها به صورت سیگنال از نورون پیش‌سیناپسی به نورون پس‌سیناپسی منتقل می‌شود. از این رو پتانسیل نورون پس‌سیناپسی افزایش می‌یابد و نورون شلیک شده و تیزه شکل می‌گیرد.

بحث و بررسی

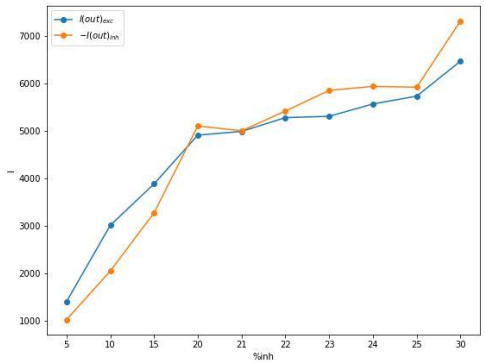
در این پژوهش سیستم دارای درصد نورون مهاری مختلف می‌باشد. درابتدا به فعالیت سیستم در حضور نورون‌های مهاری نگاهی می‌کنیم.(شکل ۱)



شکل۱: فعالیت شبکه برای ۱۰ و ۲۰ و ۳۰ درصد نورون مهاری.

همان طور که مشاهده می‌شود فعالیت سیستم با۱۰درصد نورون مهاری بی نظم تر از سیستم با ۳۰ درصد نورون مهاری می‌باشد. این در حالی است که سیستم با۲۰ درصد مهاری جایی بین این دوسیستم قرار دارد.

با مقایسه جمع جریان‌های سیناپسی خروجی از نورون‌های تحریکی و مهاری به این نتیجه رسیدیم که شبکه در محدوده‌ی ۲۰و۲۱و۲۲ درصد مهاری شبکه موازنه می شود.(شکل ۲)



شکل۲: جمع جریان سیناپسی های خروجی از نورون های تحریکی و مهاری برای درصدهای مختلف مهاری.

در ادامه به بررسی قوانین مقیاس بندی که سیستم‌های بحرانی از آن تبعیت می‌کنند می‌پردازیم. این قوانین به دلیل همبستگی بعضی از کمیت‌ها انفاق می‌افتد مثلا اندازه بهمن با طول عمر(دوره) بهمن ارتباط دارد.

$$<s>(T) \sim T^{\frac{1}{\sigma \upsilon z}} \qquad (4)$$

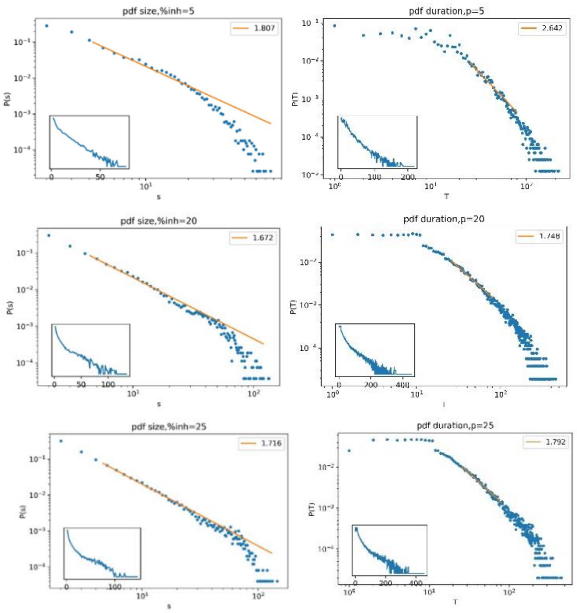
بین توان‌های بحرانی رابطه زیر برقرار است:

$$\frac{\beta-1}{\alpha-1} \sim \frac{1}{\sigma \upsilon z} \qquad (5)$$

که درآن α و β توان تابع توزیع اندازه و دوره بهمن است.

$$P(s) \sim s^{-\alpha}\ , P(T) \sim T^{-\beta} \qquad (6)$$

با بررسی نمودار تابع توزیع اندازه بهمن همانطور که در شکل۳ می‌بینیم برای ۵ درصد مهاری تابع نمایی برای ۲۰ درصد تابع توانی وبرای ۲۵ درصد تابع دوقله‌ای مشاهده می‌شود. تابع توزیع اندازه بهمن در ۲۰ درصد مهاری از رابطه‌ی توانی تبعیت می‌کند.



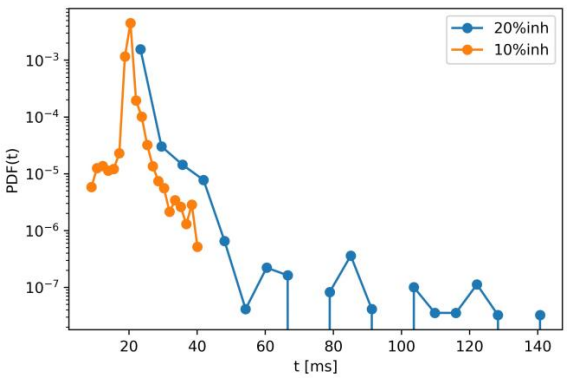
شکل۳: تابع توزیع اندازه و دوره بهمن‌ها برای ۵ و۲۰ و۲۵ درصد مهاری. برای ۲۰ درصد نورون مهاری تابع توانی دیده می شود.

برای درصد های مختلف از نورون مهاری رابطه مقیاس بندی در جدول۱ آمده است. همان طور که مشاهده می‌شود در۲۰ درصد مهاری این رابطه به خوبی برقرار است.

جدول1 : مقادیر توان‌های بحرانی برای درصدهای مختلف از نورون‌های مهاری

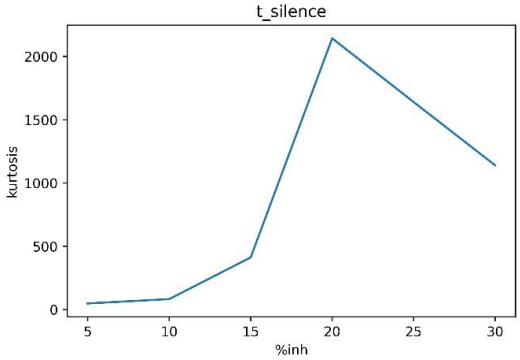
درصد مهاری	$\frac{1}{\sigma \upsilon z}$	$\frac{1-\beta}{1-\alpha}$
15	1.13(2)	0.91(2)
20	1.09(2)	1.10(2)
21	1.21(2)	1.16(2)
22	1.05(2)	1.07(2)
23	1.09(2)	0.97(2)

تابع توزیع زمان خاموشی تک نورون‌ها را برای همه درصدهای مهاری بدست آوردیم، که بیشینه‌ی همه‌ی نمودارها روی ۲۰ میلی ثانیه هست که این مقدار تقریبا فرکانس تک نورون خارج از شبکه است.(شکل۴)



شکل۴: تابع توزیع زمان خاموشی برای همه ی نورون‌ها، برای شبکه با ۱۰ و ۲۰ درصد نورون مهاری.

درادامه کشیدگی زمان خاموشی ها را حساب کردیم. همان طور که در شکل ۶ مشاهده میکنیم کشیدگی زمان خاموشی کل نورون‌ها برای شبکه با ۲۰ درصد نورون مهاری مقدار بیشینه دارد. بیشینه شدن کشیدگی به معنای بیشینه‌ی انحراف از گاوسی بودن در ۲۰ درصد مهاری است.



شکل۵: کشیدگی زمان خاموشی برای همه ی نورون‌ها، نورون‌های تحریکی و نورون‌های مهاری برای شبکه با درصدهای مختلف نورون مهاری.

نتیجه گیری

در این مقاله شبکه برای درصدهای مختلف از نورون مهاری با فرض دینامیک غیرخطی حاکم بر رفتار نورون‌ها بررسی شد. نتایج حاصل از نمودارهای فعالیت شبکه، جمع جریان سیناپسی‌های خروجی از نورون‌ها، تابع توزیع اندازه و دوره و قوانین مقیاس بندی نشان داد که رفتار توانی در نزدیک ۲۰ درصد مهاری دیده می‌شود. همچنین شبکه با ۲۰ درصد نورون مهاری موازنه هست و انحراف از گاوسی بودن در آن بیشینه است.

برای شبکه با زیر ۱۰ درصد مهاری، سیستم رفتار زیربحرانی و برای شبکه با درصد مهاری بیشتر از ۲۵ درصد، سیستم یک رفتار فرابحرانی از خود نشان می دهد.

مرجع‌ها

[1] John M.Beggs and Dietmar Plenz. *Neuronal avalanches in neocortical circuits*. *Labo- ratory of Syste Neuroscience*, December 3, 2003.

[2] M. Bear, B. Connors, and M.A. Paradiso. *Neuroscience: Exploring the Brain, EnhancedEdition: Exploring the Brain, Enhanced Edition*. Jones & Bartlett Learning, 2020..

[3] Christoph Borgers. *An Introduction to Modeling Neuronal Dynamics*. Springer, Cham, 2018.

[4] C. B¨orgers, Chemical synapses, in An Introduction to Modeling Neuronal Dynamics (Springer International Publishing, Cham, 2017) pp. 153–164.

[5] A. L. Hodgkin and A. F. Huxley. *A quantitative description of current and its application to conduction and excitation in nerve. J Physiol*, 28 August 1952.

[6] Antonio J. Fontenele, Nivaldo A. P. de Vasconcelos, Thais Feliciano, Leandro A. A. Aguiar, Carina Soares-Cunha, Barbara Coimbra, Leonardo Dalla Porta, Sidarta Ribeiro,Ana Joao Rodrigues, Nuno Sousa, Pedro V. Carelli, and Mauro Copelli. *Criticality between cortical states*. *bioRxiv*, 2018.

[7] X.-J. Wang, Synaptic basis of cortical persistent activity: the importance of nmda receptors to working memory, Journal of Neuroscience 19, 9587 (1999), https://www.jneurosci.org/content/19/21/9587.full.pdf.

از مزیت‌های کوچک ژنتیکی تا صفات پیچیده: یک مدل هم‌تکاملی مبتنی بر بازخورد

خاموشی، سیدآرش[۱]؛ گلبوئی، سیداحمد[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان ، اصفهان ۸۳۱۱۱-۸۴۱۵۶

چکیده

تکامل بسیاری از ویژگی‌های زیستی، حاصل تغییر هم‌زمان چندین صفت وابسته به یکدیگر است. در چنین سامانه‌هایی، هر صفت به تنهایی ممکن است مزیت تکاملی ناچیزی ایجاد کند؛ اما اثر جمعی آن‌ها می‌تواند مسیر تکامل را تغییر دهد. در این پژوهش، یک مدل ریاضی هم‌تکاملی سه‌صفتی با توجه به ژنتیک مندلی ارائه می‌شود تا تعامل میان آن‌ها را شبیه‌سازی کند. در مدل پیشنهادی، عملکرد هر صفت بر شدت انتخاب نسل‌های بعدی اثر می‌گذارد و یک سازوکار بازخوردی شکل می‌گیرد. ساختار مدل شامل چهار فاز متوالی ارزیابی عملکرد، تولیدمثل، انتخاب طبیعی و بقا است. نتایج نشان می‌دهد که حتی زمانی که مزیت اولیه هر صفت ناچیز باشد، برهم‌کنش و تقویت متقابل صفات می‌تواند به افزایش فشار انتخابی،افزایش سهم جمعیت آلل‌های سودمند و تثبیت هم‌زمان صفات در جمعیت منجر شود. نشان داده می‌شود که هم‌افزایی میان صفات وابسته می‌تواند سازوکاری برای نمود ویژگی‌های پیچیده زیستی فراهم کند.

واژه های کلیدی: *انتخاب طبیعی، هم‌تکاملی، ژنتیک مندلی، مدل‌سازی فرگشت، فشار انتخابی*

From Small Genetic Advantages to Complex Traits: A Feedback-Based Co-evolutionary Model

Khamooshi, Seyed Arash[1]; Golbooee, Seyed Ahmad[1]

[1]*Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran*

Abstract

The evolution of many biological traits results from the simultaneous modification of multiple interdependent characteristics. In such systems, each trait alone may provide only a negligible evolutionary advantage, whereas their combined effects can substantially alter evolutionary trajectories. In this study, a three-trait co-evolutionary mathematical model based on Mendelian genetics is proposed to simulate the interactions among these traits. In the proposed framework, the performance of each trait influences the selection intensity acting on subsequent generations, thereby creating a feedback mechanism between phenotype and natural selection. The model consists of four sequential phases: performance evaluation, reproduction, natural selection, and survival. Simulation results demonstrate that even when the initial advantage associated with each trait is extremely small, mutual interactions and positive reinforcement among traits can increase selection pressure, promote the spread of beneficial alleles, and lead to the simultaneous fixation of advantageous traits within the population. The findings suggest that synergistic interactions among interdependent traits may provide a plausible mechanism for the emergence and evolution of complex biological features.

***Keywords**: Natural Selection, Co-evolution, Mendelian Genetics, Evolutionary Modeling, Selection Pressure*
PACS No. 89

مقدمه

مایکل کرایتون در کتاب دنیای گمشده خود، این نکته را به خوبی بیان می‌کند که نگاه معمول به تکامل برخی سامانه‌های زیستی، با چالش اساسی روبه‌رو است. اجزای تشکیل‌دهنده این سامانه‌ها به یکدیگر وابسته‌اند و هیچ‌یک به تنهایی مزیت فرگشتی قابل‌توجهی ایجاد نمی‌کنند[1]. در کتاب مذکور، سامانه پژواک‌یابی خفاش‌ها نمونه‌ای از این مسئله آورده شده است. افزایش دقت شنوایی بدون توانایی تولید سیگنال مناسب، سود محدودی دارد و یا تولید پژواک

بدون وجود سازوکار دریافت و پردازش اطلاعات مزیت چندانی ایجاد نمی‌کند. این پرسش مطرح می‌شود که چگونه تعدادی صفات وابسته–این وابستگی یک وابستگی پویا است و ارتباطی با وابستگی ژن‌ها روی کروموزوم ندارد–می‌توانند به‌طور هم‌زمان تکامل یابند[1].

در بسیاری از سامانه‌های زیستی، بهتر شدن عملکرد یک صفت می‌تواند عملکرد سایر صفات را نیز افزایش دهد و نوعی بازخورد میان آن‌ها ایجاد کند. این می‌تواند زمینه فرایندهای هم‌تکاملی باشد.

در این پژوهش، یک مدل هم‌تکاملی سه‌صفتی برای بررسی تعامل میان سه صفت مذکور، ارائه می‌شود. به صورتی که طبق قوانین مندلی، این صفت به صورت جایگاه دو آلل(دو حالت غالب یا مغلوب) روی کروموزوم فرض می‌شود. به این معنی که هر جایگاه، سه حالت را همراه دارد که حالت دو آلل غالب، و حالت آلل غالب–مغلوب، ژنوتیپ‌هایی هستند که صفت مذکور را در جانور نمایش می‌دهند(فنوتیپ‌های یکسانی دارند) و حالت دو آلل مغلوب فنوتیپ متفاوتی دارد که صفت مذکور را از خود بروز نمی‌دهد[2].

در مدل، عملکرد فنوتیپی جمعیت شدت انتخاب در نسل بعد را تعیین می‌کند. بدین ترتیب فشار انتخابی تغییر می‌کند. هدف، بررسی این موضوع است که آیا صفاتی با مزیت اولیه ناچیز، می‌توانند با تقویت متقابل بازخوردی، به‌تدریج گسترش یافته و یک الگوی هم‌تکاملی پایدار ایجاد کنند یا نه.

مدل و روش

مدل پیشنهادی یک نظام هم‌تکاملی سه‌صفتی است که تعامل میان سه صفت زیستی شامل دقت بهتر شنوایی(G) ، تولید صوت با فرکانس بالاتر (S) و پردازش عصبی موقعیت منابع اصوات دریافت شده (H) را در یک جمعیت بزرگ شبیه‌سازی می‌کند. هر صفت دارای دو آلل غالب و مغلوب بوده و در نتیجه ترکیب سه صفت مستقل، ۲۷ ژنوتیپ ایجاد می‌کند. فرض بر این است که در حالت اولیه جمعیت؛ همگی شامل آلل مغلوبی از این صفات هستند؛ به این معنی که صفت مذکور، نمودی در افراد جمعیت ندارد. سپس با فاصله‌های زمانی تصادفی، آلل غالبی از این صفات در تعداد انگشت‌شماری از افراد جامعه، ظاهر شود. انتقال ژنتیکی مطابق قوانین مندلی انجام شده و جمعیت در هر نسل از چهار فاز متوالی شامل ارزیابی عملکرد، تولیدمثل، انتخاب طبیعی و بقا عبور می‌کند.

ارزیابی عملکرد و به‌روزرسانی فشار انتخابی

در آغاز هر نسل، افراد بر اساس حضور داشتن یا نداشتن آلل غالب در هر صفت دسته‌بندی می‌شوند. تعداد افراد دارای آلل غالب در صفت X از رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$N_{hasX}(t) = \sum_i N_i(t)\,\delta_X(i) \quad (1)$$

که در آن $\delta_X(i)$ تابع حضور آلل غالب در ژنوتیپ i است؛ به این شکل که در صورت حضور آلل غالب در ژنوتیپ i مقدار یک؛ و در صورت عدم حضور این آلل، مقدار ۰ دارد. تعداد افراد فاقد آلل غالب با فرض تعداد کل $N(t)$ نیز برابر است با

$$N_{noX}(t) = N(t) - N_{hasX}(t) \quad (2)$$

فراوانی نسبی افراد دارا و فاقد آلل غالب به ترتیب برابر است با

$$p_{norm,X}(t) = \frac{N_{noX}(t)}{N(t)} \quad (3)$$

$$p_{adv,X}(t) = \frac{N_{hasX}(t)}{N(t)} \quad (4)$$

سپس میانگین عملکرد فنوتیپی صفت X در نسل t به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$\mu_X(t) = \frac{N_{noX}(t)\,\mu_X^{base}(t) + N_{hasX}(t)\left(\mu_X^{base}(t) + \varepsilon_X^{eff}(t)\right)}{N(t)} \quad (5)$$

که در آن، $\mu_X^{base}(t) = \mu_X(t-1)$ و برای نسل اولیه مقدار یک دارد؛ چرا که پیش‌تر گفتیم که جمعیت در لحظه اولیه، دارای آلل‌های مغلوب است و هیچ یک از صفات مذکور را از خود نشان نمی‌دهد؛ لذا مقدار اولیه میانگین عملکرد فنوتیپی، به یک، بهنجار شده است. همچنین t به عنوان نماینده زمان، شمارنده نسل است. ε_X^{eff} اثرگذاری مزیت هر یک از سه صفت مورد بحث را نشان می‌دهد؛ که در ابتدا مقدار ناچیز ε_X را دارد. این مقدار ناچیز در طول زمان به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\varepsilon_X^{eff}(t) = \varepsilon_X \cdot f(t) \quad (6)$$

که $f(t)$ در آن یک تابع نزولی است. دلیل این انتخاب؛ همان تصادفی بودن وجود هر مزیت ناچیز در تعداد اندکی از افراد جامعه است؛ که با دور شدن از زمان ظهور، مقدار این اثر تصادفی، رو به کاهش می‌گذارد. در این مدل $f(t)$ را هم‌ارز تابع $p_{norm,X}(t)$ در نظر گرفته‌ایم؛ چرا که علاوه بر شرط کاهشی بودن؛ منطق رقابت را نیز در مدل حفظ می‌کند. به صورتی که با کاهش افراد فاقد صفت مذکور، رقابت میان اعضای جامعه کاسته شده؛ و نمود تصادفی این مزیت، اهمیت خود را از دست می‌دهد.

در نسل‌های بعد، نسبت پیشرفت عملکرد به صورت رابطه زیر

$$R_X(t+1) = \frac{\mu_X(t+1)}{\mu_X(t)} \quad (7)$$

تعریف شده. برای ایجاد بازخورد میان عملکرد و انتخاب طبیعی، شدت انتخاب ثابت نیست و متناسب با تغییر عملکرد جمعیت تغییر

می‌کند؛ در حالی که مقدار اولیه آن، ناچیز و به صفر نزدیک است. با این تفسیر فشار انتخابی مطابق رابطه ۸ به روز می‌شود.

$$\alpha_X(t+1) = \alpha_X(t) \cdot R_X(t+1) \quad (8)$$

تولیدمثل و تشکیل نسل فرزندان

تعداد آلل‌های غالب هر صفت از رابطه ۹ به دست می‌آید و فراوانی آلل‌های غالب و مغلوب در روابط ۱۰ و ۱۱ آمده است.

$$A_X(t) = \sum_i N_i(t)\left(2\delta_{XX}(i) + \delta_{Xx}(i)\right) \quad (9)$$

$$p_X(t) = \frac{A_X(t)}{2N(t)} \quad (10)$$

$$q_X(t) = 1 - p_X(t) \quad (11)$$

با فرض آمیزش تصادفی، فراوانی‌های ژنوتیپی تک‌صفتی از تعادل هاردی–واینبرگ پیروی می‌کنند[3]، که در زیر آمده است.

$$f_{XX}(t) = p_X^2(t) \quad (12)$$

$$f_{Xx}(t) = 2p_X(t)\,q_X(t) \quad (13)$$

$$f_{xx}(t) = q_X^2(t) \quad (14)$$

و با فرض استقلال کروزموزومی سه صفت، رابطه زیر را داریم.

$$f_i(t) = \prod_X f_{X,state}(t) \quad (15)$$

که سهم هر ژنوتیپ کامل(حاوی حالت سه‌صفتی) از کل جمعیت فرزندان را نشان می‌دهد. $X, state$ نشان دهنده وضعیت ژنوتیپی هر صفت خاص حاوی X در یک ژنوتیپ کامل را نشان می‌دهد که می‌تواند به صورت‌های هموزیگوت غالب (XX)، هتروزیگوت(Xx) و هموزیگوت مغلوب(xx) باشد؛ و بنابر روابط ۱۲ و ۱۳ و ۱۴ هاردی–واینبرگ، $f_{X,state}$ برای هر حالت تعیین می‌شود. بنابراین تعداد مورد انتظار افراد ژنوتیپ i در نسل فرزندان برابر است با

$$N_i^{child}(t) = N(t)\,f_i(t) \quad (16)$$

انتخاب طبیعی

نرخ فرزندان باقی‌مانده(فرزندانی که به مرحله تولید نسل بعدی می‌رسند؛ آن را می‌توان برازندگی نیز تعبیر کرد) از دارندگان صفات جدید؛ از مجموع اثرات انتخابی سه صفت به دست می‌آید. در مدل، اثر سه صفت بر تولیدمثل به صورت جمع‌پذیر فرض شده و برازندگی هر ژنوتیپ از جمع سهم صفات تشکیل می‌شود.

$$C_i(t) = c_0 + \sum_X \alpha_X(t)\,\delta_X(i) \quad (17)$$

که c_0 مربوط به موجودات فاقد آن صفات(جمعیت اولیه) است. همچنین میانگین برازندگی به صورت زیر است.

$$\bar{C}(t) = \frac{\sum_i N_i^{child}(t)\,C_i(t)}{N(t)} \quad (18)$$

فراوانی ژنوتیپ‌ها پس از اعمال انتخاب، رابطه ۱۹ می‌باشد.

$$N_i^{sel}(t) = N_i^{child}(t)\left(\frac{C_i(t)}{\bar{C}(t)}\right) \quad (19)$$

بقا و انتقال به نسل بعد

در پایان هر نسل، جمعیت والدین و فرزندان منتخب ادغام شده و نرخ بقای کلی $0 < \lambda < 1$ اعمال می‌شود؛ که نشان دهنده احتمال مرگ افراد جمعیت بین دو دوره جفت‌گیری است.

$$N_i(t+1) = \lambda\left(N_i(t) + N_i^{sel}(t)\right) \quad (20)$$

همچنین اندازه کل جمعیت در طول زمان، ثابت فرض شده؛ چرا که برای جامعه‌ای از خفاش‌ها، غذای در دسترس و نرخ مرگ و میر تغییر نیافته؛ و تغییرات نرخ برازندگی، به صورت رقابت درون جمعیتی، میان افراد دارا و فاقد مزیت‌های مشخص، نمود می‌کند.

بحث

نتایج شبیه‌سازی یک جامعه با 10^9 فرد[4] نشان داد که مدل پیشنهادی قادر است ظهور، گسترش و تثبیت آلل‌های سودمند را در جمعیت بازتولید کند. با وجود آن‌که فراوانی اولیه آلل‌های غالب در حد 10^{-9} در نظر گرفته شده بود؛ هر سه آلل در طول زمان در جمعیت گسترش یافتند و نهایتا به تثبیت کامل رسیدند. ترتیب‌ها و فواصل زمانی مختلف برای ظهور صفت‌ها آزموده شد؛ و نتیجه نهایی یکسان بود.

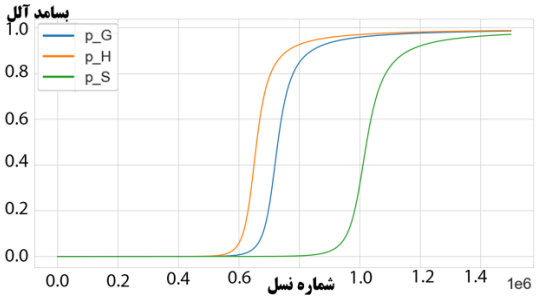
شکل ۱ تغییرات فراوانی آلل‌های غالب در سه صفت را نشان می‌دهد. روند مشاهده‌شده دارای رشد سیگماوار است؛ به این صورت که ابتدا یک دوره نهفتگی طولانی مشاهده می‌شود؛ سپس فراوانی آلل‌ها وارد رشد سریع شده و نهایتا به حالت اشباع می‌رسد.

هم‌زمان با افزایش فراوانی آلل‌های غالب، میانگین عملکرد فنوتیپی صفات نیز افزایش می‌یابد (شکل ۲). از آنجا که هر آلل غالب دارای اثر مثبت ε_X است؛ رشد فراوانی آلل‌ها موجب بهبود عملکرد جمعیت می‌شود. این نشان می‌دهد که حتی مزیت‌های بسیار کوچک ژنتیکی نیز در صورت تداوم انتخاب طبیعی می‌توانند در بلندمدت به تغییرات فنوتیپی قابل توجهی منجر شوند.

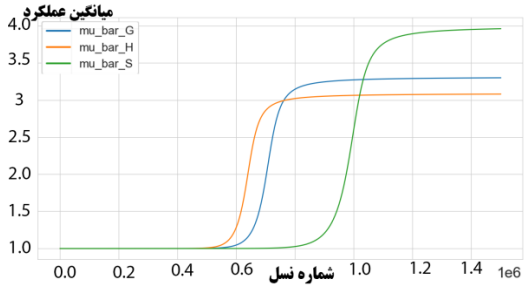
بررسی توزیع فنوتیپی جمعیت (شکل ۳) نیز نشان می‌دهد که در ابتدای شبیه‌سازی، تقریباً تمام افراد فاقد آلل‌های غالب هستند؛ اما با گذر زمان، جمعیت به سمت فنوتیپ‌های دارای دو و سه آلل غالب حرکت می‌کند. این بیانگر جایگزینی حالت‌های کم‌کارایی با حالت‌های سازگارتر است. اگرچه ژنوتیپ‌های دارای یک یا دو

صفت سودمند در بخشی از مسیر تکاملی، افزایش فراوانی نشان دادند؛ اما به حالت پایدار تبدیل نشدند و در نهایت ژنوتیپ دارای هر سه آلل غالب (GHS) بر جمعیت غالب شد. این نتیجه نشان می‌دهد که اگر مزیت اصلی در ترکیب صفات نهفته است؛ سامانه از طریق حالت‌های میانی به سمت یک عملکرد کامل حرکت می‌کند.

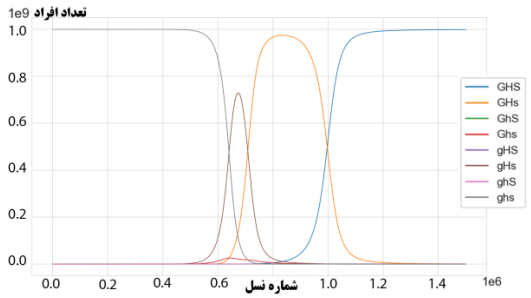
نتایج نشان می‌دهد که ترکیب وراثت مندلی با فشار انتخابی پویا قادر است الگوهای واقع‌بینانه از فرگشت صفات پیچیده را ایجاد کند. همچنین مشاهده شد که بازخورد مثبت میان عملکرد و انتخاب طبیعی می‌تواند اثر جهش‌های سودمند کوچک را در بازه‌های زمانی طولانی تقویت کرده و به تثبیت آن‌ها در جمعیت منجر شود.



شکل ۱: تغییر فراوانی آلل‌های غالب G، S و H در طول فرایند فرگشت.



شکل ۲: تغییرات میانگین عملکرد برای سه صفت در نسل‌های متوالی.



شکل ۳: *تغییر توزیع ژنوتیپ‌های جمعیت و گذار تدریجی از ژنوتیپ پایه به ژنوتیپ دارای هر سه آلل غالب (GHS).*

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، یک مدل هم‌تکاملی برای بررسی تکامل هم‌زمان سه صفت وابسته ارائه شد. در این مدل، سه از طریق یک سازوکار بازخوردی میان عملکرد فنوتیپی و فشار انتخابی به یکدیگر متصل شدند. برخلاف تصویر کلاسیک ژنتیک جمعیت که قدرت انتخاب را ثابت در نظر می‌گیرند؛ در این چارچوب، شدت انتخاب متناسب با عملکرد جمعیت در طول زمان تغییر می‌کند.

نتایج شبیه‌سازی نشان داد که آلل‌های سودمند، حتی در شرایطی که اثر اولیه آن‌ها بسیار کوچک باشد، می‌توانند در اثر تقویت متقابل صفات و افزایش تدریجی فشار انتخابی در جمعیت گسترش یابند. همچنین مشاهده شد که بهبود یک صفت می‌تواند برازندگی صفات دیگر را افزایش داده و زمینه یک فرایند هم‌تکاملی پایدار را فراهم کند. این یافته‌ها نشان می‌دهد که وابستگی متقابل میان صفات می‌تواند راهکاری برای توضیح تکامل سامانه‌هایی باشد که اجزای آن‌ها به تنهایی سودمندی محدودی دارند اما در کنار یکدیگر مزیت فرگشتی قابل توجهی ایجاد می‌کنند. اگرچه مدل حاضر با الهام از مسئله تکامل سامانه پژواک‌یابی خفاش‌ها طراحی شده است؛ چارچوب ارائه‌شده قابلیت تعمیم به سایر فرایندهای هم‌تکاملی در سامانه‌های زیستی را نیز دارد.

سپاس‌گزاری

از همراهی بی‌دریغ دکتر فرهاد شهبازی و فاطمه عسگریان مراتب تشکر را به جا می‌آوریم.

مرجع‌ها

[۱] کرایتون، مایکل؛ «دنیای گمشده»؛ ترجمه ناصر بلیغ؛ انتشارات نقطه؛ چاپ دوم، ۱۳۷۵؛ صفحه ۳۱۶.

[۲] Mackay, T.F.C. & Anholt, R.R.H. (2022). *Gregor Mendel's legacy in quantitative genetics*. **PLoS Biol** 20(7): e3001692.

[۳] A. W. F. Edwards; "G. H. Hardy (1908) and Hardy–Weinberg Equilibrium"; in *Anecdotal, Historical and Critical Commentaries on Genetics*; edited by James F. Crow and William F. Dove.

[4] L. Greenspoon, E. Krieger, R. Sender, and R. Milo; "The Global Biomass of Wild Mammals"; *Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS)*, Vol. 120, No. 10, e2204892120 (2023).

اثر حافظه بر دینامیک حرکت افراد

نوزری گلسفید ، سپیده[۱]؛ بلباسی، سمیه[۱]

[۱]گروه فیزیک، دانشگاه زنجان، زنجان

چکیده

در این مقاله دینامیک حرکت افراد با استفاده از مدل یاخته‌ای خودکار مورد بررسی قرار گرفته است که در آن ساختاری مستطیل شکل را در نظر گرفته‌ایم و با استفاده از دو میدان اسکالر استاتیکی و دینامیکی که در مدل‌سازی حرکت افراد به کار می‌روند زمان خروج افراد از ساختار مورد نظر را مورد بررسی قرار داده‌ایم. در شبیه‌سازی موردنظر در این مقاله، ما با اضافه کردن فاکتور حافظه در واقع ردپای ذرات در سیستم را ردیابی می‌کنیم و این که ذرات مسیر حرکت خود را به خاطر می‌سپارند و مسیر حرکت قبلی خود را تکرار نمی‌کنند زمان خروج همه‌ی ذرات از سیستم را کاهش می‌دهد.

واژه‌های کلیدی: *مدل‌های یاخته‌ای خودکار، دینامیک حرکت افراد، اثر حافظه*

The effect of memory on pedestrians' movement dynamics

Nozari Golsefid, Sepideh[1]; Belbasi, Somayyeh[1]

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

Abstract

In this paper, the dynamics of pedestrian movement have been investigated using a cellular automaton model, in which we considered a rectangular structure. Two static and dynamic scalar fields are used to model pedestrian movement. We have examined the evacuation time of individuals from the given structure. In the simulation described in this paper, we incorporate a memory factor, effectively tracking the footprints of particles within the system. This means that particles remember their movement path and do not repeat their previous trajectory. As a result, the evacuation time for all particles from the system is reduced.

***Keywords**: Cellular Automata models, pedestrians' movement dynamics, memory effect*

PACS No. 89

مقدمه

درک رفتارهای انسانی یکی از اهداف مورد بررسی در مدل‌سازی دینامیک حرکت افراد در سال‌های اخیر بوده است [1,2,3]. مدل‌های مختلفی برای بررسی دینامیک حرکت افراد ارائه شده است. در مدل‌های ماکروسکوپیک مفاهیم مربوط به مواد دانه درشت استفاده می‌شود [4,5,6]. در مقابل در مدل‌های میکروسکوپیک، اجزای مختلف قابل تشخیص است که این امر اجازه بررسی رفتار تک تک ذرات را امکان پذیر می‌سازد. در سال‌های اخیر تقریب‌های مبتنی بر مدل یاخته‌ای[۱] مورد توجه قرار گرفته است که در دسته مدل های میکروسکوپی قرار دارند. از جمله مدل‌های یاخته‌ای خودکار می‌توان به مدل فلور فیلد[۲] اشاره کرد [4]. این مدل‌ها قادر به باز تولید تعداد زیادی از ویژگی‌های دینامیک حرکت افراد است. در این مقاله به بررسی اثر حافظه بر زمان خروج افراد از یک اتاق پرداخته‌ایم.

[۱] Cellular Automata

[۲] Floor Field

توصیف مساله

در مدلی که برای شبیه‌سازی بکار برده‌ایم فضا را که به صورت شبکه‌ای از خانه‌های مشابه و مربعی شکل است، در نظر می‌گیریم. این خانه‌ها می‌توانند خالی و یا فقط به وسیله یک ذره اشغال شده باشند. هر ذره مطابق با احتمالی که برای گذار به یکی از خانه‌های اشغال نشده در همسایگی چپ، راست، بالا و پایین محاسبه می‌شود به خانه موردنظر حرکت می‌کند. در محاسبه این احتمال پارامترهایی وجود دارد که به آنها اشاره کوتاهی می‌کنیم: برای هر خانه شبکه در ابتدای شبیه‌سازی یک پارامتر استاتیک S_{ij} تعریف می‌شود که با گذشت زمان و عبور افراد تغییر نمی‌کند و در طول شبیه‌سازی مقدار ثابتی دارد. بیشترین مقدار پارامتر استاتیک برای خروجی‌ها در نظر گرفته شده است و کمترین مقدار برای خانه‌هایی است که بیشترین فاصله را تا خروجی دارند. علاوه بر این، یک پارامتر دینامیک D_{ij} تعریف می‌شود که بیان کننده رد مجازی از عبور افراد است. مقدار اولیه این پارامتر در ابتدای شبیه‌سازی برای تمام خانه‌های شبکه صفر است ولی با گذشت زمان و عبور افراد از خانه‌ها، تغییر می‌یابد. پدیده‌های پخش و واپاشی بر این پارامتر اعمال می‌شود. نمادهای مورد نظر برای پخش و واپاشی، که به ترتیب با α و δ نشان داده می‌شوند، مقادیری بین صفر تا یک را اختیار می‌کنند و تغییرات پارامتر دینامیکی با استفاده از معادله پخش $\frac{\partial D}{\partial t}=\alpha\left(\frac{\partial^2 D}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 D}{\partial y^2}\right)-\delta D$ انجام می‌شود. پس از تعریف پارامترها، احتمال گذار به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$p_{ij}=Ne^{k_s s_{ij}+k_d D_{ij}}(1-n_{ij})Z_{ij}$$

که در آن N ضریب بهنجارش است و پارامترهای k_s و k_d به ترتیب ثابت‌های جفتیدگی استاتیکی و دینامیکی هستند. پارامتر n_{ij} وضعیت اشغال خانه‌ها را مشخص می‌کند که برای خانه‌های خالی مقدار صفر و برای خانه‌های پر مقدار یک در نظر گرفته می‌شود. Z_{ij} نیز موقعیت موانع را مشخص می‌کند که به ازای دیواره‌ها و موانع مقدار صفر را دارد و برای بقیه خانه‌ها مقدار یک در نظر می‌شود. ممکن است خانه‌ی هدف دو یا چند ذره، یکسان باشد در این صورت مشکل برخورد پیش می‌آید که برای حل این مشکل پارامتر اصطکاک تعریف می‌شود که با نماد μ نشان داده می‌شود و مقداری بین ۰ , ۱ می‌گیرد . اگر μ برابر با یک باشد در این صورت تمام ذرات بدون حرکت باقی می‌مانند و در غیر این‌صورت یکی از ذرات را برای حرکت به خانه‌ی هدف در نظر می‌گیریم.

نتایج شبیه‌سازی

در این شبیه‌سازی اتاقی با ابعاد $L_y = L_x$ خانه در نظر گرفته شده است و خروجی خانه‌ی میانی دیواره است. شکل ۱ را ببینید یک اتاق با ابعاد ۵×۳ خانه را برای نمونه نشان داده شده است. خانه خروجی با رنگ آبی، دیواره‌ها با رنگ زرد و خانه‌های میانی با رنگ سفید نشان داده شده است. اعداد نوشته شده در هر خانه، مقدار پارامتر استاتیکی را نشان می‌دهد.

			6			
	3	4	5	4	3	
	2	3	4	3	2	
	1	2	3	2	1	

شکل ۱: نمای شماتیک یک اتاق

تعداد افراد در اتاق با پارامتر Num در نمودارها نشان داده می‌شود. چیدمان اولیه‌ی ذرات در داخل اتاق کاملا کاتوره‌ای است. در این شبیه‌سازی، هدف بدست آوردن زمان خروج ذرات از اتاق است که با پارامتر T نشان داده شده است که زمان خروج به صورت میانگین زمانی ۵۰ نمونه در نظر گرفته شده است. لازم به ذکر است که زمان خروج T بر حسب گام‌های زمانی مورد نیاز برای خروج از اتاق است.

برای هر خانه (i,j) آرایه‌ی حافظه که به صورت M_{ijk} معرفی شده که در هر گامی که ذره kام، خانه را ترک کند مقدار آن به اندازه پارامتر k_s افزایش می‌یابد. دلیل این است که k_s میزان آ گاهی فرد را از مکان خروجی بیان می‌کند و در صورتی که مقدار k_s صفر باشد (در هنگام بروز حوادث آتش سوزی، وجود دود و یا نبود برق) افراد مکان خروجی و همین‌طور مسیرهای عبور از آن را درست به یاد نمی‌آورند و بنابراین حافظه‌ی مورد بررسی نیز تحت

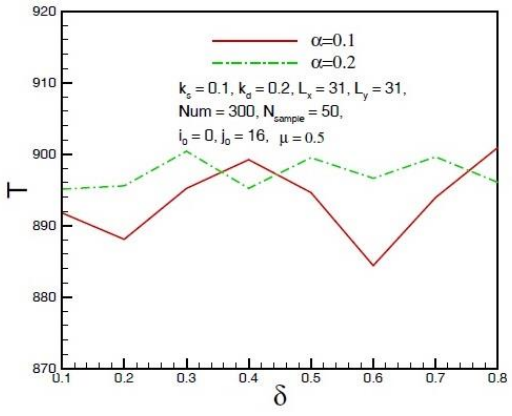
تأثیر قرار می‌گیرد. بر این اساس می‌توان احتمال گذار را به صورت زیر تغییر داد:

$$p_{ij} = Ne^{k_s s_{ij} + k_d (D_{ij} - M_{ij})}(1 - n_{ij})Z_{ij}$$

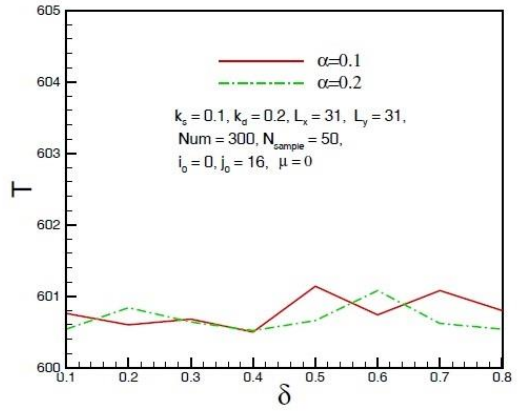
که در آن از رد به جا مانده در خانه (i,j) که با D_{ij} نشان داده می‌شود تعداد دفعات عبور ذره‌ی موردنظر از آن خانه (پارامتر حافظه) کسر شده است تا در این احتمال فقط رد بقیه‌ی ذرات در نظر گرفته شده باشد.

در شکل ۲ زمان خروج بر حسب پارامتر واپاشی δ رسم شده است. همانطور که در نمودارها مشخص است زمان خروج ذرات به ازای پارامتر αهای متفاوت محاسبه شده است. با توجه به نمودار ۲–آ درمی‌یابیم که هر چه پارامتر α بیشتر باشد زمان خروج ذرات از اتاق به طور متوسط مقدار کمی افزایش می‌یابد که در این میان نیز مقدار پارامتر اصطکاک نیز مطرح است در شکل ۲–ب داده‌ها برای مقدار μ=۰ به دست آمده‌اند. با مقایسه دو شکل ۲–آ و ۲–ب در می‌یابیم همان‌گونه که انتظار می‌رود با افزایش پارامتر اصطکاک، زمان خروج افزایش می‌یابد. زیرا در این حالت چند ذره تمایل به حرکت به یک خانه را دارند که در نهایت فقط یکی از ذرات با احتمال ۰٫۵ قادر به حرکت خواهد بود و بقیه ذرات باید در جای خود ثابت بمانند تا در گام‌های زمانی بعدی در مورد آن‌ها تصمیم‌گیری شود. در حالتی که پارامتر اصطکاک صفر است حتما یکی از ذرات قادر به حرکت به سوی خانه هدف است که همین موضوع زمان خروج ذرات از سامانه را کاهش می‌دهد.

در شکل ۳ زمان خروج بر حسب k_s رسم شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود هر چه k_s بیشتر شود زمان خروج کاهش می‌یابد. k_s در واقع پارامتری است که میزان آگاهی ذرات از مکان خروجی را بیان می‌کند یعنی هرچه مقدار k_s بیشتر باشد اطلاع از مکان خروجی نیز بیش‌تر می‌شود و زمان خروج ذرات کاهش می‌یابد و هر چه k_s کمتر باشد، یعنی اطلاع از مکان خروجی کمتر و در نتیجه زمان خروج ذرات افزایش می‌یابد. لازم به ذکر است اگر k_s به صفر میل کند، مسئله‌ی حرکت ذرات به مسئله‌ی گشت تصادفی در دو بعد تبدیل می‌شود.

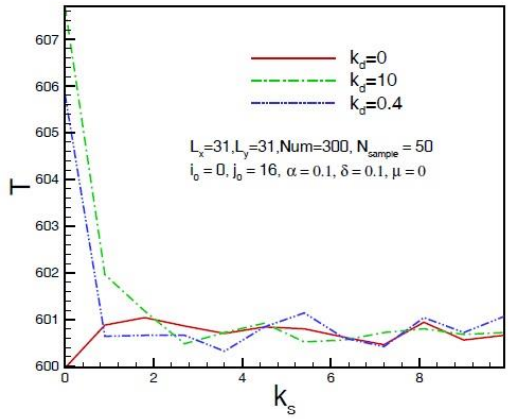


$\mu = ۰/۵$ (آ)



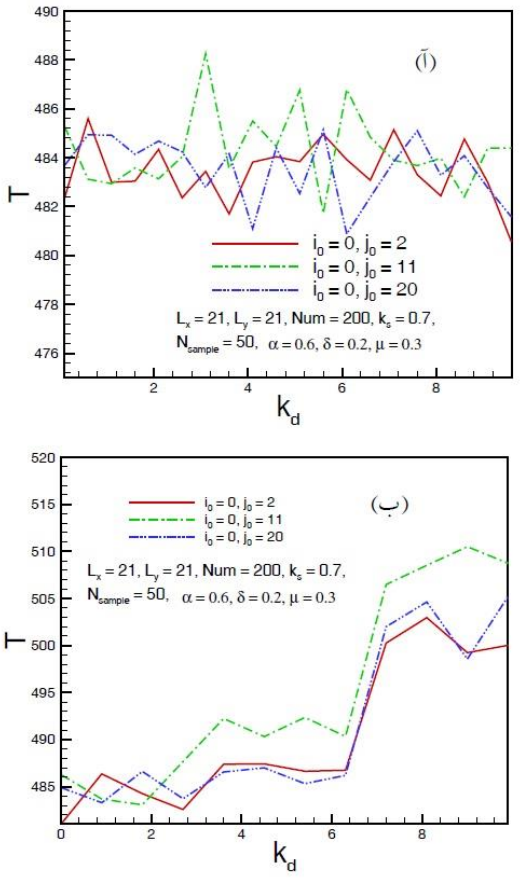
$\mu = ۰$ (ب)

شکل۲: مودارهای زمان خروج بر حسب پارامتر δ به ازای مقادیر متفاوت μ.



شکل۳: نمودار زمان خروج بر حسب پارامتر k_s.

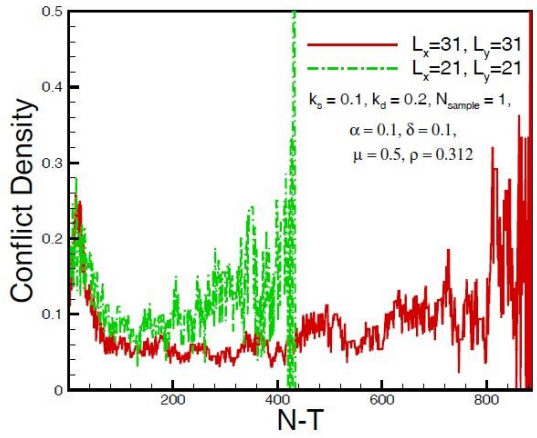
در ادامه نمودار زمان خروج بر حسب k_d، وقتی که پارامتر حافظه به اندازه k_s (شکل ٤–آ) و یک واحد (شکل ٤–ب) افزایش می‌یابد، رسم شده است.



شکل ٤: نمودار زمان خروج بر حسب k_d، وقتی که پارامتر حافظه به اندازه k_s (آ) و یک واحد (ب) افزایش می‌یابد.

از مقایسه ی رفتار زمان خروج بر حسب پارامتر k_d این‌گونه به نظر می‌رسد در زمان خروج برای حالتی که در شکل ٤–ب نشان داده شده است با تابعی افزایشی سروکار داریم.

در انتها پارامتری به نام چگالی برخورد[۳]را معرفی می‌کنیم که به صورت تعداد برخوردها در هر گام زمانی نسبت به تعداد ذرات موجود در اتاق در همان گام زمانی تعریف می‌شود. شکل ٥ نشان می‌دهد که در زمان‌های ابتدایی چگالی برخوردها نسبت به زمان‌های میانی کمتر است ولی با گذشت زمان و تجمع ذرات در جلوی خروجی، چگالی برخوردها در گام‌های زمانی آخر افزایش چشم‌گیری دارد.



شکل ٥: نمودار چگالی برخورد بر حسب زمان در ابعاد متفاوت اتاق.

نتیجه‌گیری

بررسی مساله خروج افراد از اتاق که به خاطر وابستگی بسیار به پارامترهای پدیده شناختی مساله‌ی پیچیده‌ای است. با بررسی نمودارها به این نتیجه می‌رسیم که پارامتر k_s در نمودارها مشابه عکس پارامتر دما در نظریه جنبشی گازها است که هر چه میزان k_s کم باشد ذرات شروع به حرکت کاتوره‌ای می‌کنند و زمان خروج از سامانه افزایش می‌یابد، همچنین زمان خروج در صورتی که پارامتر حافظه بیشتر از یک واحد افزایش یابد از تابعی افزایشی به تابع تقریبا همواری میل می‌کند.

مرجع‌ها

[1] Helbing, D., Molnár, P., Farkas, I., and Bolay, K., "Self-Organizing Pedestrian Movement" Environment and Planning B **28**, 361-383 (2001).
[2] Ohta, H., "Lane formation in a lattice model for oppositely driven binary particles" , EuroPhysics Letters, **99(4)**, 40006 (2012).
[3] Cividini, J., Roland, C.A. and Hilhorst, H.J., "Diagonal patterns and chevron effect in intersecting traffic flows", EuroPhysics Letters, **102**(2) (2013).
[4] Schadscheider, A., Klingsch, W., Klüfel, H., Kretz, T., Rogsch, C., and Seyfried, A., in Encyclopedia of Complexity and Systems Science, Edited by Meyer, R.A., (Springer, New York 3142, 2009).
[5] Kretz, T., Grünebohm, A., and Schreckenberg, M., "Experimental study of pedestrian flow through a bottleneck", Journal of Statistical Mechanics: Theory and expriment **P10014** (2006).
[6] Nagai, R., Fukamachi, M., and Nagatani, T., "Evacuation of crawlers and walkers from corridor through an exit", Physica A **367**, 449 (2006).

Email: s_belbasi@znu.ac.ir

[۳] Conflict Density

رویکرد فیزیک آماری در مدلسازی تحلیل تکنیکال در بازارهای سرمایه

پرج ، سعید[۱] ؛ قاسمی نژاد، محسن[۱]

[۱]بخش فیزیک دانشکده علوم، دانشگاه شیراز

چکیده

مدلسازی نوسانات قیمت در بازارهای مالی یکی از مساله های باز در فیزیک آماری و سامانه های پیچیده است. اهمیت این موضوع و نقش کلیدی آن در اقتصاد موجب شده است تا بسیاری از تحقیقات در سالهای اخیر در حوزه فیزیک اقتصاد به این سمت جهت داده شود. اگر چه می توان این سامانه را با رویکرد فرآیندهای تصادفی و بدون در نظر گرفتن عناصر تشکیل دهنده این بازارها مورد ارزیابی قرار داد اما نگاه عامل محور می تواند بسیاری از رفتارهای نوظهور در این سامانه ها را با دقت بهتری مورد بررسی قرار دهد. پیچیدگی در این سامانه ها ناشی از تعامل و بینظمی و همکاری و رقابت بین اجزای تشکیل دهنده آن است. میلیونها سرمایه گذار در بازارهی مختلفی که توسط صرافی ها برای سهام، اوراق قرضه، کالاها ترتیب داده می شوند، حضور دارند. تصمیمات سرمایه گذاری قیمت دارایی های معامله شده را تغییر می دهد و این تغییرات قیمت به نوبه خود بر تصمیمات تأثیر می گذارد. معامله گران عموما با دانشهایی که از اخبار و روند تغییرات قیمت بدست می آورند و همچنین با تعاملات بین خود تصمیم به خرید یا فروش میگیرند که به این دانشها در عمل تحلیل فاندامنتال و تکنیکال گفته می شود. در این پژوهش سعی داریم یک مدل آماری معرفی نموده و نشان میدهیم این سامانه به صورت خودسامانده دارای رفتار بحرانی است و نماهایی بسیار نزدیک با انچه در تجربه بدست آمده است بدست می آوریم.

واژه های کلیدی: *فیزیک اقتصاد، رفتارهای نوظهور، خود ساماندهی بحرانی، تحلیل تکنیکال*

A Statistical Physics Approach to Modeling Technical Analysis in Capital Markets

Paraj, Saeid[1]; Ghaseminejad, Mohsen[1]

[1] Department of Physics, Shiraz University, Shiraz

Abstract

Modeling price fluctuations in financial markets remains one of the open problems in statistical physics and complex systems. The importance of this issue and its central role in the economy have directed a substantial body of recent research in econophysics toward this topic. Although such systems can be analyzed using stochastic process approaches without explicitly considering their constituent elements, an agent-based perspective enables a more accurate investigation of many emergent behaviors observed in these systems. The complexity of financial markets arises from interactions, disorder, cooperation, and competition among their components. Millions of investors participate in various markets organized by exchanges for trading stocks, bonds, and commodities. Investment decisions alter the prices of traded assets, and these price changes, in turn, influence subsequent decisions. Traders typically decide to buy or sell based on information obtained from news, price trends, and mutual interactions, which in practice are referred to as fundamental and technical analysis. In this work, we introduce a statistical model and demonstrate that the system exhibits self-organized critical behavior. The resulting critical exponents are found to be in close agreement with those obtained from empirical observations.

***Keywords**: econophysics, emergent behavior, self-organized criticality, technical analysis*

PACS No.

مقدمه

بازارهای مالی نمونه‌ای بارز از سیستم‌های پیچیده تطبیقی هستند که رفتار آن‌ها از برهم‌کنش تعداد زیادی عامل با ویژگی‌ها، اهداف و استراتژی‌های متفاوت شکل می‌گیرد. تصمیم‌گیری‌های فردی معامله‌گران، در کنار بازخوردهای غیرخطی و جریان سریع اطلاعات، منجر به ظهور پدیده‌های جمعی نظیر حباب‌های قیمتی، سقوط‌های ناگهانی و نوسانات شدید می‌شود. مطالعات تجربی گسترده نشان داده‌اند که سری‌های زمانی مالی دارای ویژگی‌های آماری پایداری موسوم به «ویژگی‌های سبک‌شده» هستند، از جمله دُم‌های کلفت در توزیع بازده‌ها، خوشه‌بندی نوسان و وابستگی‌های زمانی بلندمدت در قدرمطلق بازده‌ها، از مشخصات بارز این سامانه هاست [۱] و [۲].

مدل‌های کلاسیک مالی که اغلب بر فروضی مانند نرمال بودن بازده‌ها، استقلال زمانی و وجود عامل نماینده استوارند، اگرچه در چارچوب‌های تعادلی کاربرد دارند، اما در توضیح این ویژگی‌های تجربی و پویایی‌های غیرخطی بازارها با محدودیت‌های جدی مواجه‌اند [۱].این نارسایی‌ها موجب شده است که رویکردهای مبتنی بر نظریه سیستم‌های پیچیده و فیزیک آماری، که تحت عنوان اقتصادفیزیک شناخته می‌شوند، به‌عنوان ابزاری مکمل برای مطالعه‌ی بازارهای مالی مطرح شوند [۲].

در چارچوب اقتصادفیزیک، مدل‌های عامل‌محور نقش مهمی در بررسی پویایی بازارها ایفا می‌کنند. در این مدل‌ها، بازار به‌صورت یک سیستم پایین‌به‌بالا در نظر گرفته می‌شود که در آن رفتار کلان قیمت‌ها و نوسانات، به‌طور برآمده از تعامل عامل‌های منفرد با قوانین رفتاری ساده شکل می‌گیرد [۶]. این رویکرد امکان بررسی نقش ناهمگنی معاملگران، تعاملات محلی و اثرات جمعی را فراهم می‌کند؛ عناصری که از ویژگی‌های ذاتی بازارهای واقعی به‌شمار می‌روند.

بخش قابل توجهی از مدل‌های عامل‌محور مالی از سامانه‌های اسپینی و مدل‌های تعامل اجتماعی الهام گرفته‌لند. در این مدل‌ها، رفتار گله‌ای و تقلید اجتماعی به‌عنوان یکی از مکانیسم‌های کلیدی تصمیم‌گیری عامل‌ها در نظر گرفته می‌شود و نشان داده شده است که چنین مکانیسم‌هایی می‌توانند به نوسانات شدید و پویایی‌های پیچیده بازار منجر شوند [۳]. همچنین، مدل‌های اسپینی مالی مبتنی بر بازخورد بین وضعیت کلان بازار و تصمیم عامل‌ها، قادرند دینامیک‌های خودتقویت‌شونده و تغییر رژیم‌های بازار را توضیح دهند [٤].

علاوه بر این، معرفی ناهمگنی عامل‌ها در چارچوب مدل‌های اسپینی نشان داده است که ترکیب رفتارهای مختلف، نقش اساسی در شکل‌گیری خواص آماری بازار ایفا می‌کند و می‌تواند به بازتولید همزمان چندین ویژگی سبک‌شده منجر شود [۵]. با این حال، بررسی نظام‌مند نقش انواع مختلف معامله‌گران و برهم‌کنش آن‌ها همچنان یکی از مسائل باز در این حوزه محسوب می‌شود.

در این کار، یک مدل عامل‌محور ساده برای بازار مالی ارائه می‌شود که در آن سه نوع معامله‌گر با رفتارهای متمایز در نظر گرفته شده‌اند: معامله‌گران کم‌تجربه با تمایل به رفتار گله‌ای، معامله‌گران فاندامنتالیست با گرایش به بازگشت به میانگین، و معامله‌گران باتجربه که تصمیمات خود را بر اساس روندهای گذشته و تعاملات محلی اتخاذ می‌کنند. هدف اصلی این مطالعه پیش‌بینی بازار نیست، بلکه بررسی این مسئله است که آیا ترکیب چنین رفتارهایی می‌تواند به‌طور برآمده برخی از ویژگی‌های آماری مشاهده‌شده در بازارهای مالی واقعی را بازتولید کند یا خیر.

مدل

در تحلیل دقیق داده‌های مالی به عنوان یکی از مهمترین متغیرها می‌توان به قیمت x_t و تغییر قیمت r_t اشاره کرد که x_t قیمت پایانی روزانه برای یک دارایی معین است. تغییر قیمت r_t در زمان t به صورت $r_\tau(t) = \log(x_{t+\tau}) - \log(x_t)$ تعریف می‌شود که در واقع تغییر قیمت لگاریتمی است و اغلب به آن بازده گفته می‌شود. تغییر قیمت، مهمترین متغیری است که برای معامله‌گران و محققان اهمیت دارد.

درک دینامیک بازارهای مالی عمدتاً بر روی توصیف دقیق داده‌های مشاهده‌شده با استفاده از تحلیل سری‌های زمانی یا روش‌های آماری

صرف متمرکز شده‌اند. مشاهدات نشان میدهد که بازده‌های قیمتی دارایی‌های مالی انحرافات قابل توجهی از مدل گاوسی نشان می‌دهند، که منجر به ظهور مدل‌های جایگزین زیادی شده است. مدل‌هایی مانند توزیع‌های توانی و دم-کلفت $P(|r_\tau|) \sim |r_\tau|^{-\alpha}$، تلاش دارند ویژگی‌هایی مانند کورتوسیس بالا، حافظه بلندمدت و تجمع نوسانات را که با رفتار گاوسی ناسازگار هستند، توضیح دهند. در بسیاری از مشاهدات و گزارش های تجربی بازارهای مالی $2 < \alpha < 4$ گزارش شده است.

برای مدل سازی نوسانات قیمت می توان از مدلهای رایج در فیزیک آماری کمک گرفت. به طور مثال مدل ایزینگ یکی از مدل‌های رایج و ساده با متغیرهای دوتایی در مدلسازی بسیاری از پدیده ها در شاخه‌های مختلف علمی از جمله زیست‌شناسی، جامعه‌شناسی و اقتصاد است. واضح است که مدل ایزینگ نمی‌تواند پدیده‌های پیچیده‌ای را که در سیستم‌های پیچیده مشاهده می‌شود توضیح دهد. با این حال، باور بر این است که این مدل می‌تواند برخی از رفتارهای عمومی این سامانه ها را توصیف کند. اخیراً، مدل اسپینی ایزینگ برای توصیف مکانیسم تصمیم‌گیری در یک جامعه بسته مورد استفاده قرار گرفته است [۳]. جامعه با یک زنجیره افقی از اسپین‌های ایزینگ مدل می‌شود که مقدار ۱+ در صورت ایجاد یک پوزیشن خرید برای معامله گری که دیدگاه صعودی برای بازار پیشبینی میکند اختیار می شود. مقدار اسپینی ۱- درحالتی رخ میدهد که بازار رفتار نزولی دارد و معامله گران یک پوزیشن فروش، انتخاب میکنند.

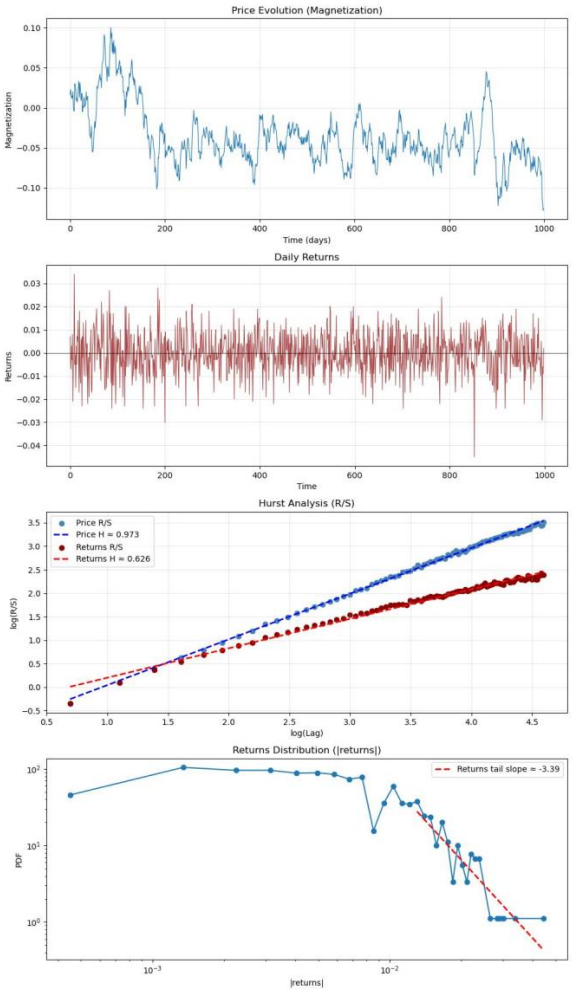
در مدل اولیه که برای دینامیک نوسانات قیمت در بازار معرفی شده است، معامله گران کم تجربه فقط با نگاه کردن به اطرافیان خود (رفتار گله ای) تصمیم به خرید یا فروش میگیرند. یعنی اگر $S_iS_{i+1} = 1$، آنگاه S_{i-1} و S_{i+2} جهت مشابه جفت$(i, i+1)$را اتخاذ می‌کنند. برای سادگی میتوان قیمت x_t را تفاوت نرمال‌شده بین تقاضا و عرضه (مغناطش) تعریف کنیم:

$$x_t = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} S_i(t)$$

که در آن N اندازه سیستم است. توجه داشته باشید که $x_t \in [-1,1]$، بنابراین $|x_t|$ می‌تواند به‌عنوان احتمال در نظر گرفته شود. معامله گران فاندمنتالیست در زمان t اگر $x_t < 0$ با احتمال $|x_t|$ خرید می‌کند (یعنی مقدار اسپین مقدار ۱ را می‌گیرد) و در حالت مخالف آن اگر $x_t > 0$، با احتمال $|x_t|$ پوزیشن فروش ایجاد می‌کند (اسپین مقدار -۱ را می‌گیرد).

در این مقاله قوانین دینامیکی جدیدی را برای توصیف رفتار سه نوع معامله گر در بازار استفاده نموده و در ادامه به بررسی نتایج شبیه سازی آن میپردازیم. معامله‌گران کم‌تجربه با تمایل به رفتار گله‌ای بسیار مشابه با مدل اولیه به خرید و فروش میپردازند بدین معنی که تنها با نگاه کردن به همسایگان خود از آنها تقلید میکنند. اگر دو همسایه $S_iS_{i+1} = 1$، آنگاه S_{i-1} و S_{i+2} جهت مشابه جفت $(i, i+1)$را اتخاذ می‌کنند در غیر این صورت به صورت تصادفی و با احتمال p_h یک پوزیشن خرید یا فروش را انتخاب مینمایند.

معامله‌گران فاندامنتالیست با گرایش به بازگشت به میانگین با احتمال، موقعیت خرید و فروش خود را بر اساس روند کلی بازار تعیین میکنند. بدین صورت که اگر میانگین قیمت $x_t > 0$ باشد، با احتمال $p_f = \min\{\alpha|x_t|, x^*\}$ وارد معامله ای می شود که احتمال فروش در آن بیشتر است. در این صورت با احتمال p_{sell} پوزیشن فروش ایجاد میکند، با احتمال $p_{nat} > p_{sell}$ از معامله خارج شده و نهایتا با احتمال کمی $p_{buy} \ll p_{sell}$ وارد موقعیت خرید می شود. معامله گران بزرگ عموما بر خلاف بازیگران خرد احساسی عمل نمیکنند و می دانند در کجای بازار بهترین تصمیم را بگیرند. عموما در شرایطی که بازار به صورت غیر کنترل شده در حال افزایش است، در موقعیت مناسبی اکثر دارایی خود را به فروش می رسانند. همین کار را در زمانی که بازار در مسیر کاهشی شدید قرار دارد و عموم مردم به خاطر ترس از بازار خارج میشوند، فاندامنتالها با احتمال p'_{buy} پوزیشن خرید ایجاد میکند، با احتمال $p'_{nat} > p'_{buy}$ از معامله خارج شده و نهایتا با احتمال کم $p'_{sell} \ll p'_{buy}$ وارد موقعیت فروش می شوند چرا که ممکن است جذابیتهای بهتری جهت شرکت در آن در موقعیت های بعدی ایجاد شود. سومین دسته معامله گران باتجربه هستند که تصمیمات خود را بر اساس روندهای گذشته و تعاملات محلی اتخاذ می‌کنند. این معامله گران عموما به روند تغییرات نمودارها نگاه میکنند که با نام تحلیل تکنیکال شناخته می شوند. در نمودارهای قیمت سرعت



رشد و کاهش قیمتها نقش مهمی را ایجاد میکند. هر معامله گر پنجره زمانی مشخصی را در نظر میگیرد که در آن شیب تغییرات نمودار قیمت–زمان در آن پنجره را با نام β نام گذاری میکنیم که به نوعی ما را به یاد معکوس دما در فیزیک می اندازد. به عبارتی اگر شیب نمودار زیاد باشد (دما کم) بسته به مثبت بودن شیب، معامله گران با احتمال بیشتری پوزیشن خرید یا فروش باز میکنند. در حالتی که دما زیاد باشد احتمال آنکه یک معامله گر پوزیشن خرید یا فروش باز کند برابر و تقریبا برابر با ½ است. در این صورت $s_i(t+1) = sgn(\beta)$ با احتمال $p_{ex} = \frac{1}{1+e^{-\beta h_i(t)}}$ که $h_i(t) = \sum_j K_{ij} s_j(t) + \epsilon_i$ اثر نظرات همسایگان روی تریدر i ام است. هرچه بازار و نظر همسایگان همسوتر، فرد با احتمال بیشتری وارد معامله میشود. در غیر اینصورت با احتمال $1 - p_{ex}$ از معامله منصرف خواهد شد.

نتیجه گیری

در این پژوهش با معرفی یک مدل آماری از معامله گران معمولی، معامله گران باتجربه (تحلیلگران تکنیکال) و فاندامنتالیستها که دانش عمیقتری از بازار دارند، سعی کرده ایم تا مدلی دینامیکی بر اساس واقعیت های معاملات در بازارهای مالی بسازیم. این مدل نسبتا ساده را با پارامترهای مختلف قابل تغییر شبیه سازی کرده و در نهایت به این نتیجه رسیدیم که دینامیک این سیستم همانند نتایجی که از داده های تجربی به دست آماده است دارای تابع توزیع دم بلند بازده بازار و رفتار فراکتالی با نمای هارست نزدیک به نتایج تجربی می باشد.

مرجع‌ها

[1] R. Cont, “Empirical properties of asset returns: stylized facts and statistical issues,” *Quantitative Finance*, **vol. 1, no. 2**, pp. 223–236, 2001.
[2] R. N. Mantegna and H. E. Stanley, Introduction to Econophysics: Correlations and Complexity in Finance, *Cambridge University Press*, 1999.
[3] K. Sznajd-Weron and R. Weron, “A simple model of price formation,” *International Journal of Modern Physics C*, vol. **13**, no. **01**, pp. 115–123, 2002.
[4] W.-X. Zhou and D. Sornette, “Self-fulfilling Ising model of financial markets,” *European Physical Journal B*, vol. **55**, pp. 175–181, 2007

آنالیز چندمقیاسی توابع موج در مدل آندرسون یک‌بُعدی با استفاده از رهبرهای موجک

نادری بنی، احمد[۱]؛ بی باک، معصومه [۱]؛ مرّی، سجاد [۲] ؛ میرزا، بهروز [۲]

[۱] گروه ه علوم پایه، دانشگاه ملی مهارت، تهران، ایران

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۳۱۱۱-۸۴۱۵۶، ایران

چکیده

در این پژوهش، رفتار چندمقیاسی ویژه‌حالت‌های مدل آندرسون یک‌بُعدی، با استفاده از روش دقیق رهبرهای موجک بررسی شده است. با محاسبه‌ی ویژه‌حالت نزدیک به انرژی صفر برای زنجیره‌ای به طول $N=1200$ و میانگین‌گیری روی ۱۰۰ پیکربندی تصادفی، پهنای طیف تکینگی (Δh) به عنوان شاخص کمّی پیچیدگی مقیاسی برای شدت بی‌نظمی w استخراج شده است. نتایج نشان می‌دهد با افزایش w از ۰.۵ به ۶.۰ مقدار Δh از ۰.۲۸۵۲ ± ۰.۶۱۹۲ به ۰.۴۱۹۸ ± ۱.۳۹۹۵ افزایش می‌یابد که حاکی از جایگزیدگی قوی‌تر و ظهور ساختارهای چندمقیاسی غنی‌تر است. میانگین Δh در رژیم بی‌نظمی ضعیف ($w<2.5$) برابر ۰.۵۱۳۲ ± ۱.۲۱۸۳ و در رژیم بی‌نظمی قوی ($w>4.5$) برابر ۰.۴۰۶۴ ± ۱.۳۶۰۱ به دست آمد که نشان‌دهنده‌ی افزایش پیچیدگی مقیاسی با افزایش بی‌نظمی است. همچنین، تحلیل وابستگی به اندازه برای سه اندازه‌ی $N=600$، 1200 و 2400 انجام شد که همگرایی نتایج برای $W\geq4.78$ را تأیید می‌کند و اعتبار انتخاب $N=1200$ را در رژیم بی‌نظمی قوی نشان می‌دهد. روند افزایشی منظم Δh با w به وضوح قابل مشاهده است.

واژه های کلیدی: *مدل آندرسون، بی‌نظمی کوانتومی، آنالیز چندمقیاسی، رهبرهای موجک، طیف تکینگی*

Multiscale Analysis of Wave Functions in the One-Dimensional Anderson Model Using Wavelet Leaders

Naderi Beni, Ahmad[1]; Bibak, Masoumeh[1]; Marri, Sajjad[2]; Mirza, Behrouz[2]

[1] Department of Basic Sciences, Technical and Vocational University (TVU), Tehran, Iran
[2] Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran

Abstract

In this study, the multiscale behavior of eigenstates of the one-dimensional Anderson model has been investigated using the exact wavelet-leaders method. By computing the eigenstate near zero energy for a chain of length $N=1200$ and averaging over 100 random configurations, the singularity spectrum width (Δh) has been extracted as a quantitative indicator of multiscale complexity for disorder strength w. The results show that as w increases from 0.5 to 6.0, the value of Δh increases from 0.6192 ± 0.2852 to 1.3995 ± 0.4198, indicating stronger localization and the emergence of richer multiscale structures. The mean Δh in the weak-disorder regime ($w<2.5$) was found to be 1.2183 ± 0.5132, and in the strong-disorder regime ($w>4.5$) it was 1.3601 ± 0.4064, demonstrating an increase in multiscale complexity with disorder strength. Additionally, a finite-size scaling analysis for three system sizes ($N=600$, 1200, and 2400) confirms the convergence of results for $W\geq4.78$, validating the choice of $N=1200$ in the strong-disorder regime. A clear and systematic increasing trend of Δh with w is observed.

Keywords: *Anderson model, Quantum disorder, Multiscale analysis, Wavelet Leader, Singularity spectrum.*

PACS No. 89

۱. مقدمه

مدل آندرسون توصیف‌کننده‌ی رفتار الکترون‌ها در یک شبکه کریستالی دارای بی‌نظمی (ناخالصی) است و پایه‌گذار درک ما از گذار فلز– عایق و پدیده‌ی جایگزیدگی آندرسون بوده است [۱و ۲]. در یک بعد نشان داده شده است که حتی بی‌نظمیِ بسیار ضعیف نیز منجر به جایگزیدگی تمام حالت‌ها می‌شود [۳]. با این حال، ساختار پیچیده‌ی توابع موج جایگزیده و ماهیت چندمقیاسی آن‌ها با استفاده از روش‌های سنّتی (مانند بُعد جعبه‌شماری) به‌خوبی آشکار نمی‌شود. در سیستم‌های بی‌نظم، تابع موج الکترون دیگر یک تابع گسترده یا تابع نمایی ساده نیست، بلکه توزیع بسیار ناهمگن با پوسته‌های متعدد است و صفرهای فراوان دارد. چنین ساختاری را نمی‌توان با بُعد فرکتالی واحد توصیف کرد؛ بلکه به مجموعه‌ای از ابعاد موسوم به طیف تکینگی $D(h)$ نیاز است. این طیف نشان می‌دهد که زیرمجموعه‌هایی از فضا با نمای هولدر h (تکینگی) چه بُعد فرکتالی دارند. در اینجا لازم است تاکید کنیم که هدف ما بررسی چندفرکتالیِ بحرانی (وابسته به گذار فاز) نیست، بلکه به‌دنبالِ کمّی‌سازی پیچیدگیِ چندمقیاسی توابع موج در حالت جایگزیده با استفاده از ارتباط آن با طیف تکینگی در آنالیز چندفرکتالی (به عنوان یک ابزار و روش) هستیم. حتی درغیاب گذارفاز توابع موج جایگزیده در مقیاس‌های کوچک‌تر از طول جایگزیدگی ، نوسانات آماری شدیدی نشان می‌دهند که منجر به پهن‌شدگی طیف تکینگی می‌شود [۹، ۱۱]. در سال‌های اخیر آنالیز چندفرکتالی به ویژه با روش رهبرهای موجک (یا موجک راهبَر) که توسط جافارد و همکاران توسعه یافته است، دقت بالایی در تخمین $D(h)$ ارائه می‌دهد [۵، ۶]. این روش برخلاف روش‌های پیشین مانند حداکثر مدول تبدیل موجک (WTMM) از تمام ضرایب موجک در یک پنجره محلی استفاده می‌کند و به مرزهای سیگنال حساس نیست [۱۰، ۱۲]. در این مقاله از روش رهبرهای موجک برای تحلیل کمّیِ توابع موج مدل آندرسونِ یک‌بُعدی استفاده می‌کنیم. هدف نهایی، معرفیِ Δh به‌عنوان شاخص کمّی و حساس برای سنجش درجه‌ی جایگزیدگی و پیش‌بینیِ گذارهای فاز در سیستم‌های بی‌نظم است.

۲. مدل و روش تحلیل

۲،۱.مدل آندرسون

هامیلتونی مدل آندرسون در تقریب تنگ‌بست، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$H = -t\sum_{\langle i,j\rangle}\left(C_i^{\dagger}C_j + h.c.\right) + \sum_i \varepsilon_i C_i^{\dagger}C_i \qquad (۱)$$

که در آن $t = 1$ واحد انرژی را تعیین می‌کند و $\langle i,j\rangle$ نشان‌دهنده‌ی جفت‌شدگی بین نزدیک‌ترین همسایه‌هاست. ε_i انرژی درون‌سایتی تصادفی با توزیع یکنواخت در بازه‌ی $[-{}^{W}/_{2}, {}^{W}/_{2}]$ می‌باشد. این مدل ساده اما غنی، نقشه‌ی راه بسیاری از پدیده‌های فیزیکی از جمله رسانش در نیمه‌های آلایش یافته و عایق‌های توپولوژیک است. در این‌کار، زنجیره‌ای به طول $N = 1200$ با شرایط مرزیِ باز درنظر گرفته شده است. ویژه‌حالت نزدیک به انرژیِ صفر (پایین‌ترین تراز در نوار انرژی)با استفاده از روش شیفت– اینورت (Shift-Invert) محاسبه شده است [۷]. برای هر مقدار W، میانگین روی ۱۰۰ پیکربندی مستقل از بی‌نظمی انجام شده و نتایج گزارش شده است.

۲،۲.روش رهبرهای موجک (Wavelet Leaders)

برای تابع موج $\psi(x)$ و تابع احتمالِ $p(x) = |\psi(x)|^2$ تبدیل موجک گسسته با موجک مادر دابچیز–۴ (Daubechies-4) در $j = 5$ سطح تجزیه اِعمال می‌شود [۸]. انتخاب دابچیز–۴ به دلیل ویژگی‌های برجسته‌ی آن شامل تکیه‌گاه فشرده و تقارن تقریبی است که آن را برای تحلیل تکینگی‌های موضعی ایده‌آل می‌کند. انتخاب $j = 5$ براساس تحلیل حساسیت انجام شد: افزایش سطح تجزیه به اندازه یک واحد بیشتر تغییز قابل توجهی در Δh ایجاد نکرد. سپس رهبرهای موجک، در هر مقیاس a به‌صورت حداکثر قدرمطلقِ ضرایب در یک پنجره‌ی محلی به اندازه‌ی $3a$ تعریف می‌شود:

$$L(a,b) = \sup_{\lambda' \subset 3\lambda_{a,b}} |W_{\psi}(a',b')| \qquad (۲)$$

تابع پارتیشن $Z(q,a) = \frac{1}{N_a}\sum_b |L(a,b)|^q$ در مقیاس‌های کوچک رفتار توانیِ $Z(q,a) \sim a^{\tau(q)}$ از خود نشان می‌دهد. نمای مقیاس‌سازی $\tau(q)$ از برازش خطی در نمودار لگاریتمی $\log Z$ بر حسب $\log a$ استخراج می‌شود. در نهایت، طیف تکینگی $D(h)$ از تبدیل لژاندر $\tau(q)$ به‌دست می‌آید:

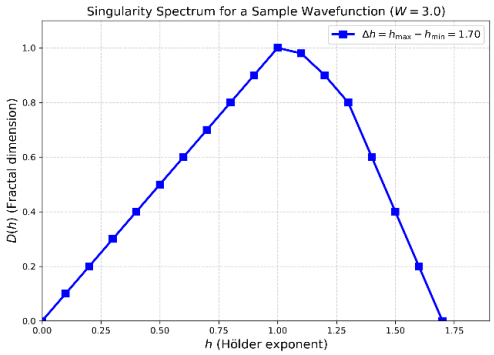
$$h(q) = \frac{d\tau(q)}{dq}, \quad D(h) = qh(q) - \tau(q) \qquad (۳)$$

پهنای طیف تکینگی $\Delta h = h_{max} - h_{min}$ به‌عنوانِ معیار کمّیِ درجه چندفرکتالیته به‌کار می‌رود. هرچه Δh بزرگ‌تر باشد، تنوع بیشتری در نماهای هولدر وجود دارد و توزیع احتمال، ناهمگن‌تر است. برای یک تابع موج کاملاً گسترده (مانند یک صفحه‌ی تخت)، $\Delta h \to 0$؛ در حالی که برای یک تابع موجِ شدیداً موضعی (متمرکز روی یک سایت)، Δh به حداکثرِ خود (حدود ۴–۵) می‌رسد. جزییات پیاده‌سازی در مراجع [۵، ۶] آمده است.

۳. نتایج و بحث

۳،۱. طیف تکینگیِ نمونه

شکل ۱ ، یک نمونه طیف تکینگی محاسبه شده برای یک پیکربندی با $w = 3.0$ را نشان می‌دهد. پهنای طیف h 1.70 به‌دست آمد که نشان‌دهنده‌ی پیچیدگی مقیاسی قابل‌توجهی است.

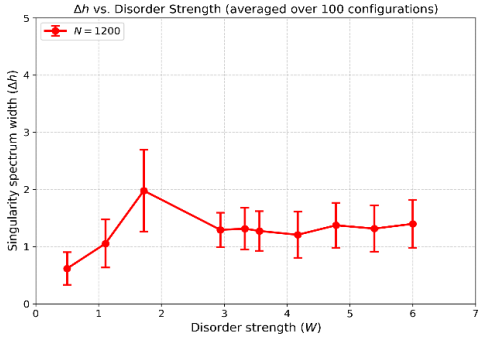


شکل۲ : طیف تکینگی $D(h)$ برای یک تابع موج نمونه در w=3.0. پهنای طیف h = 1.70 نشان‌دهنده‌ی پیچیدگی مقیاسی قابل توجه است

شکل منحنیِ متقارن، حاکی از توزیع متوازن نمایه‌های هولدر است. این طیف گسترده، بیان‌گر این است که تابع موج در عین موضعی بودن (چندین قله با ارتفاع بسیار متفاوت)، ساختار خودمتشابه پیچیده‌ای در مقیاس‌های مختلف دارد. چنین رفتاری با آنچه از سیستم‌های بی‌نظم قوی انتظار می‌رود، سازگار است.

۳،۲. وابستگی h به شدت بی‌نظمی

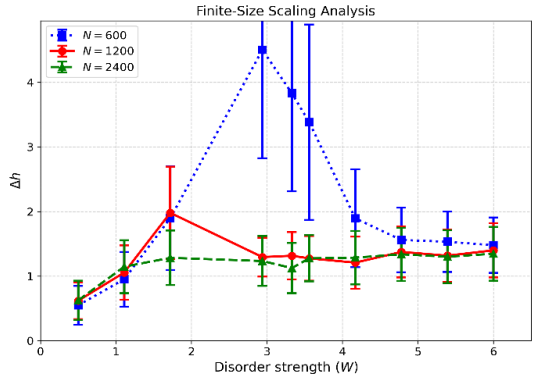
شکل۲، روند افزایشی h نسبت به افزایش w را نشان می‌دهد. برای w<2/5، Δh نسبتاً کوچک‌تر (1.2183±0.5132) است. با عبور از w≈3، Δh افزایش می‌یابد و به ازای w=6 به مقدار 1.3470 ± 0.4173 می‌رسد. جدول۱ مقادیر h (میانگین± انحراف معیار) را برای ۱۰ مقدار مختلف w نشان می‌دهد. روند کلی افزایشی h با w واضح است. شکل۲ روند افزایشی h را نسبت به افزایش w نشان می‌دهد. این رفتار با نتایج روش ماتریس انتقال که طول جایگزیدگی (λ) را تخمین می‌زند، همخوانی دارد [۴]. در یک بُعد برای w بزرگ، $\lambda \sim \frac{1}{W^2}$. کاهش طول جایگزیدگی و با افزایش w، به معنای فشرده شدن تابع موج در فضای حقیقی و در نتیجه پهنای بیشتر طیف تکینگی است.



شکل۲ : پهنای طیف تکینگی h برحسب شدت بی‌نظمی w برای N=1200. نقاط بدست آمده نشان‌دهنده میانگین روی ۱۰۰ پیکربندی هستند.

۳،۳. تحلیل وابستگی به اندازه‌ی سیستم

تحلیل وابستگی به اندازه‌ی سیستم برای سه اندازه‌ی N=600، 1200 و 2400 انجام شد که نتایج در شکل۳ و جدول۱ ارائه گردیده است. برای $w \geq 4.78$ ، هرسه اندازه نتایج همگرا دارند و اختلاف آن‌ها در محدوده‌ی خطاهای آماری قرار دارد.



شکل۳: تحلیل وابستگی به اندازه سیستم برای N=600 ، 1200و 2400 . میله‌های خطا نشان‌دهنده‌ی انحراف معیار روی ۱۰۰ پیکربندی است. همگرایی منحنی‌ها در رژیم قوی $(w \geq 4.78)$ مشهود است.

بنابراین انتخاب N=1200 برای رژیم بی‌نظمی قوی، که بخش عمده‌ای از کار حاضر را پوشش می‌دهد، معتبر است. برای بی‌نظمی‌های متوسط ($w \approx 3$)، اندازه‌ی N=600 رفتار ناهنجاری نشان می‌دهد که ناشی از اثرات اندازه‌ی محدود است، اما N=1200 و N=2400 با یکدیگر هم‌خوانی خوبی دارند. این یافته تایید می‌کند طول جایگزیدگی در این ناحیه به اندازه‌ی سیستم حساس است و N=1200 به عنوان یک اندازه‌ی بزرگتر، رفتار مجانبی را به‌درستی نشان می‌رهد.

جدول۱ : مقادیرعددی h برای سه اندازه‌ی مختلف سیستم(میانگین ±انحراف معیار روی ۱۰۰پیکربندی.

N=2400	N=1200	N=600	W
0.6248 ± 0.3028	0.6192 ± 0.2852	0.5479 ± 0.3014	0.50
1.1465 ± 0.4107	1.0556 ± 0.4208	0.9518 ± 0.4235	1.11
1.2831 ± 0.4219	1.9800 ± 0.7137	1.8981 ± 0.8051	1.72
1.2341 ± 0.3859	1.2949 ± 0.3007	4.5033 ± 1.6768	2.94
1.1246 ± 0.3896	1.3155 ± 0.3650	3.8324 ± 1.5192	3.33
1.2756 ± 0.3583	1.2751 ± 0.3460	3.3835 ± 1.5133	3.56
1.2861 ± 0.4132	1.2091 ± 0.4035	1.8954 ± 0.7587	4.17
1.3376 ± 0.4128	1.3744 ± 0.3943	1.5597 ± 0.4993	4.78
1.3003 ± 0.4083	1.3169 ± 0.4031	1.5331 ± 0.4675	5.39
1.3470 ± 0.4173	1.3995 ± 0.4198	1.4779 ± 0.4287	6.00

افزایش Δh نسبت به w را می‌توان به‌عنوان یک پیش‌نشانگر آماری برای ورود به رژیم جایگزیدگی درنظر گرفت. در بی‌نظمی ضعیف، طول جایگزیدگی بزرگ اســـت و تابع موج در مقیاس‌های کوچک رفتاری نزدیک به گسترده دارد؛ از این رو توزیع احتمال یکنواخت و Δh کوچک اســت. با افزایش بی‌نظمی، طول جایگزیدگی کاهش می‌یابد و تابع موج در ناحیه‌ای کوچک متمرکز می شود. این تمرکز شدید، همراه با نو سانات بزرگ دامنه، منجر به غنی شدن ساختار مقیا سی و افزایش Δh می‌گردد. تأکید می شود که این افزایش Δh نشـــان‌دهنده‌ی نزدیکی به گذار فلز–عایق نیســـت، زیرا در یک‌بعد چنین گذاری وجود ندارد [۱]. بلکه این افزایش بیانگر تشـــدید ناهمگنی‌های مقیا سی درون تابع موج محلی ا ست؛ به‌گونه‌ای که با فشرده‌تر شدن تابع موج، ساختار ظریف آن در مقیاس‌های کوچک برجسته‌تر شده و در پهن‌شدگی طیف تکینگی منعکس می‌شود. این چارچوب تفسیری با فیزیک شناخته‌شده‌ی مدل آندرسون یک‌بُعدی سازگاری دارد.

٤. نتیجه‌گیری

در این پژوهش، از روش رهبرهای موجک برای تحلیل چندمقیاسی توابع موج در مدل آندرسون یک‌بُعدی استفاده شد. نتایج نشان می‌دهد با افزایش w از 0.5 به 6.0 مقدار h از 0.2852±0.6192 به 0.4198±1.3995 افزایش می‌یابد که حاکی از جایگزیدگی قوی‌تر و ظهور ساختارهای چندمقیاسی غنی‌تر است. میانگین h در رژیم بی‌نظمی ضعیف (w<2.5) برابر 0.5132±1.2183 و در رژیم بی‌نظمی قوی (w>4.5) برابر 0.4064±1.3601 به دست آمد که نشان‌دهنده‌ی افزایش پیچیدگی مقیاسی با افزایش بی‌نظمی است. همچنین، تحلیل وابستگی به اندازه برای سه اندازه‌ی N=600، 1200 و 2400 انجام شد که همگرایی نتایج برای W≥4.78 را تأیید می‌کند و اعتبار انتخاب N=1200 را در رژیم بی‌نظمی قوی نشان می‌دهد. روند افزایشی منظم h با w به وضوح قابل مشاهده است. با افزایش تعداد پیکربندیها به ۱۰۰، خطاهای آماری به طور قابل‌توجهی کاهش یافت و پایایی نتایج بهبود یافت. روش معرفی شده، پتانسیل بالایی برای مطالعه‌ی سیستمهای بی‌نظم کوانتومی و شناسایی رژیم جایگزیدگی دارد.

مرجع‌ها

[1] P. W. Anderson, "Absence of Diffusion in Certain Random Lattices," *Phys. Rev*. **109**, 1492 (1958).
[2] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, "Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions," *Phys. Rev. Lett*. **42**, 673 (1979).
[3] N. F. Mott and W. D. Twose, "The theory of impurity conduction," *Adv. Phys*. **10**, 107 (1961).
[4] A. MacKinnon and B. Kramer, "One-parameter scaling of localization length and conductance in one-dimensional systems," *Z. Phys. B* **53**, 1 (1983).
[5] S. Jaffard, G. Saës, W. B. Nasr, F. Palacin, and V. Billat, "A review of univariate and multivariate multifractal analysis illustrated by the analysis of marathon runners physiological data," in *Trends in Mathematics*, pp. 3-**60** (*Birkhäuser*, *Cham*, 2023).
[6] G. Jacyna, D. Frezza, D. M. Slater, and J. R. Thompson, "An Improved Model of Wavelet Leader Covariance for Estimating Multifractal Properties," *ACM Trans. Model. Comput. Simul*. **34**(1), 1-22 (2023).
[7] Y. Saad, Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems, **2nd** ed. (*SIAM, Philadelphia, PA*, 2011).
[8] I. Daubechies, Ten Lectures on Wavelets, CBMS-NSF Regional Conference Series in *Applied Mathematics*, Vol. **61** (*SIAM, Philadelphia, PA*, 1992).
[9] W. Chen, O. Giraud, J. Gong, and G. Lemarié, "Quantum logarithmic multifractality," *Phys. Rev. Research* **6**, L032024 (2024).
[10] G. Tang, H. Guo, and Y. Liu, "Wavelet leaders based multifractal analysis of disordered systems," *Phys. Rev. B* **104**, 104202 (2021).
[11] M. A. Castellanos and E. V. Castro, "Multifractality and the metal-insulator transition in the 1D Anderson model with long-range hopping," *Phys. Rev. B* **108**, 104201 (2023).
[12] A. P. Ortiz, P. G. Balenzuela, and C. M. Arizmendi, "Wavelet leaders for multifractal analysis of disordered systems," *Phys. Rev. E* **107**, 054202 (2023).

آشکارسازی گذار چندفرکتالی در تخلیه سد دی‌الکتریک غبارآلود با استفاده از آنالیز موجک

نادری بنی ، احمد[۱] ؛ بی‌باک ، معصومه[۱] ؛ مرّی ، سجاد ؛ میرزا ، بهروز[۲]

[۱] گروه علوم پایه، دانشگاه ملی مهارت، تهران، ایران

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان، ۸۴۱۵۶-۸۳۱۱۱، ایران

چکیده

در این پژوهش، دینامیک تخلیه سد دی‌الکتریک حاوی غبار (DBD: dusty dielectric barrier) ، با مدل سلولی خودکار شبیه‌سازی شده است. با افزایش چگالی غبار، نوسانات جریان از رفتار تناوبی منظم به رفتاری پیچیده و چندمقیاسی گذار می‌کند. با آنالیز چندفرکتالی مبتنی بر تبدیل موجک و محاسبه پهنای طیف تکینگی (Δh)، نشان داده می‌شود که در چگالی غبار ۰.۱۲، Δh بیشینه است که حاکی از غنی‌ترین ساختار چندفرکتالی می‌باشد. این نتایج همراه با ظهور نویز $1/f$ در طیف توان، نشان می‌دهد که آنالیز موجک ابزاری توانمند برای آشکارسازی گذارهای فاز در پلاسمای غبارآلود است

واژه‌های کلیدی: *تخلیه سد دی الکتریک، پلاسمای غبارآلود، آنالیز چندفرکتالی، تبدیل موجک، طیف تکینگی، 1/f نویز.*

Detecting multifractal transition in dusty dielectric barrier discharge using wavelet analysis

Naderi Beni, Ahmad[1] ; Bibak, Masoumeh[1] ; Marri, Sajjad[2]; Mirza, Behrouz[2]

[1] Department of Basic Sciences, Technical and Vocational University (TVU), Tehran, Iran
[2] Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Isfahan, Iran

Abstract

In this study, a one-dimensional cellular automaton simulates a dusty dielectric barrier discharge (DBD). Increasing dust density drives the discharge current from periodic to complex multiscale behavior. Using multifractal wavelet analysis and the singularity spectrum width (Δh), we find that at dust density 0.12, Δh maximizes, indicating the richest multifractal structure. These results, along with the emergence of $1/f$ noise in the power spectrum, confirm wavelet analysis as a powerful tool for detecting hidden phase transitions in dusty plasmas.

Keywords: *dielectric barrier discharge (DBD), dusty plasma, multifractal analysis, wavelet transform, singularity spectrum, 1/f noise*

PACS No. 89

۱ مقدمه

در سال‌های اخیر، رفتار چندفرکتالی در سیستم‌های پیچیده‌ی پلاسمای غبارآلود مورد مطالعه قرار گرفته است [۱و ۲]. ویژگی خودسازماندهیِ بحرانی (SOC) با ویژگی‌های جالبی از جمله نویز 1/f و رفتار توانیِ توابع توزیع احتمال، در دینامیک بسیاری از سیستم‌های فیزیکی ظهور پیدا می‌کنند [۳]. با این حال، روش‌های سنّتی به دلیل حساسیت به نویز و فرضیات خطی، قادر به آشکارسازی دقیق ساختارهای چندمقیاسی نیستند [۵]. در مقابل، روش‌های مبتنی بر تبدیل موجک، به ویژه روش راهبَرهای موجک (Wavelet Leaders) ابزاری قدرتمند برای آنالیز تکینگی‌ها در سیگنال‌های ناایستا ارائه می‌دهند[۴]. این روش در تحلیل داده‌های تجربیِ آشفتگی (تلاطم جریان الکتریکی)، وابستگی رژیم‌های جریان به عدد رینولدز و ماهیت تکینگی‌های نوسانی را آشکار ساخته است [۵]. تبدیل موجک به دلیل ماهیت خودمتشابه خود،

ابزاری طبیعی برای تحلیل فرایندهای 1/f و تولید سیگنال‌های شبه‌تناوبی با نویز فرکتالی است [۶].

مدل‌سازی تخلیه‌ی دی‌الکتریک با سلول‌های خودکار، سابقه‌ای طولانی دارد. چوبارد و دروز، در کتاب مرجع خود چارچوب کلیِ مدل‌سازی سیستم‌های فیزیکی با اتوماتای سلولی را معرفی کرده‌اند [۷]. اَدالو و همکاران، مدلی از تخلیه‌ی سطحی با سلول‌های خودکار ارائه دادند که دینامیک تخلیه‌ی فیلامانی را شبیه‌سازی می‌کند و نتایج آن با مشاهدات تجربی مطابقت خوبی دارد [۸]. کارهای اولیه چوبارد و همکاران همچنین مدل‌های اتوماتای سلولی را برای واکنش–انتشار و الگوسازی در تخلیه‌ها توسعه داده است [۱۰]. از سوی دیگر اُلیویرا و همکاران نشان داده‌اند که تخریب الکتریکی در حضور ذرات رسانا، قابل نگاشت بر مدل پاتس است که در آن گذار فاز در q=4 رخ می‌دهد [۹]. این یافته اهمیت مدل‌های آستانه‌ای و نقش ذرات (غبار) را در تغییر ماهیت گذارها نشان می‌دهد.

در این مقاله، با معرفی یک مدل ساده از تخلیه سد دی‌الکتریکِ حاوی غبار، نشان می‌دهیم چگونه افزایش چگالی غبار می‌تواند باعث گذار از نوسانات پریودیک به رفتار چندفرکتالی شود. با استفاده از آنالیز موجک و محاسبه‌ی پهنای طیف تکینگی (h)، این گذار را به صورت کمّی مشخص می‌کنیم.

۲ مدل شبیه‌سازی و روش تحلیل

۲-۱ مدل سلولی

مدل استفاده شده در این پژوهش، یک مدل سلولی خودکارِ یک‌بُعدی مبتنی بر رویکردهای پیشین در مراجع [۷ و۸] است . این مدل شامل ۱۰۰۰ سلول با شرایط مرزی تناوبی است. دینامیک سیستم توسط معادلات زیر توصیف می‌شود:

$$V_{ext}(t) = V_0 \sin(2\pi f t) \quad (۱)$$

$$E_i(t) = V_{ext}(t) - \alpha Q_i(t) - \beta(Q_{i-1}(t) + Q_{i+1}(t)) \quad (۲)$$

که در آن $V_{ext}(t)$ ولتاژ خارجی، Q_i بار سطحیِ دی الکتریک در سلول i و پارامترهای $\alpha = 0.2$ و $\beta = 0.05$ به ترتیب شدت بازخورد بارِ خودی و همسایگی را تعیین می‌کنند. آستانه‌ی شکست موضعی $E_i = 1.0$ در نظر گرفته شده است. تخلیه با افزایش بار سطحی و ثبت جریان متناظر، مدل‌سازی می‌شود. اثر همسایگی (β) نقش مهمی در ایجاد الگوهای فیلامانی و فازهای ساختاریِ تخلیه دارد. سازوکار بازیابی (recovery) و نشت‌بار (leakage) نیز به‌طور واقع‌گرایانه‌ای دینامیک شارژِ سطح را کنترل می‌کند [۸]. اثر غبار با دو مکانیسم اصلی درنظر گرفته می‌شود.: الف) کاهش میدان موثر در سلول‌های حاوی غبار و ب) کاهش بار اضافه شده در هنگام تخلیه به دلیل جذب الکترون‌ها. پارامتر چگالی غبار (ρ) از صفر تا 0.3 در مراحل مختلف تغییر داده شده است. برای هر چگالی، یک سری زمانی جریان به طول ۱۰،۰۰۰ نقطه با گام زمانی $t = 10^{-4}\ s$ تولید شده است (با ذخیره‌سازی هر ۱۰ گام، نرخ نمونه‌برداری مؤثر ۱۰۰۰ هرتز خواهد بود). به‌منظور کاهش نویز آماری، هر سری زمانی با یک میانگین‌گیر متحرک ۵ نقطه‌ای هموار شده است.

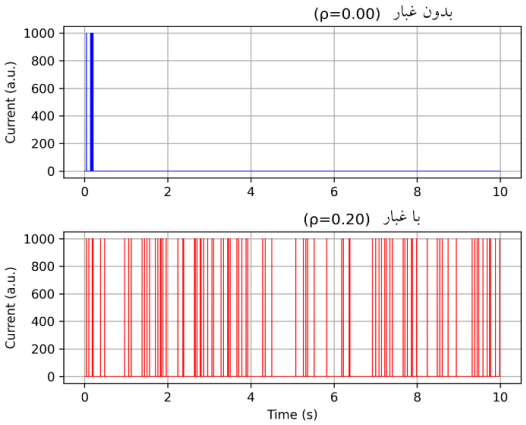
۲-۲ آنالیز چندفرکتالی مبتنی بر موجک

برای تحلیل ساختار چندمقیاسی سری‌های زمانی تولید شده، از تبدیل موجک گسسته (DWT) با موجک مادرِ دابچیز–۴ (Daubechies-4) استفاده شده است [۱۱]. راهبَرهای موجک، که توسط جافارد و همکاران [۴] معرفی شده، یک فرمول‌بندی چندفرکتالی است که در آن به جای روش حداکثر مدولِ JFNDG موجک (WTMM) ، از راهبرها استفاده می‌شود. این روش برای تحلیل داده‌های توربولانس و آشکارسازی تکینگی‌های نوسانی کارآمد است [۵]. سیگنال در ۵ سطح تجزیه شده و انرژی زیرباندهای جزئی استخراج می‌شود. بر اساس روابط ارائه شده در مرجع [۱۲]، پهنای طیف تکینگی (h) از روی انحراف معیار انرژی‌های لگاریتمی تخمین زده می‌شود. این کمیت به‌عنوان معیاری از غنای چندفرکتالی عمل می‌کند. برای بررسی پایداری نتایج، سری‌های زمانی با دو طول متفاوت (۱۰،۰۰۰ و ۵۰،۰۰۰ نقطه) تولید شدند. جدول ۱ مقایسه‌ی مقادیر Δh برای هر دو طول را نشان می‌دهد و همان‌طوری‌که مشاهده می‌شود اختلاف بین آنها کمتر از ۰.۰۰۱ است که بیانگر استقلال نتایج از طول سری می‌باشد. همچنین تکرار شبیه‌سازی با دانه‌های تصادفی مختلف، خطای استاندارد Δh را حدود ۰.۰۰۸ برآورد می‌کند که با توجه به اختلاف ۰.۰۲۲ بین Δh در چگالی‌های ۰.۰۰ و ۰.۱۲، معناداری آماری این اختلاف را در سطح اطمینان ۹۵٪ تأیید می‌کند

۳ نتایج و بحث

۳-۱ سری‌های زمانی و گذار طیفی $1/f$

در حالت بدون غبار (شکل ۱، الف) پالس‌های جریان کاملاً منظم و با پریود 0.01 ثانیه ظاهر می شوند. طیف توان متناظر (شکل ۲، ب) دارای یک قله واضح در فرکانس ۱۰۰ هرتز است که رفتار پریودیک سیستم را تایید می‌کند. این رفتار را می‌توان با نظریه‌ی تخلیه فیلامانی در DBD توجیه کرد که در آن هر نیم‌سیکل ولتاژ، منجر به تشکیل میکرو تخلیه‌های متعدد می شود. با افزایش چگالی غبار به 0.20 (شکل ۱،ب) پالس‌ها نامنظم شده و دامنه‌ی آن‌ها نوسان می‌کند. طیف توان(شکل ۲،ب) پهن‌تر شده و دارای یک شیب تقریباً -1 در ناحیه فرکانس پایین (نویز $1/f$) می‌شوند.

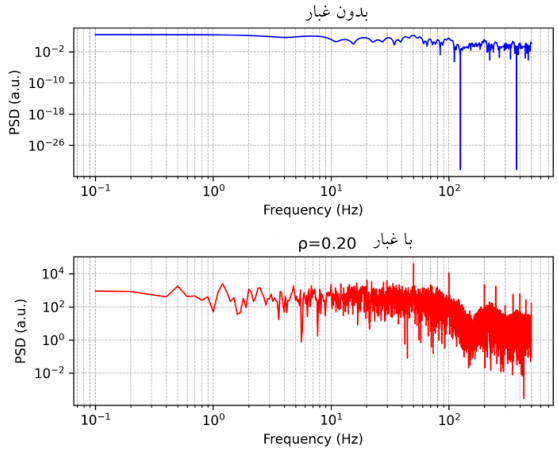


شکل ۱، الف: سری زمانی جریان بدون غبار ($\rho = 0.0$). که دارای رفتار منظم می‌باشد. ب: سری زمانی برای حالت با غبار ($\rho = 0.2$) که دارای رفتار نامنظم و با نوسانات تصادفی می‌باشد.

در مدل ما، غبارها با جذب الکترون و کاهش میدان محلی، اختلالات تصادفی ایجاد می‌کنند که چگالی بحرانی منجر به گستردگی طیف توان می‌شود. این پدیده قابل قیاس با نتایج مدل‌های ماسه‌ای (SOC) [۳] است که با افزایش رخ رانش، شیب طیف توان به سمت 1- میل می‌کند.

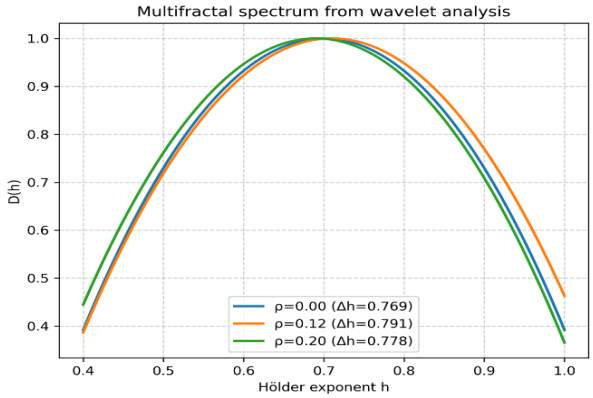
۳-۲ طیف تکینگی و شاخص‌های پهنای چندفرکتالی

طیف‌های تکینگی محاسبه‌شده با روش موجک برای سه چگالی غبار در شکل ۳ نشان داده شده است. این طیف‌ها چگونگی توزیع نماهای هولدر (h) را نشان می‌دهند. پهنای طیف تکینگی (Δh) به‌عنوان معیار کمّی برای درجه چندفرکتالیته در جدول ۱ آورده شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش چگالی غبار از ۰ به ۰.۱۲، پهنای طیف به بیشینه‌ی خود با مقدار ۰.۷۹۱۵ می‌رسد که نشان‌دهنده‌ی غنی‌ترین رفتار چندفرکتالی است.



شکل ۲، الف: طیف توانی جریان بدون غبار($\rho = 0.0$). پیک گسسته در ۱۰۰هرتز نشان دهنده نوسانات پریودیک است. ب: طیف توان برای حالت باغبار و برای چگالی ($\rho = 0.2$) . ناحیه‌ی فرکانس پایین شیب حدود -1 دارد که مشخصه‌ی نویز 1/f و خودسازمانده‌ی بحرانی است [۱۳].

این مقدارِ حداکثری با مشاهده نویز $1/f$ در طیف توان در همین چگالی همخوانی دارد. در چگالی بالاتر (0.20) پهنای طیف اندکی کاهش می‌یابد (0.7783) که می‌تواند ناشی از اشباع سیستم و کاهش درجه آزادی موثر باشد.



شکل ۳: مقایسه‌ی طیف‌های تکینگی ناشی از رفتار چندفرکتالیِ نوسانات جریان غبار برای چگالی‌های غبار ($\rho = 0, 0.12, 0.2$) . افزایش ۳ درصدیِ پهنای طیف برای چگالی $\rho = 0.12$ نسبت به چگالی $\rho = 0.2$ مشهود است.

افزایش پهنای طیف تکینگی در چگالی‌های میانی، مشابه رفتار چندفرکتالی مشاهده‌شده در سیستم‌های خودسازمانده بحرانی

(SOC) است؛ جایی که حافظه‌ی بلندمدت سیستم (نمای هارست) با مقدار $\Delta h \approx 0.8$ و همراه با ظهور فازهای بحرانی است [۱۳].

برای اطمینان از پایداری نتایج، علاوه بر سری‌های ۱۰۰۰۰ نقطه‌ای، شبیه‌سازی را با سری‌های ۵۰۰۰۰ نقطه‌ای نیز تکرار کردیم. جدول۱ علاوه بر مقادیر مربوط به سری ۱۰ هزار مقادیر مربوط به ۵۰ هزار و همچنین مقایسه‌ی مقادیر Δh را نشان می‌دهد. علاوه بر این می‌دانیم که $1/f$ نویز را می‌توان حاصل برهم‌نهی فرایندهای آرامش (relaxation processes) با طیف گسترده‌ای از ثابت‌های زمانی درنظر گرفت [۱۳]. در مدل ما، غبارها با سازوکار جذب و کاهش میدان، عملاً چنین فرایندهای آرامش متنوعی را معرفی می‌کنند. آنالیزِ موجک به‌دلیل ماهیت خودمتشابه خود، ابزاری ایده‌آل برای تحلیل فرایندهای $1/f$ است [۶].

۳-۳ بحث فیزیکی گذار

نتایج به‌دست آمده را می‌توان در چارچوب نظریه خودسازماندهی بحرانی(SOC) تفسیر کرد. درغیاب غبار، سیستم دارای یک جاذب پریودیک پایدار است. با افزایشی کوچک در میزان چگالی غبار (ρ) اختلالات محلی ناشی از ذرات غبار باعث می‌شود سیستم به سمت یک حالت بحرانی خودسازمانده حرکت کند که در آن نوسانات در همه‌ی مقیاس‌ها ظاهر می‌شوند. این حالت با نویز $1/f$ و پهنای طیف تکینگیِ افزایش‌یافته مشخص می‌گردد. زمانی که چگالی غبار افزایش بیش‌تری می‌یابد$(\rho \approx 0.2)$ برهمکنش قوی بین غبارها و میدان پلاسما منجر به مهار نوسانات و کاهش درجه‌ی آزادی موثر می‌شود که خود را به‌صورت کاهش جزئی در h نشان می‌دهد. چنین رفتاری در سایر سیستم‌های SOC مانند مدل‌های بهمنِ ماسه‌ای دیده شده است [۳]. از این‌رو، آنالیز چندفرکتالی مبتنی بر موجک می‌تواند به‌عنوان یک روش غیرتهاجمی برای تشخیص لحظه‌ی بحرانی در پلاسمای غبارآلود صنعتی و اخترفیزیکی به‌کار رود.

٤ نتیجه‌گیری

در این مطالعه، با ترکیب مدل سلولی تخلیه سد دی‌الکتریک (DBD) و آنالیز موجک، گذار نظم به چندفرکتالیته بررسی شد. افزایش چگالی غبار تا $\rho \approx 0.12$ موجب افزایش پهنای طیف تکینگی و ظهور ساختارهای چندمقیاسی می‌شود. تغییرات Δh حدود ۳٪، همراه با الگوی قله‌گونه و نویز $1/f$ در طیف توان، وقوع گذار فاز را تأیید می‌کند. این نتایج نشان می‌دهد که آنالیز موجک ابزاری توانمند برای پایش گذارهای فاز در پلاسمای غبارآلود است. بررسی تجربی با تزریق غبار می‌تواند اعتبار مدل را تأیید کند.

جدول۱ : پهنای طیف تکینگی(h) برای چگالی‌های مختلف غبار. این مقادیر نشان می‌دهند بیشینه‌ی چندفرکتالیته برای طول سری زمانی ۱۰ و ۵۰ هزار در چگالی میانیِ $\rho = 0.12$ رخ می‌دهد.

چگالی غبار (ρ)	Δh (10k)	Δh (50k)	اختلاف
0.00	0.7694	0.7701	0.0007
0.12	0.7915	0.7918	0.0003
0.20	0.7783	0.7780	0.0003

مرجع‌ها

[1] Shukla, P. K. (2004). "Dusty plasmas: From astrophysics to nanotechnology." *Physica Scripta*, **T113**, pp. 7–10
[2] Hassan, M. K., Asad, M. A. H. M., & Khan, M. H. R. R. (2020). "Multifractal analysis of complex systems." *Fractals*, **28(5)**, 2050123.
[3] Jensen, H. J. (1998). Self-Organized Criticality: Emergent Complex Behavior in Physical and Biological Systems. Cambridge, UK: *Cambridge University Press*.
[۴] Jaffard, S. (2004). "Wavelet leaders and multifractal analysis." *In Proc. SPIE*, vol. **5607**, pp. 71–82.
[۵] Abry, P. (2006). "Wavelet Leaders and Multifractal Analysis." *HAL preprint, ensl*-00195451.
[۶] Mallat, S. (2009). A Wavelet Tour of Signal Processing: The Sparse Way (3rd ed.). Amsterdam, *The Netherlands: Elsevier/Academic Press*.
[۷] Chopard, B., & Droz, M. (1998). Cellular Automata Modeling of Physical Systems. Cambridge, UK: *Cambridge University Press.*
[۸] Adalev, A. S., Hayakawa, M., Korovkin, N. V., Iudin, D. I., & Trakhtengerts, V. Yu. (2007). "Simulation of surface discharge dynamics by means of cellular automata." Journal of *Applied Physics*, **101(8)**, 083304.
[۹] Oliveira, C. L. N., Araújo, N. A. M., Andrade, J. S., & Herrmann, H. J. (2014). "Explosive electric breakdown due to conducting-particle deposition on an insulating substrate." *Physical Review Letters*, **113(15)**, 155701.
[۱۰] Chopard, B., Masselot, A., & Droz, M. (2012). "Cellular automata for reaction-diffusion and pattern formation in discharges." In *Meyers, R. A. (Ed.), Computational Complexity*: *Theory, Techniques, and Applications*, pp. 407–433. New York, **NY**: *Springer*.
[۱۱] Percival, D. B., & Walden, A. T. (2000). Wavelet Methods for Time Series Analysis. Cambridge, *UK: Cambridge University Press*.
[۱۲] Jiang, Y., Zhang, Z., & Li, H. (2022). "Multifractal analysis of dielectric barrier discharge based on wavelet leaders." *Physica A*: Statistical Mechanics and its Applications, **585**, 126436.
[۱۳] A. A. Walma, "1/f noise in physical systems," *Revue de Physique Appliquée*, vol. **15**, no. 12, pp. 1435–1455, 1980.

پایداری فاز فرومغناطیس در مدل آیزینگ میدان-تصادفی با توزیع گاوسی حول صفر

برنجکار دریاسری ، نگار[۱] ؛ دلبری، مطهره[۲]؛ نیری، محمد دهقان[۱]

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

[۲] دانشکده روانشناسی، دانشگاه کارل فون اوسیتزکی اولدنبورگ، آلمان

چکیده

در این پژوهش، پایداری فاز فرومغناطیس در مدل آیزینگ با میدان محلی تصادفی (توزیع گاوسی، میانگین صفر) به کمک شبیه‌سازی مونت‌کارلو بررسی شد. نتایج نشان می‌دهد که با وجود افت‌وخیزهای انرژی آزاد ناشی از بی‌نظمی، فاز فرومغناطیس برای مقادیر محدودی از σ در دماهای نزدیک به صفر مطلق، از نظر ترمودینامیکی در دسترس است. این نتایج پیش‌بینی فرانترا و همکاران، در وجود حالت پایه فرومغناطیس با وجود میدان خارجی را تایید می‌کند و مؤید آن است که بی‌نظمی سیستم منجر به به‌دام افتادن در کمینه‌های موضعی انرژی نمی‌شود و فاز فرومغناطیس، حالت پایه برای سامانه در دسترس است .

واژه های کلیدی: مدل آیزینگ، میدان محلی تصادفی، توزیع گاوسی، فاز فرومغناطیس، روش مونت-کارلو.

Stability of ferromagnetic phase in random-field Ising model with a Gaussian distribution around zero

Berenjkar Daryasari, Negar[1]; Delbari, Motahare[2]; D. Niry, M.[3]

[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan
[2] Department of Psychology, Carl von Ossietzky University of Oldenburg, Germany

Abstract

Using Monte Carlo simulations, we investigate the stability of the ferromagnetic phase in the Ising model under a quenched local random field. We demonstrate that, despite free-energy fluctuations caused by disorder, the ferromagnetic phase remains thermodynamically accessible at low temperatures for finite values of σ. These results confirm the prediction of Frontera et al. regarding the existence of a ferromagnetic ground state in the presence of an external field . These findings also indicate that disorder does not trap the system in metastable local energy minima, implying that the ferromagnetic phase is the accessible ground state of the system.

***Keywords**: Ising model, Local random field, Gaussian distribution, Ferromagnetic phase, Monte Carlo.*

PACS No. 89, 75.10.Nr, 05.40.2a

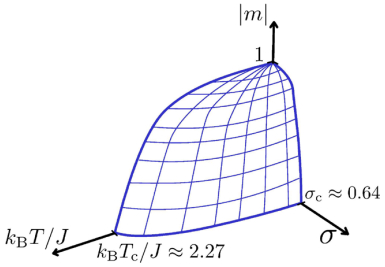
مقدمه

بررسی مدل آیزینگ در حضور میدان خارجی محلی تصادفی یخزده، شاخهٔ گسترده‌ای از پژوهش‌ها را به خود اختصاص داده است. در سال ۱۹٤٤ ایمری و همکاران به شکل تحلیلی نشان دادند که برای مدل آیزینگ در حضور یک میدان خارجی تصادفی، فاز فرومغناطیس برای بعد فضای بیش از دو قابل حصول است. خود دوبعد در این میان دارای شرایط ویژه‌ای است و به وجود آمدن فاز فرومغناطیس در آن تابعی از نوع توزیع تصادفی میدان خارجی است [۱].

فرانترا و همکاران با روش بیشینهٔشار کمینهٔبرش جواب حالت پایه را در دمای صفر استخراج کردند و نشان دادند که با توزیع گاوسی برای میدان خارجی تصادفی با میانگین صفر، برای دامنهٔ میدان کمتر از $\sigma_c \simeq 0.64 \pm 0.08$، فاز فرومغناطیس در حد ترمودینامیک در دمای صفر مطلق وجود دارد [۲].

براساس حل دقیق آنزاگر برای $\sigma = 0$ می‌دانیم که $T_c \simeq 2.27$

وجود دارد که برای دماهای کمتر از آن سامانه به فاز فرومغناطیس می‌رسد [۳]. در نتیجه برای حد $L\to\infty$ رویهٔ شکل۱ برای رفتار قدرمطلق مغناطش در صفحهٔ σ-T متصور است.



شکل۱: شمایی از رویهٔ قدرمطلق مغناطش برحسب دما T و قدرت بی‌نظمی σ برای مدل آیزینگ دوبعدی تحت میدان خارجی تصادفی پخزده با توزیع گاوسی حول صفر در حد ترمودینامیکی. دمای بحرانی $T_c \approx 2.27$، از حل دقیق آنزاگر و $\sigma_c \approx 0.64$، از نتایج عددی فرانترا و همکاران برداشت شده‌است [۲و۳].

با وجود حل عددی فرانترا و همکارن، هنوز جواب این پرسش روشن نیست که آیا فاز فرومغناطیس با سرد کردن سامانه از دماهای زیاد در دسترس می‌ماند یا به دلیل آنتروپی باقی‌مانده این حالت دور از دسترس است؟ در این پژوهش مدل آیزینگ را با روش متروپلیس تحت میدان مغناطیسی تصادفی خارجی با توزیع گاوسی حول صفر شبیه‌سازی و در دسترس بودن فاز فرومغناطیس را برای حد ترمودینامیک با روش مقیاسی بررسی می‌کنیم.

مدل و روش‌ها

هامیلتونی مدل آیزینگ با وجود یک میدان خارجی محلی تصادفی به شکل زیر است:

$$H\left(\{s_i\}\right) = -j\sum_{\langle ij\rangle} s_i s_j - \mu\sum_{i=1}^{N} s_i h_i. \qquad (۱)$$

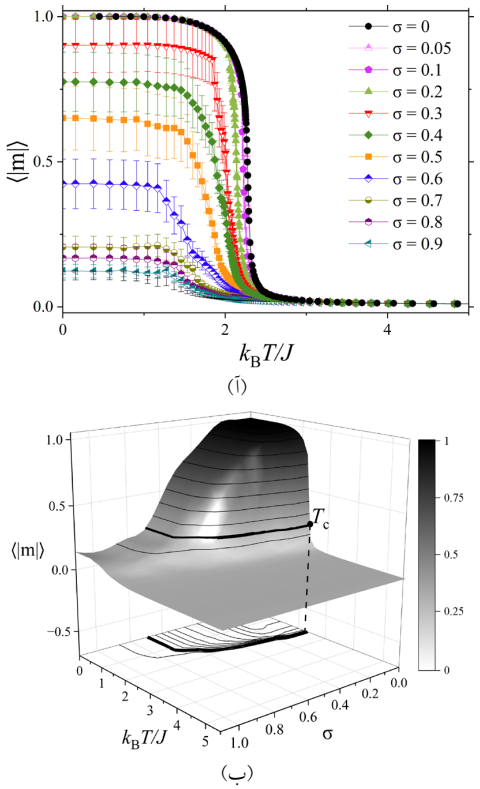
در جمله اول براکت زیر جمع، نشان دهندهٔ جمع‌زدن روی نزدیکترین همسایه‌ها است. در جملهٔ دوم h_i میدان مغناطیسی خارجی محلی در خانهٔ iام است. ضریب برهمکنش تبادلی J، و ممان مغناطیسی الکترون μ در همه شبیه‌سازی‌ها برابر با یک در نظر گرفته‌شده است. میدان مغناطیسی تصادفی h_i از تابعی گاوسی با توزیع احتمال $p(h_i) = e^{-h_i^2/2\sigma^2}/\sigma\sqrt{2\pi}$ با انحراف معیار σ به‌دست می‌آید. N تعداد اسپین‌ها است.

پارامتر نظم مغناطش به صورت مرسوم تعریف شده‌است:

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle s_i\rangle, \qquad (۲)$$

که در آن براکت نشان‌دهنده میانگین‌گیری آماری‌ست. در فاز پارامغناطیس با جهت‌گیری تصادفی اسپین‌ها، مقدار m صفر است. در فاز فرومغناطیس که اسپین‌ها هم‌جهت‌اند، این کمیت مقداری برابر ±1 به خود می‌گیرد.

نتایج

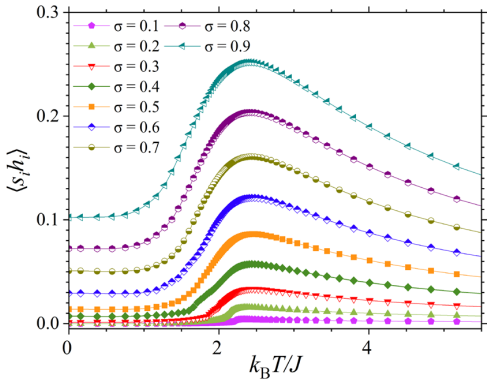


شکل۲ : (آ) میانگین قدرمطلق مغناطش برحسب دمای کاهیده تحت میدان خارجی تصادفی با مقادیر مختلف از دامنهٔ افت‌وخیز σ، برای اندازهٔ شبکه 128×128. خطوط بین نقاط برای راهنمایی چشم‌اند. (ب) رویهٔ قدرمطلق مغناطش برحسب σ و T. منحنی هم‌مغناطش قطور مقدار قدرمطلق مغناطش را در حالت $\sigma = 0$ و $T = T_c$ دنبال می‌کند.

برای شبیه‌سازی مدل از روش مونت-کارلو و الگوریتم متروپلیس استفاده می‌کنیم. در هر نمونه، سامانه از دمای زیاد با شرایط اولیه h_i تصادفی و اسپین‌ها با جهت تصادفی تا نزدیک دمای صفر سرد می‌شود. میدان خارجی تصادفی پخزده است، بنابراین مقدار و جهت h_iها در طی شبیه‌سازی ثابت می‌ماند.

شبکه اسپینی مربعی دوبعدی با شرایط مرزی دوره‌ای است. با وجود ماهیت تصادفی مدل، برای رسیدن به جواب درست فرصت کافی برای واهلش به سامانه دادیم و قدم‌های گسستهٔ‌دمایی را حین عبور از نقطه بحرانی به صورت مقیاسی کوچک کردیم.

شکل۲(آ) رفتار قدرمطلق مغناطش را برحسب دمای کاهیده، برای مقادیر مختلف دامنهٔ افت‌وخیز σ در اندازهٔ $L=128$ نشان می‌دهد. برای $\sigma<0.2$ سیستم در دماهای نزدیک به صفر به فاز منظم فرومغناطیس می‌رسد. با افزایش مقدار σ، فاز فرومغناطیس در سیستم حتی در دماهای نزدیک به صفر ظاهر نمی‌شود. در شکل۲(ب) با درون‌یابی داده‌های شکل۲(آ) به روش رنکا-کلاین، رویهٔ سه‌بعدی قدرمطلق مغناطش برحسب دمای کاهیده و σ به‌دست آمده است. این شکل با رویه پیش‌بینی شده در شکل۱ سازگار است. با این وجود، این رویه برای اندازهٔ محدود $L=128$ به‌دست آمده است و برای نتیجه‌گیری درمورد حد اندازهٔ بی‌نهایت، نیاز به بررسی بیشتر رفتار وابسته به اندازه داریم.



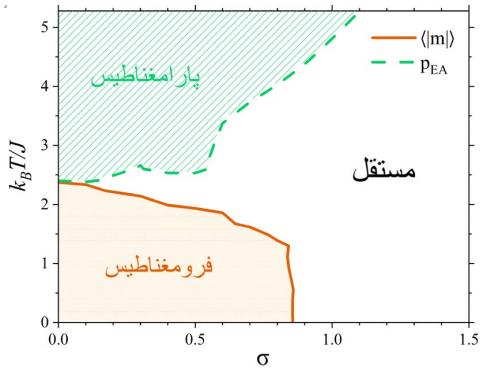
شکل۳: همبستگی اسپین-میدان برحسب دمای کاهیده برای مقادیر مختلف σ، در حضور میدان خارجی تصادفی در شبکهٔ 128×128. خطوط خطا کوچکتر از نمادها است.

برای بررسی اثر میدان مغناطیسی تصادفی بر سیستم، از کمیت همبستگی اسپین-میدان که به صورت زیر تعریف شده،

$$\langle s_i h_i\rangle=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}s_i h_i, \qquad (۳)$$

استفاده می‌شود. وقتی همبستگی اسپین-میدان صفر است یعنی میدان تصادفی بر جهت اسپین اثر ندارد و جهت اسپین تابع جهت نزدیکترین همسایه‌ها و افت‌وخیز گرمایی است. برعکس اگر مقدار همبستگی اسپین-میدان غیر صفر باشد به معنای اثر میدان مغناطیسی محلی بر اسپین است.

شکل۳، تابعیت همبستگی اسپین-میدان برحسب دمای کاهیده را نشان می‌دهد. در دماهای زیاد افت‌وخیز گرمایی بر برهمکنش اسپسن با میدان خارجی موضعی غلبه می‌کند، بنابراین مقدار همبستگی اسپین-میدان کاهش می‌یابد. اگرچه افزایش σ مقدار این کمیت را در دماهای زیاد افزایش می‌دهد. در دماهای نزدیک به صفر افت‌وخیز گرمایی از بین می‌رود. همانطور که از شکل۳ مشخص است، برای مقادیر کم σ برهمکنش با نزدیکترین همسایه‌ها غالب می‌شود در نتیجه همبستگی اسپین-میدان در نزدیک دمای صفر مقدار ناچیزی دارد، اما برای $\sigma>0.2$ مقدار این کمیت غیرصفر است، و با افزایش σ به تدریج افزایش می‌یابد.



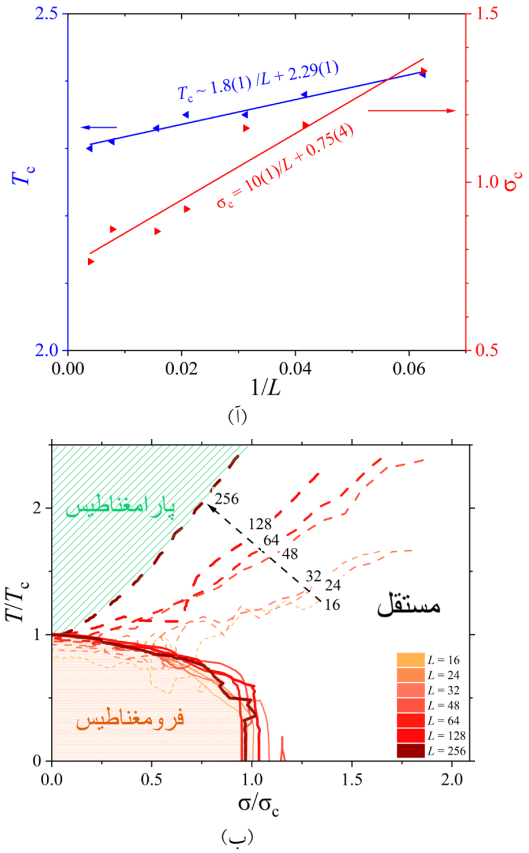
شکل٤: دیاگرام فاز مدل آیزینگ در حضور میدان خارجی تصادفی با توزیع گاوسی حول صفر برای شبکهٔ 128×128. خط پیوسته مرز فاز فرومغناطیس و خط‌چین مرز فاز پارامغناطیس را نشان می‌دهد.

برای تفکیک بین دو فاز پارامغناطیس و مستقل یخزده، از پارامتر نظم ادواردز-اندرسون به صورت

$$p_{EA}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left\langle s_i^{(a)}s_i^{(b)}\right\rangle, \qquad (٤)$$

استفاده می‌کنیم که در آن a و b رپلیکاهای مختلف از سیستم با توزیع یکسان h_i هستند. فرض کردیم که برداشتن تعداد کافی قدم مونت-کارلو بر اسپین، سیستم را به پیکربندی متفاوتی می‌برد، بنابراین از این پیکربندی‌های مونت-کارلو به جای میانگین‌گیری روی رپلیکاهای مختلف استفاده کردیم. اگر مقدار p_{EA} غیرصفر باشد، به معنای ثابت بودن جهت اسپین‌ها در توالی قدم‌های

مونت–کارلو است، که نشانهٔ یخزده بودن است. برعکس اگر کمیت p_{EA} صفر باشد، به معنای افت‌وخیز اسپین‌ها در توالی قدم‌ها است. برای فاز پارامغناطیس مقدار هر دو کمیت p_{EA} و m صفر است. در فاز مستقل، اگرچه به دلیل جهت‌های تصادفی اسپین‌ها مقدار مغناطش صفر است، اما p_{EA} مقداری غیر صفر دارد، که به این معناست که اسپین‌ها در جهت‌های تصادفی یخزده‌اند.



شکل۵: (آ) رفتار σ_c و T_c برحسب $1/L$. خطوط برازش خطی به داده‌ها را نشان می‌دهند. (ب) دیاگرام فاز مقیاس شده مدل آیزینگ در حضور میدان تصادفی گاوسی حول صفر. خطوط پیوسته رفتار قدرمطلق مغناطش و خطوط خطچین رفتار پارامتر ادواردز–اندرسون را در صفحهٔ σ-T نشان می‌دهند.

با استفاده از پارامتر نظم مغناطش و ادواردز–اندرسون می‌توان دیاگرام فازی برای مدل آیزینگ با میدان محلی تصادفی یخزده با تابعیت گاوسی در صفحهٔ σ و T به‌دست آورد، شکل٤. خط پیوسته مرز فاز فرومغناطیس به‌دست آمده از قدرمطلق مغناطش و خط‌چین مرز فاز پارامغناطیس و مستقل به‌دست آمده از p_{EA} است. محل تلاقی منحنی قدرمطلق مغناطش با محور افقی $T=0$ را σ_c می‌نامیم.

با رسم دیاگرام فاز مانند شکل٤ برای بقیهٔ اندازه‌ها، می‌توان مقدار σ_c را از هر دیاگرام برای هر اندازه به طور تخمینی به‌دست آورد شکل۵(آ) رفتار σ_c و T_c را برحسب $1/L$ نشان می‌دهد. از برازش خطی به داده‌های این شکل برای حد $L\to\infty$ مقادیر تقریبی $\sigma_c \simeq 0.75(4)$ و $T_c \simeq 2.29(1)$ به‌دست آمده است. مقدار σ_c که در اینجا به‌دست آمده با مقدار $\sigma_c \simeq 0.64 \pm 0.08$ گزارش شده توسط فرانترا وهمکاران، در محدودهٔ خطا همخوانی خوبی دارد [۲].

با استفاده از σ_c و T_cهای به‌دست آمده دیاگرام‌های فاز مربوط به هر اندازهٔ شبکه را مقیاس کردیم که در شکل۵(ب) گزارش شده است. با توجه به شکل، منحنی‌های به‌دست آمده از قدرمطلق مغناطش به خوبی رمبیده اند، اما ظاهرا منحنی‌های مستخرج از پارامترنظم p_{EA} که مرز فاز پارامغناطیس را مشخص می‌کنند از قوانین مقیاسی مشابهی پیروی نمی‌کنند.

بحث و نتیجه‌گیری

در این پژوهش با استفاده از روش مونت–کارلو و سردکردن سیستم تا دماهای نزدیک به صفر نشان دادیم که در حد $L\to\infty$، $\sigma_c \simeq 0.75(4)$ وجود دارد که به ازای σهای کمتر از آن فاز فرومغناطیس در دماهای کم در دسترس است. این مقدار حدی با نتایج فرانترا و همکاران ($\sigma_c \simeq 0.64 \pm 0.08$) همخوانی دارد [۲]. با توجه به این همخوانی، می‌توان ادعا کرد که فاز فرومغناطیس که به عنوان حالت پایه در دمای صفر مطلق معرفی شده، از نظر ترمودینامیکی برای سامانه در دسترس است و وجود بی‌نظمی و افت‌وخیزها در انرژی آزاد سبب به دام افتادن سیستم در کمینه‌های موضعی و عدم دسترسی به آن نمی‌شود.

مرجع‌ها

[۱] Imry, Yoseph, and Shang-keng Ma. "Random-field instability of the ordered state of continuous symmetry." *Physical Review Letters* **35.21** (1975): 1399.
[۲] Frontera, Carlos, and Eduard Vives. "Numerical signs for a transition in the two-dimensional random field Ising model at T= 0." *Physical Review E* **59.2** (1999): R1295.
[۳] Onsager, Lars. "Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition." *Physical review* **65.3-4** (1944): 117.

دینامیک بحرانی سامانه‌های دوفازی

سهرابی ، شبنم[۱] ؛ جعفرپور همدانی، فرهاد[۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه بوعلی سینا، خیابان شهید فهمیده، همدان

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه بوعلی سینا همدان

چکیده

ما انحرافات بزرگ جریان زمان‌تجمعی را برای یک ذره خودران در محیطی محصور بررسی می‌کنیم. دینامیک سیستم به صورت یک فرایند شبه‌مارکوفی مدل می‌شود که گذار بین دو فاز توسط احتمال‌های بازنشانی وابسته به زمان کنترل می‌شود. با تحلیل تابع مولد تجمعی مقیاس‌یافته در حد زمان‌های طولانی، شرایط وقوع گذار فاز دینامیکی در افت و خیزهای سرعت به‌دست می‌آید. نتایج نشان می‌دهد بسته به شدت پیری، گذارها می‌توانند مرتبه اول یا دوم باشند و این پیش‌بینی‌ها با شبیه‌سازی‌های عددی تأیید شده‌اند.

واژه های کلیدی: *ذره خودران، دینامیک شبه‌مارکوفی، نظریه انحراف بزرگ، گذار فاز دینامیکی، شبیه‌سازی کلونینگ تصادفی*

Critical Dynamics of Two-Phase Systems

Sohrabi, Shabnam [1]; H Jafarpour, Farhad[2]

Department of Science, Bu-Ali Sina University, Hamedan

Abstract

We study the large deviations of the time-integrated current for a self-propelled particle moving in a confined environment. The system dynamics is modeled as a semi-Markovian process in which the transitions between tow phases are controlled by time-dependent reset probabilities. By analyzing the scaled cumulant generating function in the long-time limit, we obtain the conditions for dynamical phase transitions in the fluctuations of the particle velocity. The results show that, depending on the aging strength, the transitions can be either first-order or second-order, and these predictions are confirmed by numerical simulations.

***Keywords**: self-propelled particle, semi-Markovian dynamics, large deviations theory, dynamical phase transition, stochastic cloning simulation*

PACS No. *05.40.-a, 02.50.Ga, 05.70.Ln, 64.60.De, 05.10.Ln*

مقدمه

۳]؛ به این معنا که احتمال باقی‌ماندن در یک فاز یا گذار به فاز دیگر به مدت زمانی که ذره تا آن لحظه در آن فاز سپری کرده است وابسته است. ما دو مدل ساده برای بررسی اثر پیری و بازنشانی‌های وابسته به زمان را بررسی می‌کنیم. در مدل نخست، ذره بین یک فاز حرکتی جهت‌دار و یک فاز ساکن متصل به دیواره

جابجا می‌شود. در مدل دوم، که الهام‌گرفته از رئوتاکسی است، ذره به‌صورت متناوب میان دو فاز فعال با جهت‌گیری‌های مخالف جابجا می‌شود؛ فاز نخست یک فرایند بدون حافظه در جهت جریان را توصیف می‌کند، در حالی که فاز دوم دارای ماهیت نیمه‌مارکوفی بوده و حرکت در خلاف جهت جریان را مدل‌سازی می‌کند. هدف اصلی، بررسی تأثیر این سازوکارها بر افت‌وخیزهای جابجایی ذره در چهارچوب نظریه انحرافات بزرگ است[۴،۵]. نتایج نشان می‌دهد که بسته به شدت پیری، سیستم می‌تواند گذارهای فاز دینامیکی مرتبه اول و دوم را تجربه کند و در برخی شرایط، حافظه سیستم به تغییرات کیفی مهمی در رفتار دینامیکی آن منجر شود.

مدل

در این کار، دو مدل ساده برای بررسی اثر پیری و بازنشانی نیمه‌مارکوفی بر دینامیک یک ذره خودران در محیط محصور مطالعه می‌شوند. هدف اصلی، بررسی تأثیر وابستگی نرخ بازنشانی به زمان اقامت در هر فاز بر رفتار بلندمدت و افت‌وخیزهای جابه‌جایی ذره است. در مدل اول، ذره بین دو فاز جابه‌جا می‌شود. در فاز اول یک گشت تصادفی جهت‌دار انجام می‌دهد و در فاز دوم به دیواره متصل شده و ساکن است. در این مدل احتمال خروج از هر فاز به مدت زمان حضور ذره در آن فاز وابسته است؛ بنابراین سیستم دارای حافظه بوده و با افزایش اثر پیری، زمان‌های اقامت طولانی‌تر و دنباله‌سنگین می‌شوند. نتایج نشان می‌دهد که بسته به شدت پیری، گذارهای فاز دینامیکی مرتبه اول و دوم در افت‌وخیزهای جابه‌جایی ظاهر می‌شوند. در این مدل تقارن گالاووتی–کوهن همچنان برقرار است.

در مدل دوم، هر دو فاز فعال هستند. فاز اول حرکت بدون حافظه در جهت جریان را توصیف می‌کند و فاز دوم حرکت در نزدیکی دیواره و در خلاف جهت جریان را نمایش می‌دهد. تنها فاز دوم دارای حافظه است؛ به این معنا که با افزایش زمان اقامت در نزدیکی دیواره، احتمال خروج از آن کاهش می‌یابد. این ویژگی از پدیده به‌دام‌افتادگی هیدرودینامیکی میکروشناگرها در نزدیکی سطوح الهام گرفته شده است. همانند مدل اول، گذارهای فاز دینامیکی مرتبه اول و دوم مشاهده می‌شوند، اما در اینجا حافظه تنها یکی از جهت‌های حرکت را تقویت می‌کند. در نتیجه تقارن گالاووتی–کوهن شکسته شده و سیستم می‌تواند وارد حالت خواب‌رفتگی دینامیکی شود. تفاوت اساسی دو مدل در این است که در مدل اول حافظه مدت زمان حرکت و سکون را کنترل می‌کند، در حالی که در مدل دوم حافظه یکی از جهت‌های حرکت را تقویت کرده و رفتارهای دینامیکی غنی‌تری را به وجود می‌آورد.

روابط ریاضی

تابع مولد جریان برای مدل اول یک بخش شامل گام متوالی در فاز ۰(گشت تصادفی) و فاز ۱(چسبیده به دیوار) به ترتیب می‌شود:

$$W_0(s,t)=\left(pe^{s}+qe^{-s}\right)^{t-1}r(t)\prod_{i=1}^{t-1}\left(1-r(i)\right) \qquad (۱)$$

$$W_1(s,t)=\left(1-r(t)\right)\prod_{i=1}^{t-1}r(i) \qquad (۲)$$

که در آن $p(q=1-p)$ احتمال پرش روبه‌جلو (و روبه‌عقب) است و $r(i)$ احتمال بازنشانی به فاز ۱ (حالت چسبیده به دیوار) در زمان است. مطابق [۶] احتمال بازنشانی وابسته به زمان(پیری) به شکل:

$$r(t)=\frac{a}{b+t} \qquad t=1,2,3,... \qquad (۳)$$

در نظر گرفته می‌شود، برای $0<a<b+1$ احتمال بازنشانی همیشه کمتر از یک است. توزیع هندسی ناهمگن زمان‌های اقامت در فاز ۰ و ۱ شرط بهنجارش را برآورده می‌کنند. تبدیل لاپلاس توابع (۱) و (۲) فرم بسته دارند:

$$\tilde{W}_0(s,z)=\frac{a\,{}_2F_1\left(1,1-a+b,2+b;\frac{pe^{s}+qe^{-s}}{z}\right)}{z(1+b)} \qquad (۴)$$

$$\tilde{W}_1(s,z)=\frac{e^{\frac{a}{z}}\left((1-z)\Gamma(1+b)-b\Gamma\left(b,\frac{a}{z}\right)+z\left(1+b,\frac{a}{z}\right)\right)}{z\left(\frac{a}{z}\right)^z} \quad (۵)$$

برای محاسبه تابع مولد فرایند ترکیبی از رویکرد پولند–شراگا در مطالعه واسرشت DNA [۷]، استفاده می‌کنیم. وتبدیل لاپلاس تابع مولد فرایند مرکب به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\tilde{G}(s,z)=\sum_{t=1}^{\infty}G(s,t)z^{-t} =\frac{\tilde{W}_0(s,z)+\tilde{W}_1(s,z)+2\tilde{W}_0(s,z)\tilde{W}_1(s,z)}{1-\tilde{W}_0(s,z)\tilde{W}_1(s,z)} \quad (۶)$$

تابع مولد تجمعی مقیاس‌یافته SCGF یعنی $\Lambda(s)$ توسط بزرگترین ریشه حقیقی $z^*(s)$ از مخرج تعیین می‌شود:

$$\tilde{W}_0(s,z)\tilde{W}_1(s,z)=1 \quad (۷)$$

گذار فاز دینامیکی زمانی رخ می‌دهد که برای مقدار از s در $z^*(s)$ به نقطه مرزی همگرایی $z_c(s)$ تابع $\tilde{W}_0(s,z)$ برسد که به صورت $z_c(s)=pe^{s}+qe^{-s}$ است. توجه داشته باشید که $\tilde{W}_1(s,z)$ همیشه همگراست. برای پیش‌بینی وجود گذارهای فاز دینامیکی در افت و خیزهای دینامیکی مشاهده‌پذیر، حد زمان بزرگ (۱) را بررسی می‌کنیم:

$$W_0(s,t)\sim\frac{\left(pe^{s}+qe^{-s}\right)^t}{t^{a+1}} \quad (۸)$$

با مقایسه نتیجه فوق با نتایج مدل پولند–شراگا درمی‌یابیم که بسته به مقدار شدت پیری a، ممکن است یک گذار فاز دینامیکی رخ بدهد. از رابطه (۸) نتیجه می‌گیریم که برای $0<a\le 1$ دو گذار فاز دینامیکی مرتبه دوم در $s_c^{(2)}=0$ p $_c^{(1)}=$ [qhls] رخ می‌دهد. برای $1<a<b+1$ دو گذار فاز دینامیکی مرتبه اول در همان نقاط بحرانی اتفاق می‌افتد. نکته مهم این است که یکی از نقاط بحرانی در $s=0$ قرار دارد، بنابراین رفتار بحرانی در دینامیک طبیعی و بدون جهت‌گیری سیستم قابل مشاهده است.

میانگین زمان اقامت در فاز۱ با شرط ثابت بودن سرعت را بررسی کنیم. برای این منظور علاوه بر میدان جهت‌گیری s یک میدان جهت‌گیری جدید k معرفی می‌شود. که زمان سپری شدن در فاز غیر فعال را شمارش می‌کند. بنابراین رابطه (۲) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$W_0(s,k,t)=e^{(t-1)k}\left(1-r(t)\right)\prod_{i=1}^{t-1}r(t) \quad (۹)$$

برای مقادیر $1<a<b+1$ سیستم دارای دو گذار فاز دینامیکی مرتبه اول است. نتایج نشان می‌دهد که برای $s=+0.2$ ذره در فاز حرکتی قرار دارد و تقریباً هرگز وارد فاز۱ نمی‌شود؛ بنابراین زمان اقامت معمول در فاز۱ صفر است. اما برای $s=-0.2$ سیستم وارد فاز آمیخته می‌شود که در آن هر دو فاز در دینامیک ذره نقش دارند. این نتایج وجود همزیستی فازها و ماهیت مرتبه اول گذارهای دینامیکی را تأیید می‌کند.

در مدل دوم احتمال بقا در فاز۱ برای زمان‌های بزرگ که رفتار دنباله‌سنگین دارد به صورت توانی کاهش می‌یابد:

$$P_{surv}^{(1)}\sim t^{-a} \quad (۱۰)$$

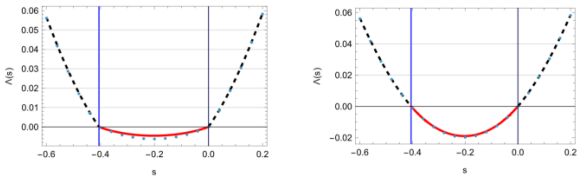
که بیانگر اثر پیری است و برای $a>1$ باعث واگرایی در زمان میانگین اقامت می‌شود. در نظریه انحرافات بزرگ، دو گذار فاز دینامیکی در نقاط بحرانی زیر رخ می‌دهد:

$$s_c^{(1)}=0 \quad n \quad {}_c^{(2)}=\frac{1}{2}\,ls\left[\frac{p(p-q+rq)}{q(q-p+rp)}\right] \quad (۱۱)$$

نتایج نشان می‌دهد که بسته به شدت پیری، گذارهای فاز دینامیکی مرتبه اول و دوم در سیستم ظاهر می‌شوند. همچنین حافظه باعث افزایش پایداری فاز حرکت خلاف جریان شده و در برخی شرایط ذره برای زمان‌های بسیار طولانی در این فاز باقی می‌ماند که به حالت خواب‌رفتگی منجر می‌شود. برخلاف مدل اول، تقارن گالاووتی–کوهن شکسته می‌شود و سیستم می‌تواند گذار بازگشتی را نیز تجربه کند.

نتایج عددی و شبیه‌سازی

در این بخش نتایج عددی و شبیه‌سازی برای تابع مولد کیومولنت مقیاس‌بندی شده مدل اول تحلیل می‌کنیم.



شکل۱. تابع مولد تجمعی مقیاس‌یافته برای مدل اول. خط‌چین مشکی خط قرمز از حل معادله (۷) است، و نقطه‌چین $\Lambda(s)=\ln\left(pe^{s}+qe^{-s}\right)$ آبی نتایج حاصل از شبیه‌سازی ***کلونیگ*** تصادفی را نمایش می‌دهد. شکل سمت راست: $a=0.6$ و شکل سمت چپ: $a=1.5$.

در شکل ۱، تابع مولد تجمعی مقیاس‌یافته برای دو مقدار مختلف شدت پیری a نمایش داده شده است. نتایج نشان می‌دهد که برای $a=0.6$ تابع SCGF هموار و مشتق‌پذیر است که بیانگر گذار فاز دینامیکی مرتبه دوم است، در حالی که برای $a=1.5$ در نقاط بحرانی، ناپیوستگی در شیب مشاهده می‌شود که نشان‌دهنده گذار مرتبه اول است. همچنین مقایسه با شبیه‌سازی‌های کلونی تصادفی توافق بسیار خوبی با نتایج تحلیلی نشان می‌دهد و مکان نقاط بحرانی را به‌درستی بازتولید می‌کند. نکته مهم این است که یکی از نقاط بحرانی همواره در $s=0$ قرار دارد، بنابراین رفتار بحرانی مستقیماً در دینامیک طبیعی و بدون جهت‌گیری سیستم قابل مشاهده است.

نتیجه گیری

این مقاله رویکردی را که نخستین بار در [۷] معرفی شده بود تعمیم می‌دهد تا اثرات بازنشانی و وقوع گذارهای فاز دینامیکی را در سامانه‌های تصادفی دوحالته با دینامیک ناهمگن زمانی، از دیدگاه انحرافات بزرگ بررسی کند. ما نشان دادیم که بازنشانی ناهمگن زمانی نیز می‌تواند در چنین سامانه‌هایی موجب بروز گذار فاز دینامیکی شود. این موضوع از طریق دو مثال مفصل نشان داده شد. نکته قابل توجه این است که مشاهده کردیم بسته به شدت پیری، هر دو نوع گذار فاز دینامیکی پیوسته (مرتبه دوم) و ناپیوسته (مرتبه اول) می‌توانند در میدان جهت‌گیری صفر رخ دهند. این یافته نشان می‌دهد که تنها بازنشانی وابسته به زمان، حتی بدون وجود جهت‌گیری خارجی، برای تغییر اساسی رفتار افت و خیزها کافی است.

مرجع‌ها

[۱] Du H, Xu W, Zhang Z and Han X; “Bacterial behavior in confined spaces Front”; *Cell Dev. Biol.* (2021) **9** 629820
[۲] Kantsler V,Dunkel J, Blayney M and Goldstein R E; “Rheotaxis facilitates upstream navigation of mammalian sperm cells”; *eLife.* (2014) **3** e02403
[۳] Evans M R, Majumdar S N and Schehr G; “Stochastic resetting and applications”; *J. Phys. A: Math. Theor.* (2020) **53** 193001
[۴] Touchette H; “The large deviation approach to statistical mechanics”; *Phys. Rep.* (2009) **478** 1–69
[۵] Burenev I N, Cloete D W H, Kharbanda V and Touchette H; “An introduction to large deviations with applications in physics”; *SciPost Phys.* (2025) Lect. Notes **104**
[۶] Korabel N, Waigh T A, Fedotov S and Allan V J; “Non-Markovian intracellular transport with sub-diffusion and run-length dependent detachment rate”; (2018) *PLoS One* **13** e0207436
[۷] Harris R J and Touchette H; “Phase transitions in large deviations of reset processes”; (2017) *J. Phys. A: Math. Theor.* **50** 10LT01

شناسایی فاز توپولوژیک در مدل‌های GXY با استفاده از روش بدون نظارت و مبتنی بر ریخت‌شناسی

یوسف زاده، مهدی[۱]؛ خالدی‌پور، محمد[۱]؛ موحد، سید محمدصادق [۱]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی، ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱، تهران، ایران

چکیده

در این تحقیق با استفاده از خواص مبتنی بر ریخت‌شناسی به طبقه‌بندی گذارهای فاز در مدل GXY می‌پردازیم. برای این منظور با بکاربردن نگاشت مناسب، پیکربندی مدل GXY را به یک میدان اسکالرِ دوبُعدی از جهت‌مندی شبکه اسپینی، تبدیل می‌کنیم. یک تابع پیش‌پردازش وابسته به q جدید پیشنهاد می‌کنیم که به طور موثری گردابه‌ها و نقص‌های نماتیک را آشکار می‌سازد. با استفاده از شبیه‌سازی و اعمال تحلیل مؤلفه‌های اصلی بر روی تابعی‌های بهنجارشده، ویژگی‌های اصلی ریخت‌شناسی به عنوان پارامترهای نظم مؤثر استخراج می‌شوند. تحلیل مقیاس‌بندی اندازه محدود بر روی این شاخص‌های ریخت‌شناسی، دماهای بحرانی و نماهای مقیاس‌بندی را به خوبی بدست می‌دهد. در نهایت، نمودارهای فاز در صفحه (T, Δ) برای مقادیر مختلف q، بدست آوردیم که در آن فازهای متعارف و نماتیک بر حسب متغیرهای خارجی به خوبی شناسایی می‌شود.

واژه های کلیدی: *گذار فاز توپولوژیک، مدل GXY، ریخت‌شناسی، تابعی‌های مینکوفسکی*

Identification of Topological phase in GXY through Morphology-Based Unsupervised method

Yousefzadeh , Mehdi[۱] ; Khaledipour, Mohammad[۱]; Movahed , Seyed Mohammad Sadegh [۱]

[۱]*Department of Physics, Shahid Beheshti University, ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱, Tehran, Iran*

Abstract

In this study, we classify phase transitions in the GXY model using morphology-based properties. To this end, by employing a suitable mapping, we transform the configuration of the GXY model into a two-dimensional scalar field representing the spin lattice orientation. We propose a novel q-dependent preprocessing function that effectively reveals vortices and nematic defects. By utilizing simulations and applying Principal Component Analysis (PCA) to the normalized functionals, the principal morphological features are extracted as effective order parameters. Finite-size scaling analysis of these morphological descriptors accurately yields the critical temperatures and scaling exponents. Finally, we obtained phase diagrams in the (T, Δ) plane for various values of q, in which the conventional and nematic phases are clearly identified in terms of external variables.

Keywords: *Topological phase transition, GXY model, Morphology, Minkowski functionals.*
PACS No. 5

مقدمه

در یک سامانه بس‌ذره‌ای شامل زیرواحدهای برهم‌کنش‌کننده غیرخطی، انتظار می‌رود با تغییر یک یا چند متغیر خارجی، گذار فاز داشته باشند. هر یک از این فازهای نوظهور با یک یا چند پارامتر نظم مشخص می‌شود[۱و۲]. گذارهای بحرانی شامل گذارهای پیوسته و گسسته در حوزه‌های مختلفی مانند بیوفیزیک [۳] بازارهای مالی[۴] و علوم شناختی [۵]، و زیست بوم خود را نشان می‌دهد. به منظور مطالعه گذارهای موجود در این سامانه‌ها، مدل‌های نظری متعددی پیشنهاد شده است. از جمله یک مثال بارز، مدل XY است که حالت خاصی از مدل برداری n-گانه استنلی با n=۲ است [۶]، این مدل هیچ واگرایی در مشتقات انرژی آزاد، نشان نمی‌دهد. در عوض، دچار نوع متفاوتی از گذار به نام گذار برزینسکی-کوسترلیتز-تجلس (BKT)، می‌شود و می‌توان آن را ناشی از باز شدن جفت‌های نقص توپولوژی (گردابه) در نظر گرفت [۷]. شناسایی این مکانیسم نظم-بی‌نظمی پنهان با ابزارهای ترمودینامیکی معمول مانند مغناطش و گرمای ویژه قابل ردیابی نیست. مطالعات اخیر نشان داده‌اند که ویژگی‌های توپولوژی فضای پیکربندی (مانند همولوژی مداومت) می‌توانند به عنوان شاخص‌های گذار فاز در مدل‌هایی نظیر XY و Ising عمل کنند و نظم پنهان سیستم را آشکار سازند [۸،۹]. فقدان روش‌های تحلیلی دقیق برای حل تابع پارش و در نتیجه استخراج انرژی آزاد و کمیت‌های ترمودینامیکی، برای این دسته از سامانه‌های که دارای برهمکنش هستند از یک سو و از سویی دیگر آهستگی بحرانی، باعث شده‌است که مقادیر دقیق گذار فاز و کمیت‌های وابسته تحت مناقشه باشد. لذا محققان تلاش می‌کنند که از طریق رویکردهای مبتنی بر معیار، در خصوص فاز، توصیف بهتری بدست آورند. معرفی پارامترهای نظم جدید نیز می‌تواند به شناخت بهتر گذارها خصوصاً گذارهای توپولوژی کمک کند. به عنوان نمونه، رودریگز-نیوا و شوئر (۲۰۱۹) با بهره‌گیری از یادگیری ماشین بدون نظارت و روش

نقشه‌های پخش، موفق به شناسایی دقیق گذار BKT در مدل XY شدند [۱۰]. با این وجود، هنوز یک چارچوب جامع مبتنی بر ویژگی‌های ریخت‌شناسی برای طبقه‌بندی فازهای پیچیده‌تر نماتیک در مدل تعمیم‌یافته (GXY) توسعه نیافته است. به همین منظور ما در این تحقیق با توجه به اینکه ماهیت گذار فاز در مدل GXY، با اتخاذ رویکرد مبتنی بر هندسه انتگرالی و تلفیق آن با روش یادگیری ماشین، تلاش می‌کنیم که خط‌مشی بهینه‌ای برای شناسایی فاز در این مدل، معرفی کنیم. کمی‌سازی شکل، اندازه، جهت‌گیری و اتصال‌پذیری در قالب قضیه هادویگر، ریخت هر شکل محدب d–بعدی می‌تواند به صورت یکتا به عنوان ترکیب خطی از d+۱ تابعی مینکوفسکی نمایش داده شود [۱۱]. به بیانی دیگر، این تابعی‌ها می‌توانند ریخت یک میدان را کمی کنند [۱۲،۱۳]. در سال‌های اخیر، استفاده از یادگیری ماشین برای طبقه‌بندی گذارهای فاز مورد توجه قرار گرفته است [۱۴،۱۵]. همزمان، معیارهای هندسی و توپولوژی دیدگاه‌های نوینی ارائه کرده‌اند [۱۶،۱۷]. هدف اصلی این پژوهش، معرفی یک ویژگی جدید مبتنی بر ریخت است که بتواند گذارهای فاز را بدون پیش‌فرض‌های قبلی و با دانش محدود شناسایی کند [۱۸] در این پژوهش نشان خواهیم داد که چگونه ترکیب هندسه انتگرالی با یک روش پیش‌پردازش مناسب می‌تواند گذارهای توپولوژی و فازهای نماتیک را در مدل‌های تعمیم‌یافته XY آشکار سازد.

شبیه‌سازی مدل GXY

مدل XY تعمیم‌یافته (GXY) با افزودن جملات اضافی به هامیلتونی مدل کلاسیک، بستری برای ظهور دیاگرام‌های فاز پیچیده‌تر و پدیده‌های بحرانی جدید فراهم می‌کند. این مدل شامل جفت‌شدگی‌های نماتیک یا هارمونیک‌های مراتب بالاتر است که منجر به فازهای منظم چندگانه می‌شود[۱۹].

هامیلتونی برای چنین مدلی به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۰]:

$$H(q,\Delta) = -\sum_{\langle i,j \rangle}\left[\Delta\cos(\phi_i-\phi_j)+(1-\Delta)\cos(q\phi_i-q\phi_j)\right] \quad (۱)$$

در این رابطه، $\Delta = ۱$ (یا معادل آن $q = ۱$) مدل استاندارد XY (PXY) را بازتولید می‌کند، در حالی که $\Delta = ۰$ مربوط به یک مدل اسپین–نماتیک خالص است. حضور جمله نماتیک $cos(q\phi i - q\phi j)$ منجر به تحریکات کسری، مانند گردابه‌های نیمه–صحیح برای $q = ۲$ می‌شود که تحت تبدیل $\theta + ۲\pi/q \to \theta$ ناوردا هستند [۱۹]. به منظور شبیه‌سازی پیکربندی این مدل در دو بُعد، از الگوریتم متروپلیس برای تولید داده‌های نمونه در ۵۰ نقطه دمایی با فواصل مساوی (از دمای پایین تا بالا) استفاده می‌کنیم و در هر نقطه ۱۰۰۰ تحقق در اندازه های L معادل با ۱۲۸, ۹۶, ۶۴, ۴۸, ۳۲ تولید می‌کنیم. در هر خانک میدان دو بُعدی مقدار ϕ که یک عددی بین صفر تا 2π است، بدست می‌آید. از آنجا که قصد داریم خواص ریخت‌شناسی این پیکربندی را محاسبه کنیم نیاز داریم که یک میدان اسکالر بسازیم. این میدان اسکالر را با روش پیش‌پردازش نوین که بر پایه محاسبه کمترین اختلاف زاویه بین جهت‌گیری اسپین‌های همسایه بنا شده است به یک میدان اسکالر دوبُعدی تبدیل می‌کنیم [۸]. این رویکرد با در نظر گرفتن تفاوت‌های سیستم، به یک تابع نگاشت وابسته به پارامتر q منجر می‌شود که قادر است به طور کارآمد ساختارهای توپولوژی و الگوهای نماتیک را در قالب یک میدان اسکالر دوبُعدی، بدست دهد. ما این میدان را با $\delta(\vec{r},T):\{\delta,x,y,T\in\Re\}$، نشان می‌دهیم. در اینجا $\delta(\vec{r},T)$ نماینده مقدار جهت‌گیری اسپین در هر نقطه و در هر دما است. کمیت آستانه را به صورت $\nu \equiv \left(\delta(\vec{r},T)-\langle\delta(\vec{r},T)\rangle\right)/\sigma(T)$، تعریف می‌کنیم که در آن $\sigma(T)=\left\langle\left(\delta(\vec{r},T)-\langle\delta(\vec{r},T)\rangle\right)^2\right\rangle$ است. شبیه‌سازی‌ها برای ۱۵ مقدار متمایز پارامتر ناهمسانگردی Δ در بازه [۰, ۱] انجام می‌دهیم. برای بررسی تأثیر درجات آزادی مختلف، شبیه‌سازی‌ها به طور خاص برای مقادیر q=۱ (معادل PXY)، q=۲ و q=٤ صورت گرفت. علاوه بر این، برای تعیین دمای بحرانی (Tc) در حد ترمودینامیک، از رفتار مقیاس‌بندی اندازه محدود $T_c(L)-T_c(\infty)\propto \ln(L)^{-1/\vartheta}$، که در آن L اندازه نمونه است، استفاده می‌کنیم [۲۱].

ریخت‌شناسی با بررسی تابعی‌های مینکوفسکی

ریخت یک سامانه عبارت است از شکل، ساختار و نحوه توزیع فضایی آن [۱۳]. به منظور تعریف ریخت سامانه در فضای D بُعدی، نگاشت $\mathfrak{F}^{d+D}: \mathrm{R^D} \to \mathrm{R^d}$ را در نظر بگیرید. اگر $\mathrm{X^{(D)}}$ نمایانگر مختصات مستقل D بُعدی باشد، پس مجموعه‌های گشت برای مولفه nام میدان $\mathfrak{F}^{D+d}$ عبارت است از:

$$\xi_{\mathfrak{F}}^{(n,D)}:\left\{\xi_{\mathfrak{F}}^{(n,D)}\left(\vartheta^{(n)},i\right), i\in \mathrm{N^D}\right\}: \quad (۲)$$
$$\left\{\mathrm{X^{(D)}}\in \mathrm{R^D}\,\middle|\,\mathfrak{F}^{D+d}(\mathrm{X^{(D)}}) \geq \vartheta^{(n)}\,\sigma_{\cdot}^{(n)}\right\}$$

در این عبارت، $\xi_{\mathfrak{F}}^{(n,D)}(\vartheta^{(n)},i)$ نمایانگر مجموعه‌ای از متغیرهای مستقل D بُعدی است که به ازای آن‌ها مولفه nاُم $\mathfrak{F}$ در شرط $\mathfrak{F}^{d+D} \geq \vartheta^{(n)}\,\sigma_{\cdot}^{(n)}$ صدق می‌کند که در آن $\sigma_{\cdot}^{(n)}$ نیز انحراف از معیار کل میدان برای مولفه nاُم می‌باشد؛ به عبارت دیگر، ریخت سامانه شامل شکل، ساختار و نحوه توزیع فضایی آن است[۱]. بدین ترتیب تابعی‌های مینکوفسکی بدین صورت تعریف می‌شوند:

$$V_{\cdot}^{(n,D)}(\vartheta^{(n)}) = \frac{1}{|W(\mathrm{X}^{(D)})|}\int_{\xi_{\mathfrak{F}}^{(n,D)}(\vartheta^{(n)})} dX^{(D)} \qquad (۳)$$

$$V_{k}^{(n,D)}(\vartheta^{(n)}) = \frac{1}{|W(\mathrm{X}^{(D)})|}\int_{\partial\xi_{\mathfrak{F}}^{(n,D)}(\vartheta^{(n)})} v_{k}^{(n,D)}\, dl^{(D)}$$

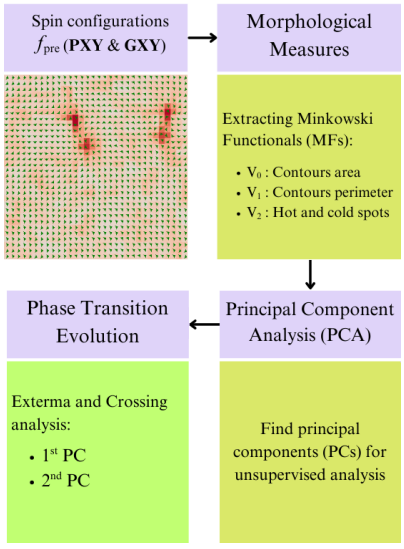
که در آن $W(\mathrm{X}^{(D)})$ نمایانگر حجم کل میدان $\mathfrak{F}$، $dX^{(D)}$ المان حجم D بُعدی در مجموعه‌های گشت و $dl^{(D)}$ المان طول D بُعدی در طول مرز مجموعه‌های گشت، $\partial\xi_{\mathfrak{F}}^{(n,D)}(\vartheta^{(n)})$، است. $v_{k}^{(n,D)}$ نیز حاوی اطلاعات مربوط به انحنای ساختار است:

$$v_{k}^{(n,D)} \equiv \frac{1}{\omega_k\, D}\, K_{k-1}^{(n,D)}, \qquad \omega_k \equiv \frac{\pi^{k/2}}{\Gamma\left(\frac{k}{2}+1\right)} \qquad (۴)$$

در این معادله $K_{k-1}^{(n,D)}$ انحنای ساختار است که برای حالت $D=2$، $K_{\cdot}^{(n,2)}=1$ و $K_{2}^{(n,2)}=\kappa_n$ است که κ_n همان انحنای ژئودزیک[۱] است.

تابعی مینکوفسکی صفرم، $V_0(T,\nu)$، مساحت نواحی پوشش داده شده مجموعه گشت را نشان می‌دهد. تابعی مینکوفسکی اول، $V_1(T,\nu)$، محیط مرزهای مجموعه گشت و $V_2(T,\nu)$ مشخصه اویلر که ویژگی توپولوژی میدان شبیه‌سازی شده است را نشان می‌دهد [۱۳].

ما در این تحقیق برای هر دمای داده‌شده، توابعی مینکوفسکی را برای شکل پیکربندی مدل GXY، محاسبه می‌کنیم. در شکل ۱ روند کلی پژوهش شامل شبیه‌سازی و پیش‌پردازش، استخراج تابعی‌های مینکوفسکی و به‌کارگیری روش روش تحلیل مؤلفه‌های اصلی(PCA) برای طبقه‌بندی گذارهای فاز، نشان داده‌شده‌است. برای تحلیل داده‌های چندبُعدی حاصل از تابعی‌های مینکوفسکی و کاهش ابعاد مسئله، از روش PCA استفاده شده است. PCA یک روش یادگیری ماشین بدون نظارت خطی است که با انتقال داده‌ها به یک دستگاه مختصات جدید، واریانس داده‌ها را بیشینه می‌کند. در این پژوهش، بردار ویژگی‌های هر پیکربندی (شامل مقادیر نرمال‌سازی شده تابعی‌های مینکوفسکی) به عنوان ورودی به الگوریتم داده می‌شود. با قطری‌سازی ماتریس کواریانس داده‌ها، بردارهای ویژه یا همان «مؤلفه‌های اصلی» استخراج می‌شوند. مؤلفه اول (PC۱) که بیشترین تغییرات داده‌ها را در بر می‌گیرد، معمولاً رفتار پارامتر نظم سیستم را بازسازی می‌کند، در حالی که مؤلفه دوم (PC۲) اغلب نوسانات حول نقطه گذار را نشان می‌دهد و برای تعیین دقیق دمای بحرانی بسیار کارآمد است. برای غلبه بر فقدان داشتن پیکربندی برای هر نقطه دمایی و تولید نمونه‌های دقیق برای آموزش مدل، از روش درون‌یابی تکه‌بندی مکعبی[۲] استفاده شد که بررسی‌های ما نشان داد به دلیل حفظ پیوستگی مشتقات، ویژگی‌های ریخت‌شناسی را بهتر از سایر روش‌ها حفظ می‌کند. در نهایت، برای فشرده‌سازی اطلاعات و استخراج پارامترهای نظم مؤثر، روش تحلیل مولفه‌های اصلی (PCA) بر روی بردارهای ویژگی اعمال شد تا با کاهش ابعاد وابستگی‌های پیچیده تابعی‌ها به آستانه v ، گذارهای فاز از طریق ردیابی تغییرات ناگهانی یا نقاط اکسترمم در مؤلفه‌های اصلی شناسایی شوند [۲۲].



شکل ۱: نمای کلی پژوهش

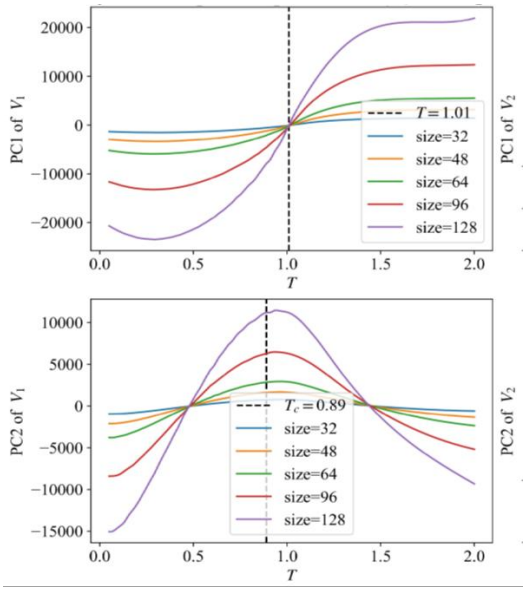
پیاده‌سازی و نتایج

شکل ۲، تجزیه مولفه‌های اصلی تابعی مینکوفسکی اول برای مدل GXY با پارامترهای $q=2$ و $\Delta=0$ و اندازه $L=128$ رسم شده‌است. اولین مؤلفه اصلی (PC۱) در بالا، رفتاری شبیه به پارامتر نظم نشان می‌دهد و

[۱] Geodesic Curvature

[۲] Cubic Spline

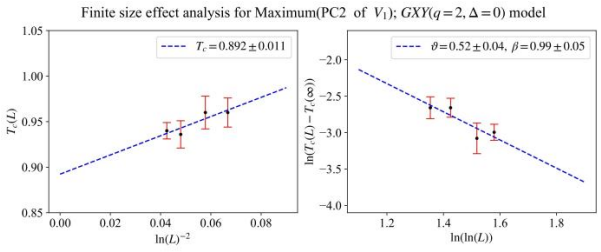
یک نقطه تقاطع مشخص دارد که بیانگر گذار فاز است. دومین مؤلفه اصلی (PC۲) در پایین، دارای نقاط اکسترمم (قله یا دره) در نزدیکی دمای گذار است. برای تخمین دقیق دمای بحرانی و حذف اثرات اندازه محدود مشاهده شده در بخش قبل، از تحلیل مقیاس‌بندی اندازه محدود، استفاده کردیم. ما موقعیت قله‌های PC۲ استخراج شده از مینکوفسکی اول را برای اندازه‌های مختلف سیستم برون‌یابی می‌کنیم. در نمودار ۳ سمت چپ، با استفاده از نمای بحرانی ثابت $\vartheta = ۰.۵$ و رابطه مقیاس‌بندی، دمای بحرانی ترمودینامیکی برون‌یابی شد. در نمودار ۳ سمت راست، با فرض دانستن دمای بحرانی نظری، نمای ϑ به عنوان پارامتر برازش محاسبه گردید. هر دو رویکرد توافق بسیار خوبی با پیش‌بینی‌های نظری دارند و دقت روش مبتنی بر ریخت‌شناسی ما را تأیید می‌کنند. در نهایت، با اعمال روش تحلیل فوق بر روی تمام نقاط پارامتری، نمودار فاز مدل GXY را استخراج می‌کنیم. شکل ٤ نمودار فاز را حسب دما و پارامتر ناهمسانگردی نشان می‌دهد. در این نمودارها، نواحی مختلف فازی (مانند فاز نماتیک، فرومغناطیس و پارامغناطیس) و مرزهای آن‌ها که با استفاده از تحلیل مقیاس‌بندی تعیین شده‌اند.



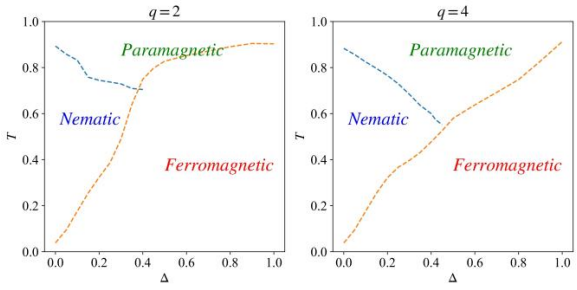
شکل ۲: رفتار PCA برای مینکوفسکی اول بر حسب دما برای اندازه‌های مختلف

جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در این پژوهش، گذارهای فاز مدل‌های XY تعمیم‌یافته با رویکردی مبتنی بر هندسه انتگرالی و بدون نیاز به پارامترهای نظم مرسوم بررسی شد. ترکیب تابع پیش‌پردازش پیشنهادی و تحلیل مؤلفه‌های اصلی بر روی تابعی‌های مینکوفسکی، ابزاری کارآمد برای شناسایی فاز توپولوژی و فازهای نماتیک است. در این چارچوب، PC۱ رفتار پارامتر نظم و PC۲ حساسیت به نقطه بحرانی را نشان می‌دهد. اعتبار روش پیشنهادی از طریق تحلیل مقیاس‌بندی اندازه محدود و توافق عالی با پیش‌بینی‌های نظری تأیید شد و در نهایت منجر به ترسیم دقیق نمودارهای فاز گردید. این رویکرد ترکیبی (هندسه و یادگیری ماشین بدون نظارت)، پتانسیل بالایی برای مطالعه سیستم‌های فیزیکی با پارامترهای نظم ناشناخته یا پیچیده دارد.



شکل ۳ تحلیل مقیاس‌بندی اندازه محدود برای مدل GXY.



شکل ٤: نمودار فاز سه فازی برای مدل GXY به ازای مقادیر q=۲ (چپ) و q=٤ (راست).نواحی رنگی فازهای مختلف (نماتیک فرومغناطیس و پارامغناطیس) را بر حسب دما و پارامتر Δ نشان می‌دهند.

مرجع‌ها

[۱]. Scheffer, M. (۲۰۰۹). Princeton University Press.
[۲]. Goldenfeld, N. (۲۰۱۸). CRC Press.
[۳]. Bandyopadhyay, A.,(۲۰۲۰). Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Proteins and Proteomics, ۱۸٦۸(۱۰), ۱٤۰٤۷٤.
[٤]. Hosseiny, A.,(۲۰۱۹). Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, ٥۱۳,٦٤٤-٦٥۲.
[٥]. Santos, F. A., (۲۰۱۹). Physical Review E, ۱۰۰(۳), ۰۳۲٤۱٤.
[٦]. Stanley, H. E. (۱۹٦۸), ۱۷٦(۲), ۷۱۸.
[۷]. Kardar, M. (۲۰۰۷). Cambridge University Press.
[۸]. Cole, A.,(۲۰۲۱). Physical Review B, ۱۰٤(۱۰), ۱۰٤٤۲٦.
[۹]. Donato, I.,(۲۰۱٦). Physical Review E, ۹۳(٥), ۰٥۲۱۳۸.
[۱۰]. Rodriguez-Nieva, J., Nature Physics ۱٥,۸ (۲۰۱۹): ۷۹۰-۷۹٥.
[۱۱]. Hadwiger, H. (۲۰۱۳). (Vol. ۹۳). Springer-Verlag.
[۱۲]. Mecke, K. R., (۲۰۰۲).(Vol. ٦۰۰). Springer Science & Business Media.
[۱۳]. Matsubara, T., (۲۰۲۲). *Physical Review D, 105*(۲), ۰۲۳٥۲۷.
[۱٤]. Richter-Laskowska, M.,(۲۰۱۸). arXiv preprint arXiv:۱۸۰۹,۰۹۹۲۷.
[۱٥]. Bachtis, D., Physical Review D, ۱۰۳(۷), ۰۷٤٥۱۰.
[۱٦]. Mendes-Santos, T.,(۲۰۲۱). Physical Review X, ۱۱(۱), ۰۱۱۰٤۰.
[۱۷]. Eriçok, O. B.,(۲۰۲۳). Physical Review E, ۱۰۷(٦), ۰٦٤۱۰۷.
[۱۸]. Carrasquilla, J.,(۲۰۱۷). Nature Physics, ۱۳(٥), ٤۳۱-٤۳٤.
[۱۹]. Samlodia, A.,(۲۰۲٤). Physical Review D, ۱۱۰(۳), ۰۳٤٥۰٤.
[۲۰]. Poderoso, F. C., Arenzon, J. J., & Levin, Y. (۲۰۱۱). Physical review letters, ۱۰٦(٦), ۰٦۷۲۰۲.
[۲۱]. Holdsworth, P. C., & Sellitto, M. (۲۰۰۲). Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, ۳۱٥(۳-٤), ٦٤۳-٦٤۹.
[۲۲]. Jolliffe, I. T., & Cadima, J. (۲۰۱٦). ۳۷٤(۲۰٦٥), ۲۰۱٥۰۲۰۲.

ریخت‌شناسی مجموعه گشت به عنوان نشانگر گذار فاز و هشدار زودهنگام

خالدی‌پور، محمد[۱]؛ روشندل، سینا[۱]؛ موحد، سیدمحمدصادق[۱و۲]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی، ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱، تهران، ایران

[۲] پژوهشکده نجوم، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی، ۱۹۳۹۵۵۵۳۱، تهران، ایران

چکیده

تشخیص نقطه‌ی گذار و رفتن به نقاط واژگونی در سامانه‌های مختلف از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. در این پژوهش، کمیت جدیدی معرفی می‌کنیم که مبتنی بر ویژگی‌های ریخت‌شناختی سامانه بوده و قادر است ناحیه‌ی گذار را تشخیص و پیش از وقوع، آن را هشدار دهد. برای این منظور، با ادغام مفهوم آنتروپی شانون با اصول هندسه‌ی انتگرالی و مجموعه‌های گشت، معیاری جدید با عنوان «آنتروپی مبتنی بر ریخت‌شناسی» تعریف می‌کنیم. این معیار با تحلیل تنوع ساختارهای مبتنی بر ریخت سامانه، قادر است گذار فاز را در حضور نوفه شناسایی کرده و هشدار زودهنگام ارائه دهد. اعمال این روش برروی فرآیند دینامیکی دوشاخگی چنگالی، نشان می‌دهد که آنتروپی مبتنی بر ریخت‌شناسی در تشخیص نقطه گذار و واژگونی با موفقیت عمل کرده است.

واژه‌های کلیدی: *گذار فاز، ریخت‌شناسی، آنتروپی.*

Morphology of Excursion Sets as Indicators of Phase Transition and Early Warning Signal

Khaledipour , Mohammad [1] ; Roshandel, Sina[1]; Movahed , Seyed Mohammad Sadegh [1,2]

[1]Department of Physics, Shahid Beheshti University, 1983969411, Tehran, Iran

[2] School of Astronomy, Institute for Research in Fundamental Science (IPM), P. O.Box 19395-5531, Tehran, Iran

Abstract

Detecting the transition point and the onset of tipping point in various systems is of critical importance. In this study, we introduce a new quantity, based on the morphological characteristics of the system, which is able to identify the transition region and signal before it occurs. To this end, by combining the concept of Shannon entropy with the principles of integral geometry and excursion sets, we define a new measure called "morphology-based entropy". This measure, by analyzing the diversity of morphological characteristics of the system, can detect the phase transition even in the presence of noise and provide an early warning signal. Applying this method to the pitchfork bifurcating process shows that morphology-based entropy successfully identifies the transition and tipping points.

***Keywords**: Phase Transition, Morphology, Entropy.*

PACS No.

مقدمه

ظهور حالت‌های متمایز با رفتار هم‌پوش‌نگر[1] در سامانه‌های طبیعی و مصنوعی بسیار فراگیر است — از فیزیک در طیف وسیعی از مقیاس‌های انرژی تا مهندسی، بوم‌شناسی، اقلیم، زیست‌شناسی و علوم اجتماعی[۷-۱]. یک فاز در یک سامانه پیچیده کلی، که از زیرواحدهایی با تعامل غیرخطی تشکیل شده است، با متغیرهای نظم[2] متعددی تعریف می‌شود. آستانه‌هایی که در آن‌ها این سامانه‌ها متغیرهای نظم خود را تغییر می‌دهند، نقاط بحرانی[4] نامیده می‌شوند. تشخیص نمودار فازی[5] به‌صورت تابعی از متغیرهای خارجی، بعلاوه شناسایی علائم هشدار زودهنگام[6] در نزدیکی نقاط بحرانی، می‌تواند سهم زیادی در تشخیص نقاط واژگونی[7]، بهینه‌سازی عملکرد، راهنمایی سیاست‌گذاری، تسهیل تصمیم‌گیری و جلوگیری از تهدیدات احتمالی زندگی روزمره ما ناشی از وقایع

[1] Holistic
[2] Order Parameter

[4] Critical Points
[5] Phase Diagram
[6] Early Warning
[7] Tipping Point

فاجعه‌بار یا بحرانی داشته باشد[۵]. لذا یافتن متغیرهایی که بتواند ناحیه گذار را در انواع سامانه‌ها تشخیص دهد، در مقابل نوفه[8] پایدار باشد و در زمان مناسبی پیش از وقوع گذار، همچون یک هشدارگر زودهنگام[9]، امکان وقوع آن را اطلاع دهد، مورد توجه است.

پیش‌تر نشان داده شده است که تحلیل ویژگی‌های توپولوژیکی یک سامانه می‌تواند معیاری کارآمد برای شناسایی نقاط گذار و تمایز فازها فراهم کند[۸ و ۹]. با این حال، این روش معمولاً نیازمند محاسبات سنگین بوده و برای کمی‌سازی نتایج، در بسیاری از موارد به الگوریتم‌های یادگیری ماشین متکی است. از سوی دیگر، شاخص‌های مبتنی بر آنتروپی نیز در تحلیل سامانه‌های پیچیده مؤثر بوده‌اند، اما در این رویکرد مسئله‌ی تأثیر نوفه همچنان چالش‌برانگیز باقی مانده است[۱۰ و ۱۱]. در پژوهش حاضر، ما با ترکیب ویژگی‌های استخراج‌شده از ریخت سامانه و تعریف یک آنتروپی مبتنی بر این ویژگی‌ها، فرآیند گذار را در یک مدل دینامیکی تحت تأثیر نوفه مورد بررسی قرار می‌دهیم. این روش از حیث محاسبات از روش مبتنی بر توپولوژی سبک‌تر بوده و اطلاعاتی فراتر در اختیار ما قرار می‌دهد.

ریخت‌شناسی:

ریخت یک سامانه عبارت است از شکل، ساختار و نحوه توزیع فضایی آن[۱۲]. به منظور استخراج ریخت یک سامانه، در فضای D بُعدی نگاشت $\Lambda^{d+D} : \mathrm{R^D} \to \mathrm{R^d}$ را در نظر بگیرید. اگر $X^{(\mathrm{D})}$ نمایانگر مختصات مستقل D بُعدی باشد، پس مجموعه‌های گشت برای مولفه nاُم میدان Λ^{D+d} عبارت است از:

$$\delta_\Lambda^{(n,D)}: \left\{\delta_\Lambda^{(n,D)}\left(\vartheta^{(n)}, i\right), i \in \mathrm{N}^D\right\}: \quad (۱)$$
$$\left\{X^{(D)} \in \mathrm{R^D} \,\middle|\, \Lambda^{D+d}(X^{(D)}) \geq \vartheta^{(n)}\, \sigma_0^{(n)}\right\}$$

در این عبارت، $\delta_\Lambda^{(n,D)}\left(\vartheta^{(n)}, i\right)$، نمایانگر مجموعه‌ای از متغیرهای مستقل D بُعدی است که به ازای آن‌ها مولفه nاُم Λ در شرط $\Lambda^{d+D} \geq \vartheta^{(n)}\, \sigma_0^{(n)}$ صدق می‌کند. $\sigma_0^{(n)}$ نیز انحراف از معیار کل میدان برای مولفه nاُم می‌باشد. تابعی مینکوفسکی[15] مرتبه صفرم مجموع تمام اعضای مجموعه $\delta_\Lambda^{(n,D)}$ است[۱۲]. ما نیز با الهام از آنتروپی شانون[16] و با استفاده از مجموعه‌های گشت که در معادله (۱) تعریف شده است، شکل جدیدی از آنتروپی تحت عنوان آنتروپی مبتنی بر ریخت‌شناسی را تعریف کردیم. بدین منظور مجموعه مقادیر $\delta_\Lambda^{(n,D)}\left(\vartheta^{(n)}; i\right)$، را جمع‌آوری کرده و تابع توزیع آن را استخراج می‌کنیم:

$$P_0^{(n,D)}\left(\vartheta^{(n)}, i\right) = \quad (۲)$$
$$\left\langle \delta_{Dirac}\left(\delta_\Lambda^{(n,D)}\left(\vartheta^{(n)}\right) - \delta_\Lambda^{(n,D)}\left(\vartheta^{(n)}, i\right)\right)\right\rangle$$

سپس با قرار دادن این تابع توزیع در فرمول آنتروپی شانون، شکل جدیدی از آنتروپی تحت عنوان آنتروپی مبتنی بر ریخت‌شناسی تعریف می‌شود:

$$ME_0^{(n)}\left(\vartheta^{(n)}\right) = \quad (۳)$$
$$-\sum_{i=1}^{k} P_0^{(n,D)}\left(\vartheta^{(n)}, i\right)\, \ln P_0^{(n,D)}\left(\vartheta^{(n)}, i\right)$$

از آنجایی که قصد داریم خروجی این آنتروپی را روی سری‌های زمانی که میدانی یک بُعدی $(n = 1, D = 1)$ هستند، بدست آوریم، به طور شهودی‌تر می‌توان گفت که معادله (۱) مجموعه مقادیر طول دامنه‌هایی است که در آن بخش، سری زمانی مقداری بیش از یک حد آستانه، ϑ ، دارد.

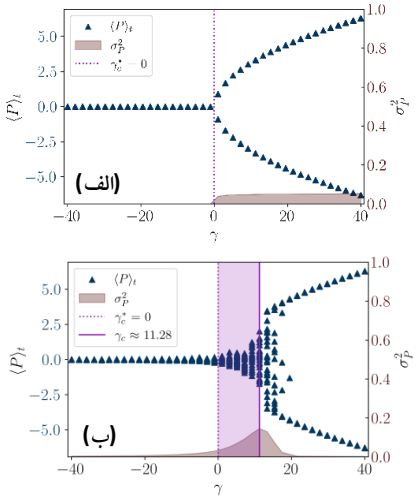
مدل دوشاخگی چنگالی[17]:

از جمله فرآیندهای دینامیکی که امکان مدل‌سازی انواع پدیده‌ها را ممکن می‌سازد، مدل‌های موسوم به دوشاخگی[18] است. در سامانه‌های پیچیده، دوشاخگی نماینده شکلی از گذار است که طی تغییرات مشخصی در سامانه، به صورت ناگهانی و قابل اندازه‌گیری به وقوع می‌پیوندد[۳]. به عبارت دیگر تعداد مشخصی از یک یا چند متغیر کنترلی[19] می‌تواند منجر به تشکیل یا نابودی حالتی از سامانه شود[۱۳]. یکی از انواع مدل‌های دوشاخگی، مدل دوشاخگی چنگالی نام دارد که معادله دینامیکی آن تحت اثر نوفه بدین شرح است[۳]:

[8] Noise
[9] Early Warning Signal
[15] Minkowski Functional
[16] Shannon Entropy
[17] Pitchfork Bifurcation
[18] Bifurcation
[19] Control Parameter

$$\frac{dP}{dt} = \gamma\, P(t) - P(t)^3 + \sigma\, dW \qquad (٤)$$

در این معادله γ، متغیر کنترلی است؛ در حالتی که $\sigma = 0$، در صورتی که $\gamma < 0$ باشد، پاسخ پایدار معادله (٤)، $P = 0$ است. با افزایش مقدار متغیر کنترلی و در $\gamma \geq 0$، سامانه از حالت پایدار به حالت ناپایدار با دو پاسخ $P = \pm\sqrt{\gamma}$ گذار می‌یابد. بنابراین نقطه گذار برای این مدل و در حالت بدون نوفه، $\gamma = 0$ است. با افزوده شدن نوفه به این معادله، و با توجه به شدت آن، ناحیه گذار به مقادیر $\gamma \geq 0$ انتقال می‌یابد(شکل ۱).



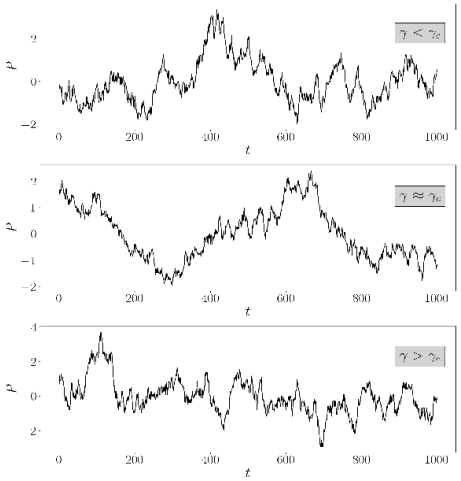
شکل(۱): مدل دوشاخگی چنگالی تحت اثر نوفه با شدت الف) $\sigma = 0.0$ و ب) $\sigma = 10.0$. در کنار آن واریانس این سامانه برای مقادیر مختلف متغیر کنترلی نمایش داده شده است. γ_c^* نمایانگر نقطه گذار در حالت بدون نوفه است و γ_c نشاندهنده نقطه جدید گذار است که تحت اثر نوفه به مقادیر دیگری انتقال یافته است.

پیاده‌سازی برروی سامانه دینامیکی:

خط مشی این پژوهش به طور خلاصه در شکل (۲) نمایش داده شده است. در این پژوهش، ما به بررسی رفتار سامانه تحت مطالعه در دو حالت بدون نوفه و با شدت نوفه $\sigma = 10.0$ می‌پردازیم. برای این منظور ابتدا با استفاده از معادله (۱)، سری‌های زمانی همچون شکل(۳) را تولید می‌کنیم؛ متغیر کنترل سامانه، γ ، در بازه $[-40, 40]$ با گام‌های ۰/۱ تغییر داده می‌شود. به ازای هر مقدار γ ، یک سری زمانی با ۲۰۰,۰۰۰ واحد زمانی تولید شد، که نمونه‌ای از آن در شکل (۳) نمایش داده شده است. در مرحله بعد، با کمک روش پنجره لغزان[20]، با طول ۱۰۰۰ و گام ۵۰۰ واحد زمانی، مجموعه‌های گشت را استخراج کردیم. در نهایت آنتروپی مبتنی بر ریخت‌شناسی به ازای هریک از پنجره‌ها محاسبه و مقدار متوسط آن در این مقاله گزارش خواهد شد.



شکل (۲): خطمشی محاسباتی این پژوهش.

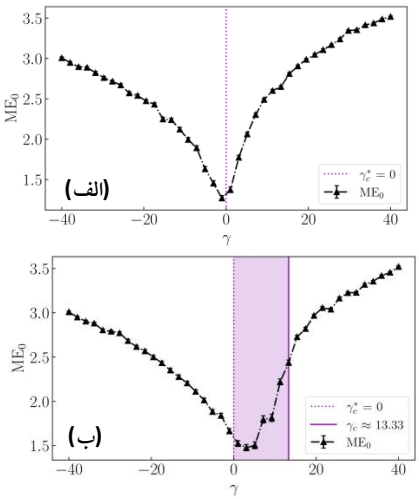


شکل (۳): سری زمانی تولید شده از معادله (۱) در حالت بدون نوفه به ازای مقادیر الف) $\gamma < \gamma_c$ ، ب) $\gamma \approx \gamma_c$ و پ)$\gamma > \gamma_c$ برای ۱۰۰۰ واحد زمانی. در حالت بدون نوفه $\gamma_c = 0$ است.

در شکل (٤) مقادیر آنتروپی مبتنی بر مینکوفسکی صفرم برای حد آستانه $\vartheta = 0$ و برحسب متغیر کنترلی γ، نمایش داده شده است؛ در شکل (٤-الف) خروجی آنتروپی برای حالت بدون نوفه و در شکل (٤-ب) برای نوفه با شدت $\sigma = 10.0$، نمایش داده شده است. در هر دو حالت آنتروپی مبتنی بر ریخت‌شناسی توانسته است به خوبی ناحیه گذار را تشخیص دهد. نکته مهم این است که باوجود افزودن نوفه به سامانه و جابجایی ناحیه گذار به مقادیر

[20] Sliding Window

بالاترِ متغیر کنترلی، عملکرد آنتروپی تقریباً تغییری نکرده و نتایج قابل اعتمادی در برابر نوفه از خود نشان دهد. از دیدگاه هشدار زودهنگام نیز این آنتروپی به طور کیفی موفق عمل کرده است. هم در حالت $\gamma < \gamma_c$ و هم در $\gamma > \gamma_c$، تغییرات آنتروپی به نحوی است که امکان وقوع گذار پیش از موعد و با کمک شیب تغییرات قابل تشخیص است. بنابراین از این منظر نیز می‌تواند به عنوان یک هشدارگر زودهنگام نیز مورد استفاده قرار گیرد. همچنین با تکیه بر نحوه تغییرات شیب، امکان تشخیص فاز سامانه نیز ممکن است. اگر با افزایش مقادیر متغیر کنترلی، شیب منفی باشد، به این معنی است که سامانه در حالت پایدار است؛ در صورتی که تغییرات شیب با افزایش متغیر کنترلی مثبت باشد، سامانه در حالت ناپایدار است.



شکل (٤): آنتروپی مبتنی بر ریخت‌شناسی برای دو حالت الف) $\sigma = 0.0$ و ب) $\sigma = 10.0$ برای حد آستانه $\vartheta = 0$. γ_c^* نمایانگر نقطه گذار در حالت بدون نوفه است و γ_c نشاندهنده نقطه جدید گذار است که تحت اثر نویز به مقادیر دیگری انتقال یافته است. با وجود نوفه و انتقال ناحیه گذار به مقادیر بالاتری از متغیر کنترلی، این آنتروپی توانسته به خوبی ناحیه گذار را تشخیص دهد.

بحث و نتیجه‌گیری

در این پژوهش، با معرفی نوع جدیدی از آنتروپی، معیاری ارائه کرده‌ایم که برای تشخیص ناحیه گذار در یک سامانه دینامیکی همراه با نوفه قابل استفاده است. این متغیر نه‌تنها ناحیه گذار را به‌خوبی تشخیص می‌دهد، بلکه نسبت به نوفه پایدار است و قادر است فاز سامانه را نیز نمایان کند. علت این رفتار در تابع توزیع معادله (۲) نهفته است: از نظر آماری، هرچه تابع توزیع شامل مقادیر متنوع‌تری باشد، آنتروپی بزرگ‌تر خواهد بود، و برعکس، کاهش تنوع در سامانه (و در نتیجه در تابع توزیع) منجر به کاهش آنتروپی می‌شود. با نزدیک شدن به نقطه واژگونی، آهنگی بحرانی خواهیم داشت که منجر به کاهش تنوع در میزان مجموعه‌های گشت می‌شود و در نتیجه آن آنتروپی مبتنی بر ریخت‌شناسی نسبت به سایر مقادیر متغیر کنترلی کاهش می‌یابد.

مراجع

[1] Kardar, M. (2007). Statistical physics of fields. Cambridge University Press.
[2] Goldenfeld, N. (2018). Lectures on phase transitions and the renormalization group. CRC Press.
[3] Scheffer, M., Carpenter, S., Foley, J. A., Folke, C., & Walker, B. (2001). Catastrophic shifts in ecosystems. *Nature*, *413*(6856), 591-596.
[4] Scheffer, M. (2009). *Critical transitions in nature and society*. Princeton University Press.
[5] Scheffer, M., Bascompte, J., Brock, W. A., Brovkin, V., Carpenter, S. R., Dakos, V., ... & Sugihara, G. (2009). Early-warning signals for critical transitions. *Nature*, *461*(7260), 53-59.
[6] Bandyopadhyay, A., & Basu, S. (2020). Criticality in the conformational phase transition among self-similar groups in intrinsically disordered proteins: Probed by salt-bridge dynamics. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Proteins and Proteomics*, *1868*(10), 140474.
[7] Sornette, D. (2014). Physics and financial economics (1776–2014): puzzles, Ising and agent-based models. *Reports on progress in physics*, *77*(6), 062001.
[8] Sale, N., Giansiracusa, J., & Lucini, B. (2022). Quantitative analysis of phase transitions in two-dimensional X Y models using persistent homology. Physical Review E, 105(2), 024121.
[9] Cole, A., Loges, G. J., & Shiu, G. (2021). Quantitative and interpretable order parameters for phase transitions from persistent homology. Physical Review B, 104(10), 104426.
[10] Bandt, C., & Pompe, B. (2002). Permutation entropy: a natural complexity measure for time series. *Physical review letters*, *88*(17), 174102.
[11] Chen, S., Shang, P., & Wu, Y. (2018). Weighted multiscale Rényi permutation entropy of nonlinear time series. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, *496*, 548-570.
[12] Matsubara, T., Hikage, C., & Kuriki, S. (2022). Minkowski functionals and the nonlinear perturbation theory in the large-scale structure: Second-order effects. *Physical Review D*, *105*(2), 023527.
[13] Strogatz, S. H. (2001). *Nonlinear dynamics and chaos: with applications to physics, biology, chemistry, and engineering (studies in nonlinearity)* (Vol. 1). Westview press.

وابستگی نرخ رمبش کوانتومی به شدت درهم‌تنیدگی سیستم_ دستگاه: آزمون عددی در مدل آیزینگ مزوسکوپیک

خرقه انداز ، میلاد[1]؛ شفیعی، افشین[2]

فارغ‌التحصیل کارشناسی ارشد فلسفه علم، دانشگاه صنعتی شریف1

دانشیار دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده شیمی2

چکیده

در اینجا، مدلی از نظریه‌های رمبش خودبخودی تابع موج پیشنهاد می‌شود که در آن، نرخ رمبش نه به تعداد ذرات یا جرم، بلکه به اطلاعات متقابل کوانتومی بین زیرسامانه‌های «سیستم» و «دستگاه اندازه‌گیری» وابسته است. هرچه درهم‌تنیدگی و هم‌بستگی اطلاعاتی بین دو زیرسامانه قوی‌تر باشد، گذار از برهم‌نهی کوانتومی به وضعیت‌های کلاسیک سریع‌تر خواهد بود. برای آزمون عددی، از یک مدل آیزینگ مزوسکوپیک شامل چهار ذره در تعامل با یکدیگر و یک کیوبیت کاوشگر استفاده شده است. برای دستیابی به حالتی با درهم‌تنیدگی بالا، حالت اولیه برهم‌نهیده‌ای از ویژه‌حالت‌های انرژی ساخته شد، که منجر به آنتروپی نویمان حدود یک بیت برای هر زیرسامانه و اطلاعات متقابل ۲ بیت گردید. نتایج نشان داد که زمان مشخصه رمبش، در مقایسه با مدل GRW/CSL استاندارد برای پنج الکترون، دارای یک تا دو مرتبه بزرگی کمتر و قابل تنظیم به مقدار آزمایشگاهی 1 الی 100 ثانیه است. در این مدل، مرز کوانتومی_ کلاسیکی به جای «اندازه سامانه»، به « اطلاعات متقابل سیستم_ دستگاه» وابسته می‌شود. محدودیت‌ها شامل انتخاب فرم اطلاعات متقابل، وابستگی به داده‌های تجربی و تعمیم نسبیتی مدل است.

واژه های کلیدی: *رمبش خودبه‌خودی، آنتروپی درهم‌تنیدگی، مدل آیزینگ، گذار کوانتومی-کلاسیکی.*

Dependence of quantum collapse rate on system-device entanglement strength: Numerical test in mesoscopic Ising model

Kherghehandaz, Milad[1]; Shafiee, Afshin[2]

[1] Master's degree in Philosophy of Science, Sharif University of Technology
[2] Associate Professor of Sharif University of Technology - Chemistry Department

Abstract

Here, a model of spontaneous wave function collapse theories is proposed in which the collapse rate depends not on the number of particles or mass, but on the quantum mutual information between the subsystems "system" and "measuring device". The stronger the entanglement and information correlation between the two subsystems, the faster the transition from quantum superposition to classical states will be. For the numerical test, a mesoscopic Ising model consisting of four interacting particles and a probe qubit was used. To achieve a highly entangled state, a superposition of energy eigenstates was constructed, resulting in a Neumann entropy of approximately one bit per subsystem and a mutual information of 2 bits. The results showed that the characteristic decay time, compared to the standard GRW/CSL model, is one to two orders of magnitude smaller and can be tuned to an experimental value of 1 to 100 seconds. In this model, the quantum-classical boundary depends on the "system-device mutual information" rather than the "system size". Limitations include

the choice of the form of mutual information, the dependence on experimental data, and the relativistic generalization of the model.
Keywords: Spontaneous collapse, entanglement entropy, Ising model, quantum-classical transition.

مقدمه

مطابق صورت‌بندی استاندارد مکانیک کوانتوم، تکامل زمانی حالت کوانتومی (تابع موج)، براساس معادله شرودینگر، خطی و پیوسته است. اما از نظر تجربی، اندازه‌گیری یک کمیت فیزیکی شامل انتقالی از حالت برهم‌نهی به یک خروجی کلاسیک منحصربفرد می‌شود که فرایندی غیرخطی است. این دو توصیف، که یکی بیانگر تکامل خطی و دیگری رمبشی ناگهانی و غیرخطی در تابع موج است، مبنای «مسئله اندازه‌گیری» را شکل می‌دهد (1). نظریه‌های رمبش خودبه‌خودی[1] تلاش می‌کنند با اصلاح دینامیک بنیادی تکامل زمانی، این دوگانگی را از میان بردارند. مدل‌های (GRW) و (CSL) از نمونه‌های شناخته‌شده این رویکرد هستند (2). در مدلGRW ، تکامل حالت کوانتومی $|\psi\rangle$، ترکیبی است از دو فرایند: تکامل زمانی براساس معادله شرودینگر و رمبش‌های تصادفی که با یک فرایند پواسونی با نرخ متوسط λ برای هر ذره رخ می‌دهند. برای سامانه‌ای با N ذره، نرخ کل رمبش‌ها λN است و مقدار آن برابر $\lambda \approx 10^{-16} s^{-1}$ درنظر گرفته می‌شود تا برای یک ذره منفرد نادر باشد، اما برای $N \sim 10^{23}$ ذره (ماکروسکوپیک)، تقریباً به‌صورت آنی رخ دهد (3). در مدل CSL، رمبش‌های گسسته مدل GRW به یک نوفه پیوسته تعمیم می‌یابد و تکامل زمانی، به‌شکل زیر بیان می‌شود:

$$d|\psi\rangle = [-\frac{i}{\hbar}\hat{H}dt - \frac{\lambda}{2m}\int d\mathbf{x}\hat{n}(\mathbf{x})\xi(\mathbf{x},t)dt + \frac{\lambda}{4mr_c^2}\int d\mathbf{x}\hat{n}(\mathbf{x})[\hat{n}(\mathbf{x}) - 2\langle\hat{n}(\mathbf{x})\rangle dt]]|\psi\rangle \qquad (1)$$

که $\hat{n}(\mathbf{x})$ عملگر چگالی ماده و m جرم ذرات است. زمان موثر رمبش متناسب با جرم درنظر گرفته می‌شود تا اثر رمبش برای ذرات سنگین‌تر، قوی‌تر باشد. تصویر ساده «تناسب نرخ رمبش با تعداد ذرات» وقتی برای توصیف سامانه‌های کوچک و مزوسکوپیک، مانند چند کیوبیت ابررسانا، به کار می‌رود، با چالش مواجه می‌شود. برای مثال، با انتخاب λ در حدود مقادیر استاندارد GRW، زمان رمبش پیش‌بینی‌شده برای سامانه‌ای شامل تنها چند الکترون از مرتبه 10^{14} تا 10^{16} ثانیه می‌شود (4). در سال‌های اخیر تلاش‌هایی برای اصلاح مدل‌های CSL صورت گرفته است: مدل بوکس (Buks): شامل ترم‌های فرونشانی کوانتومی[2] (5)، مدل اطلاعات یکپارچه: متناسب بودن نرخ رمبش به اطلاعات یکپارچه[3] (6) و مدل Diósi–Penrose : که گرانش را عامل رمبش می‌داند (7).

جدول 1: مقایسه نسخه‌های مختلف نظریات رمبش خودبخودی با یکدیگر

نام مدل	دینامیک رمبش پیشنهادی	نرخ و زمان رمبش	محدودیت‌ها
مدل GRW	اضافه کردن ترم‌های خطی گسسته به معادله شرودینگر	$\lambda = 10^{-16} s^{-1}$ افزایش خطی با تعداد ذرات؛ τ کوتاه‌تر برای N بزرگ	عدم تقارن برای ذرات همسان، مشکلات نسبیتی (8)
مدل CSL	اضافه کردن ترم‌های خطی پیوسته	λ متناسب با چگالی جرم؛ τ کوتاه‌تر برای اجسام سنگین‌تر	افزایش انرژی، پیش‌بینی تابش، مشکلات نسبیتی (9)
مدل Diósi–Penrose	نوفه مرتبط با پتانسیل نیوتنی	$\lambda = \hbar / \Delta E_{gravity}$ $\tau \propto \Delta E_{gravity}$	پیش‌بینی تابش بیش از حد؛ رد تجربی نسخه پارامتر آزاد (10)
مدل Buks	اضافه کردن جمله فرونشانی	λ افزایشی متناسب با شدت	نقض علیت؛ نیاز به آزمون تجربی بیشتر

[1] objective collapse

[2] entanglement suppression
[3] integrated information

	درهم‌تنیدگی	درهم‌تنیدگی	(11)
مدل‌های مبتنی بر اطلاعات یکپارچه	وابستگی به اطلاعات یکپارچه کوانتومی (Φ) (ویژگی ناظر)	λ افزایشی با τ کوتاه‌تر برای سیستم‌های پیچیده اطلاعاتی	وابسته به تعریف Φ؛ ارتباط فلسفی با آگاهی؛ آزمون تجربی محدود (12)
مدل پیشنهادی	رمبش ناشی از اطلاعات متقابل کوانتومی بین سیستم و دستگاه	λ تابعی از اصلاعات متقابل و τ کمتر از GRW و قابل تنظیم	وابستگی به فرم تابع اطلاعات متقابل، پدیدارشناسانه؛ عدم تعمیم نسبیتی

بخش نظری

برای یک حالت مرکب ρ_{AB}، اطلاعات متقابل کوانتومی بین زیرسامانه‌های A و B به صورت زیر تعریف می‌شود (13):

$$I(A:B)=S(\rho_A)+S(\rho_B)-S(\rho_{AB}) \qquad (2)$$

که در آن $S(\rho)=-Tr(\rho\log^{\rho})$ آنتروپی نویمان است. برای یک حالت خالص کل، $\rho_{AB}=|\psi\rangle\langle\psi|$، آنتروپی نویمان کل صفر است. بنابراین داریم:

$$I(A:B)=2S(\rho_A)=2S(\rho_B) \qquad (3)$$

این کمیت به طور مستقیم بیان‌گر مقدار درهم‌تنیدگی بین دو زیرسامانه است. در مدل ما، نرخ مؤثر رمبش برای سامانه‌ی مرکب از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$\lambda_{eff}(t)=\lambda_0 f(I(A:B;t)) \qquad (4)$$

که در آن λ_0 یک ثابت بنیادی با بعد معکوس زمان و f تابعی اسکالر و بدون‌بُعد از اطلاعات متقابل است. برای حفظ سازگاری فیزیکی، تابع f را به شرایط زیر محدود می‌کنیم:

$f(0)=0$ تا تکامل زمانی به معادله شرودینگر تبدیل شود، برای $I>0$، $f(I)$ مثبت و صعودی است تا با افزایش درهم‌تنیدگی، رمبش تسریع شود و برای $I\gg 0$، $f(I)$ طوری انتخاب شود که همواره $\lambda_{eff}\gg\lambda_0$: برهم‌نهی‌های ماکروسکوپیک در مقیاس زمانی کوتاهی فرونشانی شوند.

تکامل حالت خالص $|\psi_t\rangle$ در چارچوب CSL (معادله 1)، به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$d|\psi_t\rangle=[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}dt+\lambda_{eff}(t)\hat{L}[n,\xi]dt]|\psi_t\rangle \qquad (5)$$

که در آن $\hat{H}$ هامیلتونی سامانه و $\hat{L}[n,\xi]$ عملگر رمبش شامل عملگر چگالی ماده و نویز تصادفی است. با میانگین‌گیری روی نویز، معادله‌ی لیندبلاد (14) به شکل زیر درمی‌آید:

$$\frac{d\rho_t}{dt}=-\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\rho_t]+\lambda_{eff}(t)D[n](\rho_t) \qquad (6)$$

که در آن $D[n]$ ابرعملگر پاشنده‌ی استاندارد CSL است. تفاوت اساسی مدل ما با CSL استاندارد در این است که پارامتر $\lambda_{eff}(t)$ به‌صورت غیرخطی و به $I(A:B;t)$ وابسته است.

روش

یک سامانه نمونه مزوسکوپیک شامل 4 اسپین آیزینگ در برهم‌کنش متقابل به همراه یک کیوبیت کاوشگر به عنوان زیرسامانه A، و دستگاه اندازه‌گیری به‌عنوان زیرسامانه B، فرض شد. در اینصورت فضای هیلبرت کل، 32 بعد خواهد داشت و هامیلتونی آن (در واحد $\hbar=1$) به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\hat{H}=-J\sum_{i=0}^{2}\hat{\sigma}_i^z\hat{\sigma}_{i+1}^z-g\hat{\sigma}_0^z\hat{\sigma}_4^z-h\sum_{i=0}^{3}\hat{\sigma}_i^x \qquad (7)$$

که در آن J کوپلینگ آیزینگ، g کوپلینگ کاوشگر_سیستم، و h میدان عرضی روی چهار اسپین اول است. مقادیر $J=1$، $g=1$ و $h=0.1$ انتخاب شدند. با قطری‌سازی عددی هامیلتونی، دو حالت $|\phi_+\rangle$ و $|\phi_-\rangle$ انتخاب شد که نماینده شبه‌حالت پایه و شبه‌حالت برانگیخته هستند. حالت اولیه درهم‌تنیده به صورت زیر ساخته شد:

$$|\psi_0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_B\otimes|S_+\rangle_A+|-\rangle_B\otimes|S_-\rangle_A) \qquad (8)$$

آنتروپی نویمان هر زیرسامانه تقریباً 1 بیت و اطلاعات متقابل برابر 2 بیت به دست آمد.

شبیه سازی و نتایج عددی

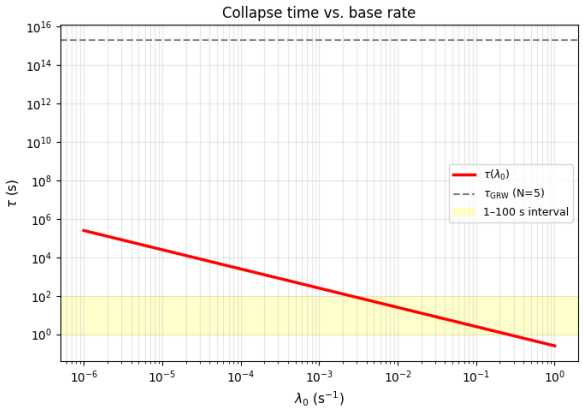
با مقدار اولیه $I(0)=2$، نرخ رمبش موثر و زمان مشخصه برای سه شکل تابع f به‌صورت زیر محاسبه شد:

$$\lambda_{eff}^{lin}(0)=2\lambda_0 \rightarrow \tau_{lin}\approx\frac{1}{2\lambda_0}$$

$$\lambda_{eff}^{pow}(0)=4\lambda_0(k=2) \rightarrow \tau_{pow}\approx\frac{1}{4\lambda_0}$$

$$\lambda_{eff}^{\exp}(0)=4.06\lambda_0(\alpha=0.7) \rightarrow \tau_{\exp}\approx\frac{1}{4.06\lambda_0}$$

با انتخاب $\lambda_0=10^{-14}s^{-1}$، مقادیر عددی زیر حاصل می‌شود: $\tau_{lin}\approx 5.0\times10^{13}s, \tau_{pow}\approx 2.5\times10^{13}s, \tau_{\exp}\approx 2.47\times10^{13}s$ $\tau_{GRW}=2\times10^{15}s$. وابستگی زمان رمبش به نرخ رمبش در شکل (1) نشان داده شده است.



شکل 1: نمودار لگاریتمی زمان مشخصه رمبش بر حسب نرخ رمبش، در مقایسه با بازه زمانی آزمایشگاهی ۱ تا ۱۰۰ ثانیه و زمان مرجع GRW برای سامانه پنج‌ذره‌ای.

نتیجه گیری

در اینجا حالتی از مدل رمبش خودبخودی CSL با نرخ رمبش وابسته به اطلاعات متقابل کوانتومی بین سیستم و دستگاه اندازه‌گیری معرفی شد. با پیاده‌سازی این چارچوب روی یک مدل آیزینگ پنج‌کیوبیتی و انتخاب حالت اولیه‌ای با $I=2$ بیت، نشان دادیم که زمان مشخصه رمبش، برای سامانه‌ای با 5 الکترون، به‌طور سیستماتیک کوچک‌تر از مقدار متناظر در مدل GRW/CSL است. در مدل حاضر می‌توان با انتخاب مناسب λ_0، زمان رمبش را در بازه‌های زمانی آزمایشگاهی تنظیم‌پذیر کرد. محدودیت‌ها شامل انتخاب خاص تابع f، ماهیت پدیدارشناسانه λ_0 و عدم تعمیم نسبیتی است. بررسی دقیق‌تر توابع f و بررسی تجربی، مسیرهای پیشنهادی برای کارهای آینده محسوب می‌شوند.

مرجع‌ها

[1] J. von Neumann; *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*; New edition, Princeton University Press (2018) Feb. 27.
[2] A. Bassi, K. Lochan, S. Satin, T. P. Singh and H. Ulbricht; "Models of wave-function collapse, underlying theories, and experimental tests"; *Reviews of Modern Physics* **85**, No. 2 (2013) 471–527.
[3] G. C. Ghirardi, A. Rimini and T. Weber; "Unified dynamics for microscopic and macroscopic systems"; *Physical Review D* **34**, No. 2 (1986) 470.
[4] W. Feldmann and R. Tumulka; "Parameter diagrams of the GRW and CSL theories of wavefunction collapse"; *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **45**, No. 6 (2012) 065304.
[5] S. L. Adler; *Quantum Theory as an Emergent Phenomenon: The Statistical Mechanics of Matrix Models as the Precursor of Quantum Field Theory*; Cambridge University Press (2004) Aug. 26.
[6] Y. Zhao, D. Zhao, C. Rong, S. Liu and P. W. Ayers; "Information Theory Meets Quantum Chemistry: A Review and Perspective"; *Entropy* **27**, No. 6 (2025) 644.
[7] L. Figurato, M. Dirindin, J. L. Gaona-Reyes, M. Carlesso, A. Bassi and S. Donadi; "On the effectiveness of the collapse in the Diósi–Penrose model"; *New Journal of Physics* **26**, No. 11 (2024) 113004.
[8] C. Jones, T. Guaita and A. Bassi; "Impossibility of extending the Ghirardi–Rimini–Weber model to relativistic particles"; *Physical Review A* **103**, No. 4 (2021) 042216.
[9] C. Jones, G. Gasbarri and A. Bassi; "Mass-coupled relativistic spontaneous collapse models"; *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **54**, No. 29 (2021) 295306.
[10] M. Smidman, O. Stockert, E. M. Nica, Y. Liu, H. Yuan, Q. Si and F. Steglich; "Colloquium: Unconventional fully gapped superconductivity in the heavy-fermion metal $CeCu_2Si_2$"; *Reviews of Modern Physics* **95**, No. 3 (2023) 031002.
[11] J. Rembieliński and P. Caban; "Nonlinear extension of the quantum dynamical semigroup"; *Quantum* **5** (2021) 420.
[12] S. Fleming, C. Frith, M. Goodale, H. Lau, J. LeDoux, A. Lee, M. Michel, A. Owen and M. Peters; "The integrated information theory of consciousness as pseudoscience".
[13] M. Shin, J. Lee and K. Jeong; "Estimating quantum mutual information through a quantum neural network"; *arXiv preprint* arXiv:2306.14566 (2023) Jun. 26.
[14] A. Smirne and A. Bassi; "Dissipative continuous spontaneous localization (CSL) model"; *Scientific Reports* **5**, No. 1 (2015) 12518.

حل عددی معادله شرودینگر برای یک شبکه عصبی کوانتومی

کدیور ، عرفان (دکتری)[۱] ؛ رضایی حیدری، فاطمه[۲]
[۱] استاد فیزیک گروه فیزیک [۲] دانشگاه صنعتی شیراز ، بلوار مدرس ،صندوق پستی ۳۱۳-۷۱۵۵۵ شیراز، ایران

چکیده

در این مقاله یک چارچوب فیلترینگ تطبیقی مبتنی بر شبکه عصبی کوانتومی بازگشتی(RQNN) ارائه می‌شود که دینامیک آن از طریق حل عددی معادله شرودینگر مدل‌سازی شده است. در این رویکرد، حالت نورونی به‌صورت تابع موج کوانتومی توصیف می‌شود و پتانسیل مؤثر شبکه از وزن‌های سیناپسی و چگالی احتمال استخراج می‌گردد. ساختار یادگیری شامل نرخ یادگیری، نرخ فراموشی و سیگنال خطا طراحی شده تا اصلاح پیوسته وزن‌ها و همگرایی سیگنال تخمینی تضمین شود. هدف اصلی، کاهش نویز و بازسازی دقیق سیگنال‌های الکتروانسفالوگرام(EEG)است. مدل پیشنهادی با بهره‌گیری از ویژگی‌های موجی و احتمالاتی، قادر است الگوهای پویا و هم‌فاز سیگنال‌های مغزی را با دقت بالاتری بازنمایی کند. نتایج حاصل نشان می‌دهد که چارچوب کوانتومی ارائه‌شده نه‌تنها توانایی کاهش مؤثر مولفه‌های نویزی و افزایش نسبت سیگنال به نویز را دارد، بلکه در تطبیق با تغییرات زمانی، پایداری همگرایی، و دقت بازسازی سیگنال عملکردی قابل‌توجه و فراتر از فیلترهای خطی و مدل‌های کلاسیک نشان می‌دهد. این بهبود ناشی از بهره‌گیری از ساختار احتمالاتی موجی و تعامل بازخوردی تابع موج با وزن‌های سیناپسی است که امکان استخراج الگوهای عصبی ظریف و غیرخطی را فراهم می‌سازد. این چارچوب می‌تواند زمینه‌ساز توسعه مدل‌های پیشرفته در تحلیل سیگنال‌های عصبی و کاربردهای آینده در سامانه‌های رابط مغزو رایانه (BCI) باشد.

واژه های کلیدی: شبکه عصبی کوانتومی بازگشتی(RQNN) ، معادله شرودینگر، سیگنال الکتروآنسفالوگرام(EEG)، پردازش سیگنال مغزی، رابط مغز و رایانه (BCI)

Numerical solution of the Schrodinger equation for a quantum neural network

Kadivar, Erfan, PhD[1]; RezaeiHeydari, Fatemeh[2]

[1] Professor of Physics Department of Physics,[2] Shiraz University of Technology, Modarres Blv., P.O. Box 71555-313, Shiraz, IRAN

Abstract

This paper presents an adaptive filtering framework based on Recurrent Quantum Neural Networks (RQNN), whose dynamics are modeled through the numerical solution of the Schrödinger equation. In this framework, neuronal states are represented as quantum wave functions, and the effective network potential is derived from synaptic weights and probability densities. The learning mechanism, incorporating learning rate, forgetting rate, and error signal, ensures continuous weight adaptation and convergence of the estimated signal. The primary goal is to denoise and accurately reconstruct electroencephalogram (EEG) signals. By exploiting the wave-like and probabilistic properties of the model, it can represent dynamic and phase-synchronized brain patterns with high precision. Results demonstrate that the proposed quantum framework not only effectively reduces noise and enhances the signal-to-noise ratio but also achieves superior temporal adaptation, convergence stability, and reconstruction accuracy compared to classical linear filters and models. This improvement arises from the probabilistic-wave structure and the feedback interaction between the wave function and synaptic weights, enabling extraction of subtle nonlinear neural patterns. The framework offers a promising foundation for advanced neural signal analysis and future Brain–Computer Interface (BCI) applications.

***Keywords**: Recurrent Quantum Neural Networks (RQNN), Schrödinger equation, Electroencephalogram (EEG) signals ,Neural signal processing, Brain–Computer Interface (BCI)*
PACS No.۸۹

مقدمه

در سال‌های اخیر، همگرایی میان علوم اعصاب، فیزیک کوانتومی و یادگیری ماشین موجب شکل‌گیری حوزه‌های میان‌رشته‌ای جدیدی شده است. یکی از مباحث بحث‌برانگیز در این میان، بررسی امکان وجود همبستگی‌های بنیادین میان پویایی‌های عصبی و مفاهیم مکانیک کوانتومی است؛ فرضیه‌ای که توجه پژوهشگران فیزیک، علوم اعصاب محاسباتی و هوش مصنوعی را به خود جلب کرده است. در این راستا، شبکه‌های عصبی کوانتومی، به‌ویژه در قالب شبکه‌های بازگشتی (RQNN)، به عنوان رویکردی نویدبخش برای مدل‌سازی سیستم‌های پیچیده عصبی مطرح شده‌اند.

معادلهٔ شرودینگر به‌عنوان هستهٔ نظری مکانیک کوانتومی، چارچوبی موج‌گونه برای توصیف حالات کوانتومی ارائه می‌دهد و در عین حال قابلیت مدل‌سازی فرآیندهای احتمالاتی در سامانه‌های غیرقطعی را فراهم می‌سازد. این ویژگی، آن را به ابزاری مناسب برای تحلیل سیستم‌های عصبی با رفتارهای پیچیده و غیرخطی تبدیل می‌کند. [۱]

پژوهش حاضر با هدف توسعه و ارزیابی یک شبکه عصبی کوانتومی بازگشتی برای مدل‌سازی و تحلیل سیگنال‌های EEG انجام می‌شود. EEG یکی از رایج‌ترین روش‌های ثبت فعالیت الکتریکی مغز بوده و نقشی کلیدی در علوم اعصاب، پزشکی و سامانه‌های رابط مغز-رایانه (BCI) ایفا می‌کند. با این حال، چالش‌هایی مانند نویز بالا، غیرخطی‌بودن سیگنال‌ها و تفاوت‌های فردی، استخراج ویژگی در کاربردهایی نظیر تصویرسازی حرکتی (MI) را دشوار می‌سازد. بهره‌گیری از مدل‌های کوانتومی، با توجه به توانایی آن‌ها در بازنمایی احتمالاتی دینامیک پیچیده، می‌تواند موجب بهبود کیفیت پیش پردازش و افزایش دقت تحلیل شود.

در مدل پیشنهادی RQNN، فعالیت‌های عصبی در قالب تابع موجی و بر اساس معادلهٔ شرودینگر مدل‌سازی می‌شوند تا بازنمایی دقیق‌تری از دینامیک مغزی فراهم گردد. هدف این پژوهش، حل معادلهٔ شرودینگر در یک شبکه عصبی کوانتومی به منظور فیلترکردن سیگنال‌های EEG، کاهش نویز و تخمین دقیق سیگنال اصلی است؛ به‌گونه‌ای که از طریق سیگنال بازخورد وزن‌دهی‌شده، خروجی بهینه تولید شود. [۲]

تعریف مسئله

رفتاردینامیکی شبکه عصبی کوانتومی با استفاده از معادلات موج شرودینگر توصیف می شود که در آن حالت کوانتومی $\psi(x,t)$ که تابع موج می‌باشد تحت تاثیر انرژی پتانسیل $V(x)$ قرار دارد. معادله موج شرودینگر به این صورت می‌باشد:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,t)+V(x,t)\psi(x,t) \qquad (۱)$$

در رابطه (۱) انرژی پتانسیل از این رابطه پیروی می‌کند:

$$V(x,t)=\varsigma W(x,t)\phi(x,t) \qquad (۲)$$

که در این رابطه $W(x,t)$ تابع وزن سناپسی و $\phi(x,t)$ چگالی احتمال می‌باشد و هرکدام از این‌ها طبق رابطه زیر بدست می‌آیند:

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t}=-\beta_d W(x,t)+\beta\phi(x,t)(1+\upsilon(t)^2) \qquad (۳)$$

$$\phi(x,t)=e^{\frac{-(y(t)-x)^2}{2\sigma^2}}-\left|\psi(x,t)\right|^2 \qquad (۴)$$

در روابط بالا β (نرخ یادگیری)، β_d (نرخ فراموشی)، υ (سیگنال خطا)، y (سیگنال ورودی) و σ (عرض نورون‌ها در شبکه) می‌باشد. سیگنال تخمین زده طبق رابطه زیر بدست می‌آید:

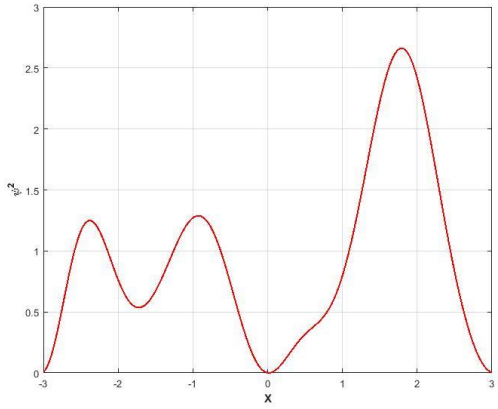
$$\hat{y}(t)=\int x\left|\psi(x,t)\right|^2 dx \qquad (۵)$$

$$\upsilon(t)=y(t)-\hat{y}(t) \qquad (۶)$$

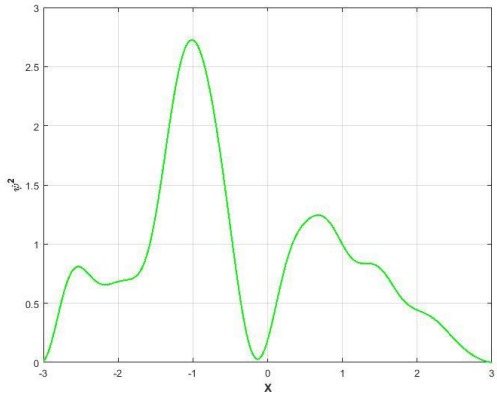
با توجه به روابط قبل، دینامیک شبکه عصبی کوانتومی توسط معادله شرودینگر و پتانسیل مؤثر ناشی از وزن‌های سیناپسی و چگالی احتمال توصیف می‌شود. پارامترهای نرخ یادگیری و نرخ فراموشی مشخص می‌کنند که شبکه با چه سرعتی نسبت به ورودی‌های جدید واکنش نشان دهد و اطلاعات پیشین را حفظ یا فراموش کند. سیگنال خطا و سیگنال ورودی باعث می‌شوند وزن‌ها به‌صورت پیوسته تصحیح شوند تا سیگنال تخمینی به سیگنال اصلی نزدیکتر شود.
به این ترتیب، ورود سیگنال به لوپ یادگیری باعث کاهش تدریجی نویز و همگرایی خروجی شبکه به سیگنال اصلی می‌شود، به‌نحوی که شبکه به‌صورت طبیعی یک فرآیند فیلترینگ تطبیقی کوانتومی انجام می‌دهد.

نتایج

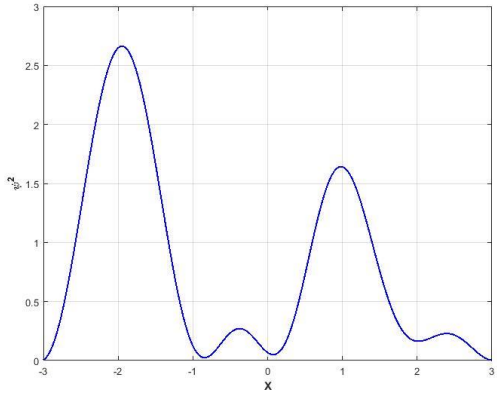
نمودار احتمال بر حسب x برای سه مقدار متفاوت β و β_d



شکل۱:نمودار احتمال بر حسب x برای مقادیر $\beta=0.5$ و $\beta_d=1$



شکل۲:نمودار احتمال بر حسب x برای مقادیر $\beta=2$ و $\beta_d=4$



شکل۳:نمودار احتمال بر حسب x برای مقادیر $\beta=9$ و $\beta_d=7$

شکل ۱ : بیانگر حالتی است که دینامیک سامانه هنوز همگرا نشده است. توزیع احتمال دارای چندین قله‌ی کم‌دامنه و پراکندگی زیاد است که نشان می‌دهد وزن‌ها تحت معادله‌ی تکاملی هنوز رفتار ناپایدار، نوسانی و حساس به نویز دارند. در این وضعیت سامانه فاقد ساختار غالب است و انرژی بین چند حالت نزد یک توزیع شده است.
شکل ۲ : نشان می‌دهد که با افزایش نرخ یادگیری، توزیع احتمال به‌وضوح سازمان‌یافته‌تر شده و قله‌های مشخص و با دامنه بالاتر شکل گرفته است. نوسانات ریز کاهش یافته و تابع موج تمایل بیشتری به تمرکز در نواحی با احتمال بیشتر دارد. این الگو

نشان‌دهنده‌ی ورود سامانه به فاز همگرایی و کاهش رفتارهای گذراست.

شکل ۳ : بیانگر حالتی با نرخ یادگیری بالا است که در آن سامانه به‌شدت روی تعداد اندکی از حالت‌ها تمرکز می‌کند. قله‌های تیز و کم‌تعداد نشان می‌دهد که تکامل وزن‌ها به سمت حالت‌های غالب و تقریباً تکمود حرکت کرده، اما این امر احتمال حساسیت به نویز و کاهش انعطاف پذیری را افزایش می‌دهد.

در نهایت:

با افزایش β و β_d سامانه از یک حالت ناپایدار و چندقله‌ای (شکل ۱) به الگوی همگرا و ساختاریافته (شکل ۲) رسیده و در نهایت در مقادیر بالا به تمرکز بیش‌ازحد روی حالت‌های محدود (شکل ۳) می‌رسد. این روند کاملاً با انتظار نظری از معادلات تکاملی وزن و تابع موج سازگار است و اهمیت تنظیم بهینه‌ی β را به‌روشنی نشان می‌دهد.

در این شبیه‌سازی، میزان پراکندگی ذره در فضا با انحراف معیار موقعیت Δx سنجیده شده است که به صورت:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \qquad (۷)$$

که در این رابطه $\langle x \rangle$ میانگین مکان ذره و $\langle x^2 \rangle$ میانگین مربع مکان است.

بنابراین Δx معیاری است برای اندازه‌گیری «پراکندگی موج» ذره در فضای مکان و مقدار آن ۳,۵۷ می‌باشد. لازم به ذکر است که تابع موج اولیه به صورت تصادفی تعریف شده است، بنابراین مقدار گزارش شده برای Δx یک نمونه از حالت‌های ممکن است و اجرای مجدد شبیه‌سازی می‌تواند نتایج کمی متفاوتی ارائه دهد. در واقع این مقدار وابسته به تابع موج اولیه است.

نتیجه‌گیری

در این مطالعه، شبکه عصبی کوانتومی بازگشتی (RQNN) با استفاده از حل عددی معادله شرودینگر برای بازسازی سیگنال‌های (EEG) مورد بررسی قرار گرفت و رفتار نورون‌ها بر حسب انرژی پتانسیل تحلیل شد. نتایج نشان داد که شبکه با گذر زمان از حالت ناپایدار و پراکنده به یک الگوی همگرا و ساختاریافته حرکت می‌کند؛ نرخ یادگیری بهینه موجب تمرکز تابع موج بر حالت‌های غالب سیگنال و کاهش نویزهای گذرا شد، در حالی که مقادیر بسیار بالا انعطاف پذیری شبکه را محدود می‌کند. تحلیل پراکندگی تابع موج و توزیع احتمال تأکید می‌کند که دینامیک شبکه با پیش‌بینی‌های نظری معادلات تکاملی وزن‌ها و تابع موج هماهنگ است. این چارچوب، با بهره‌گیری از ویژگی‌های موجی و تعامل بازخوردی تابع موج و وزن‌های سیناپسی، توانایی بازسازی دقیق سیگنال، کاهش نویز و استخراج الگوهای غیرخطی و پیچیده عصبی را دارد. یافته‌ها نشان می‌دهد که (RQNN) نه تنها ارزش نظری قابل توجهی دارد، بلکه ابزار مؤثری برای تحلیل پیشرفته سیگنال‌های مغزی و بهبود عملکرد سیستم‌های رابط مغز و رایانه (BCI) فراهم می‌کند. این مطالعه پایه‌ای محکم برای توسعه مدل‌های پیشرفته در علوم اعصاب محاسباتی و سامانه‌های هوشمند مغز-رایانه ایجاد می‌کند.

مرجع ها

[۱] Gandhi V., Prasad G., Coyle D., Behera L., MeGinnity T.M.," Quantum Neural Network-Based EEG Filtering for a Brain–Computer Interface ", IEEE Trans. Neural Netw. Learn. Syst. **25**, 278–288 (2014).

[۲] Gaur P., Gupta H., Chowdhury A., McCreadie K., Pachori R.B., and Wang H., " A Sliding Window Common Spatial Pattern for Enhancing Motor Imagery Classification in EEG-BCI ", IEEE Trans. Instrum. Meas. **70**, 1_9 (2021).

هندسه‌ی ترمودینامیکی آمارهای کلاسیکی و کوانتومی تعمیم‌یافته به روش سودو آنالیز

بایرامی ، نگین[۱] ؛ محمدزاده ، حسین[۱] ؛آگاهی، حمزه[۲] ؛ مهری دهنوی، حسین[۳] ؛ عبادی ، زهرا[۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه محقق اردبیلی ، خیابان دانشگاه ، اردبیل
[۲] گروه آمار، دانشگاه نوشیروانی بابل، مازندران
[۳] گروه فیزیک، دانشگاه نوشیروانی بابل، مازندران

چکیده

در این مقاله، یک روش متفاوت برای تعمیم فاکتورهای آماری ارائه می‌شود که مبتنی بر بازتعریف غیرخطی متغیر انرژی است. با اعمال نگاشت $g(x) = x^{\alpha}$ ، نسخه‌های تعمیم‌یافته‌ای از آمارهای ماکسول–بولتزمن، بوز–اینشتین و فرمی–دیراک به دست می‌آید که در حد $\alpha = 1$ به فرم‌های استاندارد بازمی‌گردند. پیامدهای ترمودینامیکی این تعمیم در چارچوب هندسه‌ی ترمودینامیکی بررسی شده و نشان داده می‌شود که پارامتر α می‌تواند بدون معرفی برهم‌کنش‌های فیزیکی صریح، به تغییر همبستگی‌های آماری مؤثر و رفتار هندسی سامانه منجر شود.

واژه های کلیدی: *سودو آنالیز، توزیع‌های آماری، انحنای ترمودینامیکی*

Thermodynamic Geometry of Generalized Classical and Quantum Statistics via Pseudo-Analysis

Bayrami, Negin[1]; Mohammadzade, Hossein[1] ;Agahi, Hamzeh[2]; Mehri Dehnavi, Hossein[3]; Ebadi, Zahra[1]
[1] *Department of Physics, University of Mohaghegh Ardabili, Ardebil,*
[2] *Department of Statistics, Babol Noshirvani University , Mazandaran*
[3] *Department of Physics, Babol Noshirvani University , Mazandaran*

Abstract

In this paper, an alternative approach to the generalization of statistical factors is presented, based on a nonlinear redefinition of the energy variable. By applying the mapping $g(x) = x^{\alpha}$, generalized forms of the Maxwell–Boltzmann, Bose–Einstein, and Fermi–Dirac statistics are obtained, which reduce exactly to the standard distributions in the limit $\alpha = 1$. The thermodynamic consequences of this generalization are investigated within the framework of thermodynamic geometry. It is shown that the deformation parameter α can modify effective statistical correlations and the geometric behavior of the system, even in the absence of explicit physical interactions.

Keywords: Pseudo-analysis, *Statistical distributions, Thermodynamic curvature*

PACS No.

مقدمه

توزیع‌های آماری متعارف مانند توزیع ماکسول–بولتزمن، بوز–اینشتین و فرمی–دیراک از بنیادی‌ترین ابزارهای فیزیک آماری در توصیف رفتار سامانه‌های کلاسیک و کوانتومی به شمار می‌روند[1]. این توزیع‌ها در چارچوب استاندارد خود، با موفقیت رفتار سامانه‌های ایده‌آل یا با همبستگی‌های مشخص را مدل‌سازی کرده و مبنای محاسبه‌ی بسیاری از کمیت‌های ترمودینامیکی قرار می‌گیرند. با این وجود، در توصیف سامانه‌های پیچیده، برهمکنشی یا دور از تعادل محدودیت‌های این فرم‌های استاندارد به تدریج آشکار می‌شود. به همین علت، در فیزیک آماری تلاش‌های گسترده‌ای برای تعمیم این آمارها صورت گرفته است.

یکی از روش‌های تعمیم که قبلا انجام شده، استفاده از انتگرال شوکه و مفهوم اندازه‌های فازی است. در این رویکرد تابعی به‌نام $m(x)$ تعریف می‌شود که وابسته به پارامتر کنترلی بوده، به‌طوری که امکان مدل‌سازی اندرکنش‌های ذرات را فراهم می‌کند. روش دیگر، سودو آنالیز است که در این مقاله از آن استفاده کرده‌ایم.

در این پژوهش، باتوجه به سودو آنالیز وبا استفاده از g-calculus [2] نسخه‌های تعمیم‌یافته‌ای از توابع توزیع حاصل می‌گردد. بررسی ترمودینامیکی این توزیع‌ها در چارچوب هندسه ترمودینامیکی نشان می‌دهد که این تعمیم صرفا یک باز تعریف ریاضی نبوده بلکه پیامدهای فیزیکی مشخصی دارد.

چارچوب سودو آنالیز و تعمیم آمارهای استاندارد

همان‌طور که اشاره شد، چارچوب مورد استفاده در این پژوهش ریشه در نظریه‌ی pseudo-analysis و به‌طور خاص g-calculus دارد. در این رویکرد به‌جای استفاده از عملیات کلاسیک، ساختارهای ریاضی از طریق یک مولد یکنواخت صعودی g باز تعریف میشوند[3]. در این کار، ما یک چارچوب تعمیم‌یافته برای بازتعریف توابع توزیع آماری استاندارد معرفی می‌کنیم. ایده‌ی اصلی بر مبنای استفاده از یک مولد یکنواخت افزایشی g و وارون آن g^{-1} است که امکان تعریف عملیات و توزیع‌های سودو را فراهم می‌آورد.

به‌طور مشخص، با در نظر گرفتن نگاشت

$$g(x) = x^{\alpha}, \quad \alpha > 0,$$

و وارون آن

$$g^{-1}(y) = y^{1/\alpha},$$

یک خانواده‌ی جدید از توابع توزیع تعمیم‌یافته از طریق ترکیب

$$F_{\alpha}(x) = g^{-1}\left(f\left(g(x)\right)\right)$$

ساخته می‌شود، که در آن f یکی از توابع آماری کلاسیک از قبیل ماکسول–بولتزمن، فرمی–دیراک یا بوز–اینشتین است. در این چارچوب، تابع استاندارد ابتدا توسط مولد g ارزیابی شده و سپس با اعمال وارون مولد به فضای اولیه بازگردانده می‌شود. این فرآیند منجر به ظهور یک کلاس جدید از توابع توزیع می‌شود که ضمن حفظ ساختار کلی توابع آماری اصلی، رفتاری غیرخطی و قابل تنظیم از طریق پارامتر α از خود نشان می‌دهند. برای تابع ماکسول–بولتزمن، این روش به توزیع تعمیم‌یافته‌ای به فرم

$$F_{MB}^{\alpha}(x) = exp\left(-\frac{x^{\alpha}}{\alpha}\right) \qquad (1)$$

می‌انجامد، در حالی که برای توابع فرمی–دیراک و بوز–اینشتین، به ترتیب روابط زیر به‌دست می‌آید:

$$F_{FD}^{\alpha}(x) = \frac{1}{(e^{x^{\alpha}}+1)^{1/\alpha}}, \qquad (2)$$

$$F_{BE}^{\alpha}(x) = \frac{1}{(e^{x^{\alpha}}-1)^{1/\alpha}} \qquad (3)$$

این ساختار به‌طور طبیعی شامل توابع آماری استاندارد به‌عنوان حالت خاص $\alpha = 1$ بوده و امکان بررسی گذار پیوسته از آمار کلاسیک به رژیم‌های غیرخطی تعمیم‌یافته را فراهم می‌کند. چنین رویکردی می‌تواند به‌عنوان پلی میان توزیع‌های آماری فیزیک آماری و نظریه‌ی اندازه‌های تعمیم‌یافته در چارچوب g-calculus در نظر گرفته شود.

پس از به‌دست‌آوردن توابع تعمیم‌یافته، برای هر یک از توابع آماری ماکسول–بولتزمن، فرمی–دیراک و بوز–اینشتین، گام بعدی تحلیل رفتار این توابع در مجاورت حالت کلاسیک انجام می‌شود. بدین منظور، هر یک از توزیع‌های حاصل حول مقدار مرجع $\alpha = 1$ بسط سری داده شده و تنها جمله‌های تا مرتبه‌ی اول در پارامتر انحراف $(\alpha - 1)$ نگه داشته می‌شوند. این بسط مرتبه‌ی اول، یک اصلاح کنترل‌شده و غیرخطی نسبت به آمار استاندارد فراهم می‌کند و امکان مطالعه‌ی اثرات انحراف از حالت کلاسیک را به‌صورت تحلیلی میسر می‌سازد. توابع به‌دست‌آمده پس از بسط، به‌عنوان تابع توزیع حالت‌ها در چارچوب فیزیک آماری در نظر گرفته می‌شوند:

$$n_{MB}^{\alpha}(x) = e^{-x}[1 - (\alpha - 1)x(\ln x - 1)] \qquad (4)$$

$$n_{FD}^{\alpha}(x) = \frac{1}{e^x - 1} \times \left[1 + (\alpha - 1)\left(\ln(e^x - 1) - \frac{xe^x \ln x}{e^x - 1}\right)\right] \quad (5)$$

$$n_{BE}^{\alpha}(x) = \frac{1}{e^x + 1} \times \left[1 + (\alpha - 1)\left(\ln(e^x + 1) - \frac{xe^x \ln x}{e^x + 1}\right)\right] \quad (6)$$

بر این اساس، کمیت‌های ترمودینامیکی اساسی از جمله تعداد ذرات N و انرژی داخلی U با استفاده از روابط استاندارد فیزیک آماری محاسبه می‌گردند. این فرآیند به تعریف یک ساختار هندسی طبیعی بر فضای پارامترهای ترمودینامیکی منجر می‌شود. در ادامه، با بهره‌گیری از چارچوب هندسه‌ی ترمودینامیکی، متریک ترمودینامیکی متناظر با هر یک از آمارهای تعمیم‌یافته استخراج شده و انحنای اسکالر ترمودینامیکی محاسبه می‌شود.

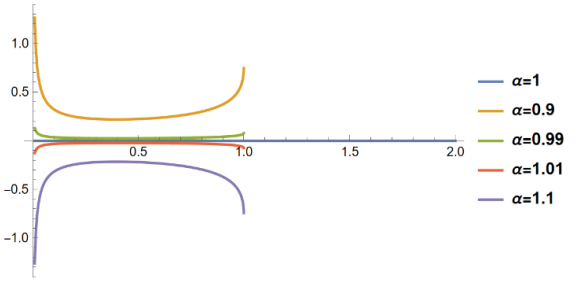
تحلیل هندسه ترمودینامیکی و گذارهای آماری ناشی از پارامتر α

در هندسه ترمودینامیکی روابط N و U به‌صورت زیر تعریف می‌شوند:

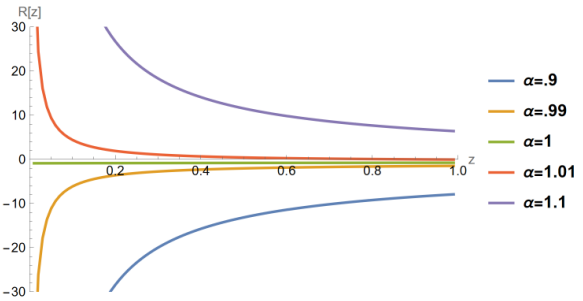
$$N = \int_0^{\infty} \Omega(\varepsilon)\, n(\varepsilon)\, d\varepsilon, \qquad U = \int_0^{\infty} \varepsilon\, \Omega(\varepsilon)\, n(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

که در این روابط بجای $n(\varepsilon)$، روابط (٤)، (٥) و (٦) جاگذاری می‌شود و N و U برای هر سه تابع بدست می‌آید.

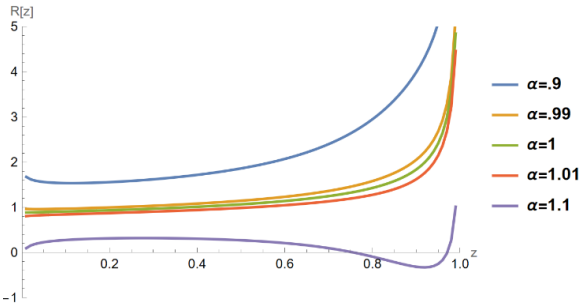
با توجه به مطالب بالا و عناصر متریک، انحنای ترمودینامیکی R برای هر سه تابع محاسبه می‌شود[4]. انحنای به‌دست‌آمده نیز، همانند توابع توزیع، حول $\alpha = 1$ بسط داده شده و تنها جمله‌های مرتبه‌ی اول حفظ می‌گردند. با توجه به طولانی بودن روابط، از درج آن‌ها در متن مقاله صرف‌نظر شده است. این رویکرد تضمین می‌کند که تحلیل هندسی ارائه‌شده مستقیماً با انحراف‌های کوچک از آمار کلاسیک مرتبط باشد و تفسیر فیزیکی روشنی داشته باشد. در نهایت، انحنای ترمودینامیکی حاصل برای هر سه مورد ماکسول–بولتزمن، فرمی–دیراک و بوز–اینشتین به‌صورت عددی محاسبه و ترسیم می‌شود. نتیجه‌ی این تحلیل، سه نمودار متمایز از انحنای ترمودینامیکی است که امکان مقایسه‌ی مستقیم رفتار هندسی سامانه‌های کلاسیک، فرمیونی و بوزونی را تحت تعمیم غیرخطی معرفی‌شده فراهم می‌آورد. این نمودارها نشان می‌دهند که حتی اصلاحات مرتبه‌ی اول در پارامتر α می‌توانند به تغییرات کیفی معناداری در ساختار هندسی و همبستگی‌های آماری سامانه منجر شوند. در ادامه، نمودار R(z) برای سه تابع سودو ماکسول–بولتزمن، سودو فرمی–دیراک و سودو بوز–اینشتین رسم شده است.



شکل۱: در این شکل، انحنای ترمودینامیکی برای توزیع سودو ماکسول–بولتزمن به ازای مقادیر مشخص α رسم شده است.



شکل۲: در این شکل، انحنای ترمودینامیکی برای توزیع سودو فرمی–دیراک به ازای مقادیر مشخص α رسم شده است. به ازای α<۱ انحنا منفی و رفتار کاملا فرمیونی است. به ازای α>۱ انحنا به سمت مثبت می‌رود.



شکل۳: در این شکل، انحنای ترمودینامیکی برای توزیع سودو بوز–اینشتین به ازای مقادیر مشخص α رسم شده است. به ازای $\alpha<1$ رفتار انحنا همچنان کاملا بوزونی است و برای $\alpha>1$ نواحی انحنای منفی ظاهر می‌شود.

در شکل(۱)، در حالت مرجع $\alpha = 1$، انحنای ترمودینامیکی در کل گستره‌ی z صفر است که این رفتار با فقدان همبستگی‌های آماری ذاتی در سامانه‌های کلاسیک ماکسول–بولتزمن سازگار می‌باشد. با این حال، با انحراف از مقدار مرجع، یعنی برای $\alpha \neq 1$ انحنای غیرصفر پدیدار می‌شود. برای مقادیر $\alpha < 1$، انحنای مثبت و ضعیف مشاهده می‌گردد، در حالی که برای $\alpha > 1$، نواحی با انحنای منفی ظاهر می‌شوند. این نتیجه نشان می‌دهد که حتی در آماری ذاتاً کلاسیک، اعمال تعمیم شبه‌تحلیلی می‌تواند به ایجاد همبستگی‌های مؤثر و تغییر کیفی در ساختار هندسی سامانه منجر شود. از این رو، آمار ماکسول–بولتزمن به‌عنوان یک خط پایه‌ی هندسی مناسب برای مقایسه با آمارهای کوانتومی عمل می‌کند.

شکل(۲)، در نمودارهای مربوط به آمار فرمی–دیراک، برای مقادیر $\alpha < 1$، انحنای ترمودینامیکی منفی بوده و این موضوع با دافعه‌ی آماری فرمیونی و اصل طرد پائولی سازگاری کامل دارد. در این ناحیه، تعمیم شبه‌تحلیلی موجب حفظ و حتی تقویت ویژگی‌های فرمیونی سامانه می‌شود. با افزایش پارامتر α و عبور از مقدار مرجع $\alpha = 1$، انحنا به‌تدریج به سمت مقادیر مثبت میل می‌کند. این تغییر علامت نشان‌دهنده‌ی تضعیف دافعه‌ی آماری فرمیونی و ظهور رفتارهایی شبیه به سامانه‌های بوزونی است. از این دیدگاه، می‌توان گفت که تغییر پارامتر α منجر به یک گذار پیوسته‌ی آماری–هندسی از رفتار فرمیونی به رفتار بوزونی می‌شود؛ گذاری که نه از جنس گذار کوانتومی واقعی، بلکه حاصل تغییر در ساختار آماری و هندسی سامانه است.

در شکل (۳)، نمودارهای مربوط به آمار بوز–اینشتین تعمیم‌یافته نشان می‌دهند که برای مقادیر $\alpha < 1$، انحنای ترمودینامیکی همچنان مثبت باقی مانده و رفتار مشخصه‌ی بوزونی، که با همگرایی حالت‌ها و جاذبه‌ی آماری همراه است، حفظ می‌شود. این موضوع بیانگر آن است که پارامتر شبه‌تحلیلی α در این ناحیه موجب تقویت یا دست‌کم تثبیت ساختار بوزونی سامانه می‌گردد. در مقابل، برای مقادیر $\alpha > 1$ نواحی با انحنای منفی ظاهر می‌شوند. ظهور این بخش‌های منفی نشان‌دهنده‌ی تضعیف رفتار بوزونی و ایجاد مؤلفه‌های دافعه‌ی آماری در اثر تعمیم شبه‌تحلیلی است. بنابراین می‌توان گفت که پارامتر α نقش یک پارامتر کنترلی را ایفا می‌کند که شدت همگرایی بوزونی را تنظیم کرده و در مقادیر بزرگ‌تر از واحد، سامانه را از رفتار بوزونی خالص دور می‌سازد.

نتیجه گیری

نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهند که پارامتر شبه‌تحلیلی α نقش اساسی در کنترل علامت و شدت انحنای ترمودینامیکی ایفا می‌کند. در حالی که آمار ماکسول–بولتزمن به‌عنوان حالت مرجع بدون همبستگی عمل می‌کند، آمارهای بوز–اینشتین و فرمی–دیراک تحت تأثیر این پارامتر، امکان بروز رفتارهای بینابینی و گذارهای آماری–هندسی معنادار را نشان می‌دهند. این امر بیانگر آن است که تعمیم‌های شبه‌تحلیلی ابزار مناسبی برای مطالعه‌ی پیوستار میان انواع مختلف همبستگی‌های آماری در چارچوب هندسه‌ی ترمودینامیکی محسوب می‌شوند.

مرجع‌ها

[۱] R.K. Pathria; *Statistical Mechanics* (1996)

[۲] E. Pap; “g-Calculus”; *Novi Sad Journal of Mathematics* 23 (1993): 145–156

[۳] H. Mehri-Dehnavi, H. Agahi and R. Mesiar;“Pseudo-exponential distribution and its statistical applications in econophysics”;*Soft Computing* 23.1 (2019): 357–363

[٤] G. Ruppeiner; “Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory”; *Reviews of Modern Physics* **67.3**(1995):605

تقویت همکاری و مهار گسترش همه‌گیری در شبکه‌های پیچیده

نوری، مهران[۱]؛ عظیمی، ناهید[۱]؛ سلحشور، محمد[۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی زنجان، زنجان

[۲] مرکز مطالعات رفتار جمعی، دانشگاه کنستانتس، کنستانتس، آلمان

چکیده

همکاری افراد دراقدامات محافظتی، ایمنی جمعی را به عنوان کالای عمومی ایجاد کرده و بیماری را کنترل می‌کند. در مقابل اپیدمی نیز همکاری را برمی‌انگیزد. در این پژوهش، مدل جفت‌شده انتشار بیماری و بازی کالای عمومی را با تمرکز بر محافظت خودمحور و نوع‌دوستی بررسی می‌کنیم. همچنین نشان می‌دهیم ناهمگنی ساختاری عامل موثر بر تقویت همکاری و کنترل بیماری است.

واژه های کلیدی: *همکاری، همه گیری، شبکه های پیچیده*

Cooperative Strategies and Epidemic Mitigation in Complex Networks

Noori, Mehran[۱]; Azimi, Nahid[۱]; Salahshour, Mohammad[۲]

[۱] *Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan*

[۲] *Centre for the Advanced Study of Collective Behaviour, University of Konstanz, Konstanz, Germany*

Abstract

Individual cooperation in protective measures establishes collective safety as a public good and controls the disease. Conversely, an epidemic also induces cooperation. In this study, we investigate a coupled model of disease spreading and the public goods game, focusing on self-centered protection and altruism. We also demonstrate that structural heterogeneity is an effective factor in enhancing cooperation and controlling the disease.

***Keywords**:Cooperation, Epidymics, Complex Networks*

PACS No. 89

مقدمه

درک دقیق سازوکارهایی که به مهار و کنترل یک همه‌گیری می انجامند از اهداف پژوهش‌های مرتبط با همه‌گیری است [۱]. واکنش‌های رفتاری افراد در مواجهه با گسترش بیماری نقش مهمی در کاهش شیوع بیماری دارند [۲، ۳] که این اقدامات با هزینه‌های اجتماعی و اقتصادی همراه‌اند، اما به سود جمعی منجر شده و شکل‌گیری ایمنی جمعی را ممکن می‌سازند. از این رو بررسی این پدیده در چارچوب نظریه بازی‌های تکاملی و با بهره‌گیری از بازی کالای عمومی رویکردی مناسب محسوب می‌شود [٤، ٥]. بررسی دو رویکرد «محافظت خودمحور» و «محافظت نوع دوستانه»، از موضوعات کلیدی در تحلیل رفتار تصمیم‌گیری افراد در کنترل بیماری‌ها به شمار می‌رود. در این مقاله، تعامل میان انتشار بیماری و شکل‌گیری رفتارهای محافظتی خودمحور و نوع‌دوستانه با استفاده از یک مدل جفت‌شده شامل بازی کالای عمومی و مدل سالم–بیمار–سالم بر روی شبکه‌های مختلف بررسی می‌شود. همچنین این تحلیل به درک نقش ساختار شبکه در پایداری همکاری در کنترل بیماری کمک می‌کند [٦، ٧].

روش‌های محاسباتی

در مدل پیشنهادی، رفتار افراد هم‌زمان تحت تأثیر دینامیک بازی کالای عمومی و فرآیند انتشار بیماری قرار دارد. بر اساس بازی کالای عمومی، هر فرد می‌تواند یکی از دو استراتژی همکار (C) یا موج‌سوار (D) را انتخاب کند. همچنین طبق دینامیک انتشار بیماری

سالم-بیمار-سالم، هر فرد ممکن است در یکی از دو حالت سالم (S) یا بیمار (I) باشد. ترکیب این دو بعد، جمعیت را به چهار گروه تقسیم می‌کند: سالمِ همکار (SC)، سالمِ موج‌سوار (SD)، بیمارِ همکار (IC) و بیمارِ موج‌سوار (ID). در این مدل دینامیک بازی و انتشار بیماری به ترتیب با احتمال‌های τ و $\tau-۱$ انجام می‌شوند. در انتشار بیماری ابتدا بهبود بیماران با نرخ μ و انتشار با نرخ پایه $\alpha_۰$ رخ می‌دهد. اگر فرد بیمار رفتار همکاری را انتخاب کند، احتمال انتشار با ضریب نوع‌دوستی α_t کاهش یافته و در صورتی که فرد سالم همکاری کند، با ضریب پیش‌گیری خودمحور α_r احتمال ابتلای او کاهش پیدا می‌کند. به این ترتیب، همکاری از طریق اثر گذاشتن بر منافع جمعی، نقشی مستقیم در کنترل انتشار بیماری ایفا می‌کند. در انجام بازی همکاران در یک گروه هزینه c_G را می‌پردازند که مجموع این هزینه‌ها با ضریب هم‌افزایی r میان کل گروه توزیع می‌شود. همچنین افراد بیمار متحمل هزینه c_I هستند. بنابراین پاداش خالص هر فرد در یک گروه g با اندازه G با روابط زیر به دست می‌آید:

$$\pi_{IC}^{g} = rc_G\frac{N_C+۱}{G}-c_G-c_I,$$
$$\pi_{ID}^{g} = rc_G\frac{N_C}{G}-c_G,$$
$$\pi_{SC}^{g} = rc_G\frac{N_C+۱}{G}-c_G-c_I,$$
$$\pi_{SD}^{g} = rc_G\frac{N_C}{G}, \qquad (۱)$$

که N_c تعداد همسایگان همکار در گروه فرد مرکزی مورد نظر است. در شبیه‌سازی مدل روی شبکه‌ها، جمعیتی شامل N فرد در نظر گرفته می‌شود. در انجام بازی گره مرکزی x با درجه k در $k+۱$ یک گروه بازی می‌کند. یک گروه به مرکزیت خود x و شامل همسایگانش و k گروه دیگر به مرکزیت هریک از همسایگان x تشکیل شده و شامل همسایه‌های همسایه x هستند. پاداش نهایی Π_x مجموع پاداش حاصل از بازی کردن در همه گروه های شامل x و براساس روابط (۱) است. در هرگامِ به‌روزرسانیِ استراتژی‌ها، راس x و همسایه‌اش y به طور تصادفی انتخاب شده و هریک پاداش نهایی خود را محاسبه می‌کنند. سپس راس x استراتژی خود را به استراتژی y با رابطه احتمال فرمی که به شکل زیر تعریف می‌شود تغییر می‌دهد.

$$W(s_x\leftarrow s_y)=\frac{۱}{۱+\exp[(\Pi_x-\Pi_y)/K]}, \qquad (۳)$$

که در آن، پارامتر K میزان عدم قطعیت در فرآیند به‌روزرسانی استراتژی را کنترل می‌کند و s_i استراتژی گره i ام است.

این فرایند در گام‌های مونت‌کارلو (هر گام N انتخاب) تا رسیدن به وضعیت پایدار تکرار می‌شود.

معادله‌های تحول جمعیت آمیخته برای هریک از چهار گونه جمعیتی به صورت تلفیقی از دینامیک بازی با ضریب τ و دینامیک انتشار بیماری با ضریب $\tau-۱$ به شکل زیر نوشته می‌شوند.

$$\frac{d\rho_{SC}}{dt}=\tau\rho_{SC}(\pi_{SC}-\bar{\pi})+(۱-\tau)\left[\mu\rho_{IC}-\alpha_۰\alpha_t\alpha_r\rho_{IC}\rho_{SC}-\alpha_۰\alpha_r\rho_{ID}\rho_{SC}\right],$$

$$\frac{d\rho_{SD}}{dt}=\tau\rho_{SD}(\pi_{SD}-\bar{\pi})+(۱-\tau)\left[\mu\rho_{ID}-\alpha_۰\alpha_t\rho_{IC}\rho_{SD}-\alpha_۰\rho_{ID}\rho_{SD}\right],$$

$$\frac{d\rho_{IC}}{dt}=\tau\rho_{IC}(\pi_{IC}-\bar{\pi})+(۱-\tau)\left[\mu\rho_{IC}+\alpha_۰\alpha_r\alpha_t\rho_{IC}\rho_{SC}+\alpha_۰\alpha_r\rho_{ID}\rho_{SC}\right],$$

$$\frac{d\rho_{ID}}{dt}=\tau\rho_{ID}(\pi_{ID}-\bar{\pi})+(۱-\tau)\left[\mu\rho_{ID}+\alpha_۰\alpha_r\rho_{IC}\rho_{SD}+\alpha_۰\rho_{ID}\rho_{SD}\right]. \qquad (۲)$$

در این معادلات π_i پاداش میانگین نوع i و $\bar{\pi}$ میانگین پاداش کل جمعیت است که از روابط زیر محاسبه می‌شوند.

$$\pi_{SC}=\sum_{m=۰}^{G-۱}\binom{G-۱}{m}\rho_C{}^m\rho_D{}^{G-۱-m}\exp\left[\frac{rc_G\frac{m+۱}{G}-c_G}{K}\right],$$

$$\pi_{SD}=\sum_{m=۰}^{G-۱}\binom{G-۱}{m}\rho_C{}^m\rho_D{}^{G-۱-m}\exp\left[\frac{rc_G\frac{m}{G}}{K}\right],$$

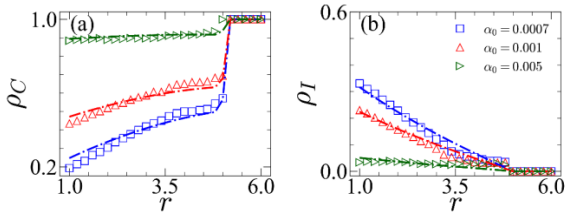
$$\pi_{IC}=\sum_{m=۰}^{G-۱}\binom{G-۱}{m}\rho_C{}^m\rho_D{}^{G-۱-m}\exp\left[\frac{rc_G\frac{m+1}{G}-c_G-c_I}{K}\right],$$

$$\pi_{ID}=\sum_{m=۰}^{G-۱}\binom{G-۱}{m}\rho_C{}^m\rho_D{}^{G-۱-m}\exp\left[\frac{rc_G\frac{m}{G}-c_I}{K}\right],$$

$$\bar{\pi}=\sum_i\rho_i\pi_i,\ \ i\in\{IC, ID, SC, SD\}. \qquad (۳)$$

نتایج

شبیه‌سازی عددی برای جمعیت آمیخته، شبکه‌های تصادفی و بی‌مقیاس با میانگین درجه $<k>=٤$ و شبکه مربعی با شرایط مرزی دوره‌ای انجام می‌شود. شرایط اولیه شامل نسبت $\rho_{۰C}=۰,۵$ برای همکاران و $\rho_{۰I}=۰,۰۱$ برای افراد بیمار است که به‌صورت تصادفی

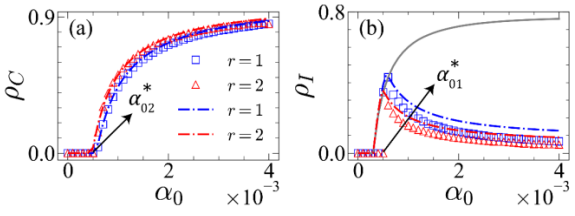


شکل ۱: مقادیر پایای کسر افراد همکار ρ_C و افراد بیمار ρ_I به عنوان تابعی از ضریب هم‌افزایی r، در یک جمعیت آمیخته برای مقادیر متفاوت احتمال انتشار بیماری α_0. نمادها نتیجه حاصل از شبیه‌سازی و خط‌چین‌ها نتیجه حل عددی معادلات میدان میانگین (۲) هستند.

در جمعیتی با اندازه N=۱۰۰۰ توزیع شده‌اند. نتایج از میانگین‌گیری ۱۰۰ تکرار با پارامترهای ثابت μ=۰٫۳ و K=۰٫۵ حاصل شده‌اند. پارامترها در جایی که تغییر نمی‌کنند به صورت ثابت $\alpha_t=\alpha_r$=۰٫۰۱، c_I=۱۰، c_G=۱، r=۱٫۵ و α_0=۰٫۵ در نظر گرفته شده‌اند. همچنین، در تمام شبیه‌سازی‌ها فرض می‌شود که به‌روزرسانی استراتژی‌ها کندتر از گسترش اپیدمی انجام می‌شود و مقدار آن τ=۰٫۰۱ است. در این چارچوب، دو متغیر اصلی مورد توجه قرار می‌گیرند: نسبت کل افراد آلوده ρ_I و نسبت همکاران ρ_C. ضریب r در ناحیه عدم شکل‌گیری همکاری و پارامترهای اپیدمی در محدوده تضمین شیوع در مدل‌های استاندارد تنظیم شده‌اند.

شکل ۱ نسبت همکاران و افراد آلوده در حالت پایا را بر حسب ضریب هم‌افزایی و احتمالات انتشار متفاوت در جمعیت آمیخته نمایش می‌دهد. نتایج حاکی از آن است که حضور بیماری، ظهور همکاری را در مقادیری کمتر از آستانه‌ی معمول ممکن ساخته و افزایش نرخ انتشار نیز آن را تقویت می‌کند. این رشد همکاری منجر به کاهش همه‌گیری شده و یک چرخه بازخوردی میان همکاری و بیماری شکل می‌دهد. افزون بر این، تطابق قابل‌توجهی میان نتایج شبیه‌سازی و حل عددی مشاهده می‌شود.

شکل ۲ رفتار چرخه بازخوردی را بر حسب احتمال انتشار نشان می‌دهد. الگوی کلی حاکی از آن است که افزایش نرخ انتشار، همکاری را تقویت و سطح آلودگی را محدود می‌کند. نکته کلیدی وجود دو گذار است: ابتدا $\alpha_{0,1}^*$ (آغاز همه‌گیری) و سپس $\alpha_{0,2}^*$ (شکل‌گیری همکاری). پس از نقطه دوم، روند گسترش بیماری معکوس شده و افزایش نرخ انتشار به کاهش آلودگی می‌انجامد؛ رفتاری که در مقایسه با دینامیک مجزا نقش مهار کننده همکاری را



شکل ۲: مقادیر پایای کسر افراد همکار ρ_C و افراد بیمار ρ_I به عنوان تابعی از احتمال انتشار بیماری α_0 در یک جمعیت آمیخته برای برای مقادیر متفاوت ضریب هم‌افزایی r. نمادها نتیجه حاصل از شبیه‌سازی و خط‌چین‌ها نتیجه حل عددی معادلات میدان میانگین (۲) هستند. خط خاکستریِ پیوسته نشان‌دهنده‌ی کسر افراد آلوده در مدل استاندارد SIS است.

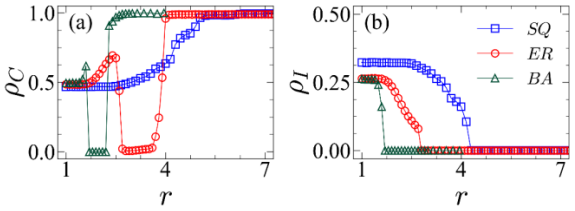
آشکار می‌سازد.

بررسی شکل‌های ۳ و ٤ برای شبکه‌های مربعی، تصادفی و بی‌مقیاس، الگوهای کلی پیشین را تایید می‌کند. در شبکه‌های تصادفی و بی‌مقیاس، ناهمگنی با تقویت همکاری، زمان بقای بیماری را کاهش داده و در بازه‌هایی از ضریب هم‌افزایی به فروپاشی آن می‌انجامد. شدت این اثر با افزایش ناهمگنی بیشتر می‌شود و در نرخ‌های انتشار بالا موجب کاهش بیشتر همه‌گیری می‌شود.

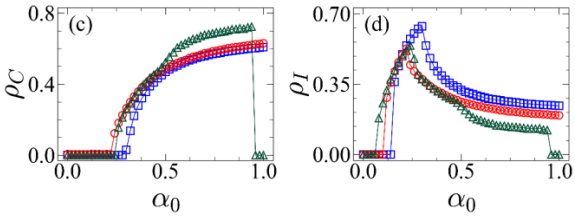
شکل ۵ مقایسه‌ای میان مدل جفت‌شده و دینامیک‌های منفرد (مجزای) بازی و انتشار را در سه ساختار شبکه مربعی، تصادفی و بی‌مقیاس نشان می‌دهد. نواحی شکل‌گیری همکاری غیربدیهی و همچنین بازه‌ای که در آن شیوع بیماری تحت تأثیر همکاری کاهش یافته، در این شکل به تصویر کشیده شده‌اند. نتایج همچنین بیانگر تأثیر مثبت ناهمگنی شبکه بر شکل‌گیری و افزایش سطح همکاری است.

همکاری شامل دو مکانیسم متمایز است: «نوع‌دوستی» (کاهش انتقال توسط بیمار) و «خودمراقبتی» (کاهش ابتلا توسط فرد سالم). بررسی این دو در جمعیت آمیخته (شکل ٦) نشان می‌دهد که رفتار خودمراقبتی (با ضریب α_r) در مهار بیماری مؤثرتر از رفتار نوع‌دوستانه (با ضریب α_t) عمل می‌کند. نتایج حاکی از آن است که کارآمدی محافظت خودمحور (مقادیر پایین α_r) سبب رشد همکاری و کاهش شیوع می‌شود. اما برخلاف انتظار، افزایش کارایی نوع‌دوستی (مقادیر پایین α_t) با امن کردن محیط و کاهش انگیزه فردی، موجب افت همکاری و افزایش آلودگی می‌گردد. بنابراین،

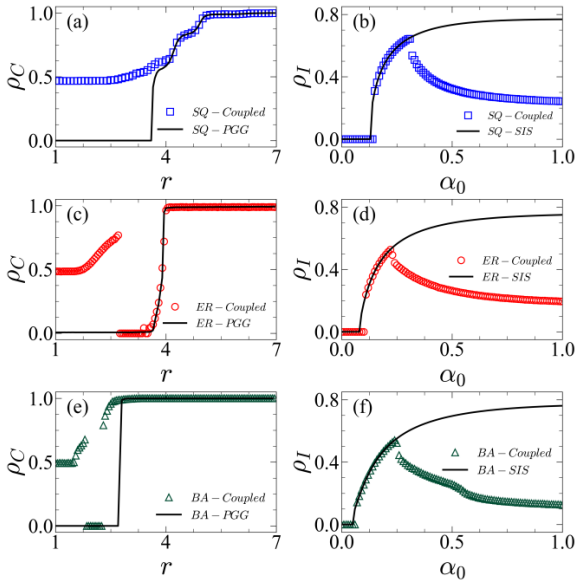
همکاری لزوماً همواره به مهار بیماری منتهی نمی‌شود و اثر نهایی آن به نوع مکانیسم محافظتی وابسته است.



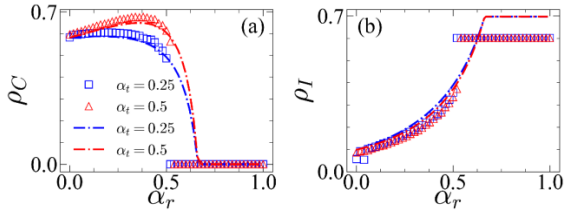
شکل۳: مقادیر پایای کسر افراد همکاری کننده ρ_C و افراد بیمار ρ_I به عنوان تابعی از ضریب هم‌افزایی r، در سه ساختار شبکه مربعی، شبکه تصادفی و شبکه بی‌مقیاس.



شکل٤: مقادیر پایای کسر افراد همکاری کننده ρ_C و افراد بیمار ρ_I به عنوان تابعی از احتمال انتشار بیماری α_0 در سه ساختار شبکه مربعی، شبکه تصادفی و شبکه بی‌مقیاس.



شکل۵: مقایسه مقادیر پایای کسر افراد همکاری کننده ρ_C و افراد بیمار ρ_I با دینامیک های مجزا در سه شبکه مربعی، تصادفی و بی‌مقیاس. خطوط پر نتایج دینامیک‌های مجزا و نمادها نتیجه دینامیک جفت شده را نشان می‌دهند.



شکل٦: مقادیر پایای کسر افراد همکاری کننده ρ_C و افراد بیمار ρ_I به‌عنوان تابعی از اثر محافظت خودمحور α_r در یک جمعیت آمیخته. هریک از منحنی‌ها مربوط به مقادیر متفاوتی از اثر محافظت نوع‌دوستانه α_t است. نمادها نتیجه حاصل از شبیه‌سازی و خط‌چین‌ها نتیجه حل عددی معادلات میدان میانگین (۲) هستند.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، تعامل دینامیک بیماری و بازی کالای عمومی بررسی شد که نشان‌دهنده بروز رفتارهای پیچیده بازخوردی است. نتایج نشان می‌دهد تحمیل هزینه بیماری با ایجاد فشار انتخابی، تمایل به همکاری را افزایش می‌دهد. این همکاری از طریق نوع‌دوستی و به‌ویژه مراقبت خودمحور (که اثرگذاری قوی‌تری دارد) شیوع را کاهش می‌دهد. همچنین، ناهمگنی شبکه با تشدید این بازخوردها، به پایداری همکاری و کنترل مؤثرتر بیماری می‌انجامد. به‌طور کلی، یافته‌ها برجسته‌ساز این نکته‌اند که تصمیم‌گیری‌های فردی در بستر شبکه، نقشی کلیدی در کنترل یا تشدید همه‌گیری ایفا می‌کنند.

مراجع

[۱] M. Boguá, R. Pastor-Satorras, and A. Vespignani, “Epidemic spreading in complex networks with degree correlations, in Statistical Mechanics of Complex Networks”, *Springer, Berlin*, (۲۰۰۳).
[۲] Z. Wang, C. T. Bauch, S. Bhattacharyya, A. d’Onofrio, P. Manfredi, M. Perc, N. Perra, M. Salathé, and D. Zhao, “Statistical physics of vaccination”, *Phys. Rep.* ٦٦٤, ١ (٢٠١٦).
[۳] M. Gosak, M. U. G. Kraemer, H. H. Nax, M. Perc, and B. S. R. Pradelski, “Endogenous social distancing and its underappreciated impact on the epidemic curve”, *Sci. Rep.* ١١, ٣٠٩٣ (٢٠٢١).
[٤] R. H. Dees, “Public health and normative public goods”, *Public Health Ethics* ١١, ٢٠ (٢٠١٨).
[٥] S. L. Chang, M. Piraveenan, *et al.*, “Game theoretic modelling of infectious disease dynamics and intervention methods: A review”, *J. Biol. Dyn.* ١٤, ٥٧ (٢٠٢٠).
[٦] Z. Wang and C. Xia, “Co-evolution spreading of multiple information and epidemics on two-layered networks under the influence of mass media”, *Nonlinear Dyn.* ١٠٢, ٣٠٣٩ (٢٠٢٠).
[٧] M. Noori, N. Azimi-Tafreshi, M. Salahshour, “Coevolution of cooperation and epidemic spreading”, Phys. Rev. Research ٧, ٠٢٣٢١١ (٢٠٢٥).

ارزیابی گذارهای بحرانی در مدل همه‌گیری تصادفی مرتبه‌کسری توسط آنتروپی همسانی

صفرپوردوبخشری، امین‌رضا[۱]؛ موحد، سیدمحمدصادق[۱]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی، ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱، تهران، ایران

چکیده

شناسایی نشانگرهای زودهنگام گذارهای بحرانی در سامانه‌های دینامیکی پیچیده، به دلیل وجود عوامل تصادفی و منابع ناشناخته یک چالش اساسی محسوب می‌شود. در این پژوهش، با تکیه بر تحلیل توپولوژی روشی برای شناسایی زودهنگام این گذارها ارائه می‌شود که طی آن، سری زمانی مشاهده شده از سامانه ابتدا به شبکه‌ی فضای حالت دانه درشت تبدیل می‌شود و سپس وضعیت سامانه از طریق شبکه مذکور و نمودارهای همسانی پایدار مورد بررسی قرار می‌گیرد و درنهایت، کمیت آنتروپی همسانی و مشتقات مرتبه‌کسری آن را به عنوان یک نشانگر جدید برای مطالعه‌ی پیچیدگی توپولوژی سامانه استخراج می‌گردند. ارزیابی این روش بر روی مدل دینامیکی همه‌گیری با درنظرگیری عوامل خارجی و ریاضیات مرتبه کسری نشان می‌دهد که آنتروپی همسانی در مقایسه با سایر روش‌های آماری مرسوم مانند واریانس، خودهمبستگی، زودتر و با حساسیت بیشتری در نزدیک شدن به نقطه‌ی بحرانی واکنش نشان می‌دهد. یافته‌های این پژوهش گامی مهم در جهت ارائه‌ی چارچوبی مؤثر برای مدیریت سامانه‌های پیچیده در آستانه تغییرات بنیادین سیستم محسوب می‌شود.

واژه‌های کلیدی: *سامانه‌های دینامیکی، حسابان کسری ،تحلیل توپولوژی، گذارهای بحرانی.*

Evaluation of Critical Transitions in Stochastic Fractional-Order Pandemic Models via Persistent Entropy

SafarpourDobakhshary, Aminreza[۱]; Movahed, Seyed Mohammad Sadegh[۱]

[۱]Department of Physics, Shahid Beheshti University, ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱, Tehran, Iran

Abstract

Identifying reliable early-warning indicators of critical transitions in complex dynamical systems remains a major challenge due to stochastic factors and unknown sources of uncertainty. In this study, we propose a novel topology-based approach for the early detection of such transitions. By transforming the observed time series into a coarse-grained state-space network and computing persistent homology diagrams, we extract persistent entropy and its fractional-order derivatives as a new indicator of the system's topological complexity. Evaluation of the method on an epidemic dynamical model incorporating external influences and fractional-order dynamics shows that persistent entropy responds earlier and with greater sensitivity to the approach of the critical point compared with conventional statistical measures, such as variance and autocorrelation. The results provide a reliable early-warning signal for impending critical transitions and represent an important step toward developing an effective framework for managing complex systems on the verge of fundamental structural changes.

Keywords: *Dynamical systems, Fractional calculation, Topological analysis, Critical transitions.*

PACS No. 5

مقدمه

تحول حالت یک سامانه، پدیده‌ای است که در طبیعت به وفور قابل مشاهده است[۱]. از نوسانات قلب گرفته تا تغییرات آب‌وهوایی، رشد جمعیت و رفتار اقتصادی، همگی از نمونه‌های بارز سامانه‌های دینامیکی هستند که وضعیت آن‌ها با زمان تغییر می‌کند. این سامانه‌ها ممکن است با تنظیم پارامتر خارجی به نقطه‌ای نزدیک شوند که در آن سامانه به‌طور ناگهانی از یک رژیم رفتاری به رژیمی کاملا متفاوت منتقل شود[۱،۲]. این نقطه که در آن گذار ناگهانی در وضعیت سامانه رخ می‌دهد، با عنوان نقطه‌ی واژگونی یا آستانه‌ی بحرانی شناخته می‌شود و به این رویداد گذار بحرانی می‌گویند[۲].

در مطالعات مرتبط با پیش‌بینی گذارهای بحرانی در سامانه‌های دینامیکی، شاخص‌هایی وجود دارند که می‌توانند پیش از وقوع گذار نشانه‌هایی مبنی بر نزدیک شدن به ناپایداری ارائه دهند. از جمله این شاخص‌ها خودهمبستگی، واریانس و چولگی هستند که معمولا که براساس تحلیل سری‌های زمانی حاصل از داده‌ها بدست می‌آیند [۲, ۳]. این روش‌ها در برابر نوفه و اختلالات خارجی حساسیت بالایی دارند به گونه‌ای که در حضور تغییرات شدید تصادفی ممکن است نشانه‌های گمراه کننده تولید کنند و شناسایی نقاط بحرانی دشوار شود[۳].

در سال‌های اخیر، مدل‌سازی ریاضی به عنوان ابزاری قدرتمند در درک، تحلیل و پیش‌بینی گسترش بیماری‌های عفونی و همه‌گیری‌ها مطرح شده است. همچنین این مدل‌ها به‌عنوان چارچوبی مؤثر برای شبیه‌سازی تعامل بین افراد آلوده و سیستم‌های مقابله با بیماری اعم از سیستم ایمنی بدن یا مداخلات پزشکی می‌توانند به کار گرفته شوند[۴,۵]. یکی از چالش‌های اصلی در تحلیل سامانه‌های دینامیکی، وجود وابستگی بلندمدت و نوفه تصادفی در داده‌ها است. استفاده از حسابان کسری–تصادفی امکان مدل‌سازی حافظه طولانی و استخراج نشانگرهای مقاوم به ناپایداری حتی در حضور اختلالات محیطی را فراهم می‌کند. در این پژوهش یک چارچوب بر مبنای حسابان کسری–تصادفی برای مطالعه‌ی مدل همه‌گیری معرفی و به طور مشخص با هدف شناسایی گذارهای بحرانی و همچنین ساخت نشانگرهای زودهنگام برمبنای ریخت‌شناسی ارائه می‌گردد. این چارچوب با بهره‌گیری از استخراج ویژگی‌های توپولوژی سری‌های زمانی و رسم نمودارهای همسانی پایدار کمیت آنتروپی همسانی را به عنوان یک نشانگر توپولوژی جدید و مقاوم به نوفه استخراج می‌کند.

مبانی نظری مدل

در مقایسه با مشتق مرتبه صحیح، مشتقات کسری در بازه‌ی وسیع‌تری تعریف می‌شوند و دارای خاصیت غیرمحلی هستند[۶]. به‌عبارتی نرخ تغییرات تابع با تکیه بر تغییرات آن در نزدیک‌ترین همسایه تعریف می‌شود. این درحالی است که در مشتقات مرتبه کسری مقدار مشتق در یک لحظه، به تمام تاریخچه‌ی آن وابسته است[۶].

تعریف مشتق کسری یک تابع به صورت زیر است[۶] :

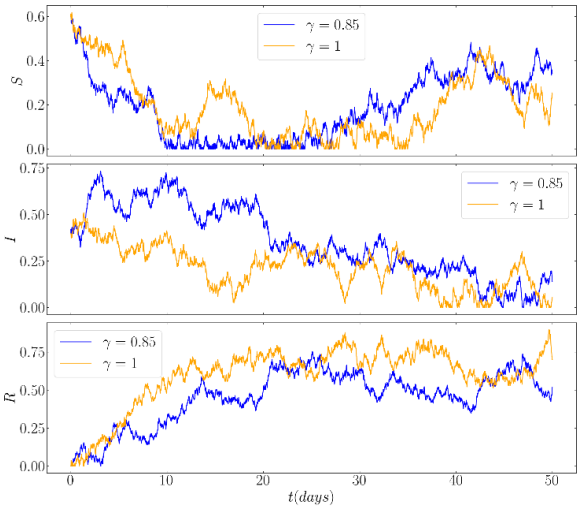
$$D_t^{\gamma} f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\gamma)} \int_0^t \frac{f^n(\tau)}{(t-\tau)^{\gamma-n+1}} d\tau \qquad (1)$$

که در این معادله، D نماد مشتق کاپوتو و Γ تابع گاما هستند[۶].

باتوجه به تعریف بالا معادلات مدل همه‌گیری به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} D_t^{\gamma} S(t) &= -\beta S(t-\tau) I(t-\tau) + \eta_1(t) \\ D_t^{\gamma} I(t) &= \kappa I - \beta S(t-\tau) I(t-\tau) + \eta_2(t) \qquad (2) \\ D_t^{\gamma} R(t) &= \kappa I(t) + \eta_3(t) \end{aligned}$$

در رابطه بالا $S(t)$ ، $R(t)$ و $I(t)$ به‌ترتیب نمایانگر جمعیت مستعد، آلوده و بهبودیافته و $\eta(t)$ نوفه ناشی از اختلالات خارجی هستند. همچنین β ، κ و τ به‌ترتیب نرخ انتقال بیماری، نرخ بهبودی و تاخیر زمانی هستند. شکل ۱ تغییرات تعداد افراد مستعد ($S(t)$)، بیمار ($I(t)$) و بهبود یافته ($R(t)$) را برحسب زمان نشان می‌دهد. مقادیر اولیه جمعیت مستعد ($S(t)$)، آلوده ($I(t)$) و بهبودیافته ($R(t)$) به‌ترتیب ٪۶۰ ، ٪۴۰ و ٪۰ درنظر گرفته شده‌اند.



شکل ۱: تغییرات تعداد افراد مستعد، آلود و بهبود یافته در طول زمان.

در شکل ۱ سری زمانی حاصل از معادله (۲) در یک بازه ۵۰ روزه و با تأخیر زمانی $\tau = 3$ روزه (مدت نهفتگی بیماری) نشان داده شده است. پارامترهای نرخ انتقال و بهبود به ترتیب $\beta = 0/3$ و $\kappa = 0/1$ در نظر گرفته شدند. عدم قطعیت در این نرخ‌ها با نوفه

مدل شد که عواملی همچون تفاوت‌های فردی در دوره بیماری و اثربخشی متغیر درمان‌ها را شامل می‌شود. نتایج شبیه‌سازی در شکل ۱ نشان می‌دهد که جمعیت مستعد و آلوده در طول زمان با نوساناتی کاهش می‌یابند، در حالی که جمعیت بهبودیافته روندی صعودی دارد. این الگوهای دینامیکی، واقع‌گرایی مدل را در حضور تأخیر زمانی و نوفه تأیید می‌کنند. تحلیل ساختار و تشخیص وضعیت دینامیکی سیستم با استفاده از شبکه‌ی فضای حالت دانه درشت[۱] $(CGSSN)$ انجام می‌شود[۷].

شبکه‌ی فضای حالت دانه درشت یک گراف وزندار است که با تقسیم فضای حالت بازسازی‌شده یک سری زمانی به سلول‌های ابرمکعبی یک‌اندازه ساخته می‌شود[۷]. هر سلول به عنوان یک رأس در نظر گرفته می‌شود و انتقال‌های زمانی بین سلول‌ها، یال‌های گراف را تشکیل می‌دهند که برای تشخیص حالت دینامیکی و تحلیل توپولوژی سیستم به‌کار می‌رود. با استفاده از نمودارهای همسانی پایدار که ویژگی‌های توپولوژی پایدار سیستم را نمایش می‌دهند تحلیل توپولوژی صورت می‌گیرد[۷].

کمیت آنتروپی همسانی به عنوان معیار پیچیدگی توپولوژی با استفاده از نمودارهای همسانی پایدار حاصل از سری زمانی، به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\mathcal{S} = -\sum_i p_i ln p_i \qquad (۳)$$

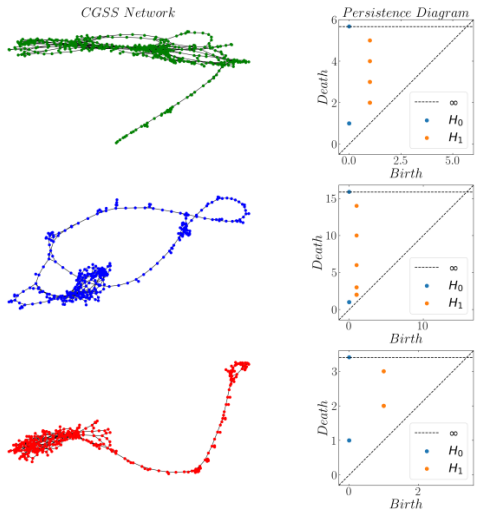
در رابطه فوق، $p_i = \frac{l_i}{\sum_{j:l_j>\varepsilon} l_j}$ توزیع احتمال طول‌عمر هر ویژگی توپولوژی را نشان می‌دهد که در آن l_i طول عمر ویژگی‌های توپولوژی بوده که به صورت $l_i = d_i - b_i$ تعریف می‌شود. همچنین b_i و d_i به ترتیب زمان مرگ و تولد ویژگی توپولوژی iام هستند. تغییرات آنتروپی همسانی نشان‌دهنده تغییر میزان پیچیدگی توپولوژی سیستم بوده و می‌تواند به عنوان نشانگر زودهنگام گذارهای بحرانی مورد استفاده قرار می‌گیرد. آنتروپی همسانی را می‌توان در دو چارچوب مورد استفاده قرار داد. در حالت نخست، سری زمانی سامانه در یک مقدار ثابت از پارامتر حالت تحلیل می‌شود و این کمیت بیانگر میزان پیچیدگی دینامیکی همان حالت پایدار است. در چارچوب دوم، برای هر مقدار پارامتر یک شاخص خلاصه استخراج شده و تغییرات آن در فضای پارامتر به‌عنوان سیگنال ورودی تحلیل می‌شود. با پنجره‌گذاری و به‌کارگیری تحلیل توپولوژی این سیگنال، سنجه‌ای از ناپایداری و پیچیدگی سیستم در هنگام تغییر پارامتر حاصل می‌شود. در این رویکرد، آنتروپی همسانی علاوه بر بازتاب دینامیک زمانی، نمایانگر تحول ساختاری سیستم در فضای پارامتر نیز هست.

شبیه‌سازی و تحلیل نتایج

برای تحلیل توپولوژی، داده‌های سری زمانی $x(t)$ ابتدا با استفاده از روش غوطه‌ورسازی با تأخیر زمانی به فضای حالت n–بعدی نگاشت می‌شوند. در این روش، هر بردار حالت به صورت:

$$V_i = [x_{t-i}, x_{t-i+\mathcal{T}}, \dots, x_{t-i+(n-1)\mathcal{T}}] \qquad (٤)$$

تعریف می‌شود که n بعد غوطه‌وری و $\mathcal{T}$ تأخیر زمانی است[۷]. سپس یک شبکه دانه‌درشت از فضای حالت ساخته می‌شود. در این شبکه، فضای حالت به سلول‌های n–بعدی تقسیم شده و هر سلول به عنوان یک رأس در نظر گرفته می‌شود. بین دو رأس در صورت وجود جریان دینامیکی، یال برقرار می‌گردد[۷]. درنهایت با مطالعه‌ی ویژگی‌های توپولوژی شبکه‌ی فضای حالت نظیر مؤلفه‌های همبند (H_0) و حلقه‌های یک‌بعدی (H_1)، نمودارهای همسانی پایدار این حاصل از این شبکه‌ها رسم می‌شوند (شکل ۲).

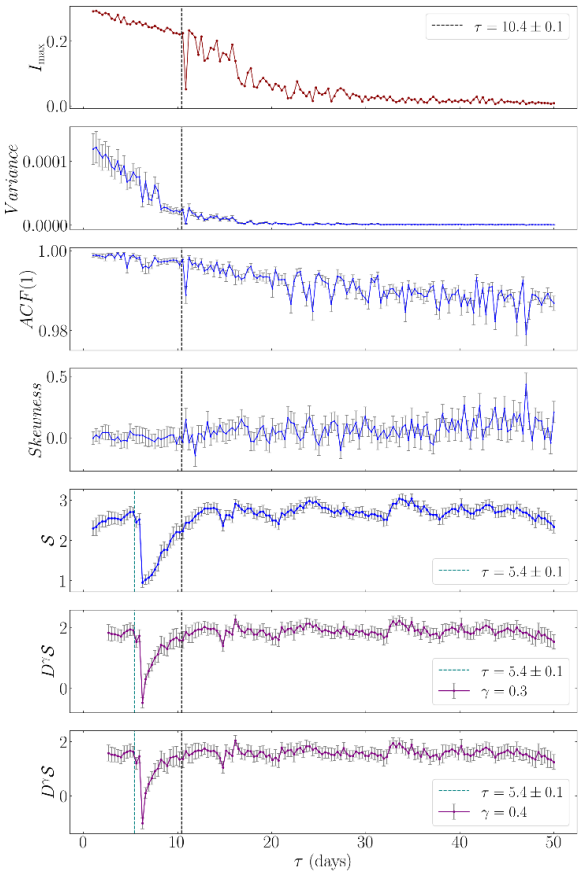


شکل ۲: شبکه‌ی فضای حالت دانه درشت و نمودارهای همسانی پایدار معادله‌ی ۲.

[۱] Coarse grained state space network

در شکل۲، شبکه فضای حالت دانه‌درشت و نمودارهای همسانی پایدار مدل همه‌گیری تصادفی مرتبه‌کسری نشان داده شده است. در این شکل بعد غوطه‌وری و تاخیرزمانی $n = ۳$ و $\mathcal{T} = ٤۳$ درنظر گرفته شده‌اند[۷]. ویژگی‌های ریخت‌شناسی سامانه از طریق مؤلفه‌های همبند (H_0) و حلقه‌های یک‌بعدی (H_1) مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. ترکیب این دو، درکی جامع از سطح پیوستگی، نظم و پیچیدگی فضای حالت را فراهم می‌آورد[۷].

همانطور که پیش‌تر نیز اشاره کردیم برای پیش‌بینی گذار سیستم از حالت پایدار به ناپایدار، می‌توان از نشانگرهای هشدار زودهنگام آماری مانند واریانس، خودهمبستگی و چولگی استفاده کرد. در شکل۳ تغییرات بیشینه تعداد افراد آلوده (I_{max}) نسبت به تاخیر زمانی τ و همچنین شاخص‌های آماری به همراه آنتروپی همسانی و مشتقات مرتبه کسری آن رسم شده‌اند.



شکل۳: تغییرات تعداد افراد آلوده نسبت به تاخیر زمانی و تغییرات شاخص‌های آماری در مقایسه با آنتروپی همسانی و مشتقات مرتبه کسری آن.

مطابق شکل۳ آنتروپی همسانی و مشتقات مرتبه‌کسری آن هنگام نزدیک شدن به نقطه‌ی گذار زودتر از وقوع تغییرات واکنش نشان می‌دهند و این درحالی است که تغییری در شاخص‌های آماری مشاهده نمی‌شود. این خود می‌تواند معیار برتری آنتروپی همسانی و مشتقات مرتبه‌کسری آن نسبت به سایر شاخص‌های آماری باشد.

جمع‌بندی

این پژوهش با تلفیق حسابان کسری و تحلیل توپولوژی، چارچوبی نوین برای شناسایی زودهنگام گذارهای بحرانی در سامانه‌های دینامیکی پیچیده ارائه کرد. نشانگر جدیدی مبتنی بر ریخت‌شناسی توسعه یافت. مطالعه موردی بر روی مدل همه‌گیری مرتبه کسری نشان داد آنتروپی همسانی در مقایسه با شاخص‌های مرسوم آماری مانند واریانس و خودهمبستگی، از حساسیت بالاتر و زمان هشدار زودهنگام‌تری برخوردار است (شکل۳). این برتری به‌ویژه در شرایط وجود نوفه و تأخیرهای زمانی مشهودتر بود. یافته‌های این تحقیق گامی مهم در توسعه روش‌های مبتنی بر داده برای پایش سامانه‌های پیچیده بوده و زمینه را برای کاربردهای گسترده در حوزه‌های همه‌گیری، اقتصاد و مهندسی فراهم می‌آورد. با این حال، مسیرهای متعددی برای پژوهش‌های آینده وجود دارد. از جمله می‌توان به تعمیم این روش به حالتی‌که هم مرتبه مشتق و هم تاخیرزمانی دارای دینامیک باشند نیز اشاره کرد.

مراجع

[۱] Strogatz, Steven H. *Nonlinear dynamics and chaos: with applications to physics, biology, chemistry, and engineering*. Chapman and Hall/CRC, ۲۰۲٤.

[۲] Scheffer, Marten, et al. "Early-warning signals for critical transitions." *Nature* ٤٦١,۷۲٦۰ (۲۰۰۹): ٥۳-٥۹.

[۳] Liu, Rui, et al. "Identifying early-warning signals of critical transitions with strong noise by dynamical network markers." *Scientific reports* ٥,۱ (۲۰۱٥): ۱۷٥۰۱.

[٤] Naik, Parvaiz Ahmad, et al. "Advancing Lotka-Volterra system simulation with variable fractional order Caputo derivative for enhanced dynamic analysis." *J. Appl. Anal. Comput.* ۱٥,۲ (۲۰۲٥): ۱۰۰۲-۱۰۱۹.

[٥] Shah, Kamal, et al. "On nonlinear classical and fractional order dynamical system addressing COVID-۱۹." *Results in Physics* ۲٤ (۲۰۲۱): ۱۰٤۰٦۹.

[٦] Loverro, Adam. "Fractional calculus: history, definitions and applications for the engineer." *Rapport technique, Univeristy of Notre Dame: Department of Aerospace and Mechanical Engineering* (۲۰۰٤): ۱-۲۸.

[۷] Myers, Audun D., et al. "Persistent homology of coarse-grained state-space networks." *Physical Review E* ۱۰۷,۳ (۲۰۲۳): ۰۳٤۳۰۳.

بررسی انتشار ازدحام ترافیکی در شبکه معابر شهری با معرفی شبکه کارکردی و با استفاده از مدل تپه‌شنی

بهمنی اصل، رضا[۱]؛ اکبرزاده، میثم[۱]

[۱] دانشکده مهندسی حمل‌ونقل، دانشگاه صنعتی اصفهان ، اصفهان

چکیده

انتشار ازدحام ترافیکی در شبکه‌های شهری پیچیده یکی از چالش‌های اساسی مدیریت حمل‌ونقل است. این مطالعه یک چارچوب نوآورانه مبتنی بر اصل بحرانیت خودسامان‌یافته (SOC) و معرفی شبکه‌کارکردی برای پیش‌بینی انتشار ازدحام ترافیکی ارائه می‌دهد. رویکرد پیشنهادی با بهره‌گیری از مدل تپه‌شنی تعمیم‌یافته، مکانیزم‌های آبشاری انتشار ازدحام ترافیکی را به‌صورت احتمالاتی مدل‌سازی می‌کند. برخلاف روش‌های سنتی، این مدل از شبکه کارکردی برای نمایش وابستگی‌های غیرمحلی ناشی از هم‌پوشانی مسیرهای جایگزین استفاده می‌کند. اعتبارسنجی با شبیه‌سازی‌های SUMO نشان داد که مدل قادر به شناسایی مسیرهای انتشار و پیوندهای بحرانی با دقت قابل‌توجه است. یافته‌ها نشان می‌دهد این رویکرد ابزاری قدرتمند و مقیاس‌پذیر برای تصمیم‌گیری پیش‌بینانه در سیستم‌های حمل‌ونقل هوشمند فراهم می‌کند.

واژه های کلیدی: *انتشار ازدحام ترافیکی، شبکه کارکردی، مدل تپه‌شنی، بحرانیت خودسامان‌یافته*

Analyzing Urban Traffic Congestion Propagation through Functional Network Representation Using a Generalized Sandpile Model

Bahmaniasl, Reza[1]; Akbarzadeh, Meisam[1]

[1] *Department of Transportation, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran*

Abstract

Traffic congestion propagation in complex urban road networks is one of the fundamental challenges in transportation management. This study proposes an innovative framework based on the principle of Self-Organized Criticality (SOC) and the introduction of a functional network for predicting traffic congestion propagation. The proposed approach employs a generalized sandpile model to probabilistically simulate cascade mechanisms underlying congestion spread. Unlike conventional methods, the model utilizes the functional network to represent non-local dependencies arising from overlapping alternative routes. Validation through SUMO simulations demonstrates that the model effectively identifies propagation paths and critical links with remarkable accuracy. The findings indicate that this approach provides a robust and scalable tool for predictive decision-making in intelligent transportation systems.

***Keywords**: Traffic Congestion Propagation, Functional Network, Sandpile model, Self-Organized Critically*

PACS No. *05.65. +b; 05.70. Fh; 05.45.-a; 89.75. Fb; 89.40.-a*

مقدمه

رشد سریع جمعیت شهری و افزایش تقاضای سفر موجب عدم تعادل عرضه و تقاضا در شبکه‌های حمل‌ونقل و ایجاد ازدحام‌های تکرارشونده شده است که پیامدهایی مانند کاهش قابلیت اعتماد زمان سفر، افزایش مصرف سوخت و آلودگی را به همراه دارد (۱). این شرایط ضرورت توسعه مدل‌های پیش‌بینی دقیق و داده‌محور برای تحلیل و کنترل انتشار زمانی–مکانی ازدحام را برجسته کرده است. در این پژوهش، یک چارچوب پیش‌بینی مبتنی بر مفهوم معرفی شده «شبکه کارکردی[۱]» و همچنین

[۱] Functional network

«بحرانیت خودسامان‌یافته» ارائه می‌شود که از اصول مدل تپه‌شنی بر روی شبکه کارکردی استفاده می‌کند.

مدل پیشنهادی قابلیت پیش‌بینی مسیرهای احتمالی انتشار ازدحام را فراهم می‌کند و می‌تواند در مدیریت لحظه‌ای ترافیک، کنترل هوشمند چراغ‌ها و هدایت پویا به‌کار رود. این رویکرد زمینه گذار از مدیریت واکنشی به مدیریت پیش‌بینانه در سامانه‌های حمل‌ونقل هوشمند را تقویت می‌کند.

مرور بر ادبیات

در سال‌های اخیر، رویکردهای شبکه‌محور و داده‌محور متنوعی برای مدل‌سازی انتشار ازدحام توسعه یافته‌اند، از تحلیل خوشه‌ها و آستانه‌های فروپاشی شبکه گرفته تا چارچوب‌های مارکوفی و بازی‌محور، و روش‌های یادگیری عمیق که وابستگی‌های مکانی–زمانی را به‌صورت پیش‌بینی‌محور استخراج می‌کنند (۲–۶). در این مطالعات میان مقیاس‌پذیری، تفسیرپذیری و سازگاری فیزیکی ناهماهنگی‌های ذاتی وجود دارد. مطالعاتی نیز با مدل‌های اپیدمیک (۷, ۸)، شبکه‌های دولایه (۹)، سامانه‌های پیش‌نگر رفتاری (۱۰)، و تحلیل‌های انتشار مبتنی بر گراف (۱۱, ۱۲) ابعاد متفاوتی از مسیرهای آبشاری، آسیب‌پذیری شبکه و نرخ‌های انتشار را روشن کرده‌اند.

از سوی دیگر، با وجود شواهد تجربی از رفتارهای بحرانی در شبکه‌های ترافیکی (۱۳)، مدل‌سازی صریح انتشار مکانی–زمانی مبتنی بر SOC تاکنون محدود بوده است. همچنین مدل‌های تپه‌شنی با وجود بازنمایی دینامیک‌های SOC ، به‌دلیل فرض مجاورت مکانی از ثبت انتقال‌های غیرمحلی بازمی‌مانند. چارچوب پیشنهادی این پژوهش با معرفی مدل تپه‌شنی تعمیم‌یافته روی شبکه کارکردی سعی در رفع این محدودیت‌ها دارد.

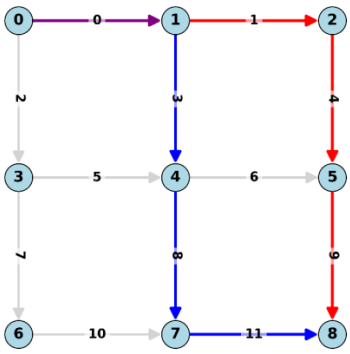
روش‌شناسی

شبکه کارکردی، که هسته اصلی روش پیشنهادی است، ساختاری انتزاعی از شبکه واقعی است که در آن هر لینک فیزیکی به یک گره متناظر تبدیل می‌شود و اتصالات میان گره‌ها نه بر اساس مجاورت جغرافیایی، بلکه بر اساس هم‌پدیدایی لینک‌ها در مجموعه مسیرهای جایگزین مبدا–مقصدها تعریف می‌شوند. بدین ترتیب، وزن هر لینک در شبکه کارکردی بسامد مشترک‌بودن یک زوج لینک در مسیرهای قابل‌انتخاب برای کاربران برای مبدا–مقصدهای مختلف است. وزنی که شدت وابستگی کارکردی و احتمال انتقال بار ترافیکی میان آن دو بخش را در زمان ازدحام منعکس می‌کند. این بازنمایی، امکان لحاظ‌کردن مسیرهای غیرمحلی و اثرات دوربرد ناشی از انتخاب مسیر را فراهم می‌کند.

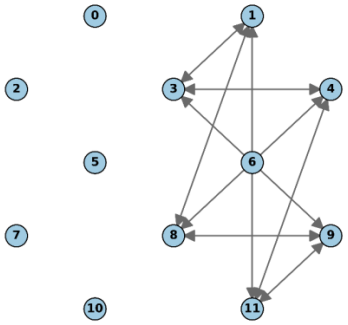
برای روشن‌سازی فرآیند استخراج شبکه کارکردی، مثال ساده شبکه ۳×۳ جهت‌دار در شکل‌های ۱ و ۲ ارائه شده است. فرض کنید برای جفت مبدأ–مقصد (۰،۸)، دو مسیر جایگزین در شبکه فیزیکی وجود دارد: مسیر نخست شامل لینک‌های (۰،۱،۴،۹) و مسیر دوم شامل لینک‌های (۰،۳،۸،۱۱). مطابق تعریف شبکه کارکردی، هر لینک در مسیر اول با هر لینک متفاوت در مسیر دوم (برای همان مبدا–مقصد) یک ارتباط جهت‌دار ایجاد می‌کند. حاصل این فرآیند مجموعه زوج‌های زیر است:

{(1,3), (3,1), (1,8), (8,1), (1,11), (11,1), (4,3), (3,4), (4,8), (8,4), (4,11), (11,4), (9,3), (3,9), (9,8), (8,9), (9,11), (11,9)}

این زوج‌ها بیانگر اتصالات جهت‌دار میان لینک‌های متناظر در شبکه کارکردی‌اند و فراوانی تکرار هر زوج در میان تمامی مسیرهای جایگزین همه مبدا–مقصدها، وزن لینک‌های شبکه کارکردی را تعیین می‌کند.



شکل ۱ : شبکه اصلی (شبکه ۳×۳ جهت‌دار) برای نمایش مسیرهای جایگزین بین گره‌های ۰ و ۸



شکل۲ : شبکه کارکردی متناظر با شبکه اصلی و مسیرهای جایگزین بین گره‌های ۰ و ۸ نشان‌داده‌شده در شکل ۱

برای تولید داده‌ها و اعتبارسنجی مدل، از شبیه‌ساز SUMO استفاده شد و دو پیکربندی شبکه در تمامی آزمایش‌ها اعمال گردید: (i) حالت پایه با سرعت یکنواخت روی تمام لینک‌ها و (ii) حالت تنش‌ازدحام که در آن سرعت یک لینک هدف به ۱۰٪ کاهش یافت تا رفتار شبکه در برابر اختلال موضعی بررسی شود. جهت بررسی پایداری مدل، ۱۲ سناریوی مستقل شامل سه ماتریس مبدا–مقصد و چهار لینک هدف اجرا شد و سپس ۳۰ سطح تقاضا برای تحلیل حساسیت انتشار ازدحام نسبت به شلوغی شبکه اعمال گردید. تمامی شبیه‌سازی‌ها یکبار برای شبکه گرید ۶×۶ و یکبار برای شبکه سیفالز انجام گردید.

یک شاخص به نام شاخص *جذب بار ترافیکی*[۲] *(TLAI)* تعریف شد تا میزان جذب بار ترافیکی هر لینک در مواجهه با اختلال را براساس فاصله نسبی از چگالی راه‌بندان اندازه‌گیری کند (رابطه ۱). در این رابطه، ζ_i شاخص *جذب بار ترافیکی* برای لینک i است، $\overline{\rho_{2i}}$ میانگین چگالی لینک i در شبیه‌سازی در حالت تنش ازدحام، $\overline{\rho_{1i}}$ میانگین چگالی همان لینک در شبیه‌سازی *حالت پایه*، و ρ_{ji} چگالی راه‌بندان لینک i را نشان می‌دهد.

$$\zeta_i = \frac{\overline{\rho_{2i}} - \overline{\rho_{1i}}}{\rho_{ji} - \overline{\rho_{1i}}} \qquad (۱)$$

بعد از شبیه‌سازی TLAIها برای تمام لینک‌های شبکه محاسبه شد. همچنین وزن‌های لینک‌ها در شبکه کارکردی باتوجه به ماتریس‌های مبدا–مقصد و ده مسیر جایگزین استخراج شد. مدل بر روی ساختار شبکه کارکردی اجرا شد. پارامترهای مدل، شامل نرخ افزودن دانه‌شن (۳ دانه در هر تکرار) و تعداد پله‌های خروج دانه‌شن از سیستم (۹ مرحله)، براساس تحلیل حساسیت اسپیرمن و کندال به‌گونه‌ای تنظیم شدند که پایداری دینامیکی، رفتار آستانه‌ای و سازگاری با اصول SOC حفظ شود. درنهایت، وزن‌های لینک‌ها در شبکه کارکردی و متوسط تعداد دانه‌ها در هر گره با TLAIها مقایسه شد تا دقت نمایش پتانسیل انتقال بار ترافیکی شبکه کارکردی و دقت مدل در بازتولید مسیرهای انتشار، نواحی بحرانی و الگوی انتقال بار ارزیابی شود.

این چارچوب با ترکیب شبکه کارکردی و پویایی **SOC**، توانایی

[۲] Traffic Load Absorption Index

یک مکانیسم آرام‌سازی داخلی نیز در مدل اضافه شد که نمایانگر تأثیر جذب بار توسط گره‌های مقصد در ماتریس تقاضا است. برای این منظور، نسبت فراوانی هر مقصد محاسبه و پس از نرمال‌سازی بر تعداد لینک‌های ورودی به آن مقصد، به‌عنوان عامل کاهش دوره‌ای در مدل اعمال شد.

روابط (۲) تا (۷) قواعد رانش ، ریزش، ماتریس احتمال انتقال و آرام‌سازی داخلی را به‌زبان ریاضی بیان می‌کنند.

$$z_k^{n+1} = z_k^n + p \qquad (۲)$$

z_k^n تعداد دانه‌های شن موجود در ستون k در تکرار n و p تعداد دانه‌هایی که در هر تکرار به ستون موردنظر افزوده می‌شود.

$$if\ z_k^{n+1} > z_c^k \rightarrow z_k^{n+2} = z_k^{n+1} - z_c^k \qquad (۳)$$

z_c^k ظرفیت ستون k است.

$$for\ m \in M_k:\ z_m^{n+2} = z_m^{n+1} + (z_c^k \times P_{km}) \qquad (٤)$$

M_k مجموعه گره‌های متصل به گره (ستون) k است. m هر یک از عناصر این مجموعه را نشان می‌دهد، و P_{km} احتمال انتقال یک دانه شن از ستون k به ستون m هنگام فروریزش است.

$$if\ z_k^{n+1} \le z_c^k \rightarrow z_k^{n+2} = z_k^{n+1} + p \qquad (٥)$$

$$if\ k_2 \notin M_{k1} \rightarrow p_{k1k2} = 0 \qquad (٦)$$

$$if\ k_2 \in M_{k1} \rightarrow p_{k1k2} = \frac{W_{k1k2}}{\sum_{i=1}^{n} W_{k1mi}} \qquad (٧)$$

$W_{k_1k_2}$ وزنِ عنصرِ k_1, k_2 در ماتریس مجاورت شبکه کارکردی را نشان می‌دهد.

نتایج و بحث

نتایج نشان دادند که وزن لینک‌ها در شبکه کارکردی شاخصی قابل‌اعتماد برای توان انتقال بار ترافیکی در شرایط ازدحام است. تحلیل‌های ناپارامتری رابطه یکنواخت و معناداری میان شاخص جذب بار ترافیک هر لینک و وزن‌های شبکه کارکردی را در اکثر سطوح تقاضا تأیید کرد.

در کالیبراسیون مدل تپه‌شنی، نرخ ورود ۳ دانه شن در هر گام و ۹ مرحله حذف، بیشترین همبستگی مثبت را ایجاد کردند و با شرط *رانش آهسته* در SOC سازگار بودند. با این پارامترهای بهینه و در ۳۰ سطح تقاضا، همبستگی اسپیرمن برای لینک‌های با افزایش بار در محدوده ۰/۳۹ تا ۰/۵۵ (میانگین ≈۰/٤۷) و کندال در محدوده ۰/۲۸ تا ۰/٤۰ (میانگین ≈۰/۳٤) قرار داشت. در دامنه کاهش بار، همبستگی ضعیف‌تر (میانگین اسپیرمن ≈ ۰/۲۹−) به دلیل ساختار سلسله‌مراتبی انتشار و بازتاب‌های ثانویه مشاهده شد.

از نظر کاربردی، شبکه کارکردی لینک‌های کلیدی با ظرفیت بالای انتقال بار را شناسایی کرده و برای مدیریت چراغ‌ها و کنترل رمپ‌ها مفید است. مدل تپه‌شنی نیز مسیرهای آبشاری غیرمحلی را آشکار ساخته و امکان ارزیابی سریع سناریوهای خرابی یا جهش تقاضا را فراهم می‌کند. در مجموع، ادغام «شبکه کارکردی + SOC» به‌عنوان چارچوبی تفسیرپذیر، کارا و مقیاس‌پذیر، با بازتولید روندهای اصلی و آشکارسازی آستانه‌های بحرانی، پیوندی میان نظریه سیستم‌های پیچیده و مدل‌سازی ترافیک شهری برقرار می‌نماید.

مرجع‌ها

[۱] UN-Habitat. World Cities Report 2022: Envisaging the Future of Cities. Nairobi: United Nations Human Settlements Programme; 2022.
[۲] Ji Y, Geroliminis N, editors. Modeling congestion propagation in urban transportation networks. 12th Swiss Transport Research Conference, Locarno, Switzerland; 2012.
[۳] Yong L, Yulan L, Kai Z. Research on the critical value of traffic congestion propagation based on coordination game. Procedia Engineering. 2016;137:754-61.
[۴] Ji Y, Luo J, Geroliminis N. Empirical observations of congestion propagation and dynamic partitioning with probe data for large-scale systems. Transportation Research Record. 2014;2422(1):1-11.
[۵] Xiong H, Vahedian A, Zhou X, Li Y, Luo J, editors. Predicting traffic congestion propagation patterns: A propagation graph approach. Proceedings of the 11th ACM SIGSPATIAL international workshop on computational transportation science; 2018.
[۶] Majumdar S, Subhani MM, Roullier B, Anjum A, Zhu R. Congestion prediction for smart sustainable cities using IoT and machine learning approaches. Sustainable Cities and Society. 2021;64:102500.
[۷] Kozhabek A, Chai WK, Zheng G. Modeling traffic congestion spreading using a topology-based SIR epidemic model. IEEE Access. 2024;12:35813-26.
[۸] Wang J, Zou L, Zhao J, Wang X. Dynamic capacity drop propagation in incident-affected networks: Traffic state modeling with SIS-CTM. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2024;637:129536.
[۹] Li R, Qin Y, Liu J, Chu X, Li J. Multipath based congestion propagation via information network interaction in IIoT. IEEE Transactions on Industrial Informatics. 2024;20(6):8512-23.
[۱۰] Yan H, Li H, Sun Q, Jiang Y. Propagation and control of congestion risk in scale-free networks based on information entropy. Plos one. 2024;19:(۳)e0300422.
[۱۱] Jin Z, Wang Y, Meng X, Duan D, Wang N. Identifying critical roads in urban road networks considering congestion propagation. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2025:130795.
[۱۲] Shi H, Kan Z, Qi H, Zhao Z, Chen T, Tang L. Beyond the jam: field theory modeling of congestion's ripple effects on traffic dynamics. GIScience & Remote Sensing. 2025;62(1):2547126.
[۱۳] Helbing D. Traffic and related self-driven many-particle systems. Reviews of modern physics. 2001;73(4):1067.

مطالعه تطبیقی عملکرد الگوریتم‌های انیلینگ کلاسیک و الهام‌گرفته از کوانتوم در لبه بحرانی مسئله SAT-3

قنبری مبارکه، مهرداد[۱]؛ احمدوند، حسین[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان ، میدان استقلال بزرگراه دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

مسئله ارضاپذیری بولی (SAT) یکی از مسائل بنیادی در نظریه پیچیدگی محاسباتی است که نسخه تصادفی آن رفتار گذار فاز مشخصی را از ناحیه ارضاپذیر به نارضایت‌پذیر نشان می‌دهد. در نزدیکی این نقطه بحرانی، حل مسئله به‌طور قابل‌توجهی دشوارتر شده و عملکرد الگوریتم‌های کلاسیک با پدیده کندی بحرانی روبرو می‌شود. در این مقاله، کارایی یک الگوریتم انیلینگ الهام‌گرفته از کوانتوم (QA-inspired) برای حل نمونه‌های تصادفی مسئله SAT-3 در بازه‌ای از نسبت تعداد قیود به تعداد متغیرها بررسی شده است. برای این منظور، مسئله به فرم بهینه‌سازی دودویی بدون قید (QUBO) نگاشته شده و فرآیند جستجو با استفاده از مکانیزم‌های پرش چند-متغیره شبیه‌سازی گردیده است. شبیه‌سازی‌ها به‌صورت موازی برای مجموعه‌ای از نمونه‌های تصادفی با ابعاد N=40 و با ۲۵۰ تکرار مستقل انجام شده و معیارهایی نظیر احتمال موفقیت، انرژی مینیمم و زمان تا دستیابی به جواب (TTS) مورد تحلیل قرار گرفته‌اند. نتایج عددی نشان می‌دهد که الگوریتم الهام‌گرفته از کوانتوم در ناحیه پیش-بحرانی ($3.8<\alpha<4.26$) عملکرد برتری نسبت به انیلینگ کلاسیک داشته و احتمال موفقیت بالاتری را ثبت می‌کند. این مطالعه نشان می‌دهد که استفاده از دینامیک‌های شبه‌کوانتومی نظیر تونل‌زنی می‌تواند کارایی حل مسائل سخت ترکیبیاتی را در نزدیکی نقاط گذار فاز بهبود بخشد.

واژه های کلیدی: *مسئله ارضاپذیری بولی، SAT-3 تصادفی، بهینه‌سازی دودویی بدون قید.*

A Comparative Study of Classical and Quantum-Inspired Annealing Algorithms at the Critical Edge of the 3-SAT Problem

Ghanbari Mobarakeh, Mehrdad[1]; Ahmadvand, Hossein[1]

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

Abstract

The Boolean Satisfiability (SAT) problem is a fundamental challenge in computational complexity theory. Its random version exhibits a distinct phase transition behavior from a satisfiable to an unsatisfiable region. Near this critical point, solving the problem becomes significantly more difficult, and classical optimization algorithms often suffer from critical slowing down. This paper investigates the performance of a Quantum-Inspired Annealing (QIA) algorithm for solving random 3-SAT instances across a range of clause-to-variable ratios (α). To achieve this, the 3-SAT problem is mapped onto an Unconstrained Binary Quadratic Optimization (QUBO) framework, and the search process is simulated using multi-spin flip dynamics inspired by quantum tunneling. Parallel simulations were conducted on a large ensemble of random instances with system size N=40 and 250 independent runs per data point. Key metrics, including success probability, minimum energy, and Time-to-Solution (TTS), were analyzed as functions of the control parameter. Numerical results demonstrate that the quantum-inspired algorithm exhibits superior performance in the pre-critical region ($3.8<\alpha<4.26$), maintaining a higher success probability compared to classical simulated annealing. This study provides a numerical framework for evaluating quantum-inspired heuristics. It suggests that simulating quantum-like dynamics can enhance the efficiency of solving hard combinatorial problems near phase transition boundaries.

***Keywords**: Boolean Satisfiability Problem (SAT), Random 3-SAT, Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO).*

PACS No. 5

مقدمه

مسئله ارضاپذیری بولی یکی از مسائل بنیادی در علوم کامپیوتر نظری و بهینه‌سازی ترکیبیاتی است که نقش مهمی در مطالعه پیچیدگی محاسباتی ایفا می‌کند. به‌ویژه نسخه ۳-SAT، که در آن هر بند شامل دقیقاً سه متغیر بولی است، به‌عنوان نخستین مسئله NP-کامل شناخته شده و کاربرد گسترده‌ای در منطق، طراحی مدار و مسائل تصمیم‌گیری دارد [۱].

نسخه‌های تصادفی مسئله 3-SAT رفتارهای جمعی غیربدیهی از خود نشان می‌دهند که شباهت زیادی به پدیده‌های مورد مطالعه در مکانیک آماری دارند. یکی از مهم‌ترین این پدیده‌ها، گذار فاز ارضاپذیری است؛ به‌طوری‌که با افزایش نسبت تعداد بندها به تعداد متغیرها (α)، احتمال وجود جواب ناگهان از نزدیک به یک به نزدیک به صفر کاهش می‌یابد [۲,۳]. این رفتار، 3-SAT تصادفی را به مدلی مرجع برای مطالعه سیستم‌های پیچیده گسسته تبدیل کرده است. تحقیقات پیشین نشان داده‌اند که سختی محاسباتی این مسئله در نزدیکی نقطه بحرانی به شدت افزایش می‌یابد، که این امر ناشی از پیچیده شدن چشم‌انداز انرژی و پیدایش کمینه‌های محلی متعدد است.

در سال‌های اخیر، چارچوب بهینه‌سازی دودویی بدون قید (QUBO) به‌عنوان ابزاری مناسب برای نگاشت مسائل منطقی و ترکیبیاتی به مدل‌های انرژی معرفی شده است [۴]. این نگاشت امکان استفاده از الگوریتم‌های مبتنی بر کمینه‌سازی انرژی، از جمله روش‌های الهام‌گرفته از محاسبات کوانتومی، را فراهم می‌کند. از سوی دیگر، الگوریتم‌های انیلینگ کوانتومی و نسخه‌های الهام‌گرفته از آن، توجه زیادی را به‌عنوان رویکردهایی جایگزین برای حل مسائل سخت بهینه‌سازی به خود جلب کرده‌اند [۵,۶]. هرچند دسترسی به سخت‌افزارهای کوانتومی واقعی محدود است، شبیه‌سازی‌های کلاسیکی این الگوریتم‌ها می‌توانند بینش ارزشمندی درباره رفتار دینامیکی سیستم‌های پیچیده ارائه دهند. به‌ویژه، مکانیزم‌هایی مانند تونل‌زنی کوانتومی شبیه‌سازی شده (Simulated Quantum Tunneling) پتانسیل بالایی در عبور از سدهای انرژی باریک دارند که در روش‌های کلاسیک مانند انیلینگ حرارتی، موانع بزرگی محسوب می‌شوند.

در این مقاله، مسئله 3-SAT تصادفی در قالب QUBO مدل‌سازی شده و با استفاده از یک الگوریتم انیلینگ الهام‌گرفته از کوانتوم (QA-inspired)، رفتار سامانه در ناحیه گذار فاز بررسی می‌شود. تمرکز اصلی این کار بر تحلیل عددی دقیق و بررسی تأثیر مکانیزم‌های پرش کوانتومی بر احتمال موفقیت و زمان دستیابی به جواب (TTS) در ناحیه گذار فاز ارضاپذیری است. این مطالعه چارچوبی برای ارزیابی ظرفیت این رویکرد در مطالعه مسائل پیچیده گسسته و مقایسه آن با روش‌های کلاسیک در شرایط دشوار محاسباتی فراهم می‌کند.

مدل و روش

۱. تولید مدل تصادفی و نگاشت QUBO: در این مطالعه، برای هر گام شبیه‌سازی، M بند (Clause) به‌صورت تصادفی از میان N متغیر بولی انتخاب می‌شوند ($M=\alpha N$). هر متغیر بولی z_i به یک متغیر دودویی $x_i \in \{0,1\}$ در فضای QUBO نگاشت می‌شود. تابع هدف (هامیلتونی) سیستم به‌صورت مجموع ترم‌های جریمه برای هر بند C_j تعریف می‌گردد:

$$H(x) = \sum_{j=1}^{M} P(C_j) \qquad (۱)$$

که در آن $P(C_j)$ برای یک بند تنها زمانی برابر با ۱ (جریمه) و در غیر این صورت ۰ است که تمام گزاره‌های آن نقض شوند. کمینه مطلق این تابع متناظر با جواب ارضاکننده مسئله است.

۲. الگوریتم انیلینگ الهام‌گرفته از کوانتوم (QIA): برای جستجو در فضای پیکربندی، از الگوریتم QIA استفاده شده است. این الگوریتم با ترکیب انیلینگ حرارتی و مکانیزم پرش چند-متغیره (Multi-spin flips)، پدیده تونل‌زنی کوانتومی را شبیه‌سازی می‌کند. در هر گام، احتمال تونل‌زنی P_{tunnel} اجازه می‌دهد تا سیستم از سدهای انرژی باریک که در انیلینگ کلاسیک (SA) نفوذناپذیر هستند، عبور کند. فرآیند سردسازی (Scheduling) به‌صورت خطی تنظیم شده تا تعادلی

میان سرعت همگرایی و دقت در یافتن حالت پایه ایجاد شود.

۳. معیارهای ارزیابی و پایداری عددی: برای کاهش خطای آماری و تضمین تکرارپذیری، شبیه‌سازی‌ها با N=40 و ۲۵۰ نمونه مستقل برای هر α به‌صورت موازی اجرا شدند. معیارهای کلیدی عبارتند از:

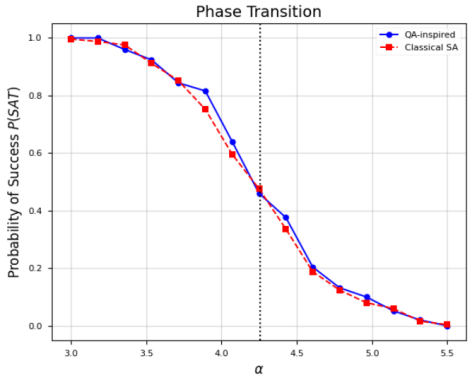
a. احتمال موفقیت (P_S): نسبت دفعاتی که الگوریتم به H=0 می‌رسد.

b. زمان تا دستیابی به جواب (TTS): فرمول آن در لینک گیت‌هاب مربوط به مقاله قرار گرفته است.

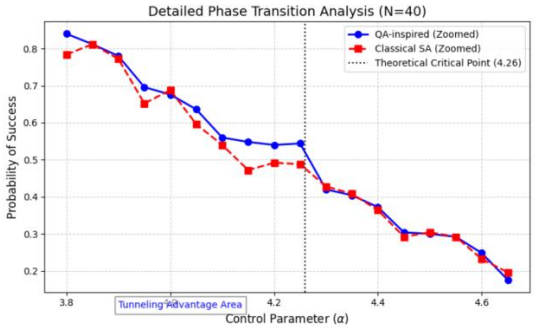
c. انرژی باقی‌مانده: میانگین بندهای نقض شده در نواحی نارضایت‌پذیر

نتایج و بحث

تحلیل گذار فاز و احتمال موفقیت: نتایج حاصل از شبیه‌سازی در شکل (۱) نشان‌دهنده یک گذار فاز مشخص در محدوده $\alpha \approx 4.26$ است. در مقادیر α کوچک‌تر از 3.8، هر دو الگوریتم با احتمال نزدیک به ۱ جواب ارضاکننده را پیدا می‌کنند. با نزدیک شدن به نقطه بحرانی، احتمال موفقیت به‌صورت غیرخطی سقوط می‌کند. مطابق با تحلیل دقیق در شکل (۲)، مشاهده می‌شود که الگوریتم QIA در بازه α بین 3.9 و 4.25 عملکرد پایدارتری نسبت به SA دارد. این برتری ناشی از مکانیزم پرش‌های چند-متغیره است که به سیستم اجازه می‌دهد از سدهای انرژی باریک در چشم‌انداز انرژی عبور کرده و از گیر افتادن در کمینه‌های محلی که در نزدیکی نقطه گذار فاز به وفور یافت می‌شوند، اجتناب کند.

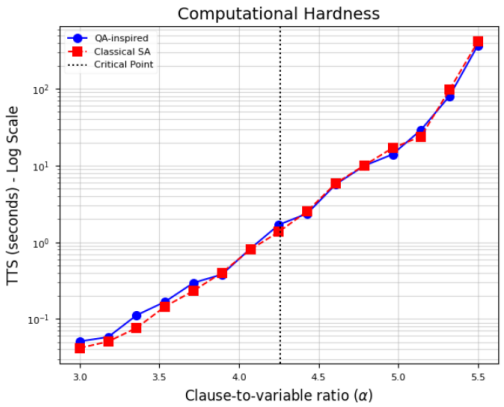


شکل۱: تغییرات احتمال یافتن جواب ارضاکننده. سقوط ناگهانی نمودار نشان‌دهنده وقوع گذار فاز ارضاپذیری در نقطه بحرانی است.



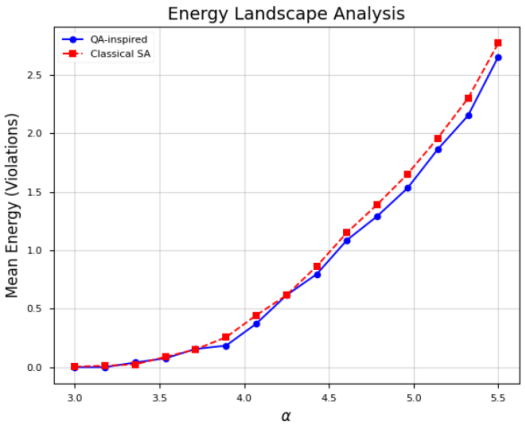
شکل۲. نمای بزرگ‌نمایی شده از احتمال موفقیت. برتری نسبی الگوریتم QIA در محدوده قبل از گذار فاز، ناشی از کارایی مکانیزم پرش‌های چند-متغیره در عبور از سدهای انرژی است.

سختی محاسباتی و معیار TTS: شکل (۳) رفتار زمان تا دستیابی به جواب (TTS) را در مقیاس لگاریتمی نشان می‌دهد. با افزایش چگالی قیود، TTS به‌صورت نمایی رشد می‌کند که بیانگر ورود مسئله به فاز سخت است. در نواحی دور از نقطه بحرانی، هر دو الگوریتم زمان اجرای مشابهی دارند؛ اما در نزدیکی نقطه بحرانی الگوریتم QIA با حفظ احتمال موفقیت بالاتر، نیاز به تکرارهای کمتری برای تضمین یافتن جواب دارد. در نواحی نارضایت‌پذیر (α بزرگ‌تر از 4.5)، رشد TTS برای هر دو روش همگرا می‌شود که نشان‌دهنده نبود جواب ارضاکننده و ماهیت جستجوی جامع در این فاز است.



شکل۳. مقایسه زمان مورد انتظار برای حل مسئله (TTS) در مقیاس لگاریتمی. رشد نمایی نمودار در نزدیکی نقطه بحرانی بیانگر ورود مسئله به فاز سخت محاسباتی است.

تحلیل تراز انرژی و کمینه‌ها: در شکل (۴)، میانگین تعداد بندهای نقض‌شده (انرژی) به ازای مقادیر مختلف α رسم شده است. در فاز ارضاپذیر، هر دو الگوریتم موفق به یافتن حالت پایه با انرژی صفر می‌شوند. با عبور از نقطه گذار، میانگین انرژی به‌صورت خطی افزایش می‌یابد. نکته حائز اهمیت این است که منحنی انرژی QIAدر اکثر نقاط پایین‌تر یا منطبق بر SA قرار دارد. این موضوع تایید می‌کند که دینامیک‌های الهام‌گرفته از کوانتوم نه تنها در یافتن جواب‌های دقیق، بلکه در تقریب زدن جواب‌های نزدیک به بهینه در مسائل نارضایت‌پذیر نیز کارایی بالایی دارند.



شکل۴. میانگین تعداد بندهای نقض‌شده در بهترین پیکربندی یافت‌شده. تطابق دو نمودار در فاز ارضاپذیر و روند صعودی خطی آن‌ها در فاز نارضایت‌پذیر، دقت مدل‌سازی QUBO را تایید می‌کند.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، کارایی الگوریتم انیلینگ الهام‌گرفته از کوانتوم در حل مسئله SAT-3 تصادفی در چارچوب QUBO بررسی شد. شبیه‌سازی‌های عددی تایید کردند که نگاشت مسئله به مدل‌های انرژی و استفاده از دینامیک‌های پرش کوانتومی، ابزاری قدرتمند برای مطالعه گذار فاز ارضاپذیری فراهم می‌کند. یافته‌های کلیدی نشان داد که الگوریتم QIA به‌ویژه در ناحیه پیش–بحرانی، به دلیل توانایی در عبور از سدهای انرژی، برتری نسبی نسبت به روش‌های کلاسیک حرارتی دارد. این مطالعه می‌تواند راهگشای استفاده از سخت‌افزارهای کوانتومی نسل جدید برای حل مسائل ترکیبیاتی پیچیده در ابعاد صنعتی باشد.

کدهای منبع مربوط به شبیه‌سازی‌ها و الگوریتم‌های استفاده شده در این پژوهش جهت بازتولید نتایج و استفاده سایر پژوهشگران در آدرس گیت‌هاب زیر در دسترس است:

https://github.com/ghmhrdd/3-SAT_Problem

مرجع‌ها

[1] S. A. Cook, *The complexity of theorem-proving procedures*, in Proceedings of the third annual ACM symposium on Theory of computing, 1971.
[2] Monasson, R., Zecchina, R., Kirkpatrick, S., Selman, B., & Troyansky, L, *Determining computational complexity from characteristic phase transitions*, Nature, **400**(6740) 1999.
[3] M. Mézard, G. Parisi, and R. Zecchina, *Analytic and algorithmic solution of random satisfiability problems*, Science, **297**, 5582, 2002.
[4] A. Lucas, *Ising formulations of many NP problems*, Frontiers in Physics, **2**, p. 5, 2014.
[5] G. E. Santoro, R. Martoňák, E. Tosatti, and R. Car, *Theory of quantum annealing of an Ising spin glass*, Science, **295**,5564, 2002.
[6] S. Boixo et al., *Evidence for quantum annealing with more than one hundred qubits*, Nature Physics, **10**, 3, 2014.

هزینه‌ی ترمودینامیکی یادگیری در پرسپترون با قواعد یادگیری هب و اویا

مصطفایی، محمدمهدی[۱]؛ موحد، سید محمدصادق[۱]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران

چکیده

یادگیری، یک فرایند فیزیکی است که به‌طور ذاتی هزینه‌ای ترمودینامیکی دارد. در این مقاله، این هزینه را برای یک پرسپترون تک‌وزن، با استفاده از چارچوب ترمودینامیک تصادفی کمّی می‌کنیم. دینامیک تحول وزن سیناپسی را به‌صورت یک فرایند لانژون به‌گونه‌ای مدل‌سازی می‌کنیم که در آن قواعد یادگیری (مانند هب و اویا) به‌عنوان نیروهایی تعیّنی عمل کنند. با اندازه‌گیری اطلاعات متقابل، تغییرات آنتروپی وزن و گرمای تلف‌شده در طول یادگیری، نشان می‌دهیم که این قواعد در نظام‌های ترمودینامیکی متمایزی عمل می‌کنند. برای مقایسه‌ی یازدهی این دو قاعده‌ی یادگیری، شاخص جدیدی به نام هزینه‌ی ترمودینامیکی معرفی می‌کنیم که عبارت است از آنتروپی کل تولیدشده، به ازای یادگیری یک واحد از اطلاعات. این چارچوب ترمودینامیکی، پارادایم جدیدی برای تحلیل الگوریتم‌ها بر اساس کارایی فیزیکی آن‌ها ارائه می‌دهد.

واژه های کلیدی: *ترمودینامیک تصادفی، هزینه‌ی یادگیری، دینامیک لانژونی، شبکه‌های عصبی*

Thermodynamic Cost of Learning in a Perceptron under Hebb and Oja Learning Rules

Mostafaei, M. Mahdi[1]; Movahed, Seyed Mohammad Sadegh[1]
[1] *Department of Physics, Shahid Beheshti University, Tehran, Iran*

Abstract

Learning is a physical process that entails inherent thermodynamic costs. In this paper we quantify this cost for a single-weight perceptron using the framework of stochastic thermodynamics. We model the dynamics of synaptic weight evolution as a Langevin process in a way learning rules (like Hebb and Oja) act as deterministic forces. By measuring the mutual information, change in weight entropy, and dissipated heat during the learning process, we show that these rules operate in distinct thermodynamic regimes. To compare the efficiency of these two learning rules, we introduce a new index called the thermodynamic cost, which is the total entropy produced per unit of learned information. This thermodynamic framework provides a new paradigm for analyzing algorithms based on their physical efficiency.

***Keywords**: Stochastic thermodynamics, Learning cost, Langevin dynamics, Neural Networks*

PACS No. 5

مقدمه

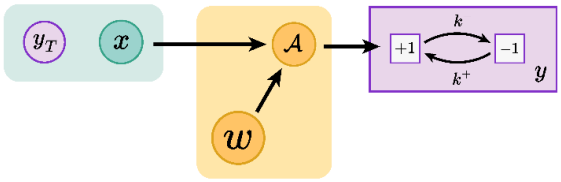
با وجود پیشرفت‌های شگرف در حوزه‌های هوش مصنوعی و یادگیری ماشین در سال‌های اخیر، تحلیل الگوریتم‌های یادگیری، غالباً و به‌طور سنتی، به معیارهای محاسباتی‌ای مانند دقت و سرعت مدل محدود بوده است. اما این دیدگاه، یک حقیقت بنیادین را نادیده می‌گیرد: هر محاسبه، و به تبع آن هر عمل یادگیری، یک فرآیند فیزیکی است [۱]. چه در جریان‌های الکتروشیمیایی مغز زیستی و چه در ترانزیستورهای سیلیکونی، یادگیری، ریشه در جهان فیزیکی دارد و بنابراین تابع قوانین آن و به‌ویژه قوانین ترمودینامیک است.

درک نوین از این ارتباط، در ابتدا با فرمول‌بندی شَنون از آنتروپی اطلاعات آغاز [۲]، و سپس توسط اصل لاندائور تثبیت شد؛ اصلی که بیان می‌کند پاک کردن (یا نگارش) یک بیت از اطلاعات، هزینه‌ی ترمودینامیکی و اجتناب‌ناپذیری در قالب اتلاف گرما به همراه دارد [۳]. بنابراین، اگر یادگیری، فرآیند نگارش اطلاعات بر یک بستر فیزیکی باشد – که در مورد وزن‌های سیناپسی شبکه‌های عصبی نیز چنین هست – پس ناگزیر باید هزینه‌ای ترمودینامیکی داشته باشد. امروزه با گسترش مصرف هنگفت انرژی از سوی مدل‌های زبانی بزرگ، مسئله‌ی هزینه یادگیری بیش از همیشه پررنگ شده است[٤].

این مقاله قصد دارد تا بر شکاف مفهومی میان توصیف الگوریتمی یادگیری و مبانی ترمودینامیکی آن پل بزند. برای این منظور، ما از چارچوب نظری ارائه شده توسط گولت و سیفریت [۵] بهره می‌بریم و ترمودینامیک تصادفی را به‌کار می‌گیریم که افزونه‌ای قدرتمند از ترمودینامیک کلاسیک است و مرزهای آن را به سامانه‌های مزوسکوپی، افت‌وخیزدار و غیرتعادلی گسترش می‌دهد [۶]. از آن‌جایی که یادگیری اساساً یک فرآیند غیرتعادلی است، این چارچوب، برای توصیف فرآیند یادگیری یک واحد یادگیرنده (نورون) منفرد که وزن‌های خود را در محیطی نوفه‌ای تطبیق می‌دهد، کاملاً مناسب است .

مدل اسباب‌بازی یادگیری

سامانه‌ی مورد مطالعه ما، یک پرسپترون تک‌وزن است که وظیفه دارد ارتباط میان ورودی x و برچسب صحیح y_T را بیاموزد. این مدل اسباب‌بازی فاقد پیچیدگی‌های غیرضروری شبکه‌های بزرگ است اما در عین حال ویژگی‌های بنیادی یادگیری را حفظ می‌کند.



شکل ۱: ساختار پرسپترون تک‌وزن با ورودی x، برچسب صحیح y_T، برچسب خروجی y و وزن w [۵]

در این مدل، ورودی و برچسب صحیح نورون، مقادیر دودویی $x, y_T \in \{+1, -1\}$ را اختیار می‌کنند. پرسپترون تلاش می‌کند تا با تنظیم وزن سیناپسی پیوسته‌ی خود $(w \in R)$، برچسب خروجی y را پیش‌بینی کند (**شکل ۱**). برخلاف مدل‌های تعیّنی سنتی، ما فرآیند پیش‌بینی را به عنوان یک فرآیند تصادفی دوحالته در نظر می‌گیریم. در این تصویر، تابع فعّال‌سازی نورون $(\mathcal{A} = w \cdot x)$ نقش اختلاف انرژی را ایفا می‌کند و نرخ‌های گذار $k^{\pm}$ بین حالت‌های خروجی، از شرط معادله‌ی تفصیلی در دمای T تبعیت می‌کنند $(k^+/k^- = e^{\mathcal{A}/k_BT})$. این دینامیک میکروسکوپی، منجر به تابع توزیع فرمی–دیراک (سیگموید) برای احتمال پیش‌بینی خروجی y به ازای وزن w می‌شود:

$$P(y|w) = \frac{1}{1 + e^{-2ywx}} \qquad (۱)$$

این توزیع احتمالاتی نشان‌دهنده‌ی یک فرآیند تصادفی است که در آن وزن سیناپسی w، نقش متغیر حالت سیستم را ایفا می‌کند. یادگیری زمانی رخ می‌دهد که وزن w به‌گونه‌ای تغییر کند که $P(y = y_T|w)$ افزایش یابد. این تغییرات وزن نهایتا در یک بستر فیزیکی (مانند سخت‌افزار نورومورفیک و یا محیط سلولی) رخ می‌دهد و بنابراین تحت تاثیر افت‌وخیزهای حرارتی قرار دارد. در این مقاله برای پرهیز از پیچیدگی‌های ابعادی و بدون از دست رفتن عمومیّت مسئله، $k_BT = 1$ در نظر می‌گیریم تا آنتروپی و انرژی را بدون بعد پردازش کنیم.

دینامیک لانژونی وزن سیناپسی

ایده‌ی اصلی تحلیل ما حول این تفسیر قرار دارد که فرآیند یادگیری ناشی از تغییرات وزن را می‌توان به‌عنوان حرکت یک ذره در یک پتانسیل انرژی مدل‌سازی کرد. در این چارچوب، قاعده‌ی یادگیری (الگوریتم به‌روزرسانی وزن) نقش یک نیروی فیزیکی تعیّنی $f(w)$ را ایفا می‌کند که بر وزن وارد می‌شود و اثرات ناشی از تصادفی‌بودن داده‌ها و افت‌وخیزهای حرارتی محیط، به‌صورت یک نوفه‌ی سفید گاوسی $\zeta(t)$ با آماره‌ی $\langle\zeta(t)\rangle = 0,\ \langle\zeta(t)\zeta(t')\rangle = 2\delta_D(t-t')$ در نظر گرفته می‌شود. بنابراین، تحول زمانی وزن سیناپسی w از معادله‌ی دیفرانسیلی تصادفی لانژون پیروی می‌کند:

$$\dot{w} = f(w, y_T) + \zeta(t) \qquad (۲)$$

رفتار بلندمدت این سامانه – پس از تغییرات متوالی وزن‌ها – از معادله‌ی فوکر–پلانک متناظر با معادله (۲) پیروی می‌کند که تحول زمانیِ چگالیِ احتمال وزن سیناپسی را توصیف می‌کند:

$$\frac{\partial p(w,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial w}[f(w)p(w,t)] + \frac{\partial^2 p(w,t)}{\partial w^2} \qquad (۳)$$

در حالت مانا $\partial_t p = 0$، و می‌توانیم چگالی احتمال مانای وزن $p_\infty(w)$ را پس از تثبیت یادگیری، به‌دست آوریم:

$$p_\infty(w) \propto \exp\left(\int^w f(w')dw'\right) \qquad (۴)$$

قواعد یادگیری هب و اویا

در این پژوهش دو قاعده‌ی یادگیری متفاوت را بررسی می‌کنیم که هرکدام نقش نیروی یادگیری $f(w, y_T)$ را با نرخ‌های یادگیری ν ایفا می‌کنند. هرکدام از این دو قاعده، منجر به دینامیک و توزیع مانای ذاتا متفاوتی می‌شود و پیامدهای ترمودینامیکی و اطلاعاتی متمایزی به دنبال دارد:

آ. قاعده‌ی هب (اصلاح‌شده):

$$f_{Hebb}(w) = -w + \nu y_T \quad (۵)$$

نیروی یادگیری هب، یک نیروی خطی است. توزیع مانای حاصل از این نیرو، یک توزیع گاوسی دو-قلّه‌ای است که میانگین قلّه‌های آن با گذر زمان، به $w = \nu y_T$ رانده می‌شود (فرآیند رانشی). برای جلوگیری از واگرایی وزن در این قاعد، جمله‌ی $-w$ به آن اضافه شده و از این رو آن را هب اصلاح‌شده می‌نامیم.

ب. قاعده‌ی اویا:

$$f_{Oja}(w) = \nu y_T(1 - w^2) \quad (۶)$$

نیروی یادگیری اویا، یک نیروی غیرخطی است که با جمله‌ی میرایی $(1 - w^2)$، وزن‌ها را در یک بازه محدود می‌کند. این دینامیک، منجر به یک توزیع مانای غیرگاوسی می‌شود که در آن دیواره‌های پتانسیل در $w = \pm 1$ قفل شده‌اند (فرایند آرام‌سازی).

آنتروپی، اطلاعات متقابل و گرمای تلف‌شده

برای کمّی‌سازی هزینه‌ی فیزیکی یادگیری، نیاز داریم تا سه کمیّت کلیدی را که مشخصه‌هایی از فرآیند یادگیری هستند، برای هردو قاعده‌ی یادگیری هب و اویا محاسبه کنیم.

آ. آنتروپی وزن $S[w]$ عدم قطعیت در چگالی توزیع وزن را نشان می‌دهد. تغییرات آنتروپی ΔS بیانگر تغییر در پیکربندی درونی سامانه در طول یادگیری است، مفهومی که در عصب‌های زیستی شکل‌پذیری سیناپسی نام دارد:

$$S[w] = -\int_{-\infty}^{\infty} p(w) \ln p(w)\, dw, \quad \int_{-\infty}^{\infty} p(w)\, dw = 1 \quad (۷)$$

ب. اطلاعات متقابل $I(y_T; y)$ بیان می‌کند که برچسب خروجی y چه میزان عدم قطعیت را حول برچسب y_T صحیح کاهش می‌دهد و سنجه‌ای از میزان یادگیری اطلاعات توسط پرسپترون است :

$$I(y_T;\ y) = H[y] - H[y|y_T] \quad (۸)$$

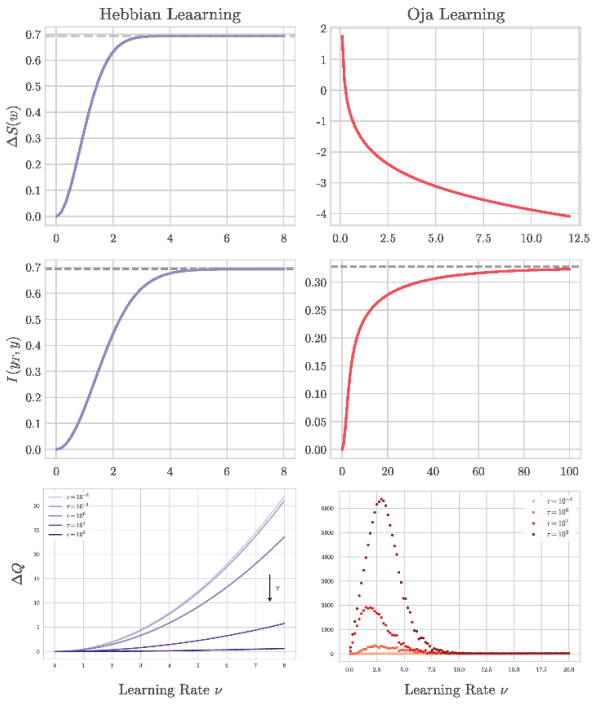
که در آن H آنتروپی گسسته‌ی شنون است.

پ. گرمای تلف‌شده ΔQ در یک سامانه‌ی فوق‌میرا، در اثر کار انجام شده توسط نیروی یادگیری بر روی وزن w، در مدت زمان یادگیری τ بر روی هنگردی از مسیرهای تصادفی تولید می‌شود[۶]:

$$\Delta Q = \int_0^{\tau} \langle f(w,t) \cdot \dot{w} \rangle dt \quad (۹)$$

مطابق نمودارهای **شکل۲**، تحت قاعده‌ی هب، با افزایش نرخ یادگیری، $\Delta S \to \ln 2$ و همچنین پرسپترون اطلاعات کامل $\ln 2$ را از برچسب‌های دودویی دریافت می‌کند. تحت قاعده‌ی اویا، با افزایش نرخ یادگیری، $\Delta S \to -\infty$ چرا که دو قلّه‌ی چگالی احتمال وزن، باریک و باریک‌تر شده و به توزیع دلتای دیراک نزدیک می‌شود. به دلیل سازوکار پایدارکننده‌ی درونی نیروی یادگیری اویا، ظرفیت اطلاعاتی آن ذاتا محدود و برابر 0.33 Nat است.

حال با استفاده از این سه کمیت، می‌توانیم شاخصه‌هایی برای ارزیابی کارآمدی ترمودینامیکی قواعد یادگیری تعریف کنیم.



شکل۲: تغییرات آنتروپی، اطلاعات متقابل و گرمای تلف شده برحسب نرخ یادگیری تحت قواعد هب (آبی) و اویا (قرمز).

شاخص هزینه‌ی ترمودینامیکی $\mathcal{C}$

پیش از این، گولت و سیفریت [۵] شاخص «بازدهی یادگیری» را به‌صورت $\eta = I(y_T; y)/\Delta S + \Delta Q$ معرفی کرده بودند. اگرچه این شاخص برای قواعدی مانند هب که فرآیندهایی رانشی هستند و تغییرات آنتروپی وزن در آن‌ها مثبت است مناسب هست؛ اما تحت قاعده‌ای مانند اویا که یک فرآیند آرام‌سازی است و کاهش شدید آنتروپی وزن را تجربه می‌کند، دچار واگرایی می‌شود و یا مقادیر غیرفیزیکی $\eta > 1$ را به‌دست می‌دهد.

از این رو، برای رفع این محدودیت و ارائه‌ی یک شاخص فیزیکی معنادار در تمامی نواحی ترمودینامیکی، ما شاخص هزینه‌ی

ترمودینامیکی یادگیری را معرفی می‌کنیم به نحوی که نسبت آنتروپی کل تولید شده، به اطلاعات کسب‌شده است:

$$\mathcal{C} = \frac{\Delta S + \Delta Q}{I(y_T; y)} \geq 1 \qquad (۱۰)$$

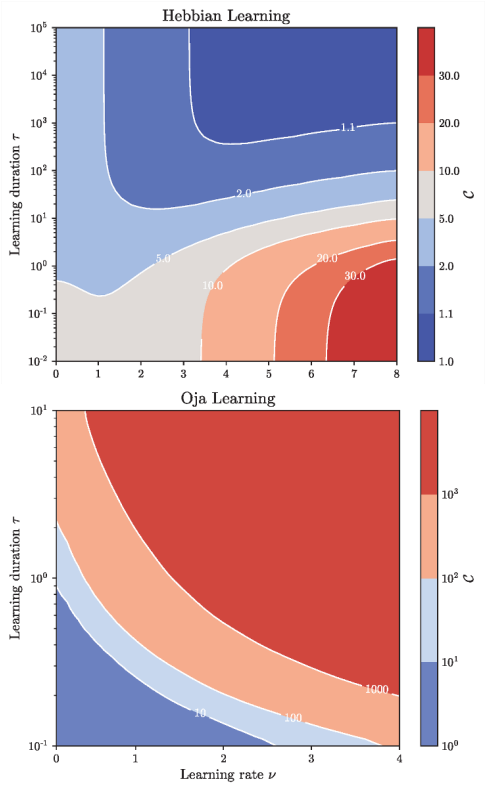
این شاخص، به‌جای بازدهی، بر هزینه تمرکز دارد و به این پرسش پاسخ می‌دهد که *«برای یادگیری یک واحد (Nat) از اطلاعات، چه‌مقدار آنتروپی باید در جهان تولید شود؟»* درحالی که شاخص گولت و سیفریت در پاسخ به این بود که *«چه کسری از تولید آنتروپی کل، با موفقیت به اطلاعات ذخیره‌شده تبدیل شده است؟»*. شاخص $\mathcal{C}$ به نوعی یک صورت‌بندی از اصل مشهور لاندائور است که بیان می‌کند برای نگارش یا پاک کردن یک نَت از اطلاعات، حداقل انرژی برابر ۱ واحد (مطابق واحدهای فرض‌شده در این مقاله) مورد نیاز است[۷].

شاخص هزینه‌ی ترمودینامیکی $\mathcal{C}$ نشان می‌دهد که بهترین و کم‌هزینه‌ترین راهبرد استفاده از قاعده‌ی هب، نرخ یادگیری بزرگ $\nu \to \infty$ و مدت زمان یادگیری طولانی $\tau \to \infty$ است. در این حالت فرآیند یادگیری شبه‌ایستاوار بوده و گرمای تلف‌شده کمینه است، و همزمان اطلاعات متقابل بیشینه می‌شود (**شکل۳** بالا). در قاعده‌ی اویا اما، کم‌هزینه‌ترین راهبرد، استفاده از نرخ‌های یادگیری کوچک $\nu < 1$ و مدت زمان یادگیری بسیار کوتاه $\tau \ll 10^0$ است چرا که جمله‌ی میرایی پایدارکننده‌ی این نیروی یادگیری، باعث انباشت گرمای نگه‌داشت در طول فرآیند یادگیری می‌شود در حالی که اطلاعات متقابل به کندی با افزایش نرخ یادگیری افزایش می‌یابد (**شکل۳** پایین).

جمع‌بندی

در این پژوهش، با به‌کارگیری چارچوب ترمودینامیک تصادفی، تغییرات وزن یک پرسپترون تک‌وزن را به‌صورت یک فرآیند لانژون مدل‌سازی کردیم. با محاسبه‌ی سه کمّیت تغییرات آنتروپی وزن، اطلاعات متقابل میان برچسب صحیح و خروجی و گرمای تلف‌شده، یادگیری اطلاعات را کمّی‌سازی کرده و شاخص هزینه‌ی ترمودینامیکی $\mathcal{C}$ را معرفی کردیم که برخلاف شاخص‌هایی که پیشتر معرفی شده بودند، برای قواعد یادگیری مختلف در نواحی ترمودینامیکی متفاوت، کارآمد است. نشان دادیم که یادگیری هب می‌تواند در حد $\nu \to \infty$، اطلاعات کامل را از برچسب‌های صحیح بیاموزد و در حد شبه‌ایستاوار $\tau \to \infty$ کم‌ترین اتلاف گرما را دارد.

همچنین قانون اویا، به دلیل سازوکار پایدارکننده‌ی داخلی خود، ظرفیت اطلاعاتی ذاتا محدودی دارد و قادر به کسب اطلاعات کامل از برچسب‌ها نیست. همچنین این سازوکار منجر به اتلاف بیشتر گرما در طول فرآیند یادگیری طولانی می‌شود و با افزایش نرخ و مدت زمان یادگیری، هزینه‌ی ترمودینامیکی آن افزایش می‌یابد.



شکل۳: هزینه ترمودینامیکی $\mathcal{C}$ به ازای مدت زمان یادگیری τ و نرخ یادگیری ν *تحت قواعد یادگیری هب و اویا*

مرجع‌ها

[1] D. H. Wolpert et al., "Is stochastic thermodynamics the key to understanding the energy costs of computation?" *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **vol**. 121, Oct. 2024.
[2] C. E. Shannon, "A mathematical theory of communication," *The Bell System Technical Journal*, **vol. 27**, no. 3, pp. 379–423, 1948.
[3] R. Landauer, "Irreversibility and heat generation in the computing process," *IBM Journal of Research and Development*, **vol. 5**, no. 3, pp. 183–191, 1961.
[4] E. Strubell, A. Ganesh, and A. McCallum, "Energy and policy considerations for deep learning in NLP," *Proceedings of the 57th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics*, pp. 3645-3650, July 2019.
[5] S. Goldt and U. Seifert, "Stochastic thermodynamics of learning," *Physical Review Letters*, **vol. 118**, p. 010601, Jan. 2017.
[6] U. Seifert, "Stochastic thermodynamics, fluctuation theorems and molecular machines," *Reports on Progress in Physics*, **vol. 75**, no. 12, p. 126001, 2012.
[7] J. M. R. Parrondo, J. M. Horowitz, and T. Sagawa, "Thermodynamics of information," *Nature Physics*, **vol. 11**, no. 2, pp. 131–139, 2015.

بررسی اثر زبری سطح الکترود در مقیاس نانو بر دینامیک شلیک نورون

رضائی کاشانی، نگار؛ نوروزی فر، احسان

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

چکیده

درک دقیق برهم‌کنش میان الکترودهای تحریک‌کننده/ثبت‌کننده و غشای نورون‌ها، نقشی اساسی در توسعه پروتزهای عصبی و رابط‌های مغز–ماشین دارد. در مدل‌های کلاسیک، فصل‌مشترک الکترود–بافت به صورت یک خازن و مقاومت ایده‌آل در نظر گرفته می‌شود. در این مقاله، با عبور از مدل‌های ساده الکترومغناطیسی، اثر هندسه فراکتالی و زبری سطح الکترود در مقیاس نانو را با استفاده از المان فاز ثابت بررسی می‌کنیم. ما این امپدانس مرتبه کسری را با مدل عصبی انباشت و شلیک نشت دار جفت کرده‌ایم. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که پارامتر زبری سطح به شدت بر تاخیر فاز، شکل پتانسیل عمل و نرخ شلیک نورون تاثیرگذار است. این رویکرد می‌تواند برای بهینه‌سازی هندسه الکترودها در تحریک عصبی مورد استفاده قرار گیرد.

واژه های کلیدی: برهم کنش الکترود–نورون، مدل انباشت و شلیک ، آستانه شلیک، دینامیک شکلیک.

Investigating the Effect of Nanoscale Electrode Surface Roughness on Neural Firing Dynamics

Rezaei Kashani, Negar; Noruzifar, Ehsan

Department of Physics, K. N. Toosi University of Technology, Tehran

Abstract

An accurate understanding of the interaction between stimulating/recording electrodes and neuronal membranes is essential for the development of neuroprosthetics and brain-machine interfaces. In classical models, the electrode-tissue interface is represented as an ideal capacitor and resistor. In this paper, moving beyond simplified electromagnetic models, we investigate the effects of fractal geometry and nanoscale electrode surface roughness using a Constant Phase Element. We have coupled this fractional-order impedance with the Leaky Integrate-and-Fire neural model. Simulation results demonstrate that the surface roughness parameter significantly influences the phase delay, action potential shape, and neuronal firing rate. This approach can be utilized to optimize electrode geometry for neural stimulation applications.

***Keywords**: Electrode-Neuron Interaction, Integrate-and-Fire Model, Firing Threshold, Firing Dynamics.*

PACS No 87.85.dd

مقدمه

در دهه‌های اخیر، توسعه پروتزهای عصبی و رابط‌های مغز–ماشین تحولی بنیادین در درمان اختلالات عصبی، از جمله بیماری پارکینسون، صرع و بازیابی عملکردهای حسی–حرکتی ایجاد کرده است. در تمامی این سیستم‌ها، فصل‌مشترک الکترود–بافت به عنوان پل ارتباطی میان سیستم‌های الکترونیکی مصنوعی و شبکه‌های بیولوژیکی، نقشی حیاتی ایفا می‌کند. کیفیت این ارتباط مستقیماً بر کارایی تحریک عصبی، مصرف انرژی و طول عمر ایمپلنت‌ها تأثیر می‌گذارد. در مدل‌سازی‌های کلاسیک، رفتار الکتریکی این فصل‌مشترک عمدتاً با استفاده از مدارهای معادل خطی مانند مدار رندلز و خازن‌های ایده‌آل (جهت مدل‌سازی ظرفیت لایه دوگانه الکتریکی) توصیف می‌شود. با این حال، مطالعات نشان داده‌اند که این مدل‌های ساده‌سازی شده، قادر به توصیف دقیق دینامیک انتقال بار در محیط‌های پیچیده بیولوژیکی نیستند [۱].

در واقعیت، سطح الکترودهای تحریک‌کننده عصبی در مقیاس میکرو و نانو هرگز کاملاً صاف نیستند؛ بلکه دارای ناهمواری، تخلخل و هندسه‌ای فراکتالی می‌باشند. این زبری سطحی باعث می‌شود که ظرفیت خازنی لایه دوگانه رفتار غیرایده‌آل از خود نشان دهد. برای مدل‌سازی دقیق این پدیده، از المان فاز ثابت استفاده می‌شود. از منظر ریاضیات و فیزیک سیستم‌های پیچیده، این رفتار غیرایده‌آل را می‌توان به پدیده پخش ناهنجار و وجود اثرات حافظه‌دار در سیستم نسبت داد.

از سوی دیگر، مدل‌سازی دینامیک شلیک نورون‌ها معمولاً با معادلات دیفرانسیل معمولی مانند مدل انباشت و شلیک نشت‌دار و یا مدل هاچکین–هاکسلی انجام می‌شود. نکته حائز اهمیت این است که هنگامی که نورون در مجاورت یک الکترود با سطح زبر نانومقیاس قرار می‌گیرد، خازن غشای سلول بیولوژیکی تغییر نمی‌کند؛ بلکه میدان الکتریکی موضعی و جریان تزریقی به بافت تحت تأثیر امپدانس کسری الکترود، تعدیل می‌شوند [۳]. به عبارت دیگر، الکترود زبر همانند یک فیلتر مرتبه کسری عمل کرده و دینامیک زمانی جریان تحریک‌کننده نورون را تغییر می‌دهد.

با وجود اهمیت این موضوع، بررسی اثر مستقیم زبری سطح الکترود (پارامتر α) بر دینامیک غیرخطی شلیک نورون‌ها و آستانه تحریک، تا حد زیادی در مقالات پیشین نادیده گرفته شده است. بنابراین، در این مقاله، با ترکیب فیزیک سطح مقیاس نانو و بیوفیزیک عصبی، یک مدل یکپارچه مدل انباشت و شلیک نشت‌دار جفت شده با المان فاز ثابت پیشنهاد شده است. هدف اصلی این پژوهش، شبیه‌سازی عددی این مدل کسری و تحلیل اثر تغییرات پارامتر زبری سطح (α) بر زمان تاخیر فاز، نرخ شلیک و دینامیک فضای فاز (چرخه‌های حدی کسری) نورون است. نتایج این مطالعه می‌تواند بینش‌های فیزیکی جدیدی برای طراحی و بهینه‌سازی هندسه الکترودهای تحریک عصبی با بیشترین بازدهی فراهم آورد.

مدل فیزیکی و روش

مدل الکترود تحریک: هنگامی که الکترود در تماس با آب میان‌بافتی (به عنوان الکترولیت) قرار می‌گیرد، لایه دوگانه الکتریکی در فصل‌مشترک آن‌ها تشکیل می‌شود. به دلیل هندسه فراکتالی سطح الکترودهای واقعی (مانند پلاتین یا نانولوله‌های کربنی)، امپدانس فصل‌مشترک به جای یک خازن ایده‌آل با یک المان فاز ثابت مدل می‌شود. امپدانس این المان در فضای بسامد به صورت زیر است:

$$Z_{CPE}(\omega) = \frac{1}{Q(j\omega)^{\alpha}} \qquad (۱)$$

در این رابطه، Q پیش‌فاکتوری با واحد s^{α}/Ω و پارامتر بی‌بُعد α توان المان فاز ثابت در بازه $0 \le \alpha \le 1$ (نمایانگر میزان زبری هندسی سطح الکترود است. حالت $\alpha = 1$ معادل خازن ایده‌آل $(C = Q)$برای سطحی کاملاً صاف، و حالت $\alpha = 0$معادل مقاومت ایده‌آل $(R = 1/Q)$ است. بازه $0 < \alpha < 1$رفتار ترکیبی مقاومتی–خازنیِ فصل‌مشترک‌های الکتروشیمیایی واقعی را نشان می‌دهد؛ کاهش α از ۱ بیانگر افزایش زبری، تخلخل و توزیع غیریکنواخت جریان است [۲]. با توجه به ارتباط α با بُعد فراکتالی، در این مقاله از آن به عنوان «نمای زبری» جهت مدل‌سازی اثرات فیلترینگ جریانِ ناشی از هندسه واقعی الکترود استفاده می‌شود.در این رابطه در حوزه زمان، جریان عبوری از این فصل‌مشترک با استفاده از مشتق کسری کاپوتو توصیف می‌شود:

$$I_{elec}(t) = Q\frac{d^{\alpha}V_{elec}(t)}{dt^{\alpha}} \qquad (۲)$$

مدل بیوفیزیکی نورون: مدل انباشت و شلیک نشت‌دار، دینامیک پتانسیل غشای نورون V_m را توصیف می‌کند. معادله کلاسیک این مدل به صورت زیر است:

$$\tau_m \frac{dV_m(t)}{dt} = -(V_m(t) - V_{rest}) + R_m I_{stim}(t) \qquad (۳)$$

که در آن پارامتر τ_m نشان‌دهنده ثابت زمانی غشا است. از نظر فیزیکی، این پارامتر برابر با حاصل‌ضرب مقاومت غشا (R_m) در ظرفیت خازنی غشا (C_m) است، $\tau_m = R_m C_m$، و مشخص می‌کند که پتانسیل غشا با چه سرعتی تغییر می‌کند (سرعت نشت بار و سرعت رسیدن به حالت آرامش)؛ V_{rest} پتانسیل آرامش غشا که همان مقدار پتانسیل پایه نورون است. این پارامتر نشان‌دهنده پتانسیل الکتریکی غشا در حالتی است که هیچ تحریک خارجی وجود ندارد و سیستم در حالت تعادل ترمودینامیکی–الکتروشیمیایی قرار دارد؛ I_{stim}، جریان تحریک خارجی نشان‌دهنده جریان الکتریکی تزریق‌شده از سوی الکترود به نورون است. این جریان باعث واقطبیده شدن غشا (افزایش پتانسیل) و در نهایت رسیدن آن به آستانه شلیک می‌شود.

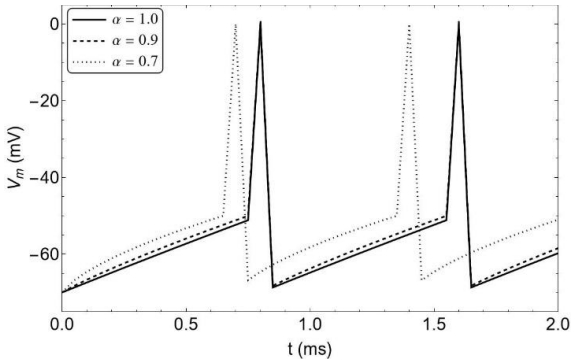
هنگامی که V_m به ولتاژ آستانه V_{th} می‌رسد، نورون شلیک کرده و ولتاژ به مقدار اولیه V_{rest} برمی‌گردد.

جفت‌شدگی فیزیکی الکترود-نورون: در این مدل، ساختار بیولوژیکی غشا (معادله ۳) ثابت می‌ماند و زبری الکترود تنها جریان تزریقی را فیلتر می‌کند($I_{stim}(t) \equiv I_{elec}(t)$). با ترکیب معادلات (۲) و (۳)، معادله سیستم جفت شده به دست می‌آید. اعمال مشتق کسری($\alpha < 1$)، به دلیل وجود هسته قانون-توان، تاریخچه زمانی (اثر حافظه) را به سیستم تحمیل کرده و پاسخ نمایی پتانسیل غشا (V_m)را به تابع میتاگ-لفلر تغییر می‌دهد. این امر موجب پدیده «شروع سریع» شده، V_mزودتر به آستانه شلیک (V_{th}) می‌رسد و نرخ شلیک نورون افزایش می‌یابد. حل عددی سیستم با الگوریتم گرونوالد-لتنیکوف انجام پذیرفت. مقادیر پارامترها بر اساس داده‌های بیوفیزیکی استاندارد به این شرح انتخاب شدند:

$\tau_m = 10$ ms، $V_{rest} = -70$ mV، $V_{th} = -50$ mV، $R_m I_{stim} = 26$ mV، و پارامتر زبری سطح الکترود در بازه $\alpha \in [0.5,1.0]$ تغییر داده شد. سیگنال ورودی به الکترود به صورت یک پالس ولتاژ مربعی با دامنه ثابت فرض شده است. لازم به ذکر است اگرچه تعیین دقیق پارامتر زبری (α) برای هر نوع الکترود خاص مستلزم انجام آزمایش‌های EIS در محیط الکترولیت مشابه با محیط زیستی است، اما بر اساس مطالعات پیشین روی الکترودهای Ag/AgCl، مقادیر α معمولاً در بازه 0.7 تا 0.95 گزارش می‌شوند[٤].

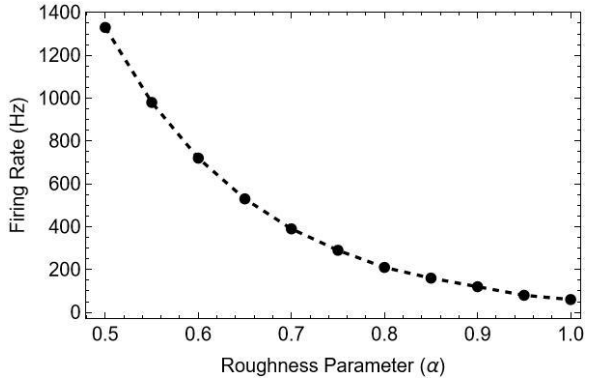
نتایج و بحث

در این پژوهش، پاسخ دینامیکی مدل نورونی جفت شده با المان فاز ثابت تحت تحریک جریان ثابت مورد بررسی قرار گرفت. شکل ۱، تغییرات پتانسیل غشا V_m را در یک بازه زمانی ۲میلی‌ثانیه‌ای تحت جریان تحریک زیاد ($R_m I_{stim} = 26.0$ mV) برای مقادیر مختلف پارامتر زبری α نشان می‌دهد. برخلاف رژیم‌های با تحریک ضعیف، در این حالت مشاهده می‌شود که کاهش مقدار α (که نمایانگر افزایش زبری سطح الکترود در مقیاس نانو و بروز پدیده پخش غیرعادی است) منجر به تسریع در رسیدن به ولتاژ آستانه شلیک (-50 mV) می‌گردد. همان‌طور که در نمودار مشخص است، منحنی مربوط به $\alpha = 0.7$ (خط‌چین نقطه‌ای) شیب شارژ اولیه تندتری داشته و زودتر از مدل کلاسیک و خازن ایده‌آل با $\alpha = 1.0$(خط پر) به آستانه رسیده و شلیک می‌کند.



شکل ۱: بررسی تغییرات پتانسیل غشا V_m بر حسب میلی ولت در بازه زمانی ۲میلی‌ثانیه برای مقادیر مختلف پارامتر زبری α برابر با 1.0 (خط‌پر)، 0.9 (خط‌چین) و 0.7 (نقطه‌چین).

دلیل علمی این پدیده، تسلط ویژگی شروع سریع در معادلات دیفرانسیل کسری تحت ورودی‌های پله‌ای بزرگ است؛ جایی که کاهش α باعث تغییر رفتار شارژ غشا از شکل نمایی استاندارد به شکل توانی با نرخ رشد اولیه بسیار زیاد می‌شود. این نتایج ثابت می‌کند که در حضور جریان‌های تحریک قوی، زبری‌های نانومقیاس سطح الکترود می‌توانند با تغییر سازوکار انتقال بار، تحریک‌پذیری نورون را تسریع کرده و بسامد شلیک عصبی را افزایش دهند.



شکل ۲: وابستگی غیرخطی نرخ شلیک نورون برحسب هرتز به پارامتر بدون بعد زبری الکترود α .

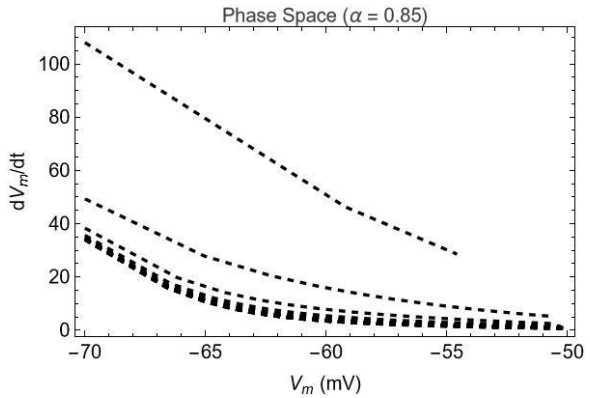
شکل ۲ وابستگی کاملاً غیرخطی نرخ شلیک نورون را نسبت به پارامتر زبری سطح α به تصویر می‌کشد. در این چارچوب مدل‌سازی، پارامتر کسری α مستقیماً بازتاب‌دهنده رفتار المان فاز ثابت است که از تخلخل، ناهمگنی و زبری‌های مقیاس نانو در سطح

مشترک الکترود–الکترولیت نشأت می‌گیرد. همان‌طور که در نمودار مشاهده می‌شود، با کاهش مقدار α از حالت ایده‌آل ($\alpha = 1.0$، معادل الکترود کاملاً صاف ایده‌آل) به سمت مقادیر کمتر (افزایش زبری سطح)، نرخ شلیک نورون به صورت غیرخطی و با شتاب فزاینده‌ای افزایش می‌یابد.

این دگرگونی در پاسخ بسامدی سیستم، ریشه در ویژگی بنیادین حافظه‌دار بودن در معادلات دیفرانسیل کسری دارد. بر این اساس، تاریخچه تغییرات ولتاژ در انباشت بار الکتریکی نقش ایفا کرده و دینامیک شارژ غشا را از یک رفتار نمایی کلاسیک به یک رفتار توانی تغییر می‌دهد. تحت جریان‌های تحریک قوی، این تغییر ماهیت منجر به بروز پدیده شروع سریع در لحظات اولیه شارژ شده و زمان رسیدن ولتاژ غشا به آستانه شلیک را به شدت کاهش می‌دهد.

در نتیجه، تحلیل تغییرات پارامتر α نشان می‌دهد که مشخصات هندسی و مورفولوژی سطح الکترود در مقیاس نانو تنها یک عامل فیزیکی ثابت نیست، بلکه می‌تواند به عنوان یک پارامتر کنترلی دقیق و قدرتمند برای تنظیم نرخ شلیک نورون عمل کند. این یافته اثبات می‌کند که با مهندسی هدفمند زبری سطح الکترودهای تحریک عصبی، می‌توان تحریک‌پذیری بافت را تعدیل کرد و کارایی پروتکل‌های تحریک عصبی را بدون نیاز به افزایش دامنه جریان خارجی (که می‌تواند به آسیب بافتی منجر شود)، به طور چشمگیری بهبود بخشید.

برای درک عمیق‌تر دینامیک سیستم، فضای فاز تغییرات پتانسیل (dV_m/dt بر حسب V_m) برای $\alpha = 0.85$ در شکل ۳ رسم شده است. در مدل‌های کلاسیک مرتبه صحیح، پس از ریست شدن پتانسیل به -70 میلی‌ولت، مسیر فاز دقیقاً روی خود تکرار می‌شود (یک چرخه حدی استاندارد). اما در این مدل کسری، به دلیل وابستگی سیستم به تاریخچه زمانی خود (اثر حافظه در روش گرونوالد–لتنیکوف)، مسیرهای فاز در چرخه‌های متوالی بر هم منطبق نیستند. این پدیده که به عنوان چرخه حدی کسری شناخته می‌شود، نشان می‌دهد که انباشت حافظه در نورون باعث می‌شود سیستم به تدریج و با گذر زمان به یک تعادل دینامیکی جدید همگرا شود.



شکل ۳: نمودار فضای فاز سیستم، تغییرات dV_m/dt بر حسب V_m به ازای پارامتر زبری $\alpha = 0.85$. برای وضوح بیشترمسیرهای فازی، پرش‌های ناشی از ریست ولتاژ از نمودار حذف شده‌اند.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش اثر زبری سطح الکترودهای تحریک عصبی را با تلفیق المان فاز ثابت و مدل انباشت و شلیک نشت‌دار بررسی شده است. نتایج نشان داد زبری نانومقیاس ($\alpha < 1$) با ایجاد پخش غیرعادی و اثر حافظه، رسیدن به آستانه شلیک را تسریع کرده و نرخ آتش را به‌طور غیرخطی تغییر می‌دهد. تحلیل فضای فاز نیز چرخه‌های حدی کسری ناشی از انباشت تاریخچه سیستم را تایید کرد.

این یافته‌ها ثابت می‌کند که در طراحی رابط‌های مغز–ماشین، مدل‌های کلاسیک RC خطای بالایی دارند و لحاظ کردن مورفولوژی الکترود الزامی است. توسعه‌های آتی می‌تواند شامل افزودن نوفه، استفاده از مدل‌های بیوفیزیکی دقیق‌تر (مانند هاجکین–هاکسلی) و بررسی اثر زبری در شبکه‌های عصبی باشد.

مرجع‌ها

[۱] S. F. Cogan, "Neural stimulation and recording electrodes," *Annual Review of Biomedical Engineering* **10**, (2008) 275-309.

[۲] W. Franks, I. Schenker, P. Schmutz, and A. Hierlemann, "Impedance characterization and modeling of electrodes for biomedical applications," *IEEE Transactions on Biomedical Engineering* **52**, no. 7, (2005) 1295-1302.

[۳] W. Teka, T. M. Marinov, and F. Santamaria, "Neuronal spike timing adaptation described with a fractional leaky integrate-and-fire model," *PLoS Computational Biology* **10**, no. 3, (2014) e1003526.

[٤] J. B. Bates, and Y. T. Chu, "Electrode-electrolyte interface impedance: experiments and model", *Ann. Biomed. Eng.* **10**, (1992) 349-362.

تحلیل رفتار دینامیکی میکروحباب ها در سیال غیرنیوتنی خون

سفیدکار، نرمین؛ بهنیا، سهراب؛ فتحی زاده، سمیرا

گروه فیزیک، دانشکده علوم و فناوری های نوین، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه

چکیده

در این مطالعه، رفتار دینامیکی میکروحباب‌ها در سیال غیرنیوتنی خون به‌طور سیستماتیک بررسی شده است. میکروحباب‌ها که ساختاری کروی با هسته گازی دارند، تحت تأثیر امواج فراصوت رشد کرده و سپس فرو می‌پاشند. برای مدل‌سازی سیستم، از معادله تعمیم‌یافته ریلی–پلست که برای سیال‌های غیرنیوتنی ویسکوالاستیک تطبیق داده شده، استفاده گردید. با استفاده از تحلیل دوشاخه‌شدگی، که ابزاری بنیادین در نظریه آشوب است، تأثیر پارامترهای کلیدی شامل فشار، فرکانس و دما بر دینامیک حباب در دامنه وسیعی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج ما نشان می‌دهد که در فشارهای اولیه پایین، سیستم رفتار تناوبی پایدار از خود نشان می‌دهد. اما با افزایش فشار، سیستم به‌تدریج وارد نواحی آشوبناک می‌شود که درون آن پنجره‌های پایداری نیز دیده می‌شود. به‌طور مشخص، افزایش فرکانس امواج فراصوت باعث گسترش ناحیه پایدار سیستم با افزایش فشار می‌شود، در حالی که افزایش دما، شروع دینامیک آشوبناک را تسهیل کرده و ناحیه آشوب را گسترش می‌دهد. این یافته‌ها بینش مهمی برای بهینه‌سازی پارامترهای فراصوت به منظور دستیابی به درمان‌های کنترل‌شده مبتنی بر میکروحباب با حداقل آسیب به بافت‌های سالم فراهم می کند.

واژه های کلیدی: *آشوب، دوشاخه شدگی، دینامیک میکروحباب، لرد ریلی، سیال*

Analysis of dynamical behavior of microbubbles in the non-Newtonian fluid of blood

Narmin, Sefidkar; Behnia, Sohrab; Fathizadeh, Samira

Department of Physics, Faculty of Sciences and Modern Technologies, Urmia University of Technology, Urmia

Abstract

In this study, the dynamic behavior of microbubbles in a non-Newtonian blood fluid are systematically investigated. Microbubbles, which have a spherical structure with a gas core, grow under the influence of ultrasound waves and then collapse. For modeling purposes, the generalized Rayleigh-Plesset equation adapted for viscoelastic non-Newtonian fluids is employed. The thermal energy generated during bubble collapse is also incorporated into the dynamic framework. Using bifurcation analysis, a fundamental tool of chaos theory, the influence of key parameters including pressure, frequency, and temperature on bubble dynamics is examined over a wide range. Our results show that at low initial pressures, the system exhibits stable periodic behavior. However, as pressure increases, the system gradually enters chaotic regions, within which windows of stability are also observed. Specifically, increasing the frequency of ultrasound waves broadens the stable region of the system with increasing pressure, while increasing temperature facilitates the onset of chaotic dynamics and expands the chaotic region. These findings provide critical insights for optimizing ultrasound parameters to achieve controlled microbubble-based therapies with minimal damage to healthy tissues.

Keywords: *Chaos, Bifurcation, Microbubble dynamic, Lord Rayleigh, fluid*
PACS No. *80, 87, 89*

مقدمه

سیال به ماده ای گفته می شود که تحت اعمال هر مقدار تنش برشی حتی بسیار کوچک دچار تغییر شکل پیوسته گردد. به عبارت دیگر مدول برشی سیالات نزدیک به صفر است [۱]. از منظر رئولوژیکی دو نوع سیال داریم:

۱) سیال نیوتنی

۲) سیال غیر نیوتنی

تحقیقات انجام شده بر روی خون نشان می دهد که در نظر گرفتن خون به عنوان یک سیال غیرنیوتنی با نتایج تجربی همخوانی خوبی دارد و از این رو، اکثر مدل های ارائه شده برای تحلیل میدان سیال، خون را یک سیال غیرنیوتنی فرض می کنند که رفتار ویسکوالاستیک از خود نشان می دهد[۲]. در این کار میکروحباب ها که دارای ساختار کروی متشکل از یک هسته گازی هستند [۳] در سیال غیرنیوتنی خون حرکت کرده، رشد می کنند و تحت امواج فراصوت در محل مورد نظر فرو می پاشند. هنگام فروپاشی میکروحباب ها، گرمایی تولید می شود که سبب تخریب سلول های هدف می شوند. در واقع ما با این کار افق های جدیدی در درمان های غیرتهاجمی، به ویژه در از بین بردن سلول های هدف بیمار با حداقل آسیب به بافت های سالم می گشاییم.

مدلسازی و روش ها

محققان از اواسط قرن نوزدهم شروع به بررسی نظریه دینامیک حباب کردند و به تدریج به رابطه نزدیک بین حباب ها و پدیده های فیزیکی مانند کاویتاسیون پی بردند. تا دهه ۱۹۴۰، با تکیه بر نظریه ریلی و درک بهتر کاویتاسیون، پلست دینامیک حباب را با تصور حباب در یک میدان سیال تراکم ناپذیر بهبود بخشید. با گسترش و اصلاح نظریه لرد ریلی، رابطه بین نوسان حباب و فشار سیال کشف شد که منجر به معادله برجسته ریلی پلست برای دینامیک حباب شد [۴]. معادله ریلی پلست به صورت زیر نشان داده می شود:

$$R\ddot{R}+\frac{3}{2}\dot{R}^2=\frac{1}{\rho}\left[p_g-p_\infty-\frac{2\sigma}{R}-\frac{4\mu}{R}\right] \qquad (1)$$

که در آن R شعاع لحظه ای حباب، $\dot{R}$ سرعت نوسانی سطح حباب، $\ddot{R}$ شتاب نوسانی سطح حباب، ρ چگالی محیط سیال اطراف، p_g فشار گاز داخل حباب، p_∞ فشار محیط در بی نهایت (دور از حباب)، σ ضریب کشش سطحی سیال و μ ضریب ویسکوزیته دینامیکی سیال است. معادله حاکم بر رشد حباب از معادله کلی ریلی–پلست پیروی می کنند. با توجه به اثرات ویسکوالاستیک سیال های غیرنیوتنی، با اضافه کرد ن تنش برشی به معادله (۱) در رفرنس [۵] ، آن ر ا برای استفاده در سیال غیرنیوتنی خون تعمیم دادند که نتیجه اش معادله انتگرال دیفرانسیلی زیر است:

$$R\ddot{R}+\frac{3}{2}\dot{R}^2=\frac{1}{\rho}\left[p_g-p_\infty-\frac{2\sigma}{R}+2\int_R^\infty\left(\frac{\tau_{rr}-\tau_{\theta\theta}}{r}\right)dr\right] \qquad (2)$$

سپس ما با اضافه کردن عبارت $R\xi\dot{R}$ به معادله (۲)، انرژی گرمایی ناشی از واپاشی حباب را در سیال غیرنیوتنی خون بررسی کردیم. همچنین اثرات پارامترهای اساسی موثر مثل فشار و فرکانس و دما بر دینامیک حباب در یک دامنه وسیع با استفاده از روش دوشاخه شدگی که یکی از ابزارهای نظریه آشوب است، مورد مطارلعه قرار گرفته است. کلمه آشوب به رفتار زمانی سیستمی اطلاق می شود که غیرمتناوب بوده و ظاهرا تصادفی است اما در پشت این ظاهر تصادفی، نظمی وجود دراد که توسط معادلات تحول سیستم به آنها داده می شود [۶]. به طور کلی زمانی می توان یک سیستم دینامیکی را آشوبناک نامید که دارای سه شرط زیر باشد [۷]:

۱) معین باشد.
۲) غیرخطی باشد.
۳) به شدت به شرایط اولیه حساس باشد.

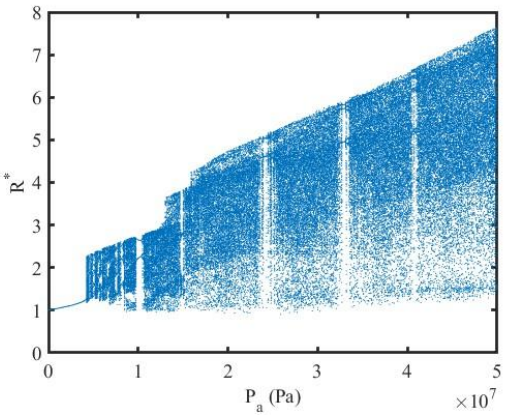
تغییر کیفی در رفتار دینامیکی یک سیستم مانند دینامیک حباب ها در میدان های فراصوت، هنگامی که یک پارامتر از سیستم تغییر می کند، دوشاخه شدگی نامیده می شود [۸]. دوشاخه شدگی یکی از ابزارهای نظریه آشوب است که با استفاده از آن می توان نواحی پایدار و آشوبناک را شناسایی کرد و آستانه های پایداری را تخمین زد.

در این مطالعه، پارامترهای فیزیکی مربوط به سیال خون در شبیه سازی های انجام شده به صورت جدول (۱) در نظر گرفته می شود:

جدول۱: پارامترهای فیزیکی سیال خون

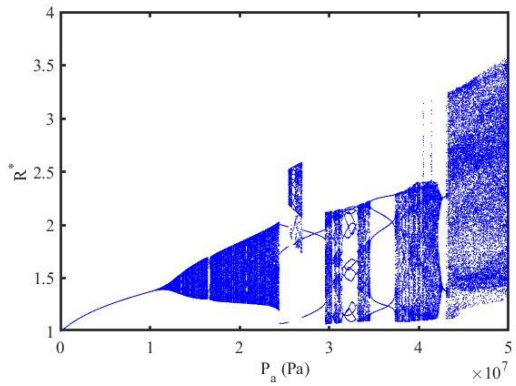
نام پارامتر فیزیکی	نماد	مقدار
چگالی	ρ	$1060\ \frac{Kg}{m^3}$
ویسکوزیته	μ	0.004 Pa.s
کشش سطحی	σ	$0.072\ \frac{N}{m}$
مدول الاستیک	G	15 Pa
ثابت زمانی تنش	λ	2.5 ms

در شکل۱، نمودار دوشاخه شدگی برحسب فشار برای دمای ۳۲۰ درجه کلوین و فرکانس ۳۰ مگاهرتز رسم شده است. شکل ۱، گذار از نوسانات تناوبی به رفتار آشوبناک را با افزایش فشار از ۰ تا ۵۰ مگاپاسکال را نشان می دهد. تا فشار ۴ مگاپاسکال، سیستم در حالت پایدار مشاهده می شود درحالی که فراتر از فشار آستانه ۴ مگاپاسکال، دینامیک آشوبناک همراه با پنجره های پایداری ظاهر می گردد.



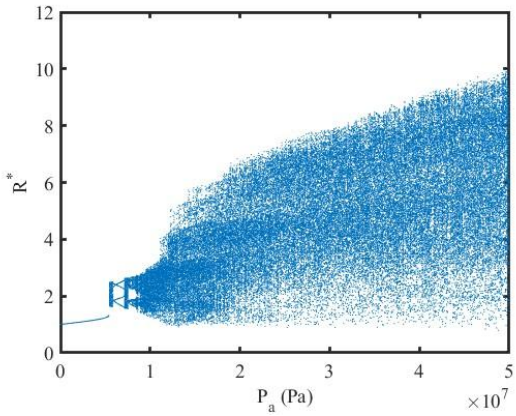
شکل ۱: نمودار دوشاخه شدگی برحسب فشار در T=320K و f=30MHz

در شکل۲، نمودار دوشاخه شدگی برحسب فشار برای دمای ۳۲۰ درجه کلوین و فرکانس ۵۰ مگاهرتز رسم شده است. یعنی فرکانس را از ۳۰ مگاهرتز به ۵۰ مگاهرتز افزایش داده ایم. در اینجا سیستم تا فشار ۱۲ مگاپاسکال عمدتا تناوبی باقی می ماند و بعد از فشار ۱۲ مگاپاسکال، سیستم وارد فاز آشوبناک می شود در حالیکه در شکل ۱، سیستم بعد از فشار ۴ مگاپاسکال وارد فاز آشوبناک می شد. بنابراین از مقایسه شکل ۲ با شکل ۱ می توان نتیجه گرفت که فرکانس بالاتر سبب گسترش ناحیه پایدار فشار شده و شروع آشوب را از ۴ مگاپاسکال به ۱۲ مگاپاسکال به تاخیر می اندازد.



شکل ۲: نمودار دوشاخه شدگی برحسب فشار در T=320K و f=50MHz

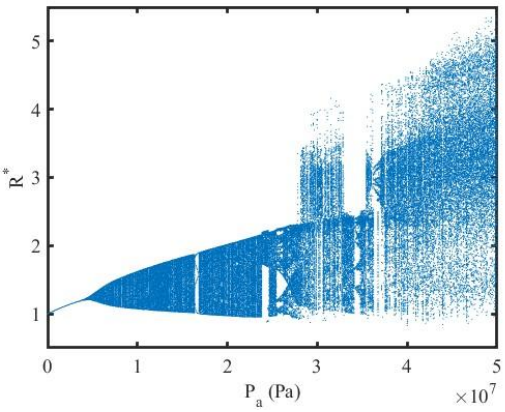
در شکل۳، نمودار دوشاخه شدگی برحسب فشار برای دمای ۳۵۰ درجه کلوین و فرکانس ۳۰ مگاهرتز رسم شده است. در اینجا افزایش دما گذار به دینامیک آشوبناک را تسریع می کند. ناحیه آشوبناک در مقایسه با حالت دمای پایین تر یعنی شکل ۱، بارزتر است و پنجره های پایداری کمتری دارد که نشان دهنده حساسیت بیشتر به اثرات گرمایی می باشد.



شکل ۳: نمودار دوشاخه شدگی برحسب فشار در T=350K و f=30MHz

در شکل۴، نمودار دوشاخه شدگی برحسب فشار برای دمای ۳۵۰ درجه کلوین و فرکانس ۵۰ مگاهرتز رسم شده است. یعنی فرکانس و دما هر دو نسبت به شکل ۱، افزایش یافته است. در این دمای بالاتر، تاثیر پایدارکنندگی فرکانس افزایش یافته همچنان مشهود است

اما تا حدودی توسط اثرات گرمایی خنثی می شود. سیستم رفتار مختلطی نشان می دهد. این نتایج، نقش رقابتی دما و فرکانس را در کنترل دینامیک میکروحباب برجسته می سازد.



شکل ۴: نمودار دوشاخه شدگی برحسب فشار در T=350K و f=50MHz

نتیجه گیری

در دهه های اخیر استفاده از میکروحباب ها در کاربردهای پزشکی به ویژه برای دارور سانی، درمان سرطان و در باز کردن سد رگ ها و شریان های مسدود شده به طور چشمگیری افزایش یافته است. در این مقاله، ما به بررسی گرمای ناشی از واپاشی میکروحباب ها در جریان خون می پردازیم و از آن در جهت کاربردهای درمانی استفاده می کنیم. ما با استفاده از روش دوشاخه شدگی نواحی پایدار و آشوبناک میکروحباب ها را شناسایی کردیم و به این نتیجه رسیدیم که در فشارهای اولیه سیستم پایدار است ولی با افزایش فشار، سیستم به تدریج وارد فاز آشوبناک می شود که داخل این فاز آشوبناک پنجره های پایداری هم مشاهده می شود. همچنین مشاهده کردیم که با افزایش فرکانس، ناحیه پایداری سیستم با افزایش فشار افزایش می یابد و با افزایش دما ناحیه آشوبناک سیستم افزایش می یابد. یافته‌های این مطالعه از منظر فیزیک پزشکی حائز اهمیت است. فروپاشی میکروحباب‌ها در رژیم آشوبناک با تولید امواج شوک و میکروجت‌های با سرعت بالا همراه است که موجب کاویتاسیون شدید و ایجاد حفره‌های موقتی در بافت می‌شود. این پدیده، اگرچه برای تخریب سلول‌های هدف (مانند تومورها) مفید است، اما در صورت عدم کنترل، می‌تواند به بافت‌های مجاور آسیب برساند و باعث پارگی مویرگ‌ها یا همولیز گلبول‌های قرمز شود. نتایج ما نشان می‌دهد که با انتخاب فرکانس‌های بالاتر (مثلاً ۵۰ مگاهرتز)، می‌توان ناحیه پایدار را گسترش داد و از وقوع کاویتاسیون ناخواسته در بافت‌های سالم جلوگیری کرد. از سوی دیگر، افزایش دما که در کاربردهای هایپرترمی رخ می‌دهد، آستانه آشوب را کاهش می‌دهد و خطر آسیب حرارتی–مکانیکی را افزایش می‌دهد. بنابراین کنترل همزمان فرکانس و دما، کلید دستیابی به درمان های هدفمند با حداقل عوارض جانبی است.

مرجع‌ها

[1] White, F. M. *Fluid mechanics*, (1999).

[2] Wang, Chen-Hao, and Jeng-Rong Ho. "A lattice Boltzmann approach for the non-Newtonian effect in the blood flow." *Computers & Mathematics with Applications* **62**, no. 1 (2011): 75-86.

[3] Kancheva, Mihaela, Lauren Aronson, Tara Pattilachan, Francesco Sautto, Benjamin Daines, Donald Thommes, Angela Shar, and Mehdi Razavi. "Bubble-based drug delivery systems: Next-generation diagnosis to therapy." *Journal of Functional Biomaterials* **14**, no. 7 (2023): 373.

[4] Xu, Runze, Shiping Wang, Hemant J. Sagar, and Haikun Wang. "Bubble theory and its applications in underwater explosion, marine cavitation, and seismic exploration." *Journal of Marine Science and Application* **24**, no. 2 (2025): 255-284.

[5] Allen, John S., and Ronald A. Roy. "Dynamics of gas bubbles in viscoelastic fluids. II. Nonlinear viscoelasticity." *The Journal of the Acoustical Society of America* **108**, no. 4 (2000): 1640-1650.

[6] Williams, Garnett. *Chaos theory tamed*. CRC press, 1997.

[7] Hilborn, Robert C. *Chaos and nonlinear dynamics: an introduction for scientists and engineers*. Oxford university press, 2000.

[8] Behnia, S., F. Mobadersani, M. Yahyavi, and A. Rezavand. "Chaotic behavior of gas bubble in non-Newtonian fluid: a numerical study." *Nonlinear Dynamics* **74**, no. 3 (2013): 559-570.

اثر نیروی ناشی از تخلیه بر پویایی دایمر در یک پتانسیل واشبرد

پروینی، میلاد[۱]؛ نوری، سمیه[۱]؛ مرادیان، علی[۲]؛ سیدزاهدی، ئه‌سرین[*۱]

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

[۲] گروه فیزیک، دانشکده بیجار، دانشگاه کردستان، بیجار

چکیده

در این مقاله، اثر تخلیه[۱] بر پویایی، پخش و ساز و کارهای انتقال یک دایمر[۲] در حضور پتانسیل دوره‌ای واشبرد[۳] بررسی شده است. دایمر شامل دو مونومر[۴] است که با یک فنر به یکدیگر متصل شده‌اند و حرکت براونی آن‌ها در یک محیط وشکسان و تحت تأثیر نویز حرارتی شبیه‌سازی شده است. با استفاده از محاسبات عددی رفتار ضریب پخش دایمر با لحاظ کردن نیروی تخلیه مطالعه شده است. نتایج نشان می‌دهد که در اثر این نیرو رفتار غیرمتناسب[۵] پخش به رفتار متناسب[۶] تبدیل شده، هم چنین رفتار متناسب به صورت غیرمتناسب در آمده، قله‌های جدیدی در ضریب پخش ایجاد شده و تشدیدهای داخلی جدیدی ظاهر می شوند. این اثرات به شدت به پارامترهایی مانند ثابت جفت شدگی مونومرها در دایمر، چگالی ذرات تخلیه کننده[۷] و دامنه‌ی پتانسیل وابسته هستند. یافته‌های این پژوهش درک عمیقی از نقش نیروهایی با منشأ آنتروپیک در سیستم‌های کلوئیدی پیچیده ارائه می‌دهد.

واژه های کلیدی: *حرکت براونی، دایمر، نیروی تخلیه، پتانسیل دوره ای*

Effect of depletion on dimer dynamics in a washboard potential

Parvini, Milad[1]; Nouri, Somayeh[1]; Moradian, Ali[2]; Seyedzahedi, Asrin[*1]

[1] Department of Physics, University of Kurdistan, Sanandaj, Kurdistan, Iran
[2] Department of Physics,Campus of Bijar, University of Kurdistan, Bijar, Kurdistan, Iran

Abstract

This study investigates the effect of depletion force on the dynamics, diffusion, and transport mechanisms of a dimer in a periodic washboard potential. The dimer consists of two monomers coupled by a spring, and their Brownian motion in a viscous medium under the thermal noise is simulated. The diffusion coefficient of the dimer is analyzed considering the depletion force. The results show that the depletion force can convert incommensurate diffusion into commensurate diffusion and vice-versa that causes new peaks in the diffusion coefficient, and reveals internal resonances. These effects strongly depend on parameters such as the spring coupling [۸]constant, the density

[1] depletion
[2] dimer
[3] washboard potential
[4] monomer
[5] incommensurate
[6] commensurate
[7] depletant

[۸]

of depletant particles, and the potential amplitude. The findings provide deep insight into the role of entropic forces in complex colloidal systems.

***Keywords**: Brownian motion, dimer, depletion force, periodic potential*

PACS No. *05.40.Jc, 05.60.Cd, 82.70.Dd*

مقدمه

بررسی حرکت براونی ذرات کلوئیدی که تحت تأثیر نوسانات حرارتی محیط سیال قرار دارند، به عنوان یکی از پایه‌ای‌ترین مدل‌ها برای درک پدیده‌های انتقال در مقیاس‌های خرد شناخته می‌شود [۱،۲]. در این سیستم‌ها، پویایی ذرات توسط معادلات لانژون توصیف می‌گردد [۳]. با این حال، هنگامی که این ذرات در معرض نیروی خارجی پیچیده یا پتانسیل‌های فضایی متناوب قرار می‌گیرند، پویایی آن‌ها رفتار متفاوتی را به نمایش می‌گذارد [٤،٥]. در میان انواع محیط‌های ساختاریافته، پتانسیل‌های تناوبی یک‌بعدی تحت تاثیر یک نیروی خارجی ثابت که اصطلاحاً پتانسیل واشبرد نامیده می‌شوند، به عنوان مدلی استاندارد برای مطالعه سطوح بلوری، شبکه‌های نوری و موتورهای مولکولی مورد استفاده قرار می‌گیرند [٦،٧]. حرکت یک مونومر در چنین پتانسیلی دهه‌هاست که مورد مطالعه قرار گرفته است اما مطالعه پویایی یک دایمر متشکل از دو مونومر متصل به هم در این نوع پتانسیل به عنوان مدلی برای درک سیستم‌های پیچیده‌تر، توجه بیشتری را به خود جلب کرده است [۸،۹،۱۰]. در اینجا، درجات آزادی داخلی دایمر و نحوه توزیع فضایی دو ذره نسبت به کمینه‌ها و بیشینه‌های پتانسیل واشبرد، به متغیرهای کلیدی در تعیین تحرک و ضریب پخش مؤثر تبدیل می‌شوند [۱۱]. مطالعات موجود در این حوزه به طور مفصل به بررسی این جفت‌شدگی‌ها پرداخته‌اند، اما این بررسی‌ها عمدتاً محدود به شرایطی بوده‌اند که ذرات از طریق فنرهای هماهنگ ایده‌آل به یکدیگر متصل شده‌اند [۱۲] یا در بهترین حالت پتانسیل‌های لنارد–جونز را در نظر گرفته‌اند [۱۳]. این در حالی است که در واقعیت فیزیکی محیط‌های کلوئیدی و بیولوژیکی، پیوندها نه توسط فنرهای فیزیکی، بلکه توسط نیروهای آنتروپیکی نظیر نیروی تخلیه ناشی از حضور ذرات ریزتر در سیال پیرامون کنترل می‌شود که ماهیتی کاملاً غیرخطی، کوتاه‌برد و وابسته به حجم طردشده دارد [۱٤،۱٥،۱٦]. این مطالعه به بررسی اثر برهم‌کنش تخلیه بر پویایی، پخش و مکانیسم‌های انتقال یک دایمر در پتانسیل یک‌بعدی واشبرد می‌پردازد و تحلیل می‌کند که معادلات اصلاح‌شده چه تأثیری بر منحنی‌های تحرک‌پذیری دایمر دارند. با وجود پیشرفت‌ها، هنوز چارچوب منسجمی برای تلفیق نیروهای آنتروپیک (مانند نیروی تخلیه) با پویایی سامانه‌های کلوییدی پیچیده وجود ندارد و مدل‌های پیشین یا ساده‌انگارانه‌اند یا محدودیت محاسباتی دارند. این شکاف تحقیقاتی، انگیزه اصلی پژوهش حاضر برای بررسی حرکت براونی دایمرها در حضور برهم‌کنش تخلیه و پتانسیل واشبرد است.

مدل

برای دو مونومر که در مکان‌های x_1 و x_2 قرار گرفته باشند، برهم‌کنش بین ذره‌ای با معادله زیر توصیف می‌شود

$$U(x_1,x_2)=U_0(x_1)+U_0(x_2)+\frac{K}{2}(x_2-x_1+a_0)^2$$

که در آن K ضریب سختی و a_0 طول تعادلی فنر است و

$$U_0(x)=A\cos(kx)$$

ساده‌ترین فرم پتانسیل دوره‌ای زمینه‌ای با $k=2\pi/L$ است که در آن L دوره تناوب پتانسیل می‌باشد [۱۱].

معادلات حرکت لانژوَن بی‌بُعد برای دو ذره‌ی متصل از طریق یک فنر به صورت زیر نوشته می‌شوند.

$$\ddot{x}_1=-\gamma\dot{x}_1+\sin x_1+F+K(x_2-x_1-a_0)+F_{dep,1}+\xi_1(t)$$

$$\ddot{x}_2=-\gamma\dot{x}_2+\sin x_2+F+K(x_2-x_1-a_0)+F_{dep,2}+\xi_2(t)$$

که در آن γ ضریب اصطکاک مرتبط با وشکسانی محیط، F نیروی خارجی ثابت، $F_{dep,i}$ نیروی تخلیه با منشاء آنتروپیکی وارد بر ذره‌ی i با مقدار ρk_BT است که به صورت عمل و عکس‌العمل است و در سامانه‌های دوتایی متشکل از ذرات با اندازه‌های متفاوت دیده می‌شود؛ در این رابطه ρ چگالی ذرات تخلیه کننده، k_B ثابت بولتزمان و T دماست. $\sin x_1$ و $\sin x_2$ از مشتق پتانسیل سطح به دست آمده‌اند و $\xi_i(t), i=1,2$ نویز

سفید گاوسی با میانگین صفر است. تابع همبستگی نویز از رابطه‌ی زیر تبعیت می‌کند:

$$\langle \xi_i(t)\xi_j(t')\rangle = 2\gamma T\delta_{ij}\delta(t-t')$$

با تعریف مختصات مرکز جرم $X=(x_1+x_2)/2$ و مختصات نسبی $Y=x_2-x_1$، معادلات حرکت به صورت زیر بازنویسی می‌شوند:

$$\ddot{X} = -\gamma\dot{X} + \cos(Y/2)\sin X + F + \frac{Q(t)}{\sqrt{2}},$$

$$\ddot{Y} = -\gamma\dot{Y} + 2\cos X \sin(Y/2) - 2K(Y-a_0) - 2\rho k_B T + \sqrt{2}q(t).$$

دو نویز ناهمبسته $q(t)$ و $Q(t)$ به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$Q(t)=\frac{[\xi_1(t)+\xi_2(t)]}{\sqrt{2}}, q(t)=\frac{[\xi_1(t)-\xi_2(t)]}{\sqrt{2}}.$$

با میانگین صفر و همبستگی تابع دلتا:

$$\langle Q(t)Q(t')\rangle = \langle q(t)q(t')\rangle = 2\gamma T\delta(t-t').$$

جمله نیروی داخلی بین دو مونومر نیز می‌توان به صورت زیر بازنویسی شود:

$$-2K(Y-a_0) - 2\rho k_B T = -2K\left[(Y-a_0) + \frac{\rho k_B T}{K}\right].$$

استفاده از دستگاه مختصات مرکز جرم و فاصله نسبی سبب می‌شود سهم نیروهای خارجی و داخلی در معادلات حرکت تفکیک شود. برای همین نیروی تخلیه فقط در مختصه فاصله نسبی، سهمی غیرصفر دارد.

با تعریف یک طول تعادلی موثر که ناشی از نیروی تخلیه است

$$a_{\text{eff}} = a_0 - \frac{\rho k_B T}{K},$$

معادله اصلاح شده زیر را برای مختصات نسبی بدست می‌آوریم:

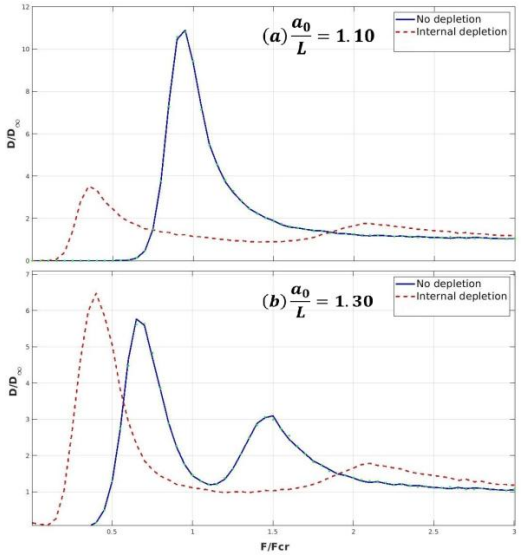
$$\ddot{Y} = -\gamma\dot{Y} + 2\cos X \sin(Y/2) - 2K(Y-a_{\text{eff}}) + \sqrt{2}q(t).$$

نتایج و بحث

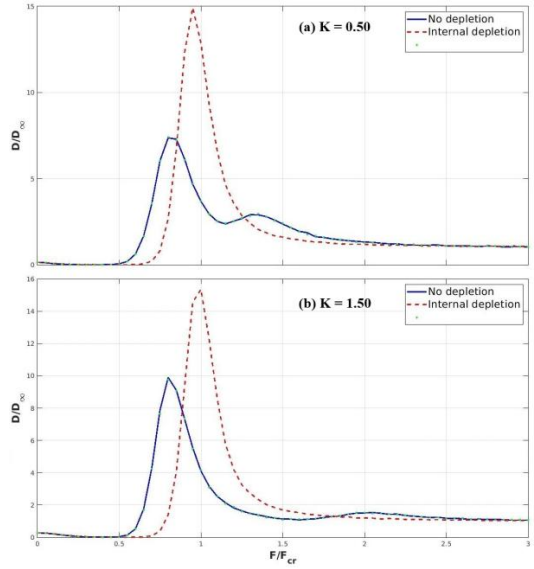
در این پژوهش، به منظور بررسی اثرات برهم‌کنش تخلیه بر پویایی و پخش دایمرها در حضور پتانسیل واشبرد، شبیه‌سازی‌های عددی انجام شده است و با استفاده از جابجایی مربعی میانگین مرکز جرم، ضریب پخش $D=\lim_{t\to\infty}<\delta X^2>/2t$ محاسبه می‌شود. برای $F\to\infty$ ضریب پخش آزاد دایمر D_∞ تعریف می‌شود. با استفاده از نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها، نمودار ضریب پخش دایمر برحسب نیروی خارجی رسم شده است و F_{cr} نیروی خارجی می‌باشد که در آن ضریب پخش دایمر بیشینه می‌شود. مطابق شکل ۱-a برای مقدار ضریب سختی میانی $K=0.5$ و $a_0/L=1.10$ به نظر می‌رسد که در اثر نیروی تخلیه نمودار پخش دایمر بر حسب نیرو از حالت یک قله به دو قله تغییر یابد، به عبارتی رفتار متناسب دایمر [۱۱] به رفتار غیرمتناسب تبدیل شده است. در واقع در اثر نیروی تخلیه طول دایمر کاهش می‌یابد و سبب بروز تشدیدهای داخلی می‌شود که ظهور قله‌ی دوم گواه این واقعیت است. همچنین به نظر می‌رسد در اثر نیروی تخلیه رفتار دایمر غیرمتناسب با کاهش طول دایمر به رفتار متناسب تبدیل شود چنانکه در شکل ۱-b برای $a_0/L=1.30$ دیده می‌شود. برای طول‌های بزرگ‌تر دایمر در ضرایب سختی میانی طول دایمر به علت اثرات نیروی تخلیه بر رفتار پخش به سمت حالت متناسب نزدیک می‌شود که متناظر با تغییر نمودار پخش از حالت دوقله‌ای به حالت یک قله‌ای می‌باشد. علاوه بر این در طول‌های بزرگتر حتی برای ضرایب سختی بالاتر هم نیروی تخلیه باعث تغییراتی در قله‌ی پخش برای نیروهای خارجی کوچکتر می‌شود و قله‌ی پخش نیز به شدت افزایش می‌یابد، همچنان که در شکل ۲ دیده می‌شود.

مقایسه تاثیر ضریب فنر و نیروی تخلیه

بررسی‌های صورت گرفته نشان می‌دهد در سختی‌های میانی $0.2<K<1$ نیروی تخلیه سبب می‌شود رفتار پخش سامانه از حالت متناسب به نامتناسب و برعکس تغییر یابد. جالب توجه است که در طول‌های بزرگتر دایمر نیروی تخلیه در ضرایب سختی بزرگتر هم باعث تغییر پخش می‌شود. در مجموع در طول‌های کوچکتر دایمر اثر نیروی تخلیه در مقابل سختی‌های بالا ضعیف‌تر عمل می‌کند که در رابطه ی $a_{\text{eff}}=a_0-\rho k_B T/K$ هم دیده می‌شود.



شکل۱ : ضریب پخش دایمر بر حسب نیروی خارجی در دو حالت بدون درنظر گرفتن نیروی تخلیه و در حضور نیروی تخلیه در دمای $T = 0.1$ برای $K = 0.5$ ، a) با طول $a_0 / L = 1.10$ و b) با طول $a_0 / L = 1.30$.



شکل۲ : ضریب پخش دایمر بر حسب نیروی خارجی در حالت با نیروی تخلیه و بدون نیروی تخلیه با $a_0 / L = 1.80$ در دمای یکسان $T = 0.1$ ، a) برای $K = 0.5$ و b) برای $K = 1.5$.

نتیجه گیری

در این مطالعه، اثر نیروی برهم‌کنش تخلیه بر پویایی و ضریب پخش یک دایمر در حضور پتانسیل دوره‌ای واشبرد مورد بررسی قرار گرفت. نتایج شبیه‌سازی‌های عددی نشان می‌دهد که نیروی تخلیه برای ضرایب سختی میانی و در طول‌های بزرگتر دایمر رفتار پخش را به‌طور چشم‌گیری تغییر دهد. در جفت‌شدگی‌های ضعیف، که ذرات دایمر مانند مونومر رفتار می‌کنند در اثر نیروی تخلیه، قله‌ی نمودار پخش کاهش می‌یابد که بیانگر مقید شدن مونومرها می‌باشد. این اثر با افزایش طول دایمر تقویت خواهد شد. این یافته‌ها تأکید می‌کنند که در نظر گرفتن نیروهایی با منشاء آنتروپیک مانند نیروی تخلیه، درک بهتری از پویایی ذرات در سیستم‌های کلوییدی پیچیده می‌دهد. بنابراین مدل ارائه شده در این پژوهش، می‌تواند زمینه ساز مطالعات بیشتر در پخش ذرات کلوییدی بزرگ در حضور ذرات کوچک و علاوه بر آن بر روی سطوح باشد.

مرجع‌ها

[1] T. Li, “Measurement of the instantaneous velocity of a Brownian particle,” Science, vol. 328, no. 5986, pp. 1673–1675, 2010.
[2] G. Volpe, S. Gigan, and G. Volpe, “Simulation of the active Brownian motion of a microswimmer,” American Journal of Physics, vol. 82, no. 7, pp. 659–664, 2014.
[3] D. S. Lemons, “Paul Langevin’s 1908 paper ‘On the Theory of Brownian Motion’,” American Journal of Physics, vol. 65, no. 11, pp. 1079–1081, 1997.
[4] R. Castañeda-Priego, “Colloidal transport in periodic potentials: The role of modulated-crowding,” Soft Matter, vol. 21, no. 19, 2025.
[5] H. Risken, The Fokker–Planck Equation: Methods of Solution and Applications, 2nd ed. Berlin, Germany: Springer, 1996.
[6] K. Iida, T. Akimoto, and A. Dechant, “Universality of giant diffusion in tilted periodic potentials,” Physical Review E, vol. 111, no. 2, Art. no. 024113, 2025.
[7] P. Reimann, “Brownian motors: Noisy transport far from equilibrium,” Physics Reports, vol. 361, no. 2–4, pp. 57–265, 2002.
[8] J. Spiechowicz and J. Łuczka, “Diffusion in a biased washboard potential revisited,” Physical Review E, vol. 101, no. 3, Art. no. 032123, 2020.
[9] Reimann, P., Van den Broeck, C., Linke, H., Hänggi, P., Rubi, J. M., & Pérez-Madrid, A. (2001). Giant acceleration of free diffusion by use of tilted periodic potentials. Physical review letters, 87(1), 010602..
[10] O. Heilmann, “Theory of monomer-dimer systems,” Communications in Mathematical Physics, vol. 25, no. 3, pp. 199–232, 1972.
[11] E. Heinsalu, M. Patriarca, and F. Marchesoni, “Dimer diffusion in a washboard potential,” Physical Review E, vol. 77, no. 2, Art. no. 021129, 2008.
[12] A. F. Voter, “Diffusion of adatoms on surfaces,” Physical Review B, vol. 34, p. 6819, 1986;
[13] R. Wang and K. A. Fichthorn, “Diffusion mechanisms of dimers adsorbed on periodic substrates,” Physical Review B, vol. 48, no. 24, pp. 18288–18291, 1993.
[14] S. Asakura and F. Oosawa, “On interaction between two bodies immersed in a solution of macromolecules,” The Journal of Chemical Physics, vol. 22, no. 7, pp. 1255–1256, 1954.
[15] H. Zhang, D. Kong, W. Zhang, and H. Liu, “Depletion attraction in colloidal and bacterial systems,” Frontiers in Materials, vol. 10, Art. no. 1206819, 2023.
[16] Z. Zarei, I. Yadav, and P. S. Doyle, “Surface-mediated self-assembly of kinetoplast DNA: Depletion-driven dimer formation and quasi-2D dynamics,” Langmuir, vol. 41, pp. 31422–31432, 2025.

تحلیل توزیع اطلاعات در آرایه‌های حسگر فوتوآکوستیک با استفاده از نقشه آنتروپی جهت شناسایی المان‌های آشکارسازی بهینه

خویش‌خواه ، بهاره[1] ؛ خامسی‌نائینی، مرتضی‌علی[2]

[1] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی‌شریف ، میدان آزادی ، تهران

[2] دانشکده فیزیک دانشگاه شهیدبهشتی ، بلوار دانشجو ، تهران

چکیده

توزیع اطلاعات آکوستیکی در آرایه حسگر فوتوآکوستیک به دلیل ماهیت جهت‌دار انتشار امواج و آرایش هندسی حسگرها ناهمگن است. در این پژوهش، یک چارچوب مبتنی بر فیزیک آماری برای کمی‌سازی محتوای اطلاعاتی هر المان آشکارساز ارائه شده است. سیگنال‌های فوتوآکوستیک در شرایط مختلف شبیه‌سازی شده و برای هر کانال، تابع چگالی احتمال با استفاده از تخمین‌گر کرنل(KDE) برآورد می‌شود. سپس آنتروپی شانون به عنوان معیار تنوع اطلاعاتی هر حسگر محاسبه می‌گردد. نتایج حاصل به صورت یک نقشه آنتروپی، توزیع اطلاعات در آرایه را نمایش داده و امکان شناسایی حسگرهای دارای بیشترین محتوای اطلاعاتی را فراهم می‌کند. تحلیل‌ها نشان می‌دهد که حسگرهای هم‌راستا با مسیرهای غالب انتشار موج، آنتروپی بالاتری دارند که بیانگر دریافت اطلاعات بیشتر توسط این المان‌ها است. روش پیشنهادی یک چارچوب فیزیکی و قابل تفسیر برای ارزیابی عملکرد آرایه ارائه داده و می‌تواند در طراحی بهینه حسگرها و کاهش تعداد المان‌ها در سیستم‌های فوتوآکوستیک مورد استفاده قرار گیرد.

واژه های کلیدی: *تصویربرداری فوتوآکوستیک، آرایه حسگر، آنتروپی شانون، تخمین چگالی کرنل (KDE)، فیزیک آماری، توزیع اطلاعات، بهینه‌سازی آرایه حسگر، شبیه‌سازی عددی k-Wave*

Entropy Mapping of Photoacoustic Sensor Arrays for Identifying High-Information Detection Elements

Khishkhah, Bahareh[1]; KhamesiNaeini, MortezaAli[2]

[1] *Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran*
[2] *Department of Physics, Shahid Beheshti University, Tehran*

Abstract

The distribution of acoustic information in a photoacoustic sensor array is inherently non-uniform due to the directional nature of wave propagation and the geometric arrangement of the detectors. In this study, a statistical-physics-based framework is proposed to quantify the information content of individual sensing elements. Photoacoustic signals are simulated under various conditions, and for each channel, the probability density function (PDF) is estimated using kernel density estimation (KDE). Shannon entropy is then computed as a measure of the information diversity of each sensor. The resulting entropy map provides a spatial representation of information distribution across the array and enables the identification of high-information detector elements. The results demonstrate that sensors aligned with dominant wave propagation paths exhibit higher entropy values, indicating richer information content. The proposed method offers a physically interpretable framework for evaluating sensor array performance and can be applied to optimal sensor design and array thinning in photoacoustic imaging systems.

***Keywords**: Photoacoustic imaging, sensor array, Shannon entropy, kernel density estimation (KDE), statistical physics, information distribution, sensor optimization, k-Wave simulation*

PACS No:87 , 89

مقدمه

تصویربرداری فوتوآکوستیک یک روش ترکیبی است که کنتراست نوری بالا را با عمق نفوذ و تفکیک‌پذیری بالای اولتراسوند ترکیب می‌کند[11 و 1]. در این روش، پالس لیزری باعث ایجاد انبساط ترموالاستیک در جاذب‌های نوری شده و امواج آکوستیکی تولید می‌کند که توسط آرایه‌ای از حسگرها ثبت می‌شوند.

کیفیت تصویر بازسازی‌شده به آرایش و ویژگی‌های حسگرها وابسته است و در عمل همه المان‌های آرایه سهم یکسانی در دریافت اطلاعات ندارند. به دلیل جهت‌دار بودن انتشار موج و اثرات محیطی مانند تضعیف و هندسه انتشار، میزان اطلاعات ثبت‌شده توسط حسگرها ناهمگن است[8 و 13]. این موضوع می‌تواند باعث افزایش بار محاسباتی و ایجاد نویز در بازسازی تصویر شود.

روش‌های کلاسیک بهینه‌سازی حسگر معمولاً بر معیارهای هندسی یا انرژی تکیه دارند و قادر به توصیف کامل رفتار تصادفی سیگنال‌ها نیستند[3]. در این مطالعه، یک چارچوب مبتنی بر فیزیک آماری برای ارزیابی محتوای اطلاعاتی هر حسگر ارائه شده است. در این روش، سیگنال‌های زمانی هر کانال به‌عنوان یک فرآیند تصادفی در نظر گرفته شده و با استفاده KDE تابع چگالی احتمال آن‌ها تخمین زده می‌شود[6]. سپس آنتروپی شانون به عنوان معیار میزان اطلاعات هر حسگر محاسبه می‌گردد[5].

در ادامه، این مقادیر برای تحلیل توزیع اطلاعات در آرایه و شناسایی حسگرهای دارای بیشترین سهم اطلاعاتی استفاده می‌شوند. ساختار مقاله نیز شامل مدل فیزیکی انتشار موج، روش آماری، شبیه‌سازی عددی، نتایج و جمع‌بندی نهایی است.

مدل فیزیکی انتشار امواج فوتوآکوستیک

تولید امواج فوتوآکوستیک ناشی از تبدیل انرژی نوری به فشار آکوستیکی از طریق اثر ترموالاستیک است[10]. تحت شرایط حبس حرارتی و تنشی، افزایش فشار اولیه در نقطه (r) به صورت زیر بیان می‌شود:

$$p_0(r) = \Gamma(r) H(r) = \Gamma(r) \mu_a(r) F(r) \quad (1)$$

پس از تولید فشار اولیه، انتشار موج در یک محیط همگن از معادله موج پیروی می‌کند[2]:

$$\nabla^2 p(r,t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 p(r,t)}{\partial t^2} = 0 \quad (2)$$

در محیط‌های واقعی زیستی، برای لحاظ کردن تضعیف وابسته به فرکانس، مدل به شکل معادله موج اتلافی توسعه می‌یابد[7]:

$$\nabla^2 p - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - \alpha_0 \frac{\partial}{\partial t} (-\nabla^2)^{\frac{y}{2}-1} p - \eta_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} (-\nabla^2)^{\frac{y-1}{2}} p = 0 \quad (3)$$

در نهایت، سیگنال ثبت‌شده توسط هر حسگر به صورت $s_i(t)$ بوده و به دلیل گسترش هندسی، فاصله و جهت‌مندی حسگرها، بین کانال‌ها تفاوت ایجاد می‌شود:

$$s_i(t) = \mathrm{D}_i(\theta) \frac{1}{r_i} p(r_i,t) \quad (4)$$

تحلیل اطلاعاتی سیگنال‌های حسگر

برای هر حسگر، سیگنال زمانی به عنوان یک متغیر تصادفی (X_i) مدل می‌شود. تابع چگالی احتمال آن بدون فرض پارامتری با KDE تخمین زده می‌شود:

$$\hat{p}_i(x) = \frac{1}{Nh} \sum_{j=1}^{N} K\left(\frac{x - x_j}{h} \right) \quad (5)$$

با هسته گوسی:

$$K(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{u^2}{2} \right) \quad (6)$$

پهنای باند به صورت قاعده سیلورمن تعیین می‌شود[6]:

$$h = \left(\frac{4\hat{\sigma}^5}{3N} \right)^{\frac{1}{5}} \approx 1.06 \hat{\sigma} N^{-1/5} \quad (7)$$

سپس آنتروپی شانون برای هر حسگر محاسبه می‌شود[5]:

$$H_i = -\int_{-\infty}^{+\infty} \hat{p}_i(x) \log_2 \hat{p}_i(x) dx \quad (8)$$

نتایج نشان می‌دهد که حسگرهایی که در راستای مسیرهای غالب انتشار موج قرار دارند، به دلیل تنوع بیشتر سیگنال، دارای PDF

گسترده‌تر و در نتیجه آنتروپی بالاتری هستند، در حالی که حسگرهای کم‌زاویه یا تحت تأثیر نویز، آنتروپی پایین‌تری نشان می‌دهند. این معیار امکان رتبه‌بندی حسگرها بر اساس میزان اطلاعات دریافتی را فراهم می‌کند.

شبیه‌سازی عددی

به منظور ارزیابی چارچوب پیشنهادی، شبیه‌سازی‌های عددی دوبعدی در محیط متلب و با استفاده از جعبه‌ابزار k-Wave [8] انجام شد. این ابزار با بهره‌گیری از روش شبه‌طیفی در فضای k امکان حل عددی معادلات انتشار موج آکوستیکی را با دقت بالا فراهم می‌کند.

دامنه محاسباتی به صورت یک شبکه دوبعدی با ابعاد 900*900 گرید تعریف شد که ناحیه‌ای مناسب برای بازنمایی محیط تصویربرداری فوتوآکوستیک را پوشش می‌دهد. در مرکز این دامنه، یک منبع موضعی به‌عنوان تولیدکننده امواج فوتوآکوستیک در نظر گرفته شد تا شرایط مشابه با یک هدف زیستی ایجاد گردد.

خواص آکوستیکی محیط شامل سرعت صوت بافت نرم و چگالی ثابت در نظر گرفته شد. همچنین برای مدل‌سازی واقع‌گرایانه‌تر، تضعیف وابسته به فرکانس در انتشار موج لحاظ گردید تا اثرات کاهش دامنه و تغییر شکل موج به‌درستی شبیه‌سازی شود.

برای آشکارسازی سیگنال‌ها، یک آرایه دایره‌ای شامل 128 المان حسگر به‌صورت یکنواخت پیرامون ناحیه مورد مطالعه قرار گرفت. هر حسگر سیگنال فشار را به صورت تابع زمان ثبت می‌کند و به دلیل تفاوت زاویه نسبت به منبع و مسیر انتشار موج، سیگنال‌های دریافتی دارای تغییرات قابل توجهی هستند.

پس از استخراج سیگنال‌های زمانی از تمام کانال‌ها، برای هر حسگر تابع چگالی احتمال با استفاده از روش تخمین‌گر کرنل (KDE) محاسبه شد. سپس آنتروپی شانون به عنوان معیار کمی‌سازی میزان تنوع اطلاعاتی هر کانال به دست آمد.

در نهایت، توزیع آنتروپی در آرایه حسگرها بر اساس موقعیت زاویه‌ای آن‌ها تحلیل شد تا ارتباط بین جهت انتشار موج و میزان اطلاعات دریافتی بررسی شود. این نتایج مبنای تولید نقشه اطلاعاتی و شناسایی حسگرهای دارای بیشترین محتوای اطلاعاتی در بخش نتایج قرار می‌گیرد.

جدول 1: مقایسه مقدار میانگین انتروپی در چهار ربع آرایه‌های حسگر

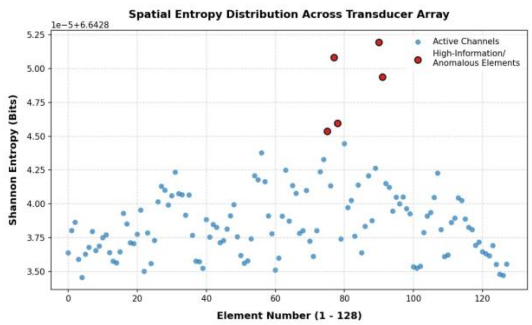
میانگین انتروپی 32 المنت اول	6.642837 بیت
میانگین انتروپی 32 المنت دوم	6.642838 بیت
میانگین انتروپی 32 المنت سوم	6.642841 بیت
میانگین انتروپی 32 المنت چهارم	6.642837 بیت

نتیجه گیری

توزیع مکانی آنتروپی شانون در میان 128 المان فعال آرایه نشان می‌دهد که به طور کلی یک سطح نسبتاً یکنواخت از اطلاعات وجود دارد، اما تغییرات مکانی ظریف و معناداری نیز دیده می‌شود که به جهت‌گیری حسگرها و مسیر انتشار موج وابسته است. اگرچه مقادیر میانگین آنتروپی در چهار بخش آرایه بسیار نزدیک به هم هستند (حدود 6.6428 بیت)، اما بخش سوم (کانال‌های 65 تا 96) به طور پایدار مقدار کمی آنتروپی بالاتر (6.642841) نشان می‌دهد که بیانگر هم‌راستایی بهتر این ناحیه با مسیر غالب انتشار موج است.

این نتیجه نشان می‌دهد که حتی اختلاف‌های کوچک در زاویه قرارگیری حسگرها نسبت به جبهه موج می‌تواند به تفاوت‌های قابل اندازه‌گیری در محتوای اطلاعاتی منجر شود، حتی زمانی که آمار کلی سیگنال‌ها تقریباً مشابه است.

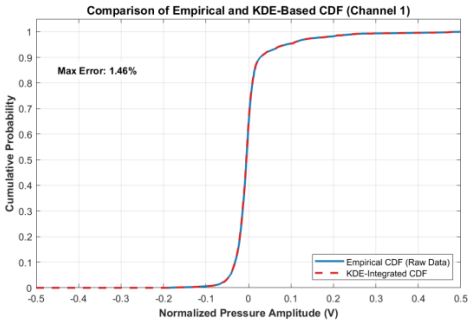
در تحلیل دقیق‌تر کانال‌ها، چند نقطه به‌صورت مشخص دارای بیشترین مقدار آنتروپی هستند. به‌ویژه کانال‌های 75، 77، 78، 90 و 91 بیشترین مقدار آنتروپی را در کل آرایه نشان می‌دهند. این المان‌ها در ناحیه‌ای قرار دارند که جبهه موج با همدوسی زاویه‌ای بالاتر و تطابق بهتر با الگوی جهت‌مندی حسگرها به آن‌ها برخورد می‌کند. در نتیجه، سیگنال‌های ثبت‌شده در این کانال‌ها دارای نوسانات زمانی پیچیده‌تر و توزیع آماری گسترده‌تری هستند که منجر به آنتروپی بالاتر می‌شود.



شکل1 : نمایش مقدار آنتروپی شانون بر حسب شماره‌ی حسگرها و قرارگیری مکانی

نقشه آنتروپی مکانی (شکل 1) نیز این رفتار را تأیید می‌کند و خوشه‌هایی از مقادیر بالای آنتروپی را در بخش سوم آرایه نشان می‌دهد، در حالی که سایر نواحی توزیع یکنواخت‌تر یا مقادیر پایین‌تری دارند.

به منظور ارزیابی دقت روشKDE ، تابع توزیع تجمعی تجربی (eCDF)داده‌های خام با CDF حاصل از KDE برای یک حسگر نمونه مقایسه شد. بیشترین اختلاف بین دو توزیع حدود 1.46٪ به دست آمد که دقت مناسب روش پیشنهادی را تأیید می‌کند (شکل 2).



شکل2 : نمودار مقایسه‌ای تابع توزیع تجمعی عددی (eCDF) داده‌های خام و CDFحاصل از انتگرال‌گیری محاسباتی متد KDE برای حسگر نمونه

از دیدگاه فیزیکی، این رفتار ناشی از ترکیب اثرات جهت‌مندی موج، پاسخ محدود روزنه حسگر و تضعیف وابسته به فرکانس است. حسگرهایی که در راستای انتشار غالب انبساط ترموالاستیک قرار دارند، طیف فرکانسی غنی‌تر و تغییرات زمانی بیشتری دریافت می‌کنند، در حالی که حسگرهای با زاویه نامطلوب سیگنال‌های فیلترشده و تضعیف‌شده دریافت کرده و در نتیجه تنوع آماری کمتری دارند.

این نتایج نشان می‌دهد که حتی در یک آرایه دایره‌ای یکنواخت، توزیع اطلاعات فضایی یکنواخت نیست. بنابراین، تحلیل مبتنی بر آنتروپی می‌تواند به عنوان یک معیار کمی برای شناسایی حسگرهای پراطلاعات استفاده شود و مبنایی برای طراحی آرایه‌های تنک و کاهش بار محاسباتی در تصویربرداری فوتوآکوستیک فراهم کند.

این مطالعه بر روی آرایه دایره‌ای انجام شده است. بررسی عملکرد روش پیشنهادی در سایر آرایش‌های حسگر مانند آرایه‌های خطی و نیم‌دایره‌ای می‌تواند در مطالعات آینده انجام شود.

مرجع‌ها

[1]. Beard, P. (2011). Biomedical photoacoustic imaging. Interface Focus, 1(4), 602–631. https://doi.org/10.1098/rsfs.2011.0028
[2]. Cox, B. T., and B. E. Treeby. "Effect of sensor directionality on photoacoustic imaging: a study using the k-wave toolbox." Photons Plus Ultrasound: Imaging and Sensing 2010. Vol. 7564. SPIE, 2010. https://doi.org/10.1109/TMI.2006.889586
[3]. Haupt, R. L. (2020). Timed arrays: Wideband and time-varying antenna arrays. John Wiley & Sons.
[4]. Kruizinga, P., van der Heijden, R. A., & Springeling, G. (2024). Transducer array optimization strategies for high-frame-rate optoacoustic tomography. Photoacoustics, 35, 100582. https://doi.org/10.1016/j.pacs.2023.100582
[5]. Shannon, C. E. (1948). A mathematical theory of communication. The Bell System Technical Journal, 27(3), 379–423. https://doi.org/10.1002/j.1538-7305.1948.tb01338.x
[6]. Silverman, B. W. (2018). Density estimation for statistics and data analysis. CRC Press.
[7]. Treeby, B. E., & Cox, B. T. (2010). Modeling power law acoustic absorption for a biomedical ultrasound tissue mimic. The Journal of the Acoustical Society of America, 127(5), 2741–2748. https://doi.org/10.1121/1.3361254
[8]. Treeby, B. E., Jaros, J., Rendell, A. P., & Cox, B. T. (2012). k-Wave: MATLAB toolbox for the simulation and reconstruction of photoacoustic wave fields. Journal of Biomedical Optics, 17(1), 010504. https://doi.org/10.1117/1.JBO.17.1.010504
[9]. Treeby, B. E., Martin, E., & Cox, B. T. (2025). Sound field directivity and spatial information content in photoacoustic computed tomography. IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control, 72(2), 145–156.
[10]. Wang, L. V. (2009). Photoacoustic imaging: Principles and applications. CRC Press.
[11]. Wang, L. V., & Hu, S. (2012). Photoacoustic tomography: In vivo imaging from organelles to organs. Science, 335(6075), 1458–1462. https://doi.org/10.1126/science.1216210
[12]. Wang, L. V., & Yao, J. (2016). A practical guide to photoacoustic tomography in the life sciences. Nature Methods, 13(8), 627–638. https://doi.org/10.1038/nmeth.3925
[13]. Xu, M., & Wang, L. V. (2005). Universal back-projection algorithm for photoacoustic computed tomography. Physical Review E, 71(1), 016706. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.71.016706

مدل‌سازی تصادفی توده‌عصبی ریتم آلفای قشر مغز: از نوسان‌گر میرا تا برآورد بیزی پارامترها

کیائی جمالی، مهتاب[۱]؛ هاشمی، میثم[۲]؛ ولیزاده، علیرضا[۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه تحصیلات تکمیلی زنجان، بلوار پروفسور ثبوتی، زنجان

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه ایکس-مارسی ، فرانسه

چکیده

هدف ما استنتاج پارامترهای ناشناخته مدل‌هایی است که دینامیک مغز را در مقیاس بزرگ با استفاده از رویکرد استنتاج مبتنی بر شبیه‌سازی تعیین می‌کنند. در این رویکرد به‌جای سری زمانی خام، از چگالی طیف توانی استفاده می شود. ابتدا این روش را بر روی مدل نوسانگر هارمونیک میرا بررسی کردیم. با به‌کارگیری الگوریتم SNPE یک شبکه عصبی عمیق، نگاشت میان پارامترها و ویژگی‌های طیفی را می‌آموزد و توزیع پسین چندبعدی پارامترها را برمی‌گرداند. در نهایت، این روش را برای استنتاج پارامترهای مدل توده عصبی رابینسون به کار برده‌ایم؛ رویکردی که می‌تواند برای بررسی تغییرات پارامترهای مدل از حالت طبیعی مغز به حالت‌هایی مانند بیهوشی یا اختلالات آسیب‌شناختی نیز مورد استفاده قرار گیرد.

واژه های کلیدی: *توده عصبی، مدل رابینسون، سیستم تالامو-کورتیکال، نوسانگر هارمونیک میرا، استنتاج بیزی*

Stochastic neural mass modeling of cortical alpha rhythms: from damped oscillators to Bayesian parameter inference

Kiaeijamali, Mahtab[1]; Hashemi, Meysam[2]; Valizadeh, Alireza[1]

[1] *Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan*
[2] *Department of Physics, Aix-Marseille University, France*

Abstract

Our goal is to infer the unknown parameters of models that determine brain dynamics on a large scale using a simulation-based inference approach. In this approach, power spectral density is used instead of raw time series. We first investigated this method on a damped harmonic oscillator model. Using the SNPE algorithm, a deep neural network learns the mapping between parameters and spectral features and returns the multidimensional posterior distribution of the parameters. Finally, we have applied this method to infer the parameters of the Robinson neural mass model; an approach that can also be used to investigate the changes in model parameters from the normal brain state to states such as anesthesia or pathological disorders.

***Keywords**: Neural mass, Robinson model, Thalamo-cortical system, Damped harmonic oscillator, Bayesian inference*

مقدمه

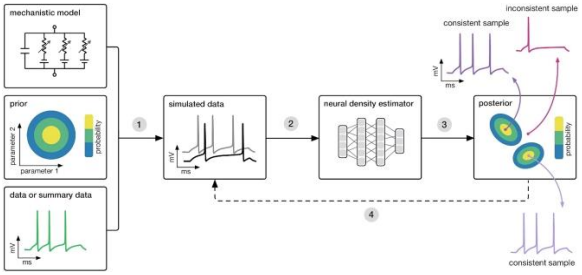
فعالیت الکتریکی مغز در مقیاس ماکروسکوپی، مانند سیگنال‌های الکتروانسفالوگرام، شامل نوساناتی در باندهای فرکانسی مختلف و به‌ویژه باند آلفاست که در پردازش حسی و تنظیم حالت‌های هوشیاری نقش مهمی ایفا می‌کند. برای توصیف این نوسانات از مدل‌های توده عصبی استفاده می‌شود که میانگین فعالیت جمعیت‌های نورونی را مدل کرده و رفتار ماکروسکوپی را به سازوکارهای میکروسکوپی شبکه‌های عصبی پیوند می‌دهند. با این حال، به‌دلیل تعداد زیاد پارامترها، غیرخطی بودن دینامیک و نویز قابل‌توجه در داده‌ها، برآورد مستقیم این پارامترها از روی ثبت‌های الکتروفیزیولوژی چالش‌برانگیز است. در این پژوهش از استنتاج

مبتنی بر شبیه‌سازی بهره می‌گیریم تا پارامترهای مدل‌های جمعیت نورونی را به‌گونه‌ای تخمین بزنیم که با داده‌های تجربی سازگار باشند.

رویکرد استنتاج بیزی

در روش بیزی، به‌جای برآورد یک مقدار منفرد برای هر پارامتر، توزیع احتمال آن را به‌دست می‌آوریم تا مشخص شود کدام نواحی از فضای پارامترها بیشترین سازگاری را با داده‌های مغزی دارند.

همانطور که در شکل (۱) نشان داده شده است، گنچالوز و همکاران [۱] الگوریتم SNPE را معرفی کرده‌اند که با استفاده از یک شبکه عصبی عمیق، ابتدا روی داده‌های شبیه‌سازی‌شده یاد می‌گیرد کدام پارامترهای مدل با داده سازگارند و سپس از همین شبکه برای داده‌های واقعی استفاده می‌کند تا پارامترهای سازگار با مشاهدات را به‌دست آورد.

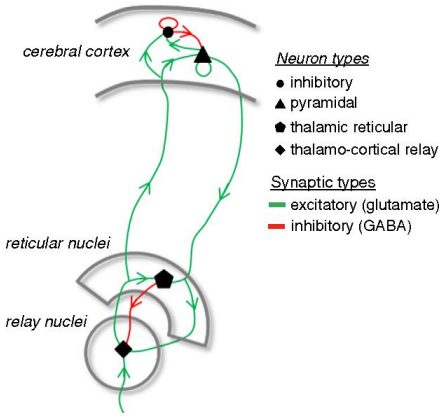


شکل ۱: روند الگوریتم SNPE. ۱) ابتدا از توزیع پیشین پارامترها و مدل مکانیکی، داده‌های شبیه‌سازی‌شده تولید می‌شود. ۲) سپس یک تخمین‌گر چگالی عصبی روی این داده‌ها آموزش می‌بیند تا رابطه‌ی بین داده و پارامترها را یاد بگیرد ۳) در نهایت، با وارد کردن داده‌ی واقعی، توزیع پسین پارامترها به دست می‌آید و نواحی سازگار با داده مشخص می‌شوند. ٤) از توزیع پسینِ به‌دست‌آمده برای نمونه‌گیری دوباره استفاده می‌شود تا شبیه‌سازی‌ها روی نواحی سازگار با داده متمرکز شوند.

مدل رابینسون

در این بخش، مدل رابینسون را برای تولید ریتم‌های EEG در سیستم تالاموکورتیکال مغز مورد بررسی قرار می‌دهیم [۲] [۳].

مدل تالاموکورتیکال رابینسون شامل چهار نوع جمعیت نورونی است: نورون‌های هرمی (e) و مهاری (i) در قشر مغز، نورون‌های مشبک تالاموس (r) و نورون‌های رله تالاموکورتیکال (s). این نورون‌ها از طریق اتصالات سیناپسی تحریکی(AMPA/NMDA) و مهاری (GABA) به هم متصل شده‌اند. ساختار سیناپسی این جمعیت‌های نورونی در شکل (۲) نشان داده شده‌است.



شکل ۲: ساختار سیناپسی مدل تالاموکورتیکال [٤].

میانگین فعالیت هر جمعیت عصبی با دو متغیر دینامیکی میانگین پتانسیل غشا و میانگین نرخ شلیک توصیف می‌شود. برهمکنش بین این جمعیت ها توسط چهار معادله دیفرانسیل غیر خطی جفت شده همراه با نویز است که دینامیک سیستم را نشان می دهند. مدل رابینسون ویژگی‌های طیفی EEG را از حالت بیداری تا مراحل مختلف خواب محاسبه می‌کند.

میانگین پتانسیل غشای هر جمعیت از معادلات زیر محاسبه می‌شوند:

$$V_e(t) = h_{ee} \otimes \phi_e(t) + h_{es} \otimes S_s\left(V_s(t-\tau/2)\right) + h_{ei} \otimes S_i\left(V_i(t)\right)$$

$$V_i(t) = h_{ie} \otimes \phi_e(t) + h_{is} \otimes S_s\left(V_s(t-\tau/2)\right) + h_{ii} \otimes S_i\left(V_i(t)\right)$$

$$V_s(t) = h_{sn} \otimes \phi_n(t) + h_{se} \otimes \phi_e(t-\tau/2) + h_{sr} \otimes S_r\left(V_r(t)\right)$$

$$V_r(t) = h_{rs} \otimes S_s\left(V_s(t)\right) + h_{re} \otimes \phi_e(t-\tau/2)$$

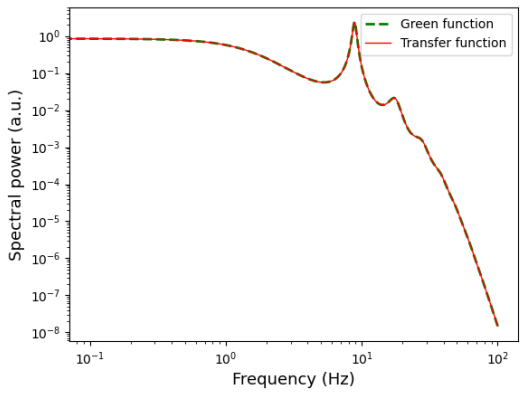
در این روابط t زمان، $\otimes$ عملگر کانولوشن، τ زمان تأخیر قشر–تالاموس، h پاسخ سیناپسی، S تابع فعال سازی، ϕ_e نرخ شلیک ورودی نورون های هرمی، ϕ_n نرخ شلیک ورودی غیرویژه را نشان می دهد.

نتایج

اکنون روش استنتاج بیزی را بر روی مدل تالاموکورتیکال رابینسون اعمال کردیم. مدلی که نحوه پاسخ سیناپسی سیستم را شبیه‌سازی کرده و توانست فرکانس آلفا را بازتولید کند. مزیت مهم این مدل، آن است که به‌جای حل عددی معادلات، یک روش تحلیلی برای آن وجود دارد که مستقیما طیف توان سیگنال را محاسبه می‌کند.

هاشمی و همکاران [۵] با به‌کارگیری روش تابع گرین، حل تحلیلی طیف توان معادلات رابینسون را استخراج کرده‌اند.

برای ارزیابی دقت استنتاج بیزی، الگوریتم SNPE را با استفاده از داده‌های مصنوعی تولید شده توسط مدل اعتبارسنجی کردیم. همانطور که در شکل (۳) مشاهده می کنید چگالی طیف توان مدل به‌عنوان داده مشاهده‌شده مصنوعی در نظر گرفته شده است.



شکل ۳: طیف توان سیگنال با فرکانس غالب ۸ هرتز در محدوده آلفا.

این قله در حدود ۸ هرتز، فرکانس تشدید سیستم را نشان می‌دهد؛ یعنی در این فرکانس، پاسخ سیستم بیشینه است و سیگنال نسبت به سایر فرکانس‌ها قوی‌تر ظاهر می‌شود.

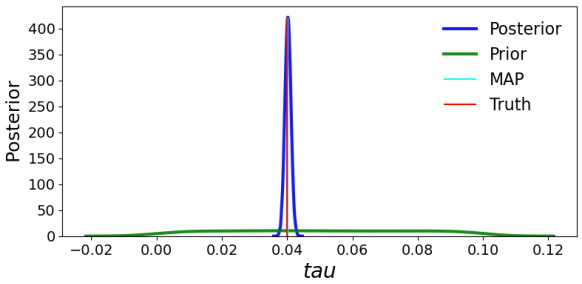
در ادامه، از نمودار طیف توان سیگنال، در حالی که همه پارامترهای مدل به‌جز تأخیر زمانی ثابت نگه داشته شده‌اند، مجموعه‌ای از ویژگی‌ها را استخراج می‌کنیم. از میان آن‌ها، ۱۰ ویژگی آموزنده که با پارامتر تأخیر زمانی تغییرات تقریباً خطی و منظمی نشان می‌دهند، انتخاب می‌شوند تا به‌عنوان ورودی مدل‌های یادگیری ماشین به کار روند. این ویژگی‌ها شامل معیارهای آماری (میانگین، انحراف معیار، توان کل، مساحت زیر منحنی، مجموع و میانگین قدرمطلق سیگنال) و ویژگی‌های طیفی (شیب و عرض از مبدأ رگرسیون خطی، قله‌های توان و قله‌های توان در باندهای فرکانسی مساوی) هستند.

برای تخمین پارامتر تأخیر زمانی، همه پارامترهای دیگر مدل را ثابت نگه داشتیم و تنها پارامتر تأخیر زمانی را به‌صورت پارامتر آزاد با توزیع پیشین یکنواخت در یک بازه فیزیولوژیک در نظر گرفتیم. با نمونه‌گیری از توزیع پیشین، مدل رابینسون را شبیه‌سازی کرده و از طیف توان سیگنال مجموعه‌ای از ویژگی‌های مفید را استخراج کردیم؛ این داده‌ها برای آموزش شبکه عصبی SNPE به کار رفت تا توزیع پسین پارامتر تأخیر زمانی را بیاموزد. پس از

حدود ۱۳۷ اپاک آموزش (معادل ۱٤ دقیقه و ۱۰ ثانیه)، شبکه به همگرایی رسید و بدون نیاز به محاسبه صریح درست‌نمایی، مقدار و عدم‌قطعیت تأخیر زمانی را با دقت خوبی برآورد کرد.

در نهایت، برای مقایسه نتایج، به‌جای داده واقعی از داده‌های مصنوعی حاصل از حل تحلیلی مدل استفاده می‌کنیم؛ داده‌هایی که از نظر آماری شبیه داده واقعی‌اند و پارامترهایشان به‌طور کامل معلوم و قابل‌کنترل است. سپس با تکیه بر این داده‌ها، توزیع پسین τ محاسبه شده و هزاران نمونه از این پارامتر روی آن ترسیم می‌شود.

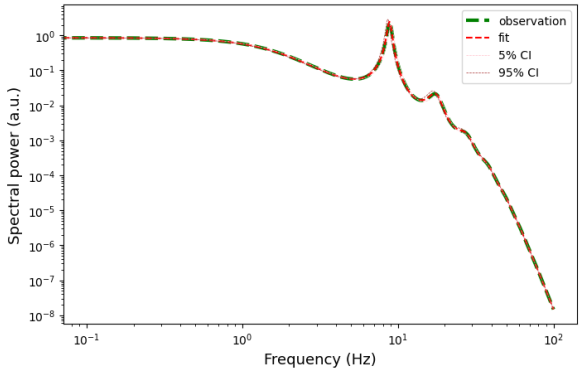
در شکل (٤)، توزیع پیشین یکنواخت، توزیع پسین، بهترین تخمین توزیع پسین و مقدار واقعی τ نمایش داده شده‌اند. همان‌طور که دیده می‌شود، توزیع پسین با قله‌ای باریک پیرامون مقدار واقعی متمرکز است، که نشان می‌دهد الگوریتم مقدار واقعی را به‌خوبی بازسازی کرده است.



شکل ٤: توزیع پسین پارامتر مدل در مقایسه با مقدار واقعی.

در نتیجه روش SBI، با وجود نویز هم می‌تواند پارامتر تأخیر زمانی مدل رابینسون را با دقت بالا و همراه با برآورد عدم‌قطعیت به‌دست آورد.

پس از به‌دست‌آوردن توزیع پسین پارامتر تأخیر زمانی با روش بیزی، یک مقدار نماینده از آن‌ها انتخاب می‌شود و مدل رابینسون با این مقادیر دوباره اجرا می‌گردد. طیف توان پیش‌بینی‌شده مدل با طیف توان مشاهده‌شده مقایسه شده و دیده می‌شود که به‌ویژه در باند آلفا، تطابق بسیار خوبی دارند؛ یعنی پارامترهای استنتاج‌شده مناسب‌اند و مدل می‌تواند رفتار واقعی مغز را به‌خوبی بازتولید کند.



شکل ۵: برازش توزیع پسین پارامتر تاخیر زمانی مدل رابینسون با داده‌های طیف توان مشاهده‌شده.

نتیجه گیری

در این پژوهش نشان دادیم که با به‌کارگیری روش استنتاج بیزی می‌توان پارامتر تأخیر زمانی در مدل رابینسون را از روی داده‌های مصنوعی با دقت بالایی بازسازی کرد، به‌طوری‌که خطای برآورد ناچیز است. از این‌رو، چارچوب پیشنهادی برای داده‌های شبیه‌سازی‌شده روشی قابل‌اعتماد محسوب می‌شود، هرچند به‌کارگیری آن بر روی داده‌های تجربی واقعی همچنان با چالش‌هایی همراه بوده و نیازمند بررسی‌های بیشتر است.

مرجع‌ها

[۱] P. J. Gonçalves *et al.*, *"Training deep neural density estimators to identify mechanistic models of neural dynamics," elife*, vol. 9, p. e56261, 2020.

[۲] P. A. Robinson, C. J. Rennie, J. J. Wright, H. Bahramali, E. Gordon, and D. L. Rowe, *"Prediction of electroencephalographic spectra from neurophysiology," Physical Review E*, vol. 63, no. 2, p. 021903, 2001.

[۳] C. J. Rennie, P. A. Robinson, and J. J. Wright, *"Unified neurophysical model of EEG spectra and evoked potentials," Biological cybernetics*, vol. 86, no. 6, pp. 457-471, 2002.

[۴] R. Hindriks and M. J. van Putten, *"Thalamo-cortical mechanisms underlying changes in amplitude and frequency of human alpha oscillations," Neuroimage*, vol. 70, pp. 150-163, 2013.

[۵] M. Hashemi, A. Hutt, and J. Sleigh *",Anesthetic action on extra-synaptic receptors: effects in neural population models of EEG activity," Frontiers in Systems Neuroscience*, vol. 8, p. 232, 2014.

ناهمگام‌سازی در شبکه عصبی متعادل تحریکی–مهاری با استفاده از منحنی‌های پاسخ فاز و دامنه

احمدی، احسان[۱]؛ ولیزاده، علیرضا[۱،۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، بلوار پرفسور یوسف ثبوتی، زنجان، ایران

[۲] مؤسسه پژوهش هوش انسانی بریسینو زاپاتا، مادرید، اسپانیا

چکیده

این مطالعه به بررسی کنترل هم‌زمانی در شبکه‌های عصبی از طریق تحریک فاز–محور می‌پردازد. یک شبکه از نورون‌های مدل integrate-and-fire نمایی (EIF) شبیه‌سازی شد و پاسخ آن به پالس‌های منفرد و مکرر در فازهای مختلف چرخه نوسان جمعی تحلیل گردید. نتایج نشان داد که پاسخ شبکه به‌طور حساسی وابسته به فاز تحریک است. منحنی‌های پاسخ فازی (PRC) و دامنه‌ای (ARC) تغییرات مستقل در زمان‌بندی و شدت نوسان جمعی را آشکار کردند. محاسبه ضریب فانو (Fano factor) منجر به طبقه‌بندی فازهای تحریک به سه دسته هم‌زمان‌ساز، ناهم‌زمان‌ساز و خنثی شد. اعمال متوالی پالس در فازهای ناهم‌زمان‌ساز، کاهشی خطی و قابل پیش‌بینی در دامنه نوسان و ضریب فانو ایجاد کرد. این یافته‌ها نشان می‌دهد که با انتخاب هدفمند فاز تحریک می‌توان دینامیک جمعی شبکه را به شکل کنترل‌پذیری جهت‌دهی کرد، که پایه‌ای برای طراحی پروتکل‌های دقیق نورومدولیشن فراهم می‌آورد.

واژه های کلیدی: *مدل EIF، منحنی پاسخ فاز (PRC)، منحنی پاسخ دامنه (ARC)، فاکتور فانو، شبکه عصبی اسپایکینگ، کنترل همگام‌سازی، NEST*

Desynchronization in a Balanced Excitatory-Inhibitory Neural Network Using Phase (PRC) and Amplitude (ARC) Response Curves

Ahmadi, Ehsan[1]; Valizadeh, Alireza[1,2]

[1] *Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences, Prof Yousef Sobouti Blvd, Zanjan, Iran*

[2] *Briceño Zapata Institute for Human Intelligence Research, Madrid, Spain*

Abstract

This study investigates the control of synchronization in neural networks through phase-targeted pulsed stimulation. A network of Exponential Integrate-and-Fire (EIF) model neurons was simulated, and its response to single and repetitive pulses at different phases of the collective oscillation cycle was analyzed. The results demonstrated that the network response is highly sensitive to the stimulation phase. Phase Response Curve (PRC) and Amplitude Response Curve (ARC) revealed independent alterations in the timing and intensity of the collective oscillation. Calculation of the Fano factor led to the classification of stimulation phases into three categories: synchronizing, desynchronizing, and neutral. Consecutive pulses applied at desynchronizing phases induced a linear and predictable reduction in both oscillation amplitude and the Fano factor. These findings indicate that the collective dynamics of a network can be steered in a controllable manner through the precise selection of stimulation phase, providing a foundation for designing precise neuromodulation protocols.

***Keywords**: EIF model, Phase response curve, Amplitude response curve, Fano factor, Spiking neural network, Synchronization control, NEST*

PACS No. 89

مقدمه

هم‌زمانی در شبکه‌های عصبی یکی از ویژگی‌های اساسی دینامیک جمعی است که هم در عملکرد طبیعی مغز و هم در بروز اختلالات عصبی نقش مهمی ایفا می‌کند. افزایش بیش از حد هم‌زمانی معمولاً با کاهش غنای دینامیکی شبکه و بروز الگوهای نابهنجار فعالیت همراه است، از این‌رو کنترل آن از طریق تحریک خارجی مورد توجه قرار گرفته است [۱،۲]. تحلیل پاسخ سامانه‌های نوسانی به تحریک پالسی اغلب در چارچوب منحنی پاسخ فازی (PRC) انجام می‌شود که تغییر فاز نوسانگر را

به‌عنوان تابعی از فاز اعمال پالس توصیف می‌کند [۳]. اگرچه این مفهوم در سطح تک‌نورونی به‌خوبی توسعه یافته است، تعمیم آن به شبکه‌های عصبی با رفتار جمعی پیچیده همچنان چالش‌برانگیز است. در چنین شبکه‌هایی، پاسخ جمعی می‌تواند به‌شدت وابسته به توزیع فازها و برهم‌کنش‌های غیرخطی باشد [٤].

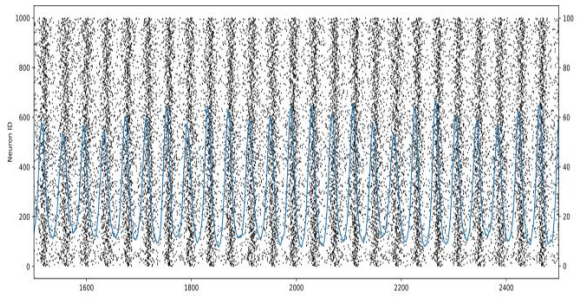
از سوی دیگر، معیارهای آماری مانند عامل فانو امکان توصیف تغییرات هم‌زمانی شبکه را فراتر از نرخ شلیک میانگین فراهم می‌کنند [۵]. با این حال، ارتباط میان پاسخ فازی شبکه، تغییرات آماری اسپایکینگ و اثر تجمعی تحریک‌های پالسی هنوز به‌طور کامل روشن نشده است.

هدف این مطالعه، شبیه‌سازی یک شبکه عصبی با مدل Exponential Integrate-and-Fire (EIF) و ارزیابی اثر تحریک پالسی فاز–محور بر PRC، ARC و فنو فکتور است. تمرکز بر شناسایی فازهای بهینه برای دسینکرونیزاسیون و تحلیل دینامیک‌های زمانی شبکه پس از تحریک‌های مکرر است. این رویکرد می‌تواند پایه‌ای برای توسعه پروتکل‌های نورومدولیشن بالینی فراهم کند.

مدل‌ها و روش‌ها

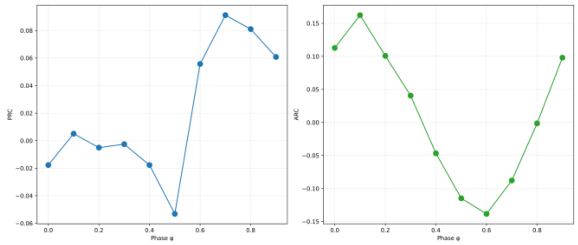
شبکه مورد مطالعه از نورون‌های مدل integrate-and-fire نمایی (EIF) تشکیل شده است که قادر به بازتولید پاسخ‌های غیرخطی نورون‌ها به تحریک‌های سریع است [٦]. شبکه‌ای متشکل از ۱۰۰۰ نورون (۸۰٪ تحریکی و ۲۰٪ مهاری) با استفاده از مدل EIF در نرم‌افزار NEST شبیه‌سازی شد. پارامترها شامل جریان ورودی ۷۰۰ پیکوآمپر، ثابت زمانی سیناپسی تحریکی ۲.۰ میلی ثانیه و مهاری ۷.۰ میلی ثانیه، ضریب مهاری ٤.۹ و احتمال اتصال ۰.۱ بودند. شبیه‌سازی برای ۳۰۰۰ میلی‌ثلنیه با وضوح ۰/۱ میلی‌ثلنیه انجام گردید [٦]. بذر تصادفی (seed=1) برای تکرارپذیری استفاده شد. (شکل ۱).

فاز شبکه بر اساس نوسان نرخ شلیک جمعی تعریف شده و هر پریود نوسان به بازه فازی $[0, 2\pi)$ نگاشت می‌شود. تحریک خارجی به‌صورت پالس‌های کوتاه و هم‌زمان به تمام نورون‌ها اعمال می‌شود و زمان اعمال هر پالس بر اساس فاز لحظه‌ای شبکه تعیین می‌گردد.



شکل ۱: فعالیت شبکه ۱۰۰۰ نورونی منظم شامل ۸۰۰ نورون تحریکی و ۲۰۰ نورون مهاری.

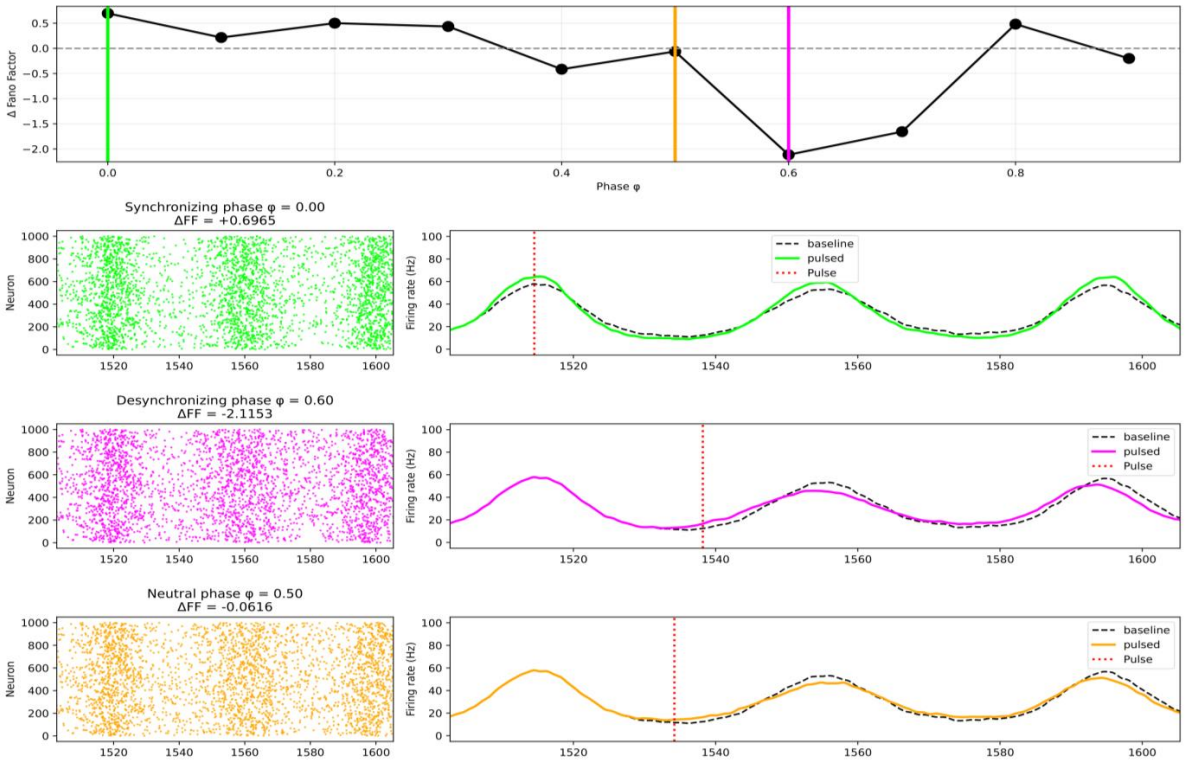
منحنی پاسخ فازی شبکه (PRC) از تغییر فاز نوسان جمعی پس از اعمال یک پالس منفرد محاسبه شد [۳]. علاوه بر آن، منحنی پاسخ دامنه‌ای (ARC) برای کمی‌سازی تغییرات دامنه نوسان شبکه در پاسخ به تحریک تعریف شده است (شکل۲).



شکل ۲: منحنی پاسخ فازی (چپ) و دامنه (راست) شبکه برحسب ۱۰ فاز در یک دوره از فعالیت شبکه.

در این مطالعه، عامل فانو به‌عنوان تابعی از فاز اعمال پالس محاسبه شد و فازهایی که منجر به افزایش یا کاهش قابل‌توجه آن می‌شدند شناسایی گردیدند (شکل۳). افزون بر این، برای بررسی اثرات غیرخطی و تجمعی تحریک‌ها، پالس‌ها طی چندین پریود متوالی شبکه اعمال شدند. پاسخ تجمعی شبکه با محاسبه ARC تجمعی و بررسی تغییرات تدریجی عامل فانو طی پریودهای متوالی ارزیابی شد (شکل٤ و ۵). این تحلیل امکان تمایز میان پاسخ‌های گذرا و تغییرات پایدار دینامیک شبکه را فراهم کرد.

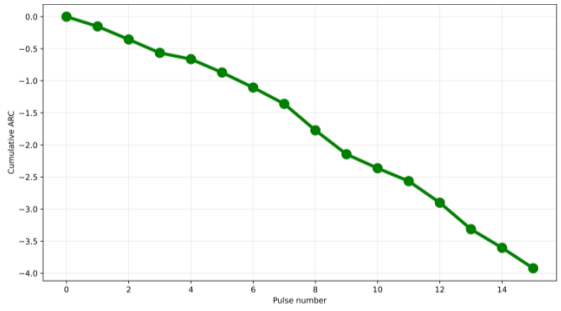
بر اساس نتایج PRC، ARC و تغییرات عامل فانو، مجموعه‌ای از فازها که بیشترین اثر ناهم‌زمان‌ساز دارند انتخاب شدند. این فازها به‌عنوان فازهای هدف برای اعمال پالس در پروتکل تحریک چندپریودی به کار رفتند. پراکندگی فازهای انتخاب‌شده به‌صورت نمودار قطبی نمایش داده شد تا به‌طور شفاف نشان داده شود که تحریک‌ها در چه نواحی از چرخه نوسان شبکه اعمال شده‌اند (شکل٦).



شکل ۳: بررسی اختلاف عامل فانو در فازهای مختلف و فازهای سه گانه (همزمان ساز، ناهمزمان ساز و خنثی) در یک دوره در شکل بالا نشان داده شده است.



شکل ۴: تغیرات لحظه ای عامل فنو حین ۱۵ تحریک در ۱۵ دوره.



شکل ۵: تغییر تجمیعی در مقدار پاسخ دامنه پس از ۱۵ دوره ی تحریک

نتایج و بحث

در این مطالعه، دینامیک شبکه نورونی مدل‌شده با نورون‌های EIF و پاسخ آن به تحریک‌ها مورد بررسی قرار گرفت. حالت پایه به عنوان مرجع برای بررسی اثر تحریک‌های پالسی در فازهای مختلف چرخه شبکه مورد استفاده قرار گرفت. اگرچه نرخ شلیک میانگین نسبتاً پایدار بود، اما ساختار زمانی اسپایک‌ها حاکی از نوساناتی نسبتا همزمان بود (شکل ۱).

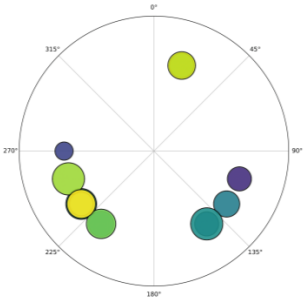
پاسخ شبکه به یک پالس منفرد به‌طور قوی به فاز اعمال پالس وابسته بود. منحنی پاسخ فازی شبکه نواحی مشخصی از فاز را آشکار کرد که در آن‌ها تحریک منجر به پیش‌افتادگی-یا پس‌افتادگی قابل‌توجه نوسان جمعی می‌شد. به‌طور هم‌زمان، منحنی پاسخ دامنه‌ای نشان داد که تغییرات دامنه نوسان لزوماً با تغییرات فاز هم‌سو نبودند. این ناهم‌راستایی میان PRC و ARC بیانگر آن بود که پاسخ شبکه صرفاً به تغییر زمان‌بندی نوسان محدود نمی‌شد، بلکه شدت نوسان جمعی نیز به‌طور مستقل تحت تأثیر تحریک قرار می‌گرفت. به‌ویژه، فازهایی وجود داشتند که با وجود تغییر فاز محدود، منجر به تغییرات دامنه قابل‌توجه می‌شدند (شکل ۲).

تحریک پالسی در فازهای متفاوت، تغییرات متمایزی در ضریب پراکندگی فانو ایجاد کرد (شکل ۳). اعمال پالس در برخی

فازها منجر به افزایش چشمگیر این ضریب شد که نشان‌دهنده افزایش نوسانات آماری و کاهش هم‌زمانی شبکه است. در مقابل، پالس در فازهای دیگر باعث کاهش ضریب فانو و تقویت هم‌زمانی گردید. بر این اساس، فازهای تحریک به سه دسته طبقه‌بندی شدند: هم‌زمان‌ساز، ناهم‌زمان‌ساز و تقریباً خنثی. الگوهای اسپایکینگ و نرخ شلیک لحظه‌ای شبکه برای نمونه‌ای از هر یک از این فازها به ترتیب در شکل‌های ۳–ب و ۳–ج ارائه شده‌اند. مقایسه این حالات نشان داد که تفاوت اصلی میان آن‌ها در بازآرایی زمانی اسپایک‌ها نهفته است که تغییر در دامنه نوسانات نرخ شلیک جمعی را در پی داشت، در حالی که نرخ شلیک میانگین تغییرات محدودی را تجربه کرد.

برای ارزیابی اثرات تجمعی تحریک، ضریب فانو به روش sliding window در طول توالی‌هایی از ۱۵ پالس متوالی محاسبه شد (شکل ٤). هنگامی که پالس‌ها به طور مکرر در فازهای ناهم‌زمان‌ساز اعمال شدند، ضریب فانو از ابتدا کاهش یافت و در طول مدت اعمال تحریک، به طور معناداری پایین‌تر از سطح پایه باقی ماند.

در پروتکل تحریک ناهم‌زمان‌ساز، نمودار ARC تجمعی یک رابطه تقریباً خطی با شیب میانگین ۰/۲۷۵– (ضریب تعیین ۰/۹۸۸) و حداکثر انحراف از خط رگرسیون ۰/۲۳۲ نشان داد. این خطی بودن حاکی از آن است که هر پالس، کاهشی نسبی و تقریباً ثابت (به طور متوسط ۰/۲٦۱) در دامنه نوسان جمعیت ایجاد می‌کند و اثرات پالس‌ها به طور تجمعی و مستقل از تاریخچه پیشین جمع می‌شوند. در نتیجه، پس از ۱۵ پالس، دامنه نوسان جمعیت حدود ۳/۹ واحد کاهش یافت. این رفتار خطی، نشان‌دهنده یک رژیم عملیاتی پایدار در مدل EIF است که در آن تحریک‌های فاز–حساس می‌توانند دامنه نوسان جمعیت را به صورتی قابل پیش‌بینی و کنترل‌پذیر کاهش دهند. این یافته اساس طراحی پروتکل‌های تحریک دقیق برای کاربردهای نوروساینس محاسباتی را فراهم می‌آورد. بررسی فازهای انتخاب‌شده و مقادیر متناظر ARC نشان می‌دهد که بین فاز تحریک و تغییر دامنه نوسان جمعیت همبستگی خطی معناداری وجود ندارد. برای فازهای مشابه مانند ۰/٤۰، مقدار ARC می‌تواند از مثبت به منفی تغییر کند که احتمالاً ناشی از اثرات وابسته به تاریخچه تحریک است.



شکل ۶: فازهای انتخاب شده.

در مقابل، فازهای پایین‌تر مانند ۰/۰۵ و فازهای میانی مانند ۰/۳۵ به‌ترتیب با ARC مثبت و منفی قوی (حدود ۰/۱۳۸–) همراه هستند. در مجموع، الگوریتم تطبیقی با جستجوی پویا در فضای فاز (میانگین فاز ≈۰/٤۵)، فازهایی را انتخاب می‌کند که در سطح تجمعی به کاهش پایدار دامنه نوسان جمعیت منجر می‌شوند، هرچند پاسخ هر پالس به وضعیت قبلی شبکه وابسته باقی می‌ماند.

نتیجه گیری

نتایج نشان داد پاسخ شبکه‌ی نورونی مدل EIF به پالس‌ها به فاز وابسته است و هم فاز و هم دامنه نوسان جمعی را به‌طور مستقل تغییر می‌دهد. تحریک در فازهای خاص، هم‌زمانی شبکه را به‌طور معناداری افزایش یا کاهش می‌داد. اعمال متوالی پالس‌ها در فازهای ناهم‌زمان‌ساز، کاهش خطی و قابل پیش‌بینی در دامنه نوسان ایجاد کرد. این یافته‌ها امکان کنترل هدفمند دینامیک شبکه از طریق انتخاب فاز تحریک را برای کاربردهای محاسباتی نشان می‌دهد.

مرجع‌ها

[1] Buzsaki G, Draguhn A. Neuronal oscillations in cortical networks. *science*. 2004;**304**(5679):1926-9.
[2] Uhlhaas PJ, Singer W. Neural synchrony in brain disorders: relevance for cognitive dysfunctions and pathophysiology. *neuron*. 2006;**52**(1):155-68.
[3] Winfree, Arthur T. *The Geometry of Biological Time*. *Interdisciplinary Applied Mathematics*, Springer New York, 1 Jan. 2001. Accessed 21 Apr. 2023.
[4] Yoshiki Kuramoto. *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence. Mineola*, N.Y., Dover Publications, 2003.
[5] Nawrot MP, Boucsein C, Molina VR, Riehle A, Aertsen A, Rotter S. Measurement of variability dynamics in cortical spike trains. *Journal of neuroscience methods*. 2008;**169**(2):374-90.
[6] Fourcaud-Trocmé N, Hansel D, Van Vreeswijk C, Brunel N. How spike generation mechanisms determine the neuronal response to fluctuating inputs. *Journal of neuroscience*. 2003;**23**(37):11628-40.

شبکه نوریستورهای اسپایکی: یادگیری برآمده از طریق انتشار حرارتی و هم‌زمانی

درخشان باهر ، آیتن[1]؛ معنوی، سید علیرضا[1]؛ باقری کلهر، مهسا[1]؛ تویبر، یوو[2]؛ جعفری، رضا[1]

[1]دانشکده فیزیک دانشگاه شهید بهشتی ، اوین تهران

[2]دانشکده فیزیک دانشگاه ویرجینیا تک، آمریکا

چکیده

با الهام از معماری شبکه‌های عصبی زیستی، در این کار یک چارچوب محاسباتی نورومورفیک مبتنی بر «نوریستورها» پیشنهاد می‌شود؛ عناصر مداری نوینی که رفتار نورون‌های اسپایکی را شبیه‌سازی می‌کنند. در این مدل، نوریستورها توسط ولتاژ ورودی فعال شده و به‌طور هم‌زمان یک اسپایک الکتریکی و گرمای موضعی تولید می‌کنند. این انرژی حرارتی به نوریستورهای مجاور منتقل شده و موجب فعال‌شدن آن‌ها می‌شود، که در نهایت منجر به برهم‌کنش‌های سطح شبکه می‌گردد. یادگیری در این سیستم به‌صورت برآمده و از طریق هم‌زمانی فعالیت اسپایکی در کل شبکه شکل می‌گیرد.

برای تحلیل این رفتار، عملکرد نوریستورهای اسپایکی را با استفاده از یک مدل شبکه‌ی اسپایکی مبتنی بر ایزینگ شبیه‌سازی می‌کنیم. همچنین یک پارامتر نظم معرفی می‌کنیم که از فعالیت هماهنگ نوریستورهایی استخراج شده است که در یک الگوی فضازمانی مشخص مشارکت دارند. این پارامتر معیاری کمی برای سنجش میزان هم‌زمانی شبکه و پایداری الگوها فراهم می‌کند و بینشی عمیق نسبت به دینامیک عملکردی سیستم نورومورفیک پیشنهادی ارائه می‌دهد.

واژه های کلیدی: *نوریستور، شبکه عصبی اسپایکی، هم‌زمانی، فیزیک آماری، یادگیری برآمده.*

Spiking Neuristor Network: Emergent Learning through Thermal Diffusion and Synchronization

Derakhshan Baher, Ayten[1]; Manavi, Seyed Alireza[1]; BagheriKalhor, Mahsa[1]; Tauber, Uwe[2]; Jafari, Reza[1]

[1] Department of Physics, Shahid Beheshti University, Tehran
[2] Department of Physics, Virginia Tech University, USA

Abstract

Inspired by the architecture of biological neural networks, this work proposes a neuromorphic computing framework based on "neuristors," novel circuit elements that emulate the behavior of spiking neurons. In this model, neuristors are activated by an input voltage, generating both an electrical spike and localized heat. This thermal energy propagates to adjacent neuristors, triggering further spiking events and enabling network-level interactions. Learning within this system emerges from the synchronization of spiking activity across the network. To analyze this behavior, we simulate the performance of spiking neuristors through an Ising-based spiking network model. We further introduce an order parameter derived from the coordinated activity of neuristors participating in a specific spatiotemporal pattern. This parameter provides a quantitative measure of network synchronization and pattern stability, offering insight into the operational dynamics of the proposed neuromorphic system.

Keywords: *Neuristor, spiking neural network, synchrony, statistical physics, emergent learning*

PACS No. 89

مقدمه

پیشرفت‌های اخیر در محاسبات نورومورفیک، دینامیک‌های جمعی چشمگیری را در شبکه‌های نوریستورهای حرارتی VO_2 آشکار کرده‌اند؛ از جمله در کار ژانگ و همکاران [1]. این پژوهش دو مؤلفه‌ی فیزیکی کلیدی را برجسته می‌کند که انگیزه‌ی اصلی مطالعه‌ی حاضر را شکل می‌دهند. نخست، گذار هیسترتیک عایق–فلز در VO_2 که در نزدیکی 340 کلوین رخ می‌دهد و با سوئیچینگ مقاومتی شدید وابسته به دما و ولتاژ، حافظه‌ی ذاتی و اسپایک‌های غیرخطی را ممکن می‌سازد. دوم، مونتاژ این نوریستورها در قالب شبکه منجر به ظهور دینامیک‌های فضازمانی غنی و قابل‌کنترل با ولتاژ می‌شود؛ از خوشه‌های موضعی اسپایک تا موج‌های رونده و هم‌زمانی سراسری، که همگی بدون نیاز به تنظیم بحرانی خارجی پدید می‌آیند [1], [2].

اهمیت این نتایج در تفاوت بنیادین میان محاسبات زیستی و دیجیتال نهفته است. در حالی که مغز با نرخ‌های شلیک در حدود 10^2 تا 10^3 هرتز عمل می‌کند، رایانه‌های مدرن با وجود فرکانس‌های گیگاهرتزی، برای انجام وظایف شناختی مشابه به منابع محاسباتی و انرژی بسیار بیشتری نیاز دارند. با وجود سرعت کمتر، مغز قادر است خاطرات کامل را از ورودی‌های ناقص بازسازی کند [3].

شبکه‌های عصبی اسپایکی چارچوبی طبیعی برای توصیف این نوع محاسبه فراهم می‌کنند، جایی که اطلاعات در قالب رویدادهای اسپایک گسسته کدگذاری می‌شود. از دیدگاه فیزیک آماری، این سیستم‌ها را می‌توان به مدل‌های اسپینی برهم‌کنشی نگاشت کرد، به‌گونه‌ای که یادگیری و بازیابی حافظه به‌صورت گذارهای فازی میان حالت‌های جمعی نامنظم و منظم تفسیر شوند [2], [5].

در این کار، با ترکیب این دیدگاه‌ها، توصیفی مبتنی بر فیزیک آماری از یادگیری در شبکه‌های نوریستور VO_2 ارائه می‌دهیم. با نگاشت دینامیک اسپایکی به متغیرهای شبه–ایزینگ، پارامترهای نظم مناسبی برای توصیف هم‌زمانی، بی‌نظمی و بازیابی الگو معرفی می‌کنیم. در این چارچوب، یادگیری به‌صورت پایدارشدن جاذب‌های اسپایکی فضازمانی تفسیر می‌شود که امکان بازسازی سریع الگوهای ذخیره‌شده از ورودی‌های ناقص را فراهم می‌کند؛ رفتاری که شباهت نزدیکی به حافظه‌ی تداعی‌گر در مغز زیستی دارد [2].

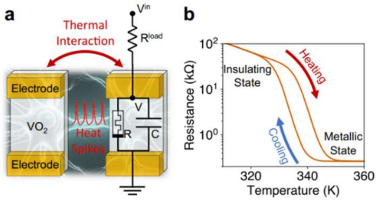
نوریستورها به‌عنوان ابزارهای یادگیری

نوریستورها دستگاه‌های الکترونیکی‌ای هستند که برای شبیه‌سازی رفتارهای کلیدی نورون‌های زیستی طراحی شده‌اند. این عناصر به‌جای منطق دیجیتال متعارف، بر دینامیک‌های آنالوگ و غیرخطی متکی‌اند که یکپارچه‌سازی ورودی‌ها، تولید اسپایک و برهم‌کنش جمعی نورون‌های واقعی را بازتاب می‌دهد. از این منظر، نوریستور صرفاً یک عنصر مداری نیست، بلکه پیاده‌سازی فیزیکی تحریک‌پذیری نورونی به‌شمار می‌آید [4], [6].

برای بروز یادگیری، یک سیستم باید از تعداد زیادی واحد برهم‌کنشی تشکیل شده باشد و این واحدها بتوانند بر یکدیگر اثر بگذارند تا رفتارهای تطبیقی پدیدار شوند. شبکه‌های نوریستور ذاتاً هر دو شرط را برآورده می‌کنند. در بسیاری از پیاده‌سازی‌ها، نوریستورها از طریق سازوکارهای وابسته به ولتاژ اعمالی و گرمای تولیدشده با یکدیگر برهم‌کنش دارند. هنگامی که ولتاژ ورودی در یک بازهٔ آستانه‌ای قرار گیرد، نوریستور میان حالت‌های رسانایی کم و زیاد سوئیچ کرده و اسپایک تولید می‌کند. همچنین، گرمای تولیدشده—که اغلب با گذار فازی ماده مرتبط است—می‌تواند رسانایی و جفتیدگی مؤثر دستگاه‌ها را تعدیل کند. این برهم‌کنش‌های وابسته به ولتاژ و دما امکان بازآرایی پویا و بروز رفتارهای جمعی غنی را در شبکه‌های نوریستور فراهم می‌سازند [1], [7].

در این دستگاه‌ها، ماده‌ی فعال مسئول سوئیچینگ دی‌اکسید وانادیوم (VO_2) است که به‌صورت لایه‌ای نازک روی زیرلایه‌ی Al_2O_3 نشانده شده است [1].

همان‌گونه که در شکل 1(a) آمده است، هر نوریستور را می‌توان با یک مدار RC مدل کرد که دینامیک آن از گذار فازی وابسته



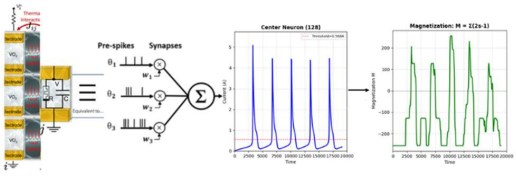
شکل 1 : (a) پاسخ وابسته به ولتاژ و دمای یک نوریستور VO_2 ، به‌همراه کوپل حرارتی میان دستگاه‌های مجاور که از طریق اسپایک‌های حرارتی برقرار می‌شود. (b) نمودار دما–مقاومت ماده‌ی فعال VO_2 که بازه‌ی دمایی باریکی را نشان می‌دهد که در آن نوریستور تحریک‌پذیر و دینامیک اسپایکی جمعی در شبکه پایدار می‌ماند. [1]

به ولتاژ در لایه‌ی VO_2 ناشی می‌شود. با اعمال ولتاژ در یک بازه‌ی مشخص، خازن شارژ شده تا VO_2 به آستانه رسیده و به حالت رسانا سوئیچ کند؛ فرآیندی که به نوسان اسپایکی می‌انجامد. این سوئیچینگ گرما تولید می‌کند که از طریق زیرلایه‌ی مشترک Al_2O_3 منتشر می‌شود و به‌دلیل حساسیت دماییVO_2، دمای محلی و در نتیجه آستانه و رفتار شلیک نوریستورهای مجاور را تغییر می‌دهد. بدین‌ترتیب، یک برهم‌کنش حرارتی مؤثر میان واحدهای الکتریکی مجزا شکل می‌گیرد.

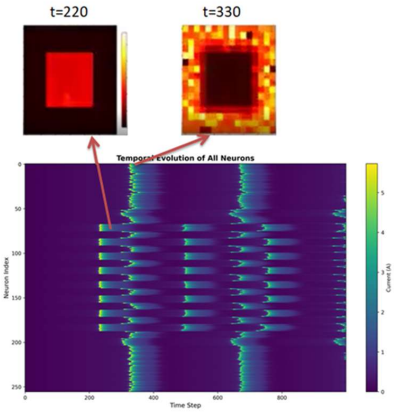
در راستای این نتایج، نمودار دما–مقاومت شکل 1(b) یک پنجره‌ی دمایی مشخص را نشان می‌دهد که در آن نوریستورهای VO_2فعال شده و دینامیک اسپایکی پایداری در سراسر شبکه بروز می‌دهند. این بازه‌ی دمایی متناظر با رژیمی است که در آن برهم‌کنش‌های حرارتی به‌اندازه‌ی کافی قوی‌اند تا کوپلینگ مؤثر و رفتار جمعی پایدار را حفظ کنند. [1], [6]

پارامتر نظم در شبکه‌های عصبی اسپایکی

شبکه‌های عصبی اسپایکی نسل سوم شبکه‌های عصبی را تشکیل می‌دهند و هدف آن‌ها تقلید دینامیک‌های زمانی سیستم‌های عصبی زیستی است. برخلاف شبکه‌های عصبی مصنوعی متعارف، که در آن‌ها همه‌ی نورون‌ها به‌صورت هم‌زمان به‌روزرسانی می‌شوند، نورون‌ها در شبکه عصبی اسپایکی تنها زمانی اسپایک تولید می‌کنند که پتانسیل غشایی آن‌ها به آستانه برسد. در نتیجه، پردازش اطلاعات در شبکه عصبی اسپایکی ذاتاً مبتنی بر رویداد است. برای مدل‌سازی دینامیک نورونی، معمولاً از مدل‌های ریاضی مانند نورون یکپارچه‌کننده–نشت‌دار استفاده می‌شود.



شکل 2: طرح شماتیک عملکرد نوریستورها. رفتار اسپایکی نوریستورها از چرخه‌ی حرارتی آن‌ها ناشی می‌شود؛ به‌طوری که یک نوریستور فعال گرم شده و با انتقال انرژی حرارتی، نوریستور هدف را تحریک می‌کند و سپس با سرد شدن، چرخه را تکرار می‌نماید.



شکل 3: فرآیند یادگیری به این صورت انجام می‌شود: یک نمونه‌ی ورودی مربعی شده و برای برانگیختن هم‌زمانی نوریستورها به‌کار می‌رود. ولتاژ ورودی ابتدا نوریستورهای متناظر با نمونه‌ی انتخاب‌شده را فعال می‌کند. گرمای تولیدشده توسط آن‌ها سپس موجب تحریک سایر بخش‌های شبکه می‌شود. بدین‌ترتیب، اطلاعات آموخته‌شده در الگوی دقیق هم‌زمانی اسپایک‌ها ذخیره می‌گردد.

در یک شبکه عصبی اسپایکی، هر نورون i در زمان t با یک متغیر اسپایکی دودویی توصیف می‌شود:

$$\sigma_i(t) = \begin{cases} 1, & if\ neuron\ i\ spikes\ at\ t \\ 0 & otherwise \end{cases} \qquad (1)$$

با نگاشت فعالیت اسپایکی به متغیرهای شبه–ایزینگ، پارامتر نظم سراسری (مغناطش) شبکه به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$m(t) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(2\sigma_i(t) - 1)) \qquad (2)$$

که در آن N تعداد کل نورون‌ها است. مقدار بزرگ $|m(t)| \approx 1$ نشان‌دهنده‌ی رژیم به‌شدت هم‌زمان است که در آن بیشتر نورون‌ها به‌طور هم‌زمان اسپایک می‌کنند؛ حالتی که متناظر با فاز فرومغناطیسی است. در مقابل، $|m(t)| \approx 0$ به رژیم شلیک نامنظم و ناهم‌بسته اشاره دارد که مشابه فاز پارامغناطیسی است. حالت استراحت معمول یک شبکه‌ی عصبی سالم عموماً در این رژیم با مغناطش پایین قرار دارد، همان‌گونه که با دینامیک تک‌نورونی و سری زمانی مغناطش متناظر در شکل 2 نشان داده شده است.

یادگیری در شبکه از طریق هم‌زمانی القاشده توسط محرک پیاده‌سازی می‌شود؛ بدین‌صورت که یک نمونه‌ی ورودی، زیرمجموعه‌ای از نورون‌ها را فعال می‌کند و فعالیت اسپایکی آن‌ها از طریق برهم‌کنش‌های حرارتی در سراسر شبکه گسترش می‌یابد. در نتیجه، اطلاعات آموخته‌شده نه در نرخ شلیک، بلکه در الگوی دقیق هم‌زمانی اسپایک‌ها کدگذاری می‌شود، همان‌گونه که در شکل 3 نشان داده شده است.

مغناطش وابسته به الگو

در طول یادگیری، هر الگوی ورودی μ زیرمجموعه‌ی مشخصی از نورون‌ها را مطابق با یک پیکربندی اسپایکی خاص ξ_i^μ فعال می‌کند. در این حالت، مغناطش سراسری دیگر برای توصیف وضعیت شبکه کافی نیست. در عوض، پارامتر نظم وابسته به الگو (هم‌پوشانی) به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$m^\mu(t) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(2\sigma_i(t) - 1)\,\xi_i^\mu \qquad (3)$$

در اینجا $\xi_i^\mu \in \{-1, +1\}$ وضعیت اسپایکی مطلوب نورون i را برای الگوی μ نشان می‌دهد. مقدار $m^\mu(t) \approx 1$ بیانگر بازیابی موفق الگوی μ است، در حالی که $m^\mu(t) \approx 0$ نشان می‌دهد که هم‌بستگی معناداری میان فعالیت فعلی شبکه و الگوی ذخیره‌شده وجود ندارد.

تعریف وزن‌های سیناپسی

برای ذخیره‌ی مجموعه‌ای از P الگوی اسپایکی آموخته‌شده $\{\xi_i^\mu\}$، ماتریس کوپل سیناپسی با استفاده از قانون یادگیری هبین به‌صورت زیر ساخته می‌شود:

$$w_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{\mu=1}^{P}\xi_i^\mu\xi_j^\mu, \quad w_{ii} = 0 \qquad (4)$$

این تعریف تضمین می‌کند که الگوهای ذخیره‌شده به جاذب‌های دینامیک شبکه تبدیل شوند. در نتیجه، تکامل زمانی شبکه های عصبی اسپایکی را می‌توان در چارچوب فیزیک آماری تحلیل کرد و ویژگی‌هایی نظیر گذارهای فازی، ظرفیت حافظه و عملکرد بازیابی را در شبکه‌های عصبی اسپایکی مورد مطالعه قرار داد.

نتیجه‌گیری

در جمع‌بندی، برای پیشبرد توسعه‌ی نوریستورها به‌عنوان دستگاه‌های نورومورفیک، در این پژوهش یک مدل شبکه‌ی عصبی اسپایکی مبتنی بر ایزینگ معرفی شد. این مدل الگوهای یادگیری را در قالب هم‌زمانی اسپینی کدگذاری می‌کند و یک پارامتر نظم برای تحلیل الگوها پیشنهاد می‌دهد. این چارچوب نظری عملکرد نوریستورها را بازتاب می‌دهد و ابزاری کلیدی برای شبیه‌سازی و هدایت طراحی آن‌ها در مقیاس بزرگ، پیش از ساخت فیزیکی، فراهم می‌کند.

مرجع‌ها

[1] Y.-H. Zhang, C. Sipling, E. Qiu, I. K. Schuller, and M. Di Ventra, Collective dynamics and long-range order in thermal neuristor networks, Nature Communications 15, 6986 (2024). doi:10.1038/s41467-024-51254-4
[2] C. Lee, S. S. Sarwar, P. Panda, G. Srinivasan, and K. Roy, Enabling Spike-Based Backpropagation for Training Deep Neural Network Architectures, Frontiers in Neuroscience 14, 119 (2020). doi:10.3389/fnins.2020.00119
[3] O'Byrne, J. & Jerbi, K. How critical is brain criticality? Trends Neurosci. 45, 820 (2022).
[4] D. Markovi´c, A. Mizrahi, D. Querlioz, and J. Grollier, Physics for neuromorphic computing, Nature Reviews Physics 2, 499 (2020). doi:10.1038/s42254-020-0210-0
[5] J. G¨oltz, L. Kriener, A. Baumbach, S. Billaudelle, O. Breitwieser, B. Cramer, D. Dold, A. F. Kungl, W. Senn, J. Schemmel, K. Meier, and M. A. Petrovici, Fast and energy efficient neuromorphic deep learning with first-spike times, Nature Machine Intelligence 3, 696–706 (2021). doi:10.1038/s42256-021-00388-x
[6] M. Belyaev and A. Velichko, A spiking neural network based on the model of VO2 neuron, Electronics 8, 1065 (2019). doi:10.3390/electronics8101065
[7] C. Sipling and M. Di Ventra, Memory-induced long-range order in dynamical systems, arXiv:2405.06834 (2024).

افزایش وفاداری تله‌پورت کوانتومی در شبکه‌های فوتونیک نویزی با استفاده از جداسازی دینامیکی

رضائی، رضا[1]؛ آزادمرزآبادی، مهدی[2]؛ رمزی، امیررضا[2]

[1]دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان، ایران
[2]گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه اراک، ایران

چکیده

در این پژوهش، دینامیک یک سامانه سه کیوبیتی فوتونی تحت تأثیر نویز حرارتی مورد مطالعه قرار گرفته است. برای توصیف رفتار غیر واحدی سیستم، از معادلات لیندبلاد و لانگوین استفاده می‌کنیم تا برهم‌کنش مؤثر بین کیوبیت‌ها و محیط حرارتی مدل‌سازی شود. پس از تحلیل تکامل زمانی حالت‌های کوانتومی، پروتکل تلپورت کوانتومی بر روی سیستم اجرا شده و عملکرد آن در حضور نویز بررسی می‌شود. به منظور کاهش اثرات مخرب محیط، از روش جداسازی دینامیکی بهره گرفته شده و تأثیر توالی‌های کنترلی مختلف بر بهبود پایداری حالت و کیفیت انتقال اطلاعات ارزیابی می‌گردد. نتایج عددی نشان می‌دهد که اعمال توالی‌های مناسب جداسازی می‌تواند به‌طور قابل توجهی آنتروپی حالت، کاهش افت همروی (coherence) و افزایش وفاداری تلپورت را به همراه داشته باشد. متریک‌های آنتروپی فون نیومن، وفاداری و همدوسی برای مقایسه کمی ارائه شده و نشان می‌دهند این روش قادر است مقاومت سیستم فوتونی در برابر نویز حرارتی را به شکل چشمگیری افزایش دهد. این نتایج می‌توانند مبنایی برای طراحی پروتکل‌های مقاوم در برابر نویز در شبکه‌های کوانتومی فوتونی فراهم کنند.

کلمات کلیدی: *وفاداری، سامانه سه کیوبیتی فوتونی، همدوسی*

Enhancing Quantum Teleportation Fidelity in Noisy Photonic Networks Using Dynamical Decoupling

Rezaee, Reza[1], Azadmarzabadi, Mahdi[2], Ramzi, Amir Reza[2]

[1]Department of Physics, Isfahan University of Technology (IUT), Isfahan, Iran
[2]Department of Physics, Faculty of Science, University of Arak, Iran

Abstract

In this work, the dynamics of a three-qubit photonic system under the influence of thermal noise is studied. To describe the non-unitary behavior of the system, we use the Lindblad and Langevin equations to model the effective interaction between the qubits and the thermal environment. After analyzing the time evolution of the quantum states, the quantum teleportation protocol is implemented on the system and its performance in the presence of noise is investigated. To reduce the destructive effects of the environment, the dynamic decoupling method is used and the effect of different control sequences on improving the state stability and the quality of information transmission is evaluated. Numerical results show that applying appropriate decoupling sequences can significantly reduce the state entropy, reduce coherence loss, and increase the teleport fidelity. The von Neumann entropy, fidelity, and coherence metrics are presented for quantitative comparison and show that this method can significantly enhance the thermal noise resistance of the photonic system. These results can provide a basis for designing noise-resistant protocols in photonic quantum networks.

Keywords*: fidelity, three-qubit photonic system, coherence*

مقدمه

یکی از مسائل بنیادی در فیزیک اطلاعات کوانتومی، درک و کنترل رفتار سامانه‌های کوانتومی در حضور نویز محیطی است. هر سامانه‌ی کوانتومی به دلیل اجتناب‌ناپذیر بودن برهم‌کنش با محیط، به‌صورت مؤثر یک سامانه‌ی باز محسوب می‌شود و تکامل آن از حالت یک دینامیک کاملاً واحدی خارج شده و رفتارهای

غیرواحدی شامل کاهش همدوسی (decoherence)، اتلاف انرژی و افزایش آنتروپی را تجربه می‌کند. این پدیده‌ها کیفیت عملیات کوانتومی، از جمله تلپورت کوانتومی و پردازش حالت‌های درهم‌تنیده، را به طور چشمگیری کاهش می‌دهند؛ موضوعی که برای سامانه‌های فوتونی، با وجود مزایای گسترده، همچنان چالشی مهم است.

سامانه‌های فوتونی چندکیوبیتی–به‌ویژه توپولوژی سه‌کیوبیتی–در پروتکل‌های کلیدی شبکه‌های کوانتومی مانند توزیع درهم‌تنیدگی، تقویت‌کننده‌های کوانتومی، و تلپورت کوانتومی نقش مهمی ایفا می‌کنند. با این حال، قرارگیری این سامانه‌ها در محیط‌های حرارتی باعث ایجاد نویزهایی مانند اتلاف (dissipation)، تحریک حرارتی (thermal excitation)، و فازززدایی (dephasing) می‌شود. مدل‌سازی دقیق این نویزها برای ارزیابی عملکرد واقعی پروتکل‌های کوانتومی ضروری است.

روش‌های محاسباتی

در این پژوهش برای بررسی پایداری فرایند تلپورتاسیون کوانتومی، از یک مدل ریاضی دوکیوبیتی مبتنی بر معادله‌ی لیندبلاد و تقریب لانگوین استفاده شد. دینامیک سیستم با معادله‌ی اصلی لیندبلاد مدلسازی شد:

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H,\rho] + \sum_k \left(L_k \rho L_k^\dagger - \frac{1}{2}\{L_k^\dagger L_k, \rho\}\right) \qquad 1-1$$

معادله اصلی لیندبلاد: معادله 1

که در آن L_k اپراتورهای فروپاشی، برانگیزش و واپاشی فازی هستند. حالت ورودی کلی و کانال درهم‌تنیده به ترتیب به صورت $|\psi_{in}\rangle = \cos(\theta/2)\,|0\rangle + e^{i\Phi}\sin(\theta/2)\,|1\rangle$ و $|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle+|11\rangle)$ تعریف شدند و ماتریس چگالی خروجی ρ_{out} پس از فرآیند استاندارد تلپورت محاسبه گردید. برای کارایی محاسباتی، از تقریب لانگوین با نرخ‌های تعدیل‌شده‌ی $\gamma' = f_\Gamma \gamma$ و $\gamma'_\phi = f_\Phi \gamma_\phi$ در سه توالی جداسازی دینامیکی (Spin Echo ، XY4 و XY8) استفاده شد که به صورت خودکار بر اساس قاعده‌ی $\gamma_\Phi > \gamma^2$ یا $\gamma > \gamma^2$ انتخاب می‌گردید[1]

کیفیت فرایند با چهار شاخص کلیدی ارزیابی شد که مهم‌ترین آن، فیدلیتی $F = \langle\psi_{in}|\rho_{out}|\psi_{in}\rangle$ بود. شبیه‌سازی عددی در بازه‌های مشخص زمانی و دمایی (0.01تا 50 کلوین) انجام شد. در تحلیل نهایی، پارامترهای بهبود عملکرد مانند $\eta_F = (F_{DD} - F_0)/F_0$ و دمای بحرانی T_c با شرط $C\,T_C = 0$، که در آن C معیار درهم‌تنیدگی است، استخراج شدند[2].

پیاده‌سازی و نتایج مقدماتی

برای پیاده‌سازی مدل‌های لیندبلاد تعمیم‌یافته با کنترل DD و لانگوین با کنترل DD انجام شد. شبیه‌سازی‌ها شامل سه کیوبیت در فرآیند تلپورتاسیون کوانتومی با هامیلتونی پایه H_0 و هامیلتونی کنترل تناوبی $H_c(t)$ بودند. نرخ‌های واپاشی مؤثر $\gamma_i^{eff}(t)$ در مدل لیندبلاد از روی زمان‌بندی پالس‌ها محاسبه شده و در مدل لانگوین شرایط مشابه اعمال گردید. توالی XY8 برای حالاتی که $\gamma_\Phi > \gamma^2$ و توالی CPMG برای حالاتی که $\gamma_\Phi \leq \gamma^2$ بود به کار گرفته شد. خروجی‌ها شامل وفاداری، خلوص، آنتروپی فون‌نیومن و درصد بهبود عملکرد بوده و به عنوان نتایج مقدماتی، روند تغییرات در نرخ‌های نمونه γترسیم و هم‌تراز شدند تا مقایسه در بخش 4 انجام گیرد.

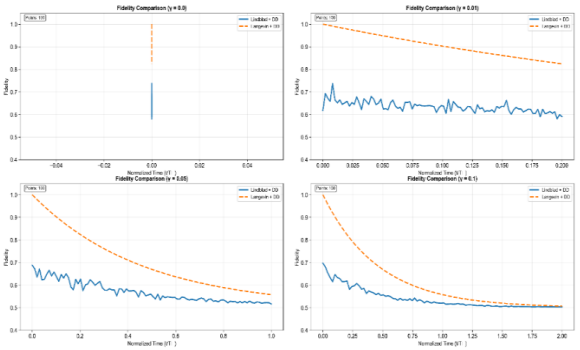
نتایج و بحث

در این بخش، رفتار سامانه‌ی تلپورتاسیون کوانتومی تحت دو توصیف لیندبلاد تعمیم‌یافته با کنترل تناوبی (DD) و لانگوین با کنترل مشابه بررسی و مقایسه شده است. هدف آن است که تأثیر نویز محیط و کنترل تناوبی بر پایداری حالت کوانتومی و صحت فرآیند انتقال مورد ارزیابی قرار گیرد. چهار شاخص اصلی یعنی وفاداری (Fidelity)، خلوص (Purity)، آنتروپی فون‌نیومن (Entropy) و درصد بهبود عملکرد تحت DD، به صورت عددی و تصویری تحلیل شده‌اند.

تغییرات وفاداری در گذر زمان

با بررسی تغییرات وفاداری در گذر زمان (شکل 4.1) مشاهده شد که در نویز ضعیف (γ کوچک)، هر دو مدل لیندبلاد و لانگوین کاهش آرامی نشان می‌دهند، اما افت وفاداری در مدل لانگوین ملایم‌تر است. در نرخ‌های متوسط (γ=0.1)، اختلاف حدود 0.1 بین دو منحنی نشان‌دهنده‌ی تأثیر نویز تصادفی در مدل لانگوین

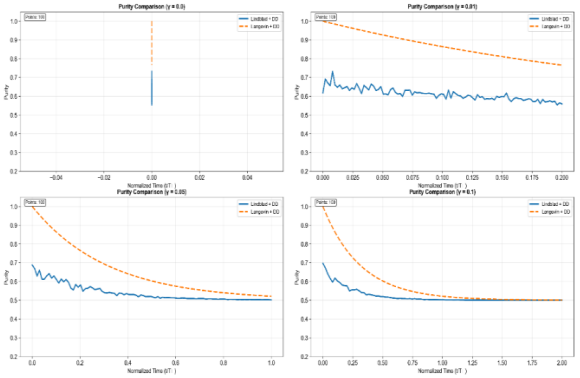
است که با یکنواخت‌کردن نوسانات،میانگین وفاداری را بهبود می‌بخشد.



شکل 4.1 تغییرات وفاداری برحسب زمان نرمال‌شده t/T_1 برای مدل‌های لیندبلاد DD و لانگوین DD (بر اساس داده‌ی شبیه‌سازی $\gamma=0.01$).

پویایی خلوص حالت

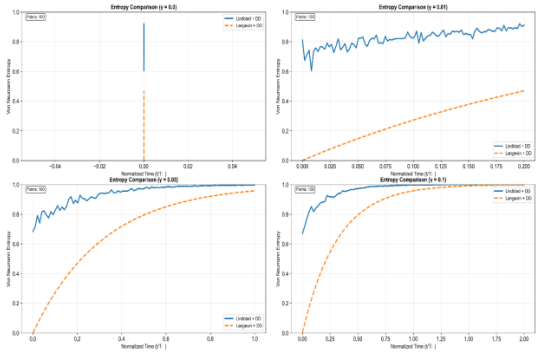
شکل 4.2 روند کاهش خلوص حالت انتقالی را نشان می‌دهد. هر دو مدل از خلوص نزدیک به یک شروع می‌کنند، اما مدل لیندبلاد با افت سریع‌تری به حدود 0.5 می‌رسد، درحالی که مدل لانگوین در حدود 0.6 تثبیت می‌شود. این اختلاف ده درصدی،مقاومت بالاتر مدل لانگوین را در برابر آمیختگی حالت، به دلیل میانگین‌گیری تصادفی نویز، نشان می‌دهد



شکل4.2 تغییرات خلوص حالت برحسب زمان نرمال‌شده برای دو مدل لیندبلاد-DD و لانگوین-DD.

آنتروپی فون‌نیومن

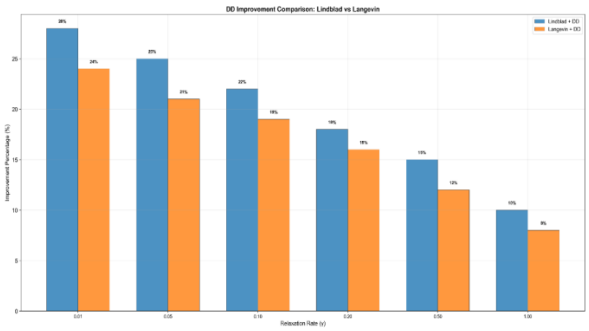
شکل 4.3 افزایش آنتروپی فون‌نیومن را در طول زمان نشان می‌دهد که بیانگر گذار از حالت خالص به آمیخته است. در نویز پایین، مدل لیندبلاد رشد نوسانی و سریع‌تری دارد، درحالی که مدل لانگوین افزایشی تدریجی‌تر نشان می‌دهد. با افزایش نرخ واپاشی ($\gamma>0.1$)، آنتروپی در هر دو مدل به حدود یک می‌رسد که نشان‌دهنده‌ی تخریب کامل انسجام کوانتومی است.



شکل 4.3 تغییرات آنتروپی فون‌نیومن برحسب زمان و نرخ γبرای مدل‌های لیندبلاد DD و لانگوین DD.

درصد بهبود عملکرد ناشی از کنترل DD

شکل 4.4 تأثیر کنترل تناوبی را بر بهبود عملکرد نشان می‌دهد. با افزایش نرخ واپاشی (γ)، نسبت بهبود وفاداری کاهش می‌یابد و از بیش از 25% در نویز کم به زیر 10% در نویز زیاد می‌رسد. مدل لیندبلاد، بهدلیل تعریف صریح نرخ واپاشی مؤثر، بهبود نسبی بیشتری نسبت به مدل لانگوین نشان می‌دهد که با پیش‌بینی نظریه‌ی اتلاف دینامیکی همخوانی دارد..



شکل 4.4 درصد بهبود وفاداری ناشی از کنترل DD در مدل‌های لیندبلاد و لانگوین برحسب نرخ γ.

تحلیل کمی و فیزیکی

مقایسه‌ی شاخص‌های کلیدی نشان می‌دهد که مدل لانگوین عملکرد مطلوب‌تری در پایداری عددی دارد. این مدل با ثبت میانگین وفاداری 0.5175 و خلوص 0.68، برتری جزئی ولی

قابل‌توجهی در حفظ حالت کوانتومی و کاهش آمیختگی نسبت به مدل لیندبلاد (با وفاداری 0.516 و خلوص 0.62) نشان می‌دهد. همچنین آنتروپی پایین‌تر (0.47 در مقابل 0.54) در مدل لانگوین، حاکی از حفظ بهتر انسجام و نظم کوانتومی در شبیه‌سازی‌ها است.

از سوی دیگر، مدل لیندبلاد با نزدیکی بیشتر به توصیف فیزیکی واقعی انتشار کوانتومی، در برخی جنبه‌های تحلیلی قوی‌تر ظاهر می‌شود. به طور خاص، این مدل بهبود خلوص تحت کنترل تناوبی را 10.5% نشان می‌دهد که در مقایسه با 8.9% در مدل لانگوین، کارایی تحلیلی بالاتری را در این حوزه ثبت می‌کند. با این حال، هر دو مدل به طور همسو تأیید می‌کنند که کنترل تناوبی منجر به بهبود 12–13% در وفاداری و حفظ حدود 10% انسجام بیشتر می‌شود.

نتیجه‌گیری کلی از پژوهش

نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که کنترل تناوبی (DD) در هر دو چارچوب لیندبلاد و لانگوین به‌طور معنی‌داری باعث افزایش وفاداری انتقال و مهار فروپاشی کوانتومی می‌شود. مدل لانگوین DDبا ایجاد یک رفتار نرم‌تر و پایدارتر در گذر زمان، شرایط آزمایشگاهی واقعی را بهتر تقریب می‌زند، در حالی که مدل لیندبلاد DD با ارائه‌ی نرخ‌های مؤثر واپاشی، تصویر تحلیلی دقیق‌تری از پویایی انسجام سیستم عرضه می‌کند. این امر نشان می‌دهد که استفاده از یک مدل ترکیبی، که در آن میانگین‌گیری آماری لانگوین بر روی نرخ‌های پایه‌ی لیندبلاد اعمال شود، می‌تواند برای طراحی کنترل‌های بهینه در سامانه‌های کوانتومی واقعی مؤثر باشد.

در جمع‌بندی نهایی، این پژوهش با مقایسه‌ی مستقیم دو مدل، تأیید کرد که کنترل تناوبی به‌طور متوسط منجر به بهبود 12 تا 13 درصدی وفاداری و تقریباً 10 درصدی خلوص می‌گردد. نقطه قوت مدل لانگوین در شبیه‌سازی رفتار یکنواخت و پایدار سیستم، و مزیت مدل لیندبلاد در ارائه‌ی توصیف تحلیلی دقیق‌تر از پویایی کوانتومی است. بنابراین، تلفیق دیدگاه آماری مدل لانگوین با دقت تحلیلی مدل لیندبلاد، می‌تواند چارچوب محکم‌تری برای توسعه‌ی استراتژی‌های کنترل بهینه در سیستم‌های کوانتومی تحت تأثیر نویز فراهم آورد.

منابع

[1] Manzano, D., *A short introduction to the Lindblad master equation.* Aip advances, 2020. **10**.(2)

[2] Lewis-Swan, R., et al., *Dynamics of quantum information.* Nature Reviews Physics, 2019. **1**(10): p. 627–634.

مدل‌سازی چندمقیاسی نانوکامپوزیت $Fe_3O_4@CoFe_2O_4$: از دینامیک اسپینی تا هایپرترمیا

میرزایی ، حوریه[۱] ؛ احسانی، محمد حسین [۱]؛ علی رمضانی[۲]

[۱] دانشکده فیزیک ، دانشگاه سمنان ، سمنان

[۲] دانشکده شیمی، دانشگاه زنجان، زنجان

چکیده

در این مطالعه، رویکرد چندمقیاسی برای مدل‌سازی رفتار گرمایی نانوکامپوزیت مغناطیسی هسته–پوسته $Fe_3O_4@CoFe_2O_4$، در کاربرد هایپرترمیای مغناطیسی ارائه شد. نانوکامپوزیت، با روش همرسوبی و پوشش‌دهی در حضور عامل پلیمری پلی وینیل پیرولیدون (PVP) تحت امواج فراصوت سنتز شد. نتایج مشخصه‌یابی نشان‌دهنده اندازه بلورک حدود ۱۸–۱۷ nm (XRD) ، مغناطش اشباع ۶۰.۶۸ emu/g (VSM) و سطح ویژه ۴۲.۰۳ m^2/g (BET) بود. در چارچوب یادگیری ماشین مبتنی بر فیزیک (PIML)، قیود فیزیکی برگرفته از معادله Landau–Lifshitz–Gilbert(LLG) و انتقال حرارت زیستی به‌طور موثر در تابع هزینه شبکه عصبی اعمال شد تا افزایش دمای مؤثر (ΔT) و نرخ جذب ویژه (SAR) پیش‌بینی شوند. مدل توسعه‌یافته با دقت بالا (خطای کمتر از ۵٪)، رفتار غیرخطی گرمایش و نقش کوپلینگ تبادلی در فصل‌مشترک هسته–پوسته را به طور موثر بازتاب داد. تحلیل حساسیت نشان داد که مغناطش اشباع، نسبت هسته به پوسته و سطح ویژه بیشترین تأثیر را بر بازده گرمایشی دارند. پیکربندی بهینه تخمین زده شده با (هسته حدود ۱۷ nm، پوسته حدود ۱ nm) منجر به افزایش دمای تقریبی $\Delta T \approx 7.5\ ^oC$ گردید. این نتایج نشان می‌دهد که ادغام دینامیک میکروسکوپی با داده‌های تجربی در چارچوب PIML، راهبردی مؤثر برای طراحی هوشمندانه نانوذرات در کاربردهای هایپرترمیا است.

واژه های کلیدی: ***هایپرترمیای مغناطیسی؛ نانوکامپوزیت هسته–پوسته؛ یادگیری ماشین مبتنی بر فیزیک (PIML) ؛ مدل‌سازی چندمقیاسی؛ دینامیک اسپینی***

Spin Dynamics and Hyperthermia Modeling of $Fe_3O_4@CoFe_2O_4$ Nanocomposites: A Multi-scale Approach

Hourieh, Mirzaei[1]; Ehsani, Mohammad Hossein[1]; Ali Ramazani[2]

[1] Department of Physics, University of Semnan, Semnan,
[2] Department of Chemistry, University of Zanjan, Zanjan,

Abstract

This study presents a multiscale approach to model the thermal behavior of $Fe_3O_4@CoFe_2O_4$ core–shell nanocomposites for magnetic hyperthermia. The material was synthesized via ultrasonic-assisted co-precipitation with PVP, yielding a 17–18 nm crystallite size (XRD), 60.68 emu/g saturation magnetization (VSM), and 42.03 m^2/g surface area (BET). Using a Physics-Informed Machine Learning (PIML) framework, Landau–Lifshitz–Gilbert (LLG) and bio-heat transfer constraints were integrated into the neural network's loss function to predict temperature rise (ΔT) and Specific Absorption Rate (SAR). The model accurately captured nonlinear heating and interfacial exchange coupling (error < 5%). Sensitivity analysis identified saturation magnetization, core-to-shell ratio, and surface area as key efficiency drivers. An optimized configuration (17 nm core/1 nm shell) achieved $\Delta T \approx 7.5\ ^\circ C$. This PIML approach, merging microscopic dynamics with experimental data, offers an effective strategy for intelligent nanoparticle design in hyperthermia.

Keywords: *Magnetic hyperthermia; core-shell nanocomposite; physics-informed machine learning (PIML); multiscale modeling; spin dynamics*

PACS No. *60-70-80*

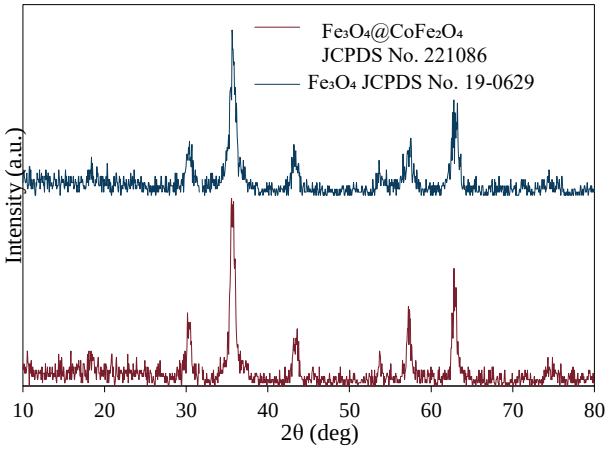
۱. مقدمه

هایپرترمیا مغناطیسی (Magnetic Hyperthermia, MHT) روشی نوین برای درمان تومورهاست که با افزایش دمای موضعی بافت سرطانی به بازه ۴۵°C –۴۲، موجب مهار رشد سلولی و القای آپوپتوز می‌شود [۱]. بازده این روش مستقیماً به خواص مغناطیسی و ساختاری نانوذرات وابسته بوده و درک رفتار گرمایی آن نیازمند بررسی دینامیک اسپینی و فرآیندهای چندمقیاسی است. نانوکامپوزیت مغناطیسی هسته–پوسته Fe_3O_4@$CoFe_2O_4$ به دلیل ترکیب رفتار نرم‌مغناطیسی Fe_3O_4 و آنیزوتروپی بالای $CoFe_2O_4$، گزینه مناسبی برای MHT محسوب می‌شوند[۲]. کوپلینگ تبادلی در فصل‌مشترک هسته–پوسته، هیسترزیس را تقویت و اتلاف انرژی مغناطیسی را افزایش می‌دهد که نقش کلیدی در بازده گرمایش دارد [۱،۲]. با توجه به وابستگی غیرخطی گرمایش به پارامترهایی چون اندازه بلورک، آنیزوتروپی و نسبت هسته به پوسته، مدل‌سازی تحلیلی این سامانه‌ها محدود است. در این مطالعه از یادگیری ماشین مبتنی بر فیزیک (Physics-Informed Machine Learning, PIML) استفاده شد که قیود فیزیکی مستخرج از دینامیک مغناطش و انتقال حرارت زیستی را مستقیماً در تابع هزینه مدل اعمال می‌کند [۳،۴]. داده‌های تجربی(XRD ، VSM ، BET) با چارچوب PIML ادغام شدند تا پیش‌بینی دقیق نرخ جذب ویژه (SAR) و افزایش دما (ΔT) و بهینه‌سازی پارامترهای کلیدی نانوذرات امکان‌پذیر شود. رویکرد چندمقیاسی ارائه‌شده، پلی میان دینامیک اسپینی نانومتری و پاسخ گرمایی ماکروسکوپی ایجاد کرده و مسیری مؤثر برای طراحی هدفمند نانوذرات مغناطیسی در کاربردهای هایپرترمیا فراهم می‌کند [۵].

۲. روش های تجربی و مشخصه یابی

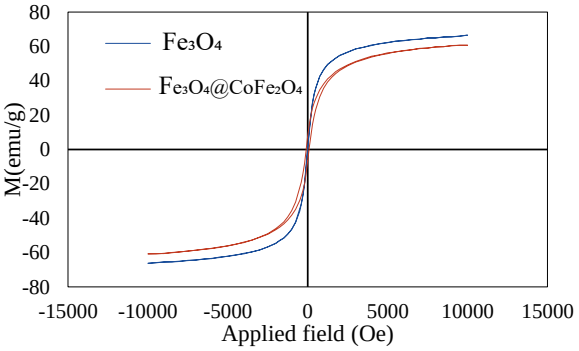
نانوذرات Fe_3O_4 و $CoFe_2O_4$ به روش هم‌رسوبی سنتز شدند. برای سنتز نانوکامپوزیت هسته–پوسته Fe_3O_4@$CoFe_2O_4$ ابتدا ۰.۷ گرم Fe_3O_4در آب دیونیزه پراکنده و ۳۰ دقیقه سونیکاسیون شد. سپس محلول PVP (۰.۳ درصد وزنی) افزوده و ۱۵ دقیقه سونیکاسیون شد. در ادامه، ۰.۳ گرم $CoFe_2O_4$ اضافه و ۴۵ دقیقه فراصوت شد. مخلوط ۱۲ ساعت همزده شد، در ۶۰°C خشک و پس از آن در۳۰۰°C کلسینه شد تا برهم‌کنش تبادلی در فصل‌مشترک هسته–پوسته برقرار شود.

آنالیز پراش اشعه ایکس (XRD) با استفاده از دستگاه PHILIPS D8 (Cu-Kα, λ=1.5406Å) نشان داد که پیک‌های اصلی در محدوده 2θ=۳۰-۶۳° با ساختار اسپینلی Fe_3O_4 ونانوکامپوزیت Fe_3O_4@$CoFe_2O_4$ تطابق دارند. میانگین اندازه بلورک‌ها با فرمول Scherrer حدود ۱۸–۱۷ nm بدست آمد (شکل ۱).



شکل ۱: الگوی XRD نانوکامپوزیت Fe_3O_4@$CoFe_2O_4$ و نانوذرات Fe_3O_4

منحنی‌های M–H در دمای اتاق (شکل ۲) نشان دادند که نانوذرات Fe_3O_4 با Ms= ۶۶.۵emu/g رفتار ابرپارامغناطیس دارد و نانوکامپوزیت Fe_3O_4/$CoFe_2O_4$ هیسترزیس مغناطیسی با Ms= ۶۰.۶۸emu/g، Mr=۷.۴emu/g و Hc =۸۵Oe نشان داد. افزایش Mr و ظهور Hc ناشی از کوپلینگ مغناطیسی هسته–پوسته است که رفتار ابرپارامغناطیس به هیسترزیس تبدیل می کند. کاهش جزئی Ms به دلیل افزودن فاز $CoFe_2O_4$ با مگنتیزاسیون کمتر و اثرات سطحی است. این ویژگی‌ها برای کاربردهای هایپرترمیا و بازده گرمایشی در میدان‌های مغناطیسی متناوب حائز اهمیت است[۲].



شکل۲: منحنی حلقه پسماند Fe_3O_4 و نانوکامپوزیت $Fe_3O_4@CoFe_2O_4$

آنالیز BET با استفاده از دستگاهBELSORP Mini X، مساحت سطح ویژه برابر با ۴۲.۰۳ m^2/g و قطر متوسط حفرات ۸.۹۱ nm را نشان داد که نشان‌دهنده ساختار متخلخل مناسب برای انتقال موثر انرژی گرمایی در هایپرترمیای مغناطیسی است.(جدول ۱).

جدول۱: سطح ویژه، حجم و قطر حفرات نانوکامپوزیت $Fe_3O_4@CoFe_2O_4$

آزمون	مقدار
سطح ویژه BET	42.03 m^2/g
حجم حفرات کل	0.094 cm^3/g
قطر متوسط حفرات	8.91 nm
مساحت سطح Langmuir	47.3 m^2/g

۳. از دینامیک اسپینی تا مدل سازی ماکروسکوپیکی

۳.۱. دینامیک مغناطش و کوپلینگ تبادلی

در مقیاس نانومتری، تکامل زمانی مغناطش تحت میدان مغناطیسی متناوب را میتوان به صورت مفهومی با معادله LLG توصیف کرد:

$$\frac{dM}{dt} = -\gamma\left(M \times H_{eff}\right) + \frac{\alpha}{M_s}\left(M \times \frac{dM}{dt}\right) \qquad (۱)$$

که در آن، γ نسبت ژیرومغناطیسی، α ضریب میرایی Gilbert، Ms مغناطش اشباع و H_{eff} میدان مؤثر شامل اعمال میدان خارجی، برهم‌کنش تبادلی، آنیزوتروپی مغناطیسی و اثرات سطحی است. در نانوکامپوزیت هسته–پوسته $Fe_3O_4@CoFe_2O_4$، کوپلینگ تبادلی بین هسته نرم مغناطیسی و پوسته سخت می‌تواند منجر به افزایش آنیزوتروپی مؤثر و ظهور حلقه هیسترزیس شود که این امر افزایش اتلاف انرژی مغناطیسی تحت میدان متناوب را به دنبال دارد[۲].

۳.۲. پل چندمقیاسی: از اتلاف اسپینی تا گرمایش زیستی

نرخ جذب ویژه (SAR) ناشی از اتلاف هیسترزیس مغناطیسی تحت میدان مغناطیسی متناوب با دامنه متوسط به‌صورت زیر بیان می‌شود:

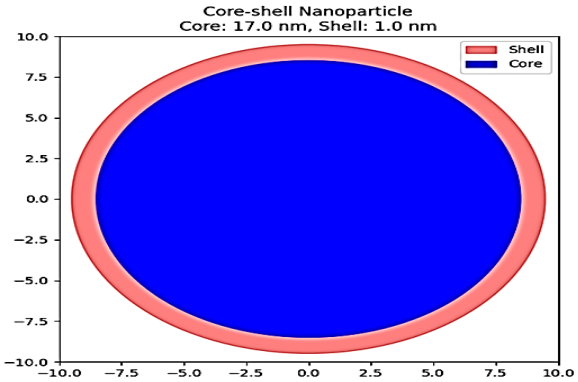
$$SAR = (\mu_0 f/\rho) \oint M.dH \qquad (۲)$$

که در آن μ_0 نفوذپذیری مغناطیسی خلاء، f فرکانس میدان، ρ چگالی جرمی نانوذرات و انتگرال روی یک سیکل کامل حلقه هیسترزیس محاسبه می‌شود. توان گرمایی تولیدشده به‌عنوان جمله چشمه در معادله انتقال حرارت زیستی Pennes وارد می‌شود:

$$\frac{\rho_{tissue} C_{tissue} \partial T}{\partial t} = k\,\nabla^2 T - \rho_{blood} C_{blood} \omega_b (T - T_{blood}) + \rho_{\{NP\}} \cdot SAR \qquad (۳)$$

k ضریب هدایت حرارتی بافت، ω_b نرخ پرفیوژن خون و ρ_{NP} غلظت نانوذرات در بافت است. این چارچوب، پلی چندمقیاسی میان دینامیک مغناطیسی مؤثر در بازه زمانی نانوثانیه تا میکروثانیه و گرمایش ماکروسکوپی بافت در مقیاس ثانیه فراهم می‌کند [۵].

۳.۳. سیستم پیچیده و ضرورت یادگیری ماشین فیزیک‌محور



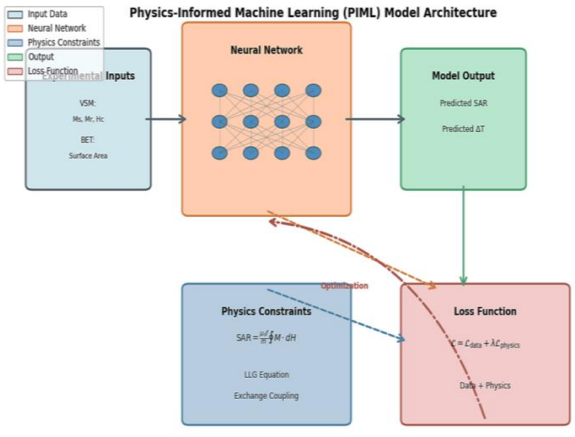
شکل ۳ :شماتیک نانوذره هسته–پوسته در محیط شبیه‌سازی؛ شامل هسته Fe_3O_4 با قطر تقریبی۱۷ nm و پوسته $CoFe_2O_4$ با ضخامت حدود ۱ nm که به عنوان پیکربندی بهینه تخمینی در مدل PIML استفاده شد.

وابستگی غیرخطی SAR و افزایش دما ΔT به پارامترهای نظیر اندازه بلورک، آنیزوتروپی مؤثر، نسبت هسته به پوسته و مساحت سطح ویژه مدل‌سازی تحلیلی صریح را محدود می‌سازد. در چنین سیستم‌های چندمقیاسی، رفتار کل سیستم لزوما از جمع خطی اجزا قابل استخراج نیست و نیازمند رویکردی داده محور اما فیزیک آگاه هست [۳،٤]. در این مطالعه از چارچوب PIML استفاده شد که در آن، پارامترهای پنهان ساختاری از جمله نسبت هسته به پوسته به‌صورت متغیرهای نهفته از داده‌هایXRD ، VSMو BET استنتاج می‌شوند و خروجی مدل نشان می‌دهد پیکربندی بهینه تخمین‌زده‌شده هسته ≈ ۱۷ nm، پوسته ≈ ۱nm منجر به افزایش دمای مؤثر حدود $\Delta T \approx 7.5\ ^\circ C$ می‌شود[٤،٦].

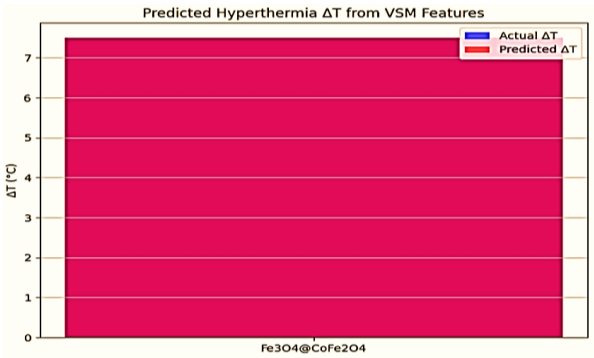
$$Loss = Loss_{data} + \lambda\ Loss_{physics} \qquad (٤)$$

که در آن، $Loss_{physics} = \|SAR_{NN} - (\mu_0 f/m) \oint M \cdot dH\|^2$

این رویکرد، شبکه عصبی را ملزم می سازد تا مانیفولد فیزیکی سیستم را بیاموزد، نه صرفاً همبستگی‌های آماری، که این امر منجر به افزایش پایداری، کاهش نیاز به داده و بهبود تعمیم پذیری مدل می شود[٦–٨].



شکل ٤: معماری مدل PIML با ورودی های VSM, BET و اعمال قیود فیزیکی SAR در تابع هزینه



شکل ٥: مقایسه خروجی مدل PIML با داده‌های تجربی .ΔT خطای کمتر از ٥٪ بیانگر کارایی ادغام ویژگی‌های VSM و BET در چارچوب PIML

۴. نتیجه گیری

این تحقیق نانوکامپوزیت $Fe_3O_4@CoFe_2O_4$ را بررسی و نشان داد مدل PIML با شناسایی گرمایش غیرخطی پایدار (ناشی از کوپلینگ اسپینی و هیسترزیس)، تعادل بهینه بین دقت و سرعت ایجاد می‌کند. تحلیل حساسیت نشان داد مگنتیزاسیون اشباع، نسبت هسته به پوسته و سطح ویژه حیاتی‌ترین پارامترها بوده و این رویکرد چندمقیاسی ابزاری قدرتمند برای پیش‌بینی بازده گرمایشی است، هرچند کاربرد بالینی نیازمند مطالعه برهم‌کنش‌های زیستی است.

۵. مراجع

[۱] V. T. K. Oanh, et al.; “Enhanced magnetic hyperthermia and MRI performance of $CoFe_2O_4$/$MnFe_2O_4$ core/shell nanostructures”; J. Electron. Mater.; 54(3), 2065–2079 (2025)
[۲] V. T. K. Oanh, et al.; “Fe_3O_4/$CoFe_2O_4$ core-shell nanoparticles with enhanced magnetic properties for hyperthermia application”; Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol.; 15(2), 025005 (2024)
[۳] A. Aftabi, A. Babakhani, and R. Khoshlahni; "Optimized Zn substituted $CoFe_2O_4$ nanoparticles for high efficiency magnetic hyperthermia in biomedical applications"; *Scientific Reports*; 15, 10039 (2025)
[۴] G. E. Karniadakis, I. G. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, and L. Yang; "Physics-informed machine learning"; *Nature Reviews Physics*; 3, 422–440 (2021); DOI: 10.1038/s42254-021-00314-5
[۵] Z. Ma, G. Jiang, Y. Hu, and J. Chen; “A review of physics-informed machine learning for building energy modeling”; Applied Energy; 381, 125169 (2025)
[۶] M. Faegh, S. Ghungrad, J. P. Oliveira, P. Rao, and A. Haghighi; “A review on physics-informed machine learning for process-structure-property modeling in additive manufacturing”; Journal of Manufacturing Processes; 133, 524–555 (2025)
[۷] M. Ahmadi, D. Biswas, M. Lin, F. D. Vrionis, J. Hashemi, and Y. Tang; "Physics-informed machine learning for advancing computational medical imaging: integrating data-driven approaches with fundamental physical principles"; *Artificial Intelligence Review*; 58, 297 (2025)
[۸] K. Pateras, et al.; "Physics-informed machine learning for automatic model reduction in chemical reaction networks"; *Scientific Reports*; 15, 7980 (2025)

شبیه سازی عددی رفتار هیدرودینامیکی سیال سوسپانسیون در جریان تیلور–کوئت

صفری، سولماز[۱]؛ حمزه پور، حسین[۱]؛ بحرانی، سید امیر[۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران
[۲] IMT نورد اروپا موسسه معادن و مخابرات، دانشگاه لیل، مرکز انرژی و محیط‌زیست، لیل، فرانسه

چکیده

مهاجرت اینرسی ذرات با چگالی برابر سیال در جریان ویسکوز نیوتنی و آرام حلقوی کوئت به‌صورت عددی مورد بررسی قرار گرفت. در این مطالعه، از یک مدل اویلری–لاگرانژی با کوپل دوسویه در چارچوب دینامیک سیالات محاسباتی برای حل میدان سیال و ردیابی ذرات استفاده شده است. نیروهای هیدرودینامیکی شامل درگ، لیفت اینرسی ناشی از گرادیان برش، جرم افزوده، گرادیان فشار و سهم تنش ویسکوز، به‌همراه برخورد ذره–دیوار لحاظ گردید. نتایج نشان می‌دهند که ذرات کوچک‌تر به سمت استوانه بیرونی متمرکز می‌شوند، زیرا برای آن‌ها نیروی لیفت ناشی از گرادیان برش بر عدم‌تعادل گریز از مرکز غالب است.

واژه های کلیدی: *جریان کوئت دایره‌ای، سوسپانسیون، کوپل دوسویهٔ اویلری–لاگرانژی، ذرات با شناوری خنثی.*

Numerical simulation of the hydrodynamic behavior of a suspension fluid in Taylor–Couette Flow

Safari, Solmaz[1]; Hamzehpour, Hossein[1]; Bahrani, S.Amir[2]

[1] Department of Physics, K. N. Toosi University of Technology, Tehran 15875-4416, Iran
[2]IMT Nord Europe, Institut Mines Télécom, Univ. Lille, Center for Energy and Environment, F-59000 Lille, France

Abstract

The inertial migration of neutrally buoyant particles in a laminar Newtonian circular Couette flow (CCF) was numerically investigated. In this study, a two-way coupled Eulerian-Lagrangian computational fluid dynamics (CFD) framework was employed to solve the fluid field and track the particles. Hydrodynamic forces considered included drag , shear-induced inertial lift , added mass, pressure gradient, and viscous stress contributions, along with particle-wall collisions. The results indicated that smaller particles migrate toward the outer cylinder, as the shear-induced lift force dominates over the centrifugal imbalance for these particles.
***Keywords**: Circular Couette flow, Suspensions, Eulerian-Lagrangian two-way coupling, neutrally buoyant particle.*

PACS No.

مقدمه

جریان بین دو استوانه متحدمرکز دوار(سامانه تیلور–کوئت) به عنوان چارچوبی کلیدی برای بررسی ناپایداری‌های هیدرودینامیکی و گذار به آشوب در طیف گسترده‌ای از سیالات پیچیده، از جمله مایعات ویسکوالاستیک، جریان های چندفازی تعلیق های ذره ای مورد استفاده قرار می گیرد[۳-۱]. در سال ۲۰۲۱، کانگ و میربود [۴] جریان سوسپانسیون های متراکم و غیرکلوئیدی را در سامانهٔ تیلور–کوئت بررسی کردند. آن ها با استفاده از مدل تعادل سوسپانسیون، نشان دادند که جریان از حالت چرخشی به گردابه های متضاد چرخش و موج دار تغییر می کند که باعث افزایش

گشتاور و اصطکاک می شود. لی و همکاران[۵] تاثیر نیروی روانکاری و عدد رینولدز بر مهاجرت ذرات در جریان کوئت دوران را بررسی کردند. نتایج آن ها نشان داد که نیروی روانکاری باعث افزایش تمرکز ذرات در نزدیکی استوانهٔ داخلی می شود، درحالی که افزایش عدد رینولدز ذرات را به سمت بیرون جا به جا می کند. با استفاده از روش های حدی، آن ها یک مدل نیرو توسعه دادند و چندین موقعیت تعادلی متمایز برای ذره شناسایی کردند، به طوری که ویسکوزیتهٔ سیال پایداری جریان را تعیین می کند. این یافته با مشاهدات تجربی قبلی موذن و همکاران[۶] همخوانی دارد. در این مطالعه، اثر اندازهٔ ذرات خنثی شناوری در یک سوسپانسیون فوق رقیق با کسرحجمی $\phi_b = ۰/۰۰۰۰۵$ بر شعاع و زمان تعادلی آن ها در جریان تیلور–کوئت بررسی می شود.

معادلات حاکم

رویکرد این مطالعه مبتنی بر چارچوب اویلری–لاگرانژی است، به طوری که فاز سیال با روش حجم محدود روی شبکه اویلری حل شد و ذرات مطابق قوانین نیوتن ردیابی شدند، فرض کردیم سیال نیوتنی و تراکم ناپذیر و کوپلینگ دو طرفه حرکت سیال–ذره در رژیم فوق رقیق، برهم کنش ذره–ذره[۷] گرفته نشده و تنها برهم کنش دره–دیواره لحاظ شده است. معادلات اصلی حرکت ذره عبارتند از:

$$m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \mathbf{F}_{f,p} + \mathbf{F}^{col}_{wall,p} \qquad (۱)$$

$$\mathbf{I}_p \frac{d\boldsymbol{\Omega}_p}{dt} = \mathbf{M}_{j,p} \qquad (۲)$$

در اینجا p را ذره ، m_p ، $\boldsymbol{F}_{f,p}$ و $\mathbf{F}^{col}_{\omega all,p}$ به ترتیب جرم ذره، نیروی برهم کنش ذره – سیال و نیروی برخورد / بازگشت ذره – دیواره هستند. در معادله (۲)، $\mathbf{I}_p$ تانسور ممان اینرسی ذره ، $\boldsymbol{\Omega}_p$ سرعت روایه ای و $\mathbf{M}_{j,p}$ نیروی تماس و گشتاور تماس است که بر ذره ی p توسط تماس آن با دیواره j وارد می شود.

$$\mathbf{F}_{f,p} = \mathbf{F}_{D,p} + \mathbf{F}_{\nabla p,p} + \mathbf{F}_{\nabla \tau,p} + \mathbf{F}_{vm,p} + \mathbf{F}_{lift,p} \qquad (۳)$$

نیروهای هیدرودینامیکی وارد بر ذره شامل نیروی درگ $\mathbf{F}_{D,p}$، نیروی گرادیان فشار $\mathbf{F}_{\nabla p,p}$، تنش ویسکوز $\mathbf{F}_{\nabla \tau,p}$، نیروی جرم مجازی $\mathbf{F}_{vm,p}$ و نیروی لیفت $\mathbf{F}_{lift,p}$ است.

برای فاز سیال، معادلات پیوستگی و تکانه به شکل زیر بیان می‌شوند:

$$\frac{\partial \phi_f}{\partial t} + \nabla . (\phi_f \mathbf{u}_f) = 0 \qquad (۴)$$

$$\partial_t(\phi_f \rho_f \mathbf{u}_f) + \nabla . (\phi_f \rho_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f) = -\nabla P + \nabla . (\phi_f \boldsymbol{\tau}) - \mathbf{A}_p \qquad (۵)$$

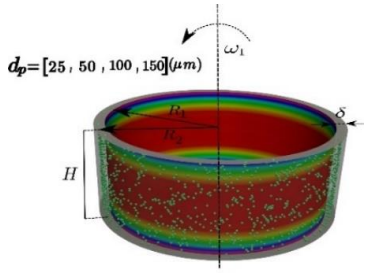
در اینجا ϕ_f کسر حجمی فاز مایع، $\mathbf{u}_f$ سرعت سیال و ρ_f چگالی سیال را نشان می دهد. همچنین P فشار هیدرودینامیکی (فیزیکی)و $\boldsymbol{\tau}$ تنش ویسکوز سیال است. $\mathbf{A}_p$ ترم چشمه است که تبادل تکانه بین سیال و ذرات را مدل می‌کند.

$$\mathbf{A}_p = \frac{1}{V_{cell}} \sum_{p \in cell} (\mathbf{F}_{D,p} + \mathbf{F}_{\nabla p,p} + \mathbf{F}_{\nabla \tau,p} + \mathbf{F}_{vm,p} + \mathbf{F}_{lift,p}) \qquad (۶)$$

نتایج

مطالعه حاضر جریان ذرات پراکنده را بین دو سیلندر هم‌مرکز عمودی بررسی می‌کند شکل (۱). سیلندر داخلی با سرعت زوایه ای ω_1 می‌چرخد و سیلندر خارجی ساکن است. و با چگالی $(\rho_f = \rho_p = ۱۱۹۰\ Kg/m^3)$ در سیالی با ویسکوزیته $\mu_f = ۰/۰۰۷۸\ Pa.s$ قرار دارند. شعاع استوانه داخلی R_1 و شعاع استوانه خارجی R_1 به ترتیب برابر با ۱۶ و ۱۷/۵ میلی متر است. و همچنین ارتفاع آن H برابر ۱۵ میلی متر است. برای کسرحجمی $\phi_b = ۰/۰۰۰۰۵$، تعداد ذرات با قطر ۱۵۰، ۱۰۰، ۵۰ و ۲۵ میکرون به‌ترتیب برابر ۸۱، ۲۷۰، ۱۸۰۰ و ۱۴۴۶۴ ذره است. مختصات شعاعی بدون بعد ذره به این صورت $R_p^* = \frac{R_p - R_1}{\delta}$ و R_p مختصات شعاعی ذره است. همچنین زمان بی بعد با $t^* = t/T$ و $T = \frac{2\pi}{\omega_1}$ تعریف شده است. در این مطالعه، پارامترهای تجربی مؤذن و همکاران [۶] بدون تغییر در شبیه‌سازی‌ها به کار رفت تا صحت پیش‌بینی مدل عددی بررسی شود. پیکربندی تک قطر $d_p = ۵۰\ (\mu m)$ به عنوان حالت مرجع درنظر گرفته شد.

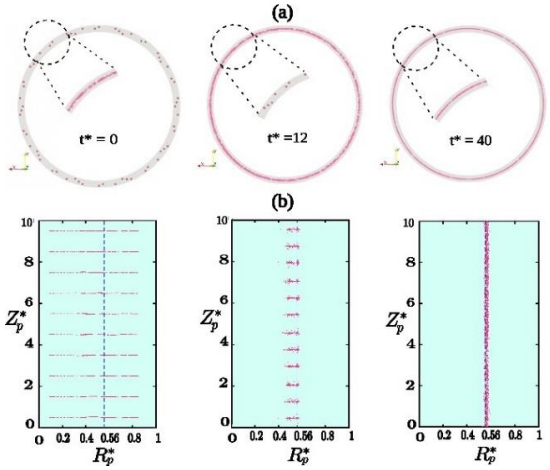
$\phi = \frac{V_p}{V_g}$ نسبت حجم اشغال شده توسط ذرات به حجم کل بخش



شکل ۱ : شماتیکی از هندسه تیلور-کوئت با توزیع ذرات

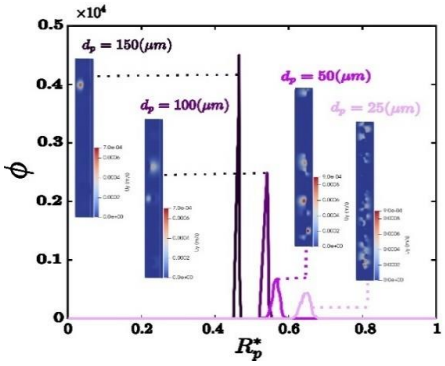
حلقوی را نشان می‌دهد. برای محاسبهٔ آن، فاصلهٔ حلقوی به ۱۵۰۰ بخش حلقوی یکنواخت تقسیم شده است، که در آن V_g حجم بخش حلقوی متناظر است. برخلاف آمار مبتنی بر شمارش، این شاخص مبتنی بر کسر حجمی قابلیت تفسیر فیزیکی دارد و از نظر کمی نیز برای توصیف تمرکز محلی ذرات مستحکم‌تر است. موقعیت شعاعی میانگین ذرات $< R_p^* >$ در زمان اولیه $t^* = ۰$ برابر ۰/۵ بوده که نشان دهنده توزیع یکنواخت اولیه است. موقعیت تعادلی شعاعی ذرات $< R_p^* >_{eq}$ پس از رسیدن سیستم به حالت پایدار و میانگین گیری زمان برابر ۰/۵۶ به دست آمده است.

$$\langle R_p^* \rangle = \frac{\langle R_p \rangle - R_1}{\delta} = \frac{\frac{1}{N_p}\sum R_p - R_1}{\delta}$$



شکل ۲ : (a) نمای بالایی (b) توزیع ذرات در صفحه R-Z در زمان های مختلف. $d_p = ۵۰$ (μm)، $Re = ۸۵$، $\phi_b = ۰/۰۰۰۰۵$ و $\frac{\rho_p}{\rho_f} = ۱$

شکل ۲(a) نمای بالایی از توزیع ذرات در شکاف حلقوی کوئت دایره‌ای را نشـــان می‌دهد. ذرات ابتدا یکنواخت هســـتند و با گذرزمان به سمت وسط شکاف مهاجرت کرده و یک باند حلقوی حول محور تشکیل می‌دهند که نمایانگر حالت تعادلی است. شکل ۲(b) توزیع زمانی ذرات در صـفحه R-Z و تمرکز شـعاعی آنها را نشـــان می‌دهد. میانگین شـــعاعی ذرات به صـــورت بی‌بعد، با R_p^* نمایش داده شده است.



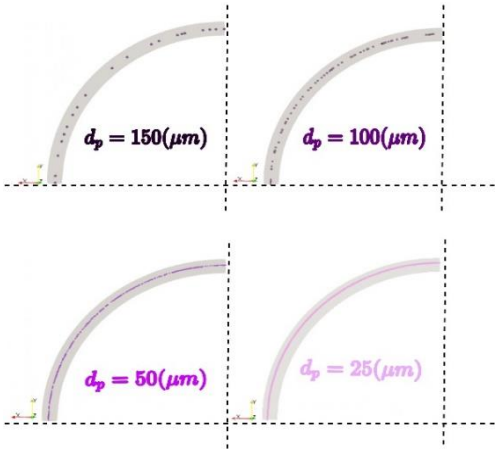
شکل ۳ : توزیع شعاعی کسرحجمی ذرات به صورت تابعی از مختصات شعاعی بدون بعد. $Re = ۸۵$، $\phi_b = ۰/۰۰۰۰۵$ و $\frac{\rho_p}{\rho_f} = ۱$

نتایج شکل (۳) نشان می‌دهد که ذرات بزرگ‌تر نزدیک استوانهٔ داخلی و ذرات کوچک‌تر در نواحی بیرونی‌تر به حالت تعادل می‌رسند. پیک کسر حجمی ذرات بزرگ‌تر تیزتر است، زیرا هم تمرکز شعاعی آن‌ها بیشتر است و هم حجم هر ذره بزرگ‌تر است ($V_p \propto d_p^3$) و حتی تعداد کم آن‌ها نیز کسر حجمی محلی بیشتری تولید می‌کند. ذرات کوچک‌تر به دلیل نیروهای لیفت ناشی از گرادیان برش که برای آن‌ها نسبتا قوی‌تر است و همچنین نیروی گریز از مرکز ضعیف‌تر، به سمت بیرون رانده می‌شوند. نسبت این نیروها به این صورت است: $\frac{F_{lift}}{F_{imb}} \sim \frac{G}{a_p}$ در این رابطه G، نرخ برشی موثر آزیموتال در هندسه استوانه ای است که به صورت

$$G = \left| \frac{\partial u_{f,\theta}}{\partial R} - \frac{u_{f,\theta}}{R} \right| \qquad (۷)$$

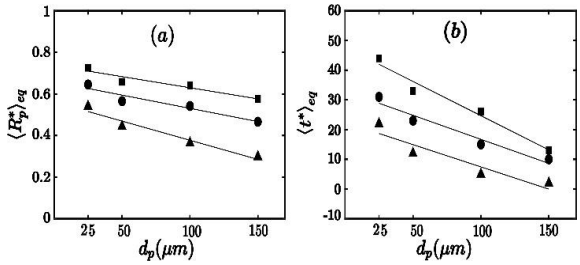
تعریف می شود. در اینجا $u_{f,\theta}$ مولفهٔ آزیموتال سرعت سیال، R مختصهٔ شعاعی، $\frac{\partial u_{f,\theta}}{\partial R}$ گرادیان شعاعی سرعت دورانی و $\frac{u_{f,\theta}}{R}$ ترم اصلاح خمیدگی مختصات استوانه‌ای است. a_p نصف قطر ذره است. F_{lift} نیروی لیفت ناشی از گرادیان برش است که ذره را به سمت بیرون می‌راند و F_{imb} نیروی گریز از مرکز ناشی از اختلاف سرعت بین ذره و سیال است که ذره را به سمت دیوارهٔ داخلی می‌کشد. با کاهش اندازهٔ ذره، این نسبت بزرگ‌تر شده و تعادل

شعاعی ذرات کوچک‌تر به سمت استوانهٔ خارجی جابه‌جا می‌شود. این موقعیت‌ها نتیجهٔ رقابت بین نیروی لیفت لختی $(\mathbf{F}_{\text{lift}})_R \sim a_p^4\, G^2)$ ، که ذرات کوچک‌تر را به سمت بیرون می‌راند، و عدم‌توازن گریز از مرکز $(\mathbf{F}_{\text{imb}} \sim a_p^5\, G)$، که ذرات بزرگ‌تر را به سمت داخل می‌کشد، هستند. برای نشان دادن اثر حضور ذرات بر جریان، شکل(۳) مولفهٔ سرعت سیال $\mathbf{U}_y$ را در صفحه Y-Z برای چهار اندازهٔ ذره نشان می‌دهد. ذرات کوچک‌تر لکه‌های بیشتری در میدان سرعت ایجاد می‌کنند.



شکل ۴ :نمای بالایی از توزیع ذرات در حالت تعادل شعاعی . $\text{Re} = ۸۵$، $\phi_b = ۰/۰۰۰۰۵$ و $\frac{\rho_p}{\rho_f} = ۱$

بنابراین ذرات بزرگ‌تر سریع‌تر به تعادل داخلی می‌رسند، در حالی که ذرات کوچک‌تر با گرایش به بیرون، به دلیل نیروی رانش ضعیف‌تر، به آرامی به تعادل می‌رسند. در شکل (۴) نمای بالایی توزیع ذرات نشان داده شده است. با کاهش اندازهٔ ذره d_p ، نوار تمرکز شعاعی (حلقهٔ تعادلی) به سمت استوانهٔ خارجی منتقل می‌شود. این جابه‌جایی ناشی از رقابت میان نیروی لیفت لختی و عدم‌توازن گریز از مرکز است. در شکل ۵(a) با افزایش اندازهٔ ذره d_p و کاهش عدد رینولدز، میانگین شعاع تعادلی $< R_p^* >_{eq}$ کاهش یافته و حلقهٔ تعادلی شعاعی سمت استوانهٔ داخلی منتقل می‌شود. این جابه‌جایی ناشی از رقابت بین نیروی لیفت لختی ناشی از گرادیان برش و عدم‌توازن گریز از مرکز است. در شکل ۵(b) دیده می‌شود که زمان بی‌بعد رسیدن ذرات به تعادل شعاعی، $\langle t^* \rangle_{eq}$، با افزایش عدد رینولدز طولانی‌تر با افزایش اندازهٔ ذره d_p کوتاه‌تر می‌شود . ذرات بزرگ‌تر به دلیل نیروهای لختی قوی‌تر سریع‌تر مهاجرت شعاعی در هر دور کمتر است و زمان بیشتری برای رسیدن به تعادل لازم است.



شکل ۵ : (a) موقعیت های شعاع تعادلی بی بعد ذرات برای قطرهای مختلف ذره d_p (b) میانگین زمان بی بعد ذرات رسیدن به تعادل برحسب قطر ذره. $\phi_b = ۰/۰۰۰۰۵$ و $\frac{\rho_p}{\rho_f} = ۱$. ($\text{Re} = ۱۲۷$ ■) ($\text{Re} = ۸۵$ ●)و ($\text{Re} = ۴۲$ ▲)

نتیجه گیری

نتایج نشان می دهد با کاهش اندازهٔ ذره، هرچند تعداد ذرات افزایش می یابد، شعاع تعادلی همچنان به سمت استوانه ی خارجی جا به جا می شود، این رفتار ناشی از رقابت بین نیروی لیفت لختی و عدم توازن گریز از مرکز است که نسبت $\frac{G}{a_p}$ را به نفع ذرات کوچکتر افزایش می دهد. با افزایش عدد رینولدز، شعاع تعادلی به سمت استوانه خارجی منتقل شده و همچنین میانگین زمان بی بعد برای رسیدن به تعادل $\langle t^* \rangle_{eq}$ با افزایش d_p کاهش می یابد.

مرجع‌ها

[۱] J. F. Morris, "*Toward a fluid mechanics of suspensions*", *Phys. Rev. Fluids*, **5**, 110519, 202.
[۲] C. Kang, M. F. Schatz, and P. Mirbod, "*Hysteresis and ribbons in Taylor–Couette flow of a semidilute non colloidal suspension*", *Phys. Rev. Fluids*, **9**, 023901, 2024.
[۳] M. Moazzen, T. Lacassagne, V. Thomy, and S.. A.Bahrani, "*Friction dynamics of elasto-inertial turbulence in Taylor–Couette flow of viscoelastic fluids*", *Philos. Trans. R. Soc*. **A, 381**, 20220300, 2023.
[۴] C. Kang, and P. Mirbod, "*Flow instability and transitions in Taylor–Couette flow of a semidilute non-colloidal suspension*", *J. Fluid Mech*., **916**, A12, 2021.
[۵] H. Li, X. Ku, and J. Lin, "*Eulerian–Lagrangian simulation of inertial migration of particles in circular Couette flow*", *Phys. Fluids*, **32**, 073308, 2020.
[۶] M. Moazzen, T. Lacassagne, V. Thomy, and S. A. Bahrani, "*Torque scaling at primary and secondary bifurcations in a Taylor–Couette flow of suspensions*", *J. Fluid Mech*., **937**, A2, 2022.
[۷] S. Elghobashi, "*On predicting particle-laden turbulent flows*", *Appl. Sci. Res*., **52**, 309–329, 1994.

هندسه ترمودینامیکی سامانه ای با آمار کوانتومی میانجی

نقی زاده اردبیلی، محمدحسین؛ یحیایی منعم، امید؛ محمدزاده، حسین

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه محقق اردبیلی

چکیده

یک مدل آماری کوانتومی تعمیم‌یافته معرفی می‌شود که با استفاده از یک پارامتر کسری، تغییر پیوسته‌ای بین آمار بوز–اینشتین و فرمی–دیراک را ممکن می‌سازد. با بهره‌گیری از چارچوب هندسه ترمودینامیکی، انحنای اسکالر فضای حالت‌های ترمودینامیکی محاسبه و تحلیل شده است. نتایج نشان می‌دهد که این انحنا در محدوده‌ی خاصی از پارامتر کسری با تغییر شرایط ترمودینامیکی، علامت عوض می‌کند که نشان‌دهنده تغییر بین برهم‌کنش‌های آماری جاذب و دافع است. یافته‌های این پژوهش نشان می‌دهند که حتی حضور مقدار بسیار ناچیزی از جزء بوزونی در سیستم، برای ایجاد یک نقطه بحرانی و ظهور رفتار شبه–بوزونی کافی است. این مطالعه نشان می‌دهد که چگونه ویژگی‌های بحرانی می‌توانند حتی در سیستم‌های عمدتاً فرمیونی نیز بروز کنند.

واژه های کلیدی: *هندسه ترمودینامیکی، تابع توزیع، آمار میانی*

Thermodynamic geometry of a system with an interpolating quantum statistics

Naghizadeh Ardabili, Mohammad Hossein; Yahyayi Monem, Omid; Mohammadzadeh, Hosein

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, University of Mohaghegh Ardabili

Abstract

A generalized quantum statistical model is introduced in which a fractional parameter enables a continuous crossover between Bose–Einstein and Fermi–Dirac statistics. Within the framework of thermodynamic geometry, the scalar curvature of the thermodynamic state space is computed and analyzed. The results show that, within a specific range of the fractional parameter, the curvature changes sign as the thermodynamic conditions vary, indicating a crossover between effective attractive and repulsive statistical interactions. The findings further reveal that even an exceedingly small Bose-like component in the system is sufficient to induce a critical point and the emergence of quasi-Bosonic behavior. This study demonstrates how critical features can manifest even in systems that are predominantly Fermionic.

Keywords: *Thermodynamic Geometry, Distribution Function, Intermediate Statistics*
PACS No. *05*

مقدمه

در فیزیک آماری، ویژگی‌های جمعی سامانه‌های چندذره‌ای معمولاً از طریق توزیع‌های آماری پایه مانند ماکسول–بولتزمن، بوز–اینشتین و فرمی–دیراک توصیف می‌شوند. این توزیع‌ها رفتار آماری ذرات کلاسیکی و کوانتومی سیستم های بس ذره ای را در گستره وسیعی از شرایط فیزیکی، از گازهای رقیق تا سامانه‌های چگال کوانتومی، تعیین می‌کنند و در حوزه‌هایی نظیر ماده چگال، ذرات بنیادی و ترمودینامیک جهان اولیه کاربرد گسترده دارند. مطابق چارچوب استاندارد، ذرات در حد دماهای بالا از آمار ماکسول بولتزمن پیروی می‌کنند و در دماهای پایین که در حوزه کوانتومی است به صورت تمیزناپذیر بوده و به دو کلاس بوزون‌ها و فرمیون‌ها تقسیم می‌شود: بوزون‌ها بدون هیچ محدودیتی می‌توانند یک حالت انرژی را به‌طور مشترک اشغال کنند، در حالی که فرمیون‌ها به دلیل اصل طرد پاولی تنها اجازه حضور یک ذره در هر حالت کوانتومی را دارند. این تمایز

در تقارن تابع موج و در روابط جابجایی یا پادجابجایی عملگرهای خلق و فنا انعکاس می‌یابد[1].

با این حال به دلایل تجربی و نظری فیزیکدانان به تعمیم آمارهای موجود پرداخته اند. در سیستم‌های دوبعدی، الزام تقارن یا پادتقارن تابع موج تحت جای‌گشت ذرات از میان برداشته شده و امکان ظهور آمارهای میانی فراهم می‌شود. پدیده مهمی مانند اثر هال کوانتومی کسری نیز وجود ذراتی با بار و اسپین کسری را مطرح می‌سازد که خارج از چارچوب آمارهای معمول قرار می‌گیرند[2]. همین ویژگی‌ها موجب شده است که طی دهه‌های اخیر، تعمیم‌های گوناگونی برای آمارهای کوانتومی از جمله آمار طرد تبادلی، آمار کسری، q–دگرگون‌ها و آنیون‌ها مطرح و مطالعه شوند. در این راستا، مطالعه توزیع‌های آماری میانی که بتوانند رفتاری پیوسته بین رفتار بوزونی و فرمیونی داشته باشند اهمیت ویژه‌ای یافته است[3,4,5].

در این مقاله تابع توزیع جدیدی را معرفی خواهیم کرد که ترکیبی خطی از تابع توزیع بوزون ها و فرمیون ها است و با تغییر پارامتر δ تغییر بین دو حد بوزونی و فرمیونی را مدل‌سازی می‌کند. برای بررسی خواص آماری و فازهای ترمودینامیکی سیستم، از چارچوب هندسه ترمودینامیکی استفاده می‌کنیم. در این رویکرد، فضای پارامترهای ترمودینامیکی به‌صورت یک خمینه با ساختار متریک تعریف شده و انحنای اسکالر آن نقش مهمی در شناسایی ماهیت برهم‌کنش‌های مؤثر ایفا می‌کند: انحنای مثبت بیانگر رفتار آماری جاذب، انحنای منفی معرف رفتار آماری دافع ، و انحنای صفر متناظر با رفتار آماری بدون برهمکنش است. همچنین تکینگی‌های انحنا می‌توانند نشانگر گذارهای فاز باشد و از این رو تحلیل هندسی ابزاری قدرتمند برای فهم عمیق‌تر آمارهای تعمیم‌یافته فراهم می‌آورد.

آمار کوانتومی میانجی

در این بخش یک تابع توزیع میانجی خطی معرفی می کنیم که ترکیبی خطی از تابع توزیع بوز–انیشتین و فرمی–دیراک است. این آمار کوانتومی به‌طور خاص به یک پارامتر δ تجهیز شده است که در شرایط حدی $\delta = 0$ و $\delta = 1$ ، به‌ترتیب به توزیع‌های بوزونی و فرمیونی معمولی باز می‌گردد. برای مقادیر میانه، این پارامتر نوعی آمار کسری جدید را معرفی می‌کند. فرم این تابع توزیع خطی به صورت زیر است:

$$n_\delta(\epsilon) = (1-\delta)n_B(\epsilon) + \delta n_F(\epsilon), \quad (1)$$

ترکیب توزیع‌های دوگانه در آمار پیشنهادی به‌عنوان ابزاری کلیدی برای برقراری ارتباط بین آمار بوزونی و فرمیونی عمل می‌کند.

کمیت های ترمودینامیکی

در این بخش، با استفاده از تابع توزیع (1)، کمیت‌های ترمودینامیکی انرژی داخلی و تعداد کل ذرات را بدست خواهیم آورد. گاز ایده‌آل D بعدی را در نظر می‌گیریم که رابطه‌ی پراکندگی انرژی–تکانه‌ی آن به‌صورت زیر توصیف می‌شود:

$$\epsilon = \gamma P^\sigma, \quad (2)$$

که در آن P نمایانگر تکانه ذرات و σ نمایانگر نمای پراکندگی است و γ ثابت تناسب است. بر روی حد غیر نسبیتی تمرکز می‌کنیم. در حد غیر نسبیتی، انرژی به‌صورت $\epsilon = \frac{P^2}{2m}$ تعریف می‌شود که در آن m جرم ذرات است و نمای پراکندگی برابر با ($\sigma = 2$) و ثابت تناسب به صورت $\gamma = \frac{1}{2m}$ است [6]. در D بعد، چگالی حالات تک‌ذره، بدون در نظر گرفتن اسپین ذرات، به‌صورت زیر داده می‌شود:

$$\Omega(\epsilon) = \frac{A^D}{\Gamma(\frac{D}{\sigma})}\epsilon^{\frac{D}{\sigma}-1}, \quad (3)$$

که A در آن به صورت زیر است:

$$A = \frac{L\sqrt{\pi}}{\frac{1}{\gamma^\sigma}h}, \quad (4)$$

که در آن L^D حجم یک جعبه D بعدی و h ثابت پلانک است و برای سادگی در ادامه‌ی مقاله فرض می‌کنیم $A = 1$ است. از آنجا که تابع توزیع پیشنهادی به صورت ترکیب خطی از توزیع‌های بوزونی و فرمیونی است، مقادیر میانگین تعداد ذرات و انرژی داخلی سامانه نیز به صورت ترکیب خطی تعداد ذرات و انرژی داخلی، بوزونی و فرمیونی خواهد بود :

$$N_\delta(\epsilon, z) = (1-\delta)N_B + \delta N_F, \quad (5)$$

$$U_\delta(\epsilon, z) = (1-\delta)U_B + \delta U_F, \quad (6)$$

که در آن N_F و N_B به ترتیب تعداد ذرات فرمیونی و بوزونی و U_F و U_B انرژی داخلی فرمیونی و بوزونی هستند. بنابراین انرژی

داخلی و تعداد ذرات در حد ترمودینامیکی به‌صورت زیر بدست می‌آید. برای انرژی داخلی داریم:

$$U = \int_0^\infty \epsilon\, n(\epsilon)\, \Omega(\epsilon)\, d\epsilon\,, \qquad (7)$$

که به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$U = \frac{A^D.d}{s}\beta^{-\left(\frac{D}{\sigma}+1\right)} .\left((1-\delta)Li_{\frac{D}{\sigma}+1}(z) - \delta Li_{\frac{D}{\sigma}+1}(-z)\right), \qquad (8)$$

و برای تعداد کل ذرات داریم:

$$N = \int_0^\infty n(\epsilon)\, \Omega(\epsilon)\, d\epsilon\,, \qquad (9)$$

که به‌صورت زیر به دست می‌آوریم:

$$N = A^D.\beta^{-\frac{D}{\sigma}}\left((1-\delta)Li_{\frac{D}{\sigma}}(z) - \delta Li_{\frac{D}{\sigma}}(-z)\right) \qquad (10)$$

که در آن $z = e^{\beta\mu}$ گریزندگی گاز ، μ پتانسیل شیمیایی و $\beta = 1/k_BT$ است. $Li_n(x)$ نیز مبین تابع پلی‌لگاریتم است.

هندسه ترمودینامیکی

در این بخش به منظور تحلیل آمار کسری در ابعاد D دلخواه از هندسه ترمودینامیکی استفاده می‌کنیم. هندسه ترمودینامیکی بسیاری از آمار های تعمیم یافته تحلیل و بررسی شده اند [5,7,10]. به این منظور، ابتدا عناصر متریک مربوط به فضای پارامترهای ترمودینامیکی را با استفاده از روابط مربوط به تعداد کل ذرات و انرژی داخلی محاسبه می‌کنیم. مشتق‌گیری ها نسبت به پارامتر های ترمودینامیکی $\beta = \frac{1}{k_BT}$ یا $\gamma = -\frac{\mu}{k_BT}$ انجام می‌شود. مؤلفه‌های متریک به‌دست آمده، پایه‌ای برای محاسبه‌ی انحنای اسکالر ترمودینامیکی خواهند بود که ویژگی‌های آماری سیستم را مشخص می‌کند[8,9] . عناصر متریک موسوم به متریک فیشر–رائو به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$g_{\beta\beta} = -\left(\frac{\partial U}{\partial \beta}\right)_\gamma = \frac{A^D.D\left(\frac{D}{\sigma}+1\right)}{\sigma}\beta^{-\left(\frac{D}{\sigma}+2\right)} \left((1-\delta)Li_{\frac{D}{\sigma}+1}(z) - \delta Li_{\frac{D}{\sigma}+1}(-z)\right), \qquad (11)$$

$$g_{\beta\gamma} = -\left(\frac{\partial N}{\partial \beta}\right)_\gamma = \frac{A^D.D}{\sigma}\beta^{-\left(\frac{D}{\sigma}+1\right)} .\left((1-\delta)Li_{\frac{D}{\sigma}}(z) - \delta Li_{\frac{D}{\sigma}}(-z)\right), \qquad (12)$$

$$g_{\gamma\gamma} = -\left(\frac{\partial N}{\partial \gamma}\right)_\beta = A^D.\beta^{-\left(\frac{D}{\sigma}\right)} .\left((1-\delta)Li_{\frac{D}{\sigma}-1}(z) - \delta Li_{\frac{D}{\sigma}-1}(-z)\right), \qquad (13)$$

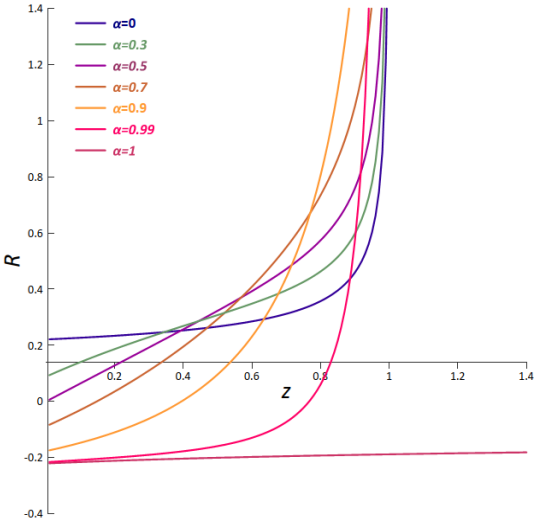
$g_{\gamma\gamma}$ با استفاده از معادله تعداد کل ذرات و استفاده از قاعده زنجیره ای به صورت زیر، محاسبه می شود:

$$\left(\frac{\partial N}{\partial \gamma}\right)_\beta = \left(\frac{\partial N}{\partial z}\right)_\beta \left(\frac{\partial z}{\partial \gamma}\right)_\beta\,, \qquad (14)$$

با مشتق گیری دوباره از روابط (11،12،13) نسبت به β و γ مشتق عناصر متریک یعنی $g_{\beta\beta,\beta}, g_{\beta\beta,\gamma}, g_{\beta\gamma,\gamma}, g_{\gamma\gamma,\gamma}$ نیزحاصل می شود. سیستمی که مورد بررسی قرار داده‌ایم دارای دو درجه آزادی ترمودینامیکی است؛ بنابراین، بُعد سطح ترمودینامیکی در فضای پارامترها برابر با دو می‌باشد. در فضاهای ترمودینامیکی دوبُعدی، انحنای ریچی (Ricci scalar)، با استفاده از عناصر متریک و مشتقات آن به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$R = -\frac{\begin{vmatrix} g_{\beta\beta} & g_{\beta\gamma} & g_{\gamma\gamma} \\ g_{\beta\beta,\beta} & g_{\beta\gamma,\beta} & g_{\gamma\gamma,\beta} \\ g_{\beta\beta,\gamma} & g_{\beta\gamma,\gamma} & g_{\gamma\gamma,\gamma} \end{vmatrix}}{2\begin{vmatrix} g_{\beta\beta} & g_{\beta\gamma} \\ g_{\beta\gamma} & g_{\gamma\gamma} \end{vmatrix}^2}\,, \qquad (15)$$

با توجه به شکل زیر، در حالت $\delta = 0$ که سیستم کاملاً بوزونی است، انحنای ترمودینامیکی مثبت بوده و در $z = 1$ واگرا می‌شود، که این رفتار دقیقاً با نقطه چگالش سیستم بوزونی منطبق است [7]. این مثبت بودن انحنا نشان‌دهنده برهم‌کنش آماری جاذب بین ذرات بوزونی است. در مقابل، برای $\delta = 1$ که سیستم کاملاً فرمیونی است، انحنای ترمودینامیکی در تمام نواحی فیزیکی منفی باقی می‌ماند، که نشان‌دهنده برهم‌کنش آماری دافع بین ذرات فرمیونی است.برای مقادیر میانی δ که سیستم دارای ترکیبی از ویژگی‌های بوزونی و فرمیونی است، مشاهده می‌شود که نواحی مختلفی از سیستم وجود دارند که برهم‌کنش آماری می‌تواند جاذب یا دافع باشد و این نواحی متناسب با دما و گریزندگی سیستم تغییر می‌کنند.



نمودار حاصل از تغییرات انحنای ترمودینامیکی R به‌عنوان تابعی از گریزندگی z به ازای $D=3$، $\sigma=2$ و $\beta=1$

جالب این است که حتی وجود مقدار بسیار کوچک ترم بوزونی در آمار میانجی باعث می‌شود که سیستم یک حد مشخص در $z=1$ داشته باشد. می‌دانیم که در سیستم بوزونی $0\le z\le 1$ است اما برای سیستم فرمیونی تمام مقادیر مثبت گریزندگی مجاز است. نکته‌ی مهم در مورد آمار میانجی معرفی شده، آن است که برای تمامی مقادیر پارامتر کسری δ بجز $\delta=1$ گریزندگی محدودیت $0\le z\le 1$ را دارد تا تابع توزیع برای همه‌ی مقادیر انرژی مثبت معین باشد و توابع ترمودینامیکی حقیقی به دست آید. رفتار انحنای ترمودینامیکی نشان می‌دهد که به ازای تمام مقادیر $0\le\delta<1$ در حد بیشینه گریزندگی یعنی $z_{max}=1$ واگرایی وجود دارد که می‌تواند دلیلی بر وجود گذار فازی مشابه گذار چگالش بوز–اینشتین باشد. یعنی سیستم، هرچند عمدتاً فرمیونی باشد، هنوز یک نقطه بحرانی برای چگالش بوزون‌ها دارد.در سیستم کاملاً فرمیونی$(\delta=1)$، این نقطه بحرانی وجود ندارد و انحنای ترمودینامیکی همواره منفی است، بنابراین هیچ چگالشی هم رخ نمی‌دهد و رفتار آماری صرفاً دافعی باقی می‌ماند.

برای مقادیر $\delta\le 0.5$ انحنای ترمودینامیکی در تمامی ناحیه‌ی فیزیکی مثبت باقی می‌ماند که بیانگر برهمکنش آماری جاذب یا بوزون‌گونه است. برای$0.5<\delta<1$ مشاهده می‌شود که در نواحی با گریزندگی کوچکتر که معادل نواحی با دمای بالاست، انحنای ترمودینامیکی منفی و رفتار فرمیون گونه است و این در حالیست که در مقادیر بزرگتر گریزندگی و به طور معادل دماهای پایین رفتار به بوزون گونه تغییر ماهیت پیدا می‌کند به طوریکه برای مقادیر کمتر از یک دمای گذار فاز، سیستم چگالیده می‌شود. بررسی چنین چگالشی با جزئیات بیشتر در دست اقدام است.

نتیجه‌گیری:

یک توزیع آماری به صورت ترکیب خطی از تابع توزیع بوزون‌ها و فرمیون‌ها برای توصیف سیستم‌های کوانتومی معرفی شد که رفتار بوزونی و فرمیونی را به طور پیوسته در بر می‌گیرد. با وارد کردن یک پارامتر خطی(δ) توانستیم تعداد کل ذرات و انرژی داخلی را به صورت ترکیب خطی بوزونی و فرمیونی محاسبه کنیم و از روی آن به محاسبه عناصر متریک و مشتقات آن پرداختیم.نشان دادیم که برای مقادیر میانی$\delta\le 0.5$ رفتار متناظر با آماری است که در یک ناحیه فیزیکی مشخص ($0<z<1$) رفتار بوزون گونه مشاهده می‌شود و انحنای ترمودینامیکی مثبت است و برای مقادیر $\delta>0.5$ سیستم در یک قسمت رفتار فرمیون گونه داشته وانحنای ترمودینامیکی منفی است و بعد از مقدار مشخصی از z رفتار بوزون گونه خواهد شد.

مرجع‌ها

[1] R. K. Pathria and Paul D. Beale, *Statistical Mechanics*, 3rd Edition, Elsevier (2011).
[2]Tsui D.C., Stormer H.L., and Gossard A.C.,"*TwoDimensional Magnetotransport in the xtreme Quantum Limit",* Phys. Rev. Lett. **48,** 1559 (1982).
[3] Wilczek F., "Quantum Mechanics of Fractional Spin Particles", Phys. Rev. Lett. 49, 957 (1982).
[4] Mirza, Behrouz, and Hosein Mohammadzadeh. "Thermodynamic geometry of deformed bosons and fermions." *J. Phy. A: Math. and Theor.* **44,** 475003 (2011).
[5] Naghizadeh Ardabili, M. H., Omid Yahyayi Monem, Morteza Nattagh Najafi, and Hosein Mohammadzadeh. "Haldane-Inspired Generalized Statistics." arXiv:2511.02546 (2025).
[6] F.Reif, Fundamentals of Statistical and Thermal Physics, McGraw-Hill, 1965.
[7] Mirza, Behrouz, and Hosein Mohammadzadeh. Thermodynamic geometry of fractional statistics." Phy. Rev. E 82, 031137 (2010).
[8] H. Janyszek and R. Mrugala, "Riemannian geometry and stability of ideal quantum gases," J. Phys. A: Math. Gen. 23, 467–476 (1990).
[9] G. Ruppeiner, "Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory," Rev. Mod. Phys. 67, 605)1995).
[10] Seifi, M., Ebadi, Z., Agahi, H., Mehri-Dehnavi, H., & Mohammadzadeh, H. (2025). Intrinsic attractive and repulsive interactions in generalized MB distribution. Physical Review E, 111, 054114.

سازوکار مولکولی القای انحنا در غشا توسط نانوقفس‌های پروتئینی؛ بررسی نقش مرتب‌سازی لیپیدی

شادی، رهنما[1] ؛ اجتهادی، محمدرضا[1]

[1]دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف ، آزادی، تهران

چکیده

نانوقفس‌های پروتئینی ساختارهای خودآرایی هستند که به دلیل زیست‌سازگاری و قابلیت مهندسی، کاربردهای گسترده‌ای در دارورسانی هدفمند یافته‌اند. یکی از راهبردهای نوین برای افزایش کارایی این ساختارها، پوشش‌دهی آن‌ها با غشاهای لیپیدی به تقلید از ویروس‌هاست. این پوشش امکان عبور از سد ایمنی بدن را فراهم می‌کند. با این حال، سازوکار مولکولی که طی آن قسمتهای تخت این ساختارها باعث ایجاد انحنا در غشا و وزیکوله‌شدن نانوقفس می‌شوند، همچنان نامشخص باقی مانده است. در این پژوهش با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی درشت‌دانه و تمام‌اتمی، نقش واحدهای سه‌تایی یک نانوقفس دوازده‌وجهی در القای انحنا به غشا بررسی شد. نتایج نشان می‌دهد که ناحیه بازی قوی در انتهای آمینی پروتئین، لیپیدهای PIP_2 را از طریق برهم‌کنش الکترواستاتیکی در حاشیه پروتئین و به دور خود جمع می‌کند. این تجمع منجر به تشکیل ناحیه‌ای تهی از PIP_2 در مرکز سطح مشترک پروتئین و غشا می‌شود. از آنجا که لیپیدهای PIP_2 بلندتر از سایر لیپیدهای غشایی هستند، این مرتب‌سازی لیپیدی، تفاوت ضخامت موضعی ایجاد کرده و غشا را به سمت انحنا سوق می‌دهد. بررسی مدلهای مختلف نشان داد که مدل‌هایی با بار مثبت قوی‌تر، بیشترین میزان ورود دم لیپیدی به غشا و بالاترین انحنا را ایجاد می‌کنند. این یافته‌ها چارچوبی مولکولی برای طراحی بهینه نانوحامل‌های زیست‌سازگار فراهم می‌آورد.

واژه های کلیدی: *نانوقفس پروتئینی، انحنای غشا، مرتب‌سازی لیپید، دینامیک مولکولی، PIP2* .

Molecular Mechanism of Membrane Curvature Induction by Protein Nanocages; Investigation of the Role of Lipid Sorting

Rahnama, Shadi[1]; Ejtehadi, MohammadReza[1]

[1] *Department of Physics, Sharif University of Technology, Azadi, Tehran, Iran*

Abstract

Protein nanocages are self-assembling structures that, owing to their biocompatibility and engineering potential, have found widespread applications in targeted drug delivery. A novel strategy for enhancing the efficiency of these structures involves coating them with lipid membranes, mimicking viral envelopes. This coating enables evasion of the immune system. However, the molecular mechanism by which the flat surfaces of these structures induce membrane curvature and subsequent nanocage vesiculation remains unclear. In this study, using coarse-grained and all-atom molecular dynamics simulations, we investigated the role of trimeric units of a dodecahedral nanocage in inducing membrane curvature. Our results demonstrate that a strongly basic region at the protein's N-terminus electrostatically sequesters PIP2 lipids at the protein periphery. This accumulation leads to the formation of a PIP2-depleted zone at the center of the protein-membrane interface. Since PIP2 lipids are taller than other membrane lipids, this lipid sorting creates local thickness variations that drive membrane curvature. Examination of different models revealed that those with stronger positive charges exhibited the highest lipid tail insertion into the membrane and induced the greatest curvature. These findings provide a molecular framework for the optimal design of biocompatible nanocarriers.

Keywords: *protein nanocage; vesiculation; membrane curvature; lipid sorting; molecular dynamics; PIP2*

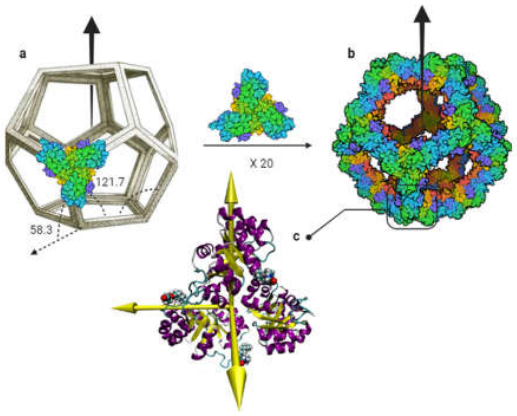
مقدمه

نانوقفس‌های پروتئینی به دلیل زیست‌سازگاری، تنوع عملکردی و امکان مهندسی ساختار، چشم‌انداز امیدبخشی برای دارورسانی هدفمند گشوده‌اند [۱-٤]. یکی از چالش‌های اساسی در مسیر کاربرد بالینی این ساختارها، محصورسازی کنترل‌شده آن‌ها درون وزیکول‌های غشایی است. برای غلبه بر این مانع، پژوهشگران به راهبردهای ویروس‌ها در برهمکنش با غشا و خودآرایی روی آورده‌اند.

ویروس‌ها از سازوکاری ذاتی برای حفاظت از ماده ژنتیکی خود، انتقال آن به فضای خارج سلولی و تحویل آن به سلول هدف بهره می‌برند. در این فرایند، ساختارهای پروتئینی خودآرایی به نام کپسید نقش کلیدی دارند. کپسیدها به‌گونه‌ای تکامل یافته‌اند که سلول میزبان را هدف قرار داده و به درون آن نفوذ کنند [۱-٤].

در پژوهشی با الهام از ویروس‌ها، روشی ماژولار برای اتصال نانوقفس‌های ساختاریافته به غشاهای لیپیدی معرفی شده است [۵]. بر این اساس، سه قابلیت بنیادین باید در طراحی هر نانوقفس کارآمد وجود داشته باشد: امکان اتصال به غشا برای غلبه بر سد انرژی لازم جهت القای انحنا، توانایی خودساختارپذیری، و بهره‌گیری از سازوکار ESCRT برای جدایش وزیکل از غشا در مراحل پایانی جوانه‌زنی.

بیشتر مطالعات پیشین بر پروتئین‌هایی با انحنای ذاتی بالا مانند کره و استوانه متمرکز بوده‌اند [۶]. نانوقفس مورد مطالعه در این پژوهش یک پروتئین دوازده‌وجهی سنتزی است که از سطوح پنج‌ضلعی تخت و توخالی تشکیل شده است (شکل ۱). هر ساختار پنج‌ضلعی شامل پنج واحد سه‌تایی (تریمر) است. با توجه به اینکه سختی خمشی نانوقفس بالاتر از دولایه لیپیدی است، درک نحوه برهمکنش هر تریمر با غشا برای بررسی همکاری آن‌ها در القای انحنا اهمیت دارد. بنابراین، روشن‌سازی سازوکار فرورفتگی غشا را می‌توان با بررسی کوچک‌ترین واحد ساختاری سیستم، یعنی تریمرها، دنبال کرد.

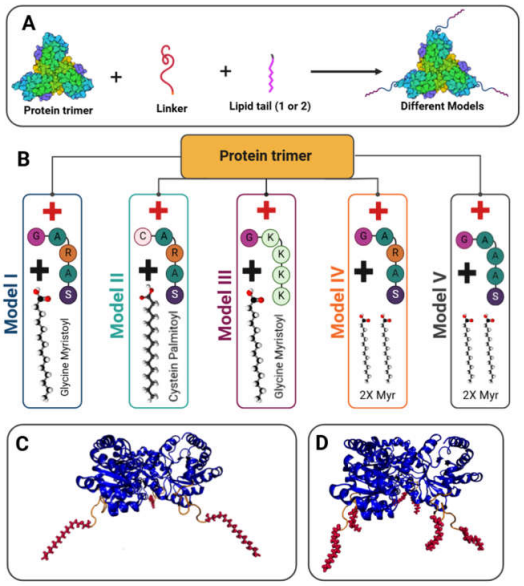


شکل ۱. (a) دوازده‌وجهی مصنوعی و واحد سه‌تایی (تریمر) سازنده آن؛ زوایای سطح فرود نسبت به سطح زمینه نشان داده شده است. (b) نانوقفس کامل متشکل از ۲۰ تریمر. (c) جزئیات اتمی یک تریمر؛ قرارگیری در زاویه ۵۸.۳ درجه نسبت به سطح مشترک، دم لیپیدی را در موقعیت مناسب برای لنگرگاه به دولایه لیپیدی قرار می‌دهد. محورهای زرد، محورهای اصلی تریمر هستند.

روش‌های محاسباتی

مختصات اولیه نانوقفس پروتئینی از پایگاه داده PDB با کد 5KP9 استخراج شد. اسیدهای آمینه‌ای که به دلیل تفکیک پایین میکروسکوپ الکترونی (۵ آنگستروم) قابل شناسایی نبودند، با نرم‌افزار Modeler بازسازی و به ساختار اصلی افزوده شدند.

ناحیه N-انتهایی پروتئین که با غشا برهم‌کنش می‌کند، شامل یک دم لیپیدی است. برای بررسی نقش بار الکتریکی و نوع لیپید در این ناحیه، پنج مدل مختلف طراحی شد (شکل ۲): مدل I با یک دم میریستیک اسید (مدل مرجع)، مدل II با جایگزینی دم میریستیک با پالمیتیک اسید، مدل III با حفظ میریستیله‌سازی و جایگزینی پنج اسید آمینه اول با زنجیره پلی‌لیزین (K4) دارای بار مثبت قوی، مدل IV با افزودن یک دم میریستیک اسید اضافی، و مدل V مشابه مدل IV اما با جایگزینی توالی بازی با پلی‌آلانین خنثی.

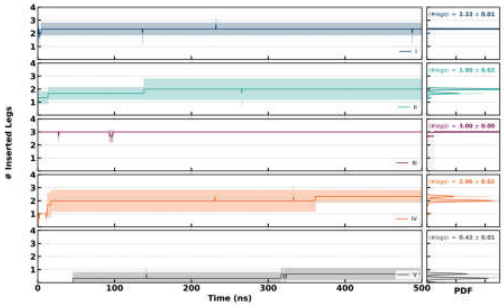


شکل ۲. پنج مدل مختلف پروتئین استفاده‌شده در این پژوهش. **(A)** هر مدل از ترکیب تریمر پروتئینی، یک اتصال‌دهنده و یک یا دو دم لیپیدی ساخته شده است. **(B)** تفاوت‌های اتمی میان مدل‌ها: مدل I شامل یک دم میریستیک اسید در انتهای آمینی است و به‌عنوان مدل مرجع در نظر گرفته شده؛ توالی اتصال‌دهنده مشابه توالی ۲–۶ پپتید Gag ویروس HIV-1 است. در مدل II، دم میریستیک با پالمیتیک اسید جایگزین شده است. مدل III همان دم میریستیک را حفظ کرده، اما توالی ۲–۶ Gag با زنجیره پلی‌لیزین (K4) با بار مثبت قوی جایگزین شده است. مدل IV دارای دم میریستیک دوم در گلایسین ۱۴ است. مدل V مشابه مدل IV است، با این تفاوت که توالی ۲–۶ Gag با زنجیره پلی‌آلانین خنثی جایگزین شده است. **(C)** نمایش تمام‌اتمی مدل III. **(D)** نمایش تمام‌اتمی مدل IV.

غشای لیپیدی با استفاده از پلتفرم CHARMM-GUI ساخته شد. ترکیب لیپیدی برای بازتاب نسبت‌های مشاهده‌شده در کپسید ویروس HIV انتخاب شد [۸]: ۲۰٪ PIP2، ۶۷٪ POPC و ۱۳٪ POPE. شبیه‌سازی‌ها از میدان نیروی درشت‌دانه MARTINI نسخه x.۲ بهره بردند [۷]. برای هر مدل، سه تکرار مستقل شبیه‌سازی شد که هر کدام حدود ۰/۵ میکروثانیه تحول آزاد را طی کردند.

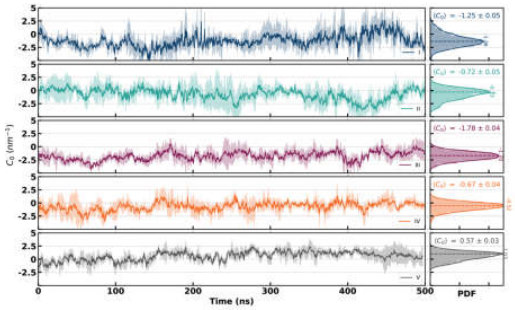
نتایج و بحث

در تمامی مدل‌ها، سیستم پس از حدود ۱۵۰ نانوثانیه به تعادل رسید. برای ارزیابی تأثیر موتیف‌های مختلف بر برهم‌کنش پروتئین با غشا، تعداد دم‌های لیپیدی واردشده به غشا شمارش شد. مدل III با زنجیره پلی‌لیزین بالاترین کارایی را نشان داد، به‌طوری که هر سه دم به‌طور کامل وارد غشا شدند. در مدل‌های I و II این مقدار به ترتیب ۲.۳۳ و ۱.۹ بود (شکل ۳).



شکل ۳. تعداد دمهای لیپیدهایی که هر مدل موفق به ورود آن به داخل غشا کرده. پنل‌های چپ تعداد دم‌های واردشده را بر حسب زمان و پنل‌های راست تابع چگالی احتمال (PDF) متناظر را نشان می‌دهند. میانگین تعداد دم‌های واردشده برای هر مدل (I) تا (V) ذکر شده است.

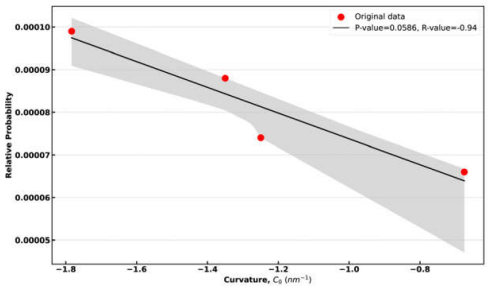
تحلیل کمّی انحنای القاشده نشان داد مدل III بیشترین انحنا را ایجاد می‌کند ($C_0 = ۱/۷۸\ nm^{-1}$) که با بالاترین میزان ورود دم لیپیدی همبستگی دارد. در مقابل، مدل V با کمترین ورود دم، کمترین انحنا را نشان داد ($C_0 = -۰/۵۷\ nm^{-1}$). این یافته‌ها حاکی از آن است که نفوذ کارآمد دم‌های لیپیدی محرک اصلی تغییر شکل غشاست (شکل ٤).



شکل ٤. تغییرات انحنای موضعی غشا (C_0) در طول زمان برای مدلهای مختلف.

برای درک سازوکار مولکولی این پدیده، توزیع فضایی لیپیدهای PIP_2 و موتیف‌های برهمکنش کننده پروتئین با غشا مورد بررسی قرار گرفت. برای سنجش میزان هم‌مکانی این دو توزیع، از کمیت $f_{\tau\varphi}$ (رابطه ۱) استفاده شد که حاصل‌ضرب نرمال‌شده توابع توزیع احتمال موتیف‌ها (τ) و لیپیدهای PIP_2، (φ) ، را در سطح غشا محاسبه می‌کند. مقادیر بالاتر این کمیت نشان‌دهنده همبستگی فضایی قوی‌تر میان موتیف‌های پروتئین و لیپیدهای PIP_2 است. تحلیل داده‌ها همبستگی (شکل ۵) معکوس قوی میان انحنای القاشده و $f_{\tau\varphi}$ را آشکار کرد (ضریب همبستگی ۰.۹٤-).

$$f_{\tau\phi} = \frac{\iint \tau(x,y)\,\phi(x,y)\,dx\,dy}{\iint \tau(x,y)\,dx\,dy \cdot \iint \phi(x,y)\,dx\,dy} \qquad (۱)$$



شکل ۵. همبستگی بین انحنای القاشده (C_0) و احتمال نسبی ($f_{\tau\varphi}$) داده‌ها (رابطه معکوس نشان می‌دهند) ضریب همبستگی = ۰/۹٤-، p-value =۰/۰۵۸٦ .(ناحیه سایه‌دار بازه اطمینان ۹۵٪ را نشان می‌دهد.)

بر اساس داده‌های به دست آمده، علت ایجاد انحنا در غشا را می‌توان اینگونه تفسیر کرد که: لیپیدهای PIP_2 به دلیل زنجیره‌های آسیل ۲۰ کربنی و سرگروه قطبی بزرگ، بلندتر از سایر لیپیدهای غشایی هستند. تجمع این لیپیدها در اطراف موتیف‌های با بار مثبت پروتئین و تخلیه آن‌ها از ناحیه مرکزی تریمر، اختلاف ضخامت موضعی در غشا ایجاد می‌کند. این اختلاف ضخامت، بخش‌های آب‌گریز لیپیدهای بلندتر را در معرض محیط آبی قرار می‌دهد که از نظر انرژی نامطلوب است. برای جبران این وضعیت، لیپیدهای مرزی جهت‌گیری خود را تغییر داده و کشیده یا فشرده می‌شوند. این تغییرات ساختاری در نهایت انحنای غشا را القا می‌کند.

نتیجه‌گیری:

این پژوهش نشان داد که انحنای غشا توسط نانوقفس‌های پروتئینی عمدتاً از طریق مرتب‌سازی لیپیدی ایجاد می‌شود. ناحیه با بار مثبت در انتهای پروتئین، لیپیدهای PIP_2 را در حاشیه‌ها تجمیع کرده و مرکز را از این لیپیدها خالی می‌کند. اختلاف ضخامت حاصل، نیروی محرکه اصلی خم‌شدن غشاست.

مدل‌هایی با بار مثبت قوی‌تر، عملکرد بهتری در ورود دم لیپیدی و القای انحنا نشان دادند. این یافته‌ها راهنمایی برای طراحی نانوقفس‌های کارآمد ارائه می‌دهد: انتهای پروتئین باید با یک ناحیه بازی قوی و دم لیپیدی مناسب مجهز شود.

سپاسگزاری

از مرکز محاسبات سریع دانشگاه صنعتی شریف برای تأمین منابع محاسباتی سپاسگزاریم.

مرجع‌ها

[۱] L. A. Lee and Q. Wang; "Virus-based fabrication of micro- and nanofibers using electrospinning"; Nanomedicine, **2** (2006) 137-149.
[۲] N. Ferrer-Miralles, E. Rodríguez-Carmona, J. L. Corchero, E. García-Fruitós, E. Vázquez and A. Villaverde; "Engineering protein self-assembling in protein-based nanomedicines for drug delivery and gene therapy"; Crit. Rev. Biotechnol., **35** (2015) 209-221.
[۳] M. Uchida, M. T. Klem, M. Allen, P. Suci, M. Flenniken, E. Gillitzer, Z. Varpness, L. O. Liepold, M. Young and T. Douglas; "Biological containers: Protein cages as multifunctional nanoplatforms"; Adv. Mater., **19** (2007) 1025-1042.
[٤] N. M. Molino and S. W. Wang; "Caged protein nanoparticles for drug delivery"; Curr. Opin. Biotechnol., **28** (2014) 75-82.
[٥] J. Votteler, C. Ogohara, S. Yi, Y. Hsia, U. Nattermann, D. M. Belnap, N. P. King and W. I. Sundquist; "Designed proteins induce the formation of nanocage-containing extracellular vesicles"; Nature, **540** (2016) 292-295.
[٦] B. J. Reynwar, G. Illya, V. A. Harmandaris, M. M. Müller, K. Kremer and M. Deserno; "Aggregation and vesiculation of membrane proteins by curvature-mediated interactions"; Nature, **447** (2007) 461-464.
[۷] S. J. Marrink, H. J. Risselada, S. Yefimov, D. P. Tieleman and A. H. De Vries; "The MARTINI force field: Coarse grained model for biomolecular simulations"; J. Phys. Chem. B, **111** (2007) 7812-7824.
[۸] L. Charlier, M. Louet, L. Chaloin, P. Fuchs, J. Martinez, D. Muriaux, C. Favard and N. Floquet; "Coarse-grained simulations of the HIV-1 matrix protein anchoring: Revisiting its assembly on membrane domains"; Biophys. J., **106** (2014) 577-585.

حرکت پخشی باکتری در محیط هیدرودینامیکی ناهمگن و ناهمسانگرد کنار دیواره

صحافی ، رژین[1] ؛ نجفی، علی[1]

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

چکیده

در این پژوهش حرکت پخشی یک باکتری با حرکت بدووبغلت در یک محیط هیدرودینامیکی ناهمگن و ناهمسانگرد محدودشده با یک تله نوری در کنار یک دیواره مورد بررسی قرار می‌گیرد. برای حل این مسئله از رویکرد مکانیک آماری و روش‌های اختلالی استفاده می‌شود. با استخراج معادلهٔ موثر پخش با ضرایب وابسته به مکان برای باکتری، پاسخ‌های تعادلی و ایستای سیستم در محیط ناهمسانگرد به صورت تقریبی محاسبه می‌شوند. حالت ناهمگن و ناهمسانگرد به مطالعات بعدی موکول می‌شوند.

واژه های کلیدی: *باکتری بدووبغلت، محیط ناهمگن، محیط ناهمسانگرد، حرکت پخشی، تلهٔ نوری.*

Diffusive motion of a bacterium in an inhomogeneous and anisotropic hydrodynamic medium near a wall

Sahafi, Rozhin[1]; Najafi, Ali[1]

[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan

Abstract

In this study, the diffusive motion of a bacterium with run-and-tumble dynamics confined in an optical trap, located in an inhomogeneous and anisotropic hydrodynamic environment near a wall, is investigated. To solve this problem, a statistical mechanics approach and perturbative methods are employed. By deriving an effective diffusion equation for the bacterium, the equilibrium and steady-state solutions of the system in a homogenous and anisotropic environment are approximately calculated. The inhomogeneous and anisotropic case is deferred to future studies.

***Keywords**: Run-and-tumble bacterium, Inhomogeneous medium, anisotropic medium, Diffusive motion, Optical trapping.*

مقدمه

ذرات فعال با دریافت انرژی از محیط اطراف، قادر به حرکت خودران بوده و در محیط پخش می‌شوند. این فرایند با معادلهٔ پخش توصیف می‌شود که ضریب پخش، تعیین کنندهٔ نرخ انتشار ذره است. در محیط‌های همگن این ضریب ثابت است، اما در محیط‌های ناهمگن می‌تواند وابسته به مکان و زمان باشد و دینامیک پخشی رفتار غیر ساده‌ای دارد[1,2]. مطالعهٔ ذرات فعال به عنوان نمونه‌ای از سیستم‌های دور از تعادل اخیراً مورد توجه بوده است[5]. این ذرات قادر به حرکت خودران هستند و یکی از مدل‌های شناخته شده برای توصیف آن‌ها، مدل بدووبغلت[1] است که در آن ذره دارای حرکت مستقیم و چرخشی در جهت‌های تصادفی است[3,4]. توصیف آماری حرکت ذرات عمدتاً با رویکرد مکانیک آماری انجام می‌شود. حالتی که ضرایب پخش این معادلات وابسته به مکان باشند، ابهامی در تفسیر جملات تصادفی ایجاد می‌شود که به انتخاب بین دو قرارداد ایتو و استراتونوویچ می‌انجامد[1,4]. این انتخاب بر شکل معادلات و ضرایب پخش موثر در محیط‌های ناهمگن تاثیر مستقیم دارد. اینجا، حرکت پخشی یک ذرهٔ فعال بدووبغلت در محیطی ناهمگن و در مجاورت دیواره، تحت تاثیر یک انبرک نوری با رویکرد مکانیک آماری بررسی می‌شود. در چارچوب اختلال مرتبهٔ

[1] Run-and-tumble

اول، معادله‌ای مشابه معادلهٔ پخش به‌دست می‌آید که ضرایب پخش مؤثر آن در هر دو تفسیر قابل بیان است.

توصیف آماری حرکت باکتری

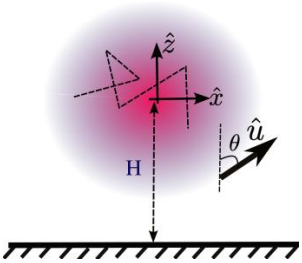
حرکت بدووبغلت یک ذرهٔ فعال، مانند باکتری ای‌کولای[2] که در کنارهٔ یک دیواره و در یک محیط هیدرودینامیکی ناهمگن قرار دارد مورد بررسی قرار می‌گیرد. فرض می‌شود ذرهٔ فعال تحت اثر نیروی یک انبرک نوری[3]باشد. این نیرو، حرکت ذره را به ناحیهٔ متناهی از فضا محدود می‌کند. باکتری مذکور، ذره‌ای با دو فاز حرکتی است؛ فاز حرکت مستقیم با سرعت ثابت v و فاز چرخش که در آن جهت باکتری به صورت تصادفی تغییر می‌کند. تغییر جهت یک فرایند تصادفی با نرخ α است و τ زمان مشخصه و نمایندهٔ فاصلهٔ میانگین بین دو تغییر جهت متوالی است. ارتباط بین این دو $\tau\sim\frac{1}{\alpha}$ است. برای سهولت مسئله در دو بعد بررسی می‌شود. مطابق شکل (1) دستگاه مختصاتی با مبدأ مرکز انبرک نوری درنظر بگیرید. بردار عمود بر دیواره در جهت $\hat{z}$ است. تابع توزیع $\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{u})$ چگالی احتمال بهنجار حضور باکتری در مکان $\boldsymbol{r}$ با جهت‌گیری لحظه‌ای $\boldsymbol{u}$ را نشان می‌دهد. این چگالی در معادلهٔ زیر صدق می‌کند[3]:

$$\partial_t\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{u})+\nabla.\left(v\boldsymbol{u}\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{u})+\mu.\boldsymbol{f}^e\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{u})\right)= -\alpha\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{u})+\frac{\alpha}{2\pi}\int\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{u})d\boldsymbol{u}. \qquad (1)$$

جملهٔ اول مرتبط با جریان سوق است که توسط نیروی محرکه خودران ایجاد می‌شود. دو جملهٔ آخر مربوط به باکتری‌هایی است که جهت‌گیری آن‌ها $\boldsymbol{u}$ است و طی چرخش جهت‌گیری‌شان تغییر می‌کند. این تغییر جهت موجب افزایش و کاهش چگالی خواهدشد. عبارت $\boldsymbol{f}^e$ نیروی خارجی اعمال شده به ذره است که ناشی از تله اپتیکی است و برابر $\boldsymbol{f}^e=-k\boldsymbol{r}$ است. فرض می‌شود ذره در نزدیکی یک دیواره است. در معادلهٔ نیرو، k سختی تله است.

هیدرودینامیک کنار دیواره

هیدرودینامیک مورد استفاده، مربوط به ذرهٔ فعالی است که در محیط هیدرودینامیکی کنار دیواره با فاصلهٔ دور از آن قرار دارد (شکل 1).



شکل 1: مدل هیدرودینامیکی مورد بررسی در مسئله که شامل ذرهٔ فعال بدووبغلت، یک دیواره و یک تلهٔ نوری است. مرکز دستگاه مختصات در مرکز تله فرض می‌شود و مسئله در دو بعد بررسی می‌شود. فرض می‌شود مرکز تله در فاصلهٔ H از دیواره قرار دارد. فاصلهٔ لحظه‌ای ذره از دیوار h است. فاصلهٔ ذره از دیواره دور است. بردار $\boldsymbol{u}$ جهت‌گیری لحظه‌ای ذره را نمایش می‌دهد و θ زاویهٔ بین بردار جهت‌گیری لحظه‌ای و محور $\boldsymbol{z}$ است.

برای سهولت ابتدا یک ذرهٔ غیرفعال درنظر گرفته می‌شود. برای یک ذرهٔ غیرفعال کروی به شعاع a در فاصلهٔ h از صفحه که تحت اثر نیروی $\boldsymbol{f}$ است، سرعت ذره و نیروی اعمال شده رابطهٔ $\boldsymbol{v}=\bar{\bar{\mu}}.\boldsymbol{f}$ دارند. تحرک‌پذیری[4] ذره با μ نشان داده‌شده و شکل تانسوری به‌صورت زیر دارد:

$$\mu=\begin{pmatrix}\mu_{\parallel} & 0\\ 0 & \mu_{\perp}\end{pmatrix}. \qquad (2)$$

که در آن $\mu_{\parallel}=\mu_0(1-\Delta)$ $\mu_{\perp}=\mu_0(1-2\Delta)$ $\mu_0=1/6\pi\eta a$ و $\Delta=\frac{9}{16}\frac{a}{h}$ هستند.

اکنون یک باکتری بدووبغلت که در فاز حرکت مستقیم خودش است را درنظر بگیریم. در این حالت نیروی داخلی به قدرت f_0 حرکت مستقیمی تولید می‌کند که نیرو و سرعت در راستای $\boldsymbol{u}$ هستند. در شرایط مذکور، معادلهٔ هیدرودینامیکی به‌صورت $v\boldsymbol{u}=f_0\bar{\bar{\mu}}.\boldsymbol{u}$ می‌شود. مطابق این رابطه برای ذرهٔ فعال، سرعت و جهت‌گیری به صورت زیر خواهد بود:

$$v(r,u)=v_0(1-\Delta(1+u_z^2)),\quad v_0=f_0/6\pi\eta a \qquad (3)$$

این مدل هیدرودینامیکی برای دو حالت حرکت هم‌جهت یا عمود بر دیواره تمایز قائل می‌شود. در حرکت هم‌جهت دیواره، سرعت ذره$v=v_0(1-\Delta)$ و در حرکت عمود بر دیواره، سرعت ذره $v=v_0(1-2\Delta)$ است که در حرکت موازی، سرعت ذره بیشتر است. در فواصل بسیار دور از صفحه که $\Delta=0$ می‌توان از اثرات هیدرودینامیکی صرف‌نظر کرد. در این‌صورت v_0 بیانگر سرعت

[2] E. coli
[3] Optical tweezer
[4] Mobility

باکتری در غیاب دیواره است. u_z مولفهٔ سرعت در راستای محور z است. Δ بیانگر اثر حضور دیواره است. در فواصل خیلی دور از دیواره، مقدار Δ بسیار کوچک است و برای نقاط بسیار دورتر از صفحه $\Delta=0$ است. روابط مذکور در دو رژیم متفاوت قابل بررسی هستند. اگر مقدار Δ ثابت باشد، مدل ناهمسانگرد است و اگر مقدار Δ وابسته به مکان و ثابت نباشد، مدل ناهمسانگرد و ناهمگن است.

پخش در محیط ناهمگن

برای حل معادلات موجود با جزئیات گفته شده و پیدا کردن تابع توزیع از گشتاورهای تابع توزیع استفاده می‌شود. متوسط زاویه‌ای هر کمیت دلخواه A به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\langle A\rangle = \int \psi(r,\boldsymbol{u}) A d\boldsymbol{u}. \qquad (4)$$

در این پژوهش گشتاورهای مرتبهٔ اول و دوم موردنظر است و از گشتاورهای مراتب بالاتر صرف نظر می‌شود. گشتاورهای تا مرتبهٔ دوم به این صورت هستند:

$$\phi(r)=\langle 1\rangle,\quad p_i=\langle u_i\rangle,\quad Q_{ij}=\langle u_iu_j\rangle-\frac{1}{2}\delta_{ij}\phi. \qquad (5)$$

گشتاور صفرم بیانگر چگالی ذره، گشتاور اول بیانگر چگالی قطبش و گشتاور دوم بیانگر نظم نماتیک محلی است. با شروع از رابطهٔ (1)، می‌توان معادلات تحول تمامی گشتاورها را بدست آورد. در این معادلات که به یکدیگر جفت شده‌اند از گشتاورهای مراتب بالا صرف‌نظر می‌کنیم. معادلات مربوط به هر گشتاور به شرح زیر است:

$$\partial_t\phi=-v_0\partial_i[(1-\Delta)\langle u_i\rangle-\Delta\langle u_z^2u_i\rangle]-\partial_i[\mu_{ij}f_j^e\phi]. \qquad (6)$$

$$\partial_t p_j=-v_0\partial_i[(1-\Delta)\langle u_iu_j\rangle-\Delta\langle u_z^2u_iu_j\rangle]-\alpha p_j-\partial_i[\mu_{ik}f_k^e p_j]. \qquad (7)$$

چون این روابط را می‌توان برحسب گشتاورها بازنویسی کرد، جفت‌شده هستند. باتوجه به اینکه گشتاورهای دوم و بالاتر بسیار کوچک و صفر فرض می‌شوند، می‌توان متوسط‌های توان دوم را بر حسب p بازنویسی کرد. معادلات بدست آمده مربوط به چگالی قطبش به صورت رابطهٔ زیر می‌شود:

$$\partial_t p_j=-v_0\left[\frac{1}{2}\partial_j\left(\left(1-\frac{5}{4}\Delta\right)\phi\right)-\frac{7}{24}\partial_z(\Delta\phi)\delta_{jz}\right]-\alpha p_j-\partial_i[\mu_{ik}f_k^e p_j]. \qquad (8)$$

باتوجه به دینامیک سریع‌تر p نسبت به سایر کمیت‌ها و سریع‌تر به تعادل رسیدن آن، تقریب $\partial_t p_j=0$ فرض می‌شود[3]. برای سهولت اثرهای نیروی خارجی کنار گذاشته شده و در معادلات نهایی اضافه می‌شود. در حالت پایا مولفه‌های p_z و p_x برابر می‌شوند با:

$$p_z=\frac{-v_o}{2\alpha}\left[\partial_z\left(\left(1-\frac{11}{6}\Delta\right)\phi\right)\right], \qquad (9)$$

$$p_x=\frac{-v_o}{2\alpha}\left[\partial_x\left(\left(1-\frac{5}{4}\Delta\right)\phi\right)\right]. \qquad (10)$$

با جاگذاری مولفه‌های p در معادلهٔ (7) معادلهٔ بدست آمده مربوط به چگالی ذره به صورت زیر است که اثر نیرو نیز اضافه شده است:

$$\partial_t\phi=\frac{-v_0^2}{2\alpha}\left[\partial_x\left(\left(1-\frac{5}{4}\Delta\right)\partial_x\left(1-\frac{5}{4}\Delta\right)\phi\right)+\partial_z\left(\left(1-\frac{7}{4}\Delta\right)\partial_x\left(1-\frac{11}{6}\Delta\right)\phi\right)\right]-\partial_i[\mu_{ij}f_j^e\phi]. \qquad (11)$$

معادلهٔ بدست آمده یک معادلهٔ پخش موثر است که ضرایب آن ناهمگن و ناهمسانگرد است. در حالت خاص $\Delta=0$ باکتری در فواصل خیلی دور از صفحه است و اثرهای هیدرودینایکی صفر می‌شوند. در این شرایط که متناظر با فضای آزاد است، باکتری به صورت یک موجود پخش شونده با ضریب پخش موثر برابر $D_{eff}=D_0={v_0}^2/2\alpha$ است. در حالت کلی که اثر صفحه وجود دارد روش‌های ایتو و استراتونوویچ[5] برای حل چنین مسائلی مناسب هستند که جواب‌های بخصوص برای این مسائل ارائه می‌دهد. حالت‌های مطرح شده در این روش‌ها به صورت زیر هستند:

$$\nabla.[D(r)\nabla\phi],\quad D(r)\nabla.(\nabla\phi),\quad \sqrt{D(r)}\nabla.[\sqrt{D(r)}\nabla\phi]. \qquad (12)$$

معادلهٔ بدست آمده با حالت $\sqrt{D(r)}\nabla.[\sqrt{D(r)}\nabla\phi]$ مطابق است.

حالت پایا برای معادلات ناهمسانگرد

در این بخش، حد حالت پایا برای معادلهٔ پخش بدست آمده (رابطهٔ (7)) در یک محیط ناهمگن و ناهمسانگرد موردنظر است. معادلات بدست آمده رسیدن به حالت تعادل را نشان می‌دهد. برای بدون بعد کردن معادلات، کمیت‌ها با واحد طول $\ell=\sqrt{D_0/\mu_0 k}$ بدون بعد می‌شوند. کمیت‌های بدون بعد به صورت $\bar{x}=x/\ell$,$\bar{z}=z/\ell$ هستند. معادلهٔ تعادلی بدون‌بعد به‌صورت زیر است:

$$\partial_{\bar{x}}\left(1-\frac{5\Delta}{4}\right)\partial_{\bar{x}}\left(1-\frac{5\Delta}{4}\right)\phi+\partial_{\bar{z}}\left(1-\frac{7\Delta}{4}\right)\partial_{\bar{z}}\left(1-\frac{11\Delta}{6}\right)\phi=-\partial_{\bar{x}}[(1-\Delta)\bar{x}\phi]-\partial_{\bar{z}}[(1-2\Delta)\bar{z}\phi]. \qquad (13)$$

[5] Ito and Stratonovich

چون اثر دیواره کوچک در نظر گرفته می‌شود، می‌توان اثر آن را به صورت اختلالی و تا مرتبهٔ اول اختلال بسط داد. باتوجه به اینکه حرکت ذره توسط تلهٔ نوری محدود شده است، می‌توان مکان ذره را به‌صورت $h = \mathrm{H} + \mathrm{z}$ درنظر گرفت که $z \ll H$. دراین‌صورت می‌توان Δ را برحسب z/H بسط داد. با تعریف $\Delta_0 = \frac{9}{16}\frac{\mathrm{a}}{\mathrm{H}}$ و $\epsilon_1 = \frac{\ell}{\mathrm{H}}$ شکل بدون بعد شده نیز به صورت زیر می‌شود:

$$\Delta = \frac{9}{16}\frac{a}{H}(1 - \frac{z}{H} + \ldots) = \Delta_0(1 - \epsilon_1 \bar{z} + \ldots). \qquad (14)$$

حالت همگن ($\boldsymbol{\ell \ll \mathrm{H}}$)

گفته شد که اثرهای هیدرودینامیکی دیواره به دو صورت ناهمگنی و ناهمسانگردی حرکت باکتری را تحت تاثیر قرار می‌دهند. در این قسمت برای سادگی فرض می‌کنیم اثرهای هیدرودینامیکی دیواره فقط به صورت یک ناهمسانگردی در معادلات دیده می‌شود. دراین‌صورت $\Delta_0 \neq 0$, $\epsilon_1 = 0$ در نظر گرفته می‌شود که متناظر با حالت همگن و ناهمسانگرد است. بازنویسی معادله برحسب کمیت‌های بدون بعد، معادلهٔ زیر را می‌دهد:

$$\alpha_1\, \partial_{\bar{x}}^2 \phi^{st} + \alpha_2\, \partial_{\bar{z}}^2 \phi^{st} = -\alpha_3\, \partial_{\bar{x}}[\bar{x}\phi^{st}] - \alpha_4\, \partial_{\bar{z}}[\bar{z}\phi^{st}]. \qquad (15)$$

جواب‌های حالت پایا فرض شده و تغییر متغیرهای اعمال شده به شرح زیر هستند:

$$\alpha_1 = (1 - \frac{5\Delta_0}{4})^2, \alpha_2 = (1 - \frac{7\Delta_0}{4})(1 - \frac{11\Delta_0}{6}), \qquad (16)$$

$$\alpha_3 = (1 - \Delta_0), \alpha_4 = (1 - 2\Delta_0). \qquad (17)$$

در دو سمت معادلهٔ (11) جملاتی وجود دارد که باعث ناهمسانگردی معادله می‌شود. به کمک بازمقیاس کردن سمت چپ اثرات ناهمسانگردی مربوط به α_1 و α_2 از بین می‌رود. با در نظر گرفتن $X = \bar{x}/\sqrt{\alpha_1}, Z = \bar{z}/\sqrt{\alpha_2}$ معادلات بازمقیاس می‌شوند. به‌منظور رفع ناهمسانگردی در سمت راست معادله، فرض می‌شود که α_4 و α_3 بسیار نزدیک به یکدیگر هستند و با تعریف $\epsilon_2 = \alpha_3 - \alpha_4$ آن را کوچک می‌گیریم.

$$[\partial_X^2 \phi^{st} + \partial_Z^2 \phi^{st}] = -\alpha_3(\partial_X[X\phi^{st}] + \partial_Z[Z\phi^{st}]) + \epsilon_2 \partial_Z[Z\phi^{st}]. \qquad (18)$$

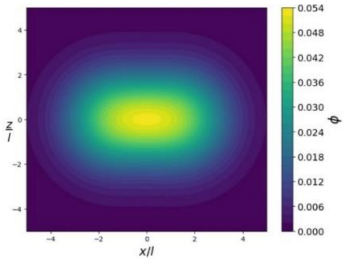
برای $\epsilon_2 \ll 1$، مسئله به‌صورت اختلالی بررسی می‌شود. پاسخ حالت مختل نشده که متناظر با $\epsilon_2 = 0$ است به صورت زیر می‌باشد:

$$\phi_0^{st} = \frac{\alpha_3}{2\pi} e^{-\frac{\alpha_3}{2}(X^2+Z^2)}. \qquad (19)$$

اختلال به‌صورت $\phi^{st} = \phi_0^{st}(1 + \epsilon_2 \delta\phi(X,Z) + O(\epsilon^2))$ و تا مرتبهٔ اول درنظر گرفته می‌شود. با حل معادلات در دستگاه مختصات قطبی، مقدار اختلال تا مرتبهٔ اول به صوت زیر به‌دست می‌آید:

$$\delta\phi = \frac{\alpha_3}{6} r^3 + (\frac{3\alpha_3}{4} + \frac{1}{2}\cos\theta) r^2. \qquad (20)$$

نمودار توزیع چگالی بر حسب کمیت‌های بدون بعد در شکل 2 نشان داده شده است. ناهمسانگردی مشاهده‌شده در توزیع چگالی، ناشی از تفاوت در مؤلفه‌های حرکت ذره در راستای با تحرک بیشتر، ناحیهٔ گسترده‌تری از فضا را اشغال می‌کند. این رفتار به‌طور مستقیم در کشیدگی توزیع چگالی در شکل قابل مشاهده است.



شکل2: نمودار توزیع چگالی بر حسب کمیت‌های بدون بعد برای $\epsilon_2 = 0.20$ ،$\alpha_1 = 0.81$ ،$\alpha_2 = 0.80$ و $\alpha_3 = 0.33$.

نتیجه‌گیری و کارهای پیش‌رو

در این پژوهش حرکت یک باکتری بدووبغلت به دام افتاده در یک تله نوری در یک محیط ناهمسانگرد و ناهمگن کنار یک دیواره مورد بررسی قرار گرفت. یک معادلهٔ پخش موثر برای این باکتری به‌دست آمد و یک حل تقریبی برای حالت همگن و ناهمسانگرد به‌دست آمد. محیط هیدرودینامیکی مفروض برای این مسئله مدل هیدرودینامیکی کنار دیواره با فاصلهٔ دور از دیواره است. رویکرد مورد بررسی مسئله، رویکرد آماری است و از روش اختلال تا مرتبهٔ اول استفاده شد. در آینده معادلهٔ پخش باکتری در یک محیط ناهمگن و ناهمسانگرد مورد بررسی قرار خواهدگرفت.

مرجع‌ها

[1] P. M. Chaikin and T. C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (1995).
[2] H. C. Berg, *Random Walks in Biology*, Princeton University Press, Princeton (1993).
[3] J. Tailleur and M. E. Cates, "Statistical Mechanics of Interacting Run-and-Tumble Bacteria," *Phys. Rev. Lett.* **100**, 218103 (2008).
[4] A. W. C. Lau and T. C. Lubensky, "State-dependent diffusion: Thermodynamic consistency and its path integral formulation," *Phys. Rev. Lett.* **98**, 098301 (2007).
[5] A. P. Solon, Y. Fily, A. Baskaran, M. E. Cates, Y. Kafri, M. Kardar, *Pressure is not a state function for generic active fluids*, *Nature Physics* **11**, 673–678 (2015).

مطالعه اصطکاک غیرتماسی میان دو لایه سیلیکا با جدایش نانومتری به روش دینامیک مولکولی

عرفان ولی زاده درخشان[۱] ؛ علی رجب پور[۱]، عباس منتظری[۲] ، سامی مرابیا[۳]

[۱] گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه بین‌المللی امام خمینی(ره)، قزوین، ایران

[۲] دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه‌نصیرالدین طوسی، تهران، ایران

[۳] مؤسسه لومی‌یر ماده(Institut Lumière Matière – ILM) ، مرکز ملی تحقیقات علمی(CNRS) ، دانشگاه کلود برنار لیون ۱، ویلوربان، فرانسه

چکیده

در این مطالعه، اصطکاک غیرتماسی میان دو لایه آمورف SiO_2 که با یک شکاف خلأ نانومتری از یکدیگر جدا شده‌اند، با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی کلاسیک بررسی می‌شود. در پیکربندی مورد مطالعه، لایه بالایی با سرعت لغزش ثابت و بدون اعمال بار نرمال روی زیرلایه حرکت داده می‌شود، و دما به‌عنوان پارامتر کنترل‌گر تغییر می‌یابد. نتایج برای جدایش ۱ نانومتر نشان می‌دهد که در ناحیه غیرتماسی، نیروی برشی در حد صدم نانونیوتن ظاهر می‌شود و نوسان‌های شبه‌دوره‌ای حول یک مقدار میانگین غیرصفر دارد. افزایش دما سبب کاهش قابل‌توجه در مؤلفه نرمال نیرو و فشار مؤثر شده و به‌طور هم‌زمان، رفتار نیروی مماسی را یکنواخت‌تر و با دامنه نوسان کمتر می‌کند. این چارچوب یک رویکرد مستقیم و مبتنی بر دیدگاه اتمی برای برآورد اصطکاک غیرتماسی در فصل‌مشترک‌های سیلیکا فراهم می‌آورد.

واژه های کلیدی: *اصطکاک غیرتماسی؛ دینامیک مولکولی؛ سیلیکا آمورف؛ فصلِ مشترک؛ شکاف خلأ؛ فاصله بین‌صفحه‌ای؛ توان اصطکاکی*

Non-contact Friction at the Nanoscale Gap Between Two Silica Solids: A Molecular Dynamics Study

Erfan V. Derakhshan ; Ali Rajabpour ; Abbas Montazeri ; Samy Merabia

Department of Mechanical Engineering, Imam Khomeini International University, Qazvin, Iran
Faculty of Mechanical Engineering, K. N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran
Institut Lumière Matière (ILM), Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), Université Claude Bernard Lyon 1, Villeurbanne, France

Abstract

In this study, noncontact friction between two amorphous SiO_2 layers separated by a nanometer-sized vacuum gap is investigated using classical molecular dynamics simulations. In the simulated configuration, the top slab is driven at a constant sliding velocity without applying any normal load on the substrate, while the temperature is varied as a control parameter. For a separation of 1 nm, the results show that in the noncontact regime the lateral force is on the order of hundredths of a nanonewton and exhibits quasi-periodic oscillations around a nonzero mean value. Increasing the temperature significantly reduces the normal force component and the effective pressure, while simultaneously rendering the tangential force smoother with reduced oscillation amplitude. This framework provides a direct, atomistic-level approach for quantifying noncontact friction at silica interfaces.

Keywords: *non-contact friction; molecular dynamics; amorphous silica; interface; vacuum gap; inter-plate separation; frictional power*

مقدمه

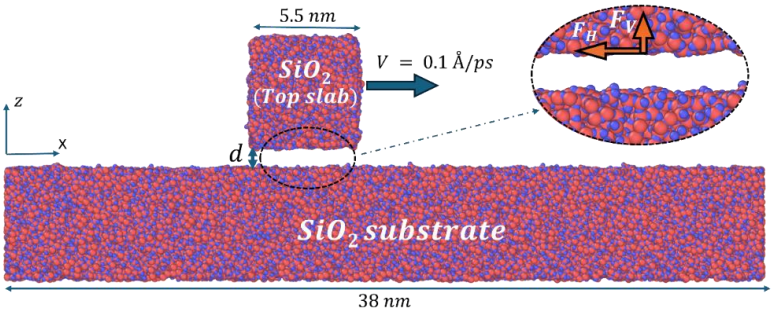
در دستگاه‌های دقیق ریز/نانومقیاس مبتنی بر شیشه، سرامیک و محیط‌های سیلیکاته، اتلاف انرژی و پایداری عملکرد سامانه به‌طور چشمگیری تحت‌تأثیر رفتار فصل‌مشترک‌های سیلیکا قرار دارد. در ابعاد نانومتری، ریشه‌های اصطکاک را می‌توان در پتانسیل‌های اتمی، برهم‌کنش‌های وندروالس و الکترواستاتیک، وجود لایه‌های مولکولی جذب‌شده و نوسان‌های حرارتی جست‌وجو کرد؛ عواملی که حتی پیش از تماس مکانیکی کامل نیز می‌توانند یک نیروی مقاوم جانبی بین دو سطح ایجاد کنند[۴_۱].

مطالعات اخیر این سازوکارها را برای شرایط مختلف تماس سیلیکایی روشن کرده‌اند. ژو و همکاران (۲۰۲۳) با استفاده از یک هندسه لغزش همراه با فنر مجازی نشان دادند که اصطکاک در سرعت‌های مختلف دچار گذار رفتاری می‌شود و لایه‌های آب جذب‌شده می‌توانند لغزش را تضعیف کنند [۵]. ویی و همکاران (۲۰۲۱–۲۰۲۳) برای جفت‌های کوارتز/کوارتز و کوارتز/رس، مقیاس‌بندی منظم نیروهای برشی–نرمال، افزایش اصطکاک با سرعت، تضعیف آن با دما و نقش هیدراسیون را گزارش کردند؛ [۶]. ژائو و همکاران (۲۰۲۱) نیز اثر سرعت را در شرایط خشک و مرطوب روی سیلیکا بررسی کرده و رژیم‌های متفاوت تقویت و تضعیف اصطکاک را مستند ساختند [۷]. در مطالعات بنیادی‌تر، اوتانی و همکاران (۲۰۱۸) نشان دادند که جذب آب می‌تواند اصطکاک بین مواد سیلیکاتی را به‌طور قابل‌توجهی کاهش دهد [۸]، و لی و همکاران (۲۰۲۱) در چارچوب اصطکاک غیرتماسی نقش میرایی فونونی و ناهمگنی‌های ساختاری را در تعیین دامنه مقاومت غیرتماسی برجسته کردند[۹].

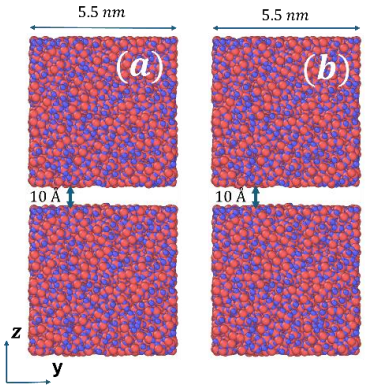
در این مطالعه، تمرکز به‌طور مشخص بر نیروی برشیِ غیرتماسی بین دو صفحه موازی SiO_2 آمورف–آمورف قرار دارد که با یک شکاف خلأ نانومتری جدا شده‌اند و تحت لغزش با سرعت ثابت قرار می‌گیرند. این کمیت تاکنون به‌صورت مستقیم، منظم و در شرایط کاملاً غیرتماسی بررسی نشده است؛ در حالی که بخش عمده کارهای موجود یا تماسی/شبه‌تماسی‌اند، یا تمرکز آن‌ها بر ترابرد گرمای نزدیک‌میدان بوده نه نیروی جانبی [۸,۱۲,۵–۱۳].

مدلسازی دینامیک مولکولی

سامانه از دو لایه موازی SiO_2 آمورف–آمورف تشکیل شده است که با یک شکاف خلأ به فاصله‌ی ۱ نانومتر از یکدیگر جدا شده‌اند. لایه بالایی با سرعت لغزش ثابت یکدهم آنگستروم بر پیکوثانیه حرکت داده می‌شود و هیچ بار نرمالی اعمال نمی‌شود؛ بنابراین نیروی اندازه‌گیری‌شده کاملاً ناشی از برهم‌کنش‌های غیرتماسی در شکاف است. برای مدل‌سازی نیروهای بین‌اتمی، از ترکیبی از پتانسیل باکینگهام برای برهم‌کنش‌های کوتاه‌بُرد، پتانسیل کولنی بلندبرد برای تعاملات الکترواستاتیکی، و پتانسیل مای برای بخش واندروالسی استفاده شده است. همچنین دما با ترموستات نوز–هوور در چند مقدار گسسته کنترل می شود.



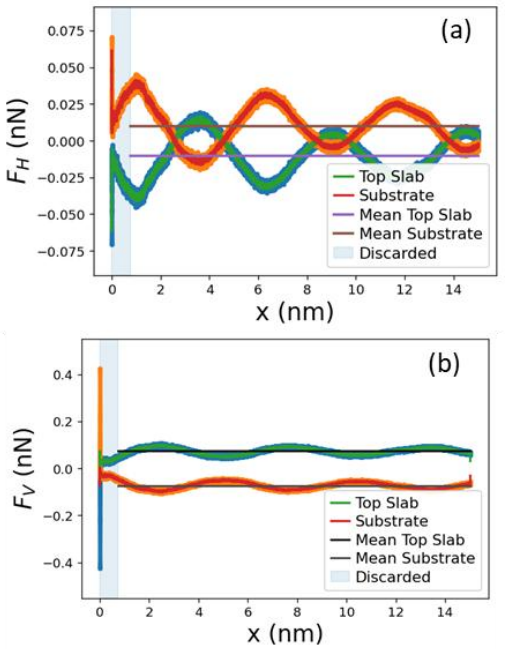
شکل ۱ : هندسه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی. یک لایه آمورف SiO_2 به‌صورت لغزشی روی زیرلایه مشابه حرکت می‌کند و بین آن‌ها شکاف خلأ ۱ نانومتر در راستای z قرار دارد. در وصله بزرگ‌نمایی‌شده، ناحیه میانی شکاف و دو مؤلفه نیروی وارد بر لایه بالا نشان داده شده‌اند.



شکل ۲ – اسنپ‌شات‌های دینامیک مولکولی از دو لایه آمورف سیلیکا که با شکاف خلأ ۱۰ آنگسترومی از هم جدا شده‌اند. (a) ساختار در دمای ۳۰۰ کلوین و (b) ساختار در دمای ۷۰۰ کلوین

نتایج

شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی نشان می‌دهند که در فصل مشترک دو لایه آمورف SiO_2 با یک شکاف خلأ، حتی در غیاب تماس مکانیکی و بدون اعمال بار نرمال، یک نیروی برشی غیرتماسی غیرصفر و مرتبه‌پایین شکل می‌گیرد. میانگین این نیرو که به‌صورت برابر و خلاف‌جهت بر لایه بالا و زیرلایه وارد می‌شود، در مرتبه صدم نانونیوتن است. در مقابل، مؤلفه نرمال نیرو و فشار مؤثر در شکاف بسیار کوچک‌اند و عملاً نزدیک به صفر باقی می‌مانند؛ موضوعی که نشان می‌دهد منشأ رفتار مشاهده‌شده صرفاً برهم‌کنش‌های غیرتماسی است و هیچ تماس مکانیکی در کار نیست.



شکل۳: نیروی وارد بر سامانه به‌صورت تابعی از مکان لغزش در دمای ۳۰۰ کلوین: (a) *مؤلفه جانبی* F_H (b) *مؤلفه نرمال* F_V .

شکل۳ نشان می‌دهد که نیروی مماسی لحظه‌ای دارای نوسان‌هایی شبه‌سینوسی است که به‌طور پیوسته حول یک مقدار میانگینِ غیرصفر علامت عوض می‌کنند. این رفتار با توجه به پتانسیل در فصلِ مشترک قابل تفسیر است؛

به‌طوری‌که لایه بالایی هنگام لغزش، به‌صورت متوالی از روی کمینه‌ها و بیشینه‌های موضعی پتانسیل میان‌صفحه‌ای عبور می‌کند. چنین الگویی با تصویر اتمیِ لغزش در مقیاس نانو سازگار بوده و نشان می‌دهد نوسان‌های مشاهده‌شده حاصل ناهمگنی‌های اتمی در فاصله شکاف است.

جدول ۱ – میانگین نیروی برشی غیرتماسی، نیروی نرمال و نسبت μ برای فصل‌مشترک سیلیکا–سیلیکا در فاصله شکاف ۱۰ آنگستروم و دو دمای ۳۰۰ و ۷۰۰ کلوین را نشان می‌دهد. با افزایش دما، نیروی نرمال و فشار مؤثر کاهش یافته و نسبت برشی μ بزرگ‌تر می‌شود.

d (Å)	T (K)	$\lvert F_H \rvert$ (nN)	$\lvert F_V \rvert$ (nN)	μ
۱۰	۳۰۰	۰٫۰۱۰	۰٫۰۷۲	۰٫۱۳۸ ± ۰٫۰۷۰
۱۰	۷۰۰	۰٫۰۱٤	۰٫۰۳۳	۰٫٤۲۰ ± ۰٫۰۱٦

مقایسه دو دمای نمونه نشان می‌دهد که افزایش دما عمدتاً موجب پهن‌تر شدن پروفیل‌های چگالی و بار در ناحیه فصلِ مشترک و کاهش هم‌بستگی ساختاری میان دو سطح روبه‌رو می‌شود. در نتیجه، مؤلفه نرمال نیرو و فشار مؤثر در شکاف کاهش یافته و سیگنال نیروی مماسی یکنواخت‌تر و هموارتر می‌شود، در حالی‌که مرتبه بزرگی نیروی مماسی تقریباً ثابت باقی می‌ماند. این رفتار نشان می‌دهد که اصطکاک غیرتماسی در این هندسه، عمدتاً تحت کنترل تابع پتانسیل و کوپلینگ فونونی است، و نقش دما بیشتر در «نرم‌کردن» و نامنظم‌سازی فصلِ مشترک و تضعیف جذب نرمال است تا حذف کامل کوپلینگ برشی.

نتیجه گیری

این مطالعه نشان داد که در فصل‌مشترک دو لایه آمورف SiO_2، حتی در جدایش نانومتری و بدون تماس مکانیکی، یک نیروی برشیِ غیرتماسیِ متناهی پدید می‌آید. این نیرو از گذر لایه بالا بر روی میدان نیروی میان صفحات و کوپلینگ فونونی (برهم‌کنش و تبادل انرژی بین ارتعاشات شبکه‌ای دو جسم) ناشی می‌شود و مرتبه بزرگی آن در دماهای مختلف تقریباً ثابت می‌ماند، در حالی‌که مؤلفه نرمال نیرو و فشار مؤثر نسبت به دما حساسیت بیشتری دارند. نتایج نشان می‌دهند که ساختار میان‌صفحه‌ای و نوسان‌های حرارتی می‌توانند در غیاب تماس، به‌تنهایی منجر به مقاومت جانبی شوند و بنابراین، اصطکاک غیرتماسی باید در تحلیل پایداری و اتلاف انرژی سامانه‌های ریز و نانومقیاس سیلیکایی مورد توجه قرار گیرد.

مرجع‌ها

[1] Bocquet L, Barrat J-L. Phys Rev E 49 (1994) 3079–3092.

[2] Bocquet L, Charlaix E. Chem Soc Rev 42 (2013) 7174–7206.

[3] Gnecco E et al. Phys Rev Lett 84 (2000) 1172–1175.

[4] Li Q et al. Phys Rev Lett 106 (2011) 126101.

[5] Xu W-Q, Zheng H. Acta Geotech (2023).

[6] Wei P-C et al. Colloids Surf A 676 (2023) 132296.

[7] Gao S et al. ACS Omega 6 (2021) 3384–3389.

[8] Ootani Y et al. J Phys Chem C 122 (2018) 10459–10467.

[9] Lee M, Vink RLC, Volkert CA, Krüger M. Phys Rev B 104 (2021) 174309.

[10] Plimpton S. J Comput Phys 117 (1995) 1–19.

[11] Thompson AP et al. Comput Phys Commun 271 (2022) 108171.

[12] van Beest BKS et al. (BKS) Phys Rev Lett 64 (1990) 1955.

[13] Yeh I-C, Berkowitz ML. J Chem Phys 111 (1999) 3155.

خواص الکترونی و ترابردی نانونوارهای سیلیسین لبه نامتقارن

آزادی، الهام[۱]؛ فرقدان ، روح اله[۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان، کیلومتر ٦ بلوار قطب راوندی، کاشان

چکیده

در این پژوهش به بررسی خواص الکترونی ، مغناطیسی و ترموالکتریک وابسته به اسپین در نانونوارهای سیلیسن با لبه نامتقارن درعرض‌های مختلف و پارامتر نقص را با استفاده از نظریه تابعی چگالی همراه با فرمالیسم انتقال همدوس می‌پردازیم . نتایج نشان می‌دهد که قطبش اسپین قوی، شکاف‌های نواری قابل تنظیم، و رفتار نیمه‌رسانای اسپینی که با حالت‌های نوار رسانش موضعی و نوار ظرفیت مشخص می‌شوند. این ویژگی‌ها باعث ایجاد ضریب سیبک اسپینی تا ۷۰۰ $\mu V/K$ می‌شود که تغییرات جزئی با تغییرات پتانسیل شیمیایی را نشان می‌دهد.هنگامی که یک گرادیان حرارتی در سراسر این نوع نانونوارها اعمال می شود، جریان های حرارتی وابسته به اسپین مجزا و دماهای آستانه قابل تنظیم ظاهر می شوند. به طور کلی، ماهیت اسپین نیمه هادی نانونوارهای سیلیسن با لبه نامتقارن همراه با تقارن نسبی ساختاری و پیکربندی لبه‌های توپولوژیکی، جریان حرارتی پایدار را با پارامتر نقص و عرض های مختلف نوار تضمین می‌کند.این ویژگی نانونوار ها را به کاندیداهای امیدوارکننده برای دستگاه‌های اسپینترونیک و اسپین کالریترونیک مبتنی بر سیلیسن تبدیل می‌کنند.

واژه های کلیدی: *نانونوارسیلیسن ، ،سیلیسن لبه متقارن، نظریه تابعی چگالی ، ترموالکتریک و اثر سیبک،*

Electronic and transport Properties of Janus silicene nanoribbons

Azadi, Elham[۱]; Farghadan, Rouhollah[۱]

[۱] *Department of Physics, University of kashan, kashan*

Abstract

In this study, we systematically investigate the electronic, magnetic, and spin-dependent thermoelectric properties of asymmetric edge silicene nanoribbons of various widths and defect parameters using density functional theory coupled with coherent transport formalism. The results show strong spin polarization, tunable band gaps, and spin semiconductor behavior characterized by localized conduction and valence band states. These features give rise to a spin Seebeck coefficient of up to ۷۰۰ μV/K that shows slight variations with chemical potential changes. When a thermal gradient is applied across this type of nanoribbons, distinct spin-dependent thermal currents and tunable threshold temperatures appear. Overall, the spin semiconductor nature of asymmetric edge silicene nanoribbons, together with the relative structural symmetry and topological edge configuration, ensures stable thermal flow with different defect parameters and band widths, making the nanoribbons promising candidates for silicene-based spintronic and spin caloritronic devices.

***Keywords**: Nanoribbon silicene, Janus silicon, density functional theory, thermoelectricity and the Seebeck effect.*

PACS No. ۷۰ - ۷۲

مقدمه

ساختارهای با لبه نامتقارن از دو بخش تشکیل شده‌اند که از نظر ترکیب و عملکرد متفاوت هستند .در طول چند سال گذشته، تحقیقات زیادی در مورد ساختارهای با لبه نامتقارن به دلیل خواص جذاب و کاربردهای بالقوه آنها در زمینه‌های مختلف، از جمله حسگرها توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده است[۳-۱].

سیلیسین، آنالوگ سیلیکونی گرافن، از یک لایه اتمی سیلیکون در شبکه لانه‌زنبوری دوبعدی تشکیل شده است. برخلاف گرافن، ساختار خمیده‌ی آن شامل دو زیرشبکه‌ی جابه‌جا شده است که امکان تنظیم شکاف نواری و ایجاد حالت‌های اسپین‌قطبی‌شده را تحت میدان الکتریکی فراهم می‌کند. این ویژگی‌ها موجب رفتار فرمیون دیراک با شکاف نواری قابل کنترل شده و سیلیسین را به

گزینه‌ای مناسب برای ترانزیستورهای اثر میدانی و دستگاه‌های نانوالکترونیک کم‌مصرف در دمای اتاق تبدیل می‌سازد [٤].

نانونوارهای سیلیسین با انتقال الکترون مؤثر و رسانایی حرارتی پایین، کاندیدای مطلوبی برای کاربردهای ترموالکتریک و حافظه‌های مغناطیسی نانومقیاس هستند. نتایج نشان می‌دهند که این ماده دارای پایداری ساختاری، قابلیت کمانش قابل تنظیم و پاسخ مکانیکی مناسب در برابر کرنش و دماهای مختلف است.این خصوصیات، سیلیسین را ماده‌ای چندمنظوره برای نانوالکترونیک، اسپینترونیک، ترموالکتریک و حافظه‌های کوانتومی معرفی می‌کنند[٥].

در این مقاله، ما خواص الکترونی و مغناطیسی نانونوارهای سیلیسین با لبه نامتقارن را بررسی می‌کنیم که هم رفتار مغناطیسی خالص و هم رفتار نیمه‌رسانایی اسپینی را نشان می‌دهند. ساختارهای الکترونی و مغناطیسی با استفاده از نظریه تابعی چگالی تجزیه و تحلیل می‌شوند، در حالی که خواص ترموالکتریک وابسته به اسپین از طریق یک فرمالیسم انتقال همدوس بر اساس رویکرد تطبیق مد محاسبه می‌شوند. با توجه به مغناطیس لبه ذاتی نانونوارهای سیلیسین با لبه نامتقارن ، همراه با حضور نوارهای ظرفیت و رسانش وابسته به اسپین گسترده و موضعی در نزدیکی سطح فرمی، نتایج ما ظهور یک اثر سیبک اسپینی و تولید جریان‌های ترموالکتریک قطبش اسپینی را در این سیستم مغناطیسی جدید پیش‌بینی می‌کند.

روش محاسبات

به صورت تجربی،نانونوارهای سیلیسن با لبه نامتقارن زیگزاگ متشکل از شش زنجیره زیگزاگ بر روی زیرلایه‌های طلا ساخته شده‌اند[٦] .در مدل ما، با یک لبه زیگزاگ کامل و یک لبه معیوب ساخته می‌شوند که با پارامتر نقص m مشخص می‌شود، که نشان دهنده تعداد حلقه‌های بنزن از دست رفته است. بنابراین هر ساختار به صورت (n,m) نمایش داده می‌شود، که در آن n تعداد زنجیره‌های زیگزاگ کامل است. هندسه نماینده در شکل (۱) نشان داده شده‌اند.. بهینه‌سازی هندسی با کد SIESTAانجا و از شبکه Monkhorst–Pack (۱۰۰×۱×۱)، انرژی قطع ۲۵۰ Ry و پایه DZP برای دقت بالا استفاده شد. برهم‌کنش‌ها در چارچوب پتانسیل همبستگی تبادلی در تقریب شیب تعمیم یافته مدل‌سازی و خلأ ۱۵ Å برای حذف اثرات تکرار دوره‌ای لحاظ گردید. در محاسبات انتقال همدوس، ضریب انتقال اسپین‌های بالا و پایین با روش تطبیق مد، تابع $T(\epsilon)$بر حسب انرژی تعیین شد.

$$T_{\uparrow,\downarrow}(\epsilon)=\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{Mf}\sum_{i=1}^{N}\left(\varphi_{\alpha i}^{\dagger}\varphi_{\alpha i}-\varphi_{\alpha i}^{\dagger}\sigma_z\varphi_{\sigma i}\right) \quad (۱)$$

در عبارت (۱) ، سیگما ماتریس پائولی است که جهت اسپین را در امتداد محور Z تعیین می‌کند. ویژه تابع φ_{α_i} تابعی است که با حالت اسپینی φ_α مرتبط است. اعمال گرادیان دما به ساختار باعث می‌شود توابع توزیع فرمی دیراک در الکترودهای گرم و سرد از تعادل خارج شوند. این عدم تقارن، همراه با گذار وابسته به اسپین، منجر به ظهور یک جریان القایی حرارتی قطبیده اسپینی برای حامل‌های الکترون و حفره بین دو الکترود می‌شود. در تقریب پاسخ خطی، این جریان را می‌توان به صورت تحلیلی به صورت زیر بیان کرد. به دلیل طول همدوسی اسپینی طولانی در ساختار و برهمکنش اسپین–مدار بالا در سیلیسین، جریان‌های اسپینی در کانال‌های اسپین بالا و اسپین پایین تقریباً مستقل از یکدیگر عمل می‌کنند. با این حال، می‌توان آنها را به طور جداگانه محاسبه کرد. اجزای جریان‌های اسپینی جدا شده به صورت رابطه (۲) بیان می‌شوند. که در این معادله ، e و h به ترتیب نشان دهنده بار بنیادی و ثابت

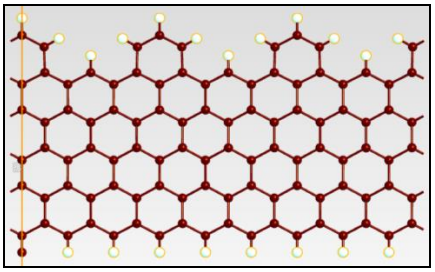
$$I_{\uparrow,\downarrow}=\frac{e}{h}\int T_{\uparrow,\downarrow}(\epsilon)[f_L(\epsilon,\mu_L,T_L)-f_R(\epsilon,\mu_R,T_R)d\varepsilon] \quad (۲)$$

پلانک هستند. T (R) و F (R) به ترتیب نشان دهنده دما و تابع توزیع فرمی–دیراک بین الکترودهای چپ و راست هستند. و نمادهای Lو R برای الکترودهای چپ و راست هستند. تابع توزیع فرمی–دیراک با فرض جریان صفر به مرتبه اول تقریب زده می‌شود و تابع انتقال میانی در رژیم پاسخ خطی را می‌توان به صورت زیر بیان کرد.

$$L_{n,\uparrow(\downarrow)}(\mu,T)=-\frac{1}{h}\int(\epsilon-\mu)^n\frac{\partial f(\epsilon,\mu,T)}{\partial\epsilon}T_{\uparrow(\downarrow)}(\epsilon)\,d\epsilon. \quad (۳)$$

ضریب سیبک اسپینی(SSC) به صورت نصف اختلاف بین ضرایب سیبک وابسته به اسپین برای کانال‌های اسپین بالا و پایین تعریف می‌شود و می‌تواند به صورت زیر باشد:

$$S_{\uparrow,\downarrow}(\mu,T) = -\frac{1}{|e|T}\frac{L_{1\uparrow,\downarrow}(\mu,T)}{L_{0\uparrow,\downarrow}(\mu,T)}. \qquad (٤)$$

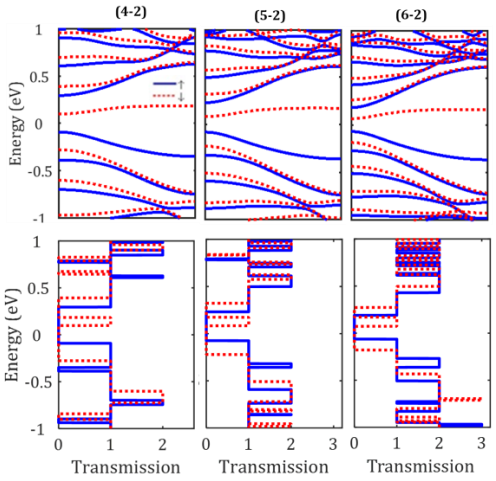


شکل (۱): یک سلول واحد از نانوارهای سیلیسی زیگزاگ سیلیسین با لبه نامتقارن .در اینجا، n نشان دهنده تعداد زنجیره‌های زیگزاگ کامل و m نشان دهنده پارامتر نقص (یعنی تعداد حلقه‌های بنزن از دست رفته) است. در این شکل، n در مقادیر ٤، ٥، ٦ تغییر میکند در حالی که m به صورت ۲ ثابت است.

در این پژوهش به بررسی خواص ترموالکتریکی نانونوار سیلیسین با لبه نامتقارن زیگزاگ،تقارن بین اسپین بالا و پایین از بین میرود بنابراین با توزیع آنتی‌فرومغناطیس که در نهایت منجر به ظهور مغناطش خالص و یک فاز فرومغناطیسی می‌شود. با توجه به این نوع ساختار، خواص مغناطیسی ویژه‌ای در لبه‌های زیگزاگ این نانونوار مشاهده می‌شود. در مطالعه، نانونوار سیلیسین با لبه نامتقارن با عرض‌های مختلف خواص الکترونی، مغناطیسی و ترابردی مورد بررسی قرار گرفته است. و با بررسی خواص الکترونی این ساختار نشان می‌دهد که جریان‌های حرارتی قابل‌کنترل بوده، دمای آستانه قابلیت تنظیم دارد و ضرایب سیبک قابل‌توجهی در سیستم مشاهده می‌شود.

بحث و نتایج

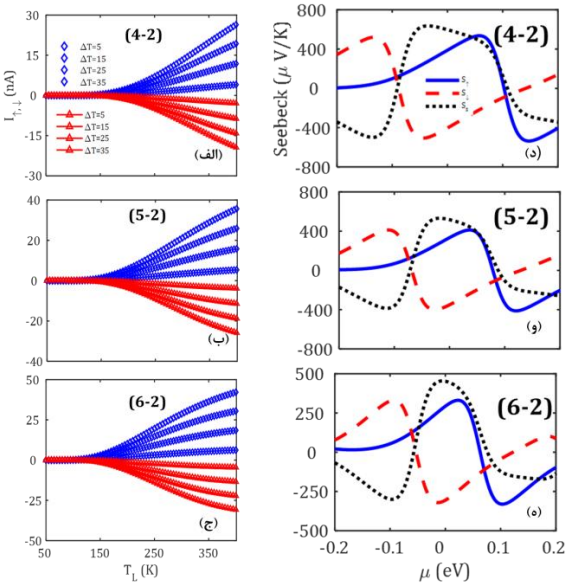
یک فاز فرومغناطیس برای m = ۱و یک فاز فری‌مغناطیس برای m >۲وجود دارد. نکته قابل توجه این است که برای m=۲ حالت پایه آنتی فرومغناطیس اسپینی در ساختارهای سیلیسن با لبه نامتقارن دارای نقص در لبه ناپدید میشود و منجر به یک حالت پایه فرومغناطیس پایدار میشود . طبق قضیه لیب، گشتاور مغناطیسی خالص در همه ساختارها برابر با ۱ است. با افزایش عرض نانونوار گاف نواری کاهش میابد . در این فرایند تعداد اتم های سیلیسن از ۲٦ اتم در ساختار (۲-٤) به ۳۸ اتم در ساختار (۲-٦)افزایش میابد . این تبدیل ساختاری تاثیر مستقیمی بر خواص مغناطیسی و انتقال الکترون در سیستم دارد



شکل (۲): ساختارهای نواری و ضرایب عبورنانونوار سیلیسین با لبه نامتقارن زیگزاگ، با پارامتر نقص m =۲ و عرض‌های نوار مختلف. خطوط قرمز خط‌چین و آبی به ترتیب مربوط به حالت‌های اسپینی اکثریت و اقلیت هستند، با انرژی فرمی صفر. نوارهای ظرفیت و رسانش موضعی در اطراف سطح فرمی باعث ایجاد پیک‌های عبوری پله‌ای در طیف عبوری می‌شوند.

در شکل(۲) ساختارهای نواری و ضرایب عبور با پارامتر نقص m= ۲ و برای پهناهای نواری مختلف شامل n=(٤،٥،٦) رسم شده‌اند. نتایج نشان میدهد که فاز نیمه‌هادی اسپینی وجود دارد که در آن اسپین الکترون‌ها و حفره‌ها، با هم متفاوت هستند. همچنین مشاهده می‌شود که با افزایش پهنای نانونوار، شکاف انرژی از حالت (۲-٤) به حالت(۲-٦) کاهش می‌یابد، در حالی که فاز نیمه‌هادی در تمامی پهناهای ساختار حفظ می‌شود. همین رفتار در ویژگی‌های ضرایب عبور نیز تأیید می‌شود و با توجه به یکسان بودن شکل کانال و اتصالات، این روند در تمامی حالات مورد بررسی حفظ می‌گردد. در این ساختارها گاف نواری به ترتیب تقریبا در (۲-٤) ۰/۱۸ev و (۲-٥) ۰/۱٥ev و (۲-٦) ۰/۱۳ev است. بنابراین با افزایش پهنای نانونوار سیلیسن با لبه نامتقارن

گاف نواری در ساختار کاهش می‌یابد و با توجه به توزیع آنتی فرومغناطیس که در این ساختارها در نظر گرفته شده است نوارهای الکترونی اسپین بالا و پایین ازهم جدا نشده اند. جریان الکترونی القا شده حرارتی ساختارها در شکل (۳الف–ج) ارائه شده است. به دلیل تقارن تقریبی تابع انتقال در اطراف سطح فرمی، سهم الکترون و حفره، متقارن مشابهی را نشان می‌دهد اما در جهت‌های مخالف جریان می‌یابد. با افزایش عرض نوار و در نتیجه کاهش شکاف نواری بزرگی جریان حرارتی افزایش می‌یابد. که حداکثر جریان حرارتی از تقریباً۳۰ نانوآمپر در (۲–٤) به بیش از ۵۰



شکل (۳): جریان حرارتی وابسته به اسپین و ضرایب سیبک وابسته به اسپین و ضریب سیبک اسپین کل (SSC) ساختار (n =٤،٥،٦) با دو حلقه بنزن از دست رفته (m =۲).خطوط قرمز خط چین و آبی پررنگ به ترتیب جریان‌های اسپین اکثریت و اقلیت را نشان می‌دهند. رفتار وابسته به اسپین مشابه در تمام عرض‌های نوار با شدت جریان‌های متفاوت مشاهده می‌شود.

نانوآمپر در (۲–٦) در دمای T=۳۵۰ کلوین و ΔT=۵۰ کلوین افزایش می‌یابد. علاوه بر این، دمای آستانه با کاهش عرض از حدود ۱۵۰ کلوین به۱۰۰ کلوین کاهش یافته است که نشان‌دهنده حساسیت فعال‌سازی حرارتی به شکاف نواری است به‌طور کلی، مقادیر جریان ناشی از موضعی‌شدن نوارها و ماهیت نیمه‌هادی ساختار هستند. وجود این رفتار نیمه‌هادی باعث می‌شود که برای جریان‌های اسپین بالا و پایین، دمای آستانه‌ای مشخص تعریف شود. اگرچه شکاف نواری قابل تنظیم منجر به تفاوت‌های قابل توجهی در بزرگی جریان می‌شود.

سرانجام برای بررسی بازدهی ترموالکتریکی ضرایب سیبک اسپینی متناظر برای همین ساختارها در شکل (۳د–ه)نشان داده شده‌اند. همان طور که می‌دانیم ضرائب سیبک در دمای اتاق و به صورت تابعی از پتانسیل شیمیایی است. اندازه سیبک به ترتیب تقریبا در شکل(۲-٤) μV/K۷۰۰ و (۲-۵) ۵۰۰ μV/K و در (۲-٦) ۳۰۰ μV/K است.بنابراین دیده می‌شود اندازه سیبک با افزایش پهنای نانونوار کاهش می‌یابد. مقدار ضرائب سیبک برای اسپین بالا (پایین) کاملا مشابه و از هم جدا نشده‌اند. و مقادیر صفر برای ضرائب سیبک نشان دهنده رفتار کاملا فلزی است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش با در نظر گرفتن مدل نظریه تابعی چگالی خواص ترموالکتریکی در نانونوار سیلیسین با لبه نامتقارن زیگزاگ مورد بررسی قرار گرفته است دیده می‌شود که با افزایش پهنا در نانونوار گاف نواری کاهش یافته و در نتیجه جریان حرارتی افزایش یافته و ضرایب سیبک نیز کاهش می‌یابد. به طور کلی در این پژوهش سعی بر آن شده است تا از راه‌کارهای موثر در آن باعث بهبود کارایی ترموالکتریکی سیستم شود.

مرجع‌ها

[۱] Ng, Sze-Wing, Nuruzzaman Noor, and Zijian Zheng. "Graphene-based two-dimensional Janus materials." NPG Asia materials ۱۰,٤ (۲۰۱۸): ۲۱۷-۲۳۷.
[۲] Ezawa, Motohiko, and Naoto Nagaosa. "Interference of topologically protected edge states in silicene nanoribbons." Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics ۸۸,۱۲ (۲۰۱۳): ۱۲۱٤۰۱
[۳] Yang, Hao-Cheng, et al. "Janus membranes: exploring duality for advanced separation." Angewandte Chemie International Edition ۵۵,٤۳ (۲۰۱٦): ۱۳۳۹۸-۱۳٤۰۷.
[٤] Farghadan, Rouhollah. "Bipolar magnetic semiconductor in silicene nanoribbons." Journal of Magnetism and Magnetic Materials ٤۳۵ (۲۰۱۷): ۲۰٦-۲۱۱.
[۵] Ferri, Matteo, et al. "Ab initio study of the structural, electronic, magnetic, and optical properties of silicene nanoribbons." Physical Review B ۹۹.۸ (۲۰۱۹): ۰۸۵٤۱٤.
[٦] Mao, Yuliang, et al. "Evolution of the electronic and magnetic properties of zigzag silicene nanoribbon used for hydrogen storage material." International Journal of Hydrogen Energy ٤۲,٤٤ (۲۰۱۷): ۲۷۱۸٤-۲۷۲۰۵.

بررسی اثر ناهمسانگردی تک‌محوره بر نیروی کاسیمیر در سامانه‌های میکرومکانیکی ساخته شده از عایق‌های توپولوژیک

نصیری، زهرا[۱]؛ تاجیک، فاطمه[۲]

[۱] گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک دانشگاه الزهرا، تهران

[۲] گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک دانشگاه الزهرا، تهران

چکیده

نیروی کاسیمیر نقش مهم و اجتناب‌ناپذیری در عملکرد و کارایی سامانه‌های میکروالکترومکانیکی ایفا می‌کند. انتخاب نوع ماده می‌تواند ناحیه عملکرد پایدار و همچنین شرایط آستانه رفتار آشوبناک را به‌طور قابل توجهی تحت تأثیر قرار دهد. در این پژوهش، جنس صفحات میکروسامانه از عایق توپولوژیک در نظر گرفته شده است. به‌منظور بررسی تأثیر ناهمسانگردی تک‌محوره بر نیروی کاسیمیر، این ویژگی در مدل لحاظ شده است. نتایج نشان می‌دهد حساسیت نیروی کاسیمیر جاذبه و دافعه نسبت به مغناطش و فاصله میان اجزا، در حضور ناهمسانگردی ضعیف افزایش می‌یابد. در ناحیه مغناطش قوی نیز، نیروی کاسیمیر وابستگی قابل‌توجهی به ناهمسانگردی از خود نشان نمی‌دهد.

واژه های کلیدی: *سامانه‌های میکروالکترومکانیکی، نیروی کاسیمیر، عایق توپولوژیکی، ناهمسانگردی.*

Influence of uniaxial anisotropy in micromechanical Casimir oscillators with topological insulator materials

Nasiri, Zahra[1]; Tajik, Fatemeh[2]

[1] *Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Physics Alzahra University, Tehran*
[2] *Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Physics Alzahra University, Tehran*

Abstract

Casimir effect play an inevitable role in the operation and efficiency of microelectromechanical systems (MEMS). Various materials can change the region of stable operation and the threshold condition for chaotic behavior. In this study, the components of the micro device are topological insulator plates. The effect of uniaxial anisotropy is included to explore how this property can modify the Casimir force. For an autonomous micro device, the sensitivity of the ratio between the attractive and repulsive Casimir forces to magnetization and the distance between components is more significant when considering weak anisotropy. In the regime of strong magnetization, the force does not show any sensitivity to anisotropy.

***Keywords**: Microelectromechanical systems, Casimir force Topological insulator, Anisotropy.*

PACS No. 60,68

مقدمه

در سال‌های اخیر، با گسترش مطالعات علمی در حوزه مواد پیشرفته شاهد پیشرفت‌های چشم‌گیری در طراحی و افزایش کارایی در حوزه سامانه‌های میکرو و نانو هستیم که معمولاً تحت عنوان سامانه‌های میکرو/نانوالکترومکانیکی شناخته می‌شوند. در این سامانه‌ها، با افزایش نسبت سطح به حجم، شرایط مرزی اهمیت ویژه‌ای پیدا می‌کنند. در نتیجه، نیروی کاسیمیر به‌عنوان یک

نیروی کوانتومی، نقش اجتناب‌ناپذیری در عملکرد این سامانه‌ها ایفا می‌کند [۱].

نیروی کاسیمیر، به عنوان یک پدیده کوانتومی، برای اولین بار توسط هندریک کاسیمیر در سال ۱۹۴۸ کشف شد [۲]. این نیرو ناشی از نوسانات کوانتومی میدان الکترومغناطیسی است. در دهه ۱۹۵۰، لیفشیتز و همکارانش این ایده را توسعه دادند و نیروی کاسیمیر را بین صفحات دی‌الکتریک مورد بررسی قرار دادند [۳]. آن‌ها از قضیه اتلاف- افت وخیز استفاده کردند که نوسانات میدان الکترومغناطیسی را با ویژگی‌های اتلافی صفحات مرتبط می‌کند. این امر ناشی از جذب میدان توسط تعداد بسیاری از دو قطبی‌ها است. این نظریه، برهمکنش جاذبه‌ای ایجاد شده توسط نوسانات کوانتومی و افت و خیزهای دمایی را برای تمام فاصله‌ها توضیح می‌دهد و شامل ناحیه کاسیمیر (بلند برد) و ناحیه واندروالس (کوتاه برد) می‌شود [۴،۵].

وابستگی نیروی کاسیمیر به ویژگی‌های اپتیکی مواد، یکی از یافته‌های بنیادی نظریه لیفشیتز است که امکان تنظیم عملکرد اجزای متحرک میکروسامانه‌ها را فراهم می‌کند [۶]. به‌عنوان مثال، استفاده از عایق‌های توپولوژیکی در دستگاه‌های میکروالکترومکانیکی امکان کنترل دقیق نیروی کاسیمیر را فراهم می‌آورد و همچنین اجازه می‌دهد که نیرو از حالت جاذبه‌ای به دافعه‌ای تغییر کند [۷]. از آنجا که عایق‌های توپولوژیکی می‌توانند تحت شرایط خاص نیروهای کاسیمیر دافعه ایجاد کنند، به‌کارگیری آن‌ها در طراحی سامانه‌های میکروالکترومکانیکی یک چشم‌انداز بسیار امیدوارکننده است. اثر مگنتوالکتریک به‌طور قابل توجهی بر معادلات ماکسول و ضرایب فرنل تأثیر می‌گذارد و باعث تغییر در بزرگی و جهت نیرو می‌شود. مطالعه‌ها نشان می‌دهند در فاصله‌های کوتاه، بین دو صفحه عایق توپولوژیک مغناطش هم‌جهت نیروی جاذبه و مغناطش خلاف جهت می‌تواند منجر به ایجاد نیروی کاسیمیر دافعه شود [۷].

تا کنون، پژوهش‌های متعددی در مورد تأثیر ویژگی‌های نوری بر دینامیک عملکرد دستگاه‌های ساخته شده با ابعاد میکرو انجام شده است [۶]. در این پژوهش، هدف اصلی بررسی حساسیت عملکرد پایدار دستگاه‌هایی با ابعاد میکرو ساخته شده از عایق‌های توپولوژیک نسبت به ناهمسانگردی است. اثر ناهمسانگردی تک‌محوره در نظر گرفته شده تا مشخص شود چگونه این ویژگی می‌تواند نیروی کاسیمیر را تغییر دهد. برای یک میکرو دستگاه بدون اتلاف انرژی، این پرسش مطرح می‌شود که چگونه حساسیت نیروی کاسیمیر جاذبه‌ای و دافعه‌ای نسبت به ناهمسانگردی با بزرگی مغناطش تغییر می‌کند.

روش محاسبات

در این پژوهش، میکروسامانه به شکل دو صفحه‌ی موازی از عایق توپولوژیک Bi_2Se_3 است که با یک لایه نازک مغناطیسی پوشش داده شده‌اند. در محاسبات انجام‌شده، اثر دما نادیده گرفته شده و فاصله میان اجزای سامانه کمتر از ۴۰۰ نانومتر در نظر گرفته می‌شود. انرژی کاسیمیر میان دو صفحه‌ی موازی در دمای صفر مطلق (T = 0 K) با بهره‌گیری از نظریه لیفشیتز به صورت زیر محاسبه می‌شود [۳]:

$$E(z) = \frac{\hbar}{4\pi^2}\int_0^\infty d\xi \int_0^\infty d k_\perp k_\perp \, log\, det\,[1 - R_1 R_2\, exp(-2k_0 z))] \qquad (۱)$$

در رابطه (۱)، $k_\parallel$ بردار موج درون صفحه را نشان می‌دهد، ξ نیز بیانگر فرکانس موهومی است $(\omega = i\xi)$ و رابطه زیر:

$$k_i = \sqrt{\varepsilon_{\perp i}(i\xi)\frac{\xi^2}{c^2} + k_\perp^2} \qquad (i = 0, 1, 2) \qquad (۲)$$

بردار موج عمود بر صفحات را نشان می‌دهد. ماتریس‌های بازتاب مربوط به صفحه‌ی اول و دوم با ضرایب فرنل مشخص شده و با $R_{1,2}$ نام‌گذاری می‌شوند. یک صفحه عایق توپولوژیکی بدون لایه مغناطیسی دارای ماتریس‌های بازتاب قطری است، در حالی که یک صفحه‌ی عایق توپولوژیکی پوشانده شده با لایه مغناطیسی به دلیل اثر مگنتوالکتریک، شامل جمله‌های غیرقطری با قطبش‌های آمیخته است. پلاریزه عرضی الکتریکی (TE)، پلاریزه عرضی مغناطیسی (TM) و قطبش‌های آمیخته (TEM) به‌ترتیب توسط ضرایب بازتاب فرنل، r_s^i ، r_p^i و r_{sp}^i توصیف می‌شوند. عناصر قطری ماتریس بازتاب برابر با r_s^i و r_p^i هستند، در حالی که عنصر غیرقطری آن r_{sp}^i است. یکی از روش‌های بیان ضرایب بازتاب به صورت زیر است:

$$r_s^i = \frac{(k_0 - k_i)(\epsilon_\perp k_0 + k_i') - k_i' k_0 \tilde{\alpha}_i^2}{(k_0 + k_i)(\epsilon_\parallel k_0 + k_i) + k_i k_0 \tilde{\alpha}_i^2} \qquad (۳)$$

$$r_p^i = \frac{(k_0 - k_i)(\epsilon_\perp k_0 - k_i') + k_i' k_0 \tilde{\alpha}_i^2}{(k_0 + k_i)(\epsilon_\parallel k_0 + k_i') + k_i' k_0 \tilde{\alpha}_i^2} \qquad (۴)$$

$$r_{sp}^{i}=\frac{2k_i'k_0\tilde{\alpha}_i}{(k_0+k_i)(\epsilon_{\parallel}k_0+k_i')+k_i'k_0\tilde{\alpha}_i^2} \quad (۵)$$

که در آن:

$$k_i'=\sqrt{\varepsilon_{\perp i}(i\xi)\frac{\xi^2}{c^2}+k_{\perp}^2\varepsilon_{\perp i}/\varepsilon_{zi}} \quad (۶)$$

افزون بر این، ثابت ساختار ریز برابر با $\alpha\approx 1/137$ و $\tilde{\alpha}_i=\alpha\theta_i/\pi$ است. همچنین، $\varepsilon_{\parallel}$ و ε_z به ترتیب پاسخ دی‌الکتریک در راستاهای داخل صفحه و خارج صفحه را نشان می‌دهند، در حالی که θ_i مشخصه اثر مگنتوالکتریک است. در این مطالعه، از عایق‌های توپولوژیکی غیرمغناطیسی با تراوایی مغناطیسی واحد $(\mu=1)$ استفاده شده است. با مشتق‌گیری از رابطه‌ی (۱)، $(F(z)/A=-dE(z)/dz)$ نیروی کاسیمیر به‌دست می‌آید. در صورتی که جمله‌های غیرقطری در ماتریس‌های بازتاب در نظر گرفته شوند، اندازه و جهت نیروی کاسیمیر (از جاذبه به دافعه) هر دو می‌توانند تغییر کنند.

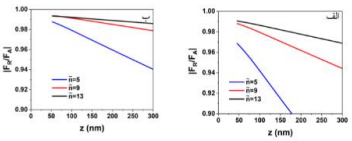
برای استفاده از نظریه لیفشیتز به منظور محاسبه نیروی کاسیمیر بین مواد واقعی، داشتن دانش دقیق از تابع‌دی‌الکتریک در فرکانس‌های موهومی، ضروری است. بر اساس مطالعات پیشین [۷]، تابع دی‌الکتریک را می‌توان با در نظر گرفتن چگالی پایین حامل‌های بار آزاد در عایق‌ها، در هر دو راستای خارج از صفحه (z) و درون صفحه $(\perp)$ به صورت زیر بیان کرد.

$$\epsilon_i(\xi)=1+\frac{\omega_{e_i}^2}{\xi^2+\omega_{R_i}^2+\gamma\xi} \qquad (i=z,\perp) \quad (۷)$$

در این رابطه ω_R فرکانس تشدید و ω_e فرکانس قدرت نوسانی مولکول‌های صفحات در هر دو راستای خارج و درون صفحه است. γ ضریب میرایی را نشان می‌دهد و چون بسیار کوچک‌تر از فرکانس تشدید در نظر گرفته می‌شود بنابراین قابل چشم‌پوشی است. عایق توپولوژیک Bi_2Se_3 دارای یک فرکانس تشدید برابر با $\omega_{R_{\parallel}}=\omega_{R_z}=\omega_R=56\ cm^{-1}$ است[۷]. برای ω_e در هر دو راستا، اثر ناهمسانگردی در نظر گرفته شده و فرض می‌شود که $\omega_{e_z}=0.45$ (بر حسب واحد ω_R) است. صفحات عایق توپولوژیکی زمانی که یک لایه نازک مغناطیسی (با ضخامت بسیار کمتر از d که در آن d فاصله بین صفحات است) بر سطح آن‌ها اعمال شود، به‌طور کامل عایق می‌شوند. این امر امکان توصیف تابع دی‌الکتریک عایق توپولوژیکی را با رابطه (۷) فراهم می‌کند[۷]. علاوه بر این، فرض می‌شود که لایه مغناطیسی به اندازه کافی نازک است، به‌طوری‌که بتوان هرگونه اثر نیروی کاسیمیر ناشی از آن را نادیده گرفت. این فرآیند را می‌توان به‌صورت تجربی کنترل کرد و با $\theta(\tilde{n})=\tilde{n}\pi$ توصیف نمود، که در آن $\tilde{n}$ یک عدد صحیح فرد بوده و $\theta(\tilde{n})$ بیانگر قطبش‌پذیری مگنتوالکتریکی توپولوژیک (TEMP) است[۷]. قطبش‌پذیری مگنتوالکتریکی توپولوژیکی ناشی از تغییر نیروی کاسیمیر بر اثر پدیده مگنتوالکتریک است که خود موجب اصلاح معادلات ماکسول نیز می‌شود.

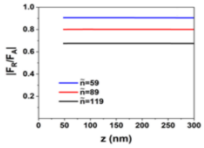
نتایج

در این مطالعه دو ناهمسانگردی با مقادیر زیر در نظر گرفته شده است $\frac{\omega_{e_z}}{\omega_{e_{\parallel}}}=\frac{0.9}{0.8}$ و $\frac{\omega_{e_z}}{\omega_{e_{\parallel}}}=\frac{0.9}{0.2}$. در حالت دوم $(\frac{\omega_{e_z}}{\omega_{e_{\parallel}}}=\frac{0.9}{0.2})$ علاوه بر افزایش اثر ناهمسانگردی، قدرت تابع دی‌الکتریک نیز تضعیف می‌شود. همان‌طور که در شکل ۱ نشان داده شده است، در ناحیه‌های مغناطش کوچک، با افزایش مغناطش، نیروی دافعه در تمام فواصل از نیروی جاذبه قوی‌تر می‌شود. این موضوع نشان‌دهنده تقویت اثر مگنتوالکتریک است. علاوه بر این، در هر مقدار معین از مغناطش، با افزایش فاصله، نیروی جاذبه قوی‌تر می‌شود و این پدیده در مقادیر کوچک‌تر مغناطش قوی‌تر است. در شکل ۱ (ب) مشاهده می‌شود که با افزایش ناهمسانگردی، فاصله بین خطوط نمودار کاهش می‌یابد. این امر بیانگر وابستگی ضعیف‌تر نیرو به فاصله و مغناطش است و نشان می‌دهد که تابع دی‌الکتریک تضعیف شده است. بنابراین، این موضوع منجر به کاهش شدت برهمکنش مگنتوالکتریک و در نتیجه کاهش حساسیت نیرو به مقدار مغناطش اعمال‌شده در میکروسامانه می‌شود.



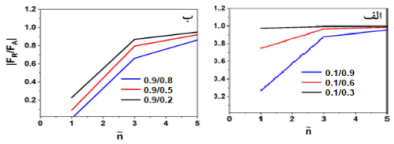
شکل ۱: نسبت نیروی کاسیمیر دافعه به جاذبه بر حسب فاصله بین صفحات در ناحیه مغناطش‌های ضعیف. اثر ناهمسانگردی دی‌الکتریک در نمودار (الف) $\frac{\omega_{e_z}}{\omega_{e_{\parallel}}}=\frac{0.9}{0.8}$ و در (ب) $\frac{\omega_{e_z}}{\omega_{e_{\parallel}}}=\frac{0.9}{0.2}$ است. مقادیر مغناطش نیز درشکل مشخص شده‌اند.

در شکل ۲، هدف ما بررسی اثر خواص دی‌الکتریک ناهمسانگرد در حضور مغناطش‌های قوی است. از آنجا که قدرت مغناطش اعمال‌شده زیاد است، در نتیجه اثر مگنتوالکتریک نیز به‌طور متناسب قوی بوده و بنابراین امکان تأثیرگذاری قابل‌توجهی را برای تابع دی‌الکتریک فراهم نمی‌کند. مشاهده می‌شود با وجود تفاوت در میزان ناهمسانگردی و قدرت دی‌الکتریک، نسبت نیروی دافعه به نیروی جاذبه ثابت باقی می‌ماند. این نسبت همچنین با افزایش قدرت مغناطش کاهش می‌یابد. در ناحیه مغناطش‌های بزرگ، بزرگی نیروی کاسیمیر جاذبه به دلیل افزایش بخش مؤلفه‌های قطری ماتریس ضرایب بازتاب افزایش می‌یابند. در نتیجه، در این ناحیه با افزایش مغناطش، نسبت بین دو نیرو کاهش پیدا می‌کند.



شکل ۲: نسبت نیروی کاسیمیر دافعه به جاذبه بر حسب فاصله بین صفحات در ناحیه مغناطش‌های قوی برای هر دو اثر ناهمسانگردی دی‌الکتریک $\frac{\omega_{e_z}}{\omega_{e_\perp}}=\frac{0.9}{0.8}$ و $\frac{\omega_{e_z}}{\omega_{e_\perp}}=\frac{0.9}{0.2}$. مقادیر مغناطش در شکل مشخص شده‌اند.

در شکل۳ (الف) مشاهده می‌شود که با هر مقدار مغناطش اعمال‌شده، نیروی جاذبه با تقویت ناهمسانگردی و در نتیجه تقویت تابع دی‌الکتریک افزایش می‌یابد. علاوه بر این، با افزایش مغناطش و تشدید اثر مگنتوالکتریک، فاصله بین منحنی‌ها کاهش می‌یابد. در این شرایط، توابع دی‌الکتریک نمی‌توانند تأثیر قابل‌توجهی بر نیروی ایجاد شده داشته باشند. شکل۳ (ب) نشان می‌دهد که هنگامی که مغناطش‌های بسیار کوچک اعمال می‌شوند، نیروها برخلاف شکل ۳ (الف) حساسیت شدیدی نسبت به تغییرات ناهمسانگردی از خود نشان نمی‌دهند. این رفتار ناشی از قوی‌تر بودن تابع دی‌الکتریک در شکل ۳ (ب) است. بنابراین ناهمسانگردی‌های مختلف، نمی‌توانند پاسخ دی‌الکتریک را به طور قابل توجهی در مقایسه با شکل ۳ (الف) تغییر دهند.



شکل ۳: نسبت نیروی کاسیمیر دافعه به جاذبه بر حسب مغناطش در محدوده قدرت مغناطش‌های ضعیف، با در نظر گرفتن توابع دی‌الکتریک ناهمسانگرد. فاصله بین صفحات ۲۵۰ نانومتر است. $\frac{\omega_{e_z}}{\omega_{e_\perp}}$ در شکل نشان داده شده است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، نقش ناهمسانگردی تک‌محوره بر نیروی کاسیمیر در سیستم‌های میکرومکانیکی شامل مواد عایق توپولوژیک، مورد بررسی قرار گرفت. با مدلسازی دو صفحه موازی از جنس عایق توپولوژیک با پوشش‌های مغناطیسی، بررسی شد چگونه تغییرات ناهمسانگردی و مغناطش بر بزرگی و علامت نیروی کاسیمیر تاثیر می‌گذارند. در بازه مغناطش‌های قوی، نیروی کاسیمیر هیچ حساسیتی نسبت به ناهمسانگردی نشان نمی‌دهد که ناشی از غلبه اثرات مگنتوالکتریک است. این امر نشان‌دهنده آستانه‌ای است که فراتر از آن، تغییرات دی‌الکتریک تأثیر محدودی دارند. این یافته‌ها نشان می‌دهند که کنترل هدفمند خواص ناهمسانگردی و مغناطش می‌تواند برای بهینه‌سازی عملکرد سامانه، کاهش پدیده چسبندگی اجزا سامانه و امکان تغییر معکوس بین نیروی کاسیمیر جاذبه و دافعه به کار گرفته شود.

سپاسگزاری

با نهایت سپاس از حمایت و پشتیبانی دانشکده فیزیک دانشگاه الزهرا.

مرجع‌ها

[1] A. W. Rodriguez, F. Capasso, and S. G. Johnson; “The Casimir effect in microstructured geometries”; *Nature Photonics*, **5** (2011) 211–221.
[2] H. B. G. Casimir; “On the attraction between two perfectly conducting plates”; *Proceedings of the Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen*, **51** (1948) 793–795.
[3] E. M. Lifshitz; “The theory of molecular attractive forces between solids”; *Soviet Physics JETP*, **2** (1956) 73–83.
[4] G. L. Klimchitskaya, U. Mohideen, and V. M. Mostepanenko; “Pulsating Casimir force”; *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **40**, No. 34 (2007) 841–850.
[5] G. L. Klimchitskaya and V. M. Mostepanenko; “Casimir interaction between graphene and substrate”; *Physical Review B*, **89**, No. 3 (2014) 035407
[6] F. Tajik, M. Sedighi, M. Khorrami, A. A. Masoudi, and G. Palasantzas; “Chaotic behavior in Casimir oscillators: A case study for phase-change materials”; *Physical Review E*, **96**, No. 4 (2017) 042215.
[7] A. G. Grushin and A. Cortijo; “Tunable Casimir repulsion with three-dimensional topological insulators”; *Physical Review Letters*, **106**, No.2 (2011)020403.

بررسی سهم چندقطبی‌های الکتریکی و مغناطیسی در یک نانوکره‌ی هسته پوسته‌ی طلا- سیلیسیوم در حضور میدان مغناطیسی پایا

همتی کلی ، حمیده[1] ؛ نصیری، مجتبی[2] ؛ مددی، ابراهیم[3]

[1و2] دانشکده علوم ، گروه فیزیک ، دانشگاه زنجان، زنجان

[3] دانشکده علوم مهندسی و مهندسی فیزیک، مرکز آموزش عالی فنی و مهندسی بوئین زهرا، بوئین زهرا

چکیده

نانوساختارهای هیبریدی عمدتا متشکل از یک بخش پلاسمونیک و یک بخش دی الکتریک هستند که درترکیب با یکدیگر به‌واسطه‌ی برهم‌کنش و هم‌پوشانی طیفی میان رزونانس‌های الکتریکی و مغناطیسی ویژگی های اپتیکی دیگری را از خود بروز می‌دهند. در این پژوهش دورنگی دایروی یک ساختار هسته پوسته و سهم چندقطبی‌های الکتریکی و مغناطیسی مورد بررسی قرار گرفته است. مشاهده شد که در شعاع های مختلف از هسته، به سبب برهمکنش رزونانس های الکتریکی و مغناطیسی طیف های متفاوتی به وجود می آید و در حضور میدان مغناطیسی پایا مقدار دورنگی دایروی نیز افزایش می‌یابد.

واژه های کلیدی: *چندقطبی‌های الکتریکی و مغناطیسی ، دورنگی دایروی، پلاسمونیک، دی الکتریک*

Investigating the Contribution of Electric and Magnetic Multipoles in a Silicon–Gold Core-Shell Nanosphere in the Presence of a Static Magnetic Field

Hemmati Koli, Hamideh[1]; Nasiri, Mojtaba[2] , Madadi, Ebrahim

[1,2] Faculty of Science, Department of Physics, University of Zanjan, Zanjan
[3] Faculty of Engineering Sciences and Physics, Buien Zahra Technical University , Buien Zahra

Abstract

Hybrid nanostructures are mainly composed of a plasmonic component and a dielectric component and when combined, they exhibit additional optical properties arising from the interaction and spectral overlap between electric and magnetic resonances. In this study, the circular dichroism of a core–shell structure and the contribution of electric and magnetic multipoles are investigated. It was observed that at different core radii, various spectra emerge due to the interaction between electric and magnetic resonances, and that the circular dichroism increases in the presence of a static magnetic field.

***Keywords**: electric and magnetic multipoles, circular dichroism, plasmonic,dielectric*

PACS No.

مقدمه

در نانوفوتونیک، یکی از اهداف اصلی، کنترل و دست‌کاری نور در مقیاس نانومتری است. برای این منظور، از نانوذرات پلاسمونیک یا دی‌الکتریک با ضریب شکست بالا به‌طور گسترده استفاده می‌شود[1]. نانوذرات پلاسمونیک عمدتاً به رزونانس دوقطبی الکتریکی محدود می‌شوند. در مقابل، نانوذرات

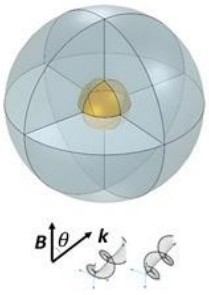
دی‌الکتریک با ضریب شکست بالا- همچون Si ، Geو مواد نیمه‌هادی مشابه- به‌دلیل ضرایب خاموشی بسیار پایین و امکان مهندسی پراکندگی، قادرند هم‌زمان رزونانس‌های الکتریکی و مغناطیسی را در گستره‌ی مرئی تا نزدیک فروسرخ پشتیبانی کنند و امکان ایجاد سازوکارهای پیشرفته‌ای همچون پراکندگی غیرمتقارن را فراهم می‌کنند. ترکیب مزیت‌های مکمل نانوذرات فلزی و دی‌الکتریک- به‌ویژه در قالب ساختارهای هیبریدی پلاسمونیک - دی‌الکتریک چشم‌اندازی نوین برای مهندسی پاسخ‌های اپتیکی گشوده است[2,3] . نانوساختارهای هیبریدی فلز–دی‌الکتریک از نوع هسته–پوسته، به‌واسطه‌ی برهم‌کنش و هم‌پوشانی طیفی میان رزونانس‌های الکتریکی و مغناطیسی اجزای تشکیل‌دهنده‌ی خود، قادر به ایجاد پاسخ‌های اپتیکی غیرمتعارف و مهندسی‌شده‌ای هستند که در ساختارهای منفرد قابل دستیابی نیست[4] .

ممان‌های چندقطبی که بر اساس مرتبه‌ی آن‌ها- مانند دوقطبی، چهارقطبی و بالاتر- و نوع آن‌ها، الکتریکی یا مغناطیسی، دسته‌بندی می‌گردند. هر یک از این ممان‌ها با یک میدان چندقطبی متناظر مرتبط است و کل مجموعه‌ی آن‌ها قادر است تابش الکترومغناطیسی منبع و همچنین نحوه‌ی تعامل آن با میدان‌های خارجی را به‌طور کامل توصیف کند[1].

در این مطالعه سعی براین شده است تا با استفاده از روابط موجود برای ممانهای چندقطبی الکتریکی و مغناطیسی ، سهم آنها را در ایجاد روزنانسهای پراکندگی از سطح نانوذرات هسته–پوسته مشخص کنیم و دورنگی دایروی را در حضور میدان مغناطیسی پایا رسم کنیم.

تئوری

مدل مورد مطالعه‌ی ما نانوذره هسته–پوسته طلا–سیلیسیم به شعاع کلی 225 نانومتر و با شعاع اولیه 60 نانومتر است که تحت تابش میدان الکترومغناطیسی با قطبش دایروی راستگرد و چپگرد قرار دارد (شکل 1). به دلیل حضور میدان مغناطیسی پایا ضریب گذردهی هسته به شکل ماتریس متقارن درخواهد آمد.



شکل 1) نانوذره هسته–پوسته

$$\varepsilon_r(\omega)=\begin{pmatrix}\varepsilon_{xx}(\omega) & iG_0\omega_c e_z & -iG_0\omega_c e_y\\ -iG_0\omega_c e_z & \varepsilon_{yy}(\omega) & iG_0\omega_c e_x\\ iG_0\omega_c e_y & -iG_0\omega_c e_x & \varepsilon_{zz}(\omega)\end{pmatrix} \quad (1)$$

که در آن $\varepsilon_{xx}(\omega)=\varepsilon_{yy}(\omega)=\varepsilon_{zz}(\omega)=1-\frac{\omega_p^2}{(\omega^2+i\gamma\omega)}$ ، $G_0=\frac{\omega_p^2}{\omega(\omega+i\gamma)^2}$ ، $\omega_c=\frac{B_0 e}{m_e}$ و $\omega_p=\sqrt{\frac{4\pi n_e e^2}{m_e}}$ است.

عبارت‌های دقیق زیر برای ممان‌های چندقطبی الکتریکی و مغناطیسی القا شده که برای هر طول‌موج و هر شکلی از ذرات معتبر هستند [1] :

$$p_\alpha=-\frac{1}{i\omega}\left\{\int d^3\boldsymbol{r}J_\alpha^\omega j_0(kr)+\frac{k^2}{2}\int d^3\boldsymbol{r}[3(\boldsymbol{r}.\boldsymbol{J}_\omega)r_\alpha-r^2J_\alpha^\omega]\frac{j_2(kr)}{(kr)^2}\right\}$$
$$m_\alpha=\frac{3}{2}\int d^3\boldsymbol{r}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{J}_\omega)_\alpha\frac{j_1(kr)}{kr}$$
$$Q_{\alpha\beta}^e=-\frac{3}{i\omega}\left\{\int d^3\boldsymbol{r}\left[3\left(r_\beta J_\alpha^\omega+r_\alpha J_\beta^\omega\right)-2(\boldsymbol{r}.\boldsymbol{J}_\omega)\delta_{\alpha\beta}\right]\frac{j_1(kr)}{kr}\right.$$
$$\left.+2k^2\int d^3\boldsymbol{r}\left[5r_\alpha r_\beta(\boldsymbol{r}.\boldsymbol{J}_\omega)-(r_\alpha r_\beta+r_\beta r_\alpha)r^2-r^2(\boldsymbol{r}.\boldsymbol{J}_\omega)\delta_{\alpha\beta}\frac{j_3(kr)}{(kr)^3}\right]\right\}$$
$$Q_{\alpha\beta}^m=15\int d^3\boldsymbol{r}\{r_\alpha(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{J}_\omega)_\beta+r_\beta(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{J}_\omega)_\alpha\}\frac{j_2(kr)}{(kr)^2} \quad (2)$$

که در آن p_α و m_α به ترتیب ممان دو قطبی الکتریکی(ED) و مغناطیسی(EQ) و $Q_{\alpha\beta}^e$ و $Q_{\alpha\beta}^m$ به ترتیب ممان چهارقطبی الکتریکی (MD) و مغناطیسی(MQ) هستند.

حال با استفاده از این ممان‌ها می‌توان عبارتی برای سطح مقطع پراکندگی کل به صورت زیر نوشت:

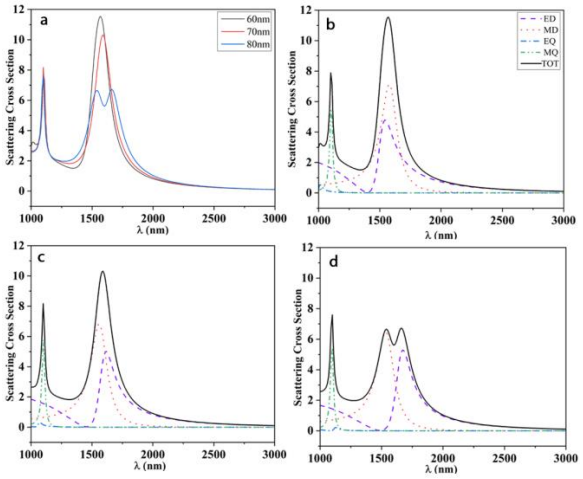
$$C_{sca}^{total} = \frac{k^4}{6\pi\varepsilon_0^2|E_{inc}|^2}\left[\sum_{\alpha}\left(|p_\alpha|^2 + \left|\frac{m_\alpha}{c}\right|^2\right) + \frac{1}{120}\Sigma_{\alpha\beta}\left(\left|kQ_{\alpha\beta}^e\right|^2 + \left|\frac{kQ_{\alpha\beta}^m}{c}\right|^2\right) + \cdots\right] \quad (3)$$

پس از بدست آوردن سطح مقطع پراکندگی برای قطبش دایروی راستگرد و چپگرد، می‌توان دورنگی دایروی را طبق رابطه زیر بدست آورد:

$$CD = C_{sca}^{+} - C_{sca}^{-} \quad (4)$$

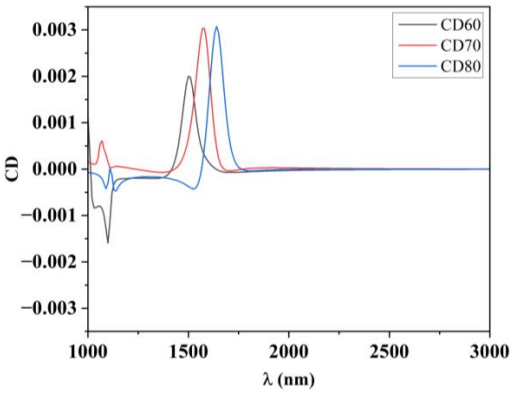
نتایج

در شکل(2a) منحنی سطح مقطع پراکندگی نانوذره‌ی کروی هسته پوسته با شعاع هسته‌های 60، 70 و80 نانومتری رسم شده است. درقسمت های 2b، 2c و 2d به ترتیب برای این شعاع‌ها سهم دوقطبی و چهارقطبی های الکتریکی و مغناطیسی رسم شده است. همینطور که مشخص است رزونانسهای پراکندگی از برهمکنش چندقطبی‌های الکتریکی و مغناطیسی هسته و پوسته بدست می‌آید.



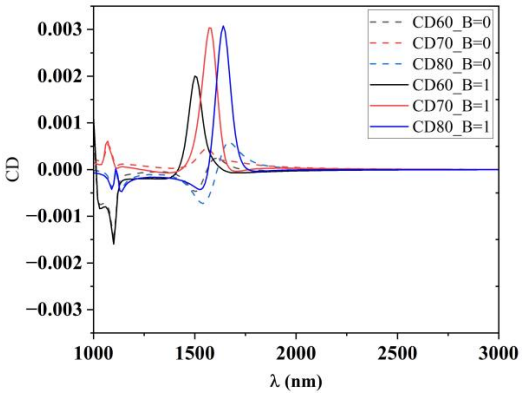
شکل2 : سطح مقطع پراکندگی و سهم چندقطبی ها. آ) سطح مقطع پراکندگی برای شعاع‌های 60، 70و80 نانومتری هسته طلا. ب) سهم چندقطبی‌ها برای ذره به شعاع 60 نانومتر ج) 70 نانومتر د) 80 نانومتر

در شکل 3 دورنگی دایروی برای این نانوذره در حضور میدان مغناطیسی خارجی پویا رسم شده است.



شکل3 : نمودار دورنگی دایروی در حضور میدان مغناطیسی خارجی

در شکل 4 این دورنگی‌ها به صورت مقایسه‌ای آورده شده است. همانطور که در نمودار مشاهده می شود اعمال میدان خارجی 1T باعث افزایش دورنگی دایروی در حدود 6 برابر شده است.



شکل4 : مقایسه دورنگی دایروی

نتیجه گیری

طبق مطالعه‌ی انجام گرفته در این مقاله، برهمکنش دوقطبی الکتریکی هسته‌ی پلاسمونیک و دوقطبی مغناطیسی پوسته‌ی دی الکتریک و همپوشانی آن‌ها در بخش‌هایی از رزونانس پراکندگی دیده می شود. همچنین بدلیل شکست تقارن ایجاد شده توسط میدان مغناطیس خارجی پایا، واکنش نانوذره ما نسبت به قطبش

دایروی راستگرد و چپگرد متفاوت بوده و می‌توان از این تفاوت دورنگی دایروی را تا 6 برابر بیشتردر این ساختار مشاهده کرد.

مرجع‌ها

[1] Alaee R, Rockstuhl C, Fernandez-Corbaton I. An electromagnetic multipole expansion beyond the long-wavelength approximation. *Optics Communications*. 2018 Jan 15;**407**:17-21.

[2] Liu, W., et al., *Broadband unidirectional scattering by magneto-electric core–shell nanoparticles.* ACS nano, 2012. **6**(6): p. 5489-5497.

[3] Zuev, D.A., et al., *Fabrication of Hybrid Nanostructures via Nanoscale Laser-Induced Reshaping for Advanced Light Manipulation.* Advanced Materials, 2016. **28**(16): p. 3087-3093.

[4] Larin AO, Sun Y, Zuev DA. Numerical design of Au/Si core-shell nanoparticles. InJournal of Physics: Conference Series 2018 Sep 1 (Vol. 1092, No. **1**, p. 012074). *IOP Publishing*.

بررسی ترمودینامیک آمار تعمیم یافته کلاسیک مبتنی بر تابع گاما

سیفی جگرکندی[1]، مریم؛ عبادی[1]، زهرا؛ محمدزاده، حسین[1]

[1] *گروه فیزیک، دانشگاه محقق اردبیل، اردبیل*

چکیده

این پژوهش یک چارچوب تعمیم‌یافته برای مکانیک آماری کلاسیک ارائه می‌دهد که در آن از تابع گاما برای تعریف توزیع جدید MB-G استفاده شده است. این توزیع با معرفی پارامتر κ، انعطاف‌پذیری لازم برای توصیف سامانه‌های پیچیده و غیرایده‌آل را فراهم می‌کند. رفتار ترمودینامیکی سیستم، شامل انحنای ترمودینامیکی و ظرفیت گرمایی، به‌شدت به مقدار κ وابسته است. نتایج نشان می‌دهد برای κ<۱، انحنای ترمودینامیکی منفی است و ظرفیت گرمایی در ناحیه بحرانی نوسانات شدید و حتی مقادیر منفی نشان می‌دهد. در مقابل، برای κ >۱، انحنای مثبت بوده و رفتار ظرفیت گرمایی مشابه توزیع استاندارد بوز–اینشتین است. این مطالعه پتانسیل تابع گاما را به‌عنوان یک ابزار مؤثر در تعمیم مکانیک آماری برای سامانه‌های واقعی پیچیده نشان می‌دهد.

واژه های کلیدی: *مکانیک آمار، توزیع ماکسول–بولتزمن، توزیع بوز–اینشتین، توزیع فرمی–دیراک، تابع گاما، انحنای ترمودینامیکی*

Thermodynamic Analysis of Generalized Classical Statistical Mechanics Based on the Gamma Function

Seifi-Jegarkandy, Maryam[1]; Ebadi, Zahra[1]; Mohammadzadeh, Hosein[1]

[1] *Department of Physics, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil, Iran*

Abstract

This research presents a generalized framework for classical statistical mechanics, utilizing the Gamma function to define a new distribution, MB-G. By introducing the shape parameter κ, this distribution provides the flexibility needed to describe complex and non-ideal systems. The thermodynamic behavior of the system, including thermodynamic curvature and heat capacity, is strongly dependent on the value of κ. The results indicate that for κ < 1, the thermodynamic curvature is negative, and the heat capacity exhibits strong oscillations and even negative values in the critical region. In contrast, for κ > 1, the curvature is positive, and the heat capacity behaves similarly to the standard Bose–Einstein distribution. This study demonstrates the potential of the Gamma function as an effective tool for extending statistical mechanics to complex real-world systems.

Keywords*: Statistical mechanics, Maxwell-Boltzmann distribution, Bose-Einstein distribution, Fermi-Dirac distribution,Gamma function, thermodynamic curvature.*
PACS No.

مقدمه

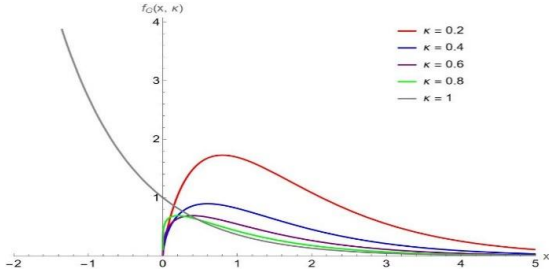
توزیع‌های استاندارد ماکسول–بولتزمن، بوز–اینشتین و فرمی–دیراک از ستون‌های اصلی و موفق در چارچوب مکانیک آماری کلاسیک و کوانتومی به‌شمار می‌روند. با این حال، این توزیع‌ها در توصیف سامانه‌هایی که رفتارهای پیچیده، برهم‌کنش‌های بلندبُرد دارند و همچنین در شرایطی که دور از تعادل ترمودینامیکی قرار می‌گیرند، با محدودیت‌هایی روبه‌رو هستند. به‌منظور غلبه بر این چالش‌ها، رویکردهای تعمیم‌یافته‌ای مانند آمار تسالیس[۱]، ابرآمار[۲]، آماره‌های کانیاداکیس[۳] و آمار دانکل [٤] توسعه یافته‌اند که در آن‌ها ساختار اساسی توزیع‌های آماری دستخوش تغییر می‌شود تا رفتارهای غیرمعمول بهتر بازتولید شوند.در همین راستا، تعمیم‌هایی مبتنی بر تابع میتاگ–لفلر[٥،٦] معرفی شده‌اند که نشان داده‌اند آمار کلاسیک با تغییر پارامتر (α) مربوط به تابع مبتاگ–لفلر می‌تواند، گذار پیوسته‌ای میان رفتارهای کلاسیک و کوانتومی (فرمیونی و بوزونی) ایجاد کند. این نوع توزیع‌ها با داشتن انعطاف‌پذیری بیشتر، قابلیت توصیف دقیق‌تر سامانه‌های پیچیده را فراهم می‌کنند. در

پژوهش حاضر، رویکرد متفاوتی مبتنی بر تابع گاما برای تعمیم توزیع‌های آماری و بررسی رفتار ترمودینامیکی ذرات ارائه می‌شود. تابع گاما، که تعمیم پیوسته تابع فاکتوریل به حوزه اعداد حقیقی و مختلط است، نقشی بنیادی در بسیاری از شاخه‌های فیزیک ایفا می‌کند. این تابع در فیزیک آماری، نظریه میدان‌های کوانتومی، مدل‌های رشد تصادفی حضور برجسته‌ای دارد.

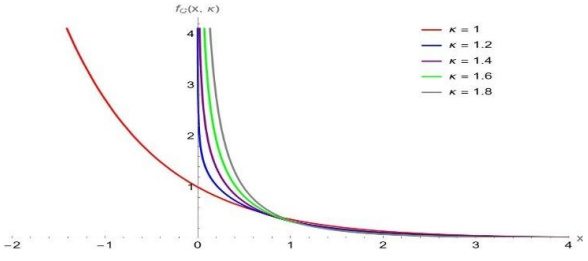
از این دیدگاه، بهره‌گیری از توزیع‌های مبتنی بر تابع گاما قادر است پل ارتباطی میان رفتارهای گسسته و پیوسته برقرار کرده و چارچوبی انعطاف‌پذیر برای توصیف سامانه‌های غیرمعمول فراهم کند. بدین ترتیب، تعمیم آماری مبتنی بر تابع گاما می‌تواند ابزار مؤثری برای مدل‌سازی سامانه‌هایی باشد که از استانداردهای توزیع‌های کلاسیک فاصله می‌گیرند؛ از جمله سامانه‌های پیچیده، غیرتعادلی و دارای برهم‌کنش‌های قوی.

تابع گاما به‌عنوان یک توزیع تعمیم‌یافته

توزیع گاما یکی از توزیع‌های پیوسته مهم در آمار و احتمال است



شکل 2 تابع توزیع MB-G به ازای مقادیر مختلف $\kappa < 1$



شکل 1 تابع توزیع MB-G به ازای مقادیر مختلف $\kappa > 1$

که برای مدل‌سازی متغیرهای تصادفی مثبت به کار می‌رود. تابع چگالی احتمال توزیع گاما به صورت زیر تعریف می‌شود[۱۰و۱۱]:

$$f_G(x;k,\theta)\ (x;k,\theta) = \frac{1}{\theta^k \Gamma(k)}\, x^{k-1} e^{-x/\theta}, \qquad x > 0, \tag{1}$$

که در آن $k > 0$ پارامتر شکل ، $(\theta > 0)$پارامتر مقیاس و $(\Gamma(k))$ تابع گاما است. تابع گاما به عنوان تعمیم فاکتوریل تعریف می‌شود:

$$\Gamma(k) = \int_0^\infty t^{k-1} e^{-t}\, dt.$$

زمانی که $k = 1$ به تابع نمایی کاهش میابد:

$$f_G(x;k,\theta) = e^X. \tag{2}$$

برای تعمیم آمار کلاسیک ماکسول–بولتزمن با تابع گاما می توان تابع توزیع جدیدی به صورت زیر تعریف که در آن $(\theta = 1)$ است:

$$n_G(X) = \frac{1}{\frac{e^x\, x^{-1+\kappa}}{\Gamma(\kappa)}} = \frac{1}{f_G(x;k)}, \tag{3}$$

که تابع توزیع عدد اشغال توزیع تعمیم یافته ماکسول–بولتزمن –گاما (MB-G) نامیده می‌شود است.

برای تضمین اعتبار فیزیکی، تابع توزیع باید همواره غیرمنفی باقی بماند زمانی که $k < 1$ ، این شرط برای تمام مقادیر X و برای همه مقادیر κ برقرار است(شکل ۱). در مورد $k > 1$ پارامتر گریزندگی باید شرط $0 \le z < 1$ را برای حفظ مثبت بودن تابع توزیع رعایت کند. در واقع همانطور که در توزیع بوز–اینشتین در $z = 1$ چگالش بوزونی (BEC) رخ می‌دهد؛ مشابه این وضعیت برای $k > 0$ در $z = 1$ واگرایی داریم(شکل ۲).

مقادیر ترمودینامیکی توزیع‌های MB-G

انرژی داخلی U و تعداد کل ذرات N در چارچوب ترمودینامیک به صورت زیر تعریف می‌شوند[۷]:

$$U = \int_0^\infty \epsilon\, n(\epsilon)\, \Omega(\epsilon)\, d\epsilon, N = \int_0^\infty n(\epsilon)\ \Omega(\epsilon)\, d\epsilon, \tag{4}$$

که در آن، $n(\epsilon)$ تابع توزیع است و $\Omega(\epsilon)$ تابع چگالی حالات برای گاز غیرنسبیتی ایده‌آل در سه بُعد $\epsilon^{\frac{1}{2}}$ می‌باشد. برای سیستم‌هایی که از آمارهای MB-G پیروی می‌کنند، رابطه انرژی داخلی و تعداد ذرات به صورت زیر بازنویسی می‌شود:

$$U = \beta^{-\frac{5}{2}} \int_0^\infty \frac{x^{\frac{3}{2}}}{\frac{e^x\, x^{-1+\kappa}}{\Gamma(\kappa)}} dx, \tag{5}$$

$$N = \beta^{-\frac{3}{2}} \int_0^\infty \frac{x^{\frac{1}{2}}}{\frac{e^x\, x^{-1+\kappa}}{\Gamma(\kappa)}} dx, \tag{6}$$

که در آن β معکوس دماست و $x = \beta\epsilon$ است که ϵ انرژی حالت‌های تک‌ذره است. برای ساده‌سازی، تابع انتگرال تعمیم‌یافته به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\int_0^\infty \frac{x^n}{\frac{e^x\, x^{-1+\kappa}}{\Gamma(\kappa)}} \mathrm{dx} = \mathcal{H}_{n,\kappa}(z) \tag{7}$$

بنابراین، شکل نهایی مقادیر انرژی و تعداد ذرات به صورت زیر خواهد بود:

$$U = \beta^{-\frac{5}{2}} \mathcal{F}_{\frac{3}{2},\alpha}(z), \qquad (8)$$

$$N = \beta^{-\frac{3}{2}} \mathcal{F}_{\frac{1}{2},\alpha}(z). \qquad (9)$$

این فرمول‌بندی چارچوبی مختصر برای ارزیابی تحلیلی یا شبیه‌سازی عددی در توزیع‌های MB-G فراهم می‌آورد.

انحنای ترمودینامیکی توزیع MB-G

بررسی ترمودینامیک سیستم با روش هندسی، ترمودینامیک هندسی نامیده می‌شود[٦]. اولین بار وینهولد با در نظر گرفتن مشتقات مرتبه دوم انرژی داخلی به عنوان متریک، تصویری هندسی از ترمودینامیک ارائه کرد[٧]. متریک‌های مختلفی با استفاده از پتانسیل-های ترمودینامیکی مختلف قابل تعریف است. متریک فیش–رائو بر اساس مشتقات لگاریتم تابع پارش بر حسب پارامترهای ناافزایشی به صورت رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود:

$$g_{ij} = \frac{\partial^2 \ln(z)}{\partial\beta^i \partial\beta^j} \qquad (10)$$

که در این رابطه (z) تابع پارش و β^i بیان‌گر متغیرهای ناافزایشی است [٨]. کمیت انحنای ترمودینامیکی در واقع اسکالر ریچی برای فضا یا رویه‌ی پارامترهای ترمودینامیکی است. اصولا باید اتصالات آفین محاسبه شوند، سپس تانسور ریمن به دست آید. در گام بعدی تانسور ریچی و در نهایت اسکالر ریچی محاسبه می‌شود. اما برای یک رویه‌ی دو بعدی نشان داد شده است که عبارت زیر همان اسکالر ریچی مربوط به رویه‌ی ترمودینامیکی دو بعدی یا همان انحنای ترمودینامیکی است. [٩]:

$$R = \frac{2\begin{vmatrix} g_{\beta\beta} & g_{\gamma\gamma} & g_{\beta\gamma} \\ g_{\beta\beta,\gamma} & g_{\gamma\gamma,\beta} & g_{\beta\gamma,\beta} \\ g_{\beta\beta,\gamma} & g_{\gamma\gamma,\gamma} & g_{\beta\gamma,\gamma} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} g_{\beta\beta} & g_{\beta\gamma} \\ g_{\gamma\beta} & g_{\gamma\gamma} \end{vmatrix}^2} \qquad (11)$$

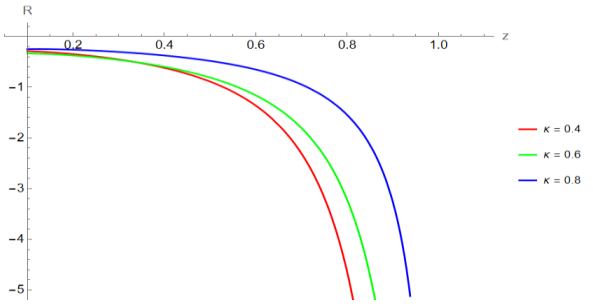
که منظور از $\beta = 1/KT$ و $\gamma = -\mu/KT$ است و رویه‌ی دوبعدی ترمودینامیکی بر حسب این دو پارامتر بنا شده است. در رابطه‌ی فوق داریم:

$$g_{\beta\beta} = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial^2 \beta} = -\left(\frac{\partial U}{\partial \beta}\right)_\gamma$$

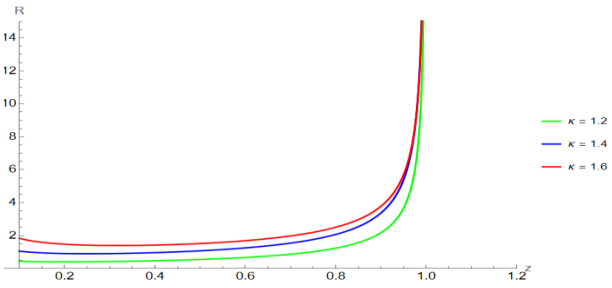
$$g_{\beta\gamma} = g_{\gamma\beta} = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial\beta\partial\gamma} = -\left(\frac{\partial N}{\partial \beta}\right)_\gamma \qquad (12)$$

$$g_{\gamma\gamma} = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial\gamma^2} = -\left(\frac{\partial N}{\partial \gamma}\right)_\beta$$

با توجه به طولانی بودن روابط، از نوشتن آن‌ها خودداری می‌کنیم. در شکل‌های (٣) و (٤)، نمودار انحنای ترمودینامیکی بر حسب گریزندگی (z) برای مقادیر مختلف (κ) رسم شده است. مشاهده می‌شود که در محدوده $(\kappa < 1)$، انحنای ترمودینامیکی برای همه مقادیر (z) منفی است(شکل ٣) و برای $(\kappa > 1)$، انحنای ترمودینامیکی برای همه مقادیر (z) مثبت است و بسیار شبیه توزیع استاندارد بوز–انیشتین رفتار می‌کند. همچنین در این محدوده در $(z = 1)$ ، واگرایی مشاهده می‌شود که مربوط به پدیده‌ی چگالش بوز–اینشتین (BEC) است(شکل ٤).



شکل ٣ نمودار انحنای ترمودینامیکی بر حسب z به ازای مقادیر مختلف $\kappa < 1$



شکل ٤ نمودار انحنای ترمودینامیکی بر حسب z به ازای مقادیر مختلف $\kappa > 1$

ظرفیت گرمایی توزیع‌های MB-G

در این بخش به بررسی ظرفیت گرمایی در حجم ثابت (C_v) در توزیع تعمیم‌یافته MB-G، پرداخته می‌شود. ظرفیت گرمایی با مشتق دمایی انرژی داخلی در حجم ثابت تعریف می‌شود [٧]:

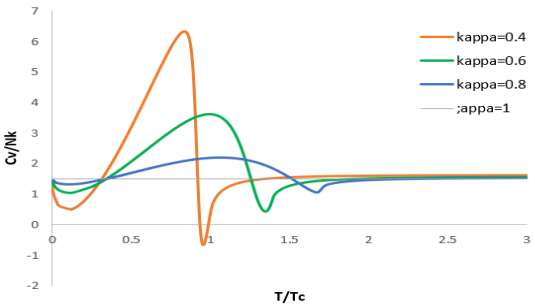
$$\frac{C_v}{Nk_B} = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V \qquad (13)$$

برای گاز کلاسیک ایده‌آل، ظرفیت گرمایی مستقل از دما بوده و تنها به درجات آزادی سیستم بستگی دارد. در این حالت، نتیجه‌گیری معمول برای ظرفیت گرمایی برابر $C_v/Nk_B = 3/2$ است. با استفاده از روابط انرژی داخلی و تعداد ذرات که از توزیع MB-G به دست

آمده، شکل تعمیم‌یافته‌ای برای ظرفیت گرمایی حاصل می‌شود. با توجه به طولانی بودن روابط، از نوشتن آن‌ها خودداری می‌کنیم.

نمودار وابستگی ظرفیت گرمایی برحسب دما برای توزیع MB-G در محدوده‌ی $\kappa < 1$ رفتار خاصی از خود نشان می‌دهد. همانطور که از شکل (۵) مشخص است، در دماهای بالا و پایین(نزدیک به صفر)، ظرفیت گرمایی به حد کلاسیک ۳/۲ می‌رسد. اما در نزدیکی دمای بحرانی، رفتار به‌شدت نوسانی از خود نشان می‌دهد و حتی برای مقادیر کوچکتر κ در دمای بسیار نزدیک به بحرانی، مقادیر منفی نیز مشاهده می‌شود.

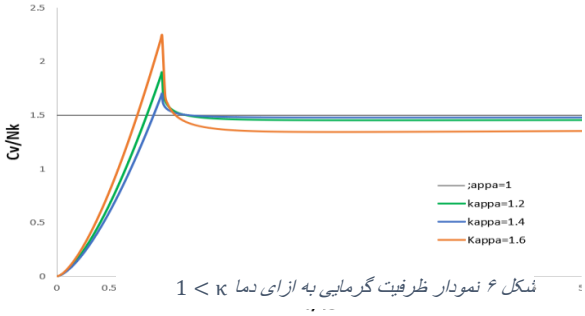
شکل (٦) نشان می‌دهد که ظرفیت گرمایی در محدوده‌ی $\kappa > 1$ بسیار شبیه به توزیع استاندارد بوز–اینشتین رفتار می‌کند: از صفر شروع می‌شود، در نزدیکی دمای بحرانی یک پیک دارد و با افزایش دما به حد کلاسیک ۳/۲ می‌رسد.



شکل ۵ نمودار ظرفیت گرمایی به ازای دما $\kappa > 1$

نتیجه‌گیری:

این پژوهش با معرفی توزیع تعمیم‌یافته MB-G مبتنی بر تابع گاما، چارچوب جدیدی برای توصیف سامانه‌های آماری پیچیده ارائه داده است. نتایج نشان می‌دهند که پارامتر (κ) رفتار ترمودینامیکی سیستم را به‌طور پیوسته تعیین می‌کند:- در $\kappa < 1$، سیستم ویژگی‌های غیرمعمول (انحنای ترمودینامیکی منفی و نوسانات شدید ظرفیت گرمایی) نشان می‌دهد.- در $\kappa > 1$ ، سیستم به رفتار گازهای بوزونی نزدیک شده و در نقطه چگالش بوز–اینشتین ($z=1$) واگرایی مشاهده می‌شود.این



شکل ۶ نمودار ظرفیت گرمایی به ازای دما $\kappa > 1$

رویکرد انعطاف‌پذیر، پل مؤثری بین توصیف کلاسیک و کوانتومی برقرار کرده است.

مراجع:

1. Tsallis, Constantino. "Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics." *Journal of statistical physics* 52 (1988**): 479-487**.
2. Beck, Christian, and Ezechiel GD Cohen. "Superstatistics." *Physica A: Statistical mechanics and its applications* 322 (2003**): 267-275**.
3. Kaniadakis, Giorgio. "New power-law tailed distributions emerging in κ-statistics (a)." *Europhysics Letters* 133.1 (2021): **10002.**
4. Dunkl, Charles F. "Differential-difference operators associated to reflection groups." *Transactions of the American Mathematical Society* 311.1 (1989): **167-183.**
5. Gorenflo, Rudolf, et al. *Mittag-Leffler functions, related topics and applications*. Berlin: Springer, 2020
6. Agahi, Hamzeh, and Mohsen Alipour. "Mittag-Leffler-Gaussian distribution: Theory and application to real data." *Mathematics and Computers in Simulation* 156 (2019): **227-235.**
7. Seifi, Maryam, et al. "Intrinsic attractive and repulsive interactions: From classical to quantum statistics in the generalized Maxwell-Boltzmann distribution." *Physical Review E* 111.5 (2025): 054114.
8. Pathria, R. K., and Paul D. Beale. "1-the statistical basis of thermodynamics." *Statistical Mechanics* (2011): 1-23.
9. Janyszek, H., and R. Mrugal. "Riemannian geometry and the thermodynamics of model magnetic systems." *Physical Review **A** 39.12* **(1989)**
10. Thom, Herbert CS. "A note on the gamma distribution." *Monthly weather review* 86.4 (1958): 117-122.
11. Artin, Emil. *The gamma function*. Courier Dover Publications, 2015.

نمودار فازی بلورهای مایع نماتیک

واشقانی فراهانی، مریم ؛ مظفری ، محمدرضا
دانشکده فیزیک دانشگاه قم، قم

چکیده

در این مقاله، گذار فازهای همسانگرد، نماتیک محوری و نماتیک دومحوری در چارچوب نظریه لاندائو-دوژن بررسی شده است. با کمینه سازی انرژی آزاد نسبت به پارامترهای نظم، نمودارهای فازی و نواحی پایداری فازها به دست آمدند. نتایج نشان دادند که حضور فاز دومحوری موجب ایجاد گذارهای پیوسته مرتبه دوم میان فازهای تک محوری می شود و امکان گذار مستقیم از فاز همسانگرد به فاز دومحوری نیز وجود دارد. همچنین، تحلیل سطوح انرژی آزاد نقش ساختار کمینه های انرژی را در تعیین نوع گذارهای فازی آشکار ساخت.

واژه های کلیدی: *بلور مایع ، نماتیک دومحور ، نظریه لاندائو- دوژن ، گذار فاز ، نماتیک تک محوری.*

Phase diagram of nematic liquid crystals

Vasheghani Farahani, Maryam; Mozaffari, MohammadReza

Department of Physics, University of Qom, Qom

Abstract

In this paper, the transitions among isotropic, uniaxial nematic, and biaxial nematic phases have been investigated within the framework of Landau-De Gennes theory. By minimizing the free energy with respect to the order parameters, phase diagrams and stability regions of the phases were obtained. The results showed that the presence of the biaxial phase leads to continuous second-order transitions between the uniaxial phases and that a direct transition from the isotropic phase to the biaxial phase is also possible. Additionally, the analysis of the free energy levels revealed the role of the structure of the energy minima in determining the type of phase transitions.

***Keywords**: Liquid crystal, Biaxial nematic, Landau–de Gennes theory, Phase transition, Uniaxial nematic*

۱. مقدمه

بلورهای مایع دماگرا از مولکول های ناهمسانگرد (میله ای یا دیسکی شکل) تشکیل شده اند. این مواد بر اساس میزان نظم سمتگیری و نظم مکانی مولکول ها به دو فاز اصلی نماتیک و اسمکتیک طبقه بندی می شوند. در فاز نماتیک، میانگین سمتگیری محور بلند مولکول ها راستای مرجحی را در فضا تعیین می کند که (دیراکتور $\hat{n}$) نامیده می شود. با وجود نظم سمتگیری، مراکز جرم مولکول ها فاقد نظم مکانی بلندبرد بوده و توزیعی مشابه مایعات معمولی دارند[۱]. فاز نماتیک توصیف شده، فاز نماتیک تک محوری نام دارد که در آن مولکول ها نسبت به دایرکتور از تقارن چرخشی برخوردارند. با این حال اگر مولکول ها کاملا نامتقارن باشند، فاز نماتیک می تواند به نماتیک دو محوری تبدیل شود. فرایزر در سال ۱۹۷۰ برای نخستین بار این فاز را به صورت نظری پیش بینی کرد. وی با تعمیم نظریه میدان مولکولی مایر– سوپ به مولکول های نامتقارن نشان داد که سیستم پس از یک گذار مرتبه اول از فاز همسانگرد به فاز نماتیک تک محوری، در دماهای پایین تر دچار

گذار مرتبه دوم به فاز نماتیک دو محوری می شود[۲,۳]. در فاز نماتیک دو محوری، نظم سمتگیری با سه بردار یکه متعامد $\hat{l}$ ، $\hat{m}$ و $\hat{n}$ توصیف می شود که $\hat{m} \times \hat{l} = \hat{n}$. از آنجا که فازهای نماتیک فاقد قطبش کلی هستند، هر یک از این بردار ها با معکوس خود معادل اند، یعنی $\hat{l} \equiv -\hat{l}$ ، $\hat{m} \equiv -\hat{m}$ و $\hat{n} \equiv -\hat{n}$. دراین مطالعه، گذار فازهای همسانگرد، تک محوری و دو محوری را در مدل لاندائو–دوژن را به صورت عددی بررسی می کنیم.

۲. انرژی آزاد لاندائو–دوژن

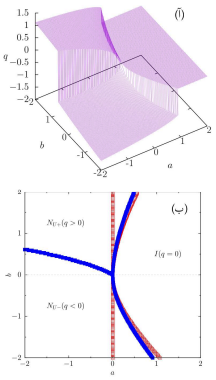
در بلورهای مایع نماتیک، نظم سمتگیری توسط تانسور نظم

$$Q_{ij} = \frac{q}{\sqrt{6}}\left(3n_i n_j - \delta_{ij}\right) + \frac{p}{\sqrt{2}}\left(l_i l_j - m_i m_j\right) \quad (1)$$

توصیف می شود که تانسوری مرتبه دوم، متقارن و بدون رد است. در این رابطه، q پارامتر نظم تک محوری و p پارامتر ویژه نظم دو محوری را نشان می دهند. بردارهای $\hat{l}$، $\hat{m}$ و $\hat{n}$ بردارهای تانسور نظم هستند که متناظر با ویژه مقادیر $\lambda_l = -\frac{q}{\sqrt{6}} + \frac{p}{\sqrt{2}}$ ، $\lambda_m = -\frac{q}{\sqrt{6}} - \frac{p}{\sqrt{2}}$ و $\lambda_n = \frac{2q}{\sqrt{6}}$ می باشند. در فاز همسانگرد، هر سه ویژه مقدار تانسور نظم با یکدیگر برابرند ($\lambda_l = \lambda_m = \lambda_n$) که در این حالت $q = p = 0$ خواهد بود. در فاز تک محوری، دو ویژه مقدار از سه ویژه مقدار تانسور نظم با یگدیگر برابر هستند. برای نمونه، اگر $\lambda_l = \lambda_m$ آن گاه $p = 0, q \neq 0$. همچنین اگر $\lambda_l = \lambda_n$ داشته باشیم $p = \sqrt{3}\, q, q \neq 0$ ودر حالت $\lambda_m = \lambda_n$ رابطه $p = -\sqrt{3}\, q, q \neq 0$ برقرار است. در مقابل، در فاز دو محوری هر سه ویژه مقدار تانسور نظم متمایز هستند، $\lambda_l \neq \lambda_n \neq \lambda_m$ [۴,۵]. براساس نظریه لاندائو-دوژن، قسمت موضعی چگالی انرژی آزاد به صورت

$$F = F_0 + \frac{a}{2} I_1 - \frac{b}{3} I_3 + \frac{c}{4} I_2^2 + \frac{d}{5} I_2 I_3 + \frac{e}{6} I_2^3 + \frac{f-e}{6} I_3^2 \quad (2)$$

نوشته می شود که $I_2 = TrQ^2 = (q^2 + p^2)$ است وهمچنین $I_3 = \sqrt{6} TrQ^3 = (q^3 - qp^2)$ است [۶]. در این بسط، تنها ضریب a به طور صریح به دما وابسته است، در حالی که سایر ضرایب پدیده شناختی(b ،c ،d ،e و f) معمولاً ثابت در نظر گرفته می شوند. با کمینه سازی انرژی آزاد نسبت به پارامترهای نظم q و p ، می توان حالت های تعادلی سیستم و نمودارهای فازی متناظر را به دست آورد.

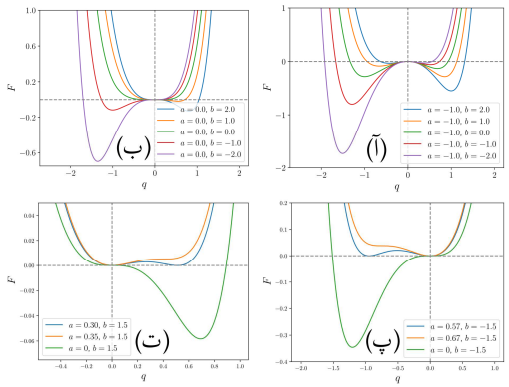


شکل ۱: (آ) نمایش سه بعدی پارامتر نظم بر حسب a و b. (ب) نمودار فازی متناظر. پارامترها برابر با $c = d = e = f = 1$ در نظر گرفته شده اند.

۳. فاز تک محوری

شکل ۱(آ) نمایش سه بعدی پارامتر نظم q را بر حسب a و b نشان می دهد. در این شکل، برای هر نقطه در صفحه(b ,a) ، مقدار تعادلی q با استفاده از شرط کمینه سازی چگالی انرژی آزاد (۲)، یعنی $\frac{\partial F}{\partial q} = 0$ ، محاسبه شده است. مشاهده می شود که فضای پارامتر به سه ناحیه مجزا تقسیم می شود و در مرزهای میان این نواحی، مقدار q به طور ناپیوسته تغییر می کند. این جهش ناپیوسته، نشان دهنده وقوع گذار فاز مرتبه اول بین نواحی مجاور است. شکل ۱(ب) نمودار فازی متناظر را در صفحه(b ,a) نشان می دهد. در این نمودار، مرز میان سه ناحیه I ، N_{U+} و N_{U-} با منحنی های آبی مشخص شده اند .در امتداد این خطوط، پارامتر نظم دچار جهش ناپیوسته می شود. خطوط قرمز نیز مرزهای ناپایداری (اسپینودال) فازهای همسانگرد و نماتیک را مشخص می کنند. این مرزها با حل همزمان معادلات $\frac{\partial F}{\partial q} = 0$ و $\frac{\partial^2 F}{\partial^2 q} = 0$ دست آمده اند که به ترتیب شرط تعادل و شرط از بین رفتن پایداری موضعی را بیان می کنند. نقطه سه گانه در مختصات (۰،۰) = (b , a) قرار دارد، نقطه ای

که در آن سه فاز I ، N_{U+} و N_{U-} بطور همزمان هم زیستی دارند. در این نقطه، مقدار پارامتر نظم و انرژی آزاد برابر صفر است، یعنی $q = 0$ و $F = 0$.

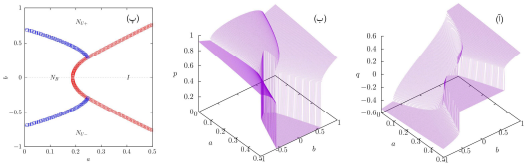


شکل۲: منحنی های چگالی انرژی آزاد F بر حسب پارامتر نظم q برای فاز نماتیک تک محوری، با $c = d = e = f = 1$ در شکل های (آ) و (ب)، به ترتیب $a = -1$ و $a = 0$ ثابت هستند و منحنی ها برای مقادیر مختلف b رسم شده‌اند. در شکل های (پ) و (ت)، به ترتیب $b = -1{,}5$ و $b = 1{,}5$ ثابت هستند و منحنی ها برای مقادیر مختلف a رسم شده اند. هر رنگ نشان دهنده یک مقدار متفاوت از پارامتر متغیر (b ,a) است.

برای درک بهتر نمودار فازی و نیز نمایش پیچیدگی رفتار انرژی آزاد، در شکل ۲ منحنی های F(q) برای مقادیر مختلف پارامترهای a و b رسم شده اند. یافتن کمینه مطلق انرژی آزاد در این سیستم، به دلیل وابستگی شدید آن به a و b به ویژه در نواحی نزدیک به مرزهای فازی، نیازمند تحلیل دقیق است. شکل ۲(آ)، منحنی های F(q) را برای $a = -1$ و مقادیر مختلف b نشان می دهد. برای $b \geq 1$ ، کمینه مطلق انرژی در $q > 0$ قرار دارد که متناظر با فاز N_{U+}است. در مقابل، برای $b < 1$، کمینه مطلق به $q < 0$ منتقل می شود که نشان دهنده پایداری فاز N_{U-} می باشد. این رفتار بیانگر رقابت مستقیم میان دو فاز نماتیک و نقش پارامتر b در تعیین علامت پارامتر نظم است. شکل ۲(ب) علاوه بر رفتار اشاره شده در شک ۲(آ)، ناحیه اطراف نقطه$(b , a) = (1, 0)$ را نیز شامل می شود، نقطه ای که در نمودار فازی به عنوان نقطه سه گانه شناخته می شود. شکل های ۲(پ) و ۲(ت) رفتار انرژی آزاد را در نزدیک مرزهای ناپایداری (اسپینودال) میان فازهای همسانگرد و نماتیک نشان می دهند. در هر دو شکل، نمودار های سبز و نارنجی که دارای نقطه عطف هستند، رفتار انرژی آزاد را در مرزهای ناپایداری مشخص می کنند. همچنین در نمودار آبی، که شامل دو کمینه هم ارزش است، وضعیت هم زیستی فاز همسانگرد $(q = 0)$ و فاز نماتیک $(q \neq 0)$را در آستانه گذار فاز نشان می دهد.

۴. فاز دومحوری

شکل های ۳(آ) و(ب) به ترتیب نمایش سه بعدی $q(b , a)$ و $p(b , a)$ را نشان می دهند. مقادیر تعادلی پارامتر های نظم از کمینه سازی همزمان انرژی آزاد (۲) نسبت به q و p ، یعنی با حل معادلات $\frac{\partial F}{\partial q} = 0$ و $\frac{\partial F}{\partial p} = 0$ بدست آمده اند. همان گونه که در شکل ۳(پ) مشاهده می شود، فضای پارامتر (b , a) به چهار ناحیه I ، N_{U+} ، N_{U-} و N_B تقسیم می شود. در مرزهای $N_{U\pm}$ و $N_B - I$ که با منحنی های قرمز در نمودار فازی مشخص شده اند، پارامترهای نظم به صورت ناپیوسته تغییر می کنند که نشان دهنده گذار فاز مرتبه اول است. نکته ی قابل توجه در شکل ۳(پ) این است که فاز دومحوری (N_B) بخشی از ناحیه گذار مستقیم میان دو فاز تک محوری (N_{U+}) و (N_{U-}) را اشغال می کند. در نتیجه، به جای یک مرز گذار واحد، دو مرز جدید بین فازهای $N_B - N_{U+}$و $N_B - N_{U-}$ ظاهر می شود. بر خلاف مرزهای قرمز که متناظر با گذار مرتبهٔ اول هستند، در امتداد مرزهای آبی هیچ جهش ناگهانی در پارامترهای نظم مشاهده نمی شود، این رفتار نشان دهنده گذار پیوسته یا گذار مرتبه دوم است. پایداری فاز دومحوری نیز به برقرار بودن شرطی روی مشتقات دوم انرژی آزاد وابسته است. به طور مشخص، دترمینان ماتریس هسین (ماتریس مشتقات دوم) باید مثبت باشد، $\left(\frac{\partial^2 F}{\partial q^2}\right)\left(\frac{\partial^2 F}{\partial p^2}\right) - \left(\frac{\partial^2 F}{\partial p \partial q}\right)^2 \geq 0$. در این حالت، نقطه تعادلی سیستم یک کمینه موضعی پایدار از انرژی آزاد است. اگر مقدار این دترمینان برابر با صفر شود، سیستم در مرز ناپایداری (اسپینودال) قرار می گیرد.

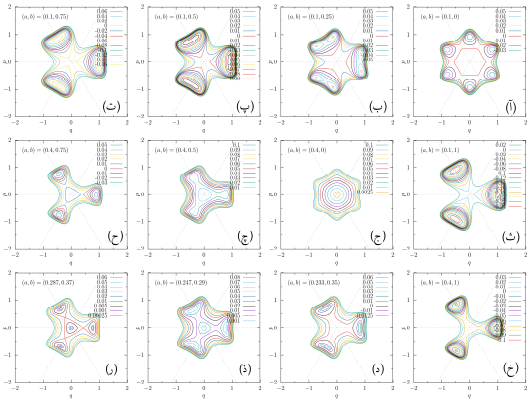


شکل۳: نمایش سه بعدی (آ) پارامتر نظم تک محوری و (ب) پارامتر نظم دومحوری بر حسب a و b . پ) نمودار فازی متناظر. پارامترها برابر با $c = -۱$، $d = ۰$، $e = ۱$ و $f = ۱,۷$ در نظر گرفته شده اند.

در شکل ۳(پ) دو نقطه سه گانه مشاهده می شود که در آن ها فازهای I، N_U و N_B به یکدیگر می رسند. همچنین، گذار فاز مستقیم از فاز همسانگرد به فاز نماتیک دومحوری می تواند در امتداد مرزی رخ دهد که میان دو نقطه سه گانه قرار دارد. شکل ۴ تغییر شکل سطح انرژی آزاد و جابه جایی میان فازهای I، N_{U+} و N_B را بر حسب a و b نشان می دهد. کمینه های روی خطوط خط چین $(p \neq ۰, p = \pm\sqrt{۳}q)$بیانگر فاز N_{U+} هستند (شکل های ۴(ث) و ۴(خ)). در حالی که کمینه های قرار گرفته میان این خطوط متناظر با فاز N_B می باشند(شکل های ۴(آ) و ۴(ب)). نقطه (۰,٤,۰) شکل ۴(ج) متناظر با فاز همسانگرد است. همچنین، شکل های ۴(پ) و ۴(ت) رفتار کمینه ها را در نزدیک گذار $N_B - N_U$ وشکل های ۴(چ) و ۴(ح) رفتار آن ها را حوالی گذار $N_{U+} - I$ نمایش می دهند. شکل ۴(ذ) رفتار کمینه های انرژی را در نقطه سه گانه نشان می دهد. همچنین، شکل های ۴(ر) و ۴(د) به ترتیب رفتار کمینه های انرژی را در نزدیک نقطه سه گانه و بر روی مرزهای گذار فازی نمایش می دهند.

۵. نتیجه گیری

در این پژوهش، گذار فازهای بلور مایع نماتیک در چارچوب نظریه لاندائو–دوژن به صورت عددی بررسی شد. با کمینه سازی انرژی آزاد بر حسب پارامترهای نظم تک محوری و دومحوری، نمودارهای فازی و نواحی پایداری فازها به دست آمدند. نتایج نشان دادند که در حالت تک محوری، گذار میان فازهای همسانگرد و نماتیک از نوع مرتبه اول بوده و حضور فاز دومحوری موجب شکسته شدن گذار مستقیم میان دو فاز تک محوری و ایجاد گذارهای پیوسته مرتبه دوم می شود. همچنین، وجود دو نقطه سه گانه و امکان وقوع گذار مستقیم از فاز همسانگرد به فاز دومحوری در بخشی از نمودار فازی مشاهده شد.



شکل۴: نمودارهای هم تراز F(p,q) برای فاز نماتیک دو محوری با $c = -۱$، $d = ۰$، $e = ۱$ و $f = ۱,۷$ و b>۰ . در شکل های (آ) تا (ث)، a=۰,۱ ثابت و b از ۰ تا ۱ متغیر است. در شکل های (ج) تا (خ)، a=۰,٤ ثابت و b از ۰ تا ۱ متغیر است. شکل های (د) تا (ر) نیز رفتار انرژی آزاد را حول نقطهٔ سه گانه نشان می دهند. رفتار های مشابه ای را برای b<۰ انتظار داریم.

مراجع:

[۱] P. G. de Gennes and J. Prost, The Physics of Liquid Crystals, 2nd ed., Oxford University Press, 1993.
[۲] L. J. Yu and A. Saupe, PRL, 45, 1000, 1980.
[۳] L. A. Madsen, T. J. Dingemans, M. Nakata, and E. T. Samulski, PRL, 92, 145505, 2004 .
[۴] G. R. Luckhurst, T. J. Sluckin, Biaxial Nematic Liquid Crystals, John Wiley and Sons, 2015.
[۵] D. Allender and L. Longa, PRE, 78 , 011704,2008.
[۶] S. Singh, Phys. Rep, 324, 107 ,2000.

راهبردهای مدیریت بار شناختی در آموزش مفاهیم انتزاعی فیزیک: یافته‌هایی از یک سنتزپژوهی

محمد دلاور[1]، پگاه خاکی[2]، فاطمه احمدی[3*]

1- دانشجوی دکتری فیزیک ماده چگال، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران، ایران
2- کارشناس ارشد آموزش فیزیک، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران، ایران
3- دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران، ایران

چکیده

مفاهیم انتزاعی فیزیک به دلیل ماهیت غیرمحسوس و نیاز به پردازش هم‌زمان بازنمایی‌ها و روابط متعدد، بار شناختی زیادی ایجاد می‌کنند. پژوهش حاضر با هدف شناسایی راهبردهای مؤثر مدیریت بار شناختی در آموزش این مفاهیم و با استفاده از روش تحقیق سنتزپژوهی انجام شد. جامعه پژوهش شامل مقالات حوزه آموزش فیزیک و علوم شناختی در سال‌های 2020 تا 2025 بود که پس از غربال‌گری، مقالات منتخب با استفاده از کدگذاری و تحلیل مضمون بررسی شدند. یافته‌ها نشان داد راهبردهایی مانند فعال‌سازی دانش پیشین، سازمان‌دهی تدریجی محتوا، استفاده از بازنمایی‌های چندگانه، هدایت توجه، حذف اطلاعات غیرضروری و مشارکت فعال یادگیرندگان در مدیریت بار شناختی و تسهیل یادگیری نقش مؤثری دارند. همچنین کاهش بار شناختی غیرضروری و اختصاص ظرفیت حافظه‌ی کاری به پردازش، یکپارچه‌سازی و ساخت طرحواره‌های مفهومی، به درک عمیق‌تر مفاهیم، اصلاح بدفهمی‌ها و انتقال مؤثر دانش کمک می‌کند. نتایج بر اهمیت بهره‌گیری از اصول علوم شناختی در طراحی آموزش فیزیک برای ارتقای یادگیری معنادار تأکید دارد.

واژه‌های کلیدی: *بار شناختی، آموزش فیزیک، مفاهیم انتزاعی، علوم شناختی، یادگیری معنادار، سنتزپژوهی.*

Cognitive Load Management Strategies in Teaching Abstract Physics Concepts: Findings from a Synthesis Study

Delavar, Mohammad[1] ;Khaki, Pegah[2]; Ahmadi, Fatemeh[3 *]

1- PhD student in condensed matter physics, Faculty of Sciences, Shahid Rajaee Teacher Training University, Tehran, Iran
2- Master of Science in Physics Education, Faculty of Sciences, Shahid Rajaee Teacher Training University, Tehran, Iran
3- (PhD), Associate Professor, Department of Physics, Faculty of Sciences, Shahid Rajaee Teacher Training University, Tehran, Iran

Abstract

Abstract physics concepts impose a high cognitive load on learners because of their intangible nature and the need to process multiple representations and relationships simultaneously. This study aimed to identify effective cognitive load management strategies for teaching such concepts through a research synthesis approach. The study corpus consisted of physics education and cognitive science research published between 2020 and 2025. After screening, the selected studies were analyzed using coding and thematic analysis. The findings revealed that strategies such as activating prior knowledge, gradual organization of content, using multiple representations, directing attention, eliminating unnecessary information, and promoting active learner engagement play important roles in managing cognitive load and facilitating learning. Furthermore, reducing extraneous cognitive load and enhancing learning-related cognitive processes contribute to deeper conceptual understanding, correction of misconceptions, and effective knowledge transfer. The results highlight the importance of applying cognitive science principles in physics instruction to promote meaningful learning.

Keywords*: Cognitive Load, Physics Education, Abstract Concepts, Cognitive Science, Meaningful Learning, Research Synthesis.*

PACS No. 1 (Education and Philosophy of Physics), 89 (Interdisciplinary Physics and Cognitive Sciences)

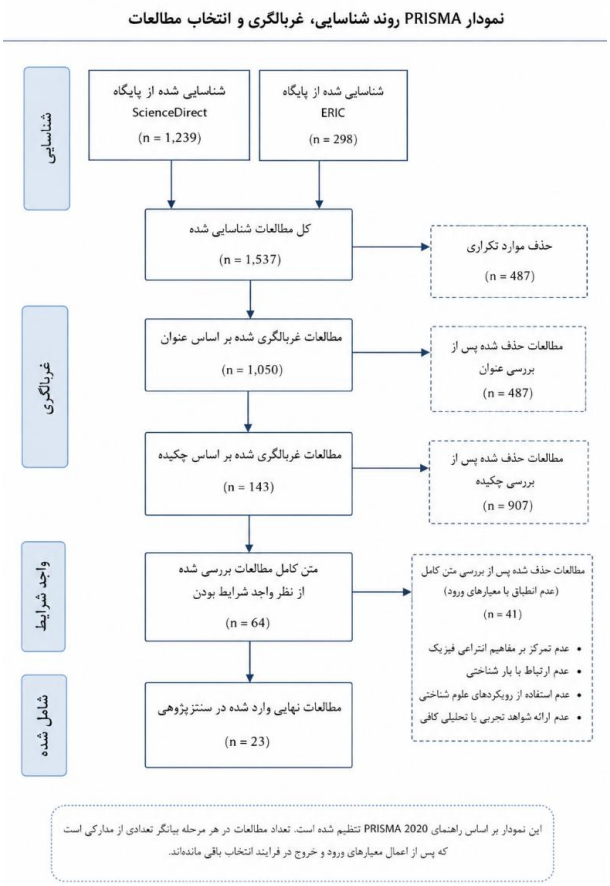
مقدمه

آموزش مفاهیم انتزاعی فیزیک از چالش‌های مهم آموزش علوم است. مفاهیمی مانند ساختار اتمی، دوگانگی موج ـ ذره، تابع موج، میدان‌های الکترومغناطیسی، برهم‌نهی کوانتومی و ساختار نواری مواد جامد، به دلیل ماهیت غیرمحسوس و غیرقابل مشاهده مستقیم خود، مستلزم تفسیر بازنمایی‌های مختلف و برقراری ارتباط میان مدل‌های مفهومی و روابط ریاضی هستند [1]. از آنجا که حافظه‌ی فعال ظرفیت محدودی دارد، پردازش هم‌زمان این عناصر می‌تواند بار شناختی زیادی ایجاد کرده و یادگیری را با دشواری مواجه سازد. پژوهش‌ها نشان داده‌اند که بسیاری از فراگیران در فهم عمیق مفاهیم و انتقال آموخته‌ها به موقعیت‌های جدید با مشکل روبه‌رو هستند [2,3]. همچنین یادگیری مؤثر مستلزم ایجاد ارتباط منسجم میان اجزای دانش مفهومی است [4]. در سال‌های اخیر، علوم شناختی به عنوان یکی از مبانی مهم بهبود آموزش و یادگیری مورد توجه قرار گرفته است. این حوزه با مطالعه فرایندهایی مانند حافظه، توجه و پردازش اطلاعات، چارچوبی علمی برای طراحی راهبردهای آموزشی فراهم می‌کند. بهره‌گیری از یافته‌های علوم شناختی می‌تواند تصمیم‌گیری آموزشی مبتنی بر شواهد را تقویت کند [5]. همچنین بسیاری از راهبردهای مؤثر یادگیری بر سازوکارهای شناختی انسان استوارند و به یادگیری عمیق و پایدار کمک می‌کنند [6]. نظریه بار شناختی یکی از مهم‌ترین مباحث علوم شناختی است که بر محدودیت ظرفیت حافظه‌ی فعال در پردازش اطلاعات تأکید دارد [7]. بر اساس این نظریه، یادگیری زمانی بهینه است که منابع شناختی صرف پردازش اطلاعات مرتبط با یادگیری شوند. در مقابل، پیچیدگی بیش از حد محتوا یا طراحی نامناسب آموزشی می‌تواند بار شناختی غیرضروری را افزایش داده و یادگیری را تضعیف کند. بنابراین، طراحی آموزشی باید به کاهش بار نامرتبط و تسهیل شکل‌گیری طرحواره‌های مفهومی کمک کند [8]. این موضوع در آموزش فیزیک اهمیت ویژه‌ای دارد، زیرا یادگیری مفاهیم فیزیکی مستلزم پردازش هم‌زمان روابط مفهومی، تصاویر، نمودارها و معادلات ریاضی است. در چنین شرایطی، راهبردهایی مانند سازمان‌دهی مناسب محتوا، حذف اطلاعات غیرضروری، استفاده هدفمند از چندرسانه‌ای‌ها و فعال‌سازی دانش پیشین می‌توانند بار شناختی اضافی را کاهش داده و یادگیری را تسهیل کنند [9,10]. مطالعات اخیر نیز اثربخشی رویکردهای مبتنی بر علوم شناختی را در بهبود یادگیری علوم تأیید کرده‌اند. برای مثال، لاگوداکیس و همکاران بهبود عملکرد تحصیلی دانش‌آموزان را در نتیجه به‌کارگیری عناصر یادگیری مغزمحور گزارش کردند [11]. همچنین شو و همکاران نشان دادند که آموزش مبتنی بر چارچوب‌های مفهومی به انسجام دانش و تعمیق درک مفهومی در فیزیک کمک می‌کند [4]. همچنان فیزیک از نظر فراگیران از مباحث سخت است و کمتر به سراغ آن می‌روند. از این رو، شناسایی و تبیین راهبردهای کاهش بار شناختی و تسهیل یادگیری حائز اهمیت است. ازاین‌رو، پژوهش حاضر با استفاده از روش سنتزپژوهی به شناسایی و تبیین این راهبردها می‌پردازد.

روش تحقیق

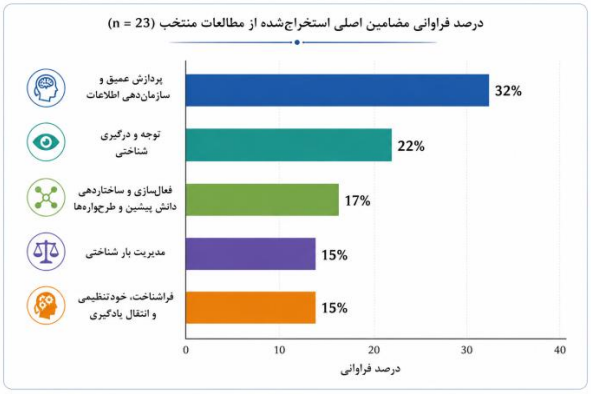
پژوهش حاضر با رویکرد کیفی و روش سنتزپژوهی انجام شد و هدف آن شناسایی راهبردهای مؤثر مدیریت بار شناختی در آموزش مفاهیم انتزاعی فیزیک بود. فرایند پژوهش بر اساس الگوی هفت‌مرحله‌ای کوپر [16] شامل تعریف مسئله، گردآوری منابع، ارزیابی مطالعات، استخراج داده‌ها، تحلیل و تلفیق یافته‌ها، تفسیر شواهد و ارائه نتایج انجام شد. جستجوی نظام‌مند در پایگاه‌های ScienceDirectو ERIC برای مقالات منتشرشده بین سال‌های 2020 تا 2025 با استفاده از کلیدواژه‌های مرتبط با آموزش فیزیک، یادگیری معنادار، علوم شناختی، روان‌شناسی شناختی و علوم اعصاب انجام گرفت. پس از حذف موارد تکراری بر اساس عنوان و اطلاعات کتاب‌شناسی و انجام غربالگری موضوعی، از 64 مقاله اولیه، 23 مقاله واجد شرایط انتخاب شدند. متن کامل 23 مقاله منتخب در نرم‌افزار MAXQDA وارد شد و پس از بررسی خط‌به‌خط، گزاره‌ها و شواهد مرتبط با راهبردهای تدریس، یادگیری معنادار و مدیریت بار شناختی استخراج و کدگذاری شدند. تحلیل داده‌ها با استفاده از تحلیل مضمون انجام شد؛ بدین ترتیب پس از کدگذاری باز و محوری، کدهای مشابه در قالب مضامین فرعی و سپس مضامین اصلی سازمان‌دهی شدند [17]. برای افزایش اعتبار و پایایی تحلیل، بخشی از فرایند کدگذاری توسط یک متخصص مستقل در حوزه آموزش فیزیک و روش‌های

پژوهش کیفی که در این پژوهش مشارکت نداشت، بازبینی شد و پس از بررسی موارد اختلاف، نسخه نهایی کدها تدوین گردید.



یافته ها و نتایج

یکی از مضامین اصلی استخراج‌شده از مطالعات منتخب، مدیریت بار شناختی بود که با 60 کد، 15 درصد از کل کدهای شناسایی‌شده را به خود اختصاص داد. تحلیل مطالعات منتخب نشان داد که راهبردهای مؤثر در آموزش مفاهیم انتزاعی فیزیک در قالب نه مضمون فرعی شامل سازماندهی تمرین‌ها، تمرین فاصله‌دار، فعال‌سازی دانش پیشین، کاهش بار شناختی غیرضروری، مدیریت توجه، زمان‌بندی آموزشی، کاهش بار شناختی هیجانی، افزایش درگیری شناختی و توسعه طرحواره‌های مفهومی قابل طبقه‌بندی هستند. این راهبردها با مدیریت حافظه‌ی کاری و بهینه‌سازی پردازش شناختی مرتبطاند .یافته‌ها نشان داد که تمرین‌های بلوکی و مخلوط، همراه با تمرین‌های فاصله‌دار و مرورهای زمان‌بندی‌شده، به کاهش بار شناختی و تثبیت طرحواره‌های ذهنی کمک می‌کنند. همچنین فعال‌سازی دانش پیشین از طریق حل مسئله و اصلاح خطا، ادغام دانش جدید در ساختارهای دانشی موجود را تسهیل کرده و یادگیری را کارآمدتر می‌سازد. مطالعات بر اهمیت کاهش بار شناختی غیرضروری از طریق حذف اطلاعات نامرتبط، کاهش محرک‌های مزاحم و سازماندهی مناسب محیط یادگیری تأکید داشتند. همچنین مدیریت



توجه و ارائه تدریجی محتوا همراه با مرورهای دوره‌ای، از اشباع حافظه‌ی کاری جلوگیری کرده و پردازش عمیق‌تر اطلاعات را تسهیل می‌کند. برخی پژوهش‌ها نشان داده‌اند که اضطراب با اشغال بخشی از منابع محدود حافظه کاری و کاهش ظرفیت پردازش همزمان اطلاعات، کارایی نظام شناختی را تضعیف می‌کند؛ به‌گونه‌ای که بخشی از منابعی که باید صرف پردازش تکلیف شوند، به کنترل نشانه‌های اضطراب و پردازش هیجانی اختصاص می‌یابد. بر این اساس، کاهش عوامل تنش‌زا و فراهم‌سازی محیط یادگیری حمایت‌گر می‌تواند با آزادسازی این منابع شناختی، ظرفیت پردازش مؤثر را افزایش داده و در نهایت به بهبود یادگیری منجر شود [18] . افزون بر این، راهبردهایی مانند داستان‌گویی، آموزش تعاملی، ترسیم و واقعیت مجازی، درگیری شناختی را افزایش می‌دهند. در نهایت، توسعه طرحواره‌های مفهومی از طریق قیاس، استنتاج و تقویت ارتباطات مفهومی، یادگیری، انتقال دانش و حل مسائل پیچیده فیزیک را تسهیل می‌کند.

مضامین فرعی	توسعه طرحواره‌های مفهومی و تسلط علمی
	افزایش درگیری شناختی و انگیزشی برای بهینه‌سازی یادگیری
	کاهش بار شناختی هیجانی و تسهیل پردازش یادگیری
	زمان‌بندی آموزشی متناسب با ظرفیت پردازش شناختی
	مدیریت توجه و تخصیص منابع شناختی
	کاهش بار شناختی غیرضروری در محیط یادگیری
	فعال‌سازی دانش پیشین از طریق حل مسئله پیش‌آموزشی و اصلاح خطا
	بهره‌گیری از تمرین فاصله‌دار برای تثبیت طرحواره‌ها
	سازمان‌دهی تمرین‌ها برای توزیع بهینه بار شناختی
شاخص‌ها	استفاده از قیاس و استنتاج در آموزش فیزیک
	تفکر واگرا، انعطاف‌پذیری، انطباق روش تدریس با ویژگی‌های یادگیرندگان، واقعیت مجازی، آموزش تعاملی، ترسیم، خلاقیت، داستان‌گویی
	صلاحیت معلم، رابطه معلم-دانش‌آموز، پردازش فعال، محیط یادگیری غنی،
	مرور زمان‌دار، آگاهی اجتماعی-فرهنگی
	ویژگی‌های شناختی یادگیرندگان
	بودجه مدارس، حذف ترس و تهدید از محیط
	ضرورت دانش برای تدریس مؤثر
	نقش اختیار در یادگیری فعال، تمرین فاصله‌دار، بهبود چرخه آموزش و اصلاح
	عوامل بیرونی و مادی

جدول ۱. مضامین فرعی و شاخص‌هااستخراج‌شده مرتبط با مدیریت بار شناختی در آموزش مفاهیم انتزاعی فیزیک

نتیجه گیری

هدف این پژوهش شناسایی راهبردهای مؤثر در مدیریت بار شناختی و تسهیل یادگیری مفاهیم انتزاعی فیزیک از طریق سنتز مطالعات علوم شناختی و آموزش فیزیک بود. یافته‌ها نشان داد که این راهبردها در سه کارکرد اصلی نظریه بار شناختی، شامل مدیریت بار شناختی ذاتی، کاهش بار شناختی غیرضروری و تقویت پردازش‌های شناختی سازنده، قابل تبیین هستند. نتایج نشان داد که سازمان‌دهی تمرین‌ها، بخش‌بندی محتوا، ارائه تدریجی مفاهیم، تمرین فاصله‌دار و حل مسئله مبتنی بر اصلاح خطا، با مدیریت ظرفیت حافظه‌ی کاری و تقویت شکل‌گیری طرحواره‌های ذهنی، یادگیری را بهبود می‌بخشند [9,14,12,15]. همچنین استفاده از بازنمایی‌های چندگانه، آموزش تعاملی، داستان‌گویی و فناوری‌هایی مانند واقعیت مجازی، همراه با ایجاد محیط یادگیری ایمن، می‌تواند با کاهش بار شناختی غیرضروری و هیجانی، فهم مفهومی را تسهیل کند [10,13]. علاوه بر این، فعال‌سازی دانش پیشین، افزایش درگیری شناختی و توسعه طرحواره‌های مفهومی، یادگیری پایدار و انتقال دانش را تقویت می‌کنند [3,4]. در مجموع، نتایج نشان می‌دهد که طراحی آموزشی مبتنی بر اصول نظریه بار شناختی می‌تواند به درک عمیق‌تر مفاهیم انتزاعی فیزیک و ارتقای یادگیری معنادار کمک کند.

مرجع‌ها

[1] Redish EF. Teaching physics with the physics suite. Hoboken (NJ): John Wiley & Sons; 2003.
[2] McDermott LC, Redish EF. Resource letter: PER-1: Physics education research. Am J Phys. 1999;67(9):755–67.
[3] Bao L, Koenig KM. Physics education research for 21st century learning. Discip Interdiscip Sci Educ Res. 2019;1:2.
[4] Xu W, Jiang Y, Yang L, Bao L. Conceptual framework-based instruction for promoting knowledge integration in learning momentum. Phys Rev Phys Educ Res. 2023;19(2):020124.
[5] Cuevas JA, Childers G, Dawson BL. A rationale for promoting cognitive science in teacher education: Deconstructing prevailing learning myths and advancing research-based practices. Trends Neurosci Educ. 2023;33:100209.
[6] Dunlosky J, Rawson KA, Marsh EJ, Nathan MJ, Willingham DT. Improving students' learning with effective learning techniques: Promising directions from cognitive and educational psychology. Psychol Sci Public Interest. 2013;14(1):4–58.
[7] Sweller J. Cognitive load during problem solving: Effects on learning. Cogn Sci. 1988;12(2):257–85.
[8] Sweller J, Ayres P, Kalyuga S. Cognitive load theory. New York: Springer; 2011.
[9] Sweller J. Element interactivity and intrinsic, extraneous, and germane cognitive load. Educ Psychol Rev. 2010;22:123–38.
[10] Mayer RE, Moreno R. Techniques that reduce extraneous cognitive load and manage intrinsic cognitive load during multimedia learning. In: Plass JL, Moreno R, Brünken R, editors. Cognitive load theory. New York: Cambridge University Press; 2010. p. 131–52.
[11] Lagoudakis N, Vlachos F, Christidou V, Vavougios D. The effectiveness of a teaching approach using brain-based learning elements on students' performance in a biology course. Cogent Educ. 2022;9(1):2158672.
[12] Paas F, van Merriënboer JJG. Cognitive-load theory: Methods to manage working memory load in the learning of complex tasks. Curr Dir Psychol Sci. 2020;29(4):394–8.
[13] Plass JL, Moreno R, Brünken R, editors. Cognitive load theory. New York: Cambridge University Press; 2010.
[14] Sweller J, van Merriënboer JJG, Paas F. Cognitive architecture and instructional design: 20 years later. Educ Psychol Rev. 2019;31:261–92.
[15] Agarwal PK, Nunes LD, Blunt JR. Retrieval practice consistently benefits student learning: A systematic review of applied research in schools and classrooms. Educ Psychol Rev. 2021;33:1409–53.
[16] Cooper H. *Research Synthesis and Meta-Analysis: A Step-by-Step Approach*. 5th ed. Thousand Oaks, CA: Sage Publications; 2015.
[17] Braun V, Clarke V. Using thematic analysis in psychology. *Qual Res Psychol*. 2006;3(2):77-101.
[18] Ward RT, Lotfi S, Sallmann H, Lee HJ, Larson CL. State anxiety reduces working memory capacity but does not impact filtering cost for neutral distracters. *Psychophysiology*. 2020;57(10):e13625.

بررسی کاهش نویز در الگوریتم جستجوی کوانتومی تقویت شده

رمضان پور، ابوالفضل[1] ؛ همایونی سنگری، مرجان[1]
[1] دانشکده فیزیک، دانشگاه شیراز، شیراز

چکیده

در این پژوهش، رویکردی مبتنی بر تقویت برای بهبود عملکرد الگوریتم جستجوی کوانتومی گروور در شرایط ایده‌آل و نویزی ارائه می‌کنیم. روش پیشنهادی ما بدون هیچ فرض یا اطلاعات پیشینی از ماهیت نویزعمل می‌کند، در حالی که روش‌های متداول کاهش خطا معمولاً مستلزم شناخت دقیق مدل نویزهستند. این ویژگی، رویکرد ما را برای سامانه‌های کوانتومی NISQ با نویز پیچیده و وابسته به زمان به‌طور موثری قابل استفاده می‌کند. نشان می‌دهیم که افزودن یک ترم تقویتی به الگوریتم جستجوی کوانتومی موجب افزایش پایداری و مقاومت در برابر نویز می‌شود. نتایج عددی نشان می‌دهند که این رویکرد در حالت بدون نویز زمان جستجو را کاهش می‌دهد و در حضور نویز همدوس، احتمال موفقیت الگوریتم افزایش می‌یابد. این یافته‌ها بیانگر آن است که تقویت می‌تواند به‌عنوان روشی ساده اما مؤثر برای پایدارسازی و بهبود عملکرد الگوریتم‌های کوانتومی در محیط‌های نویزی واقعی مورد استفاده قرار گیرد.

واژه های کلیدی: *الگوریتم جستجوی کوانتومی، یادگیری تقویتی، کاهش نویز*

Noise mitigation with reinforcement in a quantum search problem

Ramezanpour, Abolfazl[1]; Homayouni-Sangari, Marjan[1]
[1] *Department of Physics, University of Shiraz, Shiraz*

Abstract

In this work, we propose a reinforcement-based approach to enhance the performance of Grover's quantum search algorithm under both ideal and noisy conditions. Unlike conventional error-mitigation techniques that rely on an explicit characterization of the noise model, our method operates without any prior knowledge of the noise, making it particularly well-suited for noisy intermediate-scale quantum (NISQ) devices, where noise is typically complex and time-dependent. We demonstrate that incorporating a feedback (reinforcement) term into the algorithm's evolution adaptively modifies the search dynamics, making them more resilient to noise and significantly improving overall performance. Numerical results show that the proposed approach not only reduces computational time in the noise-free regime but also enhances the success probability in the presence of coherent noise. This suggests that reinforcement can serve as a simple yet effective mechanism for stabilizing quantum algorithms in realistic noisy environments.

***Keywords**: Quantum search algorithm; reinforcement learning; noise mitigation*

PACS No. 03.67.Ac; 03.65.Yz; 02.50.Le

مقدمه

این مقاله نسخه‌ی خلاصه‌شده از مقاله [1] می‌باشد که در حال حاضر در مرحله پیش از چاپ قرار دارد و هدف از ارسال آن به این کنفرانس، ارائه آن می‌باشد.

رایانه‌های کوانتومی ذاتاً نسبت به منابع مختلف نویز، از جمله تعامل با محیط، نقص‌های کنترلی و تداخل بین کیوبیت‌ها حساس هستند. بنابراین، فهم عملکرد الگوریتم‌های کوانتومی در شرایط واقعی و غیرایده‌آل ضروری است؛ زیرا در این صورت می‌توان ارزیابی کرد که آیا برتری‌های سرعتی پیش‌بینی‌شده در نظریه، در عمل نیز قابل دستیابی هستند یا نه. این موضوع به‌ویژه در دوران فعلی رایانه‌های کوانتومی میان‌مقیاس پرنویز[1] اهمیت پیدا می‌کند، جایی که زمان همدوسی کیوبیت‌ها محدود است، دقت گیت‌ها کامل نیست و پیاده‌سازی کامل تصحیح خطای مقاوم در برابر خطا هنوز از نظر عملی چالش‌برانگیز است [2].

دوران NISQ با پردازنده‌های کوانتومی دارای کمتر از چند هزار کیوبیت مشخص می‌شود که هنوز برای پیاده‌سازی کامل تصحیح خطای کوانتومی یا دستیابی به مزیت کوانتومی واقعی به اندازه کافی پیشرفته نیستند. این پردازنده‌ها به‌شدت نسبت به محیط حساس‌اند و مستعد وادوسی کوانتومی هستند، که اجرای مستمر تصحیح خطای کوانتومی را عملاً غیرممکن می‌کند.

مطالعات نشان داده‌اند که نویز می‌تواند تأثیر قابل توجهی بر عملکرد الگوریتم‌های کوانتومی داشته باشد. به‌عنوان مثال در الگوریتم جستجوی گروور، وجود نویز می‌تواند احتمال موفقیت را کاهش دهد و سرعت‌بالا بودن درجه دوم، که منجر

[1] *Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ)*

به برتری محاسباتی این الگوریتم می‌شود، را از بین ببرد[3,4].
برای مقابله با این چالش‌ها، روش‌های متنوعی برای کاهش اثر نویز و خطا توسعه یافته‌اند. این روش‌ها با هدف کاهش اثر نویز بدون نیاز به پیاده‌سازی کامل تصحیح خطای کوانتومی طراحی شده‌اند. از جمله این تکنیک‌ها می‌توان به برون‌یابی بدون نویز[2]، لغو خطای احتمالاتی[3] و کاهش خطای اندازه‌گیری[4] اشاره کرد که برای بهبود عملکرد الگوریتم‌های کوانتومی در حضور نویز به‌کار گرفته می‌شوند [5,6].
یادگیری تقویتی یا مبتنی بر بازخورد، به عنوان یک الگوی قدرتمند در بهینه‌سازی کلاسیک و کوانتومی مطرح شده است. با تقویت اقداماتی که منجر به نتایج مطلوب می‌شوند و سرکوب اقداماتی که چنین تأثیری ندارند، یادگیری تقویتی باعث تسریع همگرایی به سمت راه‌حل‌های بهینه و افزایش مقاومت در برابر نویز و خطا می‌شود. در بهینه‌سازی کلاسیک، یادگیری تقویتی عملکرد تقریباً بهینه‌ای روی مسائل ترکیبی پیچیده مانند مسئله فروشنده دوره‌گرد داشته است، به‌ویژه وقتی با شبکه‌های عصبی و مکانیزم‌های توجه ترکیب شود.
در حوزه کوانتومی، یادگیری تقویتی با موفقیت در مدارهای کوانتومی متغیر، گرمایش کوانتومی و روش‌های هیبریدی مرتبط به کار گرفته شده است. این روش‌ها امکان بهینه‌سازی مؤثر پارامترها، ساده‌سازی مدارها، آماده‌سازی حالات کوانتومی پیچیده و کاوش بهینه در مناظر انرژی ناهموار را فراهم می‌کنند. نمونه برجسته‌ای از این کاربردها، گرمایش کوانتومی تقویت‌شده است؛ در این روش، یک ترم تقویتی وابسته به زمان می‌تواند سیستم را به سمت حالات کم‌انرژی هدایت کند، عملکردی فراتر از گرمایش کوانتومی استاندارد ارائه دهد و حتی تغییر فازها را در مدل‌های پیچیده تحت تأثیر قرار دهد [7].
الگوریتم جستجوی کوانتومی گروور از حساس‌ترین الگوریتم‌های کوانتومی نسبت به نویز می‌باشد. در شرایط ایده‌آل، این الگوریتم با یک دنباله چرخش در یک زیرفضای دوبعدی، احتمال یافتن حالت علامت‌گذاری‌شده را تقویت می‌کند و پس از تقریباً $\pi/4\sqrt{D}$ تکرار به بیشینه احتمال موفقیت می‌رسد، که D نشان‌دهنده بعد فضای جستجو است[8]. حضور نویز این چرخش‌های دقیق را مختل کرده، بیشینه احتمال موفقیت را کاهش می‌دهد و ممکن است موقعیت آن را در زمان جابه‌جا کند. حتی نقص‌های جزئی نیز می‌توانند به‌طور قابل توجهی افزایش سرعت درجه دوم که برتری محاسباتی گروور است را کاهش دهند یا در برخی موارد کاملاً از بین ببرند.
با توجه به مطالعات پیشین در زمینه دینامیک گروور نویزی، ما یک استراتژی مبتنی بر تقویت ارائه می‌کنیم که هدف آن کاهش خطاها در مسائل جستجوی کوانتومی است. بر خلاف اکثر روش‌های رایج کاهش خطا، به جز برون‌یابی بدون نویز، رویکرد ما نیازی به شناسایی دقیق مدل نویز ندارد. این ویژگی، آن را به‌ویژه برای پلتفرم‌های آزمایشی مناسب می‌کند که نویز در آن‌ها پیچیده، وابسته به زمان یا به هر نحو دیگری دشوار برای مدل‌سازی دقیق است.
ما نشان می‌دهیم که اجرای رویکرد مبتنی بر تقویت می‌تواند مقیاس‌بندی زمان محاسباتی را نسبت به تعداد کیوبیت‌ها N به‌طور قابل توجهی بهبود دهد. به‌طور مشخص در شرایط ایده‌آل و بدون نویز ، این مقیاس‌بندی می‌تواند از رفتار مرسوم $\sqrt{2^N}$ به یک مقیاس‌بندی تقریباً خطی تغییر کند. این نتایج نشان می‌دهند که تکنیک‌های مبتنی بر تقویت، راهکاری مؤثر برای ارتقای عملکرد الگوریتم گروور در سامانه‌های کوانتومی میان‌مدت و نسل فعلی ارائه می‌کنند.

تعاریف پایه

یک سامانه کوانتومی شامل N کیوبیت را در نظر بگیرید که در یک فضای هیلبرت با بعد 2^N تعریف شده است و حالت‌های پایه آن با $|\boldsymbol{\sigma}\rangle$ مشخص می‌شوند. در اینجا $\boldsymbol{\sigma}=\{\sigma_i=0,1, i=1\ldots,N\}$ و $|\sigma_i\rangle$ ویژه‌حالت‌های عملگرهای پائولی σ_i^z هستند.
مسئله‌ی جستجوی کوانتومی را می‌توان به صورت یک فرآیند گرمایش کوانتومی از حالت پایه هامیلتونی $H_i=\mathbb{I}-|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ به حالت پایه هامیلتونی $H_f=\mathbb{I}-|\psi_f\rangle\langle\psi_f|$ فرمول‌بندی کرد. در اینجا $|\psi_f\rangle$ حالت هدف می باشد و داریم:

$$|\psi_i\rangle=\frac{1}{\sqrt{2^N}}\sum_{\boldsymbol{\sigma}}|\boldsymbol{\sigma}\rangle=\sqrt{P_0}\,|\psi_f\rangle+\sqrt{1-P_0}\,|\psi_f^{\perp}\rangle \quad (1)$$

در این رابطه، $|\psi_f^{\perp}\rangle$ زیرفضای حالت هایی را نشان می‌دهد که عمود بر $|\psi_f\rangle$ هستند و $P_0=1/2^N$ احتمال یافتن حالت هدف در حالت $|\psi_i\rangle$ را مشخص می‌کند.
فرآیند گرمایش کوانتومی را می‌توان با L گام تحول کوانتومی تقریب زد. هامیلتونی سامانه در هر لایه به صورت زیر تعریف می‌شود :

$$\mathrm{H}_l=\mathrm{A}_l\mathrm{H}_i+\mathrm{B}_l\,\mathrm{H}_f+\mathrm{R}_l+\mathrm{V}_l \quad (2)$$

که در آن R_l جمله‌ی تقویتی و V_l (در صورت وجود) نویز همدوس و $l=0,\ldots,L-1$ هستند. جمله‌ی تقویتی معمولاً تابعی افزایشی از حالت کوانتومی سامانه در لایه l، یعنی ρ_l می باشد. یک مثال رایج برای جمله تقویتی می تواند $R_l(\rho_l)=-r_l\ln(\rho_l)$ باشد. با این حال، برای سادگی در اینجا از فرم $R_l(\rho_l)=-r_l\rho_l$ استفاده می‌کنیم. لازم به ذکر است که برای حالت‌های خالص، هر تابعی از $\rho_l=|\psi_l\rangle\langle\psi_l|$

[2] *zero-noise extrapolation*
[3] *probabilistic error cancellation*
[4] *measurement error mitigation*

که دارای بسط تیلور باشد، می‌تواند به صورت تابع خطی از ρ_l بیان شود.

دینامیک سامانه از حالت پایه H_i، $\rho_0 = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ آغاز می‌شود. در هر لایه، با اعمال نگاشت کوانتومی $\mathcal{E}_l$ بر حالت لایه l، حالت لایه بعدی سامانه به صورت $\rho_{l+1} = \mathcal{E}_l(\rho_l)$ بدست می آید. با ادامه این روند، در نهایت به حالت خروجی ρ_L می رسیم. به‌طور کلی، نگاشت کوانتومی در هر لایه $\mathcal{E}_l$ به هامیلتونی متناظر آن لایه H_l و مدل نویز همدوس مربوط به همان لایه V_l وابسته است. همچنین، احتمال موفقیت در هر لایه به صورت $P_{success}(l) = \mathrm{tr}(\rho_L |\psi_f\rangle\langle\psi_f|)$ تعریف می شود.

برای فرآیند گرمایش کوانتومی، ضرایب هامیلتونی به صورت $A_l = 1 - t_l$ و $B_l = t_l$ در نظر گرفته می‌شوند که در آن $t_l \in (0,1)$ یک تابع اکیداً صعودی از شاخص لایه l می‌باشد.

در غیاب نویز و جمله‌ی تقویتی، زمان‌بندی بهینه‌ی فرآیند گرمایش کوانتومی با زمان‌بندی ارائه‌شده در الگوریتم جستجوی گروور منطبق است و به‌صورت زیر بیان می‌شود :

$$t_l^G = \frac{1}{2}\left[1 - \sqrt{\frac{P_0}{1-P_0}}\tan\left((1-2\frac{l}{L-1})\phi\right)\right], \qquad \phi = \arctan\left(\sqrt{\frac{1-P_0}{P_0}}\right). \tag{3}$$

در این حالت، ضرایب هامیلتونی با نمادهای A_l^G و B_l^G مشخص می‌شوند. علاوه بر فرآیند گرمایش کوانتومی، ما یک فرآیند دینامیکی محلی را نیز بررسی می‌کنیم که در آن ضرایب هامیلتونی در هر لایه به‌گونه‌ای بهینه می‌شوند که احتمال موفقیت در همان لایه، بیشینه گردد. ضرایب بهینه به‌دست‌آمده در این حالت با نمادهای A_l^* و B_l^* نمایش داده می‌شوند .

دینامیک تقویت شده در غیاب نویز

در غیاب نویز، هامیلتونی حاکم بر سامانه به صورت زیر می باشد:

$$H_l^0 = A_l H_i + B_l H_f - r_l \rho_l \tag{4}$$

که در آن $\rho_l = |\psi_l\rangle\langle\psi_l|$ می باشد. حالت‌های کوانتومی هر لایه $|\psi_l\rangle$ مطابق با رابطه $|\psi_{l+1}\rangle = U_l^0 |\psi_l\rangle$ تحول می یابند. شرایط اولیه را به صورت $|\psi_0\rangle = |\psi_i\rangle$ در نظر می گیریم و عملگر یکانی در هر لایه l نیز $U_l^0 = e^{-i\hat{H}_l^0}$ می باشد. در اینجا حالت سامانه در هر لایه را می توانیم بر حسب پایه های زیرفضای دوبعدی $\{|\psi_f\rangle, |\psi_f^\perp\rangle\}$ به صورت زیر بسط می دهیم:

$$|\psi_l\rangle = \alpha_l |\psi_f\rangle + \beta_l |\psi_f^\perp\rangle \tag{5}$$

$|\alpha_l^2|$ و $|\beta_l^2|$ به ترتیب احتمال یافتن حالت لایه l سامانه درحالت های پایه $|\psi_f\rangle$ و $|\psi_f^\perp\rangle$ می باشند.

شکل 1، زمان محاسباتی بر حسب اندازه‌ی سامانه برای دو حالت بدون تقویت و با تقویت را نشان می دهد. در این شکل مشاهده می‌کنیم که در حالت بدون تقویت، زمان محاسباتی با افزایش اندازه‌ی سامانه به‌طور نمایی رشد می‌کند در حالی‌که در حالت تقویت‌شده، زمان جستجو تقریباً به‌صورت خطی با اندازه سامانه افزایش می‌یابد.

نویز همدوس

هامیلتونی یک سامانه N کیوبیتی مطابق با رابطه (2) و نویز همدوس را به صورت زیر در نظر می گیریم:

$$V_l = \sum_i \sum_{\mu=x,y,z} \epsilon_{l,i\mu}\sigma_i^\mu \tag{6}$$

σ_i^μ عملگرهای پائولی و ضرایب $\epsilon_{l,i\mu} = \mathcal{N}(0,\epsilon_l)$ متغیرهای تصادفی مستقل هستند که از یک توزیع نرمال با میانگین صفر و واریانس ϵ_l^2 نمونه برداری می‌شوند و $\epsilon_l = \epsilon / L$ در نظر می گیریم.

در شکل 2، احتمال موفقیت به‌عنوان تابعی از شدت نویز همدوس برای سامانه‌هایی با اندازه‌های مختلف، در دو حالت با تقویت و بدون تقویت نمایش داده شده است. نتایج نشان می دهند که تقویت احتمال موفقیت را به شکل قابل ملاحظه ای افزایش می دهد.

دینامیک تقویت شده در یک سامانه D-حالته

فضای هیلبرت این سامانه توسط مجموعهٔ حالت‌های $\{|d\rangle : d = 0,\ldots,D-1\}$ بسط داده می‌شود. حالت هدف را به صورت $|\psi_f\rangle = |0\rangle$ در نظر می گیریم. حالت سامانه به صورت ترکیب خطی از حالت هدف و زیرفضای عمود بر آن، به صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$|\psi_i\rangle = \sqrt{P_0}\,|\psi_f\rangle + \sqrt{1-P_0}\,|\psi_f^\perp\rangle$$

دراین‌رابطه، $|\psi_f^\perp\rangle = \frac{1}{\sqrt{D-1}}\sum_{d=1}^{D-1}|d\rangle$ و $P_0 = 1/2^N$ می‌باشند. حالت‌های این سامانه در رابطه بسطاری $\sum_d |d\rangle\langle d| = \mathbb{I}$ و تعامد $\langle d|d'\rangle = \delta_{d,d'}$ صدق می کنند.

با این نمایش، می‌توان فضای جستجو D بعدی را به یک زیرفضای دوبعدیِ مؤثر کاهش داد، بدون آن‌که نیاز به بررسی کل فضای D بعدی باشد.

مطابق قبل، هامیلتونی سامانه مورد نظر به صورت زیر در نظر می گیریم:

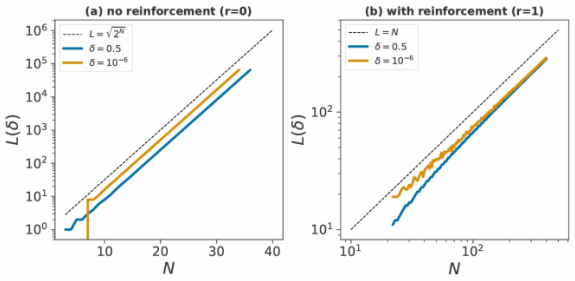
$$H_l = A_l H_i + B_l H_f - r\rho_l + V_l$$

که عناصر ماتریس نویز به صورت زیر می باشند:

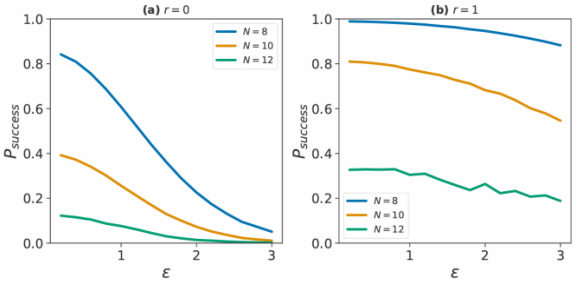
$$V_{dd'}(l) = \epsilon_{d,0}(l)\delta_{d,d'} + \epsilon_{d,\pm1}(l)(\delta_{d-1,d'} + \delta_{d+1,d'})$$

در اینجا، $\epsilon_{d,0,\pm1}(l) = \mathcal{N}(0,\epsilon_l)$ متغیرهای تصادفی مستقل هستند که از یک توزیع نرمال با میانگین صفر و واریانس ϵ_l^2 نمونه‌برداری می‌شوند و $\epsilon_l = \epsilon / L$ می باشد.

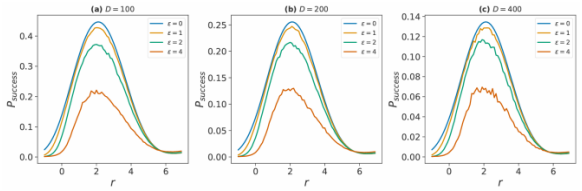
شکل 3، احتمال موفقیت را به‌عنوان تابعی از پارامتر تقویت r برای یک سامانه-D حالته با شدت‌های مختلف نویز همدوس و تعداد لایه‌های ثابت (L=10) نشان می‌دهد. برای هر سه سامانه با ابعاد (D=100, 200, 400) مشاهده می‌کنیم که با افزایش شدت نویز، احتمال موفقیت کاهش می‌یابد. همچنین، در یک $r \neq 0$ احتمال موفقیت بیشینه می شود که این احتمال بیشینه به اندازه سامانه و شدت نویز بستگی ندارد.



شکل1 : جستجوی کوانتومی در غیاب نویز: بررسی زمان محاسباتی L_δ برحسب اندازه سیستم N ، در دو حالت (a) بدون تقویت (b) با تقویت. کمیت L_δ حداقل تعداد لایه‌های تحول دینامیکی که برای دستیابی به احتمال موفقیت $P_{success} > 1-\delta$ مورد نیاز می باشد.



شکل2 : گرمایش کوانتومی با نویز همدوس در سامانه‌ای متشکل از N کیوبیت با استفاده از ضرایب گروور A_l^G و B_l^G : احتمال موفقیت به‌صورت تابعی از شدت نویز ϵ برای $r=0$ (a) و $r=1$ (b) هر نقطه نمایانگر میانگین نتایج حاصل از حداقل 20 نمونهٔ مستقل هامیلتونی نویزی می باشد.



شکل3 : گرمایش کوانتومی با نویز همدوس در سامانه- D حالته با استفاده از ضرایب گروور A_l^G و B_l^G : احتمال موفقیت به‌صورت تابعی از پارامتر تقویتی r برای شدت‌های مختلف نویز. نمودارها برای $D=100$ (a) ، $D=200$ (b) و $D=400$ (c) با تعداد ثابت لایه‌ها $L=10$ رسم شده‌اند. هر نقطه نمایانگر میانگین نتایج حاصل از حداقل 2000 نمونهٔ مستقل هامیلتونی نویزی می باشد.

نتیجه گیری

به‌طور کلی، نتایج ارائه شده نشان می‌دهند که استراتژی مبتنی بر تقویت نه تنها زمان جستجو را کاهش و مقیاس‌پذیری الگوریتم را بهبود می‌بخشد، بلکه مقاومت الگوریتم در برابر نویز همدوس را نیز افزایش می‌دهد و احتمال موفقیت را در سامانه‌های بزرگ و پرنویز به‌طور قابل‌توجهی حفظ می‌کند. بدین ترتیب، تقویت می‌تواند به‌عنوان یک ابزار ساده و مؤثر برای افزایش پایداری و بهینه‌سازی عملکرد الگوریتم‌های کوانتومی در محیط‌های واقعی مورد استفاده قرار گیرد .

با این حال یکی از محدودیت‌های اصلی روش پیشنهادی، نیاز به دسترسی به اطلاعات کامل از حالت کوانتومی سامانه است، که دامنه کاربرد آن را به سامانه‌های کوچک یا میان‌رده محدود می‌کند .

سپاسگزاری

از منابع محاسباتی ALICE که توسط دانشگاه لیدن در اختیار ما قرار گرفت، صمیمانه قدردانی می‌کنیم.

مرجع‌ها

[1] A. Ramezanpour and M. Homayouni-Sangari; “Noise mitigation with reinforcement in a quantum search problem”; in preparation.
[2] H. M. Wiseman and G. J. Milburn; Quantum Measurement and Control; Cambridge University Press (2009).
[3] D. Shapira, S. Mozes, and O. Biham; “Effect of unitary noise on Grover’s quantum search algorithm”; Physical Review A 67 (2003) 042301.
[4] R. A. Salas; “On the effect of noise in Grover’s quantum search algorithm”; European Physical Journal D 47 (2008) 447–451.
[5] A. Van Den Berg et al.; “Probabilistic error cancellation with sparse Pauli–Lindblad models on noisy quantum processors”; Nature Physics 19 (2023) 1116.
[6] A. He, B. Nachman, W. A. de Jong, and C. W. Bauer; “Zero-noise extrapolation for quantum-gate error mitigation with identity insertions”; Physical Review A 102 (2020) 012426.
[7] A. Ramezanpour; “Quantum walk in a reinforced free-energy landscape: Quantum annealing with reinforcement”; Physical Review A 106 (2022) 012418.
[8] L. K. Grover; “A fast quantum mechanical algorithm for database search”; Proceedings of the 28th Annual ACM Symposium on Theory of Computing (STOC ’96) (1996) 212–219.

گروه‌های همسانی سطوح زبر ناهمسانگرد

چوپانیان، امید[۱]؛ جلالی کنفی، محمدحسین[۱و۲]؛ موحد، سید محمدصادق[۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه شهید بهشتی، ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱، تهران، ایران

[۲] پژوهشکده فیزیک، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی، ۱۹۳۹۵۵۵۳۱، تهران، ایران

چکیده

ریخت‌شناسی میدان‌های تصادفی به منظور واکاوی ویژگی‌های و مدل‌سازی آنها و به طور خاص در مطالعه سطوح زبر از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. هر چند روش‌های متنوعی برای برآورد نمای مقیاسی و طول‌همبستگی در سطوح زبر معرفی شده است اما همچنان عدم تعیّن در خصوص تأثیر نسبت ناهمسانگردی در این برآوردها وجود دارد. در این پژوهش، با محاسبه گروه‌های همسانی میدان تراز بالا سطوح زبر، تأثیر نسبت ناهمسانگردی بر ناورداهای توپولوژی سطوح زبر خودمتناسب بررسی می‌شود. سطوح زبر دوبُعدی با استفاده از طیف توان و از طریق روش فیلترینگ فوریه‌ی تعمیم‌یافته با اندازه‌ی ۲۵۶×۲۵۶ شبیه‌سازی و فیلتراسیون تراز بالا روی آنها اعمال می‌شود، سپس منحنی‌های مداومت برای گروه‌های همسانی بتی صفر (β_0) و بتی یک (β_1)، محاسبه می‌شود. نتایج نشان می‌دهد انتگرال سطح زیر منحنی‌های بتی وابستگی یکنوا و معناداری نسبت به ناهمسانگردی و نمای مقیاسی دارد. این یافته‌ها نشان می‌دهد گروه‌های همسانی می‌تواند به‌عنوان سنجه‌ای کمّی چندمقیاسی برای شناسایی هم‌زمان نمای مقیاسی و ناهمسانگردی سطوح زبر به‌کار رود.

واژه های کلیدی: *سطح زبر – ناهمسانگردی – گروه‌های همسانی*

Homology Groups of Anisotropic Rough Surfaces

Choupanian, Omid [1]; Jalali Kanafi, Mohammad Hosein[1,2]; Movahed, Seyed Mohammad Sadegh[1]

[1] Department of Physics, Shahid Beheshti University,19839-69411 Tehran, Iran

[2] School of Physics, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), 19395-5531, Tehran, Iran

Abstract

Morphology of random fields is of particular importance for analyzing their characteristics and modeling them, especially in the study of rough surfaces. Despite the existence of numerous methods for estimating the scaling exponent and correlation length in rough surfaces, there remains considerable uncertainty about the effect of the anisotropy ratio on these estimations. In this research, by computing the homology groups of the super level filtered rough surfaces, the effect of the anisotropy ratio on the topological invariants of self-affine rough surfaces is investigated. Two-dimensional rough surfaces are simulated using a power spectrum and the generalized Fourier filtering method with a size of 256×256, and super level filtering is applied to them. Then, persistence curves for the zeroth Betti number (β_0) and the first Betti number (β_1) are computed. The results show that the area integral under the Betti curves has a monotonic and significant dependence on anisotropy and the scaling exponent. These findings indicate that homology groups can serve as a multiscale quantitative metric for simultaneously identifying the scaling exponent and anisotropy of rough surfaces.

***Keywords**: Rough surfaces, Anisotropy, homology groups*
PACS No. 68

مقدمه

زبری سطوح بر خواص مکانیکی، حرارتی و نوری مواد تأثیر میگذارد [۱]. پیشرفت‌های اخیر در فیزیک مواد، مهندسی سطح و اپتیک، نیاز به شناخت و تدقیق مدل‌سازی سطوح مذکور را افزایش داده است. غالب زبری‌ها با مدل‌های فراکتالی و دینامیک‌های رشد غیرخطی نظیر معادله KPZ توصیف می‌شوند [۲]؛ خروجی این مدل‌ها دربردارنده پدیده‌های پیچیده و وابسته به مقیاس است. اگرچه رویکردهای مبتنی بر شاخص‌های آماری هندسی و کلاسیک مانند تابع همبستگی دو نقطه‌ای، تقاطع از مبداء و معیارهای زبری میانگین (مانند R_a و R_q) اطلاعات ارزشمندی در

مورد ریخت و خواص زبری ارائه می‌دهند [۳و٤]، اما در واکاوی توپولوژی ساختارهای ناهمسانگرد و درک رابطه آماری میان ساختار هندسی–توپولوژی سطح و به طور خاص در استخراج هم‌زمان و تفکیک‌یافته دو ویژگی نسبت همبستگی دو راستای متعامد و نمای مقیاسی آن همچنان پرسش‌های بسیاری وجود دارد.

از طرفی تحلیل توپولوژی داده [۱] و به‌ویژه همسانی مداومت [۲] چارچوبی نوین برای مطالعه‌ی ساختار هندسی–توپولوژی میدان‌های تصادفی فراهم می‌آورد [۵]. در این رویکرد، با تغییر تدریجی مؤلفه آستانه در فرآیند فیلتراسیون، مجموعه گشت [۳] ساخته می‌شود و از روی آن ویژگی ناورداهای توپولوژی استخراج و ثبت می‌گردد. یکی از مهم‌ترین این ناورداها، اعداد بتی [٤] هستند که بُعد گروه‌های همسانی و به بیانی دیگر تعداد حفره‌های k–بُعدی را نشان می‌دهند؛ بتی صفر (β_0)، تعداد اجزای متصل [۵]، بتی یک (β_1)، تعداد حفره‌های یک بُعدی [٦] و بتی دو (β_2)، تعداد حفره‌های دو بُعدی [۷] می‌باشد. با تحلیل نتایج بدست آمده از آن‌ها امکان بررسی و کمّی‌سازی دقیق میدان مورد مطالعه فراهم می‌آید. این روش در مقایسه با شاخص‌های آماری کلاسیک، اطلاعات چند مقیاسی و مقاوم به نویز را استخراج و ارائه می‌کند. در سال‌های اخیر گروه‌های همسانی در طیف گسترده‌ای از مسائل فیزیکی به‌کار رفته است. در سال ۲۰۱۵ بررسی سطوح زبر خودمتناسب [۸] حاصل از شبیه‌سازی حرکت براونی کسری [۹] مورد بررسی قرار گرفت و کارآمدی آن دیاگرام مداومت برای تخمین نمای مقیاسی نشان داده شد[٦]. معصومی و همکاران [۷] در سال ۲۰۲۲ تأثیر بُعد و غوطه‌ورسازی تأخیر زمانی [۱۰] در تخمین نمای هرست [۱۱] حرکت براونی کسری در یک بُعد را بررسی کردند. و در سال ۲۰۲۵، کارآیی همسانی مداومت در تحلیل ویژگی ساختاری مواد بی‌نظم و تشخیص و طبقه‌بندی فازها نشان داده شد[۸]. با وجود این، کاربرد نظام‌مند این راهکار محاسباتی برای تشخیص همزمان نمای مقیاسی و ناهمسانگردی تاکنون مورد بررسی قرار نگرفته است؛ این در حالی است که این دو ویژگی مستقیماً بر یکدیگر تأثیر می‌گذارند و تفکیک سهم هر یک در تحلیل‌های کمّی از اهمیت بالایی برخوردار است. در این پژوهش، برای رفع خلاء تحقیقاتی موجود، سطوح زبر تک فراکتالی با نسبت طول همبستگی $\xi_{\parallel}/\xi_{\perp}\in(1,8)$ و نمای مقیاسی $\gamma\in(0.1,0.9)$ توسط فیلترینگ فوریه‌ی تعمیم‌یافته [۱۲] و استفاده از فیلتراسیون تراز بالا [۱۳] شبیه‌سازی شدند؛ سپس ناورداهای توپولوژی بتی صفر و بتی یک محاسبه و برای کمّی‌سازی، شاخص انتگرال سطح زیر منحنی بتی (A_0) و (A_1) مورد مطالعه و بررسی قرار گرفت.

گروه‌های همسانی

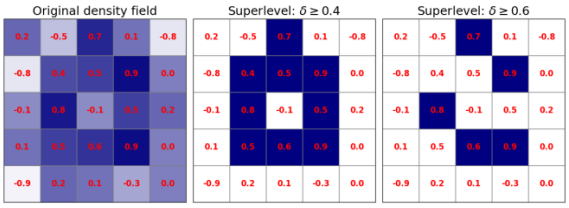
گروه‌های همسانی، ابزاری کارآمد برای کشف ساختار نهفته در داده‌ها فراهم می‌آورد. این روش بر تحلیل مداومت ویژگی‌های میدان مورد مطالعه در مقیاس‌های مختلف تمرکز دارد. در همسانی مداومت سطوح زبر، میدان ارتفاع با رابطه زیر بهنجار می‌شود:

$$\delta(r)=\frac{h(r)-\bar{h}}{\sigma_h} \qquad (۱)$$

که در آن $\bar{h}$ میانگین و σ_h انحراف معیار ارتفاع روی شبکه است. با تعریف پارامتر آستانه ϑ، مجموعه گشت به صورت $M_\vartheta=\{r\in M\,|\,\delta(r)\geq\vartheta\}$ بدست می‌آید. با کاهش تدریجی ϑ از مقدار بیشینه به کمینه، دنباله‌ای از زیرمجموعه‌های تودرتوی $M_{\vartheta_{\max}}\subseteq\ldots M_{\vartheta_{i+1}}\subseteq\ldots M_{\vartheta_i}\subseteq\ldots M_{\vartheta_{\min}}$ ساخته می‌شود؛ در هر مرحله از این فرآیند، ویژگی‌های توپولوژی متولد شده یا از بین می‌روند و اعداد بتی آن‌ها را کمّی می‌کنند. شکل ۱ طرح‌واره تحول ویژگی‌های توپولوژی یک میدان دو بُعدی نوعی را برحسب آستانه فیلتراسیون نمایش می‌دهد. در این روش با استفاده از مفهوم مجتمع‌های سادکی [۱٤] ابتدا به هر خانک [۱۵] یک رأس نسبت داده می‌شود و سپس بر اساس مقدار آن خانک، ارتفاعی به رأس

[1] Topology Data Analysis (TDA)
[2] Persistent Homology (PH)
[3] Excursion Set
[4] Betti Numbers
[5] Connected components (clusters)
[6] Loops (filaments)
[7] Closed surfaces (void)
[8] Self-affine
[9] Fractional Brownian motion
[10] Time Delay Embedding (TDE)
[11] Hurst Exponent
[12] Modified Fourier filtering
[13] Super-level
[14] Simplicial Complexes
[15] Pixel

مربوطه تخصیص داده می‌شود؛ هنگامی که ارتفاع این صفحه از ارتفاع رأس‌های مجاور عبور می‌کند، آن رأس‌ها با یال به یکدیگر متصل می‌شوند و بدین ترتیب در هر آستانه تولد و مرگ ویژگی‌های توپولوژی را شاهد خواهیم بود. به طور خلاصه، عدد بتی در یک آستانه مشخص، بیانگر تعداد جفت‌های همسانی (تولد–مرگ) است که در بالای آن آستانه متولد شده و در پایین آن آستانه از بین می‌روند. رابطه (۲) شکل ریاضیاتی این مفهوم را نمایش می‌دهد [۹و۱۰]:



شکل ۱: طرح‌واره تحول ویژگی‌های توپولوژی برحسب آستانه فیلتراسیون

$$\beta_k(\vartheta)=\sum_{i=1}^{n_k}\Theta\left(\vartheta_{i,birth}^{k}-\vartheta\right)\Theta\left(\vartheta-\vartheta_{i,death}^{k}\right) \qquad (۲)$$

که در آن Θ تابع پله هویساید[16] است و n_k نشان‌دهنده تعداد جفت‌های مربوط به همسانی k–ام است. با محاسبه و ثبت بتی در آستانه‌های مختلف، منحنی‌های بتی[17] بدست می‌آید که نمایانگر توزیع فراوانی اعداد بتی بر حسب مؤلفه مجاورت (یا مؤلفه فیلتراسیون) است؛ برای مقایسه آنها یک شاخص شناخته شده، انتگرال سطح زیر منحنی است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

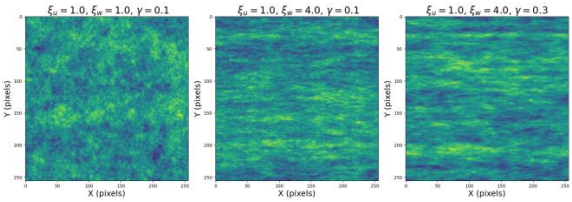
$$A_k=\int\beta_k(\vartheta)d\vartheta \qquad (۳)$$

توصیف و آماده‌سازی داده

شبیه‌سازی عددی سطوح خودمتناسب، با استفاده از روش مبتنی بر فیلترینگ فوریه تعمیم‌یافته[18] انجام می‌شود. برای تولید یک سطح زبر تک فراکتالی دو بُعدی با طول همبستگی[19] و نمای مقیاسی (نمای هرست) مشخص، از طیف توان[20] زیر استفاده می‌شود [٤]:

$$P^{(2D)}(k)=\frac{4\pi\gamma\sigma_0^2k_c^{2\gamma}\xi_u\xi_w}{L^2\left[k_c^2+\xi_u^2k_u^2+\xi_w^2k_w^2\right]^{\gamma+1}} \qquad (٤)$$

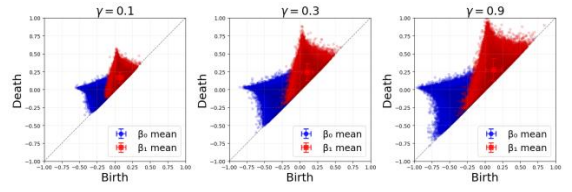
که در آن ξ_u و ξ_w طول‌های همبستگی در راستاهای u و w به‌عنوان یک دستگاه متعامد روی سطح هستند. بردار موج به‌صورت $k:(k_u,k_w)$ تعریف می‌شود، k_c بردار موج قطع است، و γ نمای مقیاسی را نشان می‌دهد. واریانس ارتفاع سطح با σ_0 نمایش داده می‌شود و L اندازه‌ی سطح را مشخص می‌کند. در این پژوهش شبیه‌سازی سطوح به ازای نسبت طول همبستگی ۱ تا ۸ با گام ضریب۲ و نمای مقیاسی ۰.۱ تا ۰.۹ با گام ۰.۱ برای واریانس ۰.۲ و بردار موج قطع ۱۰۰ و اندازه ۲۵٦ انجام شد. شکل۲ تصاویر حاصل از شبیه‌سازی سطوح زبر بهنجار شده برای نسبت‌های طول همبستگی و نمای مقیاسی مختلف نوعی را نمایش می‌دهد.



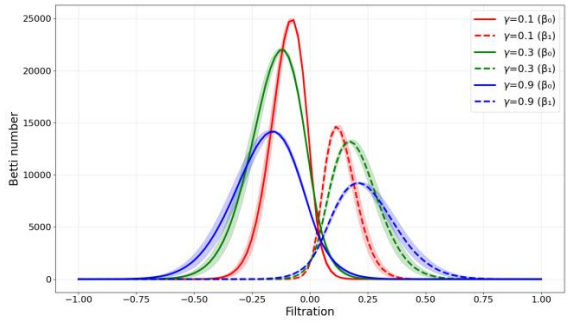
شکل۲: سطوح زبر نوعی در نسبت طول همبستگی و نمای مقیاسی مختلف

نتایج تحلیل ناورداهای توپولوژی

در این بخش، ویژگی‌های توپولوژی سطوح شبیه‌سازی‌شده در مرحله پیشین، با استفاده از ناورداهای بتی صفر و بتی یک مورد تحلیل قرار گرفته است. ابتدا، دیاگرام‌های مداومت (تولد–مرگ) برای هر نسبت ناهمسانگردی ترسیم شدند. شکل ۳ دیاگرام‌های سطح همسانگرد در سه نمای مقیاسی مختلف را نشان می‌دهد.



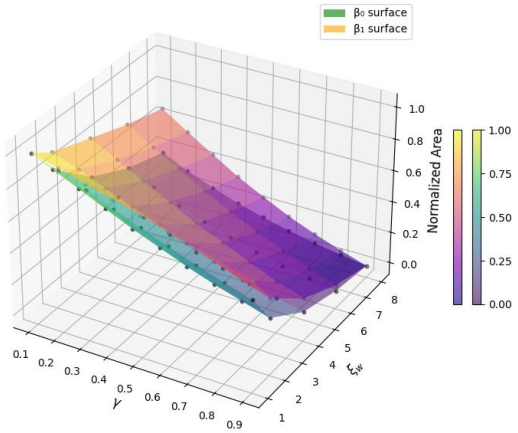
شکل۳: دیاگرام مداومت (تولد–مرگ) به ازای سه نمای مقیاسی مختلف



شکل٤: منحنی بتی صفر و بتی یک شکل۳ برحسب آستانه فیلتراسیون

16 Heaviside step function
17 Betti Curve
18 Modified Fourier filtering
19 Correlation lengths
20 Power spectrum

محاسبات و نمودارهای فوق با استفاده از کتابخانه cripser در پایتون و به ازای ۱۰ بار شبیه‌سازی برای هر مجموعه با مؤلفه یکسان و خطای آن حاصل شده‌اند. جهت تحلیل کمّی این پدیده، منحنی‌های بتی بر حسب آستانه فیلتراسیون رسم شدند (شکل ٤). نتایج نشان می‌دهد که با افزایش نمای مقیاسی، ارتفاع قله منحنی‌ها کاهش یافته و توزیع آن‌ها به سمت آستانه صفر متمایل می‌شود. در راستای ارزیابی دقیق‌تر، انتگرال سطح زیر منحنی‌های بتی صفر و بتی یک و خطای محاسباتی آن برای نسبت‌های ناهمسانگردی و مقادیر نمای مقیاسی مختلف پس از بهنجارش سطوح به انحراف معیار مورد بررسی قرار گرفت (شکل۵).



شکل۵: نمایش سه‌بُعدی بهنجار شده از تغییرات انتگرال سطح زیر منحنی‌های بتی صفر و بتی یک به ازای نسبت‌های مختلف ناهمسانگردی و نمای مقیاسی

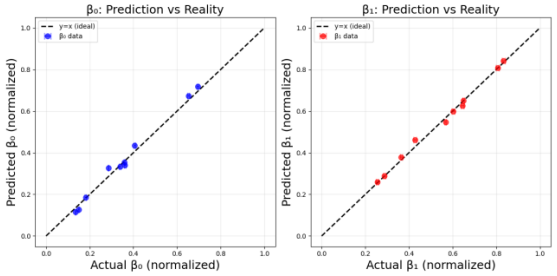
برای کمّی‌سازی دقیق‌تر رفتار مشاهده‌شده، به هر دو کمیت A_0 و A_1 یک چند جمله‌ای درجه‌ی دو کامل در فضای مؤلفه‌های (γ, ξ_y) به شکل معادله زیر برازش داده شد:

$$f(\gamma, \xi_y) = A\,\gamma^2 + B\,\xi_y^2 + C\,\gamma\,\xi_y + D\,\gamma + E\,\xi_y + F \qquad (۵)$$

پس از یک تغییر متغیر به صورت $\gamma_n=(\gamma-0.1)/0.8$ و $\xi y_n=(\xi y-1.0)/7.0$ نتایج برای شکل۵ به شرح ذیل حاصل شد:

مؤلفه	A	B	C	D	E	F
β_0	0.176 ± 0.040	0.669 ± 0.036	0.164 ± 0.031	-0.701 ± 0.044	-1.314 ± 0.040	1.010 ± 0.013
β_1	0.117 ± 0.040	0.383 ± 0.036	-0.264 ± 0.031	-0.565 ± 0.044	-0.756 ± 0.040	1.043 ± 0.013

نتایج برازش نشان می‌دهد ناهمسانگردی اجزا را حفظ و حلقه‌ها را تخریب می‌کند و حساسیت بتی یک به ناهمسانگردی بیشتر از بتی صفر است. با بررسی کلاس‌های مختلف زبری، اندازه شبکه و مدل‌های رشد در تطابق با نمونه‌های آزمایشگاهی، می‌توان جهان‌شمولی نتایج را نیز ارزیابی کرد. در ادامه، تحلیل سطوح به ازای ۱۰ نسبت ناهمسانگردی و نمای مقیاسی خارج از توسعه مدل، هر یک ۱۰ بار شبیه‌سازی شده و مدل پیش‌بینی برای آنها مورد مقایسه قرار گرفت؛ نتایج بیانگر تطابق مدل است (شکل٦).



شکل٦: نمودار مقایسه نتایج بررسی گروه‌های همسانی و مدل پیش‌بینی برای سطوح شبیه‌سازی شده با نسبت‌های تصادفی خارج از توسعه مدل

نتیجه‌گیری

نتایج نشان می‌دهد این روش محاسباتی با قابلیت توسعه در تئوری رشد و مدل‌سازی، ابزاری کارآمد برای تحلیل و مشخصه‌یابی سطوح تک‌فراکتالی (و با بررسی بیشتر سطوح چند فراکتالی) در فیزیک و مهندسی است. برای تثبیت اعتبار آماری نتایج، لازم است تعداد تحقق‌ها را افزایش داد. همچنین به منظور بررسی استحکام روش نسبت به نوفه و بی‌نظمی، می‌توان به ازای نسبت سیگنال به نوفه‌ها و بی‌نظمی‌های مختلف، محاسبات این مقاله را تکرار کرد.

مراجع

[1] Bhushan,B,(2003). Introduction to tribology. *Appl.Mech. Rev. 56*(1),B6
[2] Kardar, Mehran, Giorgio Parisi, Yi-Cheng Zhang. "Dynamic scaling of growing interfaces." *Physical Review Letters56*, no.9 (1986)
[3] Gong, Yuxuan, et al. Surface roughness: A review of its measurement at micro-nano-scale. *Physical Sciences Reviews*, 3(1): 20170057, (2018)
[4] Ghasemi Nezhadhaghighi, et al. "Characterization of the anisotropy of rough surfaces: Crossing statistics."*Journal of Applied Physics* 122,(2017).
[5] Tierney, J., (2017). Introduction to topological data analysis.
[6] Yamamoto, Ken. "Topological analysis of rough surfaces using persistent homology." *Journal of the Physical* 84.11(2015)
[7] Masoomy, H., et al. "Homology groups of embedded fractional Brownian motion." *Physical Review E* 106.6 (2022)
[8] Wang, An, et al. "Persistent homology for structural characterization in disordered systems." *Physical Review E* 111.4 (2025): 045306.
[9] Abedi, Fatemeh, et al. "Impact of redshift space distortions on persistent homology of cosmic matter density field." *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics* 22.10 (2025)
[10] Jalali Kanafi, et al. "Imprint of massive neutrinos on Persistent Homology of large-scale structure." *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 535.1 (2024)

بررسی تحولات سری زمانی تغییرات قیمت سهام با کمک الگوی بلک–شولز با استفاده از روش عددی اویلر–ماریاما مبتنی برجمع Ito

نجفی ، امین[1] ؛ طراوتی احمد، پریسا[2]

[1] گروه علوم پایه، دانشگاه فنی وحرفه ای تهران، ایران

[2] گروه فیزیک، دانشگاه بوعلی سینا، همدان

چکیده

در این مطالعه رفتارتحولات سری زمانی تغییرات سهام راکه در واقع یک حرکت براونی پیوسته از فرآیندهای تصادفی هستند را بررسی کردیم. این تغییرات رفتاربازار مالی را با حل معادلات دیفرانسیل تصادفی در چارچوب الگوی بلک–شولز و با استفاده از روش عددی اویلر– ماریاما مبتنی برجمع Ito شبیه سازی کرده و با حل دقیق تطبیق دادیم. مقادیر اختلاف حل دقیق و روش عددی را نیز برای هر شبیه سازی پیدا کردیم. شبیه سازی برای مقادیر دیفیوژن مختلف تکرار و نتایج آن را تحلیل کردیم. ورود نوفه خارجی به مؤلفه‌های دریفت باعث غنی‌تر شدن رفتار دینامیکی قیمت دارایی شده و نوسانات کوتاه‌مدت و تغییرات ناگهانی بیشتری نسبت به مدل کلاسیک بلک–شولز ایجاد می‌کند.

واژه های کلیدی: *الگوی بلک–شولز ، معادلات دیفرانسیل تصادفی، حرکت براونی پیوسته، روش اویلر– ماریاما.*

Investigating the evolution of time series of stock price changes using the Black-Scholes model using the Euler-Maruyama numerical method based on Ito sum

Najafi, Amin[1]; Taravati Ahmad, Parisa[2]

[1]*Department of Basic Sciences, Technical and Vocational University (TVU), Tehran, Iran,*
Email: a-najafi@tvu.ac.ir
[2]*Physics Department, Bu-Ali Sina University, 65174-4161 Hamedan, Iran,*

Abstract

In this study, we investigated the behavior of changes in the time series of stock changes, which are actually a continuous Brownian motion of random processes. We simulated these changes in the behavior of the financial market by solving stochastic differential equations in the framework of the Black-Scholes model and using the Euler-Mariama numerical method based on the Ito sum and compared it with the exact solution. We also found the difference values of the exact solution and the numerical method for each simulation. We repeated this simulation for different diffusion values and analyzed its results. The introduction of external noise into the drift component enriches the dynamic behavior of the asset price and leads to greater short-term fluctuations and more abrupt changes compared to the classical model.

***Keywords**: Black-Scholes model, stochastic differential equations, Continuous Brownian motion, Euler-Mariama method.*

PACS No: 05.40.−a,

مقدمه

برای مطالعه رفتار پدیده‌های فیزیکی معمولاً آنها را توسط معادلات دیفرانسیل مدلسازی می‌کنند. در بسیاری از این پدیده‌ها عواملی تصادفی دخالت دارند که باعث می‌شود تا این مدلسازی توسط معادلات دیفرانسیل تصادفی صورت گیرد. این عوامل تصادفی اغلب به شکل نوفهٔ سفید ظاهر می‌گردد. در بازارهای مالی، ابزارهای مشتقه مانند اختیار معامله به دلیل پیچیدگی‌های محاسباتی همواره نیازمند روش‌هایی علمی برای ارزش‌گذاری دقیق هستند. یکی از معروف‌ترین و پرکاربردترین این روش‌ها، مدل بلک شولز است. این مدل نه تنها نحوه قیمت‌گذاری اوراق اختیار معامله به سبک اروپایی را ساده‌تر کرد، بلکه انقلابی در طراحی استراتژی‌های معاملاتی و بازار مشتقات ایجاد کرد[1].

مدل بلک که با نام بلک‌شولز مرتون نیز شناخته می‌شود، مدلی ریاضی برای قیمت‌گذاری قراردادهای اختیار معامله به سبک اروپایی است. این مدل در سال ۱۹۷۳ توسط فیشر بلک و مایرون شولز معرفی شد و بعدها رابرت مرتون نیز توسعه‌هایی بر روی آن انجام داد. هدف این مدل، محاسبه «ارزش منصفانه» یک اختیار معامله در یک نقطه زمانی خاص است[2].

مغادلات دیفرانسیل تصادفی با پارامتر نوفه

اگر تابع قیمت مشخص در زمان t باشد، در حالت قطعی تغییرات نسبی در قیمت می تواند به صورت زیر مدل شود:

$$r \succ 0 \quad \frac{dS(t)}{S(t)} = rdt, \quad (1)$$

اما مدل تصادفی می تواند به صورت زیر مدل شود: (2)

$$\frac{dS(t)}{S(t)} = rdt + \sigma dW(t), \sigma > 0$$

حرکت براونی پیوسته

حرکت براونی یک فرآیند تصادفی پیوسته است که به ما در مدل‌سازی حرکت قیمت سهام کمک می‌کند. این بلوک سازنده ریاضیات مالی است. فرض می‌کند که تغییرات قیمت سهام تصادفی و مستقل هستند و توزیع بازده در طول زمان نرمال است[3].

برای بررسی خواص تصادفی یک فرایند ومدل توصیف کننده آن از حرکت براونی که در واقع یک نوع فرایند تصادفی می باشد استفاده خواهیم کرد.:

یک حرکت براونی در واقع یک فرآیند تصادفی می باشد با شرایط $W(t)_{t>0}$ که دارای خواص زیر را ارضا می کند:

1-توزیع ایستا گاوسین برای هر $0 < s \leq t$ داریم:

$$W(t) - W(s) \sim N(0, \sigma^2(t-s)) \quad (3)$$

یعنی تغییرات $W(t) - W(s)$ دارای یک توزیع نرمال با میانگین $E[W(t) - W(s)] = 0$ می باشد.وانحراف معیار آن

$Var((W(t) - W(s)) = \sigma^2(t-s)$ (4) می باشد.

2- تغییرات افزایشی مستقل:

بطوریکه برای $0 \leq s_1 < t_1 \leq s_2 < t_2$ دوتابع تغییرات $W(t_1) - W(s_1)$ و $W(t_2) - W(s_2)$ ازیکدیگر مستقل هستند.

3-پیوستگی: برای همه $\omega \in \Omega$ تمامی مسیرهای $t \to W(\omega, t)$ پیوسته می باشند.

مدل بلک–شولز

یک مدل توصیفی برای این حالت که بسیار مورد استفاده می شود مدل موسوم به مدل بلک–شولز می باشدکه یک مدل بسیار مشهور در دنیای اقتصاد ومسایل مالی می باشد. مدل بلک شولز یکی از مهم‌ترین ابزارهای مالی برای قیمت‌گذاری اختیار معامله است-4] [5. اختیار معامله، در واقع حق خرید یا فروش یک دارایی (مثل سهام) در آینده با قیمتی مشخص است. این مدل به ما کمک می‌کند تا پیش‌بینی کنیم که در آینده این حق چقدر ارزش خواهد داشت[6-7].

مدل (بلک–شولز)بوسیله معادله تصادفی زیر مشخص می شود:

$$\begin{cases} dX(t) = \mu X(t)dt + \sigma X(t)dW(t), 0 < t \leq T, \\ X(0) = X_0 \end{cases} \quad (5)$$

که $X(t) \in \mathbb{R}, (W(t))_{t\in[0,T]}$ یک حرکت براونی استاندارد می باشد و X_0 یک شرط اولیه داده شده بوده و یکی از مثال ها وکاربردهای مشهور آن پیش بینی بازار سهام می باشد.

مدل بلک–شولز یک حل دقیق ازاین معادله به شکل زیرارائه می دهد:

$$X(t) = X_0 exp\left\{(\mu - \frac{\sigma^2}{2})t + \sigma W(t) \right\} \quad (6)$$

μپارامتر دریفت

σ پاراميتردیفیوژن می باشد.

اثبات:لگاریتم فرآیند را درنظر می گیریم که با استفاده از لم مشهورIto محاسبه شده است: (7)

$$d\ln(X(t)) = \mu X(t)\frac{1}{X(t)}dt + \frac{\sigma^2 X(t)^2}{2}(-\frac{1}{X(t)^2})dt + \sigma X(t)\frac{1}{X(t)}dW(t)$$

با انتگراگیری از طرفین معادله روی بازه [0,t] نتیجه زیر را خواهیم داشت: (8)

$$(ln(X(t)) - ln(X(0)) = (\mu - \frac{\sigma^2}{2})t + \sigma W(t))$$

با گرفتن تابع نمایی از طرفین معادله وکمی مرتب سازی خواهیم داشت: (9)

$$X(t) = X_0 exp\left\{(\mu - \frac{\sigma^2}{2})t + \sigma W(t)\right\}$$

بدین ترتیب حل دقیق مدل بدست می آید.

روش عددی اویلر–ماریاما مبتنی بر روشIto

روش عددی اویلر–ماریاما روشی برای حل معادلات دیفرانسیل تصادفی بوده و برای شبیه سازی مسیر فرآیندهایی که شامل حرکت براونی هستند به کار می رود[8].

با گسسته سازی روی بازه [0,T]با انتخاب $\Delta t := \frac{T}{L}$

بطوریکه $L \in N$ و $\tau_j = j\Delta t$ باشد و $j = 1,...L$

معادله اویلر–ماریاما را می توان به فرم زیر نوشت: (10)

$$X_j := X_{j-1} + f(X_{j-1})\Delta t + g(X_{j-1})(W(\tau_j) - W(\tau_{j-1}))$$

با $j = 1,...L$

همانطور که $\Delta t \to 0$ آنوقت X_j به سمت جواب دقیق همگرا خواهد شد. با حل معادله انتگرالی زیر خواهیم داشت: (11)

$$X(t) = X_0 + f(X(s))ds + \int_0^t g(X(s))dW(s)$$

در $t = \tau_j$ و $t = \tau_{j-1}$ نتیجه زیر را خواهیم داشت: (12)

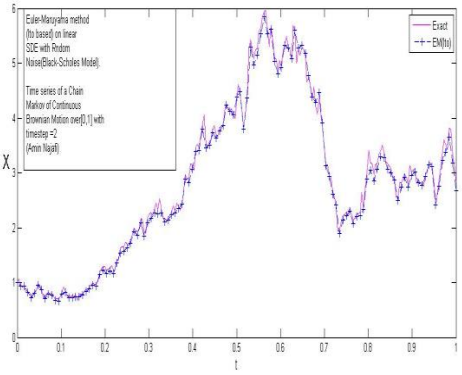
$$X(\tau_j) = X(\tau_{j-1}) + \int_{\tau_{j-1}}^{\tau_j} f(X(s)ds + \int_{\tau_{j-1}}^{\tau_j} g(X(s))dW(s)$$

نتایج شبیه سازی:

شبیه سازی با استفاده از مقادیر و ثابتهای دریفت، دیفیوژن مختلف، مقدار اولیه وبازه های زمانی مختلف که در زیر شکلها مقادیر آنها بیان شده، انجام گرفته است. میزان خطا که در واقع مقدار قدر مطلق عددی اختلاف بین مقدار حل دقیق و حل عددی می باشد در انتهای هر شبیه سازی نیز مشخص شده است. در شکل 1 روش اویلر–مارویاما روی معادله دیفرانسیل تصادفی خطی با نوفه تصادفی، معادله بلک–شولز معادله (5) انجام شده است. سری زمانی یک زنجیره مارکوف از حرکت براونی پیوسته در بازه صفر تا یک نمایش داده شده است. گام زمانی برابر 2 در نظر گرفته شده است. در شکل 2 برای گام زمانی برابر با 4 و با مقدار پارامتر مشابه شبیه سازی تکرار شده است. در شکل های 2و3 مقدار پارامتر دیفیوژن نیز برابر 2 در نظر گرفته شده است. مقدار شرایط اولیه X_0 هم برابر یک در نظر می گیریم.

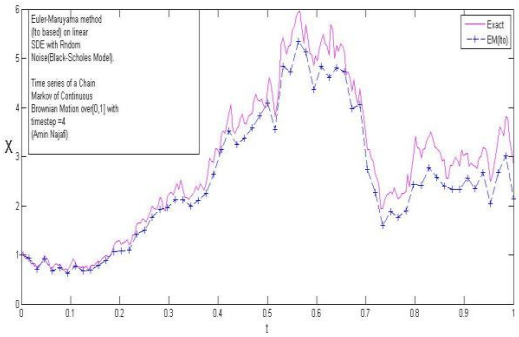
در این شبیه سازی مقدار ثابت پارامتر دریفت μ برابر با 0.05 و مقدار ثابت پارامتر دیفیوژن σ برابر با 0.2 در نظر می گیریم. میزان خطا که در واقع مقدار قدر مطلق عددی اختلاف بین مقدار حل دقیق وعددی هست در انتهای هر شبیه سازی نیز مشخص شده است. مقادیر ثابت اولیه، دریفت و دیفیوژن و تعداد شبیه سازی در شکل 2 و3 نیز مشخص می باشد. در شکل 4 شبیه سازی با ثابت دیفیوژن متفاوت و برابر با 5 تکرار شده که نتیجه قابل مشاهده می باشد. از مقایسه نتایج شکل های 4 با موارد قبلی متوجه خواهیم شد که هر چقدر مقدار ثابت دیفیوژن بیشتر شود اختلاف نتایج محاسبه دقیق ریاضی با روش عددی اویلر–مارویاما بیشتر خواهد شد. روش اویلر–ماریاما توانست تقریب عددی

پایداری از دینامیک مدل ارائه دهد. در مجموع، مدل توسعه‌یافته نسبت به نسخه کلاسیک بلک–شولز توانایی بیشتری در بازنمایی واقعیت‌های آماری بازار دارد و می‌تواند مبنایی مناسب برای تحلیل ریسک و توسعه مدل‌های پیشرفته تر باشد. در شکل 5 نمودار واریانس خطای پیش بینی شده یا همان میانگین مربعات خطا (MSE) برای ۲۰۰ مسیر تصادفی روی ۲۵۰ گام زمانی ترسیم شده است . همانطور که ملاحظه می کنید مقدار MSE از صفر شروع شده و با افزایش تعداد گام‌ها به‌صورت یکنواخت و تقریباً خطی رشد می‌کند. این روند نشان‌دهنده انباشت تدریجی نوسانات در فرآیندهای تصادفی از نوع حرکت براونی است و با رابطه نظری $MSE(t) \propto t$ سازگاری کامل دارد.



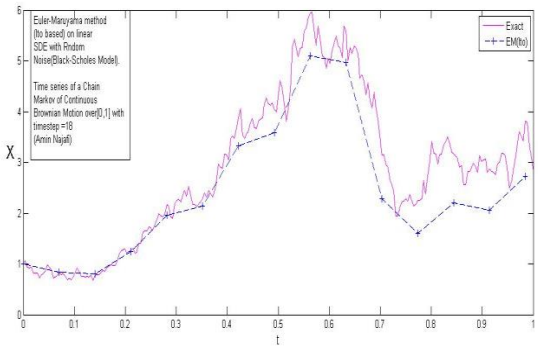
شکل1 : روش اویلر–ماریاما روی معادله دیفرانسیل تصادفی خطی (معادله بلک–شولز). سری زمانی یک زنجیره مارکوف از حرکت براونی پیوسته در بازه صفر تا یک برای گام زمانی برابر دو نمایش داده شده است.

$$EROOR = \left|X_{Exact(end)} - X_{simulate(end)}\right| = 0.1595$$



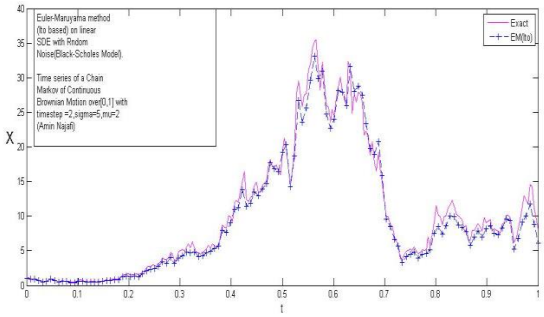
شکل2 : روش اویلر–ماریاما روی معادله دیفرانسیل تصادفی خطی (معادله بلک–شولز). سری زمانی یک زنجیره مارکوف از حرکت براونی پیوسته در بازه صفر تا یک برای گام زمانی برابر چهار نمایش داده شده است.

$$EROOR = \left|X_{Exact(end)} - X_{simulate(end)}\right| = 0.6907$$



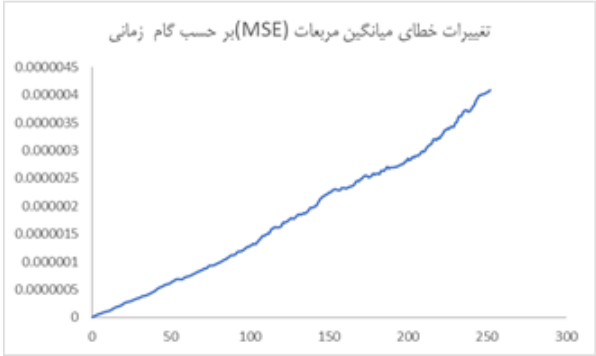
شکل3: روش اویلر–ماریاما روی معادله دیفرانسیل تصادفی خطی (معادله بلک–شولز). سری زمانی یک زنجیره مارکوف از حرکت براونی پیوسته در بازه صفر تا یک برای گام زمانی برابر هجده نمایش داده شده است.

$$EROOR = \left|X_{Exact(end)} - X_{simulate(end)}\right| = 0.7369$$



شکل4–روش اویلر–ماریاما روی معادله دیفرانسیل تصادفی خطی (معادله بلک–شولز). سری زمانی یک زنجیره مارکوف از حرکت براونی پیوسته در بازه صفر تا یک .ثابت دیفیوژن برابر پنج در نظر گرفته شده است. گام زمانی برابر دو می باشد.

$$EROOR = \left|X_{Exact(end)} - X_{simulate(end)}\right| = 1.9314$$



شکل5–نمودار تغییرات خطای میانگین مربعات، (MSE) برای 200 مسیر تصادفی روی 250 گام زمانی. همان‌طور که دیده می‌شود، مقدار خطای میانگین مربعات MSE با افزایش گام زمانی به‌صورت یکنواخت و تقریباً خطی رشد می‌کند که بیانگر ماهیت تجمعی نوسانات در فرآیندهای تصادفی از نوع حرکت براونی است.

نتیجه گیری

در این مطالعه، تحولات سری زمانی فرآیند تصادفی تغییرات سهام در چارچوب مدل بلک–شولز و با استفاده از روش عددی اویلر–ماریاما مبتنی بر جمع ایتو بررسی شد. حرکت براونی یک فرآیند با واریانس خطی در زمان بوده بنابراین باید خطای میانگین مربعات با افزایش گام زمانی، به‌صورت یکنواخت بالا برود. هرچه زمان جلوتر می‌رود، عدم‌قطعیت سیستم بیشتر می‌شود و خطای مدل به‌طور اجتناب‌ناپذیر رشد می‌کند.

در مجموع، می‌توان نتیجه گرفت که مدل بلک–شولز و تحلیل آن با روش عددی اولر–مارویاما، چارچوبی انعطاف‌پذیر برای مطالعه سری زمانی قیمت دارایی‌ها فراهم می‌کند. مدل بلک–شولز توانایی در بازنمایی واقعیت‌های آماری بازار دارد و می‌تواند مبنایی مناسب برای تحلیل ریسک و توسعه مدل‌های پیشرفته‌تر باشد.

مرجع‌ها

[1] Black, Fischer; Scholes, Myron "*The Pricing of Options and Corporate Liabilities*". Journal of Political Economy. **81** (3), (1973). 637–654.

[2] Merton, Robert C.. "*Theory of Rational Option Pricing*". Bell Journal of Economics and Management Science. **4**,(1973). (1).

[3] Tsekov, Roumen "*Brownian Markets*". Chin. Phys. Lett. **30** (8) 088901,(2013).

[4] Houstecky, Petr. *"Black-Scholes Model History and Key Papers*". Macroption. Archived from the original on Jun 14, 2024. Retrieved Oct 3, 2024.

[5] Black, Fischer; Scholes, Myron "*The Pricing of Options and Corporate Liabilities*". Journal of Political Economy. **81** (3), (1973). 637–654.

[6] Szpiro, George G . *Pricing the Future: Finance, Physics, and the 300-Year Journey to the Black–Scholes Equation*. Basic Books, (2011).

[7] Thorp, Ed.. A Man for all Markets. Random House,(2017).

[8] Higham, D.J., *An algorithmic introduction to numerical simulation of stochastic differential equations*. SIAM Review **43**(3), 525–546,2001.

همسانی مداومت شبکه فضای حالت به عنوان نشانگر هشدار زودهنگام گذار بحرانی

ایمان نژاد، نازنین[1]؛ موحد، سیدمحمدصادق[1,2]

[1] دانشکده فیزیک دانشگاه شهید بهشتی، 1983969411، تهران
[2] پژوهشکدهٔ نجوم، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی (IPM)، صندوق پستی 19395-5531، تهران

چکیده

گذارهای بحرانی در سامانه‌های پیچیده می‌توانند منجر به تغییرات ناگهانی و برگشت‌ناپذیر در رفتار دینامیکی سامانه شوند؛ ازاین‌رو، شناسایی زودهنگام آن‌ها اهمیت فراوانی دارد. روش‌های متداول تحلیل دینامیکی مانند نماهای لیاپانوف و سایر تحلیل‌های آماری معمولا با محدودیت‌هایی از قبیل فقدان مقاومت در برابر نوفه، ناتوانی در تعمیم به سامانه‌های با ابعاد بالا، مواجه‌اند. در این پژوهش، برای رفع نواقص ذکر شده، رویکردی مبتنی بر تحلیل توپولوژی داده‌ها و به‌طور خاص شبکه‌ی فضای حالت با دانه‌بندی درشت به‌کار گرفته شده است. سامانه مورد مطالعه ما در این مقاله، مدار جرک مبتنی بر تقویت‌کننده‌ی عملیاتی است. این به‌عنوان یک سامانه‌ی واقعی زمان پیوسته که دنباله‌ای از رفتارهای تناوبی تا آشوبی را نشان می‌دهد. بر روی سری‌های زمانی این مدار؛ شبکه‌های فضای حالت با دانه‌بندی درشت ساخته شده و نمودارهای همسانی مداومت یک‌بُعدی متناظر با آن‌ها استخراج گردید. از تحلیل این نمودارها، سه ویژگی توپولوژی شامل تعداد، میانگین زمان مرگ و بیشترین طول‌عمر حفره‌های یک‌بُعدی به‌عنوان نشانگرهای هشدار زودهنگام گذار بحرانی معرفی شدند. نتایج نشان داد که این شاخص‌ها علاوه بر توانایی تمایز میان فازهای مختلف در مدار جرک، الگوی مشخصی از روند افزایشی یا کاهشی پیش از گذار از حالت تناوبی به آشوبی نشان می‌دهند؛ یافته‌ای که این شاخص‌ها را به نامزدهایی امیدبخش برای شناسایی زودهنگام گذار فاز تبدیل می‌کند.

واژه‌های کلیدی: *گذار بحرانی، همسانی مداومت، شبکه فضای حالت، نشانگر هشدار زودهنگام*

Persistent Homology of State-Space Network as Early Warning Signal of Critical Transitions

Imannezhad, Nazanin[1]; Movahed, Seyed Mohammad Sadegh[1,2]

[1] *Department of Physics, Shahid Beheshti University, 1983969411, Tehran, Iran*
[2] *School of Astronomy, Institute for Research in Fundamental Sciences, P. O. Box 19395-5531, Tehran, Iran*

Abstract

Critical transitions in complex systems can lead to abrupt and irreversible changes in the dynamical behavior of the system; therefore, their early identification is of great importance. Conventional methods of dynamical analysis, such as Lyapunov exponents and other statistical analyses, typically face limitations including lack of robustness against noise and inability to generalize to high-dimensional systems. In this study, to address the aforementioned shortcomings, an approach based on topological data analysis, and specifically coarse-grained state-space networks, has been employed. The system under study in this paper is an operational-amplifier-based jerk circuit, which serves as a real continuous-time system exhibiting a sequence of periodic to chaotic behaviors. On the time series of this circuit, coarse-grained state-space networks were constructed, and the corresponding one-dimensional persistence homology diagrams were extracted. From the analysis of these diagrams, three topological features—namely, the number, the mean death time, and the maximum lifetime of one-dimensional holes—were introduced as early warning indicators of critical transitions. The results showed that, in addition to their ability to distinguish between different phases in the jerk circuit, these indicators exhibit a distinct pattern of increasing or decreasing trends prior to the transition from periodic to chaotic behavior—a finding that makes these indicators promising candidates for early identification of phase transitions.

Keywords: *Critical transition, Persistent Homology, State-Space Network, Early-warning indicator*

مقدمه

در دهه‌های اخیر، درک پویایی سامانه‌های پیچیده، از زیست‌بوم‌ها و اقلیم گرفته تا شبکه‌های فیزیکی و سامانه‌های عصبی، اهمیت فزاینده‌ای یافته‌است. یکی از ویژگی‌های بنیادی چنین سامانه‌هایی، گذارهای بحرانی[1] است؛ تغییرات ناگهانی و غیرخطی که طی آن، سامانه از حالتی پایدار به حالت دیگری منتقل می‌شود. برخلاف تصور کلاسیک که تغییرات تدریجی را نتیجه‌ی علل تدریجی می‌دانست، مطالعات [۱و۲] نشان دادند که سامانه‌های پیچیده ممکن است در اثر تغییرات کوچک در پارامترهای کنترلی، به دلیل کاهش تدریجی تاب‌آوری[2]، دچار تحولات فاجعه‌بار شوند. در نظریه‌ی سامانه‌های دینامیکی، این پدیده معمولاً با مفهوم «چشم‌انداز پایداری» تبیین می‌شود؛ تصویری که در آن پایداری هر حالت سامانه متناظر با یک «دره» در چشم‌انداز انرژی مؤثر سامانه است و کاهش تاب‌آوری به

[1] Critical transitions

[2] Resilience

معنای کم‌عمق‌ترشدن این دره‌هاست. این نوع گذارها اغلب با دو ویژگی مشخص همراه‌اند: پسماند[1]، یعنی وابستگی وضعیت سامانه به مسیر طی‌شده تا آن نقطه، و چندپایداری، یعنی وجود بیش از یک حالت پایدار برای یک دسته از پارامترهای کنترلی. حاصل این دو ویژگی آن است که پس از وقوع گذار، بازگشت سامانه به وضعیت اولیه‌اش دشوار یا حتی غیرممکن می‌شود [۱و۲]. با تغییر تدریجی شرایط محیطی، عمق یا عرض این دره‌ها کاهش یافته و سامانه نسبت به اختلالات کوچک حساس‌تر می‌شود. در این شرایط، حتی نوفه‌های تصادفی یا نوسانات کوچک می‌توانند موجب عبور سامانه از آستانه‌ی بحرانی شوند. از منظر فیزیک، چنین تغییراتی مشابه گذار فاز در مواد هستند، به این معنی که کمیت‌های ماکروسکوپیک مانند پارامتر نظم، رفتار ناپیوسته یا غیرتحلیلی از خود نشان می‌دهند. یکی از این نشانگرها بر اساس پدیده‌ای عمومی به عنوان آهستگی بحرانی[2] استوار است که طبق آن در نزدیکی بسیاری از نقاط بحرانی، نرخ بازیابی یک سامانه از اختلالات کوچک بسیار کند می شود [۱]. شاخص‌هایی چون افزایش خودهمبستگی لگ-۱ و افزایش وردایی، نشانه‌های مستقیمی از این پدیده به شمار می‌روند [۳]. افزون بر این، در سال‌های اخیر، روش‌های متعددی برای تحلیل سامانه‌های دینامیکی پیچیده معرفی شده‌اند که هر یک با محدودیت‌های خاص خود همراه‌اند؛ برخی از این رویکردها در حضور اثرات غیرخطی شدید دقت خود را از دست می‌دهند و برخی دیگر، با وجود کارآمدی در آشکارسازی ناهنجاری‌های دینامیکی، قادر به توصیف تغییرات توپولوژی رفتار سامانه در نزدیکی گذارهای بحرانی نیستند [۴-۱۰]. در این پژوهش، برای رفع این نواقص از چارچوب تحلیل داده مبتنی بر توپولوژی (TDA) به‌ویژه مفهوم همسانی مداومت، به عنوان ابزار قدرتمندی برای ردیابی تغییرات ساختاری در فضای حالت سامانه استفاده می‌کنیم. ما در این مقاله قصد داریم با استفاده از روشی جایگزین برای استخراج ویژگی‌های توپولوژی سامانه، شاخص‌هایی را به عنوان نشانگر هشدار زودهنگام گذار بحرانی در سیستم های دینامیکی آشوبناک معرفی کنیم.

همسانی مداومت شبکه فضای حالت

در تحلیل توپولوژی داده‌ها ابتدا طی فرآیند «فیلتراسیون»، مجموعه‌ای از سادک‌ها مانند ویتوریس—ریپس[3] در مقیاس‌های افزایشی ε بر روی ابرنقاط حاصل از سامانه ساخته می‌شود. همسانی مداومت تغییرات توپولوژی این سادک‌های متوالی را دنبال کرده و لحظه تولد u و مرگ v ویژگی‌های توپولوژیکی در ابعاد مختلف مانند مؤلفه‌های پیوسته (۰-بُعدی)، حفره‌های یک‌بُعدی (حلقه‌ها) و... را به صورت مجموعه زیر برای هر بعد k ثبت می‌کند:

$$\Delta_k = \{(u,v) \in \mathbb{R}^2 : u, v \geq 0, u \leq v\} \quad (۱)$$

به‌بیان شهودی، لحظه‌ی «تولد» زمانی است که یک ویژگی توپولوژیک، مانند یک حلقه، برای نخستین‌بار در مقیاس فیلتراسیون ε ظاهر می‌شود و لحظه‌ی «مرگ» زمانی است که همان ویژگی در مقیاس‌های بزرگ‌تر توسط سادک‌های بزرگ‌تر پر و ناپدید می‌شود؛ فاصله‌ی میان این دو لحظه، که طول‌عمر آن ویژگی نامیده می‌شود، معیاری از پایداری و اهمیت ساختاری آن است. نتیجه‌ی این فرایند به صورت نمودارهای مداومت نمایش داده می‌شود که طول‌عمر ویژگی‌های پایدار سامانه را از نوفه جدا کرده و امکان ردیابی تغییرات ساختاری سامانه را فراهم می‌سازد. به‌منظور غلبه بر سنگینی محاسباتی، در این پژوهش و با الهام از تحقیقات انجام شده در مراجع [۱۱و۱۲]، سری‌های زمانی نه به‌صورت ابرنقطه، بلکه به شکل نوع خاصی از شبکه‌های پیچیده، با عنوان شبکه‌ی فضای حالت با دانه‌بندی درشت[4](CGSS) مدل می‌شوند. در این مسیر، ابتدا فضای بازسازی شده‌ی حالت[5] (SSR) سیگنال ورودی ایجاد می‌شود. فرض کنیم سیگنال نمونه برداری شده $x = [x_1, x_2, \dots, x_L]$ را داریم، آنگاه بازسازی فضای حالت آن شامل بردارهای تأخیری n-بُعدی با فاصله τ بین نمونه‌ها خواهد بود:

$$f_i = [x_i, x_{i+\tau}, \dots, x_{i+(n-1)\tau}] \quad (۲)$$

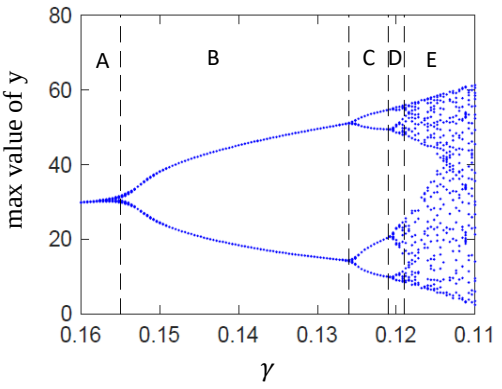
سپس دامنه فضای SSR به نواحی مساوی تقسیم می‌گردد. اگر تعداد تقسیم‌ها در هر بعد برابر b باشد در این صورت کل دامنه به $N = b^n$

[1] Hysteresis
[2] Critical slowing down
[3] Vietoris-Rips (VR)
[4] Coarse-Grained State-Space Network
[5] State-Space Reconstruction

بخش تقسیم می‌شود. سپس بر اساس اینکه نقاط تشکیل دهنده‌ی هر بردار f_i در کدام نواحی قرار گرفته‌اند یک نماد منحصر بفرد بر اساس معادله زیر به آن بردار نسبت داده می‌شود:

$$s_i = 1 + \sum_{j=0}^{n-1} \rho_i(j) b^j \quad (۳)$$

که در آن $\rho_i(j)$ شماره‌ی بخش مربوط به مؤلفه‌ی j ام بردار f_i است. به این ترتیب، هر بردار SSR به یک نماد عددی به عنوان گره‌ای در شبکه‌ی CGSSN نگاشت می‌شود و با یک یال به بردار بعدی متصل می‌شود. این تفاوت در ساختار CGSSN معیاری مؤثر برای تشخیص حالت‌های تناوبی و آشوبی به شمار می‌آید [۴]. وجه نوآورنه پژوهش حاضر نسبت به مراجع [۱۱و۱۲]، این است که ما این روش را برای هدف ساخت نشانگر زودهنگام بکار برده‌ایم.



شکل ۱: نمودار انشعاب سامانه مدار جرک

شبیه‌سازی و تحلیل نتایج

یکی از مدل‌های ریاضیاتی که به صورت جبری توانایی خوبی برای نشان دادن خواص سامانه دینامیکی غیرخطی دارد، مدار جرک[1] است. مداری که از پنج جزء شامل یک تقویت کننده عملیاتی، که به عنوان یک سامانه‌ی واقعی پیوسته‌زمان با تغییر پارامتر کنترل‌کننده γ ، تشکیل می شود و می‌تواند طیفی از رفتارهای دینامیکی از تناوبی تا آشوبی را تجربه می‌کند. این سامانه توسط سه معادله‌ی دیفرانسیل مرتبه‌اول زیر مدل‌سازی می‌شود:

$$\begin{cases} \dot{x} = \varphi(y) \\ \dot{y} = \alpha\,\varphi(y) - \alpha z \\ \dot{z} = -\beta z + \beta y - \beta\gamma z \end{cases} \quad (٤)$$

تابع غیرخطی $\varphi(y) = \begin{cases} -y & if\ y \le 1 \\ -1 & if\ y > 1 \end{cases}$ باعث ایجاد رفتارهای چندگانه در پاسخ دینامیکی این سامانه می‌گردد. سری‌های زمانی مربوط به متغیر y این سامانه به ازای پارامترهای $\alpha = 0.25$ ، $\beta = 0.765$ و γ متغیر، در بازه‌ی $[0.11 - 0.16]$ با گام‌های $\Delta t = 0.001$، به‌طول 500000 ثانیه و با نرخ نمونه‌برداری 40 هرتز شبیه‌سازی شد تا گذار فازهای مختلف سامانه به‌صورت پیوسته مشاهده گردد. شکل ۱ نمودار انشعاب[2] این سامانه را نشان می‌دهد که در آن محور افقی پارامتر کنترلی γ و محور عمودی مقادیر ماکزیمم‌های موضعی متغیر حالت y سامانه است. در این نمودار، گذار سامانه از حالت تناوبی (شکل۱–A) به ۲–حلقه‌ای (شکل۱–B)، ٤–حلقه‌ای (شکل۱–C)، ۸–حلقه‌ای (شکل۱–D) و در نهایت آشوب (شکل۱–E) به‌وضوح قابل مشاهده است. سپس بر اساس مسیر معرفی شده در این پژوهش که از خط مشی الهام گرفته شده از مرجع [11]، ابتدا بازسازی فضای حالت با پارامترهای $n = 4$ و $\tau = 43$ بر روی این سری های زمانی انجام شده و سپس با استفاده از دانه‌بندی $b = 12$ به شبکه‌ی انتقالی وزن‌دار CGSS تبدیل می‌شود. در مرحله‌ی بعد به منظور اعمال ابزار های توپولوژی، ماتریس مجاورت هر یک از این شبکه‌ها به یک ماتریس فاصله، براساس کوتاه‌ترین فاصله‌ی وزن‌دار میان گره‌های آن شبکه، تبدیل می‌شود. درایه‌های این ماتریس برابر با تعداد یال‌های مسیر P حاصل از کمینه‌سازی تابع هزینه $c(P) = \sum_{e\in P} 1/\omega(e)$ است. که $\omega(e)$ در این تابع وزن مربوط به هر یال e در مسیر P است. در گام بعد بر اساس این ماتریس نمودارهای همسانی مداومت برای حفره‌های یک‌بُعدی استخراج می‌شوند. شاخص‌های مورد نظر از تحلیل این نمودارها به‌عنوان نشانگرهای هشدار زودهنگام گذار بحرانی معرفی می‌گردد. ما در این تحقیق سه نشانگر زیر را در نظر می‌گیریم:

۱. تعداد حفره‌های یک بُعدی

$$NH_1 = \|\Delta_1\| \quad (٥)$$

که درآن Δ_1 مجموعه متناظر با گروه همسانی مداومت ۱–بُعدی است.

۲. میانگین مرگ‌های حفره‌های یک‌بُعدی

$$AD_1 = \frac{1}{|\Delta_1|}\sum_{i=1}^{|\Delta_1|} v_i \quad (٦)$$

که در آن $L_i = v_i - u_i$ طول عمره یک حفره یک‌بُعدی با مقیاس تولد $u_i = 1$ و مقیاس مرگ v_i است.

۳. بیشترین طول عمر حفره‌های یک‌بُعدی

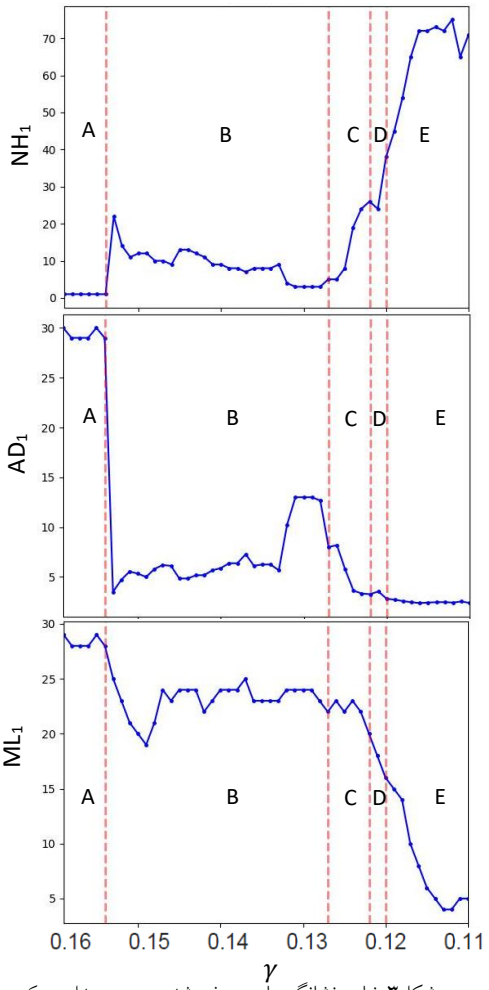
$$ML_1 = \max_{1\le i\le|\Delta_1|} L_i \quad (٧)$$

این سه شاخص، پیچیدگی توپولوژیک فضای حالت را از سه زاویه‌ی مکمل اندازه‌گیری می‌کنند: تعداد حفره‌ها که پیچیدگی ساختاری کلی را

[1] Jerk circuit

[2] Bifurcation diagram

نشان می‌دهد، میانگین طول‌عمر مرگ‌ها که پایداری میانگین ساختارهای توپولوژیک را بیان می‌کند، و بیشترین طول‌عمر که برجسته‌ترین ساختار پایدار را مشخص می‌سازد. با نزدیک‌شدن سامانه به گذار بحرانی، انتظار می‌رود مسیر آن در فضای حالت پیچیده‌تر شود و همین امر بر رفتار هر سه شاخص اثر بگذارد؛ ازاین‌رو می‌توانند نقش مؤثری به‌عنوان نشانگرهای هشدار زودهنگام ایفا کنند.



شکل۳: نتایج نشانگر های معرفی شده بر روی مدار جرک.

در شکل ۳، محور افقی هر سه نمودار پارامتر کنترلی γ و محور عمودی مقدار شاخص متناظر است. این شکل رفتار سه نشانگر معرفی‌شده را بر روی سامانه‌ی مدار جرک برحسب تغییر پارامتر γ نمایش می‌دهد؛ به ترتیب، نمودار بالا مربوط به تعداد حفره‌های یک‌بعدی(NH1) ، نمودار وسط مربوط به میانگین مرگ‌ها (AD1) و نمودار پایین مربوط به بیشترین طول‌عمر حفره‌های یک‌بعدی (ML1) است. همچنین خطوط خط چین قرمز در این نمودارها نشان‌دهنده‌ی نقاطی هستند که سامانه از یک رفتار تناوبی به رفتار پیچیده‌تر متناظر با نمودار انشعاب آن از حالت A به E (شکل ۱) وارد می‌شود. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، هر سه ویژگی نه تنها توانایی تمییز دادن بین فازهای دینامیکی مختلف (A-E) را دارند، بلکه پیش از رسیدن به آستانه‌ی آشوب، روند مشخصی (افزایشی یا کاهشی) را نشان می‌دهند که به‌عنوان هشدار زودهنگام وقوع گذار فاز قابل تفسیر است. این نتایج نشان می‌دهد که، برای سامانه‌ی مطالعه‌شده در این پژوهش، تحلیل توپولوژی داده‌ها می‌تواند بدون نیاز به مدل‌سازی دقیق سامانه، فازهای دینامیکی مختلف را تشخیص داده و برای آشکارسازی تدریجی نزدیک‌شدن به آشوب عملکرد مناسبی ارائه دهد. محدودیت‌های این دستاورد نخست آن است که ارزیابی خطا و حساسیت نتایج نسبت به پارامترهای بازسازی و دانه‌بندی هنوز به‌صورت نظام‌مند مشخص نیست. علاوه بر این، اگرچه شاخص‌های توپولوژی رفتار مناسبی نشان می‌دهند، مقایسه‌ی جامع آن‌ها با معیارهای رایج تشخیص فاز مانند نماهای لیاپانوف و شاخص‌های آماری انجام نشده است. از سوی دیگر، ترکیب این ویژگی‌ها با روش‌های یادگیری ماشین می‌تواند کارایی بیشتری فراهم کند، اما طراحی چارچوب‌های پایدار و جلوگیری از بیش‌برازش همچنان چالش‌برانگیز است. سرانجام، کاربرد این روش در سامانه‌های واقعی با نوفه زیاد یا داده‌های محدود نیازمند بررسی‌های بیشتری است تا قابلیت تعمیم آن به شرایط عملی روشن‌تر شود.

مراجع

[۱] Marten. Scheffer, *Critical Transitions in Nature and Society* (Princeton University Press, 2009).
[۲] V. Dakos, E. H. Van Nes, P. D'Odorico, and M. Scheffer, Ecology 93, 264 (2012).
[۳] E. H. van Nes and M. Scheffer, Am Nat 169, 738 (2007).
[۴] H. K. Khalil, Nonlinear Systems Third Edition,
[۵] A. N. Michel, A. I. Mees, Wiley, New York, 1981, No. of pages: 214. Price: £12.95., Optim Control Appl Methods 3, 207 (1982).
[۶] N. MARWAN, M. CARMENROMANO, M. THIEL, and J. KURTHS, Phys Rep 438, 237 (2007).
[۷] P. Grassberger and I. Procaccia, (Springer New York, New York, NY, 2004), pp. 170–189.
[۸] T. D. Sauer, (Birkhäuser Boston, Boston, MA, 2001), pp. 323–336.
[۹] C. Bandt and B. Pompe, Permutation Entropy, Phys Rev Lett 88, 174102 (2002).
[۱۰] S. Gupta and A. Ray, Appl Phys Lett 91, (2007).
[۱۱] A. D. Myers, M. M. Chumley, F. A. Khasawneh, and E. Munch, Phys Rev E 107, 034303 (2023).
[۱۲] A. D. Myers, E. Munch and F. A. Khasawneh, Phys Rev E 100, 022314 (2019).

بررسی آلودگی هوا بر اساس توزیع تسالیس

کل‌العماد، اطهره السادات[۱]؛ علی‌محمدی، مسعود[۱]

[۱] دانشکده فیزیک، گروه آموزش فیزیک، دانشگاه فرهنگیان تهران، صندوق پستی ۸۸۹-۱۴۶۶ تهران

چکیده

آلودگی هوا ناشی از اکسیدهای نیتروژن (NO_x) یکی از چالش‌های مهم زیست‌محیطی در شهرهای بزرگ است که اثرات زیان‌باری بر سلامت انسان و کیفیت زندگی شهری دارد. در سال‌های اخیر، روش‌های متنوعی برای مدل‌سازی آماری داده‌های آلودگی هوا توسعه یافته‌اند، با این حال، ویژگی‌های آماری آلاینده‌ها هنوز به‌طور کامل درک نشده‌اند. به‌ویژه، توابع چگالی احتمال (PDFs) مربوط به غلظت آلاینده‌های هوا نشان می‌دهند که این کمیت‌ها اغلب از توزیع‌های نمایی ساده تبعیت نمی‌کنند و دارای توزیع دم-سنگین(heavy tails distributions) هستند. در چارچوب مکانیک آماری نافزون‌ور تسالیس، توزیع‌های احتمال سیستم‌های پیچیده اغلب با توزیع تسالیس توصیف می‌شوند. در این مقاله، ابتدا داده‌های آلودگی هوای شهر لندن شامل غلظت‌های نیتروژن مونوکسید (NO) و نیتروژن دی‌اکسید (NO_2) مورد تحلیل قرار می‌گیرند و نشان داده می‌شود که توابع چگالی احتمال این آلاینده‌ها توزیع دم-سنگین دارند و به‌خوبی توسط توزیع تسالیس توصیف می‌شوند. سپس، به‌منظور بررسی قابلیت تعمیم این چارچوب آماری، تحلیل مشابهی بر روی داده‌های مستقل NO_2 شهر تهران انجام شده است. نتایج نشان می‌دهد که علی‌رغم تفاوت‌های جغرافیایی و محیطی، رفتار آماری غلظت NO_2 در تهران با استفاده از توزیع تسالیس قابل توصیف است. این مطالعه نشان می‌دهد که رفتار آماری آلودگی هوا در کلان‌شهرهای مختلف می‌تواند با روش‌های مبتنی بر مفاهیم مکانیک آماری غیر تعادلی تفسیر شود و دیدگاه مناسبی برای تحلیل رویدادهای شدید آلودگی فراهم آورد.

واژه های کلیدی: آلودگی هوا، توزیع تسالیس، مکانیک آماری نافزون‌ور تسالیس، اکسیدهای نیتروژن.

Analysis of Air Pollution Based on the Tsallis Distribution

Kollolemad, Athareh Sadat[۱]; Alimohamadi, Masoud[۱]

[۱] *Department of Physics Education, Farhangian University, P.O. Box ۱۴۶۶۵-۸۸۹ Tehran*

Abstract

Air pollution caused by nitrogen oxides (NO_x) is one of the major environmental challenges in large cities, with adverse effects on human health and urban quality of life. In recent years, various statistical methods have been developed to model air-pollution data; nevertheless, the statistical properties of these pollutants are not yet fully understood. In particular, the probability density functions (PDFs) of pollutant concentrations often deviate from simple exponential laws and follow a heavy-tailed distribution. Within the framework of Tsallis nonextensive statistical mechanics, the probability distributions of complex systems are frequently described by the Tsallis distribution. In this paper, we first analyze air-pollution data from London, specifically the concentrations of nitric oxide (NO) and nitrogen dioxide (NO_2), and show that the probability density functions of these pollutants follow heavy-tailed distributions and are well described by the Tsallis distribution. To examine the generalizability of this statistical framework, we perform a similar analysis on an independent dataset of NO_2 concentrations from Tehran. Our results indicate that, despite geographical and environmental differences, the statistical behavior of NO_2 concentrations in Tehran can be described using the Tsallis distribution. This study demonstrates that the statistical properties of urban air pollution across different metropolitan areas can be interpreted in terms of non-equilibrium statistical mechanics, providing a useful perspective for the analysis of extreme pollution events.

***Keywords**: Air pollution, Tsallis distribution, Tsallis nonextensive statistical mechanics, Nitrogen oxides.*

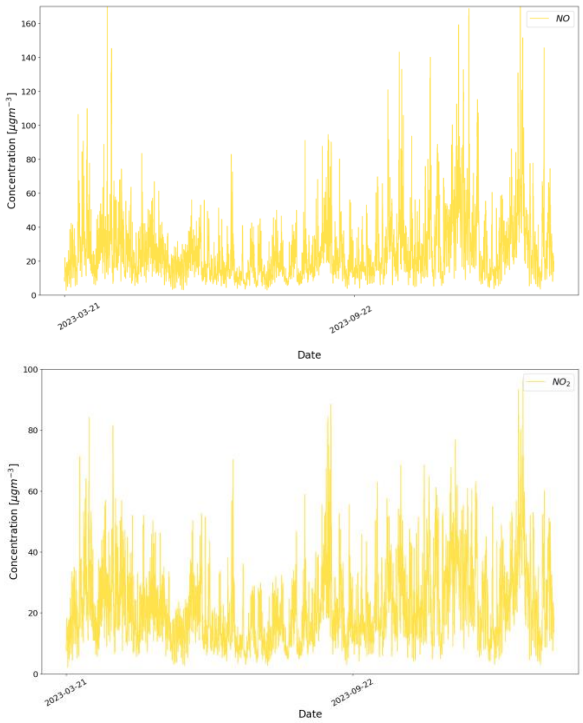
PACS No.: 05.20.-y

مقدمه

از دیدگاه فیزیک آماری، داده‌های آلودگی هوا اغلب به‌دلیل ماهیت پیچیده‌ی سامانه‌های جوی، از توزیع‌های کلاسیک پیروی نمی‌کنند [۱]، به همین منظور استفاده از چارچوب‌های تعمیم‌یافته، از جمله مکانیک آماری نافزون‌ور تسالیس، برای توصیف رفتار آماری این داده‌ها مطرح می‌شود. با توجه به ماهیت پیچیده‌ی پدیده‌ی آلودگی هوا در محیط‌های شهری و وجود نوسانات شدید در غلظت آلاینده‌ها، انتظار می‌رود که چارچوب مکانیک آماری نافزون‌ور بتواند توصیف دقیق‌تری از رفتار آماری داده‌های آلودگی هوا ارائه دهد. نیتروژن مونوکسید (NO) و نیتروژن دی‌اکسید (NO_2) نمونه‌هایی از اکسیدهای نیتروژن (NO_x) هستند که به‌عنوان آلاینده‌های گازی هوا شناخته می‌شوند و عمدتاً از طریق فرایند احتراق وارد جو می‌گردند [۲]. در مناطق شهری، منبع اصلی این آلاینده‌ها، انتشار گازهای خروجی از وسایل نقلیه موتوری است [۳]. مطالعات نشان داده‌اند که این ترکیبات می‌توانند موجب تشدید آسم، بروز علائم تنفسی دیگر و افزایش نرخ مرگ‌ومیر شوند. همچنین، قرار گرفتن کوتاه‌مدت در معرض NO_2 با بروز سکته‌های مغزی ایسکمیک و خون‌ریزی‌دهنده ارتباط دارد [۵,۴,۲]. اگرچه ترکیبات NO_x به‌طور مستقیم سرطان‌زا تلقی نمی‌شوند، اما حضور آن‌ها نشانگر وجود سایر آلاینده‌های خطرناک در هوا است [۳]. با توجه به اهمیت بررسی رفتار آماری این آلاینده‌ها، در این مطالعه ابتدا داده‌های آلودگی هوای شهر لندن تحلیل می‌شوند و به‌منظور ارزیابی تعمیم‌پذیری چارچوب آماری، همان روش تحلیلی بر روی داده‌های مستقل غلظت نیتروژن دی‌اکسید در شهر تهران نیز اعمال می‌گردد.

داده‌ها و روش تحلیل

داده‌های مورد استفاده در این مطالعه از یکی از ایستگاه‌های پایش کیفیت هوای شهر لندن گردآوری شده و بازه زمانی یک‌ساله را در بر می‌گیرد [۶]. این داده‌ها با تفکیک زمانی ۱۵ دقیقه‌ای ثبت شده‌اند و شامل اندازه‌گیری‌های پیوسته از غلظت آلاینده‌های NO و NO_2 هستند. در گام نخست، سری‌های زمانی مربوط به غلظت این دو آلاینده مورد تحلیل قرار گرفته‌اند. نتایج این تحلیل نشان می‌دهد که غلظت NO و NO_2 در مقیاس‌های زمانی مختلف دچار نوسانات قابل توجهی می‌شود. (شکل ۱)



شکل ۱: تغییرات NO و NO_2 در شهر لندن طی سال ۲۰۲۳ بر حسب زمان. سطوح غلظت در چندین مقیاس زمانی متمایز تغییر می‌کنند.

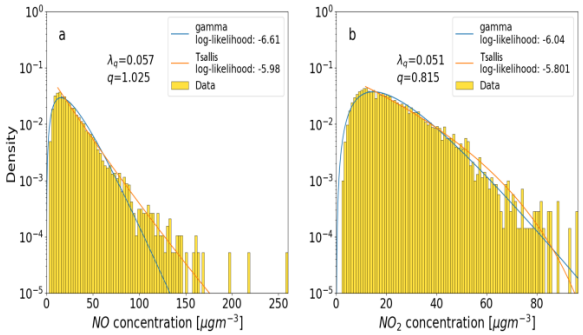
سپس رابطه بین میانگین و انحراف معیار توابع چگالی احتمال (PDFs) متناظر برای داده‌های ثبت‌شده در لندن را بررسی کرده و مشخص شد که این توابع چگالی احتمال غلظت آلاینده‌ها را نمی‌توان با توزیع‌های نمایی ساده با دقت کافی برازش داد و به توزیع‌های تعمیم‌یافته‌تری مانند توزیع تسالیس نیاز است. برازش آماری داده‌ها با استفاده از تابع چگالی احتمال نرمال‌شده انجام می‌شود و به‌صورت زیر تعریف می‌شود [۷]:

$$f_\lambda(x) = (2-q)\lambda\left[1-\lambda(1-q)x\right]^{\frac{1}{1-q}}, \qquad (۱)$$

$$\text{for } 1-\lambda(1-q)x \geq 0,\ x > 0$$

به‌طور خاص، دنباله‌های تابع چگالی احتمال غلظت آلاینده‌ها در این داده‌ها به بهترین شکل توسط توزیع تسالیس توصیف می‌شوند و دارای توزیع دم–سنگین اند. برای مقایسه و اعتبارسنجی مدل‌ها، علاوه بر برازش با توزیع تسالیس ، داده‌های غلظت آلاینده‌ها با توزیع گاما نیز برازش داده شدند.

برای هر تابع برازش، پارامترهای بهینه با روش MLE تعیین می‌شوند و سپس log-likelihood هر توزیع محاسبه شده تا کیفیت برازش مقایسه شود. در این راستا، توابع چگالی احتمال مربوط به غلظت‌های NO و NO_2 اندازه‌گیری‌شده در لندن در شکل‌های ۲(a) و ۲(b) ارائه شده‌اند.

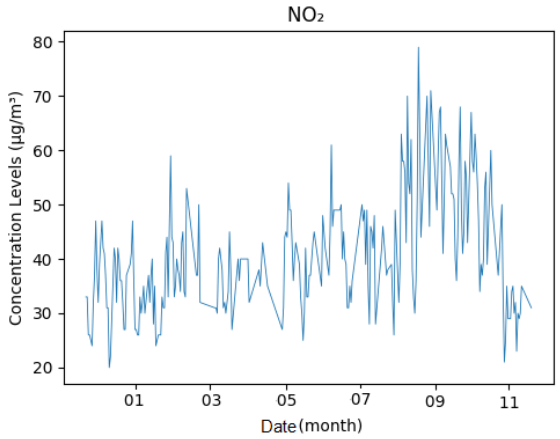


شکل ۲: چگالی احتمال برای غلظت آلاینده‌های NO و NO_2 در شهر لندن را نشان می‌دهد. شکل‌ها برازش داده‌ها با توزیع‌های تسالیس و گاما را نمایش می‌دهند. برازش تسالیس بهترین تطبیق را با دنباله تابع چگالی احتمال دارد. چرا که بالاترین مقدار درست نمایی لگاریتمی را ارائه می دهد.

پس، شواهد روشنی داریم که به‌طور کلی توزیع‌های احتمال غلظت آلاینده‌ها به‌صورت نمایی کاهش نمی‌یابند و برازش بسیار بهتری با توزیع‌های تسالیس حاصل می‌شود.

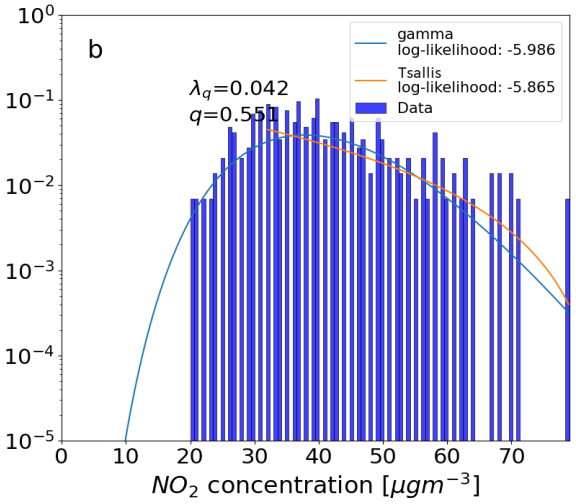
در گام بعد، به‌منظور بررسی قابلیت تعمیم این چارچوب آماری، همان روش تحلیل بر روی داده‌های مستقل NO_2 اندازه‌گیری‌شده در شهر تهران اعمال می‌شود. هدف از این بخش، مقایسه رفتار آماری آلودگی هوا در دو کلان‌شهر با شرایط جغرافیایی و محیطی متفاوت است.

داده‌های مربوط به شهر تهران به‌صورت روزانه اندازه‌گیری شده‌اند و در این مطالعه تنها داده‌های در دسترس مربوط به غلظت NO_2 مورد استفاده قرار گرفته‌اند [۸]. ابتدا تغییرات زمانی غلظت NO_2 در طول یک سال بررسی و نمودار تغییرات آن بر حسب زمان رسم شده است. شکل۳ نشان می‌دهد که غلظت NO_2 در تهران نیز دارای نوسانات قابل توجه در مقیاس‌های زمانی مختلف است.



شکل ۳: تغییرات غلظت NO_2 در تهران طی سال ۱۴۰۳ برحسب زمان.

سپس، توابع چگالی احتمال متناظر با داده‌های NO_2 در تهران محاسبه و مورد تحلیل قرار گرفتند. نتایج نشان می‌دهند که این توزیع‌ها را نمی‌توان به‌طور مناسب با توزیع‌های نمایی ساده برازش کرد و توزیع نمایی کلاسیک قادر به توصیف آن‌ها نیست. در ادامه، براساس شکل ٤ برازش آماری داده‌ها انجام شد.



شکل ٤: چگالی احتمال برای غلظت آلاینده‌ی NO_2 در شهر تهران را نشان می-دهد.

نتایج نشان می‌دهد که توزیع احتمال غلظت NO_2 در تهران با استفاده از توزیع تسالیس توصیف بهتری از داده‌ها به دست می‌آید. مقدار به‌دست‌آمده برای پارامتر q کمتر از یک است که نشان‌دهنده‌ی وجود یک برش مؤثر در دم توزیع و تفاوت در رفتار آماری این آلاینده نسبت به داده‌های لندن است.

نتیجه

در این مطالعه نشان دادیم روش‌های مبتنی بر مکانیک آماری نافزون‌ور تسالیس می‌توانند ابزار مناسبی برای مدل‌سازی کمی آمار آلودگی هوا فراهم آورند. با محاسبه‌ی توابع چگالی احتمال غلظت آلاینده‌ها و برازش آن‌ها با توزیع‌های تسالیس و گاما، نشان دادیم که داده‌های آلودگی هوای لندن به‌طور مشخص دارای توزیع دم-سنگین هستند و به‌خوبی در چارچوب توزیع‌های غیرنمایی توصیف می‌شوند. همین رویکرد آماری برای داده‌های مستقل آلودگی هوای شهر تهران، که با تفکیک زمانی روزانه اندازه‌گیری شده‌اند، به‌کار گرفته شد. نتایج نشان می‌دهد که اگرچه توزیع احتمال غلظت NO_2 در تهران از توزیع نمایی ساده پیروی نمی‌کند و با توزیع تسالیس توصیف بهتری می‌یابد، مقدار پارامتر q کمتر از یک است که بیانگر وجود یک برش مؤثر در دم توزیع می‌باشد. این تفاوت می‌تواند ناشی از محدودیت تفکیک زمانی داده‌ها و تفاوت شرایط محیطی و دینامیکی بین دو شهر باشد. به‌طور کلی، این نتایج نشان می‌دهد که چارچوب‌های مبتنی بر مکانیک آماری غیرتعادلی قابلیت تعمیم به محیط‌های شهری مختلف را دارند و می‌توانند برای ارائه برآوردهای دقیق از ریسک شرایط آلودگی شدید به‌کار گرفته شوند و مسیر را برای تدوین راهبردهای کاهش آلودگی هموار سازند.

مرجع ها

[۱] H. He, B. Schäfer, and C. Beck; *"Spatial analysis of tails of air pollution PDFs in Europe"*; Environmental Data Science, vol. ۳, p. e۳۰, (۲۰۲٤).

[۲] E. D. Amster, M. Haim, J. Dubnov, and D. M. Broday; *"Contribution of nitrogen oxide and sulfur dioxide exposure from power plant emissions on respiratory symptom and disease prevalence"*; Environ. Pollut. ۱۸٦, ۲۰ (۲۰۱٤).

[۳] G. B. Hamra, F. Laden, A. J. Cohen, O. Raaschou-Nielsen, M. Brauer, and D. Loomis; *"Lung Cancer and Exposure to Nitrogen Dioxide and Traffic: A Systematic Review and Meta-Analysis"*; Environ. Health Perspect. ۱۲۳, ۱۱۰۷ (۲۰۱٥).

[٤] A. S. Shah, K. K. Lee, D. A. McAllister, A. Hunter, H. Nair, W. Whiteley, J. P. Langrish, D. E. Newby, and N. L. Mills; *"Short term exposure to air pollution and stroke: systematic review and meta-analysis"*; BMJ ۳٥۰, h۱۲۹٥ (۲۰۱٥).

[٥] United States Environmental Protection Agency, Nitrogen Dioxide (NO۲) Pollution, https://www.epa.gov/no۲-pollution/ basic-information-about-no۲#What%۲۰is%۲۰NO۲ (۲۰۱٦).

[٦] Environmental Research Group (ERG) at King's College London, London Air, https://www.londonair.org.uk.

[۷] C. Tsallis; *"Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics: Approaching a Complex World"*; Springer, Berlin, (۲۰۰۹).

[۸] World Air Quality Index Project (WAQI), https://aqicn.org/

کنفرانس فیزیک ایران

دانشگاه قم – ۲ الی ۵ شهریور ۱۴۰۵

مجموعه مقالات شاخه

نجوم، گرانش و کیهان‌شناسی

www.psi.ir/f/physics1405

تصحیحات تک حلقه در مدل دو فازی غلتش فوق آرام

نصیری‌راد، امین [۱] ؛ شیخ‌احمدی، حیدر [۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیر الدین طوسی،تهران،ایران

[۲] پژوهشکده نجوم، پژوهشگاه دانشهای بنیادی(IPM)، تهران، ایران

چکیده

هدف این مطالعه، تحلیل تأثیرات منظم سازی بی نهایت‌های کوانتومی بر تحول کیهان آغازین و نقش آن در اختلالات مرتبه‌بالاتر است. مدلی که در اینجا بررسی می‌شود، شامل یک مدل دو فازی است که فاز اول شامل یک پتانسیل ثابت و فاز دوم به صورت غلتش آرام تحول می یابد. در فاز اول اختلالات انحنا دچار رشد می‌شوند که به‌دلیل توانایی‌اش در ایجاد سیاهچاله‌های اولیه، از جایگاه ویژه‌ای برخوردار است. ما در این مقاله به کمک روش منظم سازی نشان می دهیم که رشد اختلالات در مقیاس‌های کوچک، می‌تواند روی مقیاس های بزرگ‌تر از افق تأثیر بگذارد. در انتها نتایج را با روش کلاسیک که قبلاً محاسبه شده است مقایسه می کنیم.

واژه های کلیدی: مدل دو فازی -تورم غلتش فوق آرام– تصحیحات تک حلقه

One-Loop corrections in ultra-slow roll inflation with two phases

Nassiri-Rad, Amin [۱], Sheikhahmadi, Haidar [۲]

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

[۲] *School of Astronomy, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), Tehran, Iran*

Abstract

The aim of this study is to analyze the effects of regularizing quantum infinities on the early universe's evolution and its role in higher-order perturbations. The model examined here consists of a two-phase model, where the first phase includes a constant potential and the second phase evolves as a slow roll. In the first phase, curvature perturbations experience growth, which holds a special place due to its ability to generate primordial black holes. In this paper, using the regularization method, we show that the growth of perturbations on small scales can affect super-horizon scales. Finally, we compare the results with the classical method that has been previously calculated.

***Keywords: Two**-phase model -Ultra Slow roll inflation-One loop corrections*

مقدمه

تورم غلتش فوق آرام از جمله مدل‌های ساده و مورد توجه در کیهان‌شناسی تورمی است. از ویژگی‌های این مدل آن است که در آن پتانسیل کاملا تخت در نظر گرفته می‌شود. می‌توان نشان داد که اختلال انحنا در این مدل علی رغم مدل‌های غلتش آرام معمول در فرافق رشد می‌کند. همچنین این مدل می‌تواند به نقض قضیه مالداسنا منجر شود[۱]. مطابق این قضیه تابع سه نقطه ای را می توان بر حسب پارامترهای غلتش آرام و تابع دو نقطه‌ای نوشت[۲]. در حالی که چنین امکانی در تورم غلتش فوق آرام وجود ندارد. از دیگر ویژگی‌های این مدل آن است که رشد اختلال انحنا در فرا افق می تواند منجر به تشکیل سیاهچاله اولیه شود[۳]. همچنین در این مدل، تورم برای اتمام نیاز به یک فاز غلتش آرام دارد و بنابراین به طور

طبیعی لازم است تا تورم غلتش فوق آرام به یک دوره غلتش آرام متصل شود.

یکی از موارد مورد توجه در مطالعه هر مدل تورمی محاسبه اثرات کوانتومی در مراتب بالاتر (حلقه های کوانتومی) است. تا کنون مراجع زیادی به مطالعه این اثرات در یک مدل سه فازی تورمی پرداخته اند [۴،۵].

با وجود مطالعات زیاد اثرات تک حلقه در مدل های سه فازی تاکنون این اثرات در مدل دو فازی مطالعه نشده اند. علت انتخاب این مدل و مطالعه تصحیحات حلقه در آن مقایسه آن با تصحیحات کاتوره ای است که در کارهای قبل انجام شده است. اهمیت دیگر این مطالعه آن است که می توان اثر تصحیحات حلقه را در طول موج هایی غیر از طول موج هایی که در ابتدای تورم از افق خارج می شوند در مقیاس فراافق مطالعه کرد.

در این مقاله به مطالعه این اثرات در یک مدل دو فازی غلتش فوق آرام که با یک دوره *پتانسل تخت آغاز می شود و با یک دوره غلتش آرام خاتمه می یابد می پردازیم. به این منظور در قسمت اول مقاله به معرفی توابع مد در مدل تورمی دو فازی می پردازیم . در قسمت دوم به مرور مختصری بر نظریه میدان موثر در تورم می پردازیم که می تواند ابزار مهمی برای محاسبه تصحیحات کوانتومی در مراتب بالاتر در اختیار ما قرار دهد. در بخش سوم به معرفی نتایج می پردازیم و در نهایت به نتیجه گیری می پردازیم.*

مدل

با توجه به بخش‌های قبل، مدل مدنظر برای تورم، مدلی دومرحله‌ای است که در آن، پتانسیل فاز اول را ثابت گرفته، و پتانسیل فاز دوم را به صورت بسطی بر حسب جرم پلانک و حول نقطه پایانی غلتش فوق‌آرام مطابق رابطه زیر تعریف می‌کنیم:

$$V(\phi)=V(\phi_e)+\frac{\sqrt{2\varepsilon_V}}{M_P}V(\phi_e)(\phi-\phi_e)+\frac{\eta_V}{2M_P^2}V(\phi_e)(\phi-\phi_e)^2 \quad (1)$$

که در رابطه بالا پارامترهای غلتش اول و دوم آهسته به صورت زیر تعریف شده اند:

$$\varepsilon_V\equiv\frac{M_P^2}{2}\frac{V_{,\phi}^2}{V^2},\qquad \eta_V\equiv M_P^2\frac{V_{,\phi\phi}}{V}, \quad (2)$$

در ادامه از جمله سوم در مقابل جمله دوم در معادله (۱) چشم پوشی می کنیم که به مفهوم گذار تند است[۶] و نحوه گذار بر حسب پارامتر اول غلتش آرام در انتهای فاز اول (ϵ_e) با پارامتر زیر بر حسب پارامتر هابل (H) توصیف می شود [۶]:

$$h\equiv\frac{6\sqrt{2\varepsilon_V}}{\dot\phi(t_e)}M_PH=-6\sqrt{\frac{\varepsilon_V}{\varepsilon_e}} \quad (3)$$

از طرفی پارامترهای غلتش آرام در فاز اول بر حسب زمان پایان آن(τ_e) و زمان همدیس[۱] (τ) به صورت زیر داده می شوند[۲]

$$\varepsilon(\tau)=\varepsilon_e\left(\frac{\tau}{\tau_e}\right)^6,\ \eta=-6 \quad (4)$$

چنانچه تقاضا کنیم که میدان و سرعت آن در لحظه گذار پیوسته باشند آنگاه می توان دید که پارامتر غلتش آهسته اول و دوم نیز در فاز دوم بر حسب زمان پایان فاز اول(τ_e) به صورت زیر است [۴]:

$$\varepsilon(\tau)=\varepsilon_e\left(\frac{h}{6}-(1+\frac{h}{6})\left(\frac{\tau}{\tau_e}\right)^3\right)^2 \quad (5)$$

$$\eta(\tau)=-\frac{6(6+h)}{(6+h)-h\left(\frac{\tau_e}{\tau}\right)^3} \quad (6)$$

از طرفی با استفاده از روابط فوق، پارامترهای غلتش اول و دوم آرام در لحظه گذار به صورت زیر داده می شود:

$$\eta=-6-h\theta(\tau-\tau_e)\qquad \tau_e^-<\tau<\tau_e^+ \quad (7)$$

در ادامه برای راحتی محاسبات قرار می دهیم h=-۶.

اختلالات کوانتومی

در این بخش به محاسبه اختلال انحنا در دوره تورم می پردازیم.

مقدار انتظاری یک عملگر کوانتومی را با استفاده از نظریه میدان های کوانتومی بر حسب هامیلتونی برهمکنشی (H_{in}) و خلا غیر برهمکنشی ($|0\rangle$)می توان به صورت زیر نوشت:

---

[۱] $\varepsilon=-\frac{\dot H}{H^2}$ $\eta=\frac{\dot\varepsilon}{H\varepsilon}$

$$\langle \hat{O}(\tau_0)\rangle = \langle 0 \left| \left[\bar{T}\exp\left(i\int_{-\infty}^{\tau_0} d\tau H_{in}(\tau)\right)\right] \hat{O}[\tau_0] \left[T\exp\left(-i\int_{-\infty}^{\tau_0} d\tau H_{in}(\tau)\right)\right] \right| 0\rangle \quad (11)$$

و همان طور که از رابطه بالا دیده می شود محاسبه مقدار چشم داشتی هر عملگر نیاز به هامیلتونی برهمکنشی تا مراتب مختلف اختلال دارد. به دلیل پیچیدگی و در دسترس نبودن هامیلتونی اختلال انحنا تا مراتب مورد نیاز راحت تر است تا این کمیت را بر حسب مد گلدستون[۳] (π) و پارامتر هابل (H) به صورت زیر بیان کنیم

$$R = -H\pi \quad (12)$$

در رابطه بالا از اثرات غیر خطی مد گلدستون به دلیل صفر بودن آن ها در پایان دوره غلتش آرام چشم پوشی کرده ایم.

برای محاسبه اثرات کوانتومی در مرتبه تک حلقه[۴] نیاز به هامیلتونی مرتبه سوم و چهارم داریم. آن طور که در [۴] نشان داده شده است هامیلتونی مرتبه سوم و چهارم گلدستون مد به صورت زیر داده می شود:

$$H_3 = -H^3\varepsilon\eta a^2 \int d^3x\left(\pi\pi'^2 - \pi(\partial\pi)^2\right) \quad (13)$$

$$\mathbf{H}_4 = \frac{1}{2}\int d^3x\left[(H^4\eta^2\varepsilon a^2 - \eta' H^3\varepsilon a)\pi^2\pi'^2 + (H^4\eta^2\varepsilon a^2 + \eta' H^3\varepsilon a)\pi^2(\partial\pi)^2\right] \quad (14)$$

در ابتدا توجه می کنیم که برای محاسبه اثرات تک حلقه نیاز به جواب مد گلدستون در نظریه آزاد در هر دوره از تورم داریم و این جواب ها به صورت زیر هستند:

$$R_k = \frac{H}{M_P\sqrt{4\varepsilon_e k^3}}\left(\frac{\tau_e}{\tau}\right)^3(1+ik\tau)e^{-ik\tau} \qquad (\tau < \tau_e) \quad (15)$$

$$R_k = \frac{H}{M_P\sqrt{4\varepsilon(\tau)k^3}}\left[\alpha_k(1+ik\tau)e^{-ik\tau} + \beta_k(1-ik\tau)e^{ik\tau}\right] \qquad (\tau_e < \tau < \tau_0)$$

$$\alpha_k = 1 + \frac{ih}{4k^3\tau_e^3}(1+k^2\tau_e^2), \qquad \beta_k = -\frac{ih}{4k^3\tau_e^3}(1+ik\tau_e)^2 e^{-2ik\tau_e} \quad (16)$$

در ادامه با استفاده از جواب های نظریه بدون برهمکنش به محاسبه سهم هر کدام از هامیلتونی ها در تابع دو نقطه ای می پردازیم .

در گام اول توجه می کنیم که تابع دو نقطه ای در مرتبه درختی در پایان فاز دوم به صورت زیر داده می شود:

$$P_\zeta = \frac{k_1^3}{2\pi^2} < R_{k_1}(0)R_{k_1}(0) >= \exp(6\Delta N)\frac{H^2}{8\pi^2\varepsilon_i}(2\pi)^3\delta^3(k_1+k_2) \quad (17)$$

که در رابطه بالا تعریف کرده ایم

$$\frac{\tau_i}{\tau_e} = \exp(\Delta N) \quad (18)$$

در اینجا لازم است توجه شود که نتایج مربوط به بزرگترین مرتبه معرفی شده است و مراتب کوچکتر در مقایسه با معادله (۱۷) حذف شده اند. همچنین دوره غلتش فوق آرام نیز بزرگ فرض شده است به عنوان نمونه $\Delta N = 2-3$ فرض می شود.

حال به محاسبه اثرات حلقه می پردازیم. قبل از محاسبه توجه می کنیم که همان طور که از شکل (۱) پیداست در محاسبه اثرات حلقه نیاز به انتگرال های تکانه و زمان داریم. در حالت کلی با توجه به اینکه در انتگرال های فوریه تکانه می تواند از صفر تا بی نهایت تغییر کند قسمت های بی نهایت تکانه را با فرض آنکه بتوان با جملات متقابل[۵] حذف کرد، کنار می گذاریم. همچنین بی نهایت های زمانی را با استفاده از روش مقدار اصلی کوشی[۶] حذف می کنیم.

پس از محاسبه می توان دید که با استفاده از منظم سازی جملات مربوط به هامیلتونی مرتبه چهارم صرفا از جنس بی نهایت هستند و پس از باز بهنجارش حذف می شوند. از طرف دیگر حاصل کل جملات مربوط به هامیلتونی مرتبه سوم نیز در جملات زیر آورده شده است.

$$< R_{k_1}R_{k_2} >'_{H_3} = \frac{H^4\exp(12\Delta N)}{40\pi^2\varepsilon_i^2} \quad (19)$$

که پرایم به معنی آن است که برای اختصار از نوشتن دلتای دیراک صرف نظر شده است. از مجموع سهم جملات مربوط به درختی و هامیلتونی مرتبه سوم نتیجه نهایی برای تابع دو نقطه ای با احتساب اثرات حلقه در مرتبه غالب به صورت زیر خواهد شد

$$P_{tot} = P_\zeta\left(1+\frac{16}{5}P_\zeta\right) \quad (20)$$

همان طور که در [۷] نشان داده شده است محاسبه مشابهی با روش کاتوره ای طیف توان و تصحیحات کاتوره ای آن را با استفاده از آمار کلاسیک به صورت زیر به دست می دهد:

$$P_{tot} = P_\zeta(1+9P_\zeta(1+\Delta N)) \quad (21)$$

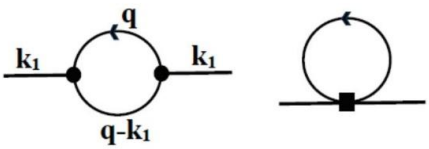
[۳] Goldstone mode

[۴] Tree level

[۵] Counter terms

[۶] Cauchy principle value

با مقایسه تصحیحات حلقه و تصحیحات کاتوره ای در دو روش میتوان دریافت که تصحیحات حلقه و کوانتومی از یک مرتبه هستند. اما می بایست توجه کنیم که تفاوت هایی در ضرایب مشهود است. علت این تفاوت آن است که در روش کاتوره ای تورم فوق غلتش آرام به صورت تک فازی است و معادل با آن است که پارامتر گذار به سمت بی نهایت برود. محاسبه اثرات حلقه در حالتی که پارامتر گذار به سمت بی نهایت برود منجر به محاسبه ای غیر اختلالی می شود که این موضوع در مطالعات آینده مورد توجه قرار خواهد گرفت. همچنین همان طور که در[۸] نشان داده شده است برای آنکه تورم کاتوره ای به نتیجه استاندارد حاصل از تصحیحات حلقه برسد می بایست دامنه نوفه را در میدان تورمی اصلاح کرد که انجام آن را به مطالعات بعدی موکول می نماییم.



شکل ۱ : نمودارهای فاینمن مورد استفاده در محاسبات تک حلقه

نتیجه گیری

در این مقاله به محاسبه اثرات کوانتومی تک حلقه در تورم دو فازی غلتش آرام با استفاده از منظم سازی بی نهایت ها پرداختیم. هدف از این محاسبه مقایسه این اثرات با روش کلاسیک (تورم کاتوره ای) است. همان طور که مشاهده شد اثرات تک حلقه از مرتبه ای است که با استفاده از اثرات کاتوره ای محاسبه شده است. البته مقایسه کامل دو عبارت به دلیل آنکه لازم است پارامتر گذار به فاز دوم را به بی نهایت میل دهیم، با توجه به غیر اختلالی شدن محاسبات نیاز به مطالعه جداگانه ای دارد.

قدردانی

نویسندگان این مقاله، از دکتر حسن فیروزجاهی برای بهبود کار و گفتگوهای مفید و سازنده تشکر و قدردانی می کنند.

مرجع ها

[۱] M. H. Namjoo, H. Firouzjahi and M. Sasaki, EPL ۱۰۱ (۲۰۱۳) ۳۹۰۰۱
[۲] J. M. Maldacena, JHEP ۰۵ (۲۰۰۳) ۰۱۳
[۳] J. Garcia Bellido and E. Ruiz Morales, Phys. Dark Univ.۱۸ (۲۰۱۷) ٤٧-٥٤
[۴] H. Firouzjahi, JCAP ۱۰ (۲۰۲۳) ۰۰٦
[۵] H. Sheikhahmadi, A. Nassiri-Rad, arxiv:۲٤۱۱,۱۸٥۲٥
[۶] Y. F. Cai, X. Chen, M. H. Namjoo, M.S. Sasaki, D. G. Wang and Z. Wang, JCAP ۰۵ (۲۰۱۸) ۰۱۲
[۷] H.Firouzjahi, A. Nassiri-Rad, M. Noorbala, JCAP ۰۱ (۲۰۱۹) ۰٤۰
[۸] A. Nassiri-Rad, H. Sheikhahmadi, H. Firouzjahi, JCAP ۰٤ (۲۰۲٦) ۰۱٤

تاثیر میدان‌های اسکالر و الکتریکی بر تکینگی‌های جواب‌های دقیق معادلات اینشتین

صادقی، فاطمه؛ میرزا، بهروز
دانشکده فیزیك، دانشگاه صنعتی اصفهان، ۸۳۱۱۱-۸۴۱۵۶ اصفهان، ایران

چکیده

در این مقاله، متریکی را در حضور میدان اسکالر وابسته به مختصهٔ شعاعی (r) در نظر می‌گیریم و با استفاده از دو روش حل دقیق معادلات اینشتین–ماکسول و نیز تبدیلات هریسون، میدان الکتریکی را به آن اضافه می‌کنیم تا متریک باردار متناظر در حضور میدان اسکالر به‌دست آید. نتایج حاصل از این دو روش در توافق کامل هستند. در ادامه، تکینگی‌های متریک حاصل را بررسی می‌کنیم تا تأثیر میدان‌های اسکالر و الکتریکی بر ساختار تکینگی‌ها مطالعه شود.

واژه‌های کلیدی: *کنش اینشتین-ماکسول، میدان‌های اسکالر، تکینگی‌های متریک.*

The Effects of Scalar and Electromagnetic Fields on the Singularities of Exact Solutions to Einstein's Field Equations

Sadeghi, Fatemeh; Mirza, Behrouz

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran

Abstract

In this work, we consider a metric in the presence of a scalar field depending on the radial coordinate (r), and by employing two different approaches—namely, exact solutions of the Einstein–Maxwell equations and Harrison transformations—we introduce an electric field to obtain the corresponding charged metric in the presence of the scalar field. The results obtained from these two methods are in complete agreement. We then investigate the singularities of the resulting metric in order to study the effects of the scalar and electric fields on the structure of the singularities.

***Keywords**: Einstein–Maxwell action, scalar fields, metric singularities.*

مقدمه

یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های نسبیت عام، پیش‌بینی وجود تکینگی‌های فضا-زمانی در جواب‌های معادلات میدان اینشتین است. این تکینگی‌ها نواحی‌ای از فضا-زمان هستند که در آن‌ها کمیت‌های هندسی و فیزیکی، مانند انحنای فضا-زمان، رفتار واگرا پیدا می‌کنند و در نتیجه توصیف کلاسیکی گرانش با محدودیت مواجه می‌شود. مطالعه این ساختارها نقش مهمی در درک رفتار فضا-زمان در نواحی با میدان گرانشی قوی ایفا می‌کند و می‌تواند اطلاعات ارزشمندی درباره محدودیت‌های نسبیت عام و ساختار فضا-زمان فراهم سازد. به همین دلیل، بررسی جواب‌های دقیق معادلات میدان و مطالعه ویژگی‌های هندسی آن‌ها همواره یکی از موضوعات مهم در نسبیت عام و گرانش نظری بوده است.

در میان جواب‌های شناخته‌شده معادلات اینشتین، متریک شوارتزشیلد و متریک ریسنر–نوردستروم از مهم‌ترین جواب‌های ایستا و متقارن کروی به شمار می‌روند. متریک شوارتزشیلد توصیف‌کننده فضا-زمان پیرامون یک جرم بدون بار است، در حالی که متریک ریسنر–نوردستروم حضور میدان الکترومغناطیسی را نیز در نظر می‌گیرد. حضور میدان‌های الکترومغناطیسی می‌تواند ساختار افق‌ها و ویژگی‌های تکینگی‌های فضا-زمان را تغییر دهد و در نتیجه هندسه فضا-زمان را تحت تأثیر قرار دهد. علاوه بر میدان‌های الکترومغناطیسی، میدان‌های اسکالر نیز در بسیاری از مدل‌های فیزیک نظری، از جمله نظریه‌های گرانش تعمیم‌یافته و مدل‌های کیهان‌شناسی، نقش مهمی ایفا می‌کنند و حضور آن‌ها می‌تواند منجر به پیدایش جواب‌های جدیدی برای معادلات اینشتین شود.

به طور کلی، افزودن میدان‌های مختلف به نظریه گرانش، یافتن جواب‌های دقیق معادلات اینشتین را دشوارتر می‌کند. از این رو، استفاده از روش‌هایی که امکان تولید جواب‌های جدید را فراهم می‌کنند اهمیت ویژه‌ای دارد. یکی از این روش‌ها، استفاده از تبدیلات هریسون [1, 2] در نظریه اینشتین–ماکسول است که امکان اضافه کردن میدان الکترومغناطیسی به برخی جواب‌های شناخته‌شده را فراهم می‌کند. این تبدیلات در بسیاری از مسائل مربوط به تولید جواب‌های باردار مورد استفاده قرار گرفته‌اند و کاربرد گسترده‌ای در تولید جواب‌های جدید معادلات اینشتین–ماکسول دارند. همچنین مقایسه جواب‌های حاصل از این روش با جواب‌های به‌دست‌آمده از حل مستقیم معادلات میدان می‌تواند سازگاری و صحت نتایج را نشان دهد.

در این مقاله، یک متریک ایستا را در حضور میدان اسکالر وابسته به مختصه شعاعی (r) در نظر می‌گیریم [3, 4] و سپس با استفاده از دو روش مختلف، شامل حل دقیق معادلات اینشتین–ماکسول و نیز تبدیلات هریسون، میدان الکتریکی را به آن اضافه می‌کنیم تا متریک باردار متناظر به‌دست آید. در ادامه، نتایج حاصل از این دو روش را با یکدیگر مقایسه می‌کنیم و سپس ساختار تکینگی‌های متریک حاصل را مورد بررسی قرار می‌دهیم تا تأثیر میدان‌های اسکالر و الکتریکی بر رفتار تکینگی‌های فضا-زمان مطالعه شود.

جواب ایستا در حضور میدان اسکالر

در این بخش در ابتدا، کنش اینشتین-ماکسول را در حضور یک میدان اسکالر بدون جرم به صورت زیر در نظر می‌گیریم

$$S=\int d^4x\sqrt{-g}\left[R-F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}-g^{\mu\nu}\partial_\mu\psi\,\partial_\nu\psi\right], \quad (1)$$

معادلات حرکت مربوط به کنش فوق به صورت زیر هستند

$$R_{\mu\nu}=\partial_\mu\psi\,\partial_\nu\psi+T^{TM}_{\mu\nu}, \quad (2)$$

$$\Box\psi=0. \quad (3)$$

که تانسور تکانه-انرژی الکترومغناطیس $T^{EM}_{\mu\nu}$ به صورت زیر است

$$T^{EM}_{\mu\nu}=2F^{\alpha}_{\mu}F_{\nu\alpha}-\frac{1}{2}g_{\mu\nu}F_{\gamma\sigma}F^{\gamma\sigma}, \quad (4)$$

و تانسور میدان الکترومغناطیس $F_{\mu\nu}$ هم با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$F_{\mu\nu}=\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu. \quad (5)$$

در غیاب میدان اسکالر ($\Psi=0$) ساده‌ترین جواب معادلات (2-5)، متریک ریسنر-نوردستروم است. در غیاب تانسور تکانه-انرژی الکترومغناطیس ($T^{EM}_{\mu\nu}=0$) و در صورتی که میدان اسکالر در روابط (3-1) تابع r باشد، یک دسته خاص از جواب‌های مربوط به معادلات میدان (2) و (3) به صورت زیر است [3, 4]

$$ds^2=-\frac{\Delta(r)}{r^2}dt^2+r^2(1+\frac{N(\theta)}{\Delta(r)})^{\nu}(\frac{dr^2}{\Delta(r)}+d\theta^2)$$
$$+r^2\sin^2\theta\,d\phi^2, \quad (6)$$

که توابع متریک (6) و میدان اسکالر مربوط به آن به صورت زیر هستند

$$\Delta(r)=r^2-2m\,r, \quad (7)$$

$$N(\theta)=m^2\sin^2\theta, \quad (8)$$

$$\psi(r)=\sqrt{-\frac{\nu}{2}}\ln(1-\frac{2m}{r}). \quad (9)$$

متریک (6-9) یک متریک ایستا در حضور یک میدان اسکالر وابسته به r را نشان می‌دهد. همچنین، با توجه به رابطه (9)، ν همواره کوچک‌تر و یا مساوی صفر است و در $\nu=0$، میدان اسکالر صفر می‌شود و متریک (6) به متریک شوارتزشیلد تبدیل می‌شود. در ادامه قصد داریم با دو روش مختلف، میدان الکتریکی را به متریک (6) اضافه کنیم.

روش حل دقیق معادلات اینشتین-ماکسول

در قسمت قبل یک متریک ایستا در حضور میدان اسکالر وابسته به r معرفی کردیم. در این قسمت قصد داریم به متریک معرفی شده در قسمت قبل میدان الکتریکی اضافه کنیم. برای این کار پتانسیل برداری را به صورت ایستا و به صورت زیر در نظر می‌گیریم

$$A_\mu=(\frac{q}{r},0,0,0). \quad (10)$$

با مورد توجه قرار دادن متریک (6) و همچنین متریک ریسنر-نوردستروم در حالت‌های حدی، یک تابع متریک به صورت زیر در نظر می‌گیریم

$$ds^2=-\frac{\tilde{\Delta}(r)}{r^2}dt^2+r^2(1+\frac{\tilde{N}(\theta)}{\tilde{\Delta}(r)})^{\nu}(\frac{dr^2}{\tilde{\Delta}(r)}+d\theta^2)$$
$$+r^2\sin^2\theta\,d\phi^2, \quad (11)$$

اکنون باید توابع متریک یعنی $\tilde{\Delta}(r)$ و $\tilde{N}(\theta)$ و نیز تابع میدان اسکالر $\tilde{\Psi}(r)$ مربوط به متریک (11) را به دست آوریم. با توجه به روابط (4)، (5)، (10) و (11) داریم

$$T^{TM}_{\mu\nu}=\begin{pmatrix}\frac{q^2\tilde{\Delta}}{r^6}(1+\frac{\tilde{N}}{\tilde{\Delta}})^{-\nu} & 0 & 0 & 0\\ 0 & -\frac{q^2}{r^2\tilde{\Delta}} & 0 & 0\\ 0 & 0 & \frac{q^2}{r^2} & 0\\ 0 & 0 & 0 & \frac{q^2\sin^2\theta}{r^2}(1+\frac{\tilde{N}}{\tilde{\Delta}})^{-\nu}\end{pmatrix}. \quad (12)$$

همچنین با استفاده از روابط (2) و (12) در این حالت داریم

$$R_{\mu\nu}=\begin{pmatrix}\frac{q^2\tilde{\Delta}}{r^6}(1+\frac{\tilde{N}}{\tilde{\Delta}})^{-\nu} & 0 & 0 & 0\\ 0 & (\partial_r\tilde{\psi})^2-\frac{q^2}{r^2\tilde{\Delta}} & 0 & 0\\ 0 & 0 & \frac{q^2}{r^2} & 0\\ 0 & 0 & 0 & \frac{q^2\sin^2\theta}{r^2}(1+\frac{\tilde{N}}{\tilde{\Delta}})^{-\nu}\end{pmatrix}. \quad (13)$$

با استفاده از روابط (11) و (13) داریم

$$R_{\varphi\varphi}=T^{TM}_{\varphi\varphi},\Rightarrow\tilde{\Delta}+r(r-\partial_r\tilde{\Delta})=q^2,\Rightarrow\tilde{\Delta}=r^2+c_1r+q^2. \quad (14)$$

با توجه به این که متریک در رابطه (11) در نبود میدان الکتریکی ($q=0$) باید به متریک (6) تبدیل شود، بنابراین c_1 باید برابر $-2m$ باشد و از رابطه (14) داریم

$$\tilde{\Delta}=r^2-2m\,r+q^2. \quad (15)$$

بار دیگر از روابط (11) و (13) برای به دست آوردن $\tilde{N}(\theta)$ استفاده می‌کنیم

$$R_{r\theta}=0,\Rightarrow\partial_\theta\tilde{N}(\theta)-2\cot\theta\,\tilde{N}(\theta)=0,\Rightarrow\tilde{N}(\theta)=c_2\sin^2\theta. \quad (16)$$

برای به دست آوردن ثابت c_2 از $R_{\theta\theta}$ و روابط (11) و (13) استفاده می‌کنیم

$$R_{\theta\theta}=T^{TM}_{\theta\theta},\Rightarrow 2\nu\,c_2(c_2+q^2-m^2)=0, \quad (17)$$

با توجه به رابطه (17)، c_2 می‌تواند به صورت زیر باشد

$$c_2=\begin{cases}0,\\ m^2-q^2,\end{cases} \qquad (18)$$

با توجه به این که متریک (11) باید در $q=0$ به متریک (6) تبدیل شود، بنابراین c_2 برابر است با

$$c_2=m^2-q^2. \qquad (19)$$

با توجه به روابط (16) و (19)، $\tilde{N}(\theta)$ برابر است با

$$\tilde{N}(\theta)=(m^2-q^2)\sin^2\theta. \qquad (20)$$

برای به دست آوردن میدان اسکالر $\tilde{\Psi}(r)$ از R_{rr} و روابط (11) و (13) استفاده می‌کنیم

$$R_{rr}=(\partial_r\tilde{\psi}(r))^2+T_{rr}^{TM},\Rightarrow\frac{2v(q^2-m^2)}{(r^2-2m\,r+q^2)^2}=(\partial_r\tilde{\psi}(r))^2. \qquad (21)$$

با حل معادله دیفرانسیلی (21)، به رابطه زیر می‌رسیم

$$\tilde{\psi}(r)=\sqrt{-\frac{v}{2}}\ln\left(\frac{r-m-\sqrt{m^2-q^2}}{r-m+\sqrt{m^2-q^2}}\right), \qquad (22)$$

بنابراین با حل دقیق معادلات میدان توانستیم توابع متریک و تابع میدان اسکالر را به دست آوریم. در نتیجه با توجه به روابط (11)، (15) و (20)، متریک زیر را به دست می‌آوریم

$$ds^2=-\left(1-\frac{2m}{r}+\frac{q^2}{r^2}\right)dt^2+\left(1+\frac{(m^2-q^2)\sin^2\theta}{r^2-2m\,r+q^2}\right)^{\nu}$$
$$\times\left(\frac{dr^2}{1-2m/r+q^2/r^2}+r^2d\theta^2\right)+r^2\sin^2\theta\,d\varphi^2, \qquad (23)$$

متریک (23) در حد $\nu=0$ یعنی در نبود میدان اسکالر به متریک ریسنر-نوردستروم تبدیل می‌شود. در قسمت بعد، می‌خواهیم با استفاده از تبدیلات هریسون به متریک (6)، میدان الکتریکی اضافه کنیم.

روش تبدیلات هریسون

در این قسمت می‌خواهیم با استفاده از تبدیلات هریسون، میدان الکتریکی را به متریک (6) اضافه کنیم. در سال ۱۹۶۸، ارنست معادلات اینشتین-ماکسول را به صورت زیر بازنویسی کرد [5]

$$(\mathrm{Re}(\varepsilon)+\Phi\Phi^*)\nabla^2\varepsilon=\nabla\varepsilon.(\nabla\varepsilon+2\Phi^*\nabla\Phi),$$
$$(\mathrm{Re}(\varepsilon)+\Phi\Phi^*)\nabla^2\Phi=\nabla\Phi.(\nabla\varepsilon+2\Phi^*\nabla\Phi). \qquad (24)$$

که $Re(\varepsilon)$ قسمت حقیقی ε را نشان می‌دهد و ε و Φ پتانسیل‌های ارنست هستند که با روابط زیر تعریف می‌شوند

$$\varepsilon:=f-|\Phi|^2+i\,\chi, \qquad (25)$$
$$\Phi:=A_t+i\,\tilde{A}_\varphi, \qquad (26)$$

که f ضریب dt^2 متریک است و χ به صورت زیر است

$$\hat{\varphi}\times\nabla\chi:=-\rho^{-1}f^2\nabla\omega-2\hat{\varphi}\times\mathrm{Im}(\Phi^*\nabla\Phi). \qquad (27)$$

که $\hat{\varphi}$ بردار یکه در جهت φ، ω تابعی در متریک لوییس-وایل-پاپاپترو در رابطه (29)، ρ تابع مختصات و $\mathrm{Im}(\Phi^*\nabla\Phi)$ قسمت موهومی $\Phi^*\nabla\Phi$ را نشان می‌دهد. تبدیلات هریسون [1, 2] و اهلرز [2, 6]، تبدیلاتی هستند که به معادلات ارنست به ترتیب بار الکتریکی و بار مغناطیسی اضافه می‌کنند و تحت این تبدیلات معادلات ارنست بدون تغییر باقی می‌مانند. در [7] نشان داده شده است که این تبدیلات می‌توانند برای کنش اینشتین-هیلبرت جفت شده با میدان اسکالر هم به کار روند. اکنون تبدیلات هریسون را به شکل زیر معرفی می‌کنیم

$$\varepsilon'=\frac{\varepsilon}{1-2\alpha^*\Phi-|\alpha|^2\varepsilon},\qquad \Phi'=\frac{\alpha\varepsilon+\Phi}{1-2\alpha^*\Phi-|\alpha|^2\varepsilon}. \qquad (28)$$

که α در حالت کلی یک عدد مختلط است. برای استفاده از تبدیلات هریسون در متریک (6) باید آن را به فرم متریک لوییس-وایل-پاپاپترو که به صورت زیر است بنویسیم

$$ds^2=-f\,(dt-\omega d\varphi)^2+f^{-1}[e^{2\lambda}(d\rho^2+dz^2)+\rho^2d\phi^2], \qquad (29)$$

رابطه ρ و z با r و θ به صورت زیر است

$$\rho=\sqrt{r^2-2m\,r}\,\sin\theta,\qquad z=(r-m)\cos\theta. \qquad (30)$$

با اعمال تبدیلات (30) در متریک (29) و مقایسه نتیجه به دست آمده با متریک (6) و همچنین با توجه به رابطه (26)، توابع $f(r)$، ω، $e^{2\lambda}(r,\theta)$ و Φ را به صورت زیر به دست می‌آوریم

$$f(r)=1-\frac{2m}{r},\qquad \omega=0,$$
$$e^{2\lambda}(r,\theta)=\left(1+\frac{m^2\sin^2\theta}{r^2-2m\,r}\right)^{\nu-1},\qquad \Phi=0. \qquad (31)$$

با استفاده از روابط (25-27) و (31) توابع ε و χ را به شکل زیر به دست می‌آوریم

$$\varepsilon=1-\frac{2m}{r},\qquad \chi=0. \qquad (32)$$

با استفاده از روابط (31) و (32) در روابط (28) داریم

$$\varepsilon'=\frac{r-2m}{r-|\alpha|^2(r-2m)},\qquad \Phi'=\frac{\alpha(r-2m)}{r-|\alpha|^2(r-2m)}. \qquad (33)$$

با توجه به روابط (25) و (33)، توابع f' و χ' را به صورت زیر به دست می‌آوریم

$$f'=\mathrm{Re}(\varepsilon')+|\Phi'|^2=\frac{r^2-2m\,r}{[r-|\alpha|^2(r-2m)]^2},$$
$$\chi'=\mathrm{Im}(\varepsilon')=0. \qquad (34)$$

برای ساده سازی محاسبات، از قسمت موهومی پتانسیل Φ صرف نظر می‌کنیم و آن را به صورت $\Phi=\mathrm{A_t}$ در نظر می‌گیریم. با توجه به این که در نظر گرفتیم Φ تنها مولفه حقیقی داشته باشد بنابراین α در همه روابط بالا یک پارامتر حقیقی است و با توجه به روابط (26) و (33)، برای A_t داریم

$$A_t=\Phi'=\frac{\alpha(r-2m)}{r-|\alpha|^2(r-2m)}. \qquad (35)$$

تبدیلات هریسون تابع λ در متریک (29) را تغییر نمی‌دهد. بنابراین با استفاده از روابط (27)، (30)، (31) و (34) در متریک (29) داریم

$$ds^2=-\frac{r^2-2m\,r}{[r-|\alpha|^2(r-2m)]^2}dt^2+[r-|\alpha|^2(r-2m)]^2$$
$$\times\{(1+\frac{m^2\sin^2\theta}{r^2-2m\,r})^{\nu}(\frac{dr^2}{r^2-2m\,r}+d\theta^2)+\sin^2\theta\,d\varphi^2\}, \qquad (36)$$

اکنون با اعمال تبدیل مختصات زیر در متریک (36)

$$\tilde{r}=r(1-|\alpha|^2)+2m|\alpha|^2,\qquad \tilde{t}=\frac{t}{1-|\alpha|^2},$$
$$\tilde{m}=m(1+|\alpha|^2),\qquad q=-2m\alpha. \qquad (37)$$

و سپس حذف علامت مد از روی مختصات ($\tilde{r} \to r$ ،$\tilde{t} \to t$ و $\tilde{m} \to m$)، شکل نهایی متریک را به صورت زیر به دست می‌آوریم

$$ds^2 = -(1-\frac{2m}{r}+\frac{q^2}{r^2})dt^2 + (1+\frac{(m^2-q^2)\sin^2\theta}{r^2-2m\,r+q^2})^{\nu} \times (\frac{dr^2}{1-2m/r+q^2/r^2} + r^2 d\theta^2) + r^2\sin^2\theta\, d\varphi^2, \qquad (38)$$

که دقیقا همان متریک (23) است. همچنین، با استفاده ازتبدیلات (37) در رابطه (35) پتانسیل برداری را به صورت زیر به دست می‌آوریم

$$A_t = \frac{q}{r}. \qquad (39)$$

در نهایت، با استفاده از رابطه (3) و متریک (38) و همچنین با در نظر رفتن شرایط مرزی، میدان اسکالر مربوط به متریک (38) را به صورت زیر به دست می‌آوریم

$$\psi(r) = \sqrt{-\frac{\nu}{2}}\ln(\frac{r-m-\sqrt{m^2-q^2}}{r-m+\sqrt{m^2-q^2}}), \qquad (40)$$

اکنون می‌خواهیم تکینگی‌های متریک (38) (همان متریک (23)) را بررسی کنیم. برای این کار، اسکالر ریچی مربوط به آن را به صورت زیر به دست می‌آوریم

$$R = -\frac{2\nu(m^2-q^2)}{r^2(r^2-2m\,r+q^2)}(1+\frac{(m^2-q^2)\sin^2\theta}{r^2-2m\,r+q^2})^{-\nu}, \qquad (41)$$

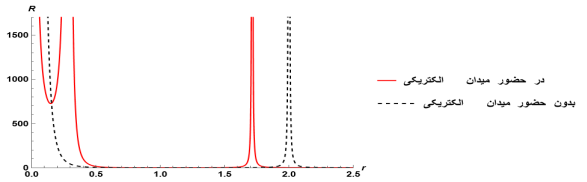
با توجه به رابطه (40)، ν همواره کوچک‌تر و یا مساوی صفر است و بنابراین، با توجه به رابطه (41)، متریک (38) همواره در نقاط زیر تکینگی دارد

$$r_{\text{singularity}} = \begin{cases} 0, \\ m-\sqrt{m^2-q^2}, \\ m+\sqrt{m^2-q^2}. \end{cases} \qquad (42)$$

اکنون اسکالر ریچی متریک ریسنر-نوردستروم را به صورت زیر معرفی می‌کنیم و با اسکالر ریچی (42) مقایسه می‌کنیم تا تاثیر میدان اسکالر وابسته به r را بر تکینگی‌های متریک مشاهده کنیم

$$R_{RN} = \frac{2-\partial_r^2 g(r)}{r^2}, \quad g(r) = r^2-2m\,r+q^2. \qquad (43)$$

همانطور که از رابطه (43) مشخص است متریک ریسنر-نوردستروم تنها یک تکینگی مرکزی در $r=0$ دارد و بنابراین وجود یک میدان اسکالر $\tilde{\Psi}(r)$ در متریک باردار (38) باعث اضافه شدن دو تکینگی انحنایی در $r = m-\sqrt{m^2-q^2}$ و $r = m+\sqrt{m^2-q^2}$ در آن می‌شود. همچنین در این حالت، با در نظر گرفتن این موضوع که سه تکینگی اساسی داریم و متریک هم قابل گسترش نیست، ناحیه مورد قبول فیزیکی در $m+\sqrt{m^2-q^2} < r < \infty$ است. برای نمایش بهتر رفتار تکینگی‌ها، نمودار اسکالر ریچی (41) را در شکل (1) رسم کرده‌ایم تا تاثیر میدان‌های اسکالر و الکتریکی بر تکینگی‌های متریک را بررسی کنیم.



شکل 1: نمودار اسکالر ریچی نسبت به r در $m=1$، $\theta=\pi/2$ و $\nu=-1$ برای متریک (38) در حضور میدان الکتریکی (نمودار قرمز) $q=0.7$ و بدون حضور میدان الکتریکی (نمودار مشکی خطچین) $q=0$. با توجه به نمودار در حالتی که میدان الکتریکی وجود دارد، در سه نقطه $r=0$، $r=m-\sqrt{m^2-q^2}\approx 0.29$ و $r=m+\sqrt{m^2-q^2}\approx 1.71$ تکینگی داریم و در حالتی که میدان الکتریکی وجود ندارد در دو نقطه $r=0$ و $r=2m=2$ تکینگی داریم. همچنین در حالتی که میدان اسکالر حضور نداشته باشد ($\nu=0$)، فقط در نقطه $r=0$ تکینگی وجود دارد پس وجود میدان اسکالر باعث اضافه شدن یک (در صورت عدم وجود میدان الکتریکی) یا دو (در صورت حضور میدان الکتریکی) تکینگی فضا-زمانی در متریک می‌شود.

نتیجه گیری

با شروع از یک متریک ایستا در حضور میدان اسکالر وابسته به r، با دو روش حل دقیق معادلات اینشتین-ماکسول و تبدیلات هریسون، به این متریک میدان الکترکی اضافه کردیم. در روش حل دقیق، ما پتانسیل برداری را مانند پتانسیل برداری متریک ریسنر-نوردستروم در نظر گرفتیم و سپس محاسبات را ادامه دادیم، اما در روش تبدیلات هریسون، بدون فرض مستقیم برای پتانسیل برداری با استفاده از محاسبات، پتانسیل برداری را به دست آوردیم. پس در نتیجه روش تبدیلات هریسون روشی نظام‌مندتر برای تولید جواب‌های باردار فراهم می‌کند و محاسبات مربوط به آن نیز ساده‌تر است. با بررسی اسکالر ریچی متوجه شدیم وجود میدان اسکالر وابسته به r بدون حضور میدان الکتریکی در متریک باعث به وجود آمدن یک تکینگی دیگر می‌شود و اگر علاوه بر میدان اسکالر وابسته به r، میدان الکتریکی هم در متریک وجود داشته باشد، در این صورت دو تکینگی خواهیم داشت. در غیاب میدان اسکالر، حضور میدان الکتریکی تکینگی انحنایی جدیدی ایجاد نمی‌کند و فقط تکینگی مرکزی در آن وجود خواهد داشت.

مرجع‌ها

[1] B. K. Harrison, *"New solutions of the Einstein-Maxwell equations from old," Journal of Mathematical Physics* **9** (1968) 1744.
[2] MT Kachi, B Mirza, F Sadeghi, *"A class of charged-Taub-NUT-scalar metrics via Harison and Ehlers transformations," Annals of Physics* **474** (2025) 169924.
[3] A. Azizallahi, B. Mirza, A. Hajibarat, H. Anjomshoa, *"Three parameter metrics in the presence of a scalar field in four and higher dimensions," Nuclear Physics B* **998** (2023) 116414.
[4] B Mirza, PK Kangazi, F Sadeghi, *"A class of rotating metrics in the presence of a scalar field," The European Physical Journal C* **83** (2023) 1161.
[5] F. J. Ernst, *"New formulation of the axially symmetric gravitational field problem," Physical Review* **167** (1968) 1175.
[6] J. Ehlers, *"Konstruktionen und charakterisierungen von lösungen der Einsteinschen gravitationsfeldgleichungen," Ph.D. thesis, Hamburg Hamburg, Germany* (1958).
[7] M. Astorino, *"Embedding hairy black holes in a magnetic universe," Physical Review D* **87** (2013) 084029.

شرایط انرژی کرم‌چاله‌های عبورپذیر منبسط‌شوندهٔ ۵-بُعدی در حضور انرژی تاریک قطب

کردزنگنه، مهدی [۱]؛ فدعمی، مریم[۱]؛ حکمی شلمزاری، مهدی[۱]

[۱]گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

چکیده

در این مقاله، کرم‌چاله‌های عبورپذیر ۵-بُعدی را در پس‌زمینهٔ منبسط‌شوندهٔ کیهانی در حضور انرژی تاریک قطب مورد بررسی قرار می دهیم. بدین منظور، ضمن در نظر گرفتن تابع شکل توانی، معادلات میدان و مولفه‌های تانسور انرژی-تکانهٔ مربوط به توزیع مادهٔ کرم‌چاله را به‌دست می‌آوریم. سپس، با حل عددی معادلهٔ حاکم بر دینامیک میدان اسکالر و استفاده از نتایج آن، اثر انرژی تاریک قطب و ابعاد بالاتر را بر شرایط انرژی برای فضا-زمان کرم‌چاله‌ای مطالعه خواهیم نمود.

واژه‌های کلیدی: *کرم‌چاله عبورپذیر، انرژی تاریک قطب، شرایط انرژی*

Energy conditions for 5-dimensional expanding traversable wormholes in the presence of pole dark energy

Kord Zangeneh, Mahdi[1]; Fadami, Maryam[1]; Hakami Shalamzari, Mehdi[1]

[1]Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran

Abstract

In this paper, we investigate 5-dimensional traversable wormholes in the cosmic expanding background in the presence of pole dark energy. Thus, by considering the power-law shape function, we obtain the field equations and components of the energy-momentum tensor corresponding to the wormhole matter distribution. Next, by solving the equation governing the scalar field dynamics numerically and using its results, we study the effect of pole dark energy and higher dimensions on the energy conditions for wormhole space-time.

***Keywords**: traversable wormhole, pole dark energy, energy conditions*

مقدمه

کرم‌چاله‌ها ساختارهای تونل مانندی هستند که دو فضا-زمان مجزا یا دو ناحیه متفاوت از یک فضا-زمان را به هم متصل می‌کنند. اولین نوع کرم‌چاله‌های معرفی‌شده، موسوم به "پل اینشتین-روزن"، توسط ساختاری پل‌مانند، دو صفحهٔ یکسان را به هم متصل می‌کرد [۱]. این نوع کرم‌چاله، عبورپذیر نبود. مفهوم کرم‌چاله‌های عبورپذیر را موریس و تورن معرفی کردند [۲]، که توانست افق جدیدی در مطالعهٔ این میانبرهای کیهانی ایجاد کند. یکی از مشخصه‌های کرم‌چاله‌های عبورپذیر ایستا در نسبیت عام این است که از مادهٔ غیرمعمول که شرایط انرژی را برآورده نمی‌کند، ساخته می‌شوند.

شرایط انرژی در نسبیت عام، تعمیم شرایط معمول فیزیک کلاسیک مانند مثبت بودن چگالی انرژی و جاذبه بودن گرانش هستند. یکی از شرایط انرژی، شرط انرژی ضعیف است. این شرط برای توزیع ماده‌ای با تانسور انرژی-تکانهٔ قطری به صورت $\rho \geq 0$، $\rho + P_r \geq 0$ و $\rho + P_t \geq 0$ که در آن‌ها ρ چگالی انرژی، P_r فشار شعاعی و P_t فشار مماسی می‌باشند، داده می‌شود. دو شرط آخر به تنهایی، شرط انرژی پوچ هستند. از آن جا که کرم‌چاله‌های عبورپذیر ایستا، شرایط انرژی معمول را برآورده نمی‌سازند،

مطالعاتی برای بررسی امکان وجود کرم‌چاله‌های ساخته‌شده از مادهٔ معمولی انجام شده است. سایان کار نشان داد که کرم‌چاله‌های عبورپذیر منبسط‌شونده می‌توانند شرایط انرژی نقطه‌ای و میانگین را در بازه‌های زمانی خاصی در امتداد ژئودزیک‌های زمان‌گونه و پوچ برآورده کنند [۳]. این امر باعث گسترش تحقیقات در مورد کرم‌چاله‌های وابسته به زمان شد. یکی از روش‌های مطالعهٔ کرم‌چاله‌های وابسته به زمان، ترکیب آن‌ها در متریک رابرتسون–واکر است که جهان در حال انبساط را توصیف می‌کند.

ساده‌ترین مدل توصیف‌کنندهٔ انرژی تاریک، در نظر گرفتن ثابت کیهان‌شناسی در معادلات می‌باشد. با این وجود، مدل‌های انرژی تاریک که آن را به میدان‌های اسکالر نسبت می‌دهند نیز ارائه شده است. یکی از این مدل‌ها، مدل انرژی تاریک قُطب می‌باشد که اخیراً معرفی شده است [٤]. کرم‌چاله‌های عبورپذیر منبسط شوندهٔ ٤–بُعدی با تابع شکل توانی در حضور انرژی تاریک قطب در [۵] مورد مطالعه قرار گرفته اند.

وجود فضا–زمان هایی با ابعاد بالاتر از ٤–بُعد، از اجزاء کلیدی نظریه‌های مدرن فیزیک بنیادی مانند نظریهٔ ریسمان است. در این مقاله قصد داریم، کرم‌چاله‌های ۵–بُعدی را در حضور انرژی تاریک قطب مورد مطالعه قرار داده و اثر انرژی تاریک قطب و ابعاد بالاتر را بر شرایط انرژی توزیع مادهٔ کرم‌چاله بررسی کنیم.

معادلات میدان و شرایط انرژی

کنش حاکم بر عالم ۵–بُعدی در حضور انرژی تاریک قطب به شکل زیر نوشته می‌شود [٤]:

$$S = \int d^5x\sqrt{-g}\left(\frac{R}{2\kappa} + \ell_\sigma + \ell_m\right), \qquad (۱)$$

که در آن R اسکالر ریچی، κ ثابت مرتبط با ثابت نیوتن، ℓ_m چگالی لاگرانژی ماده و $\ell_\sigma = -\frac{1}{2}\frac{k}{\sigma^p}\nabla_\mu\sigma\nabla^\mu\sigma - V(\sigma)$ چگالی لاگرانژی میدان اسکالر σ می‌باشند. جمله جنبشی در ℓ_σ دارای یک قطب در $\sigma = 0$ است. این جملهٔ جنبشی را می‌توان با یک تبدیل از میدان σ به ϕ، به شکل مرسوم $\frac{-(\nabla\phi)^2}{2}$ در آورد [٤].

متریک کرم‌چالهٔ منبسط‌شوندهٔ ۵–بُعدی به صورت

$$ds^2 = -dt^2 + a(t)^2\left[\frac{dr^2}{1-\frac{b(r)}{r}} + r^2 d\Omega_3^2\right], \qquad (۲)$$

نوشته می‌شود که در آن $a(t)$ فاکتور مقیاس، $b(r)$ تابع شکل و $d\Omega_3^2$ عنصر خط کرهٔ سه–بُعدی می‌باشند. در چارچوب مدل انرژی تاریک قطب، می‌توان با استفاده از متریک کرم‌چاله (۲)، معادلات میدان را به صورت زیر به دست آورد:

$$\frac{\rho}{H_0^2} = \frac{3b'(r)}{4a^2r^2H_0^2} + \frac{3b(r)}{4a^2r^3H_0^2} + 3E(a)^2 - \frac{\rho_\phi}{H_0^2}, \qquad (۳)$$

$$\frac{P_r}{H_0^2} = -\frac{3b(r)}{2a^2r^3H_0^2} - 3E(a)^2 - \frac{3}{2}aE(a)E'(a) - \frac{P_\phi}{H_0^2}, \qquad (٤)$$

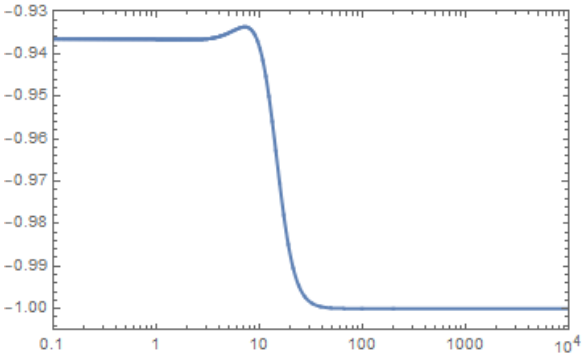
$$\frac{P_t}{H_0^2} = -\frac{b'(r)}{2a^2r^2H_0^2} - 3E(a)^2 - \frac{3}{2}aE(a)E'(a) - \frac{P_\phi}{H_0^2}, \qquad (۵)$$

$$0 = 5aE(a)^2\phi'(a) + a^2E(a)E'(a)\phi'(a) + a^2E(a)^2\phi''(a) + 3V'(\phi). \qquad (٦)$$

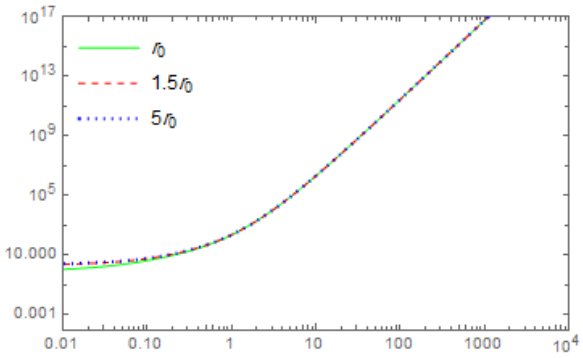
در روابط بالا، H_0 پارامتر هابل در زمان فعلی و $E = H/H_0$ یک پارامتر بدون بُعد مرتبط با پارامتر هابل است. چگالی انرژی و فشار مربوط به میدان اسکالر نیز $\rho_\phi = \frac{1}{2}a^2E(a)^2\phi'(a)^2 + V(\phi)$ و $P_\phi = \frac{1}{2}a^2E(a)^2\phi'(a)^2 - V(\phi)$ می‌باشند.

برای مطالعهٔ شرایط انرژی، ابتدا می‌بایست معادلهٔ (٦) را به صورت عددی حل کرده و جواب ϕ را به دست آوریم. سپس با استفاده از معادلات (۳) تا (۵)، شرایط انرژی را مطالعه نماییم. بدین منظور، نیاز است تا توابع E، V و b مشخص شوند. با حل معادله حالت (رابطهٔ فشار و چگالی انرژی) کیهان پس‌زمینه می‌توان E را به صورت $a^{\frac{-4(\omega+1)}{2}}$ به دست آورد که برای دوران غلبه تابش $\omega = \frac{1}{3}$ و برای دوران غلبه ماده $\omega = 0$ می‌باشد. همچنین $V(\phi) = \phi^{-0.1}$ [٤] و تابع شکل توانی به صورت $b(r) = r_0\left(\frac{r_0}{r}\right)^2$ را که در آن r_0 شعاع گلوگاه کرم‌چاله است، در نظر می‌گیریم. شعاع گلوگاه، کمینه شعاع در فضا–زمان کرم‌چاله را نشان می‌دهد ($0 < r_0/r \leq 1$). تابع شکل فوق، شرایط عبورپذیری [۲] شامل $b(r_0) = r_0$،

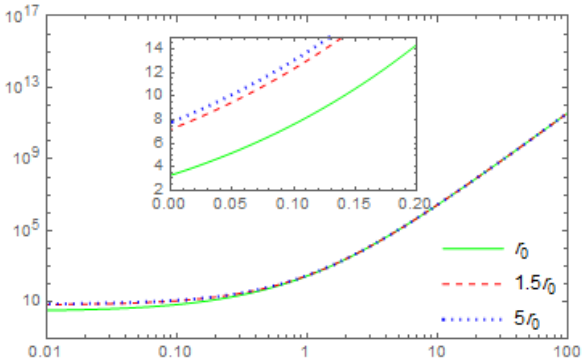
$$1 - \frac{b(r)}{r} = 1 - \left(\frac{r_0}{r}\right)^3 \geq 0, \qquad (۷)$$



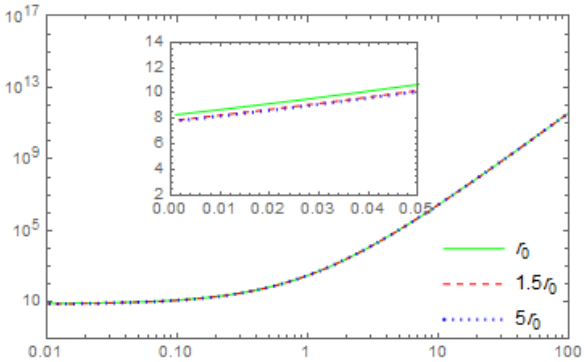
شکل ۱ : نمودار ω_ϕ برحسب z در دوران غلبه تابش.



شکل ۲ : رفتار ρ برحسب z در دوران غلبه تابش.



شکل ۳: $\rho + P_r$ برحسب z در دوران غلبه تابش.



شکل ٤ : $\rho + P_t$ برحسب z در دوران غلبه تابش.

$$b'(r) - \frac{b(r)}{r} = -3\left(\frac{r_0}{r}\right)^3 < 0, \qquad (۸)$$

را برآورده می‌سازد و در شعاع‌های بزرگ $b(r)/r \to 0$ می‌رود.

اکنون با رسم نمودارهای ρ، $\rho + P_r$ و $\rho + P_t$ بر حسب قرمزگرایی $z = \frac{1}{a} - 1$، شرایط انرژی را در دوران‌های مختلف در طول زمان مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

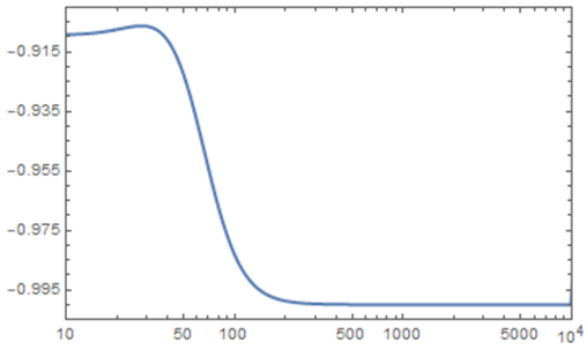
دوران غلبهٔ تابش

با حل عددی معادله میدان مربوط به میدان اسکالر (رابطهٔ (٦)) و یافتن ϕ، رفتار پارامتر $\omega_\phi = \frac{P_\phi}{\rho_\phi}$ را در دوران غلبهٔ تابش در شکل ۱ رسم نموده‌ایم. همان‌طور که در این شکل دیده می‌شود، مقدار ω_ϕ نزدیک به مقدار مورد انتظار ۱/۳ است که انبساط شتابدار عالم با شتاب مثبت را توصیف می‌کند.

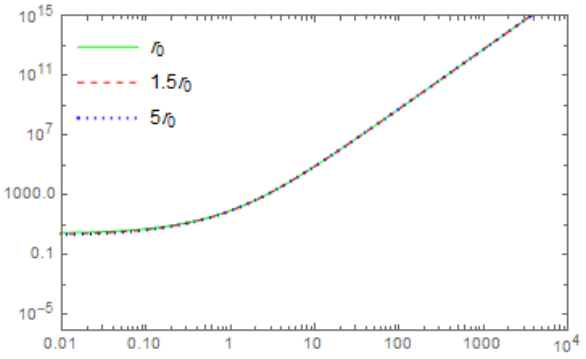
در شکل‌های ۲ تا ٤، به ترتیب، ρ ، $\rho + P_r$ و $\rho + P_t$ را برحسب قرمزگرایی z برای مقادیر مختلف فاصلهٔ شعاعی رسم کرده‌ایم. همان‌گونه که از این شکل‌ها مشخص است، در تمام طول این دوران شرایط انرژی ضعیف و پوچ برآورده می‌شوند. این در حالی است که در حالت ٤-بعدی، چگالی انرژی در دوران غلبهٔ تابش در بازه‌های زمانی خاص، منفی شده و شرط انرژی ضعیف برقرار باقی نمی‌ماند [۵]. این نشان می‌دهد که در نظر گرفتن ابعاد بالاتر می‌تواند به ساخته شدن کرم‌چاله از مادهٔ معمولی کمک کند.

دوران غلبهٔ ماده

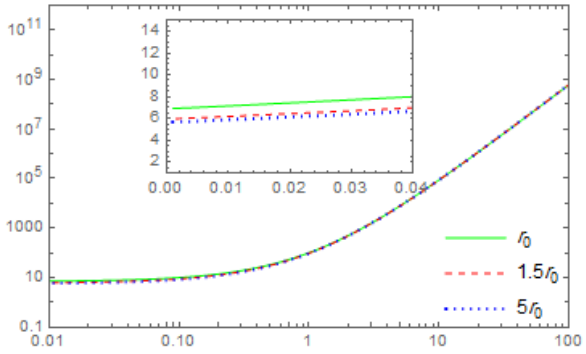
رفتار پارامتر ω_ϕ در دوران غلبهٔ ماده در شکل ۵ رسم شده است. همان‌گونه که در شکل پیدا است، ω_ϕ نزدیک به ۱/۳ می‌باشد که برای مدل انرژی تاریک توصیف‌کنندهٔ عالم منبسط شوندهٔ شتابدار با شتاب مثبت مورد انتظار و مطلوب است.



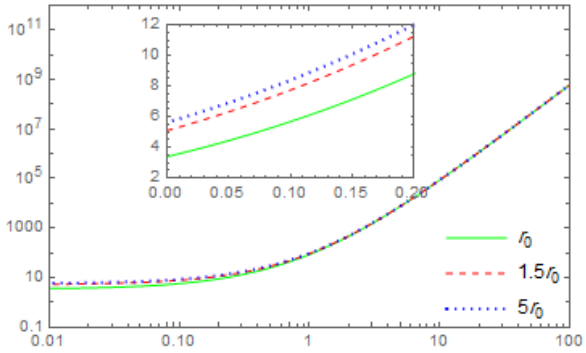
شکل۵: نمودار ω_ϕ برحسب z در دوران غلبه ماده.



شکل۶ : رفتار ρ برحسب z در دوران غلبه ماده.



شکل۷: $\rho + P_r$ برحسب z در دوران غلبه ماده.



شکل۸ : $\rho + P_t$ برحسب z در دوران غلبه ماده.

ρ ، $\rho + P_r$ و $\rho + P_t$ برای این دوران، به ترتیب در شکل‌های ٦ تا ٨ رسم شده اند. رفتار این کمیت‌ها نشان می‌دهد که شرط انرژی ضعیف و پوچ در طول این دوران برقرار است. برای حالت مشابه در ٤–بُعد، در بازهٔ زمانی خاصی، چگالی انرژی منفی می‌شود [٥]. این بدان معناست که در بازهٔ مذکور، شرط انرژی ضعیف برقرار باقی نمی‌ماند. بنابراین، نتیجه می‌گیریم، در این حالت نیز ابعاد بالاتر می‌تواند به تشکیل کرم‌چاله از مادهٔ معمولی کمک کند.

خلاصه و نتیجه‌گیری

در این مقاله، با در نظر گرفتن کرم‌چاله‌های عبورپذیر منبسط‌شوندهٔ ٥–بعدی در پس‌زمینهٔ کیهانی در حضور انرژی تاریک قطب، به بررسی شرایط انرژی ضعیف و پوچ برای توزیع مادهٔ مربوط به این فضا–زمان پرداختیم. با حل عددی معادله میدان حاکم بر میدان اسکالر توصیف کنندهٔ انرژی تاریک قطب و سپس استفاده از جواب میدان برای مطالعهٔ رفتار مؤلفه‌های تانسور انرژی–تکانه در دوران‌های غلبهٔ تابش و غلبهٔ ماده، نشان دادیم که شرط انرژی ضعیف و پوچ در کل این دوران‌ها در طول زمان برقرار باقی می‌ماند. این در حالی است که حالت‌های مشابه در ٤–بعد، در بازه‌های زمانی خاصی با نقض شرط انرژی ضعیف روبرو می‌شوند. این امر نشان می‌دهد که وجود ابعاد بالاتر در کنار مدل انرژی تاریک قطب به ساخته شدن کرم‌چاله با مادهٔ معمولی کمک می‌کند.

تشکر و قدردانی

نویسندگان از دانشگاه شهید چمران اهواز برای حمایت از این مقاله تشکر و قدردانی می‌کنند.

مرجع‌ها

[1] A. Einstein and N. Rosen, “The Particle Problem in the General Theory of Relativity,” Phys. Rev. **48**, 73-77 (1935).

[2] M. S. Morris and K. S. Thorne, "Wormholes in spacetime and their use for interstellar travel: A tool for teaching general relativity," Am. J. of Phys. **56**(5), 395-412 (1988).

[3] S. Kar, "Evolving wormholes and the weak energy condition," Phys. Rev. D **49**, 862-865 (1994).

[4] E. V. Linder, "Pole Dark Energy," Phys. Rev. D **101**(2), 023506 (2020).

[5] M. Kord Zangeneh, F. S. N. Lobo, and H. Moradpour, "Evolving traversable wormholes satisfying the energy conditions in the presence of pole dark energy," Phys. Dark Univ. **31**, 100779 (2021).

بررسی تصحیح فاز تجمعی ناشی از اصل عدم قطعیت تعمیم‌یافته در انتشار امواج و کاربرد آن در مخابرات نوری همدوس

روشن، مریم

گروه فیزیک نظری، دانشگاه مازندران ، بابلسر

چکیده

اصل عدم قطعیت تعمیم‌یافته (GUP) یکی از چارچوب‌های پدیدارشناختی مهم برای توصیف اثرات احتمالی گرانش کوانتومی است که در بسیاری از مدل‌ها به وجود طول کمینه بنیادی منجر می‌شود. در این پژوهش، اثر فرم درجه دوم GUP بر انتشار امواج مورد بررسی قرار می‌گیرد. با استفاده از نمایش مؤثر تکانه اصلاح‌شده، تصحیح متناظر برای عدد موج استخراج شده و نشان داده می‌شود که این اصلاح سبب ایجاد یک اختلاف فاز تجمعی در طول انتشار می‌گردد. نتیجه اصلی بیان می‌کند که تصحیح فاز ناشی از GUP با افزایش عدد موج و فاصله انتشار تقویت می‌شود. همچنین با بررسی چند باند متداول مخابرات نوری، وابستگی اثر به طول موج مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که سامانه‌های مخابرات نوری همدوس، به دلیل دقت بالای اندازه‌گیری فاز و بهره‌گیری از مسیرهای انتشار طولانی، می‌توانند به عنوان بستری بالقوه برای استخراج کران‌های تجربی بر پارامترهای مدل‌های GUP و بررسی پدیدارشناسی گرانش کوانتومی مورد توجه قرار گیرند.

واژه های کلیدی: *اصل عدم قطعیت تعمیم‌یافته، گرانش کوانتومی پدیدارشناختی، فاز تجمعی، انتشار امواج، مخابرات نوری همدوس*

Accumulated Phase Corrections Induced by the Generalized Uncertainty Principle in Wave Propagation and Their Application to Coherent Optical Communications

Roushan, Maryam

Department of Theoretical Physics, Mazandaran University, Babolsar

Abstract

The Generalized Uncertainty Principle (GUP) is one of the most important phenomenological frameworks for describing possible quantum-gravity effects and is commonly associated with the existence of a fundamental minimal length. In this work, we investigate the influence of the quadratic form of the GUP on wave propagation. Using an effective representation of the modified momentum operator, we derive the corresponding correction to the wave number and show that this modification leads to an accumulated phase shift during propagation. Our main result indicates that the GUP-induced phase correction is enhanced by increasing both the wave number and the propagation distance. In addition, the wavelength dependence of the effect is examined by considering several standard optical communication bands. The results suggest that coherent optical communication systems, owing to their high phase-measurement precision and long propagation paths may provide a potential platform for probing quantum-gravity phenomenology and placing experimental constraints on GUP parameters.

***Keywords**: Generalized Uncertainty Principle, Quantum Gravity Phenomenology, Accumulated Phase Shift, Wave Propagation, Coherent Optical Communications*
PACS No. (04.60.Bc, 42.25.Bs, 42.62.Eh)

مقدمه

اصل عدم قطعیت تعمیم‌یافته (GUP) یکی از اصلاحات پدیدارشناختی شناخته‌شده در گرانش کوانتومی است که در بسیاری از رویکردهای نظری به وجود یک طول کمینه ی مؤثر منجر می‌شود[5–1]. این اصلاحات معمولاً به تغییر رابطه مکان–اندازه حرکت و در نتیجه ایجاد تصحیحات کوچکی در کمیت‌های فیزیکی

قابل اندازه‌گیری می‌انجامند. بیشتر آزمون‌های تجربی GUP بر سامانه‌های مکانیکی، اتمی و اپتیکی متمرکز بوده‌اند و تاکنون حدود مختلفی برای پارامترهای این مدل‌ها گزارش شده است [4،5]. از سوی دیگر، سامانه‌های مخابرات نوری همدوس امکان اندازه‌گیری اختلاف فاز با دقت بسیار بالا را فراهم می‌کنند [6] و به دلیل طول مسیرهای انتشار زیاد، می‌توانند بستری بالقوه برای جستجوی آثار تجمعی بسیار کوچک باشند. در این پژوهش اثر فرم درجه دوم GUP بر فاز انتشار امواج بررسی می‌شود. نشان می‌دهیم که تصحیح ناشی از GUP به یک اختلاف فاز تجمعی وابسته به طول مسیر انتشار منجر می‌شود و سپس امکان آشکارسازی این اثر در سامانه‌های مخابرات نوری همدوس ارزیابی می‌شود.

اصل عدم قطعیت تعمیم‌یافته و تکانه اصلاح‌شده

یکی از متداول‌ترین فرم‌های اصل عدم قطعیت تعمیم‌یافته(GUP) ، مدل درجه دوم است که در آن رابطه جابجایی بین مکان و تکانه به صورت زیر بیان می شود [1]

$$[x,p] = i\hbar(1+\beta p^2). \qquad (1)$$

در این رابطه، β پارامتر تغییرشکل نظریه است که شدت اثرات ناشی از گرانش کوانتومی را مشخص می‌کند.

برای آنکه بتوان محاسبات را در چارچوب مکانیک کوانتومی متعارف انجام داد، معمولاً تکانه فیزیکی p بر حسب یک تکانه کانونی p_0 تعریف می‌شود که از رابطه استاندارد $[x,p_0] = i\hbar$ پیروی می‌کند. در تقریب مرتبه اول نسبت به پارامتر تغییرشکل، نمایش مؤثر تکانه را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$p = p_0\left(1+\frac{\beta}{3}p_0^2\right). \qquad (2)$$

همانطور که این رابطه نشان می دهد، وجود طول کمینه بنیادی سبب می‌شود تکانه فیزیکی از مقدار متعارف خود اندکی انحراف پیدا کند. از آنجا که انتشار موج مستقیماً به تکانه وابسته است، انتظار می‌رود این اصلاح در عدد موج و در نتیجه در فاز انتشار نیز ظاهر شود. در بخش بعد نشان خواهیم داد که این اصلاح چگونه به یک اختلاف فاز تجمعی در طول مسیر انتشار منجر می‌شود.

استخراج تصحیح فاز تجمعی در انتشار امواج

در مکانیک کوانتومی، انتشار یک موج تخت تک‌فام با تابع موج زیر توصیف می شود

$$\psi(x,t) = A\,exp[i(kx-\omega t)] \qquad (3)$$

که در آن k عدد موج و ω فرکانس زاویه‌ای است.

برای بررسی اثر GUP بر انتشار موج، از رابطه بین فاز موج و تکانه استفاده می‌کنیم. در مکانیک کوانتومی، یک موج تخت را می‌توان به صورت $\psi(x) \propto e^{ipx/\hbar}$ نوشت. بنابراین ضریب ظاهرشده در فاز، یعنی $p/\hbar$ ، نقش عدد موج را بازی می‌کند. اکنون با استفاده از رابطه (2) و با توجه به رابطه دوبروی $p_0 = \hbar k$ ، تابع موج به صورت زیر به دست می آید

$$\psi(x) \propto e^{i\,k\,x\,(1+\beta\hbar^2k^2/3)} \qquad (4)$$

بنابراین ضریب ظاهرشده در فاز را می‌توان به عنوان عدد موج مؤثر به شکل زیر تعریف کرد، که نشان می‌دهد حضور GUP موجب تغییر عدد موج و در نتیجه ایجاد یک تصحیح در فاز انتشار می‌شود.

$$k_{eff} = k\,(1+\beta\hbar^2k^2/3) \qquad (5)$$

بنابراین تغییر عدد موج برابر است با

$$\Delta k = k_{eff} - k \qquad (6)$$

که نتیجه می‌دهد

$$\Delta k = \beta\hbar^2k^3/3 \qquad (7)$$

فاز یک موج پس از طی فاصله L برابر است با

$$\varphi = kL \qquad (8)$$

در حضورGUP ، فاز انتشار به صورت زیر به دست می آید

$$\varphi_{eff} = k_{eff}\,L \qquad (9)$$

در نتیجه تصحیح فاز ناشی از GUP برابر می شود با

$$\delta\varphi_{GUP} = \varphi_{eff} - \varphi \qquad (10)$$

یا

$$\delta\varphi_{GUP} = L\Delta k \qquad (11)$$

اکنون با جایگذاری Δk به دست می‌آوریم

$$\delta\varphi_{GUP} = (\beta\hbar^2k^3L)/3 \qquad (12)$$

در بسیاری از مدل‌های GUP پارامتر تغییرشکل به صورت $\beta \to \beta_0 l_P^2/\hbar^2$ تعریف می‌شود که β_0 یک پارامتر بدون بعد است. در این صورت رابطه (12) به شکل زیر در می آید

$$\delta\varphi_{GUP} = \frac{\beta_0 l_P^2 k^3 L}{3} \qquad (13)$$

این رابطه نشان می‌دهد که اثر با فاصله انتشار افزایش می‌یابد. همچنین با توجه به رابطه $k = 2\pi/\lambda$، رابطه (13) نشان می‌دهد که تصحیح فاز با k^3 متناسب است. بنابراین طول موج‌های کوتاه‌تر

حساسیت بیشتری به اثرات GUP خواهند داشت. از آنجا که تصحیح فاز به صورت تجمعی در طول مسیر انباشته می‌شود، سامانه‌های دارای قابلیت اندازه‌گیری دقیق فاز در فواصل طولانی می‌توانند برای استخراج کران‌های تجربی بر پارامترهای مدل‌های GUPمورد توجه قرار گیرند. در سال‌های اخیر، پیشرفت‌های قابل توجهی در مخابرات نوری همدوس و انتقال فرکانس نوری حاصل شده است. در این سامانه‌ها، اطلاعات علاوه بر دامنه موج، در فاز حامل نوری نیز کدگذاری و بازیابی می‌شود. در نتیجه، اندازه‌گیری اختلاف فاز به یکی از مهم‌ترین کمیت‌های قابل مشاهده در گیرنده‌های همدوس تبدیل شده است [7].

برآورد عددی یک لینک نوری همدوس نمونه

برای بررسی مرتبه بزرگی اثر مورد نظر، یک لینک نوری همدوس نمونه با طول موج 1550 نانومتر و فاصله انتشار $L = 2\times10^{7}$ m را در نظر می گیریم، که متناظر با یک لینک ماهواره‌ای برد بلند است. عدد موج متناظر برابر با $k = 4.05\times10^{6}$ m^{-1} است.

با استفاده از رابطه (13)، ضریب فاز تجمعی مستقل از پارامتر β برابر است با $\frac{\delta\varphi_{GUP}}{\beta} = (l_p^2k^3L)/3$، که مقدار آن تقریباً $1.15\times10^{-43}\,rad$ به دست می‌آید. اگرچه این مقدار بسیار کوچک است، رابطه (13) نشان می‌دهد که حساسیت سامانه با افزایش فاصله انتشار و کاهش طول موج افزایش می‌یابد. از این رو، لینک‌های نوری همدوس برد بلند می‌توانند بستری مناسب برای تبدیل اندازه‌گیری‌های دقیق فاز به محدودیت‌های تجربی بر مدل‌های مبتنی بر اصل عدم قطعیت تعمیم‌یافته باشند.

از آنجا که لینک‌های نوری زمینی، ماهواره‌ای و بین‌ماهواره‌ای می‌توانند فواصل بسیار بزرگی را پوشش دهند، تصحیح فاز تجمعی ناشی از GUP نیز در طول انتشار افزایش می‌یابد. ازاین‌رو، سامانه‌های مخابرات نوری همدوس می‌توانند به عنوان بستری بالقوه برای استخراج حدود تجربی بر پارامترهای مدل‌های GUP مورد توجه قرار گیرند. به منظور بررسی وابستگی اثر به طول موج، چند باند متداول مورد استفاده در مخابرات نوری در نظر گرفته شده‌اند. با استفاده از رابطه ی (13)، ضریب فاز تجمعی مستقل از پارامتر تغییرشکل β برای یک لینک نمونه با فاصله ی انتشار به صورت $L = 2\times10^{7}\,m$ محاسبه شده است. نتایج در جدول 1 ارائه شده‌اند.

جدول 1. برآورد ضریب فاز تجمعی ناشی از GUP در باندهای استاندارد مخابرات نوری

طول موج λ (nm)	باند مخابراتی	عدد موج k (m^{-1})	$\frac{\delta\varphi_{GUP}}{\beta}$
850	Near-IR	7.39×10^{6}	7×10^{-43}
1310	O-band	4.80×10^{6}	1.9×10^{-43}
1550	C-band	4.05×10^{6}	1.15×10^{-43}
1625	L-band	3.87×10^{6}	1.0×10^{-43}

جدول 1 نشان می‌دهد که ضریب فاز تجمعی ناشی از GUP با کاهش طول موج افزایش می‌یابد. بنابراین، طول موج‌های کوتاه‌تر حساسیت بیشتری به این اثر دارند. با این حال، باند 1550 نانومتر به دلیل کاربرد گسترده در سامانه‌های مخابرات نوری همدوس، از مناسب‌ترین گزینه‌ها برای بررسی تجربی این پدیده به شمار می‌رود.

تحلیل حساسیت تجربی

برای بررسی امکان آشکارسازی تجربی اثر مورد بحث، رابطه (13) را معکوس می‌کنیم و حداقل مقدار پارامتر بدون‌بعد β_0 را که در یک سامانه اندازه‌گیری فاز قابل تشخیص است، محاسبه می‌کنیم. اگر حداقل اختلاف فاز قابل اندازه‌گیری سامانه با $\delta\varphi_{min}$ نشان داده شود، از رابطه (13) نتیجه می‌شود

$$(\beta_0)_{min} = \frac{3\delta\varphi_{min}}{l_p^2k^3L} \qquad (14)$$

این رابطه نشان می‌دهد که حساسیت سامانه به دقت اندازه‌گیری فاز، عدد موج و فاصله انتشار وابسته است. برای لینک نوری نمونه با طول موج $\lambda = 1550$ nm، عدد موج $k = 4.05\times10^{6}$ m^{-1} و فاصله انتشار $L = 2\times10^{7}$ m، ضریب مستقل از β_0 برابر است با

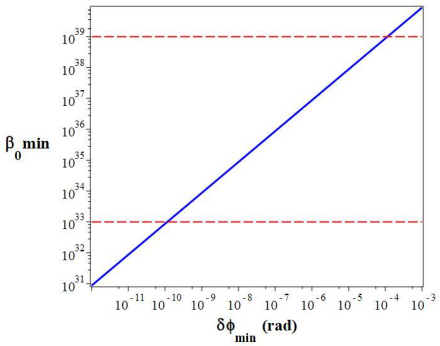
$$\frac{l_p^2k^3L}{3} \approx 1.15\times10^{-43} \qquad (15)$$

در نتیجه

$$(\beta_0)_{min} \approx 8.7\times10^{42}\,\delta\varphi_{min} \qquad (16)$$

اگر دقت اندازه‌گیری فاز سامانه 10^{-6} رادیان باشد، حداقل مقدار قابل آشکارسازی پارامتر β_0 برابر است با

$$(\beta_0)_{min} \approx 8.7\times10^{36} \qquad (17)$$



شکل 1. حداقل مقدار قابل آشکارسازی پارامتر β_0 بر حسب دقت اندازه‌گیری فاز $\delta\varphi_{min}$ برای لینک نوری نمونه مورد بررسی. خط آبی رابطه $(\beta_0)_{min}$ و $\delta\varphi_{min}$ را در مقیاس لگاریتمی نشان می‌دهد و خطوط نقطه‌چین قرمز متناظر با حدود مرتبه بزرگی $\beta_0 \sim 10^{33}$ و $\beta_0 \sim 10^{39}$ گزارش‌شده در ادبیات هستند [4].

شکل 1 وابستگی $(\beta_0)_{min}$ به دقت اندازه‌گیری فاز را نشان می‌دهد. مطابق رابطه (14)، $(\beta_0)_{min}$ با $\delta\varphi_{min}$ به طور خطی مقیاس می‌شود؛ بنابراین هر مرتبه بزرگی بهبود در دقت فازی، به همان میزان حد قابل دستیابی بر پارامتر GUP را بهبود می‌دهد. خطوط افقی نقطه‌چین نیز حدود مرتبه بزرگی $\beta_0 \sim 10^{33}$ و $\beta_0 \sim 10^{39}$ گزارش‌شده در ادبیات را نمایش می‌دهند. حدود تجربی گزارش‌شده برای پارامتر β_0 در مدل درجه دوم GUP معمولاً در بازه 10^{33} تا 10^{39} قرار دارند [4]. مقدار به‌دست‌آمده در این پژوهش، $(\beta_0)_{min} \approx 8.7 \times 10^{36}$ ، در همین بازه مرتبه بزرگی قرار می‌گیرد، هرچند هنوز با قوی‌ترین حدود موجود فاصله دارد این نتیجه نشان می‌دهد که اندازه‌گیری فاز در سامانه‌های مخابرات نوری همدوس می‌تواند به عنوان رویکردی مکمل برای استخراج حدود تجربی بر پارامترهای اصل عدم قطعیت تعمیم‌یافته مورد استفاده قرار گیرد. لازم به ذکر است که در این مطالعه تنها مرتبه بزرگی تصحیح فاز ناشی از GUP بررسی شده است. ارزیابی کامل قابلیت آشکارسازی تجربی این اثر مستلزم لحاظ کردن منابع مختلف نویز فاز، از جمله نویز لیزر، نوسانات محیطی و محدودیت‌های سامانه‌های مخابرات نوری واقعی است. ازاین‌رو، نتایج حاضربه عنوان برآوردی پدیدارشناختی از حساسیت بالقوه این سامانه‌ها تلقی می شوند.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، اثر فرم درجه دوم اصل عدم قطعیت تعمیم‌یافته بر انتشار امواج را بررسی کردیم. با استفاده از نمایش مؤثر تکانه اصلاح‌شده، تصحیح متناظر برای عدد موج را استخراج نمودیم و نشان دادیم که این اصلاح به ایجاد یک اختلاف فاز تجمعی در طول انتشار منجر می‌شود. نتیجه اصلی به‌دست‌آمده بیان می‌کند که تصحیح فاز ناشی از GUP متناسب با k^3L بوده و بنابراین با افزایش عدد موج و فاصله انتشار تقویت می‌شود. همچنین با بررسی چند باند متداول مخابرات نوری نشان دادیم که طول موج‌های کوتاه‌تر حساسیت بیشتری نسبت به این اثر دارند. این نتیجه بیانگر آن است که سامانه‌های مخابرات نوری همدوس، به دلیل قابلیت اندازه‌گیری دقیق فاز و بهره‌گیری از مسیرهای انتشار طولانی، می‌توانند به عنوان بستری بالقوه برای بررسی آثار تجمعی ناشی از گرانش کوانتومی و استخراج محدودیت‌های تجربی بر پارامترهای GUP مورد توجه قرار گیرند.

مراجع

[1] A. Kempf, G. Mangano and R. B. Mann, Phys. Rev. D **52**, 1108 (1995).
[2] M. Roushan and K. Nozari, Adv. High Energy Phys., Volume 2014, Article ID 353192.
[3] A. F. Ali, S. Das and E. C. Vagenas, Phys. Lett. B **678**, 497 (2009).
[4] P. Bosso, G. G. Luciano, L. Petruzziello and F. Scardigli, Class. Quantum Grav. **40**, 195015 (2023).
[5] S. Bhattacharyya, S. Sen and S. Gangopadhyay, Eur. Phys. J. C **84**, 425 (2024).
[6] N. R. Newbury, P. A. Williams and W. C. Swann, Opt. Lett. **32**, 3056 (2007).
[7] G. P. Agrawal, *Fiber-Optic Communication Systems*, 4th ed., Wiley, 2010.

ناپایداری ابرتابشی سیاه‌چاله‌های کر در نظریه نوین چهاربعدی اینشتین–گاؤس–بونه

رحمنی، افسانه

گروه فیزیک، واحد ورامین-پیشوا، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

چکیده

ما ناپایداری سیاه‌چاله‌های کرِ را در برابر اختلالات میدان اسکالرِی جرمدار در چارچوب نظریه‌ی نوین چهاربعدی اینشتین–گاؤس–بونه (EGB) بررسی می‌کنیم. نشان داده می‌شود که پراکندگی ابرتابشی در این نظریه برای بسامدهایی در بازه‌ی $\omega < m\Omega$ رخ می‌دهد و ترم جرمیِ میدان اسکالری به‌عنوان یک مرز آینه‌ای طبیعی عمل کرده و امکان به‌دام افتادن امواج اسکالری را فراهم می‌کند.

در این مطالعه، تأثیر جرم میدان اسکالر و ثابت جفت‌شدگی گاؤس–بونه بر میزان تقویت ناپایداری ابرتابشی بررسی می‌شود. نتایج نشان می‌دهند که ناپایداری ابرتابشی نسبت به مقدار این ثابت بسیار حساس است؛ به‌گونه‌ای که افزایش مقدار ثابت گاؤس–بونه منجر به تشدید ناپایداری ابرتابشی می‌شود. همچنین مشخص می‌گردد که سیاه‌چاله‌های کرِ در ناحیه‌ی $\mu > \sqrt{2}\, m\, \Omega$ در برابراختلالات میدان اسکالرِ جرمدار پایدار هستند و رشد ابرتابشی در این بازه رخ نمی‌دهد.

واژه های کلیدی: *سیاه‌چاله‌های کرِ، پراکندگی ابرتابشی، نظریه‌ی نوین چهاربعدی اینشتین–گاؤس–بونه، ثابت جفت‌شدگی گاؤس–بونه.*

Superradiant instability of Kerr black holes in the novel 4D Einstein-Gauss-Bonnet theory

Rahmani, Afsaneh
Department of Physics, Varamin-Pishva Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

Abstract

We investigate the instability of Kerr black holes under massive scalar perturbations in the novel 4D Einstein-Gauss-Bonnet (EGB) theory. It is shown that superradiant scattering occurs for frequencies in the range $\omega < m\Omega$, and the mass term of the scalar field play the role of a natural mirror boundary. We analyze the effects of the scalar mass and the GB coupling constant on the amplification of superradiant instability. It is found that the instability is highly sensitive to the GB coupling constant, with larger values leading to stronger amplification. Our results also show that Kerr black holes in the regime $\mu > \sqrt{2}m\Omega$ are stable under massive scalar perturbations.

***Key words**: Kerr black holes, superradiant scattering, the novel 4D Einstein-Gauss-Bonnet (EGB) theory, GB coupling constant.*
PACS No. 04.70.-s, 04.70.Bw

مقدمه

بی‌تردید سیاه‌چاله‌ها یکی از هیجان‌انگیزترین پیش‌بینی‌های نسبیت عام به‌شمار می‌آیند و نقشی بنیادی و محوری در اخترفیزیک، فیزیک انرژی‌های بالا و حتی فیزیک ماده‌ی چگال ایفا می‌کنند[۱]. ازاین‌رو، مطالعه‌ی پایداری آن‌ها از اهمیت اساسی برخوردار است. پایداری سیاه‌چاله‌ی کروی–متقارن شوارتزشیلد نخستین بار توسط رجی و ویلر (Regge & Wheeler) بررسی شد[۲] و آن‌ها نشان دادند که چنین سیاه‌چاله‌ای تحت اثر اختلالات پایدار است.

همچنین نشان داده شده است که هنگامی که یک میدان بوزونی با سیاه‌چاله‌ی کِر برخورد می‌کند، موج پراکنده‌شده می‌تواند تقویت شود [۳]. پراکندگی ابرتابشی زمانی رخ می‌دهد که بسامد موج در بازه‌ی $\omega < m\Omega$ قرار گیرد؛ که در آن Ω بسامد زاویه‌ای سیاه‌چاله و m عدد کوانتومی است.

اکنون، اگر سیاه‌چاله توسط یک آینه‌ی بازتابنده احاطه شده باشد، موج میان سیاه‌چاله و آینه به‌صورت پی‌درپی بازتاب می‌یابد و در هر بار بازتاب، دامنه‌ی آن به‌طور نمایی افزایش می‌یابد. در نتیجه، انرژی

کل استخراج‌شده از سیاه‌چاله به‌تدریج افزایش می‌یابد. در برخی موارد، خود ماهیت میدان اسکالری می‌تواند نقش آینه را ایفا کند[٤].

بهبود نسبیت عام می‌تواند از طریق افزایش ابعاد فضا–زمان، افزودن میدان‌های اضافی یا وارد کردن جمله‌هایی با مشتقات بالاتر از متریک انجام شود[٥]. یکی از طبیعی‌ترین بسط‌های نسبیت عام، گرانش لاولاک است که در ابعاد بالاتر تعریف می‌شود[٦]. این نظریه نخستین بار در سال ۱۹۷۱ توسط دیوید لاولاک ارائه شد و ساده‌ترین حالت آن، گرانش اینشتین–گاوس–بونه (EGB) است[٧]. گرانش اینشتین–گاوس–بونه به‌طور گسترده مورد بررسی قرار گرفته است[٨] در حد کم‌انرژی نظریه‌ی ریسمان نیز پدیدار می‌شود[٩].

در چهار بعد، جمله‌ی گاوس–بونه یک مشتق کامل است و سهمی در دینامیک ندارد. اما در نظریه‌ی جدیدی که اخیراً توسط گلاوان و لین پیشنهاد شده است[١٠] ثابت جفت‌شدگی گاوس–بونه به صورت $\alpha \longrightarrow \frac{\alpha}{D-4}$ تعریف می‌شود. این بازتعریف به نظریه اجازه می‌دهد تا از محدودیت‌های لاولاک عبور کند، در چهار بعد از ناپایداری اوستروگرادسکی اجتناب شود و سهمی غیربدیهی در دینامیک گرانش ایجاد شود. این مدل اصلاح‌شده، که به‌عنوان نظریهٔ نوین چهاربعدی اینشتین–گاوس–بونه شناخته می‌شود، در سال‌های اخیر توجه زیادی را به خود جلب کرده است[١١].

شایان ذکر است که فرمول‌بندی اولیه نظریه چهاربعدی اینشتین–گاوس–بونه در سال‌های اخیر از منظر سازگاری ریاضی و به ویژه در ارتباط با تعریف حد (D→4)، مورد بحث و نقد جدی قرار گرفته است [١٢]. در مطالعات متعددی به وجود ناسازگاری‌ها و ابهامات در فرمول‌بندی اولیه این نظریه اشاره شده و در مقابل، چارچوب‌های جایگزین یا تعمیم‌یافته‌ای نیز پیشنهاد شده‌اند [١٣]. در این مقاله، هدف ورود به این مباحث بنیادی یا بررسی اعتبار نظریه نیست. در عوض، از حل سیاه‌چاله کر [١٤] در چارچوب این مدل به‌عنوان یک مدل مؤثر (effective model) استفاده شده و پدیده ابرتابش مورد بررسی قرار گرفته است. بنابراین، نتایج بدست آمده به عنوان تأیید اعتبار بنیادی نظریه نیست، بلکه به‌عنوان نتایج حاصل در یک پس‌زمینه مؤثر مشخص قابل تفسیر هستند و دامنه اعتبار آن‌ها به‌طور مستقیم وابسته به اعتبار همان مدل مورد استفاده است.

در این مقاله، ما به بررسی پدیده‌ی ابرتابش در سیاه‌چاله‌ی کر در چارچوب نظریه‌ی نوین چهاربعدی اینشتین–گاوس–بونه می‌پردازیم و تأثیر ثابت گاوس–بونه بر ناپایداری ابرتابشی این سیاه‌چاله را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. در بخش اول پژوهش، ابتدا حل سیاه‌چالهٔ کر در این چارچوب بررسی می‌شود، سپس پدیدهٔ ابرتابش و شرط وقوع آن در تقریب خطی استخراج می‌گردد و در نهایت، اثر ثابت گاوس–بونه بر ناپایداری ابرتابشی تحلیل می‌شود.

حل سیاه‌چاله‌ی کر در نظریه‌ی نوین چهاربعدی اینشتین–گاوس–بُنه

سیاه‌چاله‌ی چرخان در نسبیت عام چهاربعدی توسط حل کر توصیف می‌شود که با جرم سیاه‌چاله‌ی (M) و تکانه‌ی زاویه‌ای (a) مشخص می‌گردد. ما به دنبال یافتن حل‌های چرخشی ایستا–متقارن محوری در چارچوب نظریه‌ی نوین چهاربعدی EGB هستیم. درمرجع [١٥]، متریک به صورت زیر ارائه شده است:

$$ds^2 = -(\frac{\Delta - a^2\sin^2\theta}{\Sigma})dt^2 + \frac{\Sigma}{\Delta}dr^2 \quad (١)$$
$$-2a\sin^2\theta(1-\frac{\Delta - a^2\sin^2\theta}{\Sigma})dt\,d\phi + \Sigma\,d\theta^2$$
$$+\sin\theta^2[\Sigma + a^2\sin\theta^2(2-\frac{\Delta - a^2\sin^2\theta}{\Sigma})]d\phi^2,$$

که در آن $\Delta = r^2 + a^2 + \frac{r^4}{32\pi\alpha}(1-(1+\frac{128\pi\alpha M}{r^3})^{\frac{1}{2}})$ و $\Sigma = r^2 + a^2\cos^2\theta$. می‌باشد. در حد $\alpha \to 0$ یا در فواصل بسیار بزرگ، این متریک به متریک کرِ استاندارد در نسبیت عام میل می‌کند. سرعت زاویه‌ای موضعی چرخش در این هندسه به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\omega = \frac{d\phi}{dt} = -\frac{g_{t\phi}}{g_{\phi\phi}} = \frac{a(r^2+a^2-\Delta)}{(r^2+a^2)^2 - \Delta\,a^2\sin^2\theta}. \quad (٢)$$

مقدار ω با کاهش r افزایش می‌یابد و در افق رویداد به بیشینه‌ی خود می‌رسد یکی از پارامترهای مهم سیاه‌چاله‌ی چرخان، سرعت زاویه‌ای افق رویداد (Ω)است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\Omega = \omega(r=r_h) = \frac{a}{r_h^2+a^2} = \frac{32\pi\alpha}{r_h^4(-1+(1+\frac{128\pi\alpha M}{r_h^3})^{\frac{1}{2}})} \quad (٣)$$

افق رویداد (r_h) بزرگ‌ترین ریشه‌ی معادله‌ی $\Delta = 0$ است. همان‌طور که در شکل ١ مشاهده می‌شود، افق رویداد به ثابت جفت شدگی گاوس–بُنه (α) وابسته است و با افزایش α، مقدار افق رویداد کاهش می‌یابد.

اختلالات خطی میدان اسکالر جرمدار

برای بررسی پدیده ابرتابش، یک میدان اسکالر جرمدار در اطراف سیاه‌چاله کر در چارچوب نظریهٔ نوین چهاربعدیEGB در نظر گرفته می‌شود. اکشن سیستم به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$S = \frac{1}{2}\int d^Dx\sqrt{-g}(R + \frac{\alpha}{D-4}L_{GB} - g^{ab}\nabla_a\Psi^*\nabla_b\Psi - \mu^2\Psi\Psi^*), \quad (٤)$$

که در آن μ جرم میدان اسکالر است و $8\pi G = C = 1$. ما حد $D \to 4$ را در نظر می‌گیریم. با فرض اینکه بازبرهم کنش میدان اسکالر روی متریک پس زمینه (۱) ناچیز است (اختلالات خطی)، اختلالات کروی- متقارن به صورت زیر ارائه می‌شوند:

$$\Psi = e^{im\phi - i\omega t} S_l^m(\theta) \frac{\psi(r)}{\sqrt{r^2+a^2}} \qquad (۵)$$

که $S_l^m(\theta)$ تابع زاویه‌ای اسفروئیدی است، $\omega = \omega_R + i\omega_I$ فرکانس، l شاخص هارمونیک کروی و m عدد کوانتومی صحیح بین $-l \le m \le l$ است. علامت ω_I نشان‌دهنده پایداری سیاه‌چاله است: اگر $\omega_I < 0$ دامنه مد اسکالر کاهش می‌یابد و سیاه‌چاله پایدار است، در غیر این صورت $(\omega_I > 0)$ دامنه مد با گذر زمان افزایش یافته و سیاه‌چاله ناپایدار می‌شود. معادله‌ی کلاین–گوردن برای اختلالات اسکالر جرمدار به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\nabla^a \nabla_a \psi - \mu^2 \psi = 0. \qquad (۶)$$

با جایگذاری متریک (۱) در معادله (۶) و جداسازی آن به بخش‌های شعاعی و زاویه‌ای، بخش شعاعی به صورت زیر بدست می‌آید:

$$\frac{\Delta}{r^2+a^2}\frac{d}{dr}\frac{\Delta}{r^2+a^2}\frac{d\psi}{dr} + \left[\left(\omega - \frac{ma}{r^2+a^2}\right)^2 - \frac{\Delta}{(r^2+a^2)^2}\left(\lambda + \frac{r\Delta'}{r^2+a^2} - \frac{3\Delta r^2}{(r^2+a^2)^2} + \mu^2 r^2\right)\right]\psi = 0 \qquad (۷)$$

که در آن $\lambda = l(l+1)$ ثابت جداسازی است. با استفاده از تبدیل مختصه لاک پشتی به صورت $\frac{dr_*}{dr} = \frac{r^2+a^2}{\Delta}$ تعریف می‌شود و معادله‌ی شعاعی در قالب یک معادله شبیه به معادله‌ی شرودینگر بازنویسی می‌شود:

$$\frac{d^2\psi}{dr_*^2} + V_{\text{eff}}\psi = 0, \qquad (۸)$$

که پتانسیل مؤثر آن به شکل زیر بیان می‌شود:

$$V_{\text{eff}} = \left(\omega - \frac{ma}{r^2+a^2}\right)^2 - \frac{\Delta}{(r^2+a^2)^2}\left(\lambda + \frac{r\Delta'}{r^2+a^2} - \frac{3\Delta r^2}{(r^2+a^2)^2} + \mu^2 r^2\right) \qquad (۹)$$

لازم به ذکر است که عامل $\frac{\Delta}{r^2+a^2}$ که در عملگر شعاعی (۷) ظاهر می‌شود، به‌طور کامل در تبدیل به مختصات لاک‌پشتی و همچنین در بازتعریف مشتق شعاعی جذب شده است که در نهایت منجر به فرم استاندارد شبیه معادله شرودینگر (۸) می‌گردد. بنابراین، هیچ ترم دینامیکی در تعریف پتانسیل مؤثر حذف نشده است. حل‌های تقریبی در ناحیه‌ی نزدیک افق و در بی‌نهایت فضایی به صورت زیر هستند:

$$\Psi \sim e^{-i\omega t}\frac{e^{ikr_*}}{\sqrt{r^2+a^2}}, \qquad r_* \to -\infty, \qquad (۱۰)$$

$$\Psi \sim \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{r^2+a^2}}\left(A_{\text{in}} e^{-i\sqrt{\omega^2-\mu^2}r_*} + A_{\text{out}} e^{i\sqrt{\omega^2-\mu^2}r_*}\right), \qquad r_* \to +\infty, \qquad (۱۱)$$

که در آن $k = -(\omega - m\Omega)$. ابتدا حالت بدون جرم $(\mu = 0)$ بررسی می‌شود تا محدوده ابرتابش به راحتی مشخص گردد، به طوری که $A_{\text{in}} e^{-i\omega r_*}$ موج ورودی از افق و $A_{\text{out}} e^{i\omega r_*}$ موج خروجی در بی‌نهایت فضایی در نظر گرفته می‌شوند. با استفاده از ثابت بودن رونسکین حل‌ها در افق و بی‌نهایت، رابطه بین ضریب بازتاب و انتقال موج به‌دست می‌آید:

$$|R|^2 = 1 - \frac{\omega - m\Omega}{\omega}|T|^2, \qquad (۱۲)$$

که در صورت برقراری شرط $\omega < m\Omega$ پدیده ابرتابش رخ می‌دهد. در این حالت، سرعت گروهی و سرعت فازی موج اسکالر در افق در جهت‌های مخالف‌اند و انرژی از سیاه‌چاله استخراج می‌شود.

فاکتور تقویت برای میدان اسکالر به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$Z_{0lm} = \frac{|A_{\text{out}}|^2}{|A_{\text{in}}|^2} - 1. \qquad (۱۳)$$

فاکتور تقویت با حل عددی معادله شعاعی از افق تا بی‌نهایت محاسبه می‌شود و نتایج در شکل ۲ نشان می‌دهند که فاکتور تقویت با ثابت جفت شدگی گاؤس-بونه (α) رابطه مستقیم دارد. در محدوده ابرتابش، $Z > 0$ بوده و با افزایش فرکانس (ω) رشد می‌کند تا به مقدار حداکثرخود برسد.

در معادله (۱۰) و (۱۱) باید شرط $\omega < \mu$ در نظر گرفته شود، زیرا جرم میدان اسکالر یک مکانیزم محصورکننده‌ی طبیعی ایجاد می‌کند که مشابه یک آینه بازتابنده عمل کرده و مانع از فرار میدان اسکالر به بی‌نهایت می‌شود. علاوه بر این، شکل شعاعی تابع موج در بی‌نهایت فضایی به صورت $\psi = \frac{e^{-\sqrt{\mu^2-\omega^2}r_*}}{r}$ است، که تضمین می‌کند موج‌ها در بی‌نهایت واگرا نبوده و کاهش یابند. برای بررسی ناپایداری ابرتابش، لازم است یک چاه پتانسیل وجود داشته باشد تا میدان اسکالر در ناحیه‌ی بین افق و بی‌نهایت محبوس شود. در این شرایط، موج‌ها در این ناحیه تجمع کرده و در نهایت می‌توانند منجر به تشکیل مو شوند. با تعریف $\psi = \frac{\sqrt{r^2+a^2}\,R}{\sqrt{\Delta}}$ معادله (۷) به شکل یک معادله موج شبیه به معادله‌ی شرودینگر $R'' + UR = 0$ درمی‌آید، که در آن پتانسیل مؤثر به صورت زیر است:

$$U = \frac{(r^2+a^2)^2(\omega - \frac{ma}{r^2+a^2})^2 - \Delta(\lambda + \mu^2 r^2) - \frac{1}{2}\Delta''\Delta + \frac{\Delta'^2}{4}}{\Delta^2}. \qquad (۱۴)$$

همان‌طور که ذکر شد، ناپایداری سیاه‌چاله در برابر اختلالات میدان اسکالر جرمدار به جرم میدان اسکالر بستگی دارد، زیرا جرم باعث

می‌شود میدان اسکالر در داخل چاه پتانسیل مؤثر خارج از سیاه‌چاله محصور شود. شکل تقریبی پتانسیل مؤثر در بی‌نهایت، با توجه به رفتار Δ و Δ'، به صورت زیر است:

$$U(r) = \omega^2 - \mu^2 + \frac{4M\omega^2 - 2M\mu^2}{r} + \mathcal{O}(1/r^2) \qquad (۱۵)$$

با استفاده از شرط $\omega < \mu$ ومعادله‌ی (۱۵)، می‌توان حالت‌های مقید (bound states) را در بازه‌ی زیر یافت:

$$\frac{\mu^2}{2} < \omega^2 < \mu^2 \qquad (۱۶)$$

وجود چاه پتانسیل به‌صورت عددی بررسی می‌شود، با فرض برقراری شرایط لازم برای تحقق شرط ابرتابش، باید $\omega < m\Omega$ و معادله‌ی (۱۶) برقرار باشند. برای نشان دادن تقویت ناپایداری، پتانسیل U به صورت تابعی از r رسم می‌شود همان‌طور که در شکل ۳ مشاهده می‌شود، افزایش جرم اسکالر باعث افزایش عمق چاه پتانسیل شده و ناپایداری ابرتابش تقویت می‌شود. همچنین، شکل ٤ نشان می‌دهد که با افزایش ثابت جفت‌شدگی GB، ناپایداری ابرتابش نیز تقویت می‌گردد.

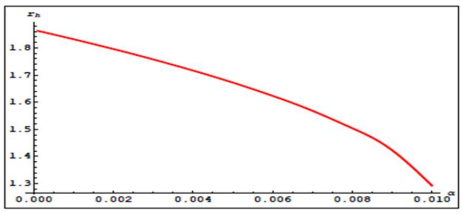
نتیجه گیری

ما نشان داده‌ایم که هنگامی که یک میدان اسکالر جرمدار به سمت یک سیاه‌چالهٔ کر (Kerr) در چارچوب نظریهٔ نوین چهاربعدی EGB فرستاده می‌شود، اگر $\omega < m\Omega$، دامنه موج پراکنده افزایش می‌یابد. علاوه بر این، جرم میدان اسکالر می‌تواند نقش یک آینه‌ی بازتابنده را ایفا کند، به شرطی که $\frac{\mu}{\sqrt{2}} < \omega < \mu$ باشد در غیر این صورت، اگر $\sqrt{2}\,\omega < \mu$، هیچ ناپایداری ابرتابشی رخ نخواهد داد.

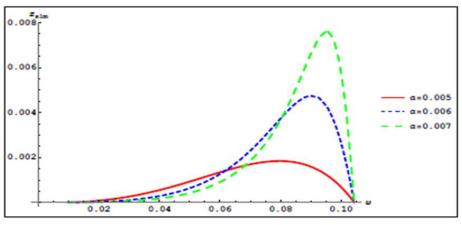
نتایج نشـــان می‌دهند که افزایش جرم میدان اســـکالر و ثابت جفت شـدگی GB باعث افزایش عمق چاه پتانسـیل می‌شـود، به طوری که میدان اسکالر بهتر در آن محبوس شـده و ناپایداری ابرتابشی تقویت می‌گردد. همچنین، نشـــان داده شـــده اســـت که فاکتور تقویت در محدوده ابرتابشـــی مثبت اســـت و با افزایش ω رشـــد می‌کند و در مقادیر بزرگ ω به مقدار حداکثر خود می‌رســـد. تأکید می‌شـــود که نتایج این پژوهش در چارچوب فرمول‌بندی نوین چهاربعدی EGB به دست آمده‌اند و اعتبار آن‌ها وابسته به اعتبار این مدل مؤثر است.

مرجع‌ها

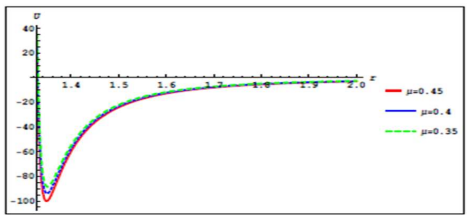
[1] P. K. Townsend, *Lect. Notes. Phys*, arXiv:9707012 [gr-qc].
[2]. T. Regge, J. A. Wheeler, *Phys. Rev*. **108**,1063 (1957).
[3] R. Brito, V. Cardoso, P. Pani, *Lect. Notes. Phys.* **906**, 1 (2015), arXiv:1501.06570 [gr-qc].
[4] S. Hod, *Phys. Lett. B* **708**, 320 (2012), arXiv:1205.1872[gr-qc].
[5] L. G. Jaime, L. Patino, M. Salgado, *Phys. Rev. D* **83**, 024039 (2011), arXiv:1006.5747[gr-qc].
[6] D. Lovelock, J. *Math. Phys. (N.Y.)* **12**, 498 (1971).
[7] C. Lanczos, Annals Math. **39**, 842(1938).
[8] O. Fierro, N. Grandi, J. Oliva, Class. Quant. Grav **35**, 105007 (2018), arXiv:1708.06037 [hep-th].
[9] N. Grandi, I. S. Landea, *Phys. Rev. D* **97**, 044042 (2018), arXiv:1711.01643 [gr-qc].
[10] D. Glavan, C. Lin, *Phys. Rev. Lett* \textbf{**124**}, 081301 (2020), arXiv:1905.03601 [gr-qc].
[11] M. Heydari-Fard, M. Heydari-Fard, H. R. Sepangi, arXiv:2004.02140 [gr-qc].
[12] W.Y. Ai, Commun. *Theor.Phys.* \textbf{**72**}, 095402 (2020).
[13] M. Gurses, T. C. Sisman and B. Tekin, Eur. Phys. J. C 80,647(2020); A. Arrechea, A. Delhom and A. Jiménez-Cano, Chin. Phys. C 45, 013107 (2021); H. Lü, Y. Pang, Phys. Lett. B 809, 135717 (2020).
[14] S. G. Ghosh, R. Kumar, arXiv:2003.12291 [gr-qc]}.



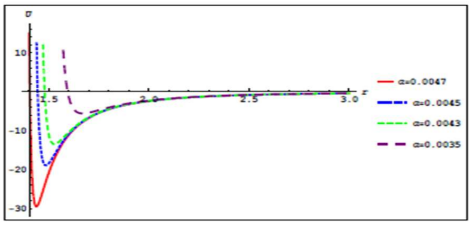
شکل ۱.افق رویداد r_h به‌عنوان تابعی از α برای مقادیر $M = 1$ و $a = 0.5$.



شکل ۲. فاکتور تقویت Z_{011} به عنوان تابعی از ω برای مقادیر مختلف ثابت جفت شدگیGB، با $M = 1$ و $a = 0.4$.



شکل۳. نمودار پتانسیل شعاعی $U(r)$ برای $M = 1$، $m = 1$، $a = 0.7$ و $\alpha = 0.005$ با مقادیر مختلف جرم میدان اسکالر.



شکل ٤. نمودار پتانسیل شعاعی $U(r)$ برای $M = 1$، $m = 1$، $a = 0.7$، $\mu =$ 0.3 با مقادیر مختلف ثابت جفت شدگی GB.

مقیدسازی کیهانشناسی کانیاداکیس با استفاده از هسته سازی مهبانگ

آوا شهبازی[۱]، احمد شیخی[۲و۱]

[۱]بخش فیزیک، دانشکده‌علوم، دانشگاه شیراز

[۲]رصدخانه ابوریحان بیرونی، دانشکده‌علوم، دانشگاه شیراز

چکیده

در این مقاله، هسته‌سازی مهبانگ اولیه کیهانی را در پس زمینه کیهانشناسی کانیاداکیس مطالعه می کنیم. در این راستا، روشی برای تعیین کران‌های پارامتر کانیاداکیس و دوگان آن که با نماد K و K^* مشخص می‌شود، ارائه می‌دهیم که مبتنی بر بررسی تأثیر کیهان‌شناسی کانیاداکیس و حالت دوگان آن بر فراوانی‌های اولیه‌ی عناصر سبک، یعنی هلیوم(^4He) ، دوتریوم (^2H) و لیتیوم (^7Li) است. تحلیل ما نشان می‌دهد که بازه‌های به‌دست‌آمده برای پارامتر دوگان کانیاداکیس، برخلاف پارامتر کانیاداکیس، برای عناصر سبک یادشده هم‌پوشانی دارند و مقادیر مجاز آن در بازه ی مشترک $-0.8\times10^{-78}\lesssim\tilde{K}^*\lesssim0.8\times10^{-78}$ قرار می‌گیرد. این نتیجه نشان می‌دهد که انحراف از فرمول متعارف بکنشتاین–هاوکینگ، همان‌گونه که انتظار می‌رود، بسیار ناچیز است. این سازگاری میان بازه‌ها می‌تواند راه‌حلی بالقوه برای مسئله ی شناخته‌شده ی لیتیوم فراهم کند.

Constraining Kaniadakis cosmology through Big-Bang nucleosynthesis

A.Shahbazi, A. Sheykhi

Department of Physics, College of Science, Shiraz University

Biruni Observatory, College of Science, Shiraz University

Abstract

In this paper, we study Big-Bang Nucleosynthesis in the context of (dual) Kaniadakis cosmology. We explore an alternative method to establish limits on the Kaniadakis parameter, denoted as K, by examining how (dual) Kaniadakis cosmology influences the primordial abundances of light elements i.e. Helium ^4He, Deuterium ^2H and Lithium ^7Li. Our analysis indicates that the obtained ranges for the dual Kaniadakis parameter (unlike the Kaniadakis parameter) exhibit overlap for the aforementioned light elements, and the allowed values fall within the range $-0.8\times10^{-78}\lesssim\tilde{K}^*\lesssim0.8\times10^{-78}$, which shows that the deviations from the conventional Bekenstein-Hawking formula are minimal, as expected. This consistency between the ranges suggests a potential solution to the well-known *Lithium problem*.

مقدمه

تناظر بین ترمودینامیک و گرانش که ایده آن از ترمودینامیک سیاهچاله ها شروع شد [۱،۲]، امروزه یکی از مباحث داغ فیزیک نظری محسوب می شود. مقاله جاکوبسون در سال ۱۹۹۵ نقطه عطفی در تایید این تناظر بود، چرا که وی نشان داد معادلات گرانش اینشتین را می توان از قانون اول ترمودینامیک بدست آورد [۳]. این مطالعات به پس زمینه کیهان شناسی هم گسترش یافت و نشان داده شد که معادلات فریدمان را می توان بصورت قانون اول ترمودینامیک روی افق کیهان نوشت [٤،٥]. نکته‌ی کلیدی آن است که تمامی این رویکردها دارای یک ویژگی مشترک هستند: شکل آنتروپی، روی معادلات گرانش اصلاح شده از رهیافت ترمودینامیک اثر می گذارد. به بیان دیگر، تغییر درآنتروپی به‌طور اجتناب‌ناپذیر به تغییر در معادلات میدان گرانشی منجر خواهد شد. در این راستا، یکی از تعمیم‌های آنتروپی، آنتروپی کانیاداکیس و صورت دوگان آن است. بر پایه‌ی تناظر میان ترمودینامیک و گرانش، این فرم اصلاح‌شده از آنتروپی می‌تواند به شکل جدیدی از معادلات فریدمان منجر شود که بررسی پیامد های کیهان شناسی آن حایز اهمیت است [٦].

از طرف دیگر هسته‌سازی اولیه‌ی مهبانگ به فرآیند تشکیل هسته‌های سبک در نخستین لحظات پس از مهبانگ اطلاق می‌شود؛ دوره‌ای که کیهان در شرایطی بسیار داغ و چگال قرار داشت. پیش‌بینی موفق فراوانی اولیه‌ی عناصر سبک، یکی از دستاوردهای مهم مدل استاندارد کیهان‌شناسی به شمار می‌رود. هسته‌سازی اولیه معتبرترین ابزار برای کاوش کیهان اولیه در چارچوب این مدل است، زیرا فراوانی هسته‌های سبکی که در سه دقیقه‌ی

نخست پس از مهبانگ سنتز شده‌اند، با مقادیر استنباط‌شده از داده‌های رصدی تطابق قابل‌توجهی دارد. با این حال، فراوانی مشاهده‌شده‌ی لیتیوم اولیه به‌طور معناداری کمتر از مقدار پیش‌بینی‌شده توسط مدل استاندارد هسته‌سازی اولیه است که به «مسئله‌ی لیتیوم» معروف می‌باشد. از این‌رو، هسته‌سازی اولیه محدودیت‌های قدرتمندی بر انحرافات احتمالی از کیهان‌شناسی استاندارد و نیز سناریوهای فیزیک نوین اعمال می‌کند. در این مقاله با استفاده از داده های هسته زایی اولیه مهبانگ قید هایی بر کیهانشناسی (دوگان) کانیاداکیس اعمال کرده و مسئله‌ی شناخته‌شده‌ی لیتیوم را در این چارچوب بررسی می کنیم.

کیهانشناسی (دوگان) کانیاداکیس

آنتروپی کانیاداکیس به‌عنوان تعمیمی یک‌پارامتری از آنتروپی بولتزمن–گیبس–شانون معرفی می‌شود که با هدف توصیف انحراف از مکانیک آماری استاندارد ارائه شده است. این آنتروپی دارای پارامتر بدون بُعد K در بازه ی $-1 < K < 1$ است که میزان این انحراف را تعیین می‌کند [۷].

کاربرد آنتروپی کانیاداکیس در ترمودینامیک سیاه‌چاله‌ها نشان می‌دهد که این چارچوب منجر به اصلاحاتی در قانون مساحت آنتروپی بکنشتاین–هاوکینگ می‌شود. با این حال، در سامانه‌های گرانشی طبیعی‌تر آن است که آنتروپی مستقیماً با لگاریتم تعداد ریزحالت‌ها مرتبط باشد. به همین دلیل، نسخه‌ی دوگان آنتروپی کانیاداکیس معرفی می‌شود تا ضمن حفظ ساختار لگاریتمی آنتروپی کلاسیک، اثرات تغییرشکل‌یافتگی ناشی از پارامتر K را در قالب تصحیحات غیرخطی وارد کند [۸]. این تعریف دوگان علاوه بر داشتن حد صحیح بولتزمن–گیبس، منجر به اصلاحی با علامت منفی در بسط آنتروپی می‌شود که از دیدگاه فیزیکی می‌تواند به‌عنوان اثرات گرانش اصلاح‌شده یا تصحیحات کوانتومی تفسیر گردد. همچنین نشان داده شده است که این فرم دوگان می‌تواند منشأ ترمودینامیکی مناسبی برای نظریه‌های گرانش اصلاح‌شده نظیر *MOND* فراهم آورد. بررسی بسط تیلور این آنتروپی‌ها در حد پارامتر های کوچک $K \ll 1$ نشان می‌دهد که جمله‌ی اصلاحی مرتبه اول، متناسب با توان سوم آنتروپی استاندارد است و علامت آن در حالت دوگان معکوس می‌شود. در نهایت، هر دو حالت آنتروپی کانیاداکیس و آنتروپی دوگان آن را می‌توان به‌صورت یک بیان واحد، تا مرتبه‌ی اول تصحیح، به شکل زیر نوشت [۸]

$$S_K = S_{BH} \pm \frac{K^2}{6} S_{BH}^3 + \mathcal{O}(K^4) \qquad (۱)$$

که در آن علامت «+» مربوط به آنتروپی کانیاداکیس و علامت «−» مربوط به آنتروپی کانیاداکیس دوگان است، و S_{BH} آنتروپی بکنشتاین–هاوکینگ می‌باشد. معادله فریدمان اصلاح‌شده بر اساس آنتروپی کانیادکیس به‌صورت زیر به‌دست می‌آید [۶]

$$H^2 + \frac{k}{a^2} \mp \lambda \left(H^2 + \frac{k}{a^2}\right)^{-1} = \frac{8\pi G}{3}\rho. \qquad (۲)$$

که در آن $\lambda = \frac{K^2\pi^2}{12G^2}$ و علامت «+» متناظر با آنتروپی کانیاداکیس و علامت «−» متناظر با آنتروپی دوگان آن می‌باشد. همچنین در حد $\lambda \to 0$ معادله فریدمان به فرم استاندارد خود بازمی‌گردد.

قیدگذاری کیهانشناسی کانیاداکیس با استفاده از فراوانی عناصر سبک

هدف ما در این بخش اعمال قید های مشاهداتی با استفاده از داده های هسته زایی مهبانگ بر کیهانشناسی (دوگان) کانیاداکیس است. در این رهیافت اثرات کیهانشناسی کانیاداکیس را بر فراوانی عناصر سبک اولیه بررسی می کنیم. از داده های رصدی مربوط به فراوانی عناصر ذکر شده برای محدود سازی K استفاده می کنیم. ایده‌ی اصلی این است که به‌جای استفاده از فاکتور تقویت استاندارد Z، که معمولاً به تعداد مؤثر نوترینوها مربوط می‌شود، از ضریب اصلاح‌شده‌ی $Z(T)$ در کیهانشناسی (دوگان) کانیاداکیس استفاده کنیم. به منظور محاسبه مقدار نظری ضریب تقویت Z(T) ، در گام اول معادله فریدمان اصلاح شده با آنتروپی کانیاداکیس را می توان به صورت زیر نوشت

$$H(T) \equiv Z(T)\, H_{\mathrm{GR}}(T) \qquad (۳)$$

مشخص است که Z معیاری از انحراف از مدل استاندارد کیهانشناسی است و در حالتیکه $Z=1$ داریم $H \to H_{GR}=\sqrt{\frac{8\pi}{3M_p^2}\rho(T)}$ و پارامتر هابل در کیهانشناسی استاندارد بازیابی می شود. حال ضریب Z با تقسیم پارامتر هابل اصلاح شده در کیهانشناسی کانیاداکیس بر H_{GR} بدست می آید. با استفاده از رابطه‌ی (۲)، معادله‌ی فریدمن اصلاح‌شده که از آنتروپی کانیاداکیس (و دوگان آن) در جهان تخت ($k=0$) به‌دست می‌آید، به‌صورت زیر نوشته می‌شود

$$H^2 \mp \lambda H^{-2} = \frac{8\pi G}{3}(\rho + \rho_\Lambda). \qquad (٤)$$

با حل معادله ی بالا برای H عبارت زیر برای پارامتر هابل به‌دست می‌آید که از آن‌جا که پارامتر K بسیار کوچک است، آن را بسط داد و پارامتر هابل اصلاح‌شده را به صورت زیر نوشت

$$H^2 = H_{\rm GR}^2 \mp \frac{\lambda}{H_{\rm GR}^2} \Rightarrow \qquad H = \left(H_{\rm GR}^2 \mp \frac{\lambda}{H_{\rm GR}^2}\right)^{1/2}. \qquad (٥)$$

که در آن علامت منفی مربوط به آنتروپی کانیاداکیس و علامت مثبت مربوط به آنتروپی دوگان کانیاداکیس است. بنابراین ضریب تقویت‌کننده $Z(T)$ به شکل زیر بدست می آید

$$Z(T) \equiv \frac{H}{H_{\rm GR}(T)} = \left(1 \mp \frac{\lambda}{H_{\rm GR}^4}\right)^{1/2} \simeq 1 \mp \frac{\lambda}{2H_{\rm GR}^4}. \qquad (٦)$$

با جایگذاری چگالی انرژی ذرات نسبیتی $\rho(T)=\frac{\pi^2}{30}g_* T^4$ که در آن $g_* \sim 10$ تعداد درجات آزادی مؤثر و T دما است [۹]. ، همچنین با در نظر گرفتن جرم پلانک کاهیده $M_p = (8\pi G)^{-\frac{1}{2}} \simeq 2.4 \times 10^{18}\ \text{GeV}$ و جایگذاری $\lambda = \frac{K^2\pi^2}{12G^2}$ ضریب تقویت‌کننده $Z(T)$ به صورت زیر بدست می آید

$$Z(T) = 1 \mp \frac{2025}{384\pi^4}\frac{K^2}{g_*^2 G^4 T^8}. \qquad (٧)$$

در این رابطه، علامت منفی مربوط به کیهان‌شناسی کانیاداکیس و علامت مثبت مربوط به نسخه‌ی دوگان آن است. همان‌طور که انتظار می‌رود، در حد $K=0$، ضریب تقویت‌کننده به $Z(T)=1$ کاهش می‌یابد و حد نسبیت عام بازیابی می‌شود.

در ادامه، به بررسی قیود وارد بر پارامتر کانیاداکیس K و پارامتر دوگان آن K^* از طریق مطالعه‌ی تأثیر کیهان‌شناسی کانیاداکیس (و نسخه‌ی دوگان آن) بر فراوانی عناصر سبک اولیه می‌پردازیم. با مقایسه‌ی پیش‌بینی‌های نظری با داده‌های رصدی مربوط به فراوانی این عناصر، می‌توان کرانهایی بر روی پارامترهای K و K^* به‌دست آورد.

الف) فراوانی هلیوم ^4He می توان برازش های ساده و خطی برای فراوانی های پیش بینی شده مدل استاندارد به صورت تابعی از پارامتر های Z و η_{10} یافت [۹]. با برابر قرار دادن مقدار تجربی فراوانی ^4He با مقدار نظری آن در برازش های مقدار مجاز برای ضریب تقویت Z با اعمال قید های هسته سازی اولیه بدست می آید [۹]

$$Z = 1.0475 \pm 0.105 \qquad (٨)$$

ب) *فراوانی دوتریوم* ^2H به‌طور مشابه، مقدار ضریب Z را می‌توان از جایگذاری مقدار تجربی فراوانی دوتریوم دربهترین برازش عددی محاسبه کرد که نتیجه‌ی آن به صورت زیر است [۹]

$$\mathrm{Z} = 1.062 \pm 0.444 \qquad (٩)$$

ج) *فراوانی لیتیوم* $^{7}\mathrm{Li}$ نسبت مقدار پیش بینی شده فراوانی لیتیوم در مدل استاندارد کیهانشناسی به مقدار بدست آمده از داده های رصدی در بازه $\frac{\mathrm{Li}|_{\mathrm{GR}}}{\mathrm{Li}|_{\mathrm{obs}}} \in [2.4-4.3]$ قرار دارد[۱۰] به‌طور شگفت‌انگیزی، هیچ‌یک از سناریوهای شناخته‌شده‌ی هسته‌زایی ـ چه مدل استاندارد، چه نسخه‌های اصلاح‌شده‌ی آن تاکنون نتوانسته‌اند مقدار کم مشاهده‌شده‌ی لیتیوم-۷ را توضیح دهند. این ناسازگاری به‌عنوان ***مسئله‌ی لیتیوم*** که یکی از مشکلات مهم در کیهانشناسی معاصراست، شناخته می شود. با اعمال شرط سازگاری میان مقدار مشاهده‌شده‌ی فراوانی لیتیوم و بهترین برازش عددی، مقادیر مجاز Z بدست می آید[۹]

$$Z = 1.960025 \pm 0.076675 \qquad (۱۰)$$

این محدودیت به‌دست‌آمده با نتایج حاصل از فراوانی دوتریم و هلیوم در روابط (۸) و (۹) سازگار نیست.

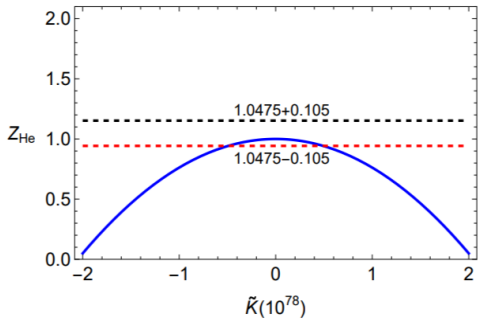
بحث در نتایج

در این بخش، نتایج به‌دست‌آمده را بررسی کرده و کران‌های حاصل برای پارامتر کانیاداکیس و پارامتر دوگان آن را استخراج می‌کنیم. برای اعمال محدودیت بر پارامتر (دوگان) کانیاداکیس باید مقداری که از مشاهدات برای ضریب Z برای عناصر سبک بدست آمد را با مقدار نظری آن در رابطه (۷) مقایسه کنیم. در شکل (۱)، رابطه‌ی (۷) را با در نظر گرفتن علامت منفی (مربوط به کیهان‌شناسی کانیاداکیس) برای دمای انجماد $T_f = 1MeV$ برای هلیوم ترسیم کرده ایم. همان‌طور که از قیود رصدی مربوط به فراوانی ^{4}He مشاهده می‌شود، پارامتر بازمقیاس‌شده‌ی کانیاداکیس $\tilde{K} = K/10^{-9}$ در بازه ی زیر محدود می شود

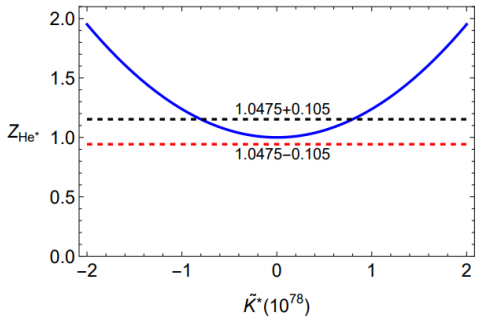
$$-0.49 \times 10^{-78} \lesssim \tilde{K} \lesssim 0.49 \times 10^{-78}. \qquad (۱۱)$$

محدودیت فراوانی هلیوم بر پارامتر دوگان کانیاداکیس در شکل (۲) نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که پارامتر دوگان کانیاداکیس در بازه‌ی زیر قرار دارد

$$-0.8 \times 10^{-78} \lesssim \tilde{K}^{*} \lesssim 0.8 \times 10^{-78}. \qquad (۱۲)$$



شکل (۱): Z_{He} بر حسب $\tilde{K}$ به ازای دما ی $T_f = 1MeV$.



شکل (۲): Z_{He} بر حسب $\tilde{K}^{*}$ به ازای دما ی $T_f = 1MeV$.

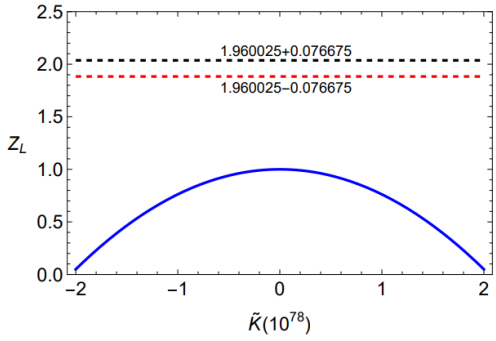
نتایج مربوط به دوتریم با استفاده از رابطه‌ی (۹) و در نظر گرفتن علامت منفی در رابطه‌ی (۷) در شکل (۳) ارائه شده است. محدوده‌ی مجاز پارامتر کانیاداکیس به صورت زیر است

$$-1.27 \times 10^{-78} \lesssim \tilde{K} \lesssim 1.27 \times 10^{-78}. \qquad (۱۳)$$

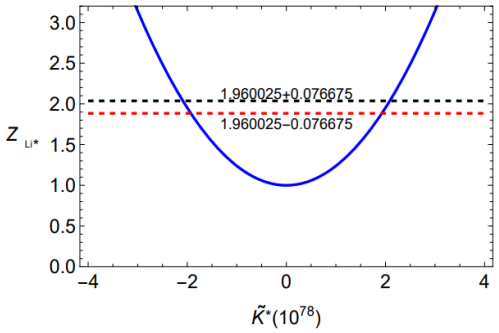
لازم به ذکر است که بازه‌ی مجاز $\tilde{K}$ حاصل از دوتریم (۱۳) با بازه‌ی به‌دست‌آمده از ^{4}He که در رابطه‌ی (۱۱) آمده است، سازگار است.

نتایج مربوط به محدودیت فراوانی دوتریوم بر پارامتر پارامتر دوگان کانیاداکیس نیز در شکل (٤) نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که این پارامتر در بازه‌ی زیر قرار دارد

$$-1.46 \times 10^{-78} \lesssim \tilde{K}^{*} \lesssim 1.46 \times 10^{-78}. \qquad (۱٤)$$



شکل(۳): Z_D بر حسب $\tilde{K}$ به ازای دما ی $T_f = 1MeV$.

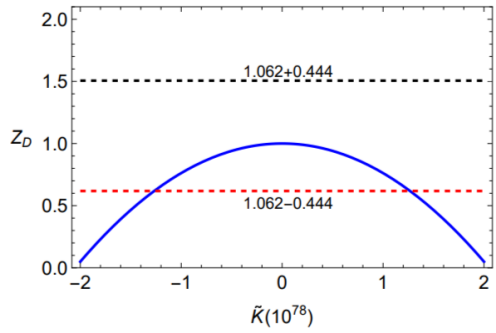


شکل (٤): Z_D بر حسب $\tilde{K}^*$ به ازای دما ی $T_f = 1MeV$.

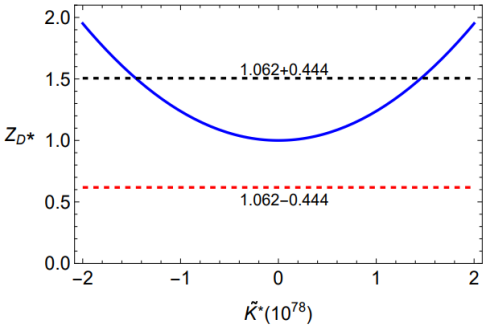
همچنین مشاهده می‌شود که بازه‌ی مجاز $\tilde{K}^*$ حاصل از دوتریم (١٤) با بازه‌ی به‌دست‌آمده از ^4He که در رابطه‌ی (١٢) آمده، سازگار است. در مورد لیتیوم، همان‌طور که در شکل (٥) دیده می‌شود، نتایج به‌دست‌آمده از فراوانی اولیه‌ی لیتیوم پارامتر کانیاداکیس $\tilde{K}$ را در بازه ی مشخصی محدود نمی کند.

نتایج مربوط به پارامتر دوگان کانیاداکیس در شکل(٦) نشان داده شده است. نمودار نشان می‌دهد که بازه‌ی $\tilde{K}^*$ برای $^7\boldsymbol{Li}$ با قیود حاصل از فراوانی ^4He و ^2H که در روابط (١٢) و (١٤) آمده است هم‌پوشانی دارد

$$-2.09 \times 10^{-78} \lesssim \tilde{K}^* \lesssim 2.09 \times 10^{-78}. \qquad (١٥)$$



شکل (٥): Z_{Li} بر حسب $\tilde{K}$ به ازای دما ی $T_f = 1MeV$.



شکل (٦): Z_{Li} بر حسب $\tilde{K}^*$ به ازای دما ی $T_f = 1MeV$.

بنابراین، بازه‌ی مجاز برای پارامتر دوگان کانیاداکیس، بر اساس فراوانی مشاهده‌شده‌ی عناصر سبک، همان ناحیه‌ی هم‌پوشانی بازه‌های (١٢)، (١٤) و (١٥) است. از این رو، مقادیر قابل قبول برای پارامتر دوگان کانیاداکیس با رابطه‌ی (١٢) داده می‌شوند. بنابراین به ازای بازه ی مجاز مشترک $-0.8 \times 10^{-78} \lesssim \tilde{K}^* \lesssim 0.8 \times 10^{-78}$ فراوانی سه عنصر سبک هلیوم ^4He، لیتیوم ^7Li و دوتریوم ^2H قابل توضیح می باشد. این موضوع امکان بررسی مشکل لیتیوم را در چارچوب کیهانشناسی دوگان کانیاداکیس مطرح می کند. از طرفی همان‌طور که پیش‌بینی می‌شد، انحراف مقادیر مجاز پارامتر (دوگان) کانیاداکیس از بیان استاندارد بکنشتاین–هاوکینگ بسیار کوچک است.

نتیجه‌گیری

در این مقاله از داده های هسته سازی اولیه مهبانگ برای قید گذاری بر روی پارامتر آزاد مدل(دوگان) کانیاداکیس استفاده کردیم. از رهیافتی استفاده کردیم که در آن اثرات کیهانشناسی (دوگان) کانیاداکیس را بر فراوانی عناصر سبک دوتریوم، لیتیوم و هلیوم بررسی کرده و با جایگذاری ضریب تقویت Z بدست آمده برای کیهانشناسی (دوگان) کانیاداکیس در بهترین تناسب های عددی بدست آمده از فراوانی عناصر سبک، پارامتر $\boldsymbol{K}$ و $\boldsymbol{K^*}$ را قیدگذاری کردیم. نتیجه گرفتیم که بازه ی مجاز پارامتر کانیاداکیس $\boldsymbol{K}$ بدست آمده از فراوانی عناصر $\boldsymbol{^4He}$ و $\boldsymbol{^2H}$ با هم همپوشانی دارند در حالیکه با بازه ی بدست آمده برای لیتیوم هرچند که بسیار نزدیک اند اما همپوشانی ندارند. با این حال بازه‌های مجاز به‌دست‌آمده برای پارامتر دوگان کانیاداکیس $\boldsymbol{K^*}$ بدست آمده از فراوانی‌های اولیه‌ی عناصر سبک، هم‌پوشانی قابل‌توجهی دارند. در نتیجه، بازه‌ی مجاز رصدی این پارامتر در اشتراک بازه‌های مربوطه قرار گرفته و در بازه ی $-0.8 \times \boldsymbol{10^{-78}} \lesssim \tilde{\boldsymbol{K}}^* \lesssim 0.8 \times \boldsymbol{10^{-78}}$ قرار میگیرد. این نتیجه نشان می‌دهد که انحراف از مدل استاندارد کیهان‌شناسی بسیار ناچیز است. افزون بر این، سازگاری بازه‌های مجاز پارامتر دوگان کانیاداکیس که از عناصر سبک مختلف به‌دست آمده‌اند، می‌تواند به‌عنوان نشانه‌ای از امکان کاهش مسئله‌ی شناخته‌شده‌ی لیتیوم تلقی شود، بدون آنکه نیاز به اصلاحات اخترفیزیکی اضافی باشد.

مرجع‌ها

[1] J. M. Bardeen, B. Carter, S. Hawking, *The four laws of black hole mechanics*, Commun. Math. Phys. **31**, 161 (1973).
[2] J. D. Bekenstein, *Black holes and entropy*, Phys. Rev. D **7**, 2333 (1973).
[3] Jacobson, Thermodynamics of spacetime: *The Einstein equation of state*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1260 (1995).
[4] R. G. Cai and S. P. Kim, *First Law of Thermodynamis and Friedmann Equations of Friedmann-Robertson-Walker Universe,* JHEP **0502**, 050 (2005).
[5] M. Akbar and R. G. Cai, *Thermodynamic behavior of the Friedmann equation at the apparent horizon of the FRW universe,* Phys. Rev. D **75**, 084003 (2007).
[6] A. Sheykhi, *Corrections to Friedmann equations inspired by Kaniadakis entropy*, Phys. Lett. B **850**, 138495 (2024).
[7] G. Kaniadakis, *Statistical mechanics in the context of special relativity*, Phys. Rev. E **66**, 056125 (2002).
[8] M. Kord Zangeneh, A. Sheykhi, *Modified cosmology through Kaniadakis entropy*, Mod. Phys. Lett. A **39**, 2450138 (2024).
[9] Ghoshal, G. Lambisae, *Constraints on Tsallis cosmology from big bang nucleosynthesis and dark matter freeze-out*, (2021), [arX:2104.11296].
[10] S. Boran and E. O. Kahya,*Testing a dilaton gravity model using nucleosynthesis* Adv. High Energy Phys. **1**, 282675 (2014).

شواهدی بر جهان باز در داده‌های اخیر کیهان‌شناسی

طالبیان، علیرضا[۱و۲]؛ رضازاده، کاظم [۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی، ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱، تهران، ایران

[۲] پژوهشکده نجوم، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی(IPM) ، تهران، ایران

چکیده

داده‌های جدید DESI DR2 نشانه‌هایی از انرژی تاریک پویا را تقویت کرده‌اند. در این پژوهش، با تحلیل این داده‌ها همراه پیش‌توزیع‌های پلانک، و ابرنواخترهای DESY5 نشان می‌دهیم که یک جهان باز به طور مشخص بر جهان تخت ترجیح داده می‌شود. دو مدل ΛCDM و $m^2\phi^2$ به عنوان ساده‌ترین مدل انرژی تاریک پویا در دو حالت تخت و غیرتخت بررسی شده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که در هر دو مدل، جهان باز با سطح اطمینانی در حدود 3σ بر جهان تخت برتری دارد و مقدار بهینه پارامتر انحنا تقریباً $\Omega_K \sim 0.0036$ به دست می‌آید. همچنین مدل $m^2\phi^2$ غیرتخت، برازش بهتری نسبت به ΛCDM غیرتخت دارد. این یافته فرض استاندارد تخت بودن جهان را به چالش می‌کشد و نیاز به بازنگری در مدل‌های تورمی را گوشزد می‌کند.

واژه‌های کلیدی: *کیهان‌شناسی، جهان باز، انرژی تاریک، انبساط شتاب‌دار، ریزموج زمینه کیهانی*

Evidence for an Open Universe from Recent Cosmological Data

Talebian, Alireza[1, 2]; Rezazadeh, Kazem[2]

[1] *Department of Physics, Shahid Beheshti University, 1983969411, Tehran, Iran*

[2] *School of Astronomy, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), Tehran, Iran*

Abstract

The new DESI DR2 data have strengthened the hints of dynamical dark energy. In this work, by analyzing these data together with Planck distance priors and DESY5 supernovae, we show that an open universe is distinctly preferred over a flat universe. Two models, ΛCDM and $m^2\phi^2$ as the simplest model of dynamical dark energy, are investigated in both flat and non-flat geometries. Our results indicate that, for both models, an open universe is favored over a flat universe at approximately 3σ confidence level, with the best-fit curvature parameter being $\Omega_K \sim 0.0036$. Furthermore, the non-flat $m^2\phi^2$ model provides a slightly better fit than non-flat ΛCDM, offering weak evidence in favor of dynamical dark energy. This finding challenges the standard assumption of a flat universe and calls for a reassessment of inflationary models.

***Keywords**: Cosmology, Open Universe, Dark Energy, Accelerated Expansion, DESI, CMB*
PACS No. 98

۱. مقدمه

نتایج جدید دور دوم داده‌های طیف‌نگار انرژی تاریک (DESI DR2) بار دیگر تأیید کرد که جهان با شتاب در حال انبساط است [1]. این موضوع مستقل از این است که مکانیسم پشت این شتاب، ثابت کیهانی Λ در مدل استاندارد ΛCDM باشد یا یک میدان پویا تحت عنوان انرژی تاریک. نکته مهم این است که نتایج جدید DESI نخستین نشانه‌های قوی از انحراف از ثابت کیهانی را ارائه می‌دهند [1]. در کنار ماهیت انرژی تاریک، یکی از بنیادی‌ترین پرسش‌های کیهان‌شناسی، هندسه فضایی جهان است. مدل‌های تورمی استاندارد، جهان تخت ($\Omega_K = 0$) را با دقت بسیار بالا پیش‌بینی می‌کنند. با این حال، داده‌های رصدی در سال‌های اخیر نشانه‌هایی از انحنای غیرصفر را گزارش کرده‌اند. به عنوان مثال، داده‌های پلانک 2018 میل ملایمی به جهان بسته $\Omega_K < 0$ نشان دادند [2]. در این پژوهش، به بررسی امکان دیگر یعنی جهان باز ($\Omega_K > 0$) می‌پردازیم که کمتر مورد توجه قرار گرفته است. پرسش اصلی ما این است که آیا داده‌های جدید DESI، در ترکیب با داده‌های دیگر، جهان باز را بر جهان تخت ترجیح می‌دهند یا خیر. برای پاسخ به این پرسش، ما دو مدل اصلی را تحلیل می‌کنیم: نخست مدل استاندارد ΛCDM با ثابت کیهانی، و دوم ساده‌ترین مدل فیزیکی انرژی تاریک پویا یعنی میدان نرده‌ای $m^2\phi^2$ با پتانسیل درجه دو. هر دو مدل در دو حالت هندسه تخت (با فرض $\Omega_K = 0$) و هندسه غیرتخت (با Ω_K آزاد) بررسی می‌شوند. این رویکرد به ما امکان می‌دهد تا به طور همزمان هم نقش انرژی تاریک پویا و هم نقش هندسه باز را در برازش به داده‌ها ارزیابی کنیم.

۲. مدل‌ها

کنش توصیف‌کننده مدل ما به صورت زیر است

$$S = \int d^4x\sqrt{-g}\left[\frac{1}{2}M_{Pl}^2R + L_{m,r} + L_{DE}\right]$$

که در آن M_{Pl} جرم کاهش‌یافته پلانک، R اسکالر ریچی برای یک جهان FLRW با متریک $g_{\mu\nu}$ و $L_{m,r}$ چگالی لاگرانژی برای ماده و تابش است. جمله L_{DE} چگالی لاگرانژی انرژی تاریک را نشان می‌دهد.

مدل ΛCDM: در این مدل، انرژی تاریک به صورت ثابت کیهانی Λ در نظر گرفته می‌شود $L_{DE} = -M_{Pl}^2\Lambda$ که یعنی انرژی تاریک چگالی ثابتی در سراسر جهان دارد و معادله حالت آن $\omega = P/\rho = -1$ است.

مدل $m^2\phi^2$: ما ساده‌ترین مدل فیزیکی انرژی تاریک پویا یعنی میدان نرده‌ای با پتانسیل درجه دو را در نظر می‌گیریم

$$V(\phi) = \frac{1}{2}m^2\phi^2 = V_0\left(\frac{\phi}{M_{Pl}}\right)^2$$

در این مدل، میدان ϕ به صورت یک میدان نرده‌ای متعارف با جفت شدگی کمینه با گرانش در نظر گرفته می‌شود. چگالی لاگرانژی انرژی تاریک به صورت زیر است:

$$L_{DE} = -\frac{1}{2}g^{\mu\nu}\partial_\mu\phi\partial_\nu\phi - V(\phi)$$

و چگالی انرژی و فشار میدان نرده‌ای به ترتیب برابرند با:

$$\rho_\phi = \frac{1}{2}\dot{\phi}^2 + V(\phi)$$
$$p_\phi = \frac{1}{2}\dot{\phi}^2 - V(\phi)$$

و معادله حالت آن نیز از طریق $w_\phi = \frac{p_\phi}{\rho_\phi}$ قابل محاسبه است.

معادلات پس‌زمینه: معادلات کلاین–گوردون و فریدمان که تکامل جهان را توصیف می‌کنند به صورت زیر هستند:

$$\ddot{\phi} + 3H\dot{\phi} + V_{,\phi} = 0,$$
$$3M_{Pl}^2H^2 = \rho_m + \rho_r + \rho_K + \rho_\phi$$

که در آن $H = \dot{a}/a$ پارامتر هابل، ρ_m چگالی ماده، ρ_r چگالی تابش، و ρ_K چگالی مربوط به انحنای فضایی است. برای جهان باز (هندسه هذلولوی)، $\rho_K > 0$ و $\Omega_K > 0$.

پارامترهای مدل: پارامترهای آزاد در تحلیل ما عبارتند از: Ω_m (پارامتر چگالی ماده در زمان حال)، Ω_b (پارامتر چگالی باریون)، ثابت کنونی هابل بدون بعد شده $\Omega_K h = H_0/(100 kms^{-1}Mpc^{-1})$ ، (پارامتر چگالی انحنا در مدل‌های غیرتخت)، ϕ_i (مقدار اولیه میدان نرده‌ای) و V_0 (مقیاس انرژی پتانسیل).

۳. داده‌ها و روش آماری

در این پژوهش، از $N = 1845$ نقطه داده استفاده می‌کنیم که شامل:

۳-۱- DESI DR2 [1] : ما از جدیدترین داده‌های نوسانات صوتی باریون (BAO) از همکاری DESIمربوط به دومین انتشار داده (DR2) استفاده می‌کنیم. این داده‌ها شامل اندازه‌گیری‌های فاصله در چندین افق قرمز مختلف است.

۳-۲- پیش‌توزیع‌های فاصله پلانک (Planck Distance Priors [3]): برای لحاظ کردن اطلاعات ریزموج زمینه کیهانی (CMB) بدون نیاز به تحلیل طیف کامل، از پیش‌توزیع‌های فاصله پلانک استفاده می‌شود.

۳-۳- داده‌های ابرنواختر[4] DESY5 : داده‌های پنج‌ساله ابرنواخترهای نوع Ia.

روش تحلیل :MCMC ما برای برازش مدل‌ها به داده‌ها و یافتن فضای پارامترها، از روش زنجیره مارکوف مونت کارلو (MCMC) استفاده می‌کنیم. برای بررسی همگرایی زنجیره‌های مارکوف، پارامتر گلمان–روبین را محاسبه کردیم و حد بالای آن را برابر $\hat{R} - 1 < 0.01$ قرار دادیم که همگرایی زنجیره‌ها را تضمین می‌کند. پارامترهای آزاد ما در این نوشتار شامل $\{\Omega_m, \Omega_b, h\}$ برای تمام مدلها و پارامتر انحنا $\{\Omega_K\}$ برای مدلهای غیرتخت و $\{\phi_i\}$ برای $m^2\phi^2$ (همراه با تعیین V_0 از شرط بسته‌شدن) است.

معیارهای انتخاب مدل: برای مقایسه کیفیت برازش مدل‌های مختلف با در نظر گرفتن تعداد پارامترهای آزاد، از دو معیار استفاده می‌کنیم:

– **ضریب بیز** (Bayes Factor):(ما از کد MCEvdence برای محاسبه ضریب بیز هر مدل نسبت به مدل ΛCDM تخت استفاده می‌کنیم. مقادیر $\Delta \ln \ln B$ براساس مقیاس جفریز به‌روز شده تفسیر می‌شوند:

$\Delta \ln \ln B < 1.1$: دو مدل قابل مقایسه هستند.

$1.1 < \Delta \ln \ln B < 3$: شواهد ضعیف به نفع مدل اول.

$3 < \Delta \ln \ln B < 5$: شواهد متوسط به نفع مدل اول.

$\Delta \ln \ln B > 5$: شواهد قوی به نفع مدل اول.

– **معیار اطلاعات آکائیک** (AIC) **و معیار اطلاعات بیزی** (:(BIC به عنوان معیارهای تکمیلی نیز این مقادیر را محاسبه می‌کنیم:

$AIC = \chi^2_{min} + 2n$ □ $BIC = \chi^2_{min} + n \ln \ln N$

که در آن n تعداد پارامترهای آزاد مدل و N تعداد کل نقاط داده است.

پارامتر	ΛCDM تخت	ΛCDM غیرتخت
h	$0.7006^{+0.0017}_{-0.0020}$	$0.6992^{+0.0019}_{-0.0021}$
Ω_b	$0.04685^{+0.00049}_{-0.0013}$	$0.04644^{+0.00051}_{-0.0013}$
Ω_c	$0.2378^{+0.0021}_{-0.0021}$	$0.2467^{+0.0038}_{-0.0038}$
Ω_K	–	$0.0036^{+0.0013}_{-0.0017}$
H_0	$70.06^{+0.17}_{-0.20}$	$69.92^{+0.19}_{-0.21}$
Ω_m	$0.2847^{+0.0025}_{-0.0025}$	$0.2931^{+0.0039}_{-0.0039}$
Ω_{DE}	$0.7152^{+0.0026}_{-0.0023}$	$0.7068^{+0.0039}_{-0.0039}$
سن کیهان (Gyr)	$13.648^{+0.036}_{-0.025}$	$13.538^{+0.047}_{-0.042}$
χ^2_{min}	1736.12	1705.71
$\Delta \ln \ln B$	0	3.2

جدول ۱: محدودیت‌های 1σ (سطح اطمینان 68.3٪) برای پارامترهای مدل

٤. نتایج تحلیل داده‌ها

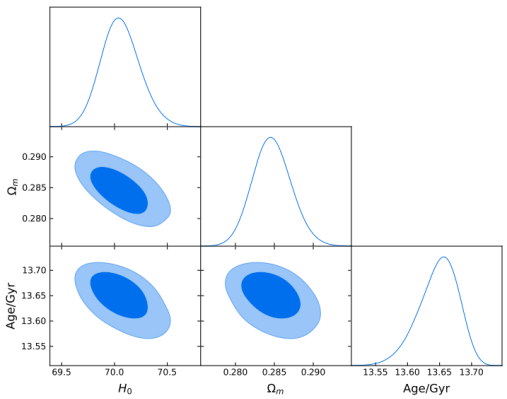
نتایج اصلی تحلیل MCMCما در جداول ۱ و ۲ و همچنین شکل‌های ۱ تا ٤ خلاصه شده است.

٤-۱- نتایج مدل ΛCDM :در جدول ۱، نتایج برازش مدل ΛCDM در دو حالت تخت و غیرتخت ارائه شده است. این نتایج نشان می‌دهد که مدل ΛCDM غیرتخت (جهان باز) با $\Delta\chi^2 = -30.41$ نسبت به مدل تخت، برازش بسیار بهتری به داده‌ها دارد. ضریب بیز ($\Delta \ln \ln B = 3.2$) نشان‌دهنده شواهد متوسط به نفع جهان باز است. مقدار بهینه $\Omega_K = 0.0036^{+0.0013}_{-0.0017}$ معنی‌داری حدود 3σ را نشان می‌دهد. ناسازگاری ظاهری بین نتایج به‌دست‌آمده برای مدل ΛCDM تخت در این کار و نتایج گزارش‌شده توسط همکاری پلانک، عمدتاً ناشی

از نوع داده‌های CMB مورد استفاده در تحلیل ما است. در این پژوهش، به‌جای استفاده از داده‌های کامل CMB پلانک ۲۰۱۸، از نتایج پیشینه‌های فاصله استخراج‌شده از این داده‌ها استفاده کرده‌ایم. این کمیت‌ها اگرچه اطلاعات هندسی اصلی CMB را به‌خوبی خلاصه می‌کنند، اما شامل تمام توان آماری طیف توان دما و قطبش نیستند. در نتیجه، قیود به‌دست‌آمده بر پارامترهای کیهان‌شناسی، از جمله پارامتر هابل H_0، می‌تواند با نتایج حاصل از تحلیل مبتنی بر داده‌های کامل CMB متفاوت باشد. علاوه بر این، در کار حاضر داده‌های پلانک ۲۰۱۸ در قالب پیشینه‌های فاصله با داده‌های ابرنواختر نوع Ia از مجموعه DESY5 و داده‌های BAO و از 2DESI DR ترکیب شده‌اند. این ترکیب داده‌ای با ترکیب مورد استفاده در تحلیل‌های رسمی گروه پلانک متفاوت است و به‌طور طبیعی می‌تواند منجر به تفاوت در مقادیر بهترین برازش و بازه‌های اطمینان پارامترها شود. بنابراین، اختلاف مشاهده‌شده ناشی از تفاوت در نوع و ترکیب داده‌ها است و نه وجود ناسازگاری در چارچوب مدل یا پیاده‌سازی آن.

۴-۲- نتایج مدل $m^2\phi^2$: در جدول ۲، نتایج برازش مدل $m^2\phi^2$ در دو حالت تخت و غیرتخت ارائه شده است. این نتایج بیانگر این است که:

۱. جهان باز: مشابه مدل ΛCDM ، مدل $m^2\phi^2$ غیرتخت نیز با $\Delta\chi^2 = -31.5$ نسبت به نسخه تخت خود، برازش بهتری دارد. مقدار $\Omega_K = 0.0035^{+0.0013}_{-0.0017}$ با معنی‌داری حدود 3σ و ضریب بیز $\Delta \ln \ln B = 4.5$ نشان‌دهنده شواهد قوی به نفع جهان باز است.

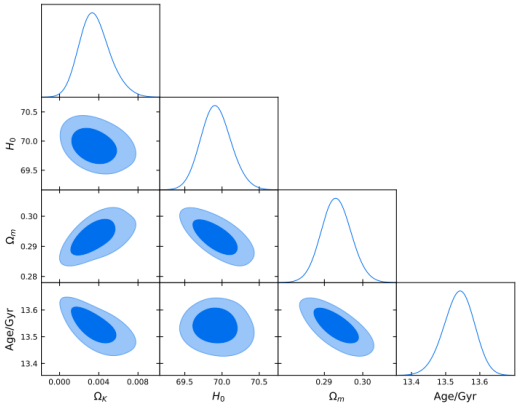


شکل ۱: نمودار مثلثی مربوط به مدل ΛCDM تخت. این نمودار توزیع پسین و همبستگی‌های بین پارامترهای H_0, Ω_m و سن کیهان را نشان می‌دهد.

۲. مقایسه با ΛCDM غیرتخت: مدل $m^2\phi^2$ غیرتخت ($\chi^2_{min} = 1701.23$) برازش بهتری نسبت به ΛCDM غیرتخت ($\chi^2_{min} = 1705.71$) ارائه می‌دهد ($\Delta\chi^2 = -4.48$). ضریب بیز بین این دو مدل $\Delta \ln \ln B = 1.3$ است که نشان‌دهنده شواهد ضعیف به نفع مدل پویای $m^2\phi^2$ است.

۳. پارامترهای میدان: مقدار اولیه میدان اسکالر ϕ_i فقط به صورت کران پایین مشخص می‌شود که نشان می‌دهد میدان از مقادیر بالای پلانکی شروع می‌شود.

همچنین V_0 با دقت کمی تعیین می‌شود که انتظاری طبیعی برای مدل‌های نزدیک به ΛCDM است.



شکل 2: نمودار مثلثی مربوط به مدل ΛCDM غیرتخت. این نمودار توزیع پسین و همبستگی‌های بین پارامترهای H_0, Ω_m و سن کیهان و Ω_K را نشان می‌دهد.

۵. جمع‌بندی

در این پژوهش، ما داده‌های جدید DESI DR2، پیش‌توزیع‌های فاصله پلانک، و ابرنواختری‌های DESY5 را به کار بردیم. این مجموعه‌داده‌ها به‌طور کلی از مشاهدات مستقل و کمیت‌های فیزیکی متفاوت در بازه‌های انتقال به سرخ مختلف به‌دست آمده‌اند. از این‌رو، فرض استقلال آماری بین آن‌ها تقریب مناسبی است و ترکیب

پارامتر	تخت $m^2\phi^2$	غیرتخت $m^2\phi^2$
h	$0.7006^{+0.0017}_{-0.0020}$	$0.7005^{+0.0017}_{-0.0020}$
Ω_b	$0.04685^{+0.00049}_{-0.0013}$	$0.04629^{+0.00054}_{-0.0013}$
Ω_c	$0.2379^{+0.0021}_{-0.0021}$	$0.2456^{+0.0035}_{-0.0035}$
Ω_K	–	$0.0035^{+0.0013}_{-0.0017}$
$ln(\phi_i)$	> 2.53	> 2.44
H_0	$70.06^{+0.17}_{-0.20}$	$70.05^{+0.17}_{-0.20}$
Ω_m	$0.2847^{+0.0025}_{-0.0025}$	$0.2919^{+0.0036}_{-0.0036}$
Ω_{DE}	$0.7152^{+0.0026}_{-0.0023}$	$0.7080^{+0.0036}_{-0.0036}$
سن کیهان (Gyr)	$13.648^{+0.036}_{-0.025}$	$13.540^{+0.046}_{-0.041}$
$ln\ ln\ (V_0)$	$-4.95^{+2.2}_{-0.75}$	$-4.89^{+2.3}_{-0.81}$
χ^2_{min}	1732.73	1701.23
$\Delta\ ln\ ln\ B$	-1.1	4.5

جدول 2: محدودیت‌های 1σ (سطح اطمینان 68.3٪) برای پارامترهای مدل.

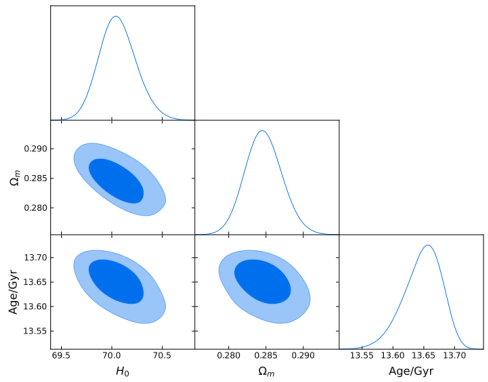
آن‌ها در قالب یک درست‌نمایی مشترک، رویکردی استاندارد در تحلیل‌های کیهان‌شناسی محسوب می‌شود. با این وجود، بررسی نتایج به‌صورت تفکیک‌شده برای هر مجموعه‌داده نیز از اهمیت برخوردار است. در تحلیل‌های ما مشخص شد که تمایل به هندسه‌ی فضایی غیرتخت (به‌ویژه کیهان باز) عمدتاً از ترکیب داده‌های SN DESY5 و 2BAO DESI DR ناشی می‌شود، در حالی که داده‌های CMB در قالب پیشینه‌های فاصله نقش مکمل ایفا می‌کنند. ما تأکید می‌کنیم که این نتیجه باید به‌عنوان یک «نشانه» یا «تمایل» در چارچوب داده‌های مورد استفاده تفسیر شود، نه یک نتیجه‌گیری قطعی. بررسی دقیق‌تر این موضوع، به‌ویژه با

استفاده از داده‌های کامل CMB و تحلیل‌های تفکیک‌شده‌ی بیشتر، می‌تواند در کارهای آینده انجام شود و به روشن‌تر شدن این مسأله کمک کند.

در کار خود، دو مدل کیهان‌شناسی ΛCDM و $m^2\phi^2$ (به عنوان ساده‌ترین مدل انرژی تاریک پویا) را در دو حالت هندسه تخت و غیرتخت مورد بررسی قرار دادیم. برای سهولت مقایسه، نتایج مربوطه را در جدول ۳ خلاصه کرده‌ایم.

مدل	χ^2_{min}	$\Delta \ln \ln B$	تفسیر
ΛCDM تخت	1736.12	0	مدل پایه
ΛCDM غیرتخت	1705.71	3.2	شاهدی به نفع جهان باز
$m^2\phi^2$ تخت	1732.73	-1.1	شاهد ضعیفی علیه مدل
$m^2\phi^2$ غیرتخت	1701.23	4.5	شاهد قوی به نفع جهان باز

جدول 3: خلاصه نتایج و تفسیر مدل‌های انرژی تاریک.

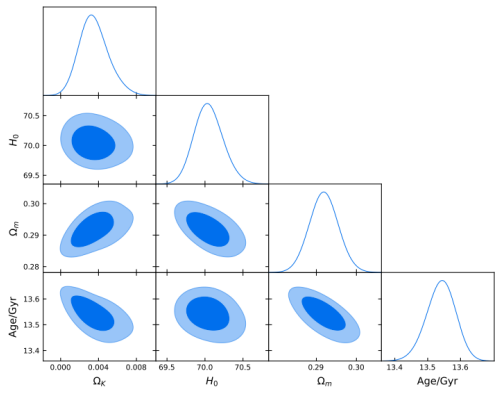


شکل 3: **نمودار مثلثی مربوط به مدل $m^2\phi^2$ تخت. این نمودار توزیع پسین و همبستگی‌های بین پارامترهای H_0, Ω_m و سن کیهان را نشان می‌دهد.**

نتایج اصلی ما به شرح زیر است:

۱. **ترجیح جهان باز:** مهم‌ترین یافته ما این است که در هر دو مدل ΛCDM و $m^2\phi^2$ ، داده‌ها به طور مشخص یک جهان باز ($\Omega_K > 0$) را بر جهان تخت ترجیح می‌دهند. مقدار بهینه پارامتر انحنا در هر دو مدل تقریباً $\Omega_K \sim 0.0036$ است و معنی‌داری این ترجیح حدود 3σ می‌باشد. بر اساس مقیاس جفریز به‌روز شده، شواهد به نفع جهان باز در مدل ΛCDM متوسط و در مدل $m^2\phi^2$ قوی است.

۲. **ترجیح ضعیف به نفع انرژی تاریک پویا:** مدل $m^2\phi^2$ غیرتخت، برازش بهتری نسبت به ΛCDM غیرتخت ارائه می‌دهد ($\Delta\chi^2 = -4.48$)، اما ضریب بیز ($\Delta \ln \ln B = 1.3$) تنها شواهد ضعیفی به نفع انرژی تاریک پویا نشان می‌دهد. این بدان معناست که عامل اصلی در بهبود برازش به داده‌ها، وجود انحنای مثبت (جهان باز) است و نه لزوماً پویایی انرژی تاریک.



شکل 4: **نمودار مثلثی مربوط به مدل $m^2\phi^2$ غیرتخت. این نمودار توزیع پسین و همبستگی‌های بین پارامترهای H_0, Ω_m و سن کیهان و Ω_K را نشان می‌دهد.**

۳. **نکات احتیاط:** با وجود قوت این یافته، باید با احتیاط رفتار کرد. ما داده‌های DESIرا با همان خطاهای اعلام شده توسط این گروه همکاری استفاده کرده‌ایم و نگرانی‌هایی در مورد نقاط پرت یا سیستماتیک‌های احتمالی وجود دارد. همچنین مقدار χ^2_{min} کاهش‌یافته در همه مدل‌ها کمتر از یک است که ممکن است نشان‌دهنده بیش‌برآوردی خطاهای ابرنواخترها باشد. با این حال، سازگاری این نتیجه در مدل‌های مختلف، اعتبار آن را تقویت می‌کند. در مجموع، نتایج ما نشان می‌دهد که داده‌های کنونی ممکن است در حال اشاره به جهان باز باشند و این موضوع شایسته بررسی عمیق‌تر در پژوهش‌های آتی است.

مراجع

[1] M. Abdul Karim and others (DESI collaboration); "*DESI DR2 results. II. Measurements of baryon acoustic oscillations and cosmological constraints*"; arXiv preprint arXiv:2503.14738 (2025).
[2] N. Aghanim and others (Planck collaboration); "*Planck 2018 results. VI. Cosmological parameters*"; Astron. Astrophys. 641, A6 (2020).
[3] L. Chen, Q.-G. Huang, and K. Wang; "*Distance Priors from Planck Final Release*"; JCAP 02, 028 (2019).
[4] T. M. C. Abbott and others (DES collaboration); "*The Dark Energy Survey: Cosmology Results with ~1500 New High-redshift Type Ia Supernovae Using the Full 5 yr Data Set*"; Astrophys. J. Lett. 973, L14 (2024).

سه مقیاس، یک آنتروپی: انتخاب طبیعی آنتروپی تسالیس در دینامیک گرانشی

شاماری، شهریار؛ شیخی، احمد

بخش فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز ، شیراز

چکیده

*در این مقاله نشان داده شده که با اعمال چارچوب نیروی آنتروپیک به منحنی‌های چرخش کهکشانی و جرم باریونی خوشه‌های کهکشانی، از میان مدل‌های مختلف آنتروپی اصلاح‌شده، تنها **آنتروپی سالیس** انتخاب می‌شود. سپس این گرانش اصلاح‌شده به خوشه‌های کروی تعمیم داده می‌شود تا سلسله‌مراتب ساختاری از کهکشان‌ها تا خوشه‌های کهکشانی و خوشه‌های کروی تکمیل گردد. نتیجه مهم آن است که **پارامتر نافزونور** (δ) با جرم، شعاع، دما یا چگالی سامانه‌های گرانشی همبستگی ندارد. پیش‌بینی کلیدی مقاله، وجود **خوشه‌های کهکشانی با** $\delta=1$ (بدون نیاز به ماده تاریک) است، مشابه آنچه قبلاً در مقیاس کهکشانی و خوشه‌های کروی دیده شده. تأیید رصدی این پیش‌بینی، آزمونی منحصربه‌فرد برای تمایز گرانش سالیس از ΛCDM و MOND خواهد بود.*

واژه های کلیدی: ***ماده تاریک، نیروی انتروپی، منحنی دوران کهکشان ها، خوشه های کهکشانی، خوشه های کروی .***

Three Scales, One Entropy: Natural Selection of Tsallis Entropy in Gravitational Dynamics

S. Shamari; A. Sheykhi

Department of Physics, College of Science, Shiraz University, Shiraz, Iran,

Abstract

In this paper, it is shown that by applying the entropic force framework to galactic rotation curves and the baryonic mass of galaxy clusters, among various modified entropy models, only the Tsallis entropy is selected. This modified gravity is then extended to globular clusters to complete the structural hierarchy from galaxies to galaxy clusters and globular clusters. The important finding is that the nonextensive parameter (δ) does not correlate with the mass, radius, temperature, or density of gravitational systems. The key prediction of the paper is the existence of galaxy clusters with $\delta = 1$ (requiring no dark matter), similar to what has already been observed on galactic scales and in globular clusters. Observational confirmation of this prediction will provide a unique test to distinguish Tsallis gravity from ΛCDM and MOND.

***Keywords**: dark matter, entropic force, rotation curve of galaxy, galaxy cluster, globular cluster*

PACS No.

1. مقدمه

مسئله ماده تاریک از دهه ۱۹۳۰ مطرح شد، اما با مشاهدات ورا روبین به موضوعی داغ تبدیل گشت[1]. امروزه شواهد نشان می‌دهند حدود ۸۵٪ ماده جهان ناباریونی است، با این حال آشکارسازی مستقیم ذرات ماده تاریک ناموفق بوده و نظریه‌های جایگزین بدون ماده تاریک مانند MOND و MOG مورد توجه جدی قرار گرفته‌اند.[2,3] در رویکردی موازی، گرانش می‌تواند پدیده‌ای برآمده ناشی از تغییر در آنتروپی سیستم باشد[4] در این چارچوب، انتخاب تابع آنتروپی تعیین‌کننده است.

اولین تلاش برای نشان دادن هم ارزی معادلات گرانش و و قوانین ترمودینامیک توسط جیکوبسون انجام شد که نشان داد معادلات میدان اینشتین به عنوان معادله حالت فضا–زمان تفسیر می‌شود[5] . سپس ورلینده پا را فرا تر گذاشت و سعی کرد قوانین گرانش را در دو رژیم غیرنسبیتی و نسبیتی با کمک دو اصل هولوگرافیک و قضیه

تقسیم مساوی انرژی بدست آورد. در رهیافت ورلینده نیروی گرانشی از تغییر آنتروپی افق هولوگرافیک حاصل می‌شود [4]

$$F\Delta x = T\Delta S \qquad (1)$$

در رهیافت ورلینده، انتخاب تابع آنتروپی وابسته به سطح هوگرافی نقشی بنیادین دارد. آنتروپی بکنشتاین–هاوکینگ $S_{BH} = \frac{A}{(4G)}$ در حد غیر نسبیتی به معادله گرانش نیوتنی منجر می شود. با تغییر عبارت آنتروپی، قانون گرانش هم تغییر می کند. به عبارتی هرآنتروپی تعمیم‌یافته، دینامیک گرانشی اصلاح‌شده‌ای را نتیجه می‌دهد. در این کار، اصلاحات آنتروپی را به دو نوع دسته‌بندی کرده و عملکرد آنها را در منحنی‌های چرخش کهکشانی و خوشه‌های کهکشانی بررسی می‌کنیم. نتایج نشان می‌دهد که تنها آنتروپی «تسالیس» موفق عمل می‌کند. سپس این گرانش اصلاح‌شده را به خوشه‌های کروی تعمیم داده و در پایان به ریشه نظری آنتروپی تسالیس می‌پردازیم. تمام آنتروپی‌های شناخته شده به دو دسته قابل تقسیم هستند:

$$S = \alpha R^{n-1} S_{BH} \qquad (\text{نوع } I: \text{ تسالیس، بارو}) \qquad (2)$$

$$S = S_{BH} + \alpha f(R) \quad (\text{نوع II: کانیاداکیس ،رنی و ...}) \qquad (3)$$

که در اینجا R شعاع افق و S_{BH} آنتروی سیاهچاله معمولی است که از قانون مساحت پیروی می کند. هدف این مقاله، آزمون این آنتروپی‌ها در سه مقیاس مستقل کهکشانی و یافتن تنها گزینه‌ی سازگار با داده های رصدی است.

۲ .گرانش پدیداری

۲-۱ .قانون نیروی تعمیم‌یافته

برای آنتروپی‌های نوع II ، رابطه زیر برقرار است [6]:

$$F = -\frac{GMm}{R^2} \times 4G \times \frac{dS}{dA} \qquad (4)$$

که نیروی ناشی از انتروپی های نوع اول را میدهد. میبینیم که ***هیچکدام از این نیروها نمیتوانند مسئله منحنی دوران تخت کهکشان ها را حل کند*** مثلا برای انتروپی رینی میرسیم به سرعت زیر

$$V = \sqrt{\frac{GM}{R + \frac{\lambda \pi R^3}{G}}} \qquad (5)$$

که در آن λ پارامتر آزاد است. مشخص است که این رابطه نمیتواند یک حرکت دورانی ثابت را در فواصل دور توصیف کند. اما با این وجود جای خالی این سوال باقیست که ***آیا هیچ انتروپی دیگری از این نوع که فعلا شناخته شده نیست نیز نمیتواند این کار را انجام بدهد؟*** با انتخاب رابطه تالی فیشر به عنوان مبنا و انتظار اصلی از انتروپی های نوع دوم میبینیم که جمله اصلاحی باید به شکل $f(R) = R^4$ باشد که قابل قبول نیست. ***پس هیچ انتروپی از نوع دوم قادر به توصیف صحیح دینامیک کهکشان نیست.***

برای انتروپی های نوع یک رابطه ی زیر را جهت یافتن نیرو از انتروپی استخراج میکنیم:

$$F = \frac{L_p^2 Mm}{\alpha R^{n-1} R^2} \qquad (6)$$

که در آن L_p^2 طول پلانک است و به ازای nهای مختلف انتروپی های مختلف بازیابی میشوند مثلا به ازای $n = 1$ به انتروپی بکنشتاین هاوکینگ میرسیم.

بعد از به دست آوردن نیروی حاصل از انتروپی بارو میبینیم که آن هم در توصیف دینامیک کهکشان ناکارآمد است.

انچه که باقی می ماند انتروپی سالیس است . نکته مهم این است که انتروپی های نوع اول توانی هستند و انتروپی هافقط در بازه توانی متفاوت لند مثلا ***انتروپی بارو خود یک بازه محدودتر از انتروپی سالیس است*** پس هر انچه که در ادامه در مورد سالیس عنوان میشود به صورت یکتا در مورد انتروپی سالیس از بین تمام انتروپی های ممکن صادق است.

در منبع [7] بحث مفصلی درباره ی تعمیم قانون گرانش نیوتون توسط انتروپی تعمیم یافته آمده است که منجر به نیروی زیر شده است:

$$\mathrm{F} = -\left(\frac{2\delta - 1}{2 - \delta}\right)\frac{GMm}{R^{2\delta}} \qquad (7)$$

در این منبع مقدار $\delta \approx 0.5$ برای توصیف منحنی دوران کهکشان ها به دست آمده است.(البته باید ذکر کرد که در این منبع به جای

δ از β استفاده شده اما چون در این کار ما با مدل بتای کینگ کار میکنیم از δ استفاده شد که آن هم در ادبیات رایج است.) علاوه بر آن در مقاله اصلی این نوشته نشان داده ایم که این تنها انتروپی است که میتواند از یک مکانیسم درست منشایی برای نظریه MOND ارائه بدهد.

با اینکه که انتروپی سالیس در دینامیک کهکشانی موفق عمل میکند آن هم زمانی که مابقی انتروپی های دیگر شکست میخورند ما آن را در یک آزمون سخت تر محک میزنیم ، جایی که حتی نظریه MOND هم با چالش روبروست.

۲-۲ .خوشه‌های کهکشانی

برای گاز درون‌خوشه‌ای با فرض تعادل هیدرواستاتیک و همدما، از مدل β کینگ استفاده می‌شود[8]

$$\rho(r) = \rho_0 \left[1 + \left(\frac{r}{r_c}\right)^2\right]^{-\frac{3\beta}{2}} \qquad (8)$$

که در آن r_c شعاع هسته خوشه و β پارامتر فیت کننده است. از معادله تعادل:

$$\frac{d}{dr}\left[\frac{kT(r)}{\mu m_p}\rho(r)\right] = -\rho(r)\frac{d\emptyset(r)}{dr} \qquad (10)$$

با μ میانگین پویش آزاد و m_p جرم پروتون شتاب گرانشی پتانسیل $\emptyset$ به دست می‌آید:

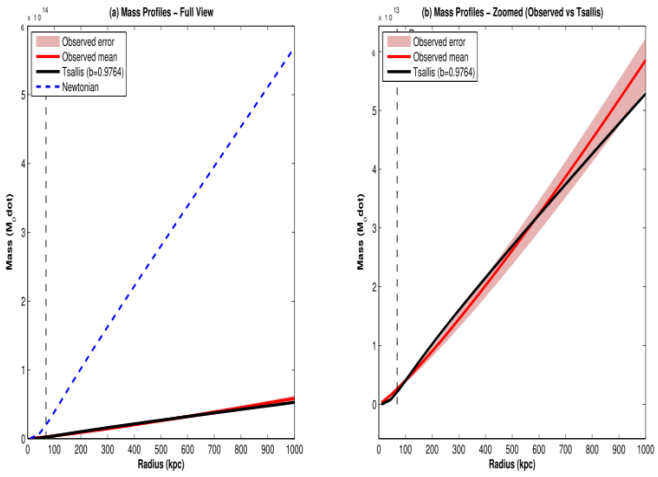
$$a = -\frac{3\beta kT}{\mu m_p}\left(\frac{r}{r^2 + {r_c}^2}\right) \qquad (11)$$

با *قرار دادن شتاب از گرانش اصلاح شده سالیس*جرم دینامیکی خوشه در چارچوب تسالیس به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$M = -\frac{3\beta kT r^{2\delta}}{\mu m_p G}\frac{(2-\delta)}{(2\delta-1)}\left(\frac{r}{r^2 + {r_c}^2}\right) \qquad (12)$$

برای ۴۰ خوشه از داده‌های [9] (شامل T، β ،r_c) پارامتر δ در جرم دینامیکی پیش بینی و با جرم رصدی مقایسه شده است . باید در نظر داشت که در مدل بتای کینگ جرم بر حسب r در هر شعاع به دست می آید و مقدار تجربی آن هم در [9] محاسبه شده است. مقدار پارامتر نافزونور سالیس برای این 40 خوشه

$\langle\delta\rangle = 0.9770 \pm 0.004$ به دست آمد. شکل 1 مقدار جرم محاسبه شده را در برابر مقدار رصدی بر حسب شعاع برای یک خوشه کهکشانی A0478 نشان میدهد



شکل1. این نمودار پروفایل جرمی سالیس با منحنی سیاه در مقایسه با پیش بینی نیوتونی با خط به رنگ آبی و مقدار رصدی با منحنی چین دار قرمز رنگ برای خوشه A0478 را نشان میدهد. نمودار سمت چپ هر سه منحنی را با هم و نمودار سمت راست فقط مقدار محاسبه شده در برابر مقدار رصدی را نشان میدهد.

۲-۳ .خوشه‌های ستاره‌ای کروی

خوشه های کروی سیستم هایی فاقد ماده ی تاریک پنداشته می شوند اما نمونه هایی از آن ها مشاهده شده که رفتار غیر کپلری دارند به همین دلیل در بررسی نظریات گرانشی حائز اهمیت هستند . قانون گرانش سالیس را برای سرعت پخشی ۳۳ خوشه

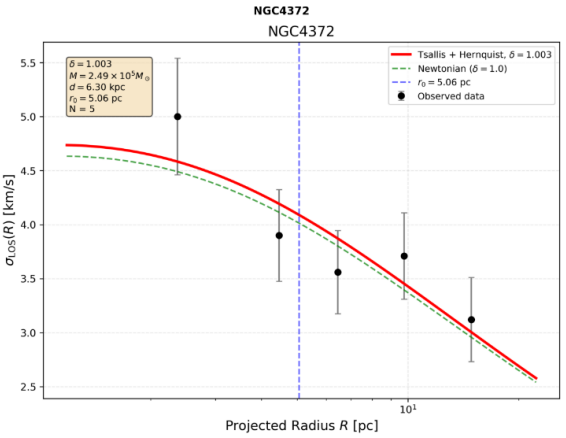
کروی از داده‌های [10] با پروفایل چگالی هرنکوئیست محاسبه میکنیم:

$$\rho(r) = \frac{Mr_0}{2\pi r(r+r_0)^3} \qquad (13)$$

که در آن r_0 شعاع مشخصه است و سرعت پخشی تصویر شده در راستای دید عبارت است از:

$$\sigma_{los}^2(R) = \frac{\int_R^\infty \frac{r\sigma_r^2(r)\rho(r)}{\sqrt{r^2-R^2}}\,dr}{\int_R^\infty \frac{r\rho(r)}{\sqrt{r^2-R^2}}\,dr} \qquad (14)$$

در هر خوشه با کمینه سازی پارامتر χ^2_{red} بهترین مقدار δ تعیین شد. برای این نمونه 33 خوشه ای پارامتر نافزونور مقدار $\langle\delta\rangle = 1.0046 \pm 0.0025$ به خود میگیرد. در شکل 2 نمودار سرعت پخشی برای خوشه NGC4372 رسم شده است.



شکل2. نمودار سرعت پخشی خوشه کروی NGC4372. منحنی قرمز پیش بینی حاصل از نیروی انتروپیک سالیس و خط چین سبز پیش بینی نیوتونی است.

3 .بحث و نتیجه‌گیری

آنتروپی تسالیس تنها آنتروپی است که در سه مقیاس کهکشان، خوشه‌ی کهکشانی و خوشه‌ی کروی با موفقیت عمل می‌کند. و پارامتر δ وابستگی درون مقیاسی به جرم، دما یا اندازه ندارد، اما در مقیاس‌های مختلف مقادیر مجزا می‌گیرد چون آمارهای نافزونور و آنتروپی سالیس زمانی پدید می‌آیند که قیدهای میکروسکوپی پنهان، ارگودیسیته را شکسته و فضای فاز را پیچیده می‌کنند؛ این رویکرد برای توصیف آرامش‌خشنِ ناقص در سیستم‌های گرانشی ضروری است. شواهد رصدی و شبیه‌سازی‌هانشان می‌دهند که پارامتر نافزونور یک کمیت دینامیکی و وابسته به سن، محیط و تاریخچه آرامش سیستم است. همچنین نشان دادیم که آنتروپی‌های نوع II قادر به تولید منحنی دورانی تخت نیستند. آنتروپی بارو نیز به دلیل محدوده‌ی پارامتری خود در مقیاس کهکشانی شکست می‌خورد. از طرفی این چارچوب، مشکل کارول–رمن [11] در مورد تعریف‌ناپذیری آنتروپی در گرانش پدیداری را با استفاده از مکانیک آماری غیرگسترده حل می‌کند. در نهایت پیش‌بینی مهم این کاروجود خوشه‌های کهکشانی با $\delta = 1$ (نیروی نیوتنی خالص، بدون ماده تاریک) است. مشاهده‌ی چنین خوشه‌هایی آزمونی قطعی برای تمایز نظریه گرانش ترمودینامیکی از ΛCDM و MONDخواهد بود. از آنجا که آنتروپی تسالیس تنها گزینه‌ی سازگار با رصد در چارچوب نیروی آنتروپیک است، می‌توان نتیجه گرفت که آنتروپی تسالیس توصیف درستی از درجات آزادی میکروسکوپیک فضا–زمان ارائه می‌دهد.

4.مراجع

[1] V. Rubin and W. Ford,, ApJ **159, 379** (1970).
[2] M. Milgrom,, ApJ **270, 365** (1983)
[3] J. W. Moffat,, JCAP **2006, 004** (2006)
[4] E. Verlinde, J. High Energy Phys. **1104, 029** (2011), [arXiv:1001.0785].
[5] T. Jacobson, Phys. Rev. Lett. **75, 1260** (1995), [arXiv:gr-qc/9504004].
[6] A. Sheykhi, Phys. Rev. D **81, 104011** (2010), [arXiv:1004.0627
[7] A. Sheykhi, Eur. Phys. J. **C 80, 25** (2020),
[8] A. Cavaliere and R. Fusco-Femiano, Astron. Astrophys. **70, 677** (1978).
[9] T. H. Reiprich and H. B¨ohringer, Astrophys. J. **567, 716** (2002),
[10] H. Baumgardt and M. Hilker Mon. Not. R. Astron. Soc. **478, 1520** (2018)
[11] S. M. Carroll and G. N. Remmen Phys. Rev. D 93, 123538 (2016).

اثر چرخش های موضعی کیهانشناسی بر آستانه تشکیل و فراوانی سیاهچاله های نخستین

حسینی فرد، محمد[1] ؛ مهرآفرین، محمد[1] ;تقی زاده فیروزجایی، جواد[2]
[1]دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر ،تهران، ایران
[2] دانشکده فیزیک،دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران

چکیده
در این مقاله اثر چرخش‌های موضعی کیهان‌شناسی با پروفایل گاوسی بر تشکیل سیاهچاله‌های نخستین مورد بررسی قرار گرفته است. با افزودن یک میدان ورتیسیته موضعی به دینامیک رمبش گرانشی، نشان داده می‌شود که چرخش می‌تواند از طریق ایجاد پشتیبانی گریز از مرکز، آستانه تشکیل سیاهچاله‌های نخستین را اصلاح کند. این اصلاح منجر به تغییر نمایی در فراوانی سیاهچاله‌ها می‌شود که به شدت به نسبت دامنه چرخش به نرخ هابل، یعنی(ω/H) ، وابسته است. محاسبات تحلیلی نشان می‌دهد که برای مقادیر کوچک ورتیسیته در حدود $\left(\frac{\omega}{H} \leq 10^{-3}\right)$ اثر چرخش بر فراوانی سیاهچاله‌های نخستین ناچیز است، در حالی که برای مقادیر بزرگ‌تر، کاهش قابل توجهی در فراوانی آن‌ها قابل انتظار است. این نتیجه بیانگر آن است که نقش چرخش‌های موضعی تنها در سناریوهای دارای ورتیسیته قوی می‌تواند در فیزیک سیاهچاله‌های نخستین اهمیت پیدا کند. این مطالعه یک چارچوب تحلیلی ساده و قابل تعمیم برای بررسی اثر مدهای برداری در کیهان اولیه ارائه می‌دهد و می‌تواند به عنوان پایه‌ای برای بررسی‌های دقیق‌تر عددی در آینده مورد استفاده قرار گیرد.

واژه های کلیدی: *سیاهچاله های نخستین، تشکیل ساختار، گردابه کیهانی*

Impact of Localized Cosmological Vorticity on the Formation Threshold and Abundance of Primordial Black Holes

Hoseinifard, Mohammad[1]; Mehrafarin, Mohammad[1]; Taghizadeh Firouzjaee, Javad[2]

[1] Department of Physics, Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran
[2] Department of Physics, K.N. Toosi University of Technology, P.O. Box 15875-4416, Tehran, Iran

Abstract
In this paper, we investigate the effect of localized cosmological vorticity with a Gaussian profile on the formation of primordial black holes (PBHs). By introducing a localized vortical field into the gravitational collapse dynamics, we show that rotation can modify the PBH formation threshold through an effective centrifugal support. This leads to an exponential sensitivity of the PBH abundance to the ratio of the vorticity amplitude to the Hubble rate, (ω/H). Our analytical estimates indicate that for small vorticity amplitudes, $\left(\frac{\omega}{H} \leq 10^{-3}\right)$, the effect on PBH abundance is negligible. However, for larger values of the vorticity parameter, a significant suppression of PBH formation is expected. This suggests that only scenarios with sufficiently strong primordial vorticity can lead to observable modifications in PBH abundance. The present work provides a simple analytical framework for studying the role of vector perturbations in the early Universe and may serve as a starting point for more detailed numerical investigations in future studies.

Keywords: *Primordial Black Hole, structure formation, cosmological vorticity*

PACS No.: 98.80.Cq, 97.60.Lf, 98.80.-k

مقدمه
سیاهچاله‌های نخستین (Primordial Black Holes یا PBHs) یکی از جذاب‌ترین پیامدهای ممکن فیزیک عالم آغازین به شمار می‌روند. برخلاف سیاهچاله‌های ستاره‌ای که از رمبش ستارگان پرجرم تشکیل می‌شوند، سیاهچاله‌های نخستین می‌توانند در دوران‌های بسیار اولیه عالم و در اثر رمبش نواحی دارای چگالی بالا ایجاد شوند [1،2]. این اجرام در سال‌های اخیر به دلیل ارتباط احتمالی با ماده تاریک، تشکیل ساختارهای کیهانی و همچنین رویدادهای امواج گرانشی مورد توجه گسترده قرار گرفته‌اند [3].

تشکیل سیاهچاله‌های نخستین به شدت به دامنه اغتشاشات چگالی و شرایط دینامیکی ناحیه در حال رمبش وابسته است. در مدل‌های استاندارد، تشکیل یک سیاهچاله نخستین زمانی رخ می‌دهد که اضافه‌چگالی از یک مقدار آستانه بحرانی فراتر رود [4]. از آنجا که فراوانی سیاهچاله‌های نخستین به صورت نمایی به این آستانه وابسته است، حتی تغییرات کوچک در شرایط اولیه می‌توانند منجر به تغییرات قابل توجه در فراوانی نهایی این اجرام شوند.

در اغلب مطالعات پیشین فرض می‌شود که رمبش نواحی متراکم در محیطی بدون چرخش یا با اثرات چرخشی ناچیز

رخ می‌دهد. با این حال، فرآیندهای مختلفی در عالم آغازین از جمله گذارهای فازی، آشفتگی‌های پلاسما و فرآیندهای غیرخطی می‌توانند منجر به ایجاد ساختارهای موضعی چرخشی و میدان‌های ورتیسیته شوند [5,6]. وجود چنین چرخش‌هایی می‌تواند نوعی پشتیبانی گریز از مرکز در برابر رمبش گرانشی ایجاد کرده و در نتیجه شرایط تشکیل سیاهچاله‌های نخستین را تغییر دهد.

اثر چرخش بر آستانه تشکیل PBH پیش‌تر توسط He و Suyama (۲۰۱۹) با استفاده از پارامتر J (تکانه زاویه‌ای) در یک ناحیه در حال فروپاشی بررسی شده است و در اینجا ما به بررسی وجود میدان های ورتیسیته موضعی پیش از فروپاشی تمرکز داریم همچنین در آن کار به قید گذاری بر روی فراوانی سیاهچاله ها پرداخته نشده است [7]. در این مقاله اثر یک میدان چرخشی موضعی با پروفایل گاوسی بر فرآیند تشکیل سیاهچاله‌های نخستین بررسی می‌شود. بدین منظور، سهم انرژی چرخشی در دینامیک رمبش محاسبه شده و تغییرات آستانه تشکیل و فراوانی سیاهچاله‌های نخستین برای دامنه‌های مختلف ورتیسیته مورد مطالعه قرار می‌گیرد. هدف این کار ارائه یک برآورد تحلیلی از حساسیت فراوانی سیاهچاله‌های نخستین به چرخش‌های موضعی و بررسی اهمیت این اثر در سناریوهای مختلف عالم آغازین است.

مدل چرخش موضعی و اصلاح شرط تشکیل سیاهچاله‌های نخستین

برای بررسی اثر چرخش‌های موضعی بر تشکیل سیاهچاله‌های نخستین، یک میدان ورتیسیته موضعی با پروفایل گاوسی در نظر گرفته می‌شود. این میدان به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$S_i = \omega 0 \times \varepsilon_{ijk} \times \left(x^j - x0^j\right) \times n^k \times \exp\left(-\frac{|x-x0|^2}{R^2}\right) \quad (1)$$

در این رابطه، ω_0 (که در ادامه به اختصار ω نامیده می‌شود) دامنه ورتیسیته موضعی در مرکز گردابه است؛ یعنی بزرگترین مقدار $|\omega(x)| = |\nabla \times v|$ و H نیز نرخ انبساط هابل در زمان ورود مقیاس فیزیکی ناحیه مورد نظر به افق کیهانی است. تمام محاسبات این مقاله در چارچوب دوران تابش انجام شده است. در این دوران، نسبت ω/H تقریباً ثابت می‌ماند، زیرا هم ورتیسیته و هم نرخ هابل با زمان به صورت a^{-2} کاهش می‌یابند. x0مرکز ناحیه چرخشی، n بردار واحد در راستای محور چرخش ε_{ijk} نماد لووی-چیویتا است.

این پروفایل یک گردابه موضعی را توصیف می‌کند که شدت آن با فاصله گرفتن از مرکز به صورت نمایی کاهش می‌یابد. در مدل استاندارد تشکیل سیاهچاله‌های نخستین، شرط رمبش زمانی برقرار می‌شود که اضافه‌چگالی از مقدار بحرانی δ_c فراتر رود. در دوران تابش این مقدار تقریباً برابر است با:

$$\delta_c \approx 0.45 \quad (2)$$

در حضور چرخش، انرژی دورانی ناحیه باید در موازنه دینامیکی لحاظ شود. انرژی گرانشی ناحیه به صورت زیر است:

$$E_G \approx -\left(\frac{3}{5}\right) \times G \times \frac{M^2}{R} \quad (3)$$

انرژی چرخشی نیز از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$E_{rot} = \left(\frac{1}{2}\right) \int \rho\, v_{phi}^2 dV \quad (4)$$

که در آن v_{phi} سرعت مماسی ناشی از چرخش است . برای یک برآورد مرتبه بزرگی، نسبت انرژی چرخشی به انرژی گرانشی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\frac{E_{rot}}{|E_G|} = \alpha \times \left(\frac{\omega}{H}\right)^2 \quad (5)$$

برای برآورد ضریب α، انرژی چرخشی معادله (۴) را با استفاده از پروفایل سرعت چرخشی معادله (۱) به صورت تحلیلی انتگرال‌گیری کردیم. این انتگرال‌گیری در فضای سه‌بعدی انجام شد. بعد از قرار دادن نتایج در معادله (5) محاسبات نشان می‌دهد که $\alpha \approx ۰.۲۰$. از آنجا که انرژی چرخشی در برابر رمبش گرانشی عمل می‌کند، می‌توان آن را به عنوان یک تصحیح مرتبه اول بر شرط فروپاشی در نظر گرفت. در حد چرخش‌های ضعیف $\frac{E_{rot}}{|E_G|} \ll 1$، انتظار میرود آستانه بحرانی رمبش متناسب با نسبت انرژی چرخشی به انرژی گرانشی اصلاح شود. بنابراین به صورت پدیدارشناختی می‌نویسیم:

$$\delta_{c_{eff}} = \delta_c \times \left[1 + \frac{E_{rot}}{|E_G|}\right] \quad (6)$$

یعنی اثر چرخش را به صورت یک اصلاح مؤثر در آستانه تشکیل سیاهچاله‌ها در نظر گرفت:

$$\delta_{c_{eff}} = \delta_c \times \left[1 + \alpha \times \left(\frac{\omega}{H}\right)^2\right] \quad (7)$$

از آنجا که فراوانی سیاهچاله‌های نخستین به صورت نمایی به آستانه وابسته است، داریم:

$$\beta(M) \approx erfc\left(\frac{\delta_{c_{eff}}}{(sqrt(2)\times\sigma)}\right) \quad (8)$$

در این رابطه σ واریانس اغتشاشات چگالی است.به دلیل وابستگی نمایی، حتی تغییرات کوچک در δ_c می‌تواند تغییرات قابل توجهی در فراوانی سیاهچاله‌ها ایجاد کند. در بخش بعدی، اثر این اصلاح برای بازه‌های مختلف دامنه چرخش بررسی خواهد شد. [8]

اثر چرخش موضعی بر فراوانی سیاهچاله‌های نخستین

فراوانی اولیه سیاهچاله‌های نخستین (PBHs) به شدت به آستانه فروپاشی گرانشی وابسته است[9]. در مدل استاندارد، اگر نوسان چگالی از مقدار بحرانی δ_c عبور کند، رمبش به تشکیل سیاهچاله منجر می‌شود. در دوران تابش، این مقدار تقریباً برابر است با $\delta_c \approx 0.45$ با توجه به توزیع تقریباً گاوسی اغتشاشات چگالی، فراوانیPBHها به صورت معادله (8) بیان می‌شود .که در آن σ واریانس چگالی در مقیاس M است. [10] در حضور چرخش

موضعی، آستانه مؤثر رمبش تغییر می‌کند. در بخش قبل نشان داده شد که:

$$\delta_{c_{eff}} = \delta_c \times \left[1 + \alpha \times \left(\frac{\omega}{H}\right)^2\right] \quad (9)$$

برای بررسی اثر نسبی چرخش، نسبت زیر را تعریف می‌کنیم:

$$R_\beta = \frac{\beta_{rot}}{\beta_{std}} \quad (10)$$

که در آن β_{std} حالت بدون چرخش است .از آنجا که تابع erfc در ناحیه دم توزیع به شدت نمایی است، می‌توان از تقریب زیر استفاده کرد:

$$erfc(x) \sim \exp(-x^2) \quad (11)$$

بنابراین:

$$\beta \propto \exp\left(-\frac{\delta_c^2}{(2\,\sigma^2)}\right) \quad (12)$$

در نتیجه:

$$R_\beta \approx \exp\left[-\frac{\left(\delta_{c_{eff}^2} - \delta_c^2\right)}{(2\,\sigma^2)}\right] \quad (13)$$

با جایگذاری $\delta_{c_{eff}}$:

$$\delta_{c_{eff}^2} \approx \delta_c^2 \times \left(1 + 2\alpha\left(\frac{\omega}{H}\right)^2\right) \quad (14)$$

پس:

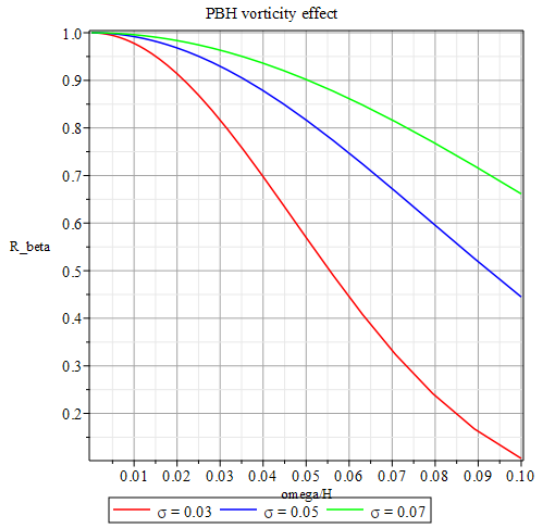
$$\delta_{c_{eff}^2} - \delta_c^2 \approx 2\alpha\,\delta_c^2\left(\frac{\omega}{H}\right)^2 \quad (15)$$

در نتیجه:

$$R_\beta \approx \exp\left[-\alpha\frac{\delta_c^2\left(\frac{\omega}{H}\right)^2}{\sigma^2}\right] \quad (16)$$

- **تحلیل عددی مرتبه بزرگی**

شکل 1 نمودار ضریب سرکوب تشکیل PBH ها توسط چرخش موضعی را به ازای سه مقدار مختلف برای انحراف از معیار اغتشاشات چگالی زمینه نشان می دهد. در ادبیات سیاهچاله های نخستین این پارامتر واریانس اغتشاشات چگالی زمینه مقادیری بین 0.03 الی 0.1 را دارد.



شکل (1): نمودار حساسیت اثر نسبی چرخش در تشکیل PBH به دامنه چرخش گردابه ها به ازای سه مقدار مختلف واریانس تباین چگالی.

برای بررسی اهمیت فیزیکی اثر، چند مقدار نمونه در نظر می‌گیریم:

$$\delta_c \approx 0.45$$
$$\sigma \approx 0.05$$
$$\alpha \approx 0.20$$

در این صورت:

$$R_\beta \approx \exp\left[-16.2 \times \left(\frac{\omega}{H}\right)^2\right] \quad (17)$$

جدول 1 نتایج نسبت سرکوب فراونی را به ازای دامنه چرخش های موضعی متفاوت نشان میدهد:

جدول1: نتایج نسبت سرکوب فراونی به ازای دامنه چرخش های موضعی متفاوت

$\frac{\omega}{H}$	نسبت سرکوب فراوانی تشکیل سیاهچاله های اولیه R_β
10^{-1}	$\approx \exp(-0.162) \approx 0.850$
10^{-2}	$\approx \exp(-0.0016) \approx 0.998$
10^{-3}	$\approx 1 - 1.62 \times 10^{-5}$
10^{-4}	$\approx 1 - 1.62 \times 10^{-7}$

توجه داشته باشید که عوض کردن شکل تابع چرخشی (1) فقط منجر به تغیر در ضریب α در معادله (9) می شود که خود اثر چندانی در سرکوب فراوانی سیاهچاله های اولیه که با رصد های موج گرانشی هم قید گذاری می شوند [11،12] ندارد، آنچه در اینجا اهمیت دارد دامنه چرخش است.

- **نتیجه مدل**

مشاهده می‌شود که فراوانی سیاهچاله‌های نخستین تنها در صورتی تغییر قابل توجه دارد که دامنه چرخش موضعی به مقادیر نسبتاً بزرگ $\left(\frac{\omega}{H} \geq 10^{-1}\right)$ برسد. در مقادیر

کوچک‌تر، اثر چرخش عملاً ناچیز است .این نتیجه نشان می‌دهد که نقش ورتیسیته موضعی در تشکیل PBH بسیار حساس به دامنه اولیه چرخش بوده و می‌تواند تنها در سناریوهای غیرخطی قوی اهمیت پیدا کند. برای درک بهتر رفتار مدل بهتر است شبیه سازی هایی مانند[13] انجام داد.

نتیجه‌گیری

در این مقاله اثر چرخش‌های موضعی کیهان‌شناسی با پروفایل گاوسی بر تشکیل سیاهچاله‌های نخستین مورد بررسی قرار گرفت. هدف اصلی، ارزیابی نقش ورتیسیته اولیه در تغییر آستانه رمبش و در نتیجه اصلاح فراوانی PBHها بود .نتایج نشان می‌دهد که حضور یک میدان چرخشی موضعی منجر به اصلاح آستانه تشکیل سیاهچاله‌های نخستین به صورت زیر می‌شود:

$$\delta_{c_{eff}} = \delta_c \times \left[1 + \alpha \times \left(\frac{\omega}{H}\right)^2\right]$$

این اصلاح باعث تغییر نمایی در فراوانیPBH ها می‌شود، به طوری که:

$$R_\beta = \frac{\beta_{rot}}{\beta_{std}} \approx \exp\left[-\alpha \frac{\delta_c^2 \left(\frac{\omega}{H}\right)^2}{\sigma^2}\right]$$

بررسی عددی این رابطه نشان داد که حساسیت فراوانی PBH به چرخش موضعی به شدت به دامنه نسبی ω/H وابسته است. برای مقادیر کوچک چرخش در حد $\frac{\omega}{H} \leq 10^{-3}$، اثر اصلاحی عملاً ناچیز بوده و تغییر قابل توجهی در فراوانی سیاهچاله‌های نخستین ایجاد نمی‌شود.در مقابل، برای دامنه‌های بزرگتر چرخش در حدود $\omega/H \sim 10^{-1}$، اثر سرکوبی قابل مشاهده در فراوانی PBHمشاهده می‌شود که می‌تواند تا 15% کاهش در مقدار β ایجاد کند. در چارچوب کیهان‌شناسی استاندارد انتظار می‌رود $\frac{\omega}{H} \leq 1$ باشد و در این حالت اثر ورتیسیته بر تشکیل PBH ناچیز است. با این حال، در سناریوهای غیراستاندارد مانند گذارهای فازی شدید، آشفتگی پلاسمایی یا منابع فعال برداری، امکان تولید ورتیسیته‌های بزرگتر وجود دارد که می‌تواند اثرات مورد بررسی این مقاله را تقویت کند. این نتیجه نشان می‌دهد که تنها در سناریوهای دارای ورتیسیته قوی، اثر دینامیکی چرخش بر تشکیل سیاهچاله‌های نخستین می‌تواند اهمیت فیزیکی داشته باشد.با توجه به مقادیر کوچک مورد انتظار برای ورتیسیته در مدل‌های استاندارد کیهان‌شناسی، نتیجه طبیعی این مطالعه آن است که اثر چرخش‌های موضعی بر فراوانیPBH ها در اغلب سناریوهای واقع‌بینانه ناچیز خواهد بود. با این حال، این چارچوب یک ابزار تحلیلی مفید برای بررسی نقش احتمالی مدهای برداری در فیزیک کیهان اولیه فراهم می‌کند. از منظر فیزیکی، این مطالعه نشان می‌دهد که حتی در صورت وجود چرخش‌های موضعی کوچک، ساختار نمایی فراوانیPBH ها می‌تواند در سناریوهای غیرخطی یا دارای تولید تقویت‌شده ورتیسیته، به طور قابل توجهی تغییر کند. این موضوع می‌تواند در مدل‌های غیر استاندارد کیهان اولیه، مانند سناریوهای توربولانس یا گذارهای فازی شدید، اهمیت پیدا کند.

در مجموع، این کار یک برآورد تحلیلی اولیه از اثر ورتیسیته موضعی بر تشکیل سیاهچاله‌های نخستین ارائه می‌دهد و می‌تواند به عنوان پایه‌ای برای مطالعات دقیق‌تر عددی و شبیه‌سازی‌های آینده مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع‌ها

[1]B. J. Carr and S. W. Hawking,
Black holes in the early Universe,
Mon. Not. R. Astron. Soc. 168, 399.(1974)
[2]B. J. Carr, K. Kohri, Y. Sendouda and J. Yokoyama,
Primordial Black Hole Constraints for Extended Mass Functions ,Phys. Rev. D 94, 044029.(2016)
[3]B. Carr and F. Kühnel,
Primordial Black Holes as Dark Matter: Recent Developments ,Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. 70, 355 .(2020)
[4]I. Musco,
Threshold for primordial black holes: Dependence on the shape of the cosmological perturbations,
Phys. Rev. D 100, 123524.(2019)
[5]C. Bhattacharjee and D. J. Stark, "Vortex generation in the early Universe", Astron. Astrophys. 642, L5 (2020).
[6] D. Cutting, M. Hindmarsh and D. J. Weir, "Vorticity, kinetic energy, and suppressed gravitational wave production in strong first order phase transitions", Phys. Rev. Lett. 125, 021302 (2020).
[7] He, M., Suyama, T. "Formation threshold of rotating primordial black holes", Phys. Rev. D 100, 063520. (2019).
[8] S. Young, I. Musco, and C. T. Byrnes,
Primordial black hole formation and abundance: contribution from non-Gaussian perturbations,
JCAP 11, 012 (2016).
[9] C. Germani and I. Musco,
Abundance of primordial black holes depends on the shape of the inflationary power spectrum,
Phys. Rev. Lett. 122, 141302 (2019).
[10] I. Musco and J. C. Miller,
"Primordial black hole formation in the early Universe: critical behaviour and self-similarity",
Class. Quantum Grav. 30, 145009 (2013).
[11] K. Kohri and T. Terada,
Primordial black holes and gravitational waves from second-order perturbations,
Class. Quantum Grav. 35, 235017 (2018).
[12] G. Domènech,
Induced gravitational waves in a general cosmological background,
Universe 7, 398 (2021).
[13] A. Escrivà,
Simulation of primordial black hole formation,
Phys. Dark Univ. 27,100477 (2020)

تشکیل سیاهچاله‌های آغازین و امواج گرانشی القایی در مدل تورمی تاکیونی

پریا خاکسارحقانی و نرگس رشیدی
گروه فیزیك نظری، دانشگاه مازندران ، بابلسر

چکیده

دراین مقاله، تشکیل سیاهچاله‌های آغازین و امواج گرانشی القایی در یک مدل تورمی تاکیونی بررسی شده است. با ورود مدل به فاز فوق‌غلتش آرام، طیف توان اختلالات انحنا در مقیاس‌های کوچک تا مرتبه 10^{-2}تقویت می‌شود. نتایج عددی نشان می‌دهند که سیاهچاله‌های آغازین تولید شده در این مدل می‌توانند بخشی از ماده تاریک کیهانی را توجیه کنند و سیگنال‌های امواج گرانشی القایی متناظر با آن‌ها، به خوبی در بازه حساسیت رصدی آشکارسازهای مختلف قرار می‌گیرند.

واژه های کلیدی: *تورم تاکیونی، سیاهچاله‌های آغازین، امواج گرانشی القایی، پارامتربندی پدیدارشناختی.*

Primordial Black Hole Formation and Induced Gravitational Waves in a Tachyonic Inflationary Model

Parya Khaksar Haghani and Narges Rashidi
Department of Theoretical Physics, University of Mazandaran, Babolsar, Mazandaran, Iran

Abstract

This study investigates the formation of primordial black holes (PBHs) and induced gravitational waves within a tachyonic inflationary framework. By transitioning into an ultra-slow-roll phase, the curvature power spectrum is enhanced to $\mathcal{P}_{\mathcal{R}} \sim 10^{-2}$at small scales. Our numerical results demonstrate that the resulting PBHs can account for the entirety of dark matter, while the associated SIGW signals are well-positioned within the sensitivity frequency bands of different future space-based detectors.

keywords: *Tachyonic inflation, Primordial black holes, Induced gravitational waves.*

PACS No:98.80, Cq,98.80Es

مقدمه

مدل‌های تورمی تک‌میدانی علی‌رغم موفقیتهای مختلف، در تبیین ساختارهای کوچک‌مقیاس مانند سیاهچاله‌های آغازین (PBHs) با چالش مواجه‌اند. تولید PBHها نیازمند تقویت موضعی طیف توان اختلالات اسکالر در مقیاس‌های کوچک است که فراتر از دینامیک غلتش آرام ساده قرار می‌گیرد. در این پژوهش، امکان ایجاد تقویت موضعی در طیف توان اولیه‌ی اختلالات انحنا در چارچوب یک مدل تورمی الهام‌گرفته از تاکیون بررسی شده است. هدف اصلی، ارزیابی این است که آیا چنین ویژگی‌هایی می‌توانند بدون ناسازگاری با داده‌های رصدی موجود، اختلالات را در مقیاس‌های کوچک به‌طور چشمگیری تقویت کنند. همچنین اثر این تقویت بر تشکیل سیاهچاله‌های نخستین و ایجاد زمینه‌ی تصادفی امواج گرانشی القایی مورد بررسی قرار گرفته است.

چارچوب مدل

در این کار، مدل تورمی بر پایه میدان تاکیونی ϕ را در پس‌زمینه فضا-زمان تخت (FRW) بررسی می‌کنیم. ویژگی اصلی این مدل، غیرکانونی بودن کنش آن است که منجر به دینامیک متفاوتی نسبت به مدل‌های استاندارد می‌شود. کنش میدان تاکیونی ϕ با پتانسیل $V(\phi)$ به صورت زیر تعریف می‌شود

$$S = \int d^4x\sqrt{-g}\left[\left(\frac{M_{pl}^2}{2}\right)R - V(\phi)\sqrt{1 - g^{\mu\nu}\partial_\mu\phi\partial_\nu\phi}\right] \quad (1)$$

معادلات فریدمن برای این مدل عبارتند از

$$H^2 = \frac{V(\varphi)/\sqrt{(1-\dot{\varphi}^2)}}{3M_{pl}^2} \quad (2)$$

$$\dot{H} = -V(\varphi)\,\dot{\varphi}^2 / [2\,M_{pl}^2\sqrt{(1-\dot{\varphi}^2)}] \quad (3)$$

سرعت صوت در این مدل نیز به صورت زیر می باشد

$$c_s^2 = 1 - \dot{\phi}^2 \quad (4)$$

پارامترهای غلتش آرام نیز بدین صورت تعریف می شوند

$$\epsilon^1 = -\frac{\dot{H}}{H^2} \quad (5)$$

$$\epsilon^2 = \left(\frac{1}{H}\right)\left(\frac{\dot{\epsilon}^1}{\epsilon^1}\right) \quad (6)$$

$$s = (1/H)(\dot{c}_s/c_s) \quad (7)$$

در این پژوهش، پتانسیل مؤثر زیر در نظر گرفته می شود

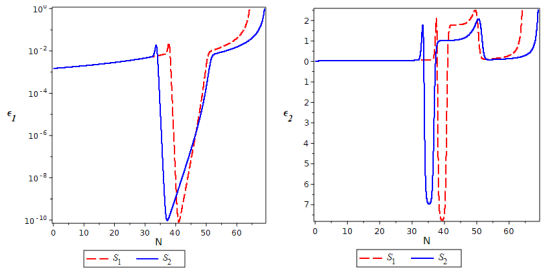
$$V(\phi) = V_0\left(1-e^{-\beta\phi}\right)^2 \left[1 + C_d \exp -\frac{(\phi-\phi_d)^2}{2\sigma^2} - C_b \exp\frac{(\phi-\phi_b)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (8)$$

که در آن V_0 مقیاس انرژی تورم، β شیب پتانسیل و پارامترهای C_d، C_b، ϕ_d، ϕ_b و σ به‌ترتیب دامنه، مکان و پهنای ویژگی‌های موضعی گاوسی را مشخص می‌کنند. این ویژگی‌های موضعی باعث کاهش موقت پارامتر غلتش آرام اول شده و در نتیجه، اختلالات انحنای اولیه را در مقیاس‌های کوچک تقویت می‌کنند. این تقویت می‌تواند زمینه مناسبی برای تشکیل سیاهچاله‌های نخستین پس از ورود مجدد مدها به افق در دوران چیرگی تابش فراهم سازد. با استفاده از این پتانسیل و معادلات فریدمن میتوان پارامترهای غلتش آرام را در این مدل بررسی کرد. رفتار پارامترهای غلتش آرام در این مدل در شکل (1) نمایش داده شده است که به وضوح ورود سیستم به فاز USR را تایید می‌کند. در تحلیل‌های عددی، پارامترهای مدل به صورت ثابت برابر با $V_0 = 1$، $\beta = 0.44$، $C_d = 0.9960 \times 10^{-6}$، $\phi_d = 3.10$ و $\sigma = 0.13$ در نظر گرفته شدند. همچنین دو مجموعه پارامتری S_1 و S_2 تنها در مقادیر پارامترهای C_b و ϕ_b با یکدیگر تفاوت دارند که به‌ترتیب برای بررسی اثر ویژگی موضعی پتانسیل تغییر داده شده‌اند.

اختلالات اسکالر و طیف توان

برای بررسی اختلالات خطی، از متغیر موخانوف-سازاکی u_k استفاده می‌کنیم. معادله تحول این متغیر به صورت زیر است[1،2]

$$u_k'' + \left(c_s^2 k^2 - \frac{z''}{z}\right) u_k = 0 \quad (9)$$



شکل 1 رفتار پارامترهای غلتش آرام در مدل تاکیونی. منحنی خطچین قرمز مربوط به مجموعه پارامتری $C_b = 0.0143631$ و $\phi_b = 37.7$ و منحنی پیوسته آبی مربوط به $C_b = 0.0119993$ و $\phi_b = 3.55$ است.

در این رابطه، پارامتر z به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$z = \frac{a\sqrt{2\epsilon_1}M_{\rm pl}}{c_s} \quad (10)$$

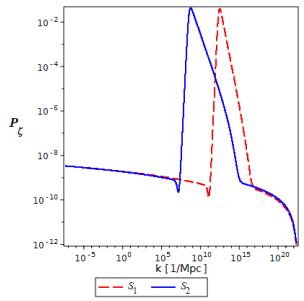
کاهش موضعی پارامتر غلتش آرام اول ϵ_1 که در بخش قبلی معرفی شد، باعث تغییر سریع پارامتر z و در نتیجه تقویت چشمگیر طیف توان اسکالر در مقیاس‌های کوچک می‌گردد. طیف توان اسکالر نیز از رابطه زیر به دست می‌آید

$$\mathcal{P}_{\mathcal{R}}(k) = \frac{k^3}{2\pi^2}\left|\frac{u_k}{z}\right|^2 \quad (11)$$

با حل عددی معادله موخانوف-سازاکی می توان تحول طیف توان اسکالر بر حسب عدد موج را بررسی کرد. نتیجه در شکل (2)نشان داده شده است که طیف توان در مقیاس‌های کوچک تا مرتبه 10^{-2} تقویت شده است برای تشکیل سیاهچاله‌های آغازین ضروری است.

فراوانی سیاهچاله‌های آغازین

زمانی که اختلالات تقویت‌شده در فاز فوق‌غلتش آرام، پس از پایان تورم مجدداً به داخل افق کیهانی وارد می‌شوند، اگر دامنه اختلال چگالی از یک مقدار آستانه $\delta_{\rm th}$ فراتر رود، فروریزش گرانشی رخ داده و سیاهچاله‌های آغازین شکل می‌گیرند. در این محاسبات، مقدار آستانه طبق مراجع معتبر برابر با $\delta_{\rm th} = 0.4$ در نظر گرفته شده است.



شکل 2 طیف توان اختلالات انحنا بر حسب عدد موج با مجموعه پارامتری مذکور.

جرم سیاهچاله‌های آغازین در لحظه تشکیل (M) با جرم افق در آن لحظه متناسب است. کسر جرمی اولیه $\beta(M)$ با استفاده از آمار گوسی به صورت زیر به دست می‌آید [5-3]

$$\beta(M) \simeq \frac{\gamma_c\,\sigma(M)}{\sqrt{2\pi}\,\delta_{\rm th}} \exp\left(-\frac{\delta_{\rm th}^2}{2\sigma^2(M)}\right) \quad (12)$$

که در آن

$$\sigma^2(k_0) = \int d\ln k\ \frac{16}{81}\,W^2\left(\frac{k}{k_0}\right)\left(\frac{k}{k_0}\right)^4 \mathcal{P}_{\mathcal{R}}(k) \quad (13)$$

$$W(x) = e^{-x^2/2} \Rightarrow W^2(x) = e^{-x^2} \quad (14)$$

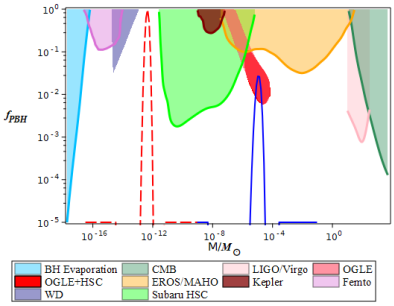
کمیت نهایی مورد نظر، کسر فراوانی PBHs نسبت به کل ماده تاریک است که از رابطه زیر استخراج می‌شود

$$f_{\rm PBH}(M) = 0.168\times10^{9}\left(\frac{\gamma_c}{0.2}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{g_*}{106.75}\right)^{-\frac{1}{4}}M^{-\frac{1}{2}}\beta(M) \quad (15)$$

شکل 3 فراوانی جرمی سیاهچاله‌های آغازین حاصل از مدل را در بستر مهم‌ترین قیود رصدی موجود [6-13] نشان می‌دهد. به نظر می رسد که در حالت های بررسی شده در این مدل، سیاهچاله‌های آغازین می‌توانند بخش از ماده تاریک کیهانی را تشکیل دهند.

طیف امواج گرانشی القایی

یکی از مهم‌ترین پیش‌بینی‌های مدل‌های تورمی که طیف توان اسکالر را در مقیاس‌های کوچک تقویت می‌کنند، تولید امواج گرانشی در مرتبه دوم اختلالات است که به آن‌ها «امواج گرانشی القایی» (SIGWs) گفته می‌شود. چگالی انرژی امواج گرانشی القایی در زمان حاضر، با استفاده از رابطه زیر محاسبه می‌شود [14]



شکل 3 فراوانی سیاهچاله‌های آغازین بر حسب جرم نرمال‌شده به جرم خورشید.

$$\Omega_{\rm GW}(\eta_c,k) = \frac{1}{12}\int_0^{\infty}dv\int_{|1-v|}^{1+v}du\left[\frac{4v^2-(1+v^2-u^2)^2}{4uv}\right]^2 \times \mathcal{P}_{\mathcal{R}}(ku)\,\mathcal{P}_{\mathcal{R}}(kv)\,\mathcal{I}^2(u,v) \quad (16)$$

در این رابطه، جمله‌ی داخل کروشه‌ی اول بخش هندسی جفتیدگی مدها را توصیف می‌کند، در حالی که تابع $\mathcal{I}(u,v)$ بیانگر **اثر** زمانی مؤثر جمله منبع در دوران تابش است که از حل معادله‌ی تانسوری به‌دست می‌آید. فرم صریح این تابع به‌صورت

$$\mathcal{I}^2(u,v) = \left[\frac{3(u^2+v^2-3)}{4u^3v^3}\left(-4uv + (u^2+v^2-3)\ln\left|\frac{3-(u+v)^2}{3-(u-v)^2}\right|\right)\right]^2 + \pi^2\left[\frac{3(u^2+v^2-3)}{4u^3v^3}\right]^2\phi(u+v-\sqrt{3}) \quad (17)$$

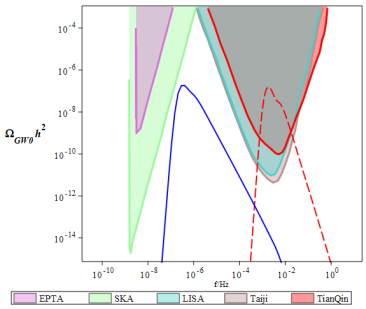
نوشته می‌شود. جمله‌ی شامل تابع پله‌ای هویساید Φ ناشی از ساختار نوسانی منبع و عبور آن از ناحیه‌ی رزونانسی است برای انتقال این کمیت به زمان کنونی، از رابطه‌ی

$$\Omega_{\rm GW,0}(k)h^2 = 0.83\left(\frac{g_c}{10.75}\right)^{-\frac{1}{3}}\Omega_{r,0}h^2\,\Omega_{\rm GW}(\eta_c,k) \quad (18)$$

استفاده می‌شود که در آن $\Omega_{r,0}h^2 \simeq 4.2\times10^{-5}$ چگالی تابش امروزی و g_c تعداد درجات آزادی در زمان تولید است. این رابطه اثر انبساط کیهان و تغییر درجات آزادی را در انتقال طیف به زمان حال در نظر می‌گیرد. شکل 4 کمیت $\Omega_{\rm GW,0}h^2$ را بر حسب فرکانس در بستر محدوده‌ی حساسیت آشکارسازهای مختلف [15-23] نشان می‌دهد. طیف امواج گرانشی القایی دارای ساختاری پیکی است که مستقیماً ناشی از پیک طیف توان اسکالر و توزیع جرمیPBH ها است. این رفتار نشان می‌دهد که مدل حاضر نه‌تنها منجر به تشکیل سیاهچاله‌های آغازین می‌شود، بلکه یک پس‌زمینه از امواج گرانشی نیز تولید می‌کند که می‌تواند به‌عنوان آزمونی مستقل برای صحت مدل مورد استفاده قرار گیرد. همچنین، برای آزمودن بیشتر مدل می توان پارامترهای اختلالی شاخص طیفی اسکالر $n_s = 1-2\epsilon_1-\epsilon_2-s$ با $s=\frac{\dot{c}_s}{Hc_s}$ و نسبت تانسور $(r=16\epsilon_1c_s)$ به اسکالر را بررسی کرد. بررسی ما نشان می دهد که به ازای هر دو مجموعه از داده های انتخاب شده در بخشهای قبلی، مدل مقادیر زیر از r و n_s را به دست می دهد

$$ns \sim 0.975 \text{ و } r \sim 2.51\times10^{-2}$$

که سازگار با داده‌های ترکیبی از Planck 2018 ، BK18، DESI، DESY5 است [24-28].



شکل 4 طیف امواج گرانشی القایی بر حسب فرکانس.

جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در این مقاله، یک مدل تورمی تاکیونی برای سیاهچاله های آغازین بررسی شد. نوع پتانسیل و نیز وجود یک کاهش موضعی در پارامتر غلتش آرام، منجر به ورود موقت سیستم به فاز فوق

غلتش آرام مؤثر و در نتیجه تقویت قابل توجه طیف توان اختلالات اسکالر در مقیاس‌های کوچک شد. این تقویت شرایط لازم برای تشکیل سیاهچاله‌های آغازین با توزیع جرمی باریک و سازگار با بخش مهمی از قیود رصدی موجود را فراهم کرد. همچنین همان ساختار موجب تولید طیف پیکی از امواج گرانشی القایی شد که امکان آزمون رصدی مدل را فراهم می‌سازد. از سوی دیگر، بررسی پارامترهای شاخص طیفی اسکالر و نسبت تانسور به اسکالر نشان داد که این سناریو در عین تولید PBH و سیگنال‌های قابل آشکارسازی GW ، همچنان با داده‌های تابش زمینه کیهانی و قیود رصدی سازگار باقی می‌ماند. بنابراین، مدل تاکیونی حاضر می‌تواند چارچوبی خودسازگار برای توضیح هم‌زمان تورم اولیه، تشکیل سیاهچاله‌های آغازین و تولید امواج گرانشی القایی فراهم سازد.

مراجع

[1] V. F. Mukhanov, Sov. Phys. JETP 67, 1297 (1988).
[2] M. Sasaki, Prog. Theor. Phys. 76, 1036 (1986).
[3] S. Young, C. T. Byrnes, and M. Sasaki, JCAP **07**, 045 (2014).
[4] M. Sasaki, T. Suyama, T. Tanaka, and S. Yokoyama, Class. Quant. Grav. **35**, 063001 (2018).
[5] M. Shibata and M. Sasaki, Phys. Rev. D **60**, 084002 (1999).
[6] Y. Ali-Haïmoud and M. Kamionkowski, Phys. Rev. D **95**, 043534 (2017).
[7] V. Poulin, P. D. Serpico, F. Calore, S. Clesse, and K. Kohri, Phys. Rev. D **96**, 083524 (2017).
[8] B. J. Carr, K. Kohri, Y. Sendouda, and J. Yokoyama, Phys. Rev. D **81**, 104019 (2010).
[9] P. Tisserand *et al.* (EROS-2 Collaboration), Astron. Astrophys. **469**, 387 (2007).
[10] H. Niikura *et al.*, Nat. Astron. **3**, 524 (2019).
[11] H. Niikura, M. Takada, S. Yokoyama, T. Sumi, and S. Masaki, Phys. Rev. D **99**, 083503 (2019).
[12] Y. Ali-Haimoud, E. D. Kovetz, and M. Kamionkowski, Phys. Rev. D **96**, 123523 (2017).
[13] K. Griest, A. M. Cieplak, and M. J. Lehner, Phys. Rev. Lett. **111**, 181302 (2013).
[14] K. Kohri, T. Terada, Phys. Rev. D **97**, 123532 (2018).
[15] R. D. Ferdman *et al.*, Class. Quantum Grav. **27**, 084014 (2010).
[16] G. Hobbs *et al.*, Class. Quantum Grav. **27**, 084013 (2010).
[17] M. A. McLaughlin, Class. Quantum Grav. **30**, 224008 (2013).
[18] G. Hobbs, Class. Quantum Grav. **30**, 224007 (2013).
[19] C. J. Moore, R. H. Cole, and C. P. L. Berry, Class. Quantum Grav. **32**, 015014 (2015).
[20] P. Amaro-Seoane *et al.* (LISA Collaboration), arXiv:1702.00786.
[21] K. Danzmann, Class. Quantum Grav. **14**, 1399 (1997).
[22] W. R. Hu and Y. L. Wu, Natl. Sci. Rev. **4**, 685 (2017).
[23] J. Luo *et al.* (TianQin Collaboration), Class. Quantum Grav. **33**, 035010 (2016).
[24] D. Paoletti, F. Finelli, J. Valiviita & M. Hazumi, Phys. Rev. D 106, 083528 (2022).
[25] D. Wang, [arXiv:2404.06796] (2024).
[26] S. S. da Costa, [arXiv:2412.14290] (2024).
[27] T. Louis et al. [ACT], [arXiv:2503.14452] .
[28] E. Calabrese et al. [ACT], [arXiv:2503.14454].

حل معادله کلاین–گوردون در فضا- زمان ریسمان کیهانی

شیرانی بیدآبادی ، میلاد[۱] ؛ احمدی کلاته ، فاطمه[۲]

[۱] کارشناسی ارشد گرانش و کیهان شناسی، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی تهران

[۲] گروه علوم پایه، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی تهران

چکیده

در این مقاله، حل معادله کلاین–گوردون برای ذرات نسبیتی بدون اسپین در فضا–زمان ریسمان کیهانی بررسی می شود. ریسمان‌های کیهانی به‌عنوان نقص‌های توپولوژیکی ناشی از گذار فازهای اولیه کیهان، سبب ایجاد انحنا و تغییرات هندسی در فضا–زمان می‌شوند و انتظار می رود که این تغییرات بر ویژگی های تابع موج و طیف انرژی آن تأثیر بگذارد. در اینجا، با در نظر گرفتن متریک فضا- زمان ریسمان کیهانی، معادله کلاین–گوردون در فضای خمیده حل می‌گردد. جواب ها نشان می‌دهند که حضور نقص هندسی ریسمان کیهانی، موجب تغییرات قابل‌توجهی در ساختار مدهای تابع موج و طیف انرژی آن در مقایسه با فضا – زمان تخت می‌شود. به نظر می‌رسد که این تفاوت‌ها، در آشکاری سازی ذرات قابل مشاهده باشند.

واژه های کلیدی: فضا – زمان خمیده، ریسمان کیهانی، ذرات نسبیتی، معادله کلاین –گوردون،

Solving the Klein–Gordon equation in cosmic string spacetime

Shirani bidabadi, Milad[۱]; Ahmadi kalate, Fatemeh[۲]

[۱] *Master's Degree in Gravity and Cosmology, Shahid Rajaee Teacher Training University, Tehran*

[۲] *Department of Basic Sciences, Shahid Rajaee Teacher Training University, Tehran*

Abstract

In this paper, the Klein–Gordon equation is solved for spinless relativistic particles in cosmic string spacetime. Cosmic strings, as topological entities originating from the early phases of the universe, cause curvature and geometric changes in spacetime, and these changes are expected to affect the properties of its wave properties and energy. Here, by considering the metric of cosmic string spacetime, the Klein–Gordon equation is solved in curved spacetime. The solutions show that the lack of cosmic string geometry causes significant changes in the structure of the wave function modes and its energy compared to flat spacetime. These differences seem to be observable in the construction of the essence.

***Keywords*: *Curved space-time, cosmic string, relativistic particles, Klein-Gordon equation*,**

مقدمه

معادله کلاین-گوردون یکی از معادلات مشهور موج نسبیتی است که برای توصیف ذرات بدون اسپین در مکانیک کوانتومی نسبیتی مورد استفاده قرار می‌گیرد [۱]. یکی از عواملی که می‌تواند بر روی حل این معادله تأثیر بگذارد، شکل و خصوصیات فضا-زمان است. فضا-زمان خمیده، بر اساس تئوری نسبیت عام، توسط توزیع ماده و انرژی در آن مشخص می‌شود [۲]. از مدل‌های جالب فضا-زمان، فضا-زمان ریسمان کیهانی است که به عنوان یک نقص توپولوژیک به شکل یک خط راست تک‌بعدی وجود دارد و می

تواند در اثر شکست تقارن در دوران اولیه ایجاد شده باشد [۱]. ریسمان‌های کیهانی به دلیل چگالی انرژی بسیار زیاد خود، ساختار فضا–زمان را در اطراف شان تغییر می‌دهند و در نتیجه می‌توانند آثار گرانشی قابل مشاهده‌ای مانند همگرایی گرانشی و تولید امواج گرانشی ایجاد کنند[۲]. برخلاف مطالعات پیشین که به بررسی اثرات غیرلخت و پتانسیل های پیچیده خارجی پرداخته‌اند، در پژوهش حاضر بر حل بنیادی و دقیق معادله جهت استخراج اثر محض هند سه مخروطی و پارامتر نقصان زاویه‌ای (α) بر ترازهای انرژی تمرکز شده است [۳، ٤]. این رویکرد به عنوان یک مدل اولیه برای درک بهتر تأثیرات خالص توپولوژیکی فضا–زمان بر سیستم‌های کوانتومی عمل می‌کند.

معادله کلاین – گوردون

معادله کلاین–گوردون یکی از نخستین معادلات موج نسبیتی است که برای توصیف ذرات بدون اسپین (اسکالر) در فیزیک کوانتومی معرفی شد. این معادله در سال ۱۹۲٦ توسط اسکار کلاین و والتر گوردون ارائه گردید و شکل کلی آن در فضای تخت مینکوفسکی به صورت زیر است[۵]:

$$(-\frac{\partial^2}{c^2 t^2}+\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\frac{m^2 c^2}{\hbar^2})\psi(\vec{x},t)=0 \quad (۱)$$

این معادله بیانگر رابطه انرژی–تکانه ذره به صورت:

$$E^2=P^2C^2+E_0^2 \quad (۲)$$

می‌باشد که طیف انرژی استاندارد نسبیتی را نشان می‌دهد. اهمیت این معادله در آن است که پایه‌ای برای مطالعه میدان‌های اسکالر در شرایط مختلف فضا–زمانی فراهم می‌کند.

فضا–زمان خمیده

بر اساس نظریه نسبیت عام اینشتین، توزیع ماده و انرژی موجب خمیدگی فضا–زمان می‌شود. این خمیدگی با استفاده از تانسور متریک و معادلات اینشتین توصیف می‌گردد. در فضا–زمان خمیده، معادلات موج باید با در نظر گرفتن هندسه زمینه بازنویسی شوند. به طور کلی، معادله کلاین–گوردون در فضا–زمان خمیده به صورت زیر بیان می‌شود[۵]:

$$\frac{1}{\sqrt{-g}}\partial_\mu\left(\sqrt{-g}g^{\mu\nu}\partial_\nu\psi\right)-\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi=0 \quad (۳)$$

در این محاسبات از دستگاه واحد های طبیعی[۱] ($\hbar$=c=۱) استفاده شده است.

$$\left(\frac{1}{\sqrt{-g}}\frac{\partial}{\partial x^\mu}\sqrt{-g}g^{\mu\nu}\frac{\partial}{\partial x^\nu}-m^2\right)\psi=0 \quad (٤)$$

ریسمان کیهانی

ایده وجود ریسمان ها کیهانی، برای نخستین بار در سال ۱۹۷٦ توسط تام کیبل مطرح شد. بنابر مدل کیبل، این ریسمان‌ها در واقع نقص های هندسی یک بعدی در ساختار فضا – زمان هستند که اندک زمانی پس از مهبانگ شکل‌گرفته‌اند. جهان اولیه با گذر از فازهای مختلف سریع سرد می‌شود و به شکل نسبتا آرامی که امروزه مشاهده می کنیم، درآمده است. او دریافت که ساختار فضا – زمان در طی سردشدن سریع باید دچار نقص‌های هندسی شده باشد[٦].

متریک ریسمان کیهانی

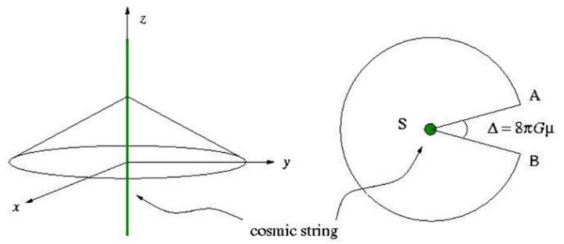
تانسور متریک فضا – زمان ریسمان کیهانی هموردا[۲] به شکل زیر است [۷]:

$$g_{\mu\nu}=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \alpha^2r^2 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix} \quad (۵)$$

عنصر خطی متریک مربوط به این هندسه را می توان به صورت زیر نوشت:

$$ds^2=-dt^2+dr^2+\alpha^2r^2d\theta^2+dz^2 \quad (٦)$$

که $\alpha=1-4G\mu$ پارامتر رشته کیهانی را مشخص می کند و μ چگالی جرم ریسمان کیهانی است. همچنین t مختصات زمان است، و (z, θ, r)مختصات استوانه‌ای هستند. در این فضا – زمان محدوده مختصات به صورت $0\le r<\infty$ و $0\le\theta\le 2\pi$ و $(t,z)<\infty$ پارامتر α خمیدگی فضا – زمان را مشخص می کند[٤].



شکل ۱: فضا – زمان مخروطی که حول یک ریسمان کیهانی تشکیل شده است[۷].

[۱] Natural units

[۲] Covariant

کیهان‌شناسی و گرانش محدودیت‌هایی را برای پارامتر α تحمیل می‌کنند که به $\alpha < 1$ محدود می‌شود[٤].

در اینجا به بررسی $0 < \alpha < 1$ می پردازیم. ماهیت مخروطی فضا-زمان در حضور ریسمان کیهانی می تواند اثرات فیزیکی جالبی ایجادکند. برای تجسم این ریسمان کیهانی یک بخش زاویه ای $2\pi(1-\alpha)$ را حذف می کنیم. به این ترتیب تغییرات زاویه سمتی در محدوده $0 < \theta < 2\pi\alpha$ می باشد. α زاویه کاستی از هندسه مخروطی است.

بنا بر آنچه گفته شد، پارامتر α را در محدوده $0 < \alpha < 1$ در نظر می‌گیریم. این متریک فضا – زمان اطراف یک ریسمان کیهانی را توصیف می‌کند.

با تغییر متغیر $\hat{\theta} = (1-4G\mu)\theta$ متریک ریسمان کیهانی به متریک مینکوفسکی تبدیل می یابد. با این حال فضا – زمان ریسمان کیهانی تفاوت اساسی با فضا – زمان تخت دارد. بازه تغییرات θ در فضا – زمان ریسمان کیهانی به صورت $0 < \theta < 2\pi$ است. لذا:

$$0 < \hat{\theta} < 2\pi(1-4G\mu) \qquad (۷)$$

از رابطه (۷) می توان متوجه شد که بازه تغییرات زاویه سمتی در فضا – زمان ریسمان کیهانی به اندازه $8\pi G\mu$ که از بازه تغییرات زاویه سمتی در فضا – زمان مینکوفسکی کمتر است. اثرات گرانشی ریسمان کیهانی مربوط به همین کمیت $\Delta\theta = 8\pi G\mu$ است که به آن زاویه کاستی یا نقصان زاویه ای[۳] می گویند[۷].

حل معادله کلاین–گوردون در فضا–زمان ریسمان کیهانی

با توجه به این که ریسمان‌های کیهانی بر فضا – زمان اطراف خود تأثیر می‌گذارند و فضا – زمان را خمیده می‌کنند؛ برای بررسی جوابهای معادله کلاین – گوردون در این فضا – زمان از معادله (٤) که به‌عنوان معادله کلاین – گوردون در فضا – زمان خمیده است، شروع می‌کنیم. سپس این معادله به‌دست‌آمده را حل می‌نماییم [۸].

باتوجه‌به رابطه ٦ خواهیم داشت:

$$g = detg_{\mu\nu} = -\alpha^2 r^2 \quad \text{و} \quad \sqrt{-g} = \alpha r \qquad (۸)$$

حال در معادله ۷ جایگذاری می کنیم.

$$\frac{1}{\alpha r}\partial_\mu(\alpha r g^{\mu\nu}\partial_\nu\psi) - m^2\psi = 0 \qquad (۹)$$

جمله اول معادله فوق را می‌توان به‌صورت زیر باز نمود:

$$\frac{1}{\alpha r}\partial_\mu(\alpha r g^{\mu\nu}\partial_\nu\psi) = \frac{1}{\alpha r}[\partial_0(\alpha r g^{0\nu}\partial_\nu\psi) + \partial_1(\alpha r g^{1\nu}\partial_\nu\psi) + \partial_2(\alpha r g^{2\nu}\partial_\nu\psi) + \partial_3(\alpha r g^{3\nu}\partial_\nu\psi)] \qquad (۱۰)$$

سپس هر جمله از رابطه فوق را می‌توان به‌صورت جداگانه نوشت:

$$\partial_0(\alpha r g^{0\nu}\partial_\nu\psi) = [\partial_0(\alpha r g^{00}\partial_0\psi) + \partial_0(\alpha r g^{01}\partial_1\psi) + \partial_0(\alpha r g^{02}\partial_2\psi) + \partial_0(\alpha r g^{03}\partial_3\psi)]$$
$$\partial_1(\alpha r g^{1\nu}\partial_\nu\psi) = [\partial_1(\alpha r g^{10}\partial_0\psi) + \partial_1(\alpha r g^{11}\partial_1\psi) + \partial_1(\alpha r g^{12}\partial_2\psi) + \partial_1(\alpha r g^{13}\partial_3\psi)]$$
$$\partial_2(\alpha r g^{2\nu}\partial_\nu\psi) = [\partial_2(\alpha r g^{20}\partial_0\psi) + \partial_2(\alpha r g^{21}\partial_1\psi) + \partial_2(\alpha r g^{22}\partial_2\psi) + \partial_2(\alpha r g^{23}\partial_3\psi)]$$
$$\partial_3(\alpha r g^{3\nu}\partial_\nu\psi) = [\partial_3(\alpha r g^{30}\partial_0\psi) + \partial_3(\alpha r g^{31}\partial_1\psi) + \partial_3(\alpha r g^{32}\partial_2\psi) + \partial_3(\alpha r g^{33}\partial_3\psi)] \qquad (۱۱)$$

با جای‌گذاری روابط (۱۱)در روابط (۱۰)و جمع روابط بدست آمده، می توان بخش اول معادله (۹) را بدین صورت نوشت:

$$\frac{1}{\alpha r}\partial_\mu(\alpha r g^{\mu\nu}\partial_\nu\psi) = \frac{1}{\alpha r}[\partial_0(\alpha r g^{00}\partial_0\psi) + \partial_1(\alpha r g^{11}\partial_1\psi) + \partial_2(\alpha r g^{22}\partial_2\psi) + \partial_3(\alpha r g^{33}\partial_3\psi)] \qquad (۱۲)$$

در نتیجه، معادله (۹) بدین صورت خواهد شد:

$$\left[-\partial_t^2 + \frac{1}{\alpha r}(\partial_r)\alpha r(\partial_r) + \frac{1}{\alpha^2 r^2}\partial_\theta^2 + \partial_z^2 - m^2\right]\psi(r) = 0 \qquad (۱۳)$$

حال جمله دوم داخل عبارت فوق را به صورت زیر می نویسیم:

$$\frac{1}{\alpha r}(\partial_r)\alpha r(\partial_r) = \frac{1}{r}(\partial_r) + \partial_r^2 \qquad (۱٤)$$

با جای‌گذاری رابطه(۱٤)در معادله (۱۳) به معادله زیر خواهیم رسید:

$$\left[-\partial_t^2 + \frac{1}{r}(\partial_r) + \partial_r^2 + \frac{1}{\alpha^2 r^2}\partial_\theta^2 + \partial_z^2 - m^2\right]\psi(r) = 0 \qquad (۱۵)$$

حال تابع موج را به‌صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$\psi(t,r,\theta,z) = e^{i(-Et+l\theta+kz)}\varphi(r) \qquad (۱٦)$$

که E انرژی کل، l و k ثابت هستند. با جاگذاری معادله (۱٦) در معادله (۱۵) داریم:

[۳] Deficit angle

$$\varphi''(r)+\frac{1}{r}\varphi'(r)+\left[E^2-k^2-\frac{l^2}{\alpha^2 r^2}-m^2\right]\varphi(r)=0 \quad (17)$$

حال پارامترهایی را برای محاسبات ساده‌تر تعریف می‌کنیم:

$$\lambda=E^2-k^2-m^2 \quad , \quad v=\sqrt{\frac{l^2}{\alpha^2}} \quad (18)$$

در نتیجه، معادله (۱۷) را می توان بدین صورت نوشت:

$$\varphi''(r)+\frac{1}{r}\varphi'(r)+\lambda\varphi(r)-\frac{v^2}{r^2}\varphi(r)=0 \quad (19)$$

معادله فوق همان معادله بسل است و جواب کلی این معادله به‌صورت زیر است [۹]:

$$\varphi(r)=c_i J_v(r\sqrt{\lambda})+d_i N_v(r\sqrt{\lambda}) \quad (20)$$

حال شرایط فیزیکی مسئله را بر آن اعمال می‌کنیم. با توجه به اینکه تابع موج فیزیکی باید در مرکز مختصات، یعنی محل قرارگیری ریسمان کیهانی، متناهی باقی بماند و از طرفی توابع بسل نوع دوم در مبدأ واگرا می‌شوند، ضریب این دسته از جواب‌ها باید صفر در نظر گرفته شود[۱۰]. بنابراین تنها تابع بسل نوع اول که در مبدأ رفتاری منظم دارد در جواب باقی می‌ماند و رابطه (۲۱) حاصل می‌شود:

$$\varphi(r)=c_i J_v(r\sqrt{\lambda}) \quad (21)$$

از طرفی وقتی r خیلی بزرگ می‌شود، می‌توان فرض کرد که به شعاع کیهان که ما آن را R می‌نامیم، میل می‌کند؛ بنابراین باید تابع موج در $R=r$ مساوی صفر شود، پس خواهیم داشت:

$$(R\sqrt{\lambda})=(x_{kn}) \quad , \quad \lambda=\frac{x_{kn}^2}{R^2} \quad (22)$$

که x_{kn} ها صفر های توابع بسل هستند. حال با استفاده از پارامترهای فوق، می توان ویژه مقادیر انرژی [۴] معادله کلاین – گوردون در فضا – زمان ریسمان کیهانی را بدین صورت بدست آورد:

$$E_n^2=\frac{x_{kn}^2}{R^2}+k^2+m^2 \quad (23)$$

همچنین ویژه توابع زیر را به دست آورد:

$$\psi(t,r,\theta,z)=c_i J_v\left(\frac{x_{kn}}{R}r\right)e^{i(-Et+l\theta+kz)} \quad (24)$$

نتیجه گیری

در این مقاله، حل معادله کلاین–گوردون برای ذرات نسبیتی بدون اسپین در فضا–زمان ریسمان کیهانی بررسی شد. نتایج نشان می‌دهد که مرتبه مدهای تابع موج و طیف انرژی آن نسبت به فضا – زمان تخت تغییر می‌کند. به‌عبارت‌دیگر، نقص توپولوژیکی در فضا – زمان ریسمان کیهانی، بر ساختار مدهای شعاعی و زاویه‌ای تابع موج تأثیر می‌گذارد؛ همچنین، انرژی حالت‌های مجاز را افزایش می دهد؛ بنابراین به نظر می‌رسد که هندسه فضا–زمان ریسمان کیهانی اثرات قابل‌ملاحظه‌ای در خواص دینامیکی میدان‌های اسکالر و در نتیجه بر آشکارسازی ذرات نسبیتی بدون اسپین داشته باشد.

مرجع‌ها

[۱] M. R. Anderson, "The mathematical theory of cosmic strings", IOP Publishing Ltd(۲۰۰۳).

[۲] Stephen Battersby, "Cosmic string: The search continues", New Scientist, ۲۳ Feb ۲۰۰۸

Vilenkin, A. (۱۹۸۱). Gravitational field of vacuum domain walls and strings. Physical Review D, ۲۳(٤), ۸۵۲.

[۳] Santos, L. C. N., & Barros Jr, C. C. (۲۰۱۸). Relativistic quantum motion of spin-۰ particles under the influence of noninertial effects in the cosmic string spacetime. The European Physical Journal C, ۷۸(۱), ۱۳. https://doi.org/۱۰,۱۱٤۰/epjc/s۱۰۰۵۲-۰۱۷-٥٤۹۷-z

[٤] Santos, L. C. N., & Barros Jr, C. C. (۲۰۱۷). Scalar bosons under the influence of noninertial effects in the cosmic string spacetime. European Physical Journal Plus, ۱۳۲(۳), ۱۲٥. https://doi.org/۱۰,۱۱٤۰/epjp/i۲۰۱۷-۱۱۳۸۸-۱

[٥]Greiner, Walter. Relativistic Quantum Mechanics.Wave Equations. Springer, Chap. (۱،۲،۱٦), ۱-۱۲٦،۳۸۹-۳۹۰, (۲۰۰۰).

[٦] جهانگیری لاله (۱۳۹٥)، «سیستم های کوانتومی مقید بر روی فضاهای خمیده»، رساله دکتری فیزیک، دانشگاه گیلان

[۷]Vilenkin, A. (۱۹۸۳). Gravitational field of vacuum domain walls. Physics Letters B, ۱۳۳(۳-٤), ۱۷۷-۱۷۹.

[۸] Belahcene, I. (۲۰۱۹). Searching for gravitational waves produced by cosmic strings in LIGO-Virgo data (Doctoral dissertation, Université Paris Saclay (COmUE)).

[۹] Ahmed, F. The generalized Klein–Gordon oscillator in the background of cosmic string space-time with a linear potential in the Kaluza–Klein theory. Eur. Phys. J. C ۸۰, ۲۱۱ (۲۰۲۰). https://doi.org/۱۰,۱۱٤۰/epjc/s۱۰۰۵۲-۰۲۰-۷۷۸۱-٥

[۱۰]Garah, S., & Boumali, A. (۲۰۲٥). Quantum dynamics of scalar particles in a spinning cosmic string background with topological defects: a Feshbach–Villars formalism perspective. The European Physical Journal C, ۸٥, ۱۲٥۷. https://doi.org/۱۰,۱۱٤۰/epjc/s۱۰۰۵۲-۰۲٥-۱٤۸٦٦-۸

[4] eigenvalues

اثر ناگوسیت نخستین متساوی‌الاضلاع‌گونه در گروه‌های همسانی میدان‌چگالی ماده‌تاریک

کریمی، ریحانه[۱ و ۴]؛ جلالی، محمدحسین[۲ و ۳]؛ طالبیان، علیرضا[۲ و ۴]؛ موحد، سید محمد صادق[۲ و ۴]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، ۱۵۸۷۵۴۴۱۶، تهران، ایران
[۲]دانشکده فیزیک ، دانشگاه شهید بهشتی، ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱، تهران، ایران
[۳]پژوهشکده فیزیک، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی(IPM) ، تهران، ایران
[۴]پژوهشکده نجوم، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی(IPM) ، تهران، ایران

چکیده

ناگوسیت نخستین یکی از مهم‌ترین ابزارها برای مطالعه شرایط اولیه کیهان است. در این پژوهش، آثار ناگوسیت نخستین متساوی‌الاضلاع‌گونه بر ساختارهای بزرگ‌مقیاس با استفاده از شبیه‌سازی بس‌ذره‌ای کیشوت بررسی می‌شود. با محاسبه گروه‌های همسانی مبتنی بر فیلتراسیون تراز بالا و استخراج دو کمیت توپولوژی B_k و P_k، نشان می‌دهیم که برای میدان چگالی ماده تاریک با مقیاس هموارسازی $R = 5\ (Mpc/h)$ در سرخ‌گرایی صفر، کمیت B_1، متناظر با آستانه تولد رشته‌های کیهانی و کمیت P_2، متناظر با مداومت تهی‌جاها، بیشترین حساسیت را به ناگوسیت نخستین متساوی‌الاضلاع‌گونه دارند.

واژه های کلیدی: *ناگوسیت نخستین، گروه‌های همسانی، شبیه‌سازی بس‌ذره‌ای*

Equilateral-type Primordial non-Gaussianity Impact on the Homology Groups of the Dark Matter Density Field

Karimi, Reihaneh[1,4]; Jalali, Mohammad Hosein[2, 3]; Talebian, Alireza[2,4]; Movahed, Seyed Mohammad Sadegh[2, 4]

[1] Department of Physics, K. N. Toosi University of Technology, 158754416, Tehran, Iran
[2] Department of Physics, Shahid Beheshti University, 1983969411, Tehran, Iran
[3] School of Physics, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), Tehran, Iran
[4] School of Astronomy, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), Tehran, Iran

Abstract

Primordial non-Gaussianity (PNG) is a key probe of the early Universe. In this study, we investigate the imprints of equilateral-type PNG on large-scale structure using Quijote N-body simulations. By computing homology groups based on super-level filtration and extracting the topological quantities B_k(birth) and P_k(persistence), we show that, for the dark matter density field at redshift $z = 0$ and a smoothing scale of $R = 5\ Mpc/h$, the B_1 quantity associated with the birth threshold of cosmic filaments and the P_2 quantity associated with the persistence of voids exhibit the highest sensitivity to equilateral-type primordial non-Gaussianity.

***Keywords**: Primordial non-Gaussianity, Homology groups, N-body simulation*
PACS No. 98

مقدمه

ناگوسیت یکی از مهم‌ترین سرنخ‌ها برای درک شرایط اولیه کیهان، به ویژه در دوره تورم کیهانی است. در ساده‌ترین مدل‌های تورمی، تابع توزیع افت‌وخیزها به صورت گاوسی است اما در صورت آشکارسازی ناگوسیت در داده‌های رصدی، می‌توان آن را نشانه‌ای از فرایندهای غیرخطی در کیهان اولیه در نظر گرفت [۱]. اندازه‌گیری میزان ناگوسیت، امکان تمایز میان مدل‌های گوناگون تورم کیهانی را برای ما فراهم می‌آورد. رصدهای ماهواره پلانک از تابش زمینه کیهانی قیدهایی بر روی انواع ناگوسیت از جمله موضعی‌گونه[۱] $f_{NL}^{local} = -0.9 \pm 5.1$، متساوی‌الاضلاع‌گونه[۲] $f_{NL}^{equi} = -26 \pm 47$ و متعامدگونه[۳] $f_{NL}^{ortho} = -38 \pm 24$ گزارش کرده است. به علاوه ساختارهای بزرگ‌مقیاس (مانند توزیع خوشه‌های کهکشانی) نیز حاوی اطلاعات مستقیمی از افت‌وخیزهای آغازین چگالی جهان است و از این رو یکی از بسترهای مناسب برای مطالعه ناگوسیت نخستین به شمار می‌رود[۲]. برخلاف ناگاوسیتی موضعی‌گونه که عمدتاً ناشی از اختلالات اولیه است و به راحتی با ویژگی مقیاس‌وابسته[۴]بودن قابل شناسایی است نوع متساوی‌الاضلاع‌گونه سهم

[1] Local-type
[2] Equilateral-type
[3] Orthogonal-type
[4] Scale-dependent bias

قابل توجهی از تکامل غیرخطی جهان متأخر را نیز دریافت می‌کند که فرآیند شناسایی آن را دشوار می‌کند. دلیل اصلی این دشواری، وقوع پیچش[5] در فضای فوریه است که باعث می‌شود اطلاعات موجود در تابع سه‌نقطه‌ای ناشی از ساختارهای کیهان متاخر با کیهان اولیه تَبهگنی[6] بالایی داشته باشد. در نتیجه، تحلیل در فضای فوریه نمی‌تواند این دو منشا برای ناگوسیت متساوی‌الاضلاع‌گونه را به خوبی از هم جدا کند. در مقابل، تحلیل در نقشه‌پایه[7] این امکان را فراهم می‌کند که خاصیت محلی بودن تکامل متاخر کیهان (که در فضای مکان به صورت یک نگاشت موضعی ظاهر می‌شود) در برابر غیرموضعی بودن همبستگی‌های اولیه ناشی از تورم، به کار گرفته شود. به همین دلیل، استخراج اطلاعات مستقیماً از نقشه‌های فضای واقعی، رویکردی کارآمدتر برای جداسازی سیگنال ناگوسیت متساوی‌الاضلاع‌گونه اولیه و شکستن تَبهگنی آن از اثرات متأخر است [۳].

در مقاله مرجع [۴] از روش فیلتراسیون αDTM بر روی ابرنقاط ساخته شده از میدان هاله‌های شبیه‌سازی شده در فضای اغتشاشات سرخ‌گرایی استفاده شده است که از دیدگاه اطلاعاتی، بهینه است. اما این روش در برابر نوفه‌ها و نقاط پرت[8] که در داده‌های رصدی ساختار بزرگ مقیاس فراوان هستند، آسیب‌پذیر است. در مقابل، روش پیش‌پردازش پیشنهادی ما مبتنی بر فیلتراسیون تراز بالا[9] و محاسبه گروه‌های همسانی آن ذاتاً نسبت به نقاط پرت مقاوم‌تر است؛ بنابراین، نوآوری ما در این است که با ترکیب ایده «تحلیل فضای مکان» از یک سو و «مقاوم‌سازی فرایند فیلتراسیون» از سوی دیگر، قابلیت تفکیک ناگاوسیتی نوع متساوی‌الاضلاع‌گونه را حتی در حضور نوفه‌های شدید و ساختارهای رشته‌ای، به طور چشمگیری افزایش می‌دهیم. در پژوهش‌های قبلی گروه ما [۵]، تعداد حفره‌های k–بعدی از گروه‌های همسانی محاسبه شد. از سوی دیگر در مرجع [۶] نشان داده شده است که تلفیق اطلاعات حاصل از این حفره‌ها با سایر ناورداهای توپولوژی مانند تولد مؤلفه‌ها[10] و تداوم آن‌ها[11] به صورت چشمگیری مقیدسازی پارامترهای کیهانی را بهبود می‌بخشد. به عبارت دیگر، استفاده از هر دو ویژگی توپولوژی B (تولد) و P (مداومت) علاوه بر آمار حفره‌های k–بعدی، اطلاعات بیشتری را از ساختار لایه‌ای داده‌ها استخراج کرده و تبهگنی میان سیگنال اولیه ناگاوسیتی و اثرات غیرخطی متأخر را بیشتر کاهش می‌دهد. بنابراین در این تحقیق قصد داریم ناوردای توپولوژی جدیدی را محاسبه کنیم. روش‌شناسی اتخاذ شده در این پژوهش مبتنی بر محاسبه گروه‌های همسانی[12]، برای تحلیل میدان چگالی حاصل از شبیه‌سازی بس‌ذره‌ای کیشوت[13] است. ما از این میدان چگالی یک مجموعه گشت توسط فیلتراسیون تراز بالا در آستانه‌های مختلف می‌سازیم و با درنظر گرفتن یک مقیاس هموارسازی بهینه در حضور ناگوسیت نخستین متساوی‌الاضلاع‌گونه سعی در تشخیص ردپای آن داریم. مراحل انجام این پژوهش شامل آماده‌سازی داده‌های شبیه‌سازی‌شده، اعمال هموارسازی برای حذف جزئیات کوچک، تحلیل توپولوژی با استفاده از فیلتراسیون تراز بالا و همسانی مداومت، و در نهایت بررسی اثرات ناگوسیت نخستین بر روی کمیت‌های توپولوژی معناداری است که در ادامه معرفی می‌شوند [۴و۷].

ناگوسیت نخستین[14]

ناگوسیت نخستین بیانگر میزان انحراف از رفتار گاوسی در افت‌وخیزهای انحنای اولیه کیهان (که با نماد ζ نشان داده می‌شود) است. ناگوسیت در فضای فوریه به صورت

$$\langle \zeta_{k_1}\, \zeta_{k_2}\, \zeta_{k_3} \rangle = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(k_1 + k_2 + k_3)\, B_\zeta\,(k_1, k_2, k_3) \quad (۱)$$

تعریف می‌شود. کمیت $B_\zeta\,(k_1, k_2, k_3)$ نیز حاوی بزرگی و شکل ناگوسیت است. در این پژوهش، تمرکز ما بر روی ناگوسیت متساوی‌الاضلاع‌گونه است که در آن $B_\zeta \propto f_{NL}^{equi}$ است.

ساختار داده و پیش‌پردازش آن

برای تحلیل ناگوسیت، ما از داده‌های شبیه‌سازی‌های بس‌ذره‌ای کیشوت استفاده کرده‌ایم. این شبیه‌سازی‌ها شامل بیش از ۸۲،۰۰۰ نمونه شبیه‌سازی بس‌ذره‌ای هستند و هر شبیه‌سازی شامل $۵۱۲^۳$ ذره ماده تاریک است که در یک حجم مکعبی با ابعاد $1(Gpc/h)^3$ قرار گرفته‌اند[۸]. برخی شبیه‌سازی‌ها بر اساس مدل استاندارد ΛCDM طراحی شده‌اند. در این پژوهش تمام تحلیل‌ها برای $z = 0$ انجام شده است. شبیه‌سازی‌های مورد استفاده در این پژوهش شامل داده‌های مربوط به ۱۵۰ شبیه‌سازی از ذرات ماده تاریک با ناگوسیت نخستین متساوی‌الاضلاع، با مقادیر $f_{NL}^{equi} = \pm 100$ است. از آنجایی که هدف در این تحقیق بررسی میزان توانایی آماره خلاصه مبنی بر توپولوژی است، بنابراین با همین مقادیر امکان بررسی سوال پژوهش فراهم است. از طرفی به منظور ارزیابی آماره

[5] Convolution
[6] Degeneracy
[7] Map-level
[8] Outliers
[9] Super-level filtration
[10] Birth
[11] Persistence
[12] Homology groups
[13] Quijote simulations
[14] Primordial non-Gaussianity

خلاصه ما با سایر بردار داده، ما از شبیه‌سازی‌های یکسان استفاده میکنیم تا مقایسه منصفانه‌ای داشته باشیم. در ادامه ما از یک شبکه‌بندی (ساخت سلول) مکعبی برای تولید میدان ماده استفاده می‌کنیم [۳]. با در نظر گرفتن $\overline{n}$ به عنوان میانگین تعداد ذرات در کل سلول‌ها و $n(r)$ به عنوان تعداد ذرات در یک سلول مشخص، تباین چگالی را به صورت

$$\delta(r) \equiv \frac{n(r)-\overline{n}}{\overline{n}} \qquad (۲)$$

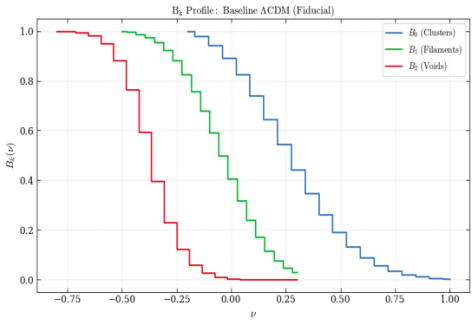
تعریف می‌کنیم. به دلیل علاقه‌مندی ما به تمرکز روی ناگوسیت‌های اولیه کیهانی، ما تباین چگالی حاصله را هموارسازی می‌کنیم. این کار باعث کاهش اثرات ناشی از ناگوسیت‌های ثانویه (مانند آن‌هایی که از تحولات گرانشی کیهان به وجود می‌آیند) می‌شود. به علاوه هموارسازی با ما امکان کنترل بهتر اثرات نوفه و تمرکز بر روی اطلاعات نهفته در مقیاس‌های مختلف میدان را می‌دهد. در این مقاله ما هموارسازی را توسط رابطه زیر انجام می‌دهیم:

$$\delta_{smoothed}(r) = \int dr' W(r-r';R)\delta(r') \qquad (۳)$$

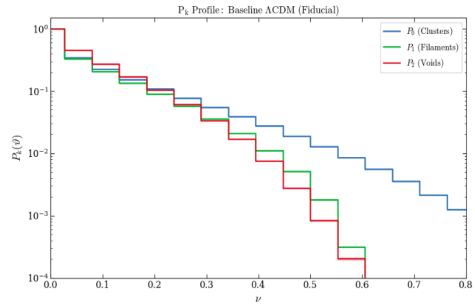
در این فرآیند ما از فیلتر گاوسی، داده‌ها را مقیاس مشخصه $R = 5(Mpc/h)$ هموار می‌کنیم. اگرچه که با کمتر کردن این مقیاس هموارسازی تعداد ویژگی‌های توپولوژی افزایش می‌یابد، اما بنابر محدودیت وضوح داده، ما این حد پایین را انتخاب کردیم و با مقایسه این مورد با چند مقیاس بزرگتر، دریافتیم که حساسیت آماره‌های همسانی پایدار در این مقیاس به ناگوسیت نخستین نسبت به سایر مقیاس‌های مورد ارزیابی بیشتر است. با افزایش مقیاس، این ویژگی‌ها به تدریج محو می‌شوند، زیرا ساختارهای کیهانی ساده‌تر و یکپارچه‌تر می‌شوند.

روش تحلیل داده: همسانی مداومت

در همسانی مداومت با استخراج و بررسی ویژگی‌های توپولوژی داده‌ها، ساختارهای توپولوژی در فضا استخراج شده و پایداری آنها به اعمال فیلتراسیون بررسی می‌شود [۹, ۱۰, ۱۱]. با اعمال فیلتراسیون تراز بالا بر داده‌ها، میدان چگالی ماده در یک شبکه مکعبی نگاشته می‌شود و نواحی با چگالی بالاتر از یک آستانه $\nu \equiv \log(1+\delta)$ جدا شده و ویژگی‌های توپولوژی آن‌ها (خوشه‌ها، رشته‌ها، و حفره‌ها) در طول تغییرات آستانه بررسی می‌شوند. در این مورد ویژگی‌های توپولوژی خاصی به نام اعداد B_k و P_k در نظر گرفته می‌شوند که مقدار k بیانگر ساختارهای مختلف در داده‌هاست؛ $k=0$ بیانگر اجزای متصل (خوشه‌ها)، $k=1$ برای حفره‌های یک بعدی (رشته‌ها) و $k=2$ مربوط به حفره‌های دو بعدی (حفره‌ها) است.



شکل ۱: منحنی $B_k(\nu)$ برای مدل معیار $(f_{NL}^{equi}=0)$



شکل ۲: منحنی $P_k(\nu)$ برای مدل معیار $(f_{NL}^{equi}=0)$

با استخراج نمودارهای مداومت یعنی جفت‌های $\nu^{(k)} = \left(\nu_{birth}^{(k)}, \nu_{death}^{(k)}\right)$ ما اطلاعات توپولوژی داده‌ها را استخراج می‌کنیم. در اینجا $\nu^{(k)}$ نشان می‌دهد که این جفت در ساختار k در آستانه $\nu_{birth}^{(k)}$ ظاهر شده و در آستانه $\nu_{death}^{(k)}$ از بین رفته است. در نهایت برای مطالعه میزان مداومت این جفت می‌توان از کمیت

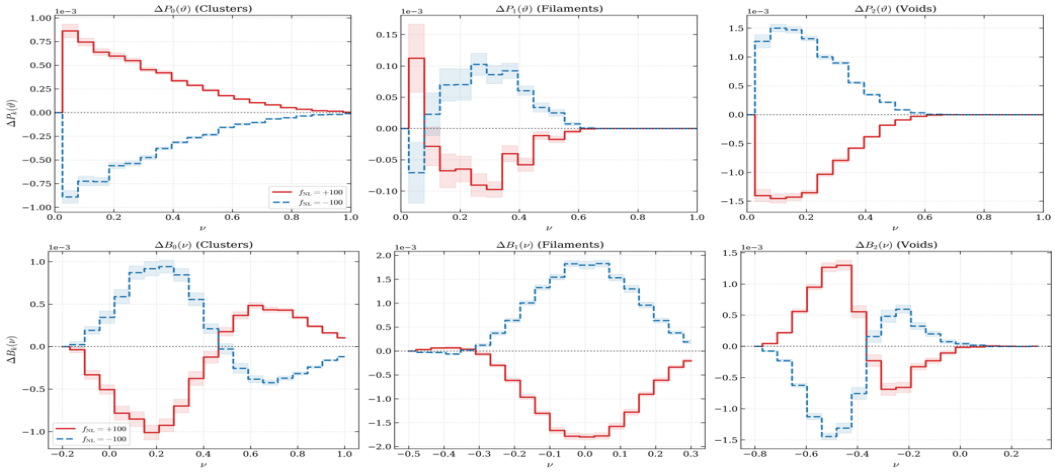
$$\nu_{pers}^{(k)} = \left|\nu_{birth}^{(k)} - \nu_{death}^{(k)}\right| \qquad (۴)$$

بهره برد. با این مفاهیم ویژگی‌های توپولوژی B_k و P_k به این صورت تعریف می‌شوند [۱۲,۳]:

$$B_k(\nu) = \sum_{i=1}^{m_k} \Theta\left(\nu_{(i),birth}^{(k)} - \nu\right) \qquad (۵)$$

$$P_k(\nu) = \sum_{i=1}^{m_k} \Theta\left(\nu_{(i),pers}^{(k)} - \nu\right) \qquad (۶)$$

در آن Θ تابع پله است. در شکل‌های ۲ و ۱ منحنی‌های B_k و P_k مربوط به مدل معیار $(f_{NL}^{equi}=0)$ برای $R = 5(Mpc/h)$، به ازای $k = 0,1,2$ رسم شده است. نواحی سایه‌دار در هر نمودار، میزان خطا را در تراز تطابق 1σ نشان می‌دهد. در مقیاس‌های کوچکی مانند $R = 5(Mpc/h)$، ویژگی‌های توپولوژی بیشتری مانند خوشه‌ها و رشته‌ها ظاهر می‌شوند.



شکل ۳: δP_k (بالا) و δB_k (پایین) برای حفره‌های k-بعدی مختلف برای ناگوسیت متساوی‌الاضلاع.

ردپای‌ناگوسیت نخستین برساختارهای کیهانی

در این پژوهش از ۱۵۰ داده‌ی مدل ΛCDM در شبیه‌سازی کیشوت در $z = 0$ با مقادیر $f_{NL}^{equi} = \pm 100$ و مدل معیار ($f_{NL}^{equi} = 0$) استفاده کرده‌ایم. این داده‌ها میدان چگالی ماده تاریک را در فضای واقعی مدل‌سازی می‌کنند. اکنون با درنظرگرفتن اثرات ناگوسیت نخستین، منحنی‌های B_k و P_k را محاسبه می‌کنیم و برای ملاحظه جزئیات دو کمیت زیر را تعریف می‌کنیم:

$$\delta B_k \equiv B_k(\nu; f_{NL}^{equi} = \pm 100) - B_k(\nu; f_{NL}^{equi} = 0) \quad (۷)$$

$$\delta P_k \equiv P_k(\nu; f_{NL}^{equi} = \pm 100) - P_k(\nu; f_{NL}^{equi} = 0) \quad (۸)$$

در شکل‌های ۳ ما نمودارهای δP_k (بالا) و δB_k (پایین) را برای مدل ناگوسیت متساوی‌الاضلاع ترسیم کرده‌ایم که در آنها خط ممتد برای $f_{NL}^{equi} = +100$ و خطچین برای $f_{NL}^{equi} = -100$ است. در مقیاس‌هایی به کوچکی $R = 5(Mpc/h)$ اثرات ناگوسیت به خوبی آشکار است و تغییرات حفره‌های k-بُعدی برای ناگوسیت متساوی‌الاضلاع به وضوح دیده می‌شود.

جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

این پژوهش نشان می‌دهد که ویژگی B_1 (حفره‌های یک بُعدی یا رشته‌های‌کیهانی) و P_2 (حفره‌های سه‌بعدی یا تهی‌جاها) معیارحساس‌تری برای آشکارسازی ناگوسیت نخستین است. بنابراین ظاهر شدن رشته‌های کیهانی و طول عمر تهی‌جاها بیشترین تاثیر را از ناگوسیت متساوی‌الاضلاع می‌گیرند.

رویکرد ما در این تحقیق با آنچه که در مرجع [۴] انجام شد، در ساخت ردیاب و نوع فیلتراسیون تفاوت ماهوی دارد و روش ما نسبت به نوفه‌های پواسونی مقاوم است. همچنین درصورت محاسبه ماتریس فیشر مقادیر گزارش شده برای $\sigma_{f_{NL}^{equi}}$ علی الأصول از Δf_{NL}^{equi} کوچکتر نخواهد بود [۱۳]. برای تکمیل می‌توان مطالعات را در فضای اغتشاشات سرخ‌گرایی و همچنین در نظر گرفتن سایر ردیاب‌ها مانند هاله‌ها و کهکشان‌ها توسعه داد. بررسی ناگوسیت موضعی و مطالعه اثر مقیاس‌های هموارسازی مختلف، در ادامه فعالیت‌های این گروه قرار دارد.

مراجع:

[1] D. Baumann; "TASI Lectures on Inflation"; *arXiv*:0907.5424 (2009).
[2] J. Morawetz, E. Paillas, and W. J. Percival; "Constraining primordial non-Gaussianity with Density-Split Clustering"; *JCAP* **01** (2025) 026.
[3] D. Baumann and D. Green; "The power of locality: primordial non-Gaussianity at the map level"; *JCAP* **2022** (2022) 061.
[4] M. Biagetti, J. Calles, L. Castiblanco, A. Cole, and J. Norena; "Fisher forecasts for primordial non-Gaussianity from persistent homology"; *JCAP* **2022** (2022) 002.
[5] F. Jafari, M. H. J. Kanafi, A. Karami, and S. M. S. Movahed; 25th NCGC (2025). Proceedings
[6] M. H. Jalali Kanafi and S. M. S. Movahed; "Quantifying weighted morphological content of large-scale structures via simulation-based inference"; *Physical Review D* **113** (2026) 063543.
[7] A. Yadav and B. Wandelt; "*Advances in Astronomy*" **2010** (2010) 565248.
[8] F. Villaescusa-Navarro et al.; "The Quijote Simulations"; *APJ* **250** (2020) 1.
[9] A. Zomorodian; *"Computational topology"*; *Algorithms and theory of computation handbook* **2** (2009) 3.
[10] H. Masoomy, B. Askari, M. N. Najafi, and S. M. S. Movahed; *Physical Review E* **104** (2021) 034116.
[11] R. J. Adler and J. E. Taylor; "Random Fields and Geometry"; *Springer Science & Business Media* (2009).
[12] F. Abedi, M. H. J. Kanafi, and S. M. S. Movahed; "Impact of redshift space distortions on persistent homology of cosmic matter density field"; *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics* **22** (2025) 2540006.
[13] G. Jung et al.; "Quijote-PNG: The Information Content of the Halo Mass Function"; *Astrophys. J.* **957** (2023) 50.

گروه‌یابی مبتنی بر میدان چگالی ماده برای شناسایی برهم‌کنش‌های دینامیکی میان سامانه‌های کهکشانی

غفور ، پارسا[۱] ؛ انصاری فرد ، سعید[۲] ؛ جلالی کنفی ، محمد حسین[۱و۲] ؛ موحد ، سید محمد صادق[۱و۳]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی، ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱، تهران، ایران
[۲] پژوهشکده فیزیک، پژوهشگاه دانش های بنیادی، ۱۹۳۹۵۵۵۳۱ ، تهران، ایران
[۳] پژوهشکده نجوم، پژوهشگاه دانش های بنیادی، ۱۹۳۹۵۵۵۳۱ ، تهران، ایران

چکیده

در این پژوهش، تأثیر دو روش گروه‌یابی متفاوت بر شناسایی برهم‌کنش‌های دینامیکی میان سامانه‌های کهکشانی بررسی شده است. بدین منظور، دو کاتالوگ گروه با استفاده از الگوریتم مبتنی بر موقعیت FoF و روش مبتنی بر میدان چگالی ماده GraphShed تولید گردید. همچنین، به‌منظور شناسایی انواع برهم‌کنش‌ها میان سامانه‌ها، یک روش جدید مبتنی بر سرعت معرفی شد که بر اساس مؤلفه‌های شعاعی و عمود بر شعاع سرعت نسبی، رده های مختلف برهم‌کنش سامانه‌ها از جمله ادغام‌های عمده و جزئی، گذرهای نزدیک و رویدادهای برافزایشی را طبقه‌بندی می‌کند. کاربرد این روش منجر به شناسایی 271 و 63 جفت برهم‌کنشی به‌ترتیب در کاتالوگ‌های GraphShed و FoF شد. اگرچه هر دو روش سهم مشابهی از ادغام‌های عمده را آشکار می‌کنند، تفاوت‌های قابل‌توجهی در فراوانی سامانه‌های گذر نزدیک، ادغام جزئی و برافزایشی مشاهده می‌شود. به‌ویژه، روش GraphShed تعداد بیشتری از سامانه‌های گذر نزدیک را شناسایی می‌کند که نشان‌دهنده توانایی بالاتر این روش در تفکیک ساختارهای مجاور اما از نظر دینامیکی مستقل است.

واژه‌های کلیدی: *خوشه بندی داده محور، شناسایی گروه بر پایه میدان چگالی، برهم‌کنش‌های دینامیکی سامانه‌های کهکشانی*

Matter Density Field-Based Group Finding for Detection of Dynamical Interactions Among Galaxy Systems

Ghafour, Parsa[1]; Ansarifard, Saeed[2]; Jalali Kanafi, Mohammad Hossein[1,2]; Movahed, Seyed Mohammad Sadegh[1,3]

[1]Department of Physics, Shahid Beheshti University, 19839-69411, Tehran, Iran
[2]School of Physics, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), 19395-5531, Tehran, Iran
[3]School of Astronomy, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), 19395-5531, Tehran, Iran

Abstract

In this study, the impact of two different group-finding approaches on the detection of dynamical interactions among galaxy systems is investigated. To this end, two group catalogs were constructed using the position-based Friends-of-Friends (FoF) algorithm and the matter-density-field-based GraphShed method. Furthermore, a new velocity-based approach was introduced to identify different types of interactions among galaxy systems. This method classifies interacting systems into mergers, flybys, and accretion events based on the radial and tangential components of their relative velocities. Applying this framework resulted in the detection of 271 and 63 interacting pairs in the GraphShed and FoF catalogs, respectively. Although both methods reveal comparable fractions of major mergers, significant differences are found in the populations of flybys, minor mergers, and accretion events. In particular, the matter-density-field base approach reveals a substantially larger number of flyby systems, indicating its enhanced ability to resolve neighboring structures that are spatially close but dynamically independent.

Keywords*: Data-driven clustering, Density field-based group identification, Dynamical interactions of galaxy systems*

مقدمه

گروه‌ها و خوشه‌های کهکشانی بزرگ‌ترین ساختارهای گرانشی مقید در کیهان هستند و جایگاه ویژه‌ای در مطالعات کیهان‌شناسی و شکل‌گیری ساختارهای کیهانی دارند. این سامانه‌ها از یک سو بازتابی از رشد نوسانات چگالی در مقیاس‌های بزرگ کیهانی و فرایندهای حاکم بر ماده تاریک بوده و از سوی دیگر مکانی مناسب برای مطالعه تحول کهکشان‌ها و برهم‌کنش آن‌ها با محیط پیرامون خود فراهم می‌کنند [1]. ازاین‌رو، گروه‌ها و خوشه‌های کهکشانی به‌عنوان آزمایشگاه‌هایی طبیعی برای بررسی ارتباط میان فرایندهای کیهان‌شناختی و تحول کهکشانی شناخته می‌شوند.

برهم‌کنش‌های دینامیکی میان سامانه‌های کهکشانی، از جمله ادغام‌های عمده و جزئی، گذرهای نزدیک و رویدادهای برافزایشی، نقش مهمی در رشد سلسله‌مراتبی ساختارهای کیهانی ایفا می‌کنند. این برهم‌کنش‌ها می‌توانند بر توزیع ماده، خواص دینامیکی سامانه‌ها و ویژگی‌های محیط میان‌خوشه‌ای تأثیر قابل توجهی بگذارند [2]. به‌ویژه رویدادهای ادغامی از مهم‌ترین سازوکارهای رشد گروه‌ها و خوشه‌های کهکشانی به شمار می‌روند و از طریق ایجاد شوک‌ها، آشفتگی‌ها و بازتوزیع انرژی در گاز داغ میان‌خوشه‌ای، اطلاعات ارزشمندی درباره تاریخچه تحول ساختارها در اختیار قرار می‌دهند [3] . در مقابل، سامانه‌های گذر نزدیک و برافزایشی نیز سرنخ‌های مهمی از وضعیت دینامیکی محیط‌های متراکم و نحوه رشد تدریجی ساختارها ارائه می‌کنند [4].

با وجود اهمیت این برهم‌کنش‌ها، شناسایی آن‌ها به‌طور مستقیم به نحوه تعریف و شناسایی سامانه‌های کهکشانی وابسته است. مطالعات مختلف نشان داده‌اند که روش‌های متفاوت گروه‌یابی می‌توانند منجر به تفاوت‌های قابل‌توجهی در تعداد سامانه‌های شناسایی‌شده، زیرساختارهای آشکارشده و خواص فیزیکی استنتاج‌شده برای آن‌ها شوند [5]. ازاین‌رو، انتظار می‌رود که شیوه گروه‌یابی بر شناسایی و طبقه‌بندی برهم‌کنش‌های

دینامیکی میان سامانه‌های کهکشانی نیز تأثیرگذار باشد. در این میان، روش‌های مبتنی بر میدان چگالی ماده به دلیل حساسیت بیشتر به زیرساختارها، توانایی بالاتری در تفکیک ساختارهای مجاور و مستقل از نظر دینامیکی دارند. به همین جهت این پژوهش در راستای نتایج ارائه‌شده در مرجع [5] و با هدف گسترش بررسی‌های انجام‌شده درباره تأثیر دو روش گروه‌یابی FoF [6] و GraphShed [5] بر شناسایی برهم‌کنش‌های دینامیکی میان سامانه‌های کهکشانی صورت گرفته است. در این مطالعه از داده‌های شبیه‌سازی IllustrisTNG300-1 [7] استفاده شده که با داشتن حجم بزرگ‌تر، امکان شناسایی و تحلیل تعداد بسیار بیشتری از برهم‌کنش‌های دینامیکی را فراهم می‌کند. همچنین، به‌منظور کاهش اثر سامانه‌های کم‌عضو و افزایش قابلیت اتکای نتایج آماری، تنها گروه‌های متوسط، بزرگ و خوشه‌ها در تحلیل در نظر گرفته شده‌اند. افزون بر این، شناسایی برهم‌کنش‌های دینامیکی در [5] به‌صورت محدود و در قالب یک بررسی تکمیلی ارائه شده بود، اما در این پژوهش به‌عنوان محور اصلی تحلیل به‌کار گرفته شده و تأثیر روش‌های گروه‌یابی بر فراوانی و نوع برهم‌کنش‌های دینامیکی میان سامانه‌های کهکشانی به‌طور نظام‌مند بررسی شده است.

این مقاله به صورت زیر نگارش شده است: در بخش 2 داده‌ها و کاتالوگ‌های گروه مورد استفاده معرفی می‌شوند. در بخش 3 روش پیشنهادی برای شناسایی برهم‌کنش‌های دینامیکی ارائه می‌شود. در نهایت، مقایسه برهم‌کنش‌های دینامیکی شناسایی شده در کاتالوگ‌های دو روش گروه‌یابی در بخش 4 بررسی شده و سپس در بخش 5 جمع‌بندی ارائه می‌شود.

توصیف داده‌ها:

مجموعه داده مورد استفاده در این پژوهش از شبیه سازی گرانشی-مغناطوهیدرودینامیکی IllustrisTNG300-1 استخراج شده است. این شبیه‌سازی، تحول هم‌بسته ماده تاریک و باریونی را از انتقال به سرخ 127 تا 0 مدل‌سازی می‌کند. این شبیه‌سازی از چارچوب شبکه متحرک Arepo بهره می‌برد و متغیرهای کیهان‌شناختی مبتنی بر کیهان‌شناسی Planck را به کار می‌گیرد [8]. این شبیه‌سازی، مکعبی با طول ضلع تقریباً $205\ \mathrm{Mpc/h}$ را در بر می‌گیرد و دارای تفکیک جرمی $7.5 \times 10^6\ \mathrm{M}_\odot$ برای ماده تاریک و $1.4 \times 10^6\ \mathrm{M}_\odot$ برای ماده باریونی است. از میان کهکشان‌های موجود در این شبیه‌سازی، کهکشان‌های با قدر مطلق روشن‌تر از تقریبا-16 در فیلتر r و با جرم ستاره‌ای بیشتر از $10^8\ \mathrm{M}_\odot$ و موجود در انتقال به سرخ 0 انتخاب شدند. اعمال این آستانه‌ها منجر به نمونه نهایی شامل تقریبا 481000 کهکشان می‌شود.

به منظور مطالعه اثر گروه‌یابی مبتنی بر چگالی ماده بر تشخیص برهم‌کنش‌های دینامیکی سامانه‌های کهکشانی، ابتدا گروه‌ها و خوشه‌های کهکشانی با استفاده از الگوریتم گروه‌یابی مبتنی بر موقعیت FoF شناسایی شدند. سپس با بهره‌گیری از الگوریتم گروه‌یابی مبتنی بر میدان چگالی ماده GraphShed نیز سامانه‌های کهکشانی شناسایی شدند. در این روش، جرم ستاره‌ای کهکشان‌ها در ساخت میدان چگالی ماده لحاظ شد تا شناسایی ساختارها بر اساس توزیع جرم ستاره‌ای انجام گیرد.

به منظور کاهش اثر گروه‌های بسیار کم‌عضو و در راستای رویه متداول در مطالعات کیهان‌شناسی [9]، تنها سامانه‌هایی که دارای بیش از ده عضو بودند در تحلیل نهایی مورد استفاده قرار گرفتند. بدین طریق در نهایت، الگوریتم GraphShed و FoF به ترتیب 4296 و 4333 سامانه کهکشانی را شناسایی کردند. همچنین، طول پیوند به کار برده شده توسط الگوریتم‌های GraphShed و FoF به ترتیب برابر با 0.53 و 0.52 Mpc/h بود. نزدیکی این مقادیر نشان می‌دهد که آنالیز انجام شده تحت تأثیر تفاوت‌های ناشی از این پارامتر قرار ندارد.

شناسایی برهم‌کنش‌های دینامیکی:

به منظور مقایسه برهم‌کنش‌های دینامیکی موجود در کاتالوگ‌های گروه حاصل از روش‌های FoF و GraphShed، در این پژوهش یک روش جدید مبتنی بر سرعت کهکشان‌ها برای شناسایی ادغام‌ها، گذرهای نزدیک و رویدادهای برافزایشی، معرفی و به کار گرفته شده است.

در گام نخست، از میان تمامی گروه‌ها و خوشه‌های شناسایی‌شده توسط الگوریتم‌ها، جفت‌هایی به‌عنوان نامزد برهم‌کنش انتخاب می‌شوند که فاصله مرکز جرم آن‌ها ($\vec{r}_C$) از مجموع شعاع‌های R_{200} آن‌ها کمتر باشد:

$$\Delta^{\alpha\beta} = \left|\vec{r}_C^{\,\alpha} - \vec{r}_C^{\,\beta}\right| < R_{200}^{\alpha} + R_{200}^{\beta}. \qquad (1)$$

سپس برای هر جفت منتخب، ابتدا بردار سرعت میانگین وزن‌دار شده با جرم ستاره‌ای کهکشان‌ها برای هر گروه محاسبه می‌شود:

$$\vec{V}_\alpha = \frac{\sum_{i\in\alpha} M_i^* \vec{v}_i}{\sum_{i\in\alpha} M_i^*}, \quad \vec{V}_\beta = \frac{\sum_{j\in\beta} M_j^* \vec{v}_j}{\sum_{j\in\beta} M_j^*} \qquad (2)$$

و سرعت میانگین وزن‌دار شده مجموعه کهکشان‌های دو سامانه (سامانه مرکب) نیز از رابطه زیر به‌دست می‌آید:

$$\vec{V}_{\alpha\beta} = \frac{\sum_{k\in\alpha,\beta} M_k^* \vec{v}_k}{\sum_{k\in\alpha,\beta} M_k^*} \qquad (3)$$

و سپس، سرعت نسبی هر گروه نسبت به چارچوب سکون آن جفت محاسبه می‌گردد:

$$\vec{\mathcal{V}}_\alpha = \vec{V}_\alpha - \vec{V}_{\alpha\beta}, \quad \vec{\mathcal{V}}_\beta = \vec{V}_\beta - \vec{V}_{\alpha\beta}. \qquad (4)$$

در ادامه، بردارهای یکه شعاعی میان مراکز جرم گروه‌ها و مرکز جرم سامانه مرکب به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\hat{\tau}_\alpha = \frac{\vec{r}_C^{\,\alpha\beta} - \vec{r}_C^{\,\alpha}}{\left|\vec{r}_C^{\,\alpha\beta} - \vec{r}_C^{\,\alpha}\right|}, \qquad \hat{\tau}_\beta = \frac{\vec{r}_C^{\,\alpha\beta} - \vec{r}_C^{\,\beta}}{\left|\vec{r}_C^{\,\alpha\beta} - \vec{r}_C^{\,\beta}\right|} \qquad (5)$$

و در نتیجه، مؤلفه‌های شعاعی و عمود بر شعاع سرعت نسبی به ترتیب به شکل زیر استخراج می‌شوند:

$$\boldsymbol{V}_\alpha^{\parallel} = \vec{\mathcal{V}}_\alpha . \hat{\tau}_\alpha, \qquad \boldsymbol{V}_\beta^{\parallel} = \vec{\mathcal{V}}_\beta . \hat{\tau}_\beta \qquad (6)$$

$$\boldsymbol{V}_\alpha^{\perp} = \left|\vec{\mathcal{V}}_\alpha - \boldsymbol{V}_\alpha^{\parallel}\hat{\tau}_\alpha\right|, \qquad \boldsymbol{V}_\beta^{\perp} = \left|\vec{\mathcal{V}}_\beta - \boldsymbol{V}_\beta^{\parallel}\hat{\tau}_\beta\right| \qquad (7)$$

بر اساس این مؤلفه‌ها، سرعت‌های نسبی وزن‌دار شده شعاعی و عمود بر شعاع آن جفت به ترتیب و به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$V_{\parallel} = \frac{M_{200}^{\alpha}\boldsymbol{V}_\alpha^{\parallel} + M_{200}^{\beta}\boldsymbol{V}_\beta^{\parallel}}{M_{200}^{\alpha} + M_{200}^{\beta}} \qquad (8)$$

$$V_{\perp} = \frac{\left| M_{200}^{\alpha} \boldsymbol{V}_{\alpha}^{\perp} - M_{200}^{\beta} \boldsymbol{V}_{\beta}^{\perp} \right|}{M_{200}^{\alpha} + M_{200}^{\beta}} \qquad (9)$$

که در آنها استفاده از جرم M_{200} جهت وزن‌دهی سرعت‌ها، موجب کاهش تأثیر سامانه‌های کم‌جرم و با سرعت‌های بزرگ می‌شود.

پس از محاسبه مؤلفه‌های سرعت، جفت‌ها بر اساس نوع برهم‌کنش در حال وقوع طبقه‌بندی می‌شوند. یک جفت زمانی به‌عنوان ادغام دسته‌بندی خواهد شد که هر دو سامانه دارای مؤلفه شعاعی مثبت بوده و همچنین مؤلفه شعاعی بر مؤلفه عمود بر شعاع، غلبه داشته باشد:

$$\boldsymbol{V}_{\alpha}^{\parallel} > 0, \qquad \boldsymbol{V}_{\beta}^{\parallel} > 0, \qquad V_{\parallel} > V_{\perp} \qquad (10)$$

و در مقابل، تنها اگر:

$$V_{\perp} > V_{\parallel} \qquad (11)$$

جفت مورد نظر به عنوان گذر نزدیک طبقه‌بندی می‌شود.

در نهایت، برای تمامی جفت‌های موجود در دسته‌بندی ادغام، نسبت جرم جفت به صورت زیر تعریف و محاسبه می‌گردد [10]:

$$\xi \equiv \frac{\min\left(M_{200}^{\alpha}, M_{200}^{\beta}\right)}{\max\left(M_{200}^{\alpha}, M_{200}^{\beta}\right)} \qquad (12)$$

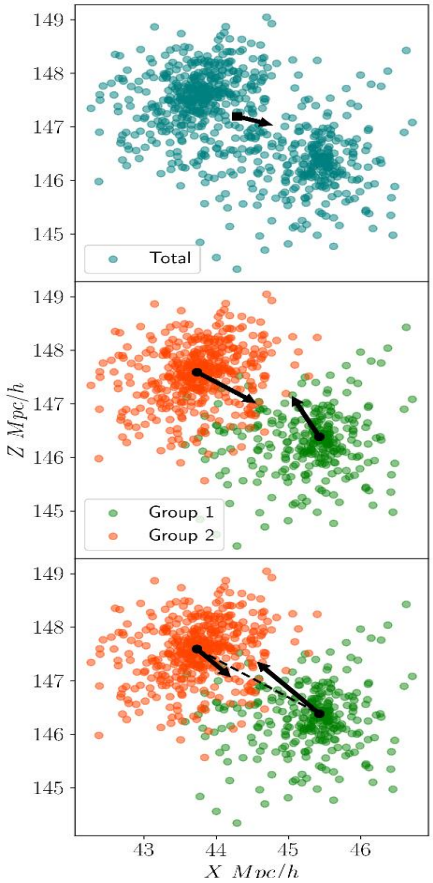
و سپس، جفت‌هایی با $\xi > 0.33$ به‌عنوان ادغام‌های عمده، جفت‌های دارای $0.33 \geqslant \xi \geqslant 0.1$ به عنوان ادغام‌های جزئی و نهایتا جفت‌های دارای $\xi < 0.1$ به عنوان رویدادهای برافزایشی طبقه‌بندی می‌شوند [10].

نمونه‌ای از اعمال این روش بر روی یک جفت و شناسایی یک ادغام عمده در حال وقوع، در شکل 1 نمایش داده شده است.

نتایج:

با اعمال روش معرفی‌شده در بخش قبلی، به ترتیب تعداد 472 و 159 جفت سامانه کهکشانی نامزد برهم‌کنش (معادله 1) از کاتالوگ‌های گروه GraphShed و FoF شناسایی و تحلیل شدند. نتایج طبقه‌بندی این جفت‌ها در جدول 1 ارائه شده است. تعداد بسیار بالاتر جفت‌های شناسایی‌شده در کاتالوگ حاصل از GraphShed نشان‌دهنده حساسیت بیشتر این روش مبتنی بر چگالی ماده در آشکارسازی ساختارهای موجود در سامانه‌های کهکشانی است؛ قابلیتی که امکان شناسایی دامنه گسترده‌تری از برهم‌کنش‌های دینامیکی را فراهم می‌سازد.

مقایسه انواع برهم‌کنش‌ها نشان می‌دهد که هر دو روش سهم نسبتاً مشابهی از ادغام‌های عمده را آشکار می‌کنند. در کاتالوگ‌های حاصل از GraphShed و FoF به ترتیب 29% و 33% از جفت‌های نامزد برهمکنش به‌عنوان ادغام عمده شناسایی شدند. با این حال، در مورد ادغام‌های جزئی و سامانه‌های برافزایشی اختلافات محسوسی مشاهده می‌شود. در حالی‌که این دو دسته در



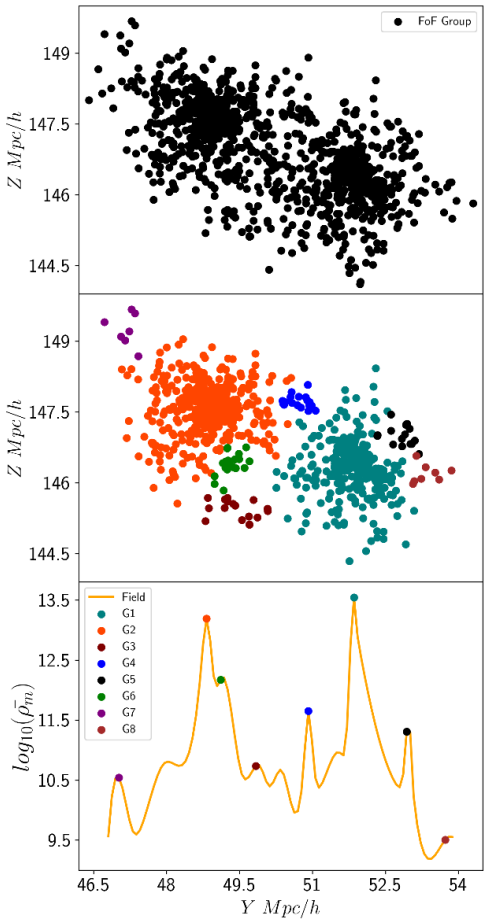
شکل 1: نمونه‌ای از اعمال روش پیشنهادی برای شناسایی برهم‌کنش دینامیکی میان یک جفت سامانه کهکشانی. بردارهای سرعت میانگین وزن‌دار سامانه مرکب و هر تک سامانه به ترتیب در پنل بالا و میانی؛ و سرعت های نسبی سامانه‌ها در چارچوب سکون سامانه مرکب در پنل پایین نمایش داده شده‌اند.

جدول 1: طبقه‌بندی انواع برهم‌کنش‌های دینامیکی میان سامانه‌های کهکشانی شناسایی شده در کاتالوگ‌های گروه حاصل از روش‌های GraphShed و FoF.

	تعداد (مجموع)	
دسته	GraphShed (472)	FoF (159)
ادغام‌های عمده	137 (29%)	53 (33%)
ادغام‌های جزئی	77 (17%)	38 (24%)
رویدادهای برافزایشی	47 (10%)	25 (16%)
رویدادهای گذر نزدیک	211 (44%)	43 (27%)

کاتالوگ FoF به ترتیب حدود 24% و 16% از کل جفت‌های نامزد برهم‌کنش را تشکیل می‌دهند، سهم آن‌ها در کاتالوگ GraphShed به ترتیب حدود 17% و 10% است.

بیشترین اختلاف میان دو روش، در شناسایی سامانه‌های در حال گذر نزدیک مشاهده می‌شود. در کاتالوگ GraphShed



شکل 2: نمونه ای از تفاوت به کارگیری الگوریتم شناسایی سامانه‌های کهکشانی فقط مبتنی بر موقعیت و الگوریتم مبتنی بر میدان چگالی ماده در این شکل نمایش داده شده است. در شکل بالا بزرگترین سامانه شناسایی شده توسط روش FoF، در وسط سامانه های شناسایی شده توسط GraphShed در همان ناحیه فضایی؛ و در پایین نمایه یک بعدی میانگین میدان چگالی ماده در راستای محور افقی به همراه مراکز جرم سامانه ها نشان داده شده اند.

حدود 44% از جفت‌های نامزد برهم‌کنش در این رده قرار می‌گیرند، در حالی که این مقدار برای کاتالوگ FoF نزدیک به 27% است. این نتیجه نشان می‌دهد که GraphShed تعداد بیشتری از ساختارهای مجاور اما دینامیکی مستقل را تفکیک می‌کند؛ سامانه‌هایی که حرکت نسبی آن‌ها عمدتاً توسط مؤلفه‌های عمود بر شعاع کنترل می‌شود. در مقابل، روش FoF به دلیل اینکه صرفا به نزدیکی مکانی اتکا می‌کند، تمایل بیشتری به ادغام ساختارهای همسایه در یک سامانه واحد دارد.

نمونه‌ای از این قابلیت در شکل 2 نشان داده شده است. در این شکل، بزرگ‌ترین گروه شناسایی‌شده توسط الگوریتم FoF به همراه گروه‌های متناظر استخراج‌شده توسط روش GraphShed در همان ناحیه به تصویر کشیده شده‌اند. علاوه بر این، نمایه یک‌بعدی میانگین میدان چگالی ماده در راستای محور افقی نیز ارائه شده است. این نمایه از میانگین‌گیری مقادیر چگالی تمامی سلول‌های ورونوی مورد استفاده در الگوریتم GraphShed در هر بین مکانی محاسبه شده و در نتیجه توزیع کلی چگالی ماده در این ناحیه را نشان می‌دهد.

مقایسه موقعیت مرکز جرم سامانه‌ها و ساختارهای شناسایی‌شده توسط GraphShed و همچنین قله‌های موجود در نمایه میانگین چگالی، هم‌بستگی روشنی میان این ساختارها و بیشینه‌های میدان چگالی ماده را آشکار می‌کند. از آنجا که قله‌های چگالی بیانگر نواحی دارای پتانسیل گرانشی عمیق‌تر و تمرکز بیشتر ماده هستند، انتظار می‌رود که هاله‌ها و زیرساختارهای واقعی نیز در مجاورت این نواحی شکل گرفته باشند. مشاهده این هم‌مکانی نشان می‌دهد که GraphShed نه تنها قادر به بازتولید ساختارهای اصلی شناسایی‌شده توسط FoF است، بلکه می‌تواند زیرساختارهای متمایزی که در میان نواحی پرتراکم قرار دارند را نیز آشکار سازد.

این نتیجه مؤید آن است که رویکرد مبتنی بر میدان چگالی ماده در GraphShed، با بهره‌گیری از اطلاعات موضعی موجود در سلول‌های ورونوی و دنبال کردن گرادیان‌های چگالی، حساسیت بیشتری نسبت به تغییرات ریزمقیاس محیط دارد. در نتیجه، این روش قادر است مرزهای ساختاری را با دقت بیشتری تعیین کرده و زیرسامانه‌های فیزیکی موجود در محیط‌های متراکم را با جزئیات و تفکیک‌پذیری بالاتری نسبت به روش‌های متعارف شناسایی کند.

جمع بندی

به‌طور کلی، نتایج نشان می‌دهد که گروه‌یابی مبتنی بر میدان چگالی ماده نه تنها قادر به آشکارسازی نامزدهای ادغامی است که ممکن است در روش‌های صرفاً مبتنی بر موقعیت، پنهان بمانند؛ بلکه سامانه‌های گذر نزدیک و برافزایشی را نیز با دقت بیشتری از یکدیگر تفکیک می‌کند. ازاین‌رو می‌توان عنوان کرد که روش‌های مبتنی بر میدان چگالی ماده، امکان شناسایی جزئی‌تر برهم‌کنش‌های دینامیکی در محیط‌های متراکم را ارائه داده و همچنین توانایی تمایز بیشتر میان انواع مختلف برهم‌کنش‌های دینامیکی را ممکن می‌سازند.

مرجع ها

[1] Planelles, S, and Vicent Q. *MNRAS,* 399.1 (2009): 410-424.
[2] Bulbul, E., et al., *A & A,* 685 (2024): L2.
[3] McCarthy I. G. et al., 2007, MNRAS, 376, 497
[4] Peebles, P. J. E., *Princeton University Press* (2020): 1-448.
[5] Ghafour, P., et al., *arXiv preprint:* 2606.03790.
[6] Davis, M, et al. ApJ, Part 1, vol. 292, 1985, p. 371-394.
[7] Nelson, Dylan, et al., *Comp. Astro. Cosmo.* 6.1 (2019): 2.
[8] Ade, P. A., et al. (2016). A & A, 594:A13.
[9] Genel, S., et al. (2010). ApJ, 719(1):229–239.
[10] Contreras, A., et al. (2022). MN RAS, 511(2):2897–2913.

بررسی منحنی چرخش کهکشان NGC 2403 در گرانش کانفرمال بدون ماده تاریک

راستکار ثمرین، بهار[۱]؛ میرزا، بهروز[۱]؛ انجم‌شعاع، همایون[۱]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۳۱۱۱-۸۴۱۵۶

چکیده

مسئله ثابت بودن سرعت چرخش کهکشان‌ها یکی از مهم‌ترین چالش‌های اخترفیزیک جدید است. در چارچوب گرانش نیوتونی، سرعت چرخش ستاره‌ها در نواحی بیرونی کهکشان باید کاهش یابد، در حالی که داده‌های رصدی رفتار متفاوتی را نشان می‌دهند. یک از روش‌های رایج برای توضیح این پدیده در نظر گرفتن ماده تاریک است. در این مقاله، منحنی چرخش کهکشان NGC 2403 در چارچوب گرانش کانفرمال و بدون در نظر گرفتن ماده تاریک بررسی شده است. برای این منظور، سرعت چرخش با استفاده از مدل گرانش کانفرمال محاسبه و با داده‌های رصدی مقایسه شد. نتایج نشان می‌دهند که این مدل می‌تواند رفتار منحنی سرعت چرخش کهکشان را بدون نیاز به هاله ماده تاریک توصیف کند. همچنین، در این مدل یک ثابت جهانی γ_0 وجود دارد که وابستگی مدل به این ثابت مورد بررسی قرار گرفت. تحلیل حساسیت نشان داد که تغییرات γ_0 تأثیر کمی بر سرعت چرخش در نواحی داخلی کهکشان دارد، اما در نواحی بیرونی نقش قابل توجهی در رفتار این منحنی چرخش ایفا می‌کند.

واژه های کلیدی: *گرانش کانفرمال، سرعت چرخش کهکشان‌ها، ماده تاریک، کهکشان NGC 2403 .*

Investigation of the Rotation Curve of NGC 2403 in Conformal Gravity without Dark Matter

Rastkar, Bahar[1]; Mirza, Behrouz[1]; Anjomshoa, Homayon[1]

[1] Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran

Abstract

The problem of the nearly constant rotational velocities of galaxies is one of the major challenges in modern astrophysics. In the framework of Newtonian gravity, the rotational velocity of stars is expected to decrease in the outer regions of galaxies, whereas observational data indicate a different behavior. One of the common approaches to explain this phenomenon is the introduction of dark matter. In this work, the rotation curve of the galaxy NGC 2403 is investigated within the framework of conformal gravity without considering dark matter. For this purpose, the rotational velocity was calculated using the conformal gravity model and compared with observational data. The results show that this model can successfully describe the rotational behavior of the galaxy without the need for a dark matter halo. Furthermore, the model contains a global parameter, γ0\gamma_0γ0, whose effect was also studied. The sensitivity analysis indicates that variations in γ0\gamma_0γ0 have only a small effect on the rotational velocity in the inner regions of the galaxy, while they play a significant role in the outer regions of the rotation curve.

***Keywords**: Conformal Gravity, Galactic Rotation Curves, Dark Matter, NGC 2403 Galaxy.*

مقدمه

سرعت چرخش ستاره‌ها در کهکشان‌ها یکی از مسائل مهم اخترفیزیک جدید است. بر اساس گرانش نیوتونی، انتظار می‌رود سرعت چرخش ستاره‌ها در نواحی بیرونی کهکشان کاهش یابد، اما داده‌های رصدی نشان می‌دهند که این سرعت تقریباً ثابت باقی

می‌ماند. این اختلاف یکی از مهم‌ترین انگیزه‌ها برای مطرح شدن ماده تاریک و نظریه‌های گرانش اصلاح‌شده است [۱].

ما در این مقاله با استفاده از گرانش کانفرمال، که هامیلتونی آن غیرهرمیتی بوده اما تحت تقارن PT ناوردا است، به بررسی سرعت چرخش کهکشان NGC 2403 پرداخته و نتایج حاصل را با داده‌های رصدی مقایسه می‌کنیم. اهمیت تقارن PT در این است که این نظریه، با وجود غیرهرمیتی بودن هامیلتونی، همچنان می‌تواند از نظر کوانتومی سازگار و فیزیکی باقی بماند و دارای مقادیر فیزیکی حقیقی باشد. این موضوع امکان استفاده از گرانش کانفرمال را به‌عنوان یک مدل بنیادی برای توصیف سامانه‌های اخترفیزیکی فراهم می‌کند. نتایج نشان می‌دهند که این مدل می‌تواند بدون نیاز به ماده تاریک، رفتار سرعت چرخش کهکشان را توصیف کند [۲].

گرانش کانفرمال

گرانش کانفرمال نظریه‌ای جایگزین برای گرانش اینشتین است که علاوه بر ناوردایی نسبت به تبدیلات مختصاتی، دارای تقارن کانفرمال موضعی نیز می‌باشد. در این نظریه، متریک فضازمان تحت تبدیل زیر:

$$g_{\mu\nu}(x) \to e^{2\alpha(x)} g_{\mu\nu}(x). \qquad (۱)$$

در رابطه (۱)، $g_{\mu\nu}(x)$ متریک فضازمان است $\alpha(x)$ یک تبدیل موضعی است و ناوردا باقی می‌ماند و به همین دلیل کنش گرانشی به‌صورت مربع تانسور ویل ساخته می‌شود [۳]:

$$I_W = -\alpha_g \int d^4x \sqrt{-g} C_{\lambda\mu\nu\kappa} C^{\lambda\mu\nu\kappa}. \qquad (۲)$$

در رابطه (۲)، α_g ثابت بی بعد جفتشدگی گرانش کانفرمال است که شدت برهم‌کنش گرانشی را در این نظریه تعیین می‌کند و $C_{\lambda\mu\nu\kappa}$ تانسور ویل است. کنش (۲) را حول فضای تخت ($g_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} + h_{\mu\nu}$) خطی‌سازی کنیم و کنش را به صورت زیر باز نویسی می‌کنیم [۳]:

$$I_W = \frac{-\alpha_g}{2} \int d^4x \partial_\alpha \partial^\alpha K_{\mu\nu} \partial_\beta \partial^\beta K_{\mu\nu}. \qquad (۳)$$

در رابطه (۳)، $K_{\mu\nu}$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$K_{\mu\nu} = h_{\mu\nu} - \frac{1}{4}\eta_{\mu\nu}\eta^{\alpha\beta}h_{\alpha\beta}. \qquad (٤)$$

در نهایت هامیلتونی متناظر با کنش (۳) با مدل نوسانگر پایس_اولن‌بک به صورت زیر نوشته می‌شود [۳]:

$$H = \frac{p^2}{\gamma^2} - iqx + \frac{\gamma}{2}(\omega_1^2 + \omega_2^2)x + \frac{\gamma}{2}\omega_1^2\omega_2^2 y^2. \qquad (۵)$$

در رابطه (۵)، ثابت پایس_اولن‌بک و $q = ip$ است. هامیلتونی (۵) یک هامیلتونی غیرهرمیتی است که تحت PT تقارن دارد و نشان داده شده است که این دسته از هامیلتونی‌ها می‌توانند توصیف کننده پدیده‌های فیزیکی باشند [۳].

سرعت چرخش در گرانش کانفرمال

در گرانش کانفرمال، برای یک سامانه ایستا و کروی‌متقارن، به کمک تقارن کانفرمال می‌توان متریک را به صورت زیر نوشت:

$$ds^2 = cB(r)dt^2 - \frac{dr^2}{B(r)} - r^2 d\theta^2 - r^2 sin^2(\theta) d\varphi^2. \qquad (٦)$$

این شکل از متریک با حل معادلات میدان گرانش کانفرمال به دست می‌آید، نه از معادلات اینشتین. در این نظریه معادله میدان از کنش (۲) است و به جای معادله پواسون مرتبه دوم، به یک معادله پواسون مرتبه چهارم برای $B(r)$ میرسد که به صورت $\nabla^4 B(r) = f(r)$ است. بنابراین برای منبع موضعی کروی با شعاع r شکل $B(r)$ به صورت زیر نوشته می‌شود [۳]:

$$B(r) = 1 - \frac{2\beta}{r} + \gamma r. \qquad (۷)$$

در رابطه (۷)، $\beta = \frac{GM}{c^2}$ است.

در گام بعدی برای محاسبه پتانسیل گرانشی از این موضوع استفاده می‌کنیم که در تقریب میدان ضعیف مؤلفه زمانی متریک با پتانسیل گرانشی رابطه دارد، بنابراین:

$$B(r) = g_{00} \simeq 1 + \frac{V(r)}{c^2}. \qquad (۸)$$

با قرار دادن (۷) در (۸) پتانسیل را به صورت زیر می‌نویسیم:

$$V(r) = -\frac{\beta c^2}{r} + \frac{\gamma c^2 r}{2}. \qquad (۹)$$

برای محاسبه سرعت از رابطه زیر استفاده می‌کنیم:

$$\frac{v^2(r)}{r} = \frac{dV(r)}{dr}. \qquad (۱۰)$$

که در نتیجه سرعت به صورت زیر به دست می‌آید:

$$v^2(r) = \frac{\beta c^2}{r} + \frac{\gamma c^2 r}{2}. \qquad (۱۱)$$

سرعت چرخش کهکشان در مدل گرانش کانفرمال

با توجه به اینکه در گرانش کانفرمال باید معادله مرتبه چهار $\nabla^4 B(r) = f(r)$ حل شود، برخلاف گرانش معمول که معادله مرتبه دو است و جواب فقط به ماده درونی بستگی دارد، در این مدل ماده خارجی هم در سرعت نقش دارد بنابراین سرعت کل را به صورت زیر نوشته می‌شود [۳]:

$$V_{TOT}^2(R) = V_{LOC}^2(R) + v_{global}^2(R). \qquad (۱۲)$$

در رابطه (۱۲)، R شعاع کهکشان است و $V_{LOC}^2(R)$ سهم ماده مرئی در سرعت چرخش کهکشان و $v_{global}^2(R)$ به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$V_{LOC}^2(R) = \frac{N^*\beta^* c^2}{R} - \frac{N^*\gamma^* c^2 R}{2}, \qquad (۱۳)$$

و

$$v_{global}^2(R) = \frac{\gamma_0 c^2 R}{2} - \frac{k c^2 R^2}{2}. \qquad (۱۴)$$

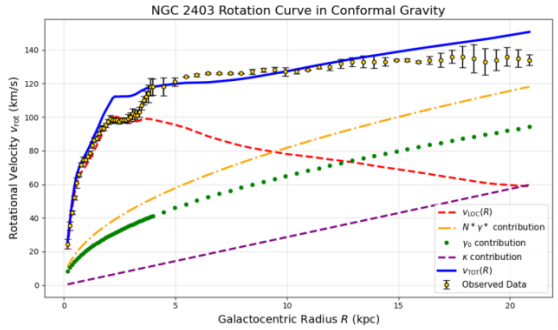
در رابطه (۱۳)، N^* تعداد کل ستاره‌های کهکشان، یا به‌صورت مؤثر تعداد واحدهای جرم خورشیدی موجود در کهکشان است و در رابطه (۱۴) جمله $\frac{\gamma_0 c^2 R}{2}$ نشان دهنده سهم کلی هندسه جهان [] و جمله $-\frac{k c^2 R^2}{2}$ نشان دهنده سهم ناهمگنی ناشی از اجرام بزرگ مقیاس در کهکشان [۳] بر سرعت چرخش کهکشان‌ها در مدل گرانش کانفرمال است. در رابطه (۱۳)، مقادیر $\gamma_0 = 3.06 \times 10^{-30} cm^{-1}$ ،$k = 9.54 \times 10^{-54} cm^{-2}$ و $\beta^* = 1.48 \times 10^5 cm$ و $\gamma^* = 5.42 \times 10^{-4} cm^{-1}$ هستند.

سرعت چرخش کهکشان NGC 2403 در مدل گرانش کانفرمال

کهکشان NGC 2403 یکی از کهکشان‌های مارپیچی نزدیک و شناخته‌شده در گروه M81 است که به دلیل در دسترس بودن داده‌های دقیق منحنی چرخش، توزیع جرم مرئی و اطلاعات فوتومتری، گزینه مناسبی برای بررسی مدل‌های گرانشی به شمار می‌رود. این کهکشان در بسیاری از مطالعات مربوط به منحنی‌های چرخش کهکشانی مورد استفاده قرار گرفته است [۳]؛ زیرا داده‌های رصدی آن از دقت و کیفیت بالایی برخوردار بوده و امکان مقایسه مستقیم میان پیش‌بینی‌های نظری و مشاهدات را فراهم می‌کند. به همین دلیل، در این مقاله ما کهکشان NGC 2403 را به عنوان نمونه‌ای مناسب برای بررسی گرانش کانفرمال انتخاب کردیم.

برای انجام تحلیل، داده‌های رصدی مربوط به این کهکشان از پایگاه داده SPARC استخراج شد. این داده‌ها شامل سرعت‌های چرخشی مشاهده‌شده، توزیع ماده مرئی و اطلاعات فوتومتری کهکشان هستند. ابتدا داده‌های رصدی منحنی چرخش کهکشان به صورت نمودار رسم شدند تا رفتار واقعی سرعت چرخشی ستارگان و گاز در فاصله‌های مختلف از مرکز کهکشان مشخص شود.

سپس با استفاده از روابط گرانش کانفرمال، سرعت چرخشی نظری کهکشان محاسبه شد. در این مدل، سرعت کل از مجموع سهم ماده مرئی کهکشان و سهم جهانی ناشی از ساختار بزرگ‌مقیاس جهان از (۱۲)، (۱۳) و (۱۴) به دست می‌آید. در ادامه، مقادیر نظری محاسبه‌شده برای سرعت چرخشی و نمودار داده‌های رصدی رسم شدند تا میزان تطابق مدل گرانش کانفرمال با داده‌های واقعی بررسی شود. علاوه بر منحنی سرعت کل، سهم هر یک از مؤلفه‌های سرعت نیز به صورت جداگانه نمایش داده شد؛ به‌طوری‌که سهم ماده مرئی، سهم کلی هندسه جهان، و سهم ناشی از ناهمگنی‌های بزرگ‌مقیاس جهان، هر کدام به صورت مستقل در شکل ۱ رسم شدند. این مقایسه امکان بررسی نقش هر یک از مؤلفه‌ها در شکل‌گیری منحنی چرخش کهکشان را فراهم می‌کند.

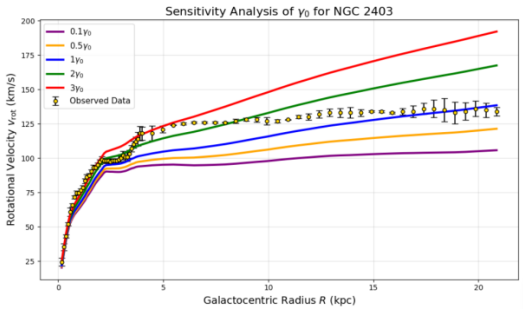


شکل ۱: نمودار سرعت چرخش کهکشان نسبت به فاصله از مرکز کهکشان

در شکل ۱، داده‌های رصدی منحنی چرخش کهکشان NGC 2403 به همراه خطاهای اندازه‌گیری، با رنگ زرد نمایش داده شده‌اند. سهم ماده مرئی کهکشان، که خود شامل دو مؤلفه اصلی است، با رنگ‌های نارنجی و قرمز رسم شده است. همچنین، منحنی سبزرنگ سهم ناشی از هندسه را نشان می‌دهد و

منحنی بنفش‌رنگ بیانگر سهم ناهمگنی‌ها و ساختارهای بزرگ‌مقیاس جهان است. در نهایت، منحنی آبی‌رنگ که حاصل جمع تمامی این مؤلفه‌ها و پیش‌بینی نهایی مدل گرانش کانفرمال است، تطابق بسیار خوبی با داده‌های رصدی نشان می‌دهد. این نتیجه بیانگر توانایی گرانش کانفرمال در بازتولید منحنی چرخش کهکشان بدون نیاز به فرض وجود ماده تاریک است.

با توجه به اینکه ضریب γ_0 بیانگر سهم هندسه کیهان‌شناختی در مدل گرانش کانفرمال است، بررسی حساسیت مدل نسبت به تغییرات این پارامتر می‌تواند اهمیت فیزیکی داشته باشد. برای این منظور، یک ضریب عددی در γ_0 ضرب می‌کنیم و مقدار آن را تغییر می‌دهیم. سپس برای مقادیر مختلف این ضریب، سرعت کل پیش‌بینی‌شده توسط مدل محاسبه شده و نتایج در شکل ۲ رسم می‌شوند. این کار نشان می‌دهد که تغییر سهم هندسه کیهان‌شناختی تا چه اندازه بر منحنی چرخش نهایی و میزان تطابق مدل با داده‌های رصدی اثر می‌گذارد.



شکل ۲: سرعت چرخش کهکشان به ازای ضرایب مختلف ضرب شده در پارامتر γ_0

با توجه به شکل ۲ نتیجه می‌گیریم که حساسیت مدل نسبت به ضریب γ_0 در نواحی مرکزی کهکشان کمتر از نواحی بیرونی آن است. این موضوع نشان می‌دهد که در بخش‌های مرکزی، دینامیک کهکشان عمدتاً تحت تأثیر ماده مرئی و سهم موضعی گرانش قرار دارد، در حالی که در فاصله‌های بزرگ‌تر از مرکز کهکشان، اثرات هندسه کیهان‌شناختی و ساختار بزرگ‌مقیاس جهان اهمیت بیشتری پیدا می‌کنند. بنابراین جمله مرتبط با γ_0 بیشتر در نواحی بیرونی منحنی چرخش نقش ایفا کرده و رفتار ثابت بودن سرعت چرخش را بدون نیاز به ماده تاریک توضیح می‌دهد.

نتیجه گیری

ابتدا مدل گرانش کانفرمال معرفی شد و پس از خطی‌سازی حول فضای تخت، به یک نظریه مشتق چهارم از نوع پایس_اولن‌بک منجر می‌شود. هامیلتونی متناظر با این مدل غیرهرمیتی است، اما تحت تقارن PT ناوردا باقی می‌ماند. این ویژگی نشان می‌دهد که این مدل می‌تواند توصیفی فیزیکی و سازگار از برهم‌کنش گرانشی ارائه دهد. سپس با استفاده از روابط گرانش کانفرمال، منحنی چرخش کهکشان NGC 2403 محاسبه و با داده‌های رصدی مقایسه شد. نتایج نشان دادند که مدل گرانش کانفرمال تطابق خوبی با داده‌های تجربی دارد و می‌تواند بدون نیاز به فرض ماده تاریک، رفتار منحنی چرخش کهکشان را توضیح دهد. در این مدل، سرعت کل از مجموع سهم ماده مرئی کهکشان و سهم‌های جهانی ناشی از هندسه و ساختار بزرگ‌مقیاس جهان به دست می‌آید. در بخش دیگر نقش پارامتر γ_0 ، که بیانگر اثر هندسه کیهان است، مورد بررسی قرار گرفت. نتایج تحلیل حساسیت نشان داد که تغییرات در نواحی مرکزی کهکشان تأثیر کمتری دارد، در حالی که در نواحی بیرونی کهکشان نقش آن بسیار پررنگ‌تر می‌شود. این موضوع نشان می‌دهد که در مرکز کهکشان، دینامیک بیشتر تحت تأثیر ماده مرئی قرار دارد، اما در فواصل بزرگ‌تر، اثرات هندسه کیهان‌شناختی و ساختار کلی جهان اهمیت بیشتری پیدا می‌کنند. بنابراین، جمله وابسته به γ_0 نقش مهمی در توضیح تخت شدن منحنی‌های چرخش کهکشانی ایفا می‌کند.

سپاسگزاری در صورت لزوم

خانم بهار راستکار از جناب آقای دکتر سروش شاکری بخاطر گفتگو و پیشنهادات ارزشمند در این پژوهش سپاسگزاری می‌نمایند.

مرجع‌ها

[۱] Mistele, T., McGaugh, S., Lelli, F., Schombert, J. and Li, P., 2024. Indefinitely flat circular velocities and the baryonic tully–fisher relation from weak lensing. *The Astrophysical Journal Letters*, *969*(1), p.L3.

[۲] Bender, C.M., Boettcher, S. and Meisinger, P.N., 1999. $\mathcal{PT}$-symmetric quantum mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, *40*(5), pp.2201-2229.

[۳] Mannheim, P.D., 2013. Astrophysical evidence for the non-Hermitian but PT-symmetric Hamiltonian of conformal gravity. *Fortschritte der Physik*, *61*(2-3), pp.140-154.

بررسی اثر دما بر ساختار ستاره‌های نوترونی چرخان با استفاده از معادله حالت LPB

ریاحی، رشید

دانشکده علوم پایه، واحد شهرکرد، دانشگاه آزاد اسلامی، شهرکرد، ایران

چکیده

اثر دما بر ساختار ستاره‌های نوترونی، به‌ویژه در مراحل اولیه تکامل یا در سامانه‌های حاصل از ادغام ستاره‌های نوترونی، یکی از عوامل مؤثر در تعیین ویژگی‌های ماکروسکوپی این اجرام است. در این پژوهش، تأثیر وابستگی دمایی معادله حالت LPB بر دنباله جرم–شعاع ستاره‌های نوترونی در حالت غیرچرخان و برای فرکانس‌های چرخش مشاهده‌شده ۳۱۷، ۷۱۶ و ۱۱۲۲ هرتز بررسی شده است. برای این منظور، ساختار ستاره‌های نوترونی با حل معادلات اینشتین و استفاده از کد عددی LORENE محاسبه شد. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش دما، جرم بیشینه ستاره کاهش یافته و شعاع متناظر با آن افزایش می‌یابد و در دماهای بالا دیگر حالت تعادلی پایداری به دست نمی‌آید. همچنین مقایسه نتایج با داده‌های رصدی تپ‌اختر J1614−2230 نشان می‌دهد که در فرکانس ۳۱۷ هرتز، تنها در بازه دمایی ۴۰ تا ۵۰ مگاالکترون‌ولت، جرم بیشینه محاسبه‌شده با مقدار مشاهده‌شده سازگار است. علاوه بر این، نتایج نشان می‌دهد که نادیده گرفتن اثرات دما می‌تواند به خطایی در حدود ۱۸ درصد در جرم بیشینه و ۱۳ درصد در شعاع ستاره منجر شود. این یافته‌ها بیانگر آن است که لحاظ کردن اثرات حرارتی در مدل‌سازی ستاره‌های نوترونی چرخان، به‌ویژه در مقایسه با داده‌های رصدی، از اهمیت قابل توجهی برخوردار است.

واژه‌های کلیدی: *ستاره نوترونی چرخان، معادله حالت وابسته به دما، معادلات اینشتین، LORENE*

Effects of Temperature on the Structure of Rotating Neutron Stars Using the LPB Equation of State

Riahi, Rashid

Department of Sciences, ShK. C., Islamic Azad University, Shahrekord, Iran.

Abstract

Temperature is one of the key factors affecting the macroscopic properties of neutron stars, particularly during the early stages of their evolution and in remnants formed by binary neutron star mergers. In this study, the influence of the temperature-dependent LPB equation of state (EOS) on the mass–radius sequence of neutron stars is investigated for both the non-rotating configuration and the observed rotational frequencies of 317, 716, and 1122 Hz. The stellar structure is obtained by solving Einstein's field equations using the numerical LORENE code. The results indicate that increasing temperature reduces the maximum gravitational mass while increasing the corresponding stellar radius. At sufficiently high temperatures, stable equilibrium configurations no longer exist. Comparison with the observational mass of the pulsar J1614−2230 further shows that, at a rotational frequency of 317 Hz, the calculated maximum mass is consistent with the observed value only within the temperature range of 40–50 MeV. Moreover, neglecting thermal effects may lead to errors of approximately 18% in the maximum mass and 13% in the stellar radius. These findings demonstrate that incorporating thermal effects is essential for accurately modeling rotating neutron stars, particularly when comparing theoretical predictions with observational data.

Keywords: *Rotating neutron stars, Temperature-dependent equation of state, Einstein's field equations, LORENE.*

PACS No. 26

مقدمه

ستاره‌های نوترونی از متراکم‌ترین اجرام شناخته‌شده در عالم هستند [۱] و مطالعه آن‌ها امکان بررسی رفتار ماده هسته‌ای در چگالی‌هایی چندین برابر چگالی اشباع هسته را فراهم می‌کند. ویژگی‌های ماکروسکوپی این ستاره‌ها، از جمله جرم، شعاع و حد پایداری، به‌طور مستقیم به معادله حالت ماده درونی آن‌ها وابسته است. ازاین‌رو، تعیین اثر عوامل فیزیکی مؤثر بر معادله حالت، نقش مهمی در تفسیر داده‌های رصدی و محدود کردن مدل‌های ماده چگال دارد.

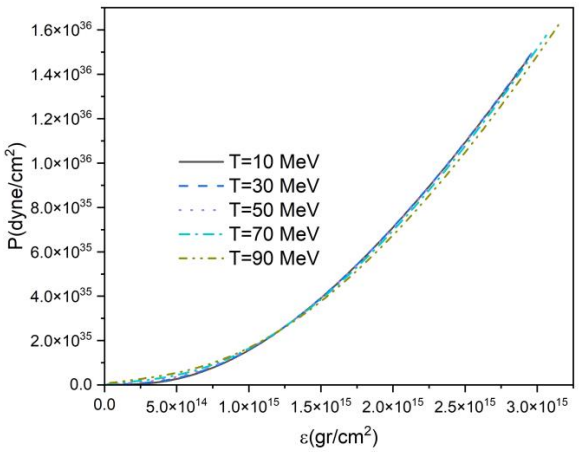
بیشتر مطالعات انجام‌شده در زمینه ساختار ستاره‌های نوترونی بر معادلات حالت در دمای صفر متمرکز بوده‌اند، زیرا اغلب ستاره‌های نوترونی پیر دارای دمای داخلی نسبتاً پایینی هستند. با این حال، در مراحل اولیه تولد ستاره نوترونی و نیز در سامانه‌های حاصل از ادغام ستاره‌های نوترونی، دمای ماده می‌تواند به چند ده مگاالکترون‌ولت برسد[۲]. در چنین شرایطی، اثرات دمایی بر معادله حالت دیگر قابل صرف‌نظر کردن نیست و می‌تواند بر ساختار تعادلی، جرم بیشینه، شعاع و حتی محدوده پایداری ستاره‌های نوترونی چرخان تأثیر قابل توجهی بگذارد.

در سال‌های اخیر، معادله حالت وابسته به دمای LPB [۳،۴] که بر پایه تعمیم نظریه میکروسکوپی Brueckner–Bethe–Goldstone به دماهای محدود توسعه یافته است، به عنوان یکی از معادلات حالت واقع‌بینانه در شبیه‌سازی ستاره‌های نوترونی و ادغام آن‌ها مورد استفاده قرار گرفته است. در شکل ۱ این معادله حالت در دماهای مختلف نشان داده شده است. با وجود مطالعات انجام‌شده درباره تأثیر دما بر خواص کلی ستاره‌های نوترونی، بررسی رفتار دنباله جرم–شعاع در فرکانس‌های چرخش مشاهده‌شده و تعیین محدوده دمایی سازگار با جرم‌های رصدی، همچنان نیازمند مطالعه دقیق‌تر است.

در این پژوهش، با استفاده از معادله حالت وابسته به دمای LPB و کد عددی LORENE ، دنباله جرم–شعاع ستاره‌های نوترونی برای حالت غیرچرخان و سه فرکانس چرخش ۳۱۷، ۷۱۶ و ۱۱۲۲ هرتز محاسبه شده است. سپس تغییرات جرم بیشینه، شعاع متناظر و محدوده پایداری ستاره با افزایش دما بررسی شده و نتایج برای فرکانس ۳۱۷ هرتز با جرم اندازه‌گیری‌شده تپ‌اختر PSR J1614–2230 مقایسه شده است. این مقایسه نشان می‌دهد که وابستگی دمایی معادله حالت می‌تواند بازه دمایی سازگار با داده‌های رصدی را محدود کند و بنابراین در مدل‌سازی ستاره‌های نوترونی جوان و سامانه‌های داغ حاصل از ادغام، نقش قابل توجهی داشته باشد.

حل معادلات اینشتین

برای تعیین ساختار و ویژگی‌های ستاره‌های نوترونی چرخان، حل معادلات اینشتین برای توصیف فضا–زمان خمیده اطراف این اجرام ضروری است. در این مطالعه، معادلات مربوط به ستاره‌های نوترونی چرخان با در نظر گرفتن معادله حالت وابسته به دما LPB حل شده‌اند تا جرم و شعاع ستاره‌ها در فرکانس‌های چرخش مختلف و دماهای متفاوت محاسبه شوند. این فرایند شامل حل سیستم معادلات دیفرانسیل کوپل شده‌ای است که بر اساس تقارن محوری و پایداری تعادل هیدرواستاتیکی ستاره تدوین شده‌اند.



شکل ۱ : معادله حالت استفاده شده در این مطالعه در دماهای مختلف

برای انجام این محاسبات پیچیده و دقیق، از کد عددی LORENE استفاده شده است. این کد ابزاری قدرتمند برای

مدل‌سازی اجرام فیزیک نجومی نسبیتی چرخان، از جمله ستاره‌های نوترونی، فراهم می‌کند [۵]. این کد قادر است به طور دقیق هندسه فضا–زمان و توزیع ماده در ستاره‌های نوترونی چرخان را با استفاده از روش‌های عددی حل کند.

نتایج

شکل ۲ دنباله جرم–شعاع ستاره نوترونی غیرچرخان را برای دماهای مختلف نشان می‌دهد. نتایج بیانگر آن است که با افزایش دما، جرم بیشینه ستاره به‌تدریج کاهش یافته، در حالی که شعاع متناظر با آن افزایش می‌یابد. در دمای MeV ۱۰ بیشترین جرم قابل دستیابی برای حالت تعادل به دست می‌آید، اما با افزایش دما تا MeV ۷۰، جرم بیشینه کاهش یافته و شعاع ستاره افزایش پیدا می‌کند. همچنین برای دماهای بالاتر از MeV ۷۰ هیچ پاسخ تعادلی پایداری برای ستاره غیرچرخان به دست نیامده است، که بیانگر محدود شدن ناحیه پایداری در دماهای بالا است. مقایسه این نتایج نشان می‌دهد که نادیده گرفتن اثرات دمایی می‌تواند به خطایی در حدود ۱۸ درصد در جرم بیشینه و حدود ۱۳ درصد در شعاع منجر شود.

نتایج مربوط به ستاره‌های نوترونی چرخان در فرکانس ۳۱۷ هرتز در شکل ۳ ارائه شده است. روند تغییرات مشابه حالت غیرچرخان است، با این تفاوت که چرخش باعث افزایش جرم قابل تحمل ستاره می‌شود. با افزایش دما، جرم بیشینه کاهش و شعاع متناظر افزایش می‌یابد و برای دماهای بیش از MeV ۶۰ دیگر هیچ پیکربندی پایداری به دست نمی‌آید. مقایسه نتایج با جرم اندازه‌گیری‌شده تپ‌اختر PSR J1614–2230 [۶] نشان می‌دهد که تنها در بازه دمایی تقریباً MeV ۴۰ تا MeV ۵۰، جرم بیشینه محاسبه‌شده با مقدار رصدی سازگار است، در حالی که در دماهای پایین‌تر یا بالاتر، مدل از بازتولید جرم مشاهده‌شده بازمی‌ماند. این نتیجه نشان می‌دهد که در چارچوب معادله حالت LPB، وابستگی دمایی می‌تواند دامنه پارامترهای سازگار با مشاهدات را محدود کند.

شکل ۴ نتایج مربوط به فرکانس ۷۱۶ هرتز را نشان می‌دهد. در این فرکانس نیز افزایش دما موجب کاهش تدریجی جرم بیشینه و افزایش شعاع متناظر می‌شود. بیشترین دمایی که در آن هنوز حالت تعادل برای ستاره به دست می‌آید، حدود MeV ۶۰ است و در دماهای بالاتر، پاسخ‌های پایدار وجود ندارند. این رفتار نشان می‌دهد که با افزایش دما، ناحیه پایداری ستاره‌های نوترونی چرخان کوچک‌تر می‌شود.

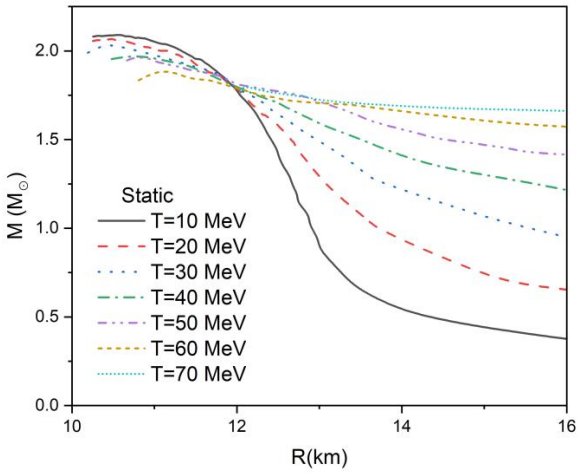
نتایج فرکانس ۱۱۲۲ هرتز در شکل ۵ ارائه شده است. اگرچه چرخش سریع‌تر امکان دستیابی به جرم‌های بزرگ‌تر را فراهم می‌کند، اما هم‌زمان حساسیت ساختار ستاره به اثرات دمایی نیز افزایش می‌یابد. در این حالت تنها تا دمای حدود MeV ۵۰ پاسخ‌های پایدار به دست آمد و در دماهای بالاتر هیچ ساختار تعادلی مشاهده نشد. این موضوع نشان می‌دهد که افزایش هم‌زمان دما و سرعت چرخش، دامنه شرایطی را که در آن ستاره می‌تواند در حالت تعادل باقی بماند، محدود می‌کند.

در مجموع، نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که وابستگی دمایی معادله حالت تنها موجب تغییر مقادیر جرم و شعاع نمی‌شود، بلکه محدوده پایداری ستاره‌های نوترونی را نیز تحت تأثیر قرار می‌دهد. علاوه بر این، مقایسه با جرم رصدی PSR J1614–2230 نشان می‌دهد که برای معادله حالت LPB تنها یک بازه مشخص از دماها با داده‌های مشاهده‌ای سازگار است. ازاین‌رو، در مدل‌سازی ستاره‌های نوترونی داغ و به‌ویژه اجرام حاصل از ادغام ستاره‌های نوترونی، در نظر گرفتن اثرات دمایی برای دستیابی به نتایج واقع‌بینانه ضروری است.

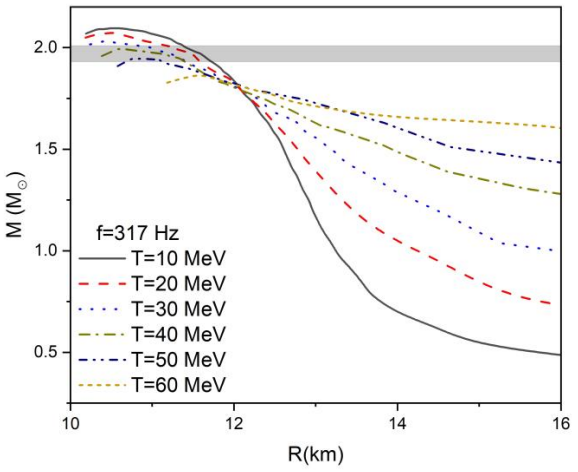
نتیجه گیری

در این پژوهش، اثر وابستگی دمایی معادله حالت LPB بر دنباله جرم–شعاع ستاره‌های نوترونی در حالت غیرچرخان و برای سه فرکانس چرخش ۳۱۷، ۷۱۶ و ۱۱۲۲ هرتز با استفاده از کد عددی LORENE بررسی شد. نتایج نشان داد که افزایش دما موجب کاهش جرم بیشینه، افزایش شعاع متناظر و محدود شدن ناحیه پایداری ستاره‌های نوترونی می‌شود. همچنین مشخص شد که بیشینه دمای قابل دستیابی برای وجود حالت تعادل به فرکانس چرخش وابسته است و با افزایش سرعت چرخش، دامنه دمایی پایداری کاهش می‌یابد.

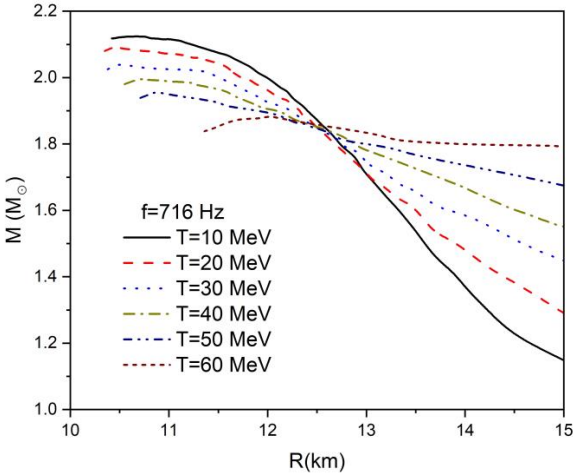
مقایسه نتایج با جرم اندازه‌گیری‌شده تپ‌اختر PSR J1614–2230 نشان داد که در چارچوب معادله حالت LPB تنها یک بازه محدود از دماها با داده‌های رصدی سازگار است. این یافته بر اهمیت در نظر گرفتن اثرات دمایی در مدل‌سازی ستاره‌های نوترونی داغ، به‌ویژه در مراحل اولیه تکامل و سامانه‌های حاصل از ادغام ستاره‌های نوترونی، تأکید می‌کند. همچنین نتایج این پژوهش می‌تواند مبنایی برای بررسی روابط تقریباً مستقل از معادله حالت در ستاره‌های نوترونی داغ در مطالعات آینده باشد [۷].



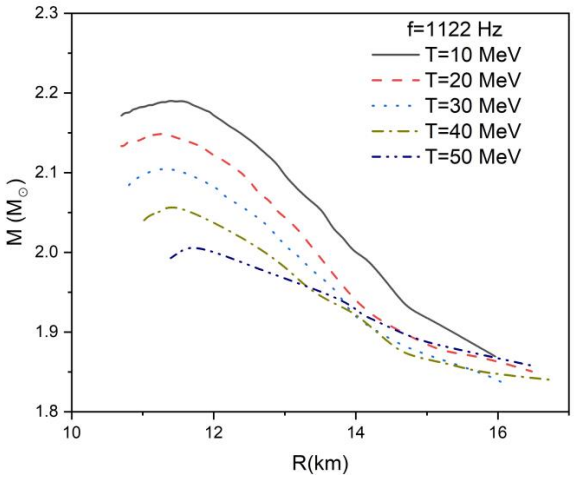
شکل۲ : نمودار جرم–شعاع برای ستاره غیرچرخان در دماهای مختلف



شکل۳ : نمودار جرم–شعاع برای ستاره چرخان با فرکانس ۳۱۷Hz در دماهای مختلف. نوار افقی رسم شده محدوده جرم اندازه‌گیری شده برای ستاره ۲۲۳۰–J۱۶۱۴ با فرکانس چرخش ۳۱۷Hz، $(۱/۹۷\pm۰/۰۴)M_{\odot}$، را نشان می‌دهد.



شکل۳ : نمودار جرم–شعاع برای ستاره چرخان با فرکانس ۷۱۶Hz در دماهای مختلف.



شکل۳ : نمودار جرم–شعاع برای ستاره چرخان با فرکانس ۱۱۲۲Hz در دماهای مختلف.

مرجع‌ها

[1] J. M. Lattimer, Annual Review of Nuclear and Particle Science 62, 485 (2012).
[2] A. Perego, D. Logoteta, D. Radice, S. Bernuzzi, R. Kashyap, Phys. Rev. Lett. 129, 032701 (2022).
[3] D. Logoteta, A. Perego, I. Bombaci, Astron. Astrophys. 646, A55 (2021).
[4] I. Bombaci and D. Logoteta, Astron. Astrophys. 609, A128 (2018).
[5] http://www.lorene.obspm.fr.
[6] P. Demorest, T. Pennucci, S. Ransom, M. Roberts, and J. Hessels, Nature 467, 1081 (2010).
[7] R. Riahi, S. Z. Kalantari and J. A. Rueda, "Universal relations for the Keplerian sequence of rotating neutron stars", *Physical Review D* **99**, (2019) 043004.

سیاه‌چاله‌های تاب–نات شبه AdS در گرانش بامبلیبی به عنوان ماشین گرمایی

اسلام‌پناه، بهزاد؛ سلیمان‌نژاد، کسری

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه دانشگاه مازندران، بابلسر

چکیده

در این مقاله، سیاه‌چاله‌های تاب–نات شبه AdS در چارچوب گرانش بامبلیبی مورد بررسی قرار می‌گیرند. در این راستا، ویژگی‌های ترمودینامیکی این سیاه‌چاله‌ها–از جمله دمای هاوکینگ، آنتروپی، جرم، ظرفیت گرمایی و همچنین بار نات و پتانسیل متناظر با آن محاسبه و تحلیل می‌شوند. و سازگاری آن‌ها با قانون اول ترمودینامیک مورد ارزیابی قرار می‌گیرد. افزون بر این، در چارچوب ترمودینامیک فضای فاز گسترده، این سیاه‌چاله‌ها به‌عنوان ماشین‌های گرمایی در نظر گرفته شده و تأثیر پارامترهای نات و بامبلیبی بر بازده ماشین گرمایی و بازده کارنو این دسته از سیاه‌چاله‌ها مورد مطالعه قرار می‌گیرد.

واژه های کلیدی: سیاه‌چاله‌های تاب–نات، گرانش بامبلیبی، ماشین گرمایی، بازده ماشین گرمایی

Taub-NUT AdS-like Black Holes in Bumblebee Gravity as Heat Engine

Eslam Panah, Behzad; Soleimannejad, Kasra

Department of Theoretical Physics, Faculty of Basic Sciences, University of Mazandaran, Babolsar, Iran

Abstract

In this paper, Taub–NUT AdS-like black holes are investigated within the framework of Bumblebee gravity. In this context, the thermodynamic properties of these black holes-including the Hawking temperature, entropy, mass, heat capacity, as well as the NUT charge and its corresponding potential-are calculated and analyzed, and their consistency with the first law of thermodynamics is examined. Furthermore, within the framework of extended phase space thermodynamics, these black holes are treated as heat engines, and the effects of the NUT and Bumblebee parameters on the heat engine efficiency and the Carnot efficiency of this class of black holes are studied.

***Keywords**: Taub-NUT black holes, Bumblebee gravity, Heat engine, Efficiency of heat engine*

PACS No.: 04.70.Dy, 04.50.Kd, 05.70.-a, 04.70.Bw

مقدمه

ترمودینامیک سیاه‌چاله‌ها یکی از مهم‌ترین پیوندها میان گرانش، مکانیک کوانتومی و فیزیک آماری به‌شمار می‌رود [1]. در این چارچوب، کمیت‌هایی مانند دما و آنتروپی به سیاه‌چاله‌ها نسبت داده می‌شود؛ به‌گونه‌ای که دما با گرانش سطحی و آنتروپی با مساحت افق رویداد آن‌ها متناسب است. به بیان دیگر، سیاه‌چاله را می‌توان به‌عنوان یک سامانه‌ی ترمودینامیکی مورد مطالعه قرار داد [2].

با در نظر گرفتن سیاه‌چاله به‌عنوان یک سامانه‌ی ترمودینامیکی، جانسون (Jonhson) در مقاله‌ی [۳] با استفاده از مفهوم حجم ترمودینامیکی و در نظر گرفتن جمله‌ی PdV در قانون اول ترمودینامیک، به بررسی بازده یک ماشین گرمایی مبتنی بر سیاه‌چاله پرداخت. در این چارچوب، سیاه‌چاله می‌تواند در طی یک چرخه‌ی ترمودینامیکی بخشی از گرمای جذب‌شده را به کار مکانیکی تبدیل کند.

در سال‌های اخیر، نظریه‌های نقض خودبه‌خودی تقارن لورنتس در فیزیک نظری مطرح شد. یکی از مهم‌ترین این مدل‌ها، نظریه گرانش بامبلیبی است که در آن یک میدان برداری دینامیکی با مقدار خلأ غیرصفر به ساختار نسبیت عام افزوده می‌شود [۴]. وجود این میدان باعث ایجاد جهت ترجیحی در فضازمان و در نتیجه شکستن خودبه‌خودی تقارن لورنتس می‌شود. نظریه بامبلیبی به دلیل ساختار نسبتاً ساده خود، بستری مناسب برای مطالعه آثار نقض لورنتس در گرانش، کیهان‌شناسی و فیزیک سیاه‌چاله‌ها فراهم می‌کند. حضور پارامتر نقض لورنتس در معادلات میدان می‌تواند

ساختار افق رویداد، دمای هاوکینگ، و ویژگی‌های ترمودینامیکی سیاه‌چاله‌ها را تغییر دهد [۵].

از سوی دیگر، فضازمان تاب–نات یکی از راه‌حل‌های معادلات میدان اینشتین است که به دلیل حضور پارامتر نات دارای ساختار هندسی و توپولوژیکی ویژه‌ای است [۶]. پارامتر نات به عنوان نوعی بار مغناطیسی گرانشی تعبیر می‌شود و موجب بروز ویژگی‌هایی مانند تغییر ساختار افق‌ها، ایجاد مسیرهای ژئودزیکی غیرمعمول و اصلاح خواص ترمودینامیکی سیاه‌چاله می‌گردد [۶]. بررسی گرانش بامبلیبی در حضور میدان تاب–نات امکان مطالعه آثار نقض لورنتس و بار گرانشی مغناطیسی را فراهم می‌کند و ممکن است که رفتار ترمودینامیکی و بازده ماشین گرمایی سیاه چاله را تغییر دهد.

گرانش بامبلیبی در میدان تاب–نات

ساختار کنش نظریه بامبلیبی به صورت زیر است [۶]

$$S=\int d^4x\sqrt{-g}\left(\frac{1}{2\kappa}R+L_B+L_m\right) \qquad (1)$$

که در آن R اسکالر ریچی، L_m لاگرانژین میدان معمولی و L_B لاگرانژین میدان بامبلیبی است، که عبارت است از [۶]

$$L_B=-\frac{1}{4}\left(B^{\mu\nu}B_{\mu\nu}-V(B^{\mu}B_{\mu}\pm b^2)\right) \qquad (2)$$

به طوری که B^{μ} میدان برداری بامبلیبی است که جهت ترجیحی ایجاد می‌کند. b مقدار میانگین خلأ میدان بامبلیبی است که تعیین‌کننده‌ی مقدار شکست خودبه‌خودی لورنتس است و $B^{\mu\nu}$ تانسور شدت میدان بامبلیبی است که دینامیک و تغییرات فضازمان را توصیف می‌کند.

با در نظر گرفتن فضازمان ۴–بعدی به صورت

$$ds^2=-f(r)\left(dt+2n\cos\theta d\phi\right)^2+\frac{(1+l)dr^2}{f(r)} \qquad (3)$$
$$+\left(r^2+n^2\right)\left(d\theta^2+\sin^2\theta d\phi^2\right)$$

که در آن تابع متریک به صورت زیر است [۶]

$$f(r)=\frac{r^2-2mr-n^2}{r^2+n^2}+\frac{\Lambda\left(3n^4-6n^2r^2-r^4\right)}{\left(3r^2+n^2\right)} \qquad (4)$$

لازم به ذکر است که در روابط (3) و (4)، n پارامتر نات و l پارامتر بامبلیبی است.

کمیت‌های ترمودینامیکی

با استفاده از گرانش سطحی، دمای هاوکینگ برای سیاه‌چاله تاب–نات شبه AdS در گرانش بامبلیبی به صورت زیر بدست می‌آید [۶]

$$T_H=\frac{1}{4\pi\left(\sqrt{1+l}\right)}\left(\frac{df(r)}{dr}\right)|_{r=r_+}=\frac{1-\Lambda\left(r_+^2+n^2\right)}{4\pi\left(\sqrt{1+l}\right)r_+} \qquad (5)$$

که به پارامترهای n و l وابسته است. از تعریف مساحت افق رویداد، آنتروپی برای سیاه‌چاله تاب–نات شبه AdS منجر به رابطه‌ی زیر می‌گردد [۶]

$$S=\pi\left(r_+^2+n^2\right)(1+l) \qquad (6)$$

که با افزایش مقادیر n و l، آنتروپی افزایش می‌یابد.

جرم سیاه‌چاله از رابطه $\left(f(r=r_+)=0\right)$ بدست می‌آید که عبارت است از

$$M=\left(\frac{r_+^2+n^2}{2r_+^2}-\frac{\Lambda\left(r_+^4+3n^4\right)}{6r_+}\right)\sqrt{1+l} \qquad (۷)$$

که به پارامترهای n و l وابسته است.

بار نات و پتانسیل نات نیز به این صورت بدست می‌آیند [۶]

$$Q_N=\frac{n}{r_+}+\left(1-\Lambda\left(n^2-r_+^2\right)\right),\quad \&\quad \Phi_N=\frac{N\sqrt{1+l}}{2} \qquad (۸)$$

در فضای فاز گسترده، فشار سیاه‌چاله تاب–نات شبه AdS به صورت زیر می‌باشد [۶]

$$P=\frac{-\Lambda}{(1+l)8\pi} \qquad (۹)$$

با استفاده از رابطه‌ی آنتروپی (۶)، شعاع افق رویداد برابر است با

$$r_+=\sqrt{\frac{S-\pi(1+l)n^2}{\pi(1+l)}} \qquad (۱۰)$$

با جاگذاری Λ از معادله (۹) و r_+ از معادله (۱۰) در رابطه (۷)، جرم سیاه‌چاله در فضای فاز گسترش یافته برابر می‌شود با

$$M(S,P)=\frac{16\left(\frac{S^2P}{4}+\frac{3S}{32}-\frac{\pi(1+l)n^2SP}{2}\right)+\pi^2(1+l)^2n^4P}{3\pi\sqrt{\frac{S}{\pi}-(1+l)n^2}} \qquad (۱۱)$$

اکنون با استفاده از جرم در فضای فاز گسترده، حجم ترمودینامیکی از رابطه‌ی $V=\left(\frac{\partial M(S,P)}{\partial S}\right)_S$ بدست می‌آید که منجر به

$$V=\frac{16\left(\frac{S^2}{4}-\frac{\pi(1+l)n^2S}{2}+\pi^2(1+l)^2n^4\right)}{3\pi\sqrt{\frac{S}{\pi}-(1+l)n^2}} \qquad (۱۲)$$

با در نظر گرفتن کمیت‌های ترمودینامیکی، قانون اول ترمودینامیک سیاه‌چاله مورد مطالعه، به صورت زیر بدست می‌آید

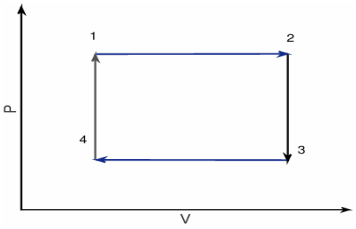
$$dM=TdS+\Phi_N dQ_N+VdP \qquad (۱۳)$$

سیاه‌چاله تاب–نات به عنوان ماشین گرمایی

بازده ماشین گرمایی به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\eta=\frac{W}{Q_H} \qquad (۱۴)$$

لازم به ذکر است که در چرخه‌هایی مانند کارنو و استرلینگ دو فرآیند هم‌دما، با مسیرهای هم‌حجم و یا بی‌دررو به هم متصل می‌شوند. اما از آنجا که حجم ترمودینامیکی سیاه‌چاله‌ها وابسته به آنتروپی است، رفتار مسیرهای بی‌دررو و هم‌حجم مشابه همدیگر می‌گردد و چرخه‌های کارنو و استرلینگ هم‌ارز می‌شوند؛ این هم‌ارزی محاسبات بازده را ساده می‌کند (شکل ۱ را مشاهده نمایید).



شکل 1 : نمودار $P-V$ برای چرخه کارنو با دو فرآیند هم‌فشار ($2\to1$ و $4\to3$) و دو فرآیند هم‌حجم ($3\to2$ و $1\to4$) [۳].

کار انجام شده در چرخه ترمودینامیکی شکل ۱ برابر است با

$$W=P_1(V_2-V_1)+P_4(V_4-V_3) \qquad (۱۵)$$

که مقدار آن به صورت زیر محاسبه می‌شود

$$W=\left(\frac{8(P_1-P_4)\beta_2}{\sqrt{S_2-\pi(1+l)n^2}}-\frac{8(P_1-P_4)\beta_1}{\sqrt{S_1-\pi(1+l)n^2}}\right) \qquad (۱۶)$$

همچنین در رابطه بالا، مقدار β_i به صورت زیر است

$$\beta_i=\frac{S_i^2}{4}-\frac{\pi(1+l)n^2S_i}{2}+\pi^2(1+l)^2\pi^4 \qquad (۱۷)$$

همچنین ظرفیت گرمایی ویژه نیز از معادله‌ی زیر بدست می‌آید

$$C_P=\frac{T}{\left(\frac{dT}{dS}\right)_P} \qquad (۱۸)$$

گرمای ورودی به سیستم توسط ایزوبار $1\to2$ تأمین می‌شود که به این صورت محاسبه می‌گردد

$$Q_H=\int_{T_1}^{T_2}C_P(P_1)dT=\int_{S_2}^{S_1}C_P(P_1)\frac{\partial T}{\partial S}dS$$
$$=\frac{16}{3\sqrt{\pi}}\left(\frac{\beta_2P_1+\frac{3S_2}{32}}{\sqrt{S_2-\pi(1+l)n^2}}-\frac{\beta_1P_1+\frac{3S_1}{32}}{\sqrt{S_1-\pi(1+l)n^2}}\right) \qquad (۱۹)$$

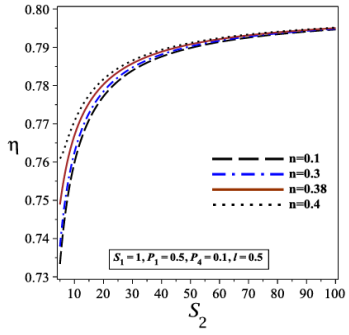
با جاگذاری معادلات (۱۶) و (۱۹) در معادله (۱۴)، بازده ماشین گرمایی برای سیاه‌چاله تاب–نات شبه AdS در گرانش بامبلیبی برابر می‌شود با

$$\eta=\frac{(P_1-P_4)\left(\frac{\beta_2}{\sqrt{S_2-\pi(1+l)n^2}}-\frac{\beta_1}{\sqrt{S_1-\pi(1+l)n^2}}\right)}{\frac{\xi_{12}}{\sqrt{S_2-\pi(1+l)n^2}}-\frac{\xi_{11}}{\sqrt{S_1-\pi(1+l)n^2}}} \qquad (۲۰)$$

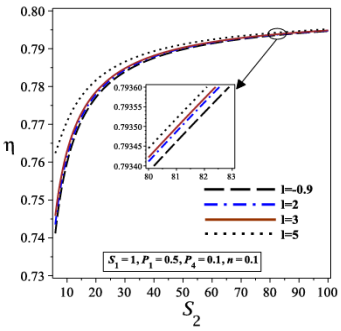
که در آن ξ_{1i} عبارت است از

$$\xi_{1i}=\xi_1|_{S=S_i}=\frac{S_i^2P_1}{4}+\frac{3S_i}{32}-\frac{\pi(1+l)n^2S_iP_1}{2}+\pi^2(1+l)^2n^4P_1 \qquad (۲۱)$$

برای آنکه رابطه (۲۰) دارای مقادیر فیزیکی باشد، حضور جمله $\sqrt{S_1-\pi(1+l)n^2}$ محدودیتی ایجاد می‌کند که پارامتر تاب–نات باید در بازه $n^2<\frac{S_1}{\pi(1+l)}$ باشد. اثرات پارامترهای n و l در شکل‌های ۲ و ۳ رسم شده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش این مقادیر، بازده ماشین گرمایی افزایش می‌یابد. همچنین در آنتروپی یکسان، با افزایش مقادیر n و l، بازده ماشین گرمایی افزایش می‌یابد. علاوه بر این، بازده ماشین گرمایی در حد $S_2\to\infty$ به یک مقدار معین همگرا می‌شود.



شکل 2 : بازده ماشین گرمایی بر حسب S_2 با تغییر پارامتر نات.



شکل3 : بازده ماشین گرمایی بر حسب S_2 با تغییر پارامتر بامبلیبی.

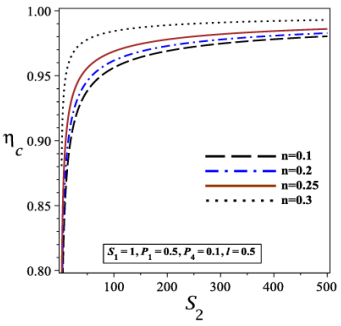
بازده کارنو از رابطه زیر تعیین می‌شود

$$\eta_C = 1 - \frac{T_C}{T_H} \qquad (۲۲)$$

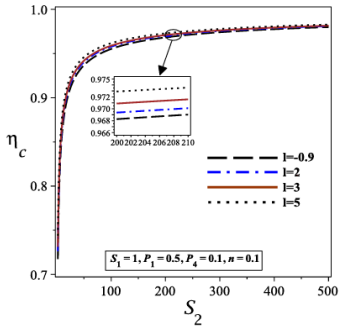
و با استفاده از کمیت‌های ترمودینامیکی در فضای فاز گسترده، بازده کارنو برای این سیاه‌چاله به صورت زیر بدست می‌آید

$$\eta_C = 1 - \frac{(1+8S_1P_4)(S_2-\pi(1+l)n^2)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{S_1}{2}-\pi(1+l)n^2\right)}{(1+8S_2P_1)(S_1-\pi(1+l)n^2)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{S_2}{2}-\pi(1+l)n^2\right)} \qquad (۲۳)$$

بررسی تأثیر پارامترهای n و l بر بازده کارنو برای سیاه‌چاله‌ی مورد مطالعه نشان می‌دهد که با افزایش مقادیر این پارامترها، بازده کارنو ماشین گرمایی نیز افزایش می‌یابد. همچنین نتایج نشان می‌دهد که در آنتروپی ثابت، افزایش مقادیر n و l موجب افزایش بازده کارنو می‌شود. افزون بر این، بازده کارنو در حد $S_2 \to \infty$ به مقدار ۱ همگرا می‌شود (شکل‌های ۴ و ۵).



شکل4 : بازده کارنو بر حسب S_2 با تغییر پارامتر نات.



شکل5 : بازده کارنو بر حسب S_2 با تغییر پارامتر بامبلیبی.

نتیجه گیری

در این پژوهش، سیاه‌چاله‌های تاب–نات شبه AdS در چارچوب گرانش بامبلیبی مورد بررسی قرار گرفتند. بدین منظور، ابتدا کمیت‌های ترمودینامیکی مرتبط با این سیاه‌چاله‌ها محاسبه و سازگاری آن‌ها با قانون اول ترمودینامیک تحلیل شد. در ادامه، در چارچوب ترمودینامیک فضای فاز گسترده، این سیاه‌چاله‌ها به‌عنوان یک ماشین گرمایی در نظر گرفته شده و بازده چرخه‌ی ترمودینامیکی آن‌ها محاسبه گردید. نتایج نشان داد که بازده ماشین گرمایی و همچنین بازده کارنو به پارامترهای تاب–نات و بامبلیبی وابسته هستند. بررسی‌ها حاکی از آن است که با افزایش مقادیر این پارامترها، بازده ماشین گرمایی افزایش می‌یابد. افزون بر این، نتایج بدست‌آمده نشان می‌دهد که بازده ماشین گرمایی نسبت به تغییرات پارامتر تاب–نات حساسیت قابل توجهی از خود نشان می‌دهد.

مرجع‌ها

[1] J. D. Bekenstein, Phys. Rev. D **7**, 2333 (1973).
[2] S. Hawking, and D. N. Page, Commun. Math. Phys. **87**, 577 (1983).
[3] C. V. Johnson, Class. Quantum Grav. **33**, 215009 (2016).
[4] V. A. Kostelecky, and S. Samuel, Phys. Rev. D **39**, 683 (1989).
[5] R. Bluhm, and V. A. Kostelecky, Phys. Rev. D **71**, 065008 (2005).
[6] Y. Q. Chen and H. S. Liu, Phys. Rev. D **112**, 084040 (2025).

ترمودینامیک و تحلیل پایداری سیاهچاله‌های کند- چرخان در حضور الکترودینامیک توانی

دهقانی کاظمی، محسن

گروه فیزیک، دانشگاه رازی، کرمانشاه، ایران

چکیده

معادلات میدان نظریه گرانشی انیشتین ـ Λ در حضور الکترودینامیک غیر خطی توانی ـ ماکسول حل و دو دسته جدید سیاهچاله باردار غیر خطی کند- چرخان معرفی شده‌اند که به صورت مجانبی آنتی ـ دوسیته هستند. کمیتهای پایستار و ترمودینامیکی محاسبه شده‌اند و نشان داده شده است که این کمیتها در شکل استاندارد قانون اول ترمودینامیک صدق می‌کنند. پایداری دمایی سیاهچاله‌ها با استفاده از روشهای هندسی و ترمودینامیکی تحلیل و نتایج حاصل از این دو روش با هم مقایسه شده‌اند.

واژه های کلیدی: *سیاهچاله کند- چرخان، ترمودینامیک سیاهچاله، الکترودینامیک غیر خطی*

Thermodynamics and stability analysis of slowly rotating black holes in the presence of power-law electrodynamics

Dehghani Kazemi, Mohsen

Department of Physics, Razi University, Kermanshah, Iran

Abstract

The field equations of Einstein- Λ gravity theory have been solved in the presence of power-Maxwell nonlinear electrodynamics. Two new classes of nonlinear charged slowly rotating black holes have been introduced which are asymptotically anti-de Sitter. The conserved and thermodynamic quantities have been calculated and it has been shown that these quantities fulfill the standard form of the thermodynamical first law. Thermal stability of the black holes has been analyzed, by using the geometrical and thermodynamical methods, and the results of these alternative approaches have been compared.

Keywords: *Rotating black hole, Black hole thermodynamics, Nonlinear electrodynamics.*

PACS No. 04

مقدمه

نسبیت عام اینشتین، به عنوان نظریه استاندارد گرانش، در توجیه بسیاری از مسائل فیزیک موفق ظاهر شده است. یکی از دستاوردهای مهم این نظریه پیش‌بینی سیاهچاله‌ها، به عنوان سیستمهای ترمودینامیکی، است که دارای دما و آنتروپی هندسی با مقادیر مشخص هستند. سیاهچاله‌های شوارزشیلد و رایزنر- نوردستروم اولین جواب‌های متقارن کروی غیر چرخان، به ترتیب بدون بار و باردار، این نظریه هستند. اولین سیاهچاله متقارن کروی چرخان بدون بار نیز بعدها توسط کر معرفی شد. سیاهچاله باردار چرخان نیز، از حل معادلات جفت شده گرانش با الکترودینامیک ماکسول، توسط کر و نیومن به دست آمد. مطالعه ویژگیهای هندسی و ترمودینامیکی سیاهچاله‌های چرخان، در نظریه های مختلف گرانشی و در حضور مدلهای مختلف الکترودینامیک، برای مدت زمان طولانی مورد توجه بوده است (مراجع [۳-۱] را ببینید).

سیاهچاله‌های کند- چرخان که در آنها از اثرات غیرخطی صرفنظر می‌شود، علاوه بر این که از نظر ریاضی ساختار ساده‌تری دارند محیط‌های مناسبی را برای آزمونهای نسبیت عام فراهم می‌کنند. مطالعه ترمودینامیک این سیاهچاله‌ها نیز بسیار حائز اهمیت است.

در این مقاله معادلات حاصل از وردش کنش چهار- بعدی گرانش انیشتین ـ Λ در حضور الکترودینامیک توانی، در یک هندسه متقارن کروی ایستا به صورت دقیق حل و دو دسته سیاهچاله کند- چرخان معرفی شده است. با محاسبه کمیتهای ترمودینامیکی نشان داده شده است که قانون اول ترمودینامیک برقرار است و پایداری ترمودینامیکی سیاهچاله‌ها با دو روش مختلف مطالعه و نتایج حاصل با یکدیگر مقایسه شده‌اند.

کنش و معادلات حرکت

کنش چهار- بعدی نظریه اینشتین در حضور ثابت کیهانشناسی و الکترودینامیک توانی را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\mathrm{I}=-\frac{1}{16\pi}\int\sqrt{-\mathrm{g}}\,\mathrm{d}^4\mathrm{x}[\mathcal{R}-2\Lambda+\mathrm{L}(\mathcal{F})], \qquad (۱)$$

در اینجا $\mathcal{R}$ اسکالر ریچی، Λ ثابت کیهانشناسی ، $\mathcal{F}=F^{\mu\nu}F_{\mu\nu}$ ناوردای ماکسول، $F_{\mu\nu}=\partial_\mu \mathrm{A}_\upsilon-\partial_\upsilon \mathrm{A}_\mu$ تانسور فارادی، A_μ چهار- بردار پتانسیل الکترومغناطیسی، $\mathrm{L}(\mathcal{F})=(-\mathcal{F})^p$ لاگرانژین الکترودینامیک توانی و p پارامتر غیر خطی است. از وردش کنش (۱)، نسبت به میدانهای گرانشی و الکترومغناطیسی، معادلات حرکت به دست می‌آیند

$$\left[\partial_\mu\sqrt{-\mathrm{g}}\,(-\mathcal{F})^{p-1}F^{\mu\nu}\right]=0, \qquad (۲)$$

$$\mathcal{R}_{\mu\nu}=\left[\Lambda+\left(\mathrm{p}+\frac{1}{2}\right)(-\mathcal{F})^p\right]\mathrm{g}_{\mu\nu} +2p(-\mathcal{F})^{p-1}F_{\mu\alpha}F_\nu^\alpha. \qquad (۳)$$

برای حل معادلات فوق یک هندسه متقارن دو پارامتری به صورت زیر در نظر می‌گیریم

$$ds^2=-G(r)dt^2+\frac{dr^2}{G(r)}+2a\,H(r)dt\,d\varphi +r^2(d\theta^2+\sin^2\theta\,d\varphi^2), \qquad (۶)$$

که در آن $\mathrm{G}(r)$ و $\mathrm{H}(r)$ به عنوان توابعی از r باید تعیین شوند و a پارامتر چرخش است که در این جا کوچک فرض می‌شود. همچنین فرض می‌کنیم $\mathrm{A}_\mu=(\mathrm{A}_t,0,0,-a\mathrm{A}_t\sin^2\theta)$. در این متریک جواب معادله (۲) بر حسب ثابت‌های q و ℓ به صورت است

$$F_{tr}=q\,r^{\frac{-2}{2p-1}}, \qquad p\neq\frac{1}{2}, \qquad (۷)$$

$$\mathrm{A}_t(r)=\begin{cases}-\mathrm{q}\ln\left(\frac{r}{\ell}\right), & p=\frac{3}{2},\\ \mathrm{q}\frac{2\mathrm{p}-1}{2\mathrm{p}-3}r^{\frac{2\mathrm{p}-3}{2p-1}}, & \frac{1}{2}<p<\frac{3}{2}.\end{cases} \qquad (۸)$$

محدودیتهای اعمال شده برروی پارامتر غیر خطی p ناشی از این واقعیت است که پتانسیل الکتریکی باید در فاصله بینهایت از بار صفر شود. همچنین، مولفه‌های مختلف معادله میدان گرانشی (۳) به صورت زیر در می‌آیند

$$C_{tt}=C_{rr}=G''(r)+\frac{2G\prime(r)}{r}+2\Lambda-(-\mathcal{F})^p=0, \qquad (۹)$$

$$C_{\theta\theta}=C_{\varphi\varphi}=G'(r)+\frac{G(r)-1}{r}+\Lambda r +\left(\mathrm{p}-\frac{1}{2}\right)r(-\mathcal{F})^p=0, \qquad (۱۰)$$

$$C_{t\varphi}=\frac{1}{2}G(r)H''(r)-p(-\mathcal{F})^p\,G(r)$$

$$+\left[\frac{\Lambda-1}{r^2}+\frac{G'(r)}{r}+\left(\mathrm{p}-\frac{1}{2}\right)(-\mathcal{F})^p\right]H(r)=0. \qquad (۱۱)$$

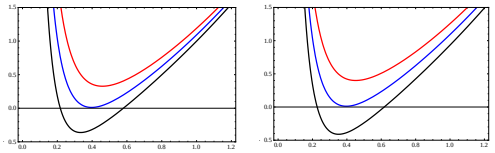
با محاسبه مستقیم می‌توان نشان داد

$$\left(\frac{1}{r}-\frac{d}{dr}\right)C_{\theta\theta}=C_{rr}, \qquad \mathrm{p}\neq\frac{1}{2}. \qquad (۱۲)$$

بنابراین معادلات (۹) و (۱۰) مستقل نیستند و جواب معادله (۱۰) در معادله (۹) نیز صدق می‌کند. از حل معادله (۱۰) داریم

$$\mathrm{G}(r)=\begin{cases}1-\frac{m}{r}-\frac{\Lambda}{3}r^2-\frac{(2q^2)^{3/2}}{r}\ln\left(\frac{r}{\ell}\right),\\ 1-\frac{m}{r}-\frac{\Lambda}{3}r^2-\frac{(2p-1)^2(2q^2)^p}{2(2p-3)}r^{\frac{-2}{2p-1}}.\end{cases} \qquad (۱۳)$$

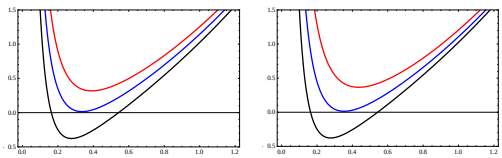
شاخه‌های معادله (۱۳) به ترتیب برای $p=\frac{3}{2}$ و $\frac{1}{2}<p<\frac{3}{2}$ برقرارند و m یک ثابت انتگرالگیری است. توجه شود که به ازای $p=1$ الکترودینامیک توانی به الکترودینامیک ماکسول تبدیل می‌شود و معادله (۱۳) نیز متریک رایزنر- نوردستروم را نتیجه می‌دهد. شکلهای (۱) و (۲)، نشان می‌دهند که جواب‌های به دست آمده سیاهچاله‌های دارای دو افق رویداد، سیاهچاله‌های اکستریم (دارای دمای صفر) و جواب‌های بدون تکینکی را نشان می‌دهند



شکل (۱): نمودار $G(\mathrm{r})$ بر حسب r برای $\Lambda=-3$ و $m=2$

سمت چپ: $p=1.227$ و $\mathrm{q}=0.54,0.56,0.58$ از پایین به بالا.

سمت راست: $\mathrm{q}=0.56$ و $\mathrm{p}=1,2.1,1.227,1.25$ از پایین به بالا.



شکل (۲): نمودار $G(\mathrm{r})$ بر حسب r برای $\Lambda=-3$ و $p=3/2$ و $\ell=10$

سمت چپ: $q=0.54$ و $m=2,1.88,1.77$ از پایین به بالا.

سمت راست: $m=2$ و $\mathrm{q}=0.54,0.554,0.57$ از پایین به بالا.

از ترکیب معادلات (۱۰) و (۱۱) و ساده سازی معادله حاصل داریم

$$H''(r)-\frac{2}{r^2}H(r)=2p(-\mathcal{F})^p. \qquad (۱۴)$$

از حل معادله (۱۴) به دست می‌آید

$$\mathrm{H}(r)=\begin{cases}c_2r^2-\frac{c_1}{3r}-\frac{(2q^2)^{3/2}}{3r}\left[1+3\ln\left(\frac{r}{\ell}\right)\right],\\ C_2r^2-\frac{C_1}{3r}-\frac{(2p-1)^2(2q^2)^p}{2(2p-3)}r^{\frac{-2}{2p-1}}.\end{cases} \qquad (۱۵)$$

شاخه‌های معادله فوق به ترتیب برای $p=\frac{3}{2}$ و $\frac{1}{2}<p<\frac{3}{2}$ صادقند

و C_1 (c_1) و C_2 (c_2) ثابتهای انتگرالگیری هستند. توجه شود که در حالت $p = 1$ داریم

$$\mathrm{H}(r) = C_2 r^2 - \frac{C_1}{3r} - \frac{q^2}{r^2}, \qquad (۱۶)$$

و از مقایسه آن با متریک کر ـ نیومن کند- چرخان می‌توان ثابت‌های انتگرالگیری را به صورت زیر تثبیت کرد [۴]

$$C_1 = 3m. \quad \text{و} \quad C_2 = c_2 = -\Lambda/3 \quad \text{و} \quad c_1 = 3m - (2q^2)^{3/2}$$

با استفاده از جواب‌های به دست آمده می‌توان اسکالرهای ریچی و کرشمن ($\mathcal{K} = \mathcal{R}^{\mu\nu\rho\lambda}\mathcal{R}_{\mu\nu\rho\lambda}$) را به صورت زیر به دست آورد

$$\mathcal{R} = 4\Lambda + 2(\mathrm{p}-1)(2q^2)^p r^{\frac{-4p}{2p-1}}, \qquad \frac{1}{2} < p \leq \frac{3}{2}, \qquad (۱۷)$$

$$\mathcal{K} = \frac{8}{3}\Lambda^2 + \frac{12m^2}{r^6} + \frac{104q^2}{r^6} + \frac{8\sqrt{2}\Lambda q^3}{3r^3} + \frac{8\sqrt{2}(6\mathrm{L}-5)\mathrm{m}q^3}{r^6} + \frac{32(3\mathrm{L}-5)\mathrm{L}q^4}{r^6}, \qquad p = \frac{3}{2}, \qquad (۱۸)$$

$$\mathcal{K} = \frac{8}{3}\Lambda^2 + \frac{12m^2}{r^6} + \frac{8\Lambda}{3}(p-1)(2q^2)^p r^{\frac{-4p}{2p-1}} + 8A_1 r^{-\frac{10p-3}{2p-1}} + 2A_2 r^{-\frac{8p}{2p-1}}, \qquad \frac{1}{2} < p < \frac{3}{2}, \qquad (۱۹)$$

که در آن، به منظور ساده سازی، از تعاریف زیر استفاده شده است

$$L = \ln\left(\frac{r}{\ell}\right), \qquad A_1 = \frac{mp(2p+1)}{2p-3}(2q^2)^p, \qquad (۲۰)$$

$$A_2 = \frac{8p^4-16p^3+22p^2-10p+3}{(2p-3)^2}(2q^2)^{2p}. \qquad (۲۱)$$

در حالت $p = 1$، اسکالرهای ریچی و کرشمن به مقادیر خود در نظریه انیشتین ـ ماکسول ـ آنتی ـ دوسیته تبدیل می‌شوند.

با استفاده از معادلات به دست آمده می‌توان نشان داد

$$\lim_{r\to\infty} \mathcal{R} = 4\Lambda, \qquad \lim_{r\to 0^+} \mathcal{R} = \infty, \qquad (۲۲)$$

$$\lim_{r\to\infty} \mathcal{K} = \frac{8}{3}\Lambda^2, \qquad \lim_{r\to 0^+} \mathcal{K} = \infty. \qquad (۲۳)$$

معادلات فوق نشان می‌دهند که جواب‌های به دست آمده دارای یک تکینگی فیزیکی در مبدا بوده و مجانباً آنتی ـ دوسیته هستند.

تحقیق درستی قانون اول ترمودینامیک

در این بخش نشان می‌دهیم که قانون اول ترمودینامیک در مورد سیاهچاله‌های به دست آمده برقرار است. لذا بار الکتریکی Q، جرم M، دمای T، آنتروپی S و پتانسیل الکتریکی Φ را محاسبه می‌کنیم. این کمیتها به صورت زیر هستند

$$\mathrm{Q} = \frac{1}{4\pi}\int \sqrt{-\mathrm{g}}\, p(-\mathcal{F})^{p-1} F_{tr} d\Omega = p 2^{p-1} q^{2p-1}, \qquad (۲۴)$$

$$M = \frac{m\,\mathrm{b}^{2\alpha\gamma}}{8(1+2\alpha^2)}, \qquad \frac{1}{2} < p \leq \frac{3}{2}, \qquad (۲۵)$$

با اعمال شرط $G(r_+) = 0$ در معادله (۱۳)، پس از محاسبه m و قرار دادن آن در معادله (۱۴) داریم

$$M = \begin{cases} \frac{r_+}{2}\left[1 - \frac{\Lambda}{3}{r_+}^2 - \frac{(2q^2)^{3/2}}{r_+}\ln\left(\frac{r_+}{\ell}\right)\right], \\ \frac{r_+}{2}\left[1 - \frac{\Lambda}{3}{r_+}^2 - \frac{(2p-1)^2(2q^2)^p}{2(2p-3)} r_+^{\frac{-2}{2p-1}}\right], \end{cases} \qquad (۲۶)$$

که در آن شاخه‌ها به ترتیب برای $p = \frac{3}{2}$ و $\frac{1}{2} < p < \frac{3}{2}$ برقرارند و r_+ شعاع خارجی‌ترین افق رویداد و M تابعی از r_+ و q است.

دما در افق رویداد با استفاده از مفهوم گرانش سطحی، برای همه مقادیر مجاز p، با رابطه زیر داده می‌شود

$$T(r_+) = \frac{1}{4\pi r_+}\left[1 - \Lambda {r_+}^2 - \frac{2p-1}{2}(2q^2)^p r_+^{\frac{-2}{2p-1}}\right]. \qquad (۲۷)$$

آنتروپی سیاهچاله با استفاده از قانون آنتروپی ـ مساحت داده می‌شود

$$S = \frac{\mathrm{A}}{4} = \pi r_+^2, \qquad \frac{1}{2} < p \leq \frac{3}{2}. \qquad (۲۸)$$

با انتخاب مبدا در بینهایت، برای پتانسیل در افق سیاهچاله داریم

$$\Phi(r_+) = \begin{cases} -\mathrm{q}\ln\left(\frac{r_+}{\ell}\right), & p = \frac{3}{2}, \\ \mathrm{q}\frac{2\mathrm{p}-1}{2\mathrm{p}-3} r_+^{\frac{2\mathrm{p}-3}{2\mathrm{p}-1}}, & \frac{1}{2} < p < \frac{3}{2}. \end{cases} \qquad (۲۹)$$

اینک با استفاده از معادلات فوق می‌توان نشان داد که قانون اول ترمودینامیک به شکل زیر برقرار است

$$dM(S,Q) = T(\mathrm{r}_+)dS + \Phi(\mathrm{r}_+)dQ. \qquad (۳۰)$$

تحلیل پایداری

در این بخش پایداری و یا گذار فاز ترمودینامیکی سیاهچاله‌ها را با استفاده از روشهای آنسامبل کانونیک و ترمودینامیک هندسی به صورت جداگانه بررسی و نتایج حاصل را با یکدیگر مقایسه می‌کنیم.

۱ـ آنسامبل کانونیک

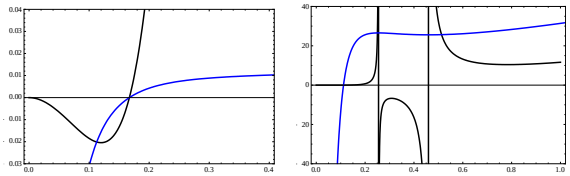
در این روش محدوده‌های پایداری و نقاط گذار فاز ترمودینامیکی سیاهچاله‌ها با توجه به علامت ظرفیت گرمایی تعیین می‌شوند. نقاطی که در آنها ظرفیت گرمایی صفر یا واگرا می‌شود به ترتیب نقاط گذار فاز نوع اول و نوع دوم نامیده می‌شوند. سیاهچاله-هایی که دارای دما و ظرفیت گرمایی مثبت هستند، پایدارند. ظرفیت گرمایی به صورت زیر تعریف می‌شود [۵]

$$C_Q = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_Q = \frac{T}{M_{SS}}, \qquad M_{SS} = \left(\frac{\partial^2 M}{\partial S^2}\right)_Q. \qquad (۳۱)$$

دمای سیاهچاله در معادله (۲۷) داده شده است. می‌توان نشان داد

$$M_{SS} = \frac{-1}{8\pi^2 {r_+}^3}\left[1 + \Lambda {r_+}^2 - \frac{2p+1}{2}(2q^2)^p r_+^{\frac{-2}{2p-1}}\right]. \qquad (۳۲)$$

نقاط گذار فازهای نوع اول و نوع دوم به ترتیب ریشه‌های معادلات $T=0$ و $M_{SS}=0$ هستند. نمودارهای شکل (۳) نشان می‌دهند که در حالت $p=3/2$ یک گذار فاز نوع اول در $r_+=r_{ext}$ وجود دارد. سیاهچاله‌های با شعاع افق رویداد بیشتر از این مقدار پایدارند. در حالت $p\neq 3/2$ یک گذار فاز نوع اول در $r_+=r_{ext}$ و دو گذار فاز نوع دوم در $r_+=r_1$ و $r_+=r_2$ انجام می‌شود. سیاهچاله‌های با شعاع افق رویداد در بازه $r_{ext}<r_+<r_1<r_2$ پایدارند.



شکل (۳): نمودار C_Q (سیاه) و T (آبی) بر حسب r_+ برای $\Lambda=-3$
سمت چپ: $q=0.4$ و $p=3/2$، C_Q و 0.05 T.
سمت راست: $q=2.5$ و $p=1.25$، C_Q و 100 T.

۲ـ ترمودینامیک هندسی

در این روش نقاط گذار فاز ترمودینامیکی همان نقاط واگرایی اسکالر ترمودینامیکی هستند. برای محاسبه اسکالر ترمودینامیکی باید از یک متریک ترمودینامیکی شروع کنیم. متریک کویدو (نوع I و نوع II)، متریک وینهلد، متریک راپینیر و متریک هندی و همکاران ($HPEM$) مشهورترین متریک‌های ترمودینامیکی هستند. متریک‌های نوع I و نوع II کویدو $(QII\,,QI)$ به ترتیب عبارتند از [۵]

$$ds^2=\left(SM_S+QM_Q\right)\left(-M_{SS}ds^2+M_{QQ}dQ^2\right), \quad (۳۳)$$

$$ds^2=SM_S\left(-M_{SS}ds^2+M_{QQ}dQ^2\right). \quad (۳۴)$$

متریک‌های وینهلد(W) و راپینیر (R) به ترتیب زیرند [۵]

$$ds^2=Mg^{(W)}_{ab}dX^adX^b, \qquad g^{(W)}_{ab}=M_{ab}, \quad (۳۵)$$

$$ds^2=-MT^{-1}g^{(W)}_{ab}dX^adX^b. \quad (۳۶)$$

متریک پیشنهادی هندی و همکاران نیز به صورت زیر است

$$ds^2=S\frac{M_S}{M_{QQ}^3}\left(-M_{SS}dS^2+M_{QQ}dQ^2\right). \quad (۳۷)$$

مخرج کسرهای اسکالر ریچی متریک‌های فوق، که صفر شدن آنها باعث واگرایی اسکالر ریچی می‌شود، به صورت زیر است [۶]

$$D\left(\mathcal{R}^{(QI)}\right)=2(M_{SS})^2(M_{QQ})^2(SM_S+QM_Q)^3, \quad (۳۸)$$

$$D\left(\mathcal{R}^{(QII)}\right)=2S^3(M_{SS})^2(M_{QQ})^2(M_S)^3, \quad (۳۹)$$

$$D\left(\mathcal{R}^{(R)}\right)=TM^2[(M_{SS}M_{QQ}-(M_{SQ})^2]^2, \quad (۴۰)$$

$$D\left(\mathcal{R}^{(W)}\right)=M^2[(M_{SS}M_{QQ}-(M_{SQ})^2]^2, \quad (۴۱)$$

$$D\left(\mathcal{R}^{(HPEM)}\right)=2S^3(M_{SS})^2(M_S)^3. \quad (۴۲)$$

معادله (۳۸) نشان می‌دهد که نقاط گذار فاز مربوط به متریک کویدو نوع اول با نتایج روش آنسامبل کانونیک متفاوت است. با توجه به معادله (۳۹) نتایج حاصل از متریک کویدو نوع دوم با روش آنسامبل کانونیک سازگار است به شرط آنکه M_{QQ} صفر نشود. با توجه به معادلات (۴۰) و (۴۱) نتایج بکارگیری متریک‌های راپینیر و وینهلد نیز قابل قبول نیستند؛ اما نتایج حاصل از متریک پیشنهادی هندی و همکاران کاملاً بر نتایج روش آنسامبل کانونیک منطبق است.

نتیجه گیری

در این مقاله، معادلات حاصل از وردش کنش نظریه اینشتین–Λ در حضور الکترودینامیک توانی در یک هندسه متقارن دو پارامتری به صورت دقیق حل شدند. دو دسته جواب سیاهچاله‌ای کند– چرخان، با پارامتر چرخش کوچک، معرفی و کمیت های پایستار و ترمودینامیکی مربوط به آنها مانند بار الکتریکی، جرم، دما، آنتروپی و پتانسیل الکتریکی محاسبه و نشان داده شد که این کمیتها در قانون اول ترمودینامیک صدق می‌کنند. با استفاده از روش آنسامبل کانونیک و با محاسبه ظرفیت گرمایی نشان داده شد به ازای $p=3/2$ فقط یک گذار فاز نوع اول در $r_+=r_{ext}$ رخ می‌دهد و سیاهچاله‌هایی که شعاع افق رویداد آنها از این مقدار بیشتر است پایدارند. در حالت $p\neq 3/2$ یک گذار فاز نوع اول در $r_+=r_{ext}$ و دو گذار فاز نوع دوم در $r_+=r_1$ و $r_+=r_2$ $(r_1<r_2)$ انجام می‌شود. سیاهچاله‌های فیزیکی با شعاع افق رویداد در بازه $r_{ext}<r_+<r_1$ پایدارند. در روش هندسی نیز نقاط گذار فاز با استفاده از پنج متریک ترمودینامیکی بررسی شدند و تحلیل نتایج حاصل نشان داد که نتایج حاصل از متریک‌های کویدو نوع دوم، به شرط آنکه M_{QQ} صفر نشود، و نیز نتایج حاصل از متریک $HPEM$، به طور کامل و دقیق، با نتایج روش آنسامبل کانونیک سازگارند.

مرجع‌ها

[1] V.P. Forolov and A. Zelnikov, Introduction to black hole physics, Oxford University Press, 2011.
[2] M. Gammon and Robert B. Mann, Phys. Rev. D, 110 (2024) 044004.
[3] S.H. Hendi and R. Katebi, Eur. Phys. J. C, 72 (2012) 2235.
[4] V.P. Frolov and A. Zelnikov, "Introduction to black hole physics", Oxford university press, 2011.
[5] S.H. Hendi, B. Eslam Panah, S. Panahiyan, and M. Momennia, Eur. phys. J. C, 75 (2015) 507.
[6] M. Dehghani and M. Badpa, Prog. Theor. Exp. Phys. 2020 (2020) 033E03.

فراوانی سیاه‌چاله‌های اولیه با استفاده از برش کیهانی اقلیدس

صافی، سارا؛ فرهنگ، مرضیه[۱و۲]

[۱،۲] دانشگاه شهید بهشتی،تهران، اوین، میدان شهید شهریاری، دانشکده فیزیک ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱

چکیده

سیاه‌چاله‌های اولیه یکی از کاندیداهای ماده تاریک هستند که از راه‌های مختلفی می‌توانند بررسی شوند. در این پژوهش این اجرام را از طریق اثر آنها بر ساختار بزرگ‌مقیاس کیهان و با استفاده از داده‌های شبیه‌سازی‌شده مبتنی بر مشخصات رصدی کاوشگر اقلیدس و کاوش برش کیهانی، توانایی این کاوشگر را در محدود کردن کسر ماده تاریک موجود در قالب سیاه‌چاله‌های اولیه f_{PBH} مورد مطالعه قرار می دهیم. حضور سیاه‌چاله‌های اولیه از طریق نوفه پواسونی ناشی از توزیع گسسته آن‌ها، طیف توان ماده را تغییر می‌دهد و در نتیجه بر سیگنال همگرایی گرانشی اثر می‌گذارد. با محاسبه ماتریس فیشر، محدودیت‌های مورد انتظار بر این پارامتر برای جرم‌های مختلف سیاه‌چاله‌های اولیه به دست آمده است. نتایج نشان می‌دهد که در پارامترهای کیهان‌شناسی از طریق داده های دیگر مقید شده باشند، برش کیهانی اقلیدس قادر است در جرم‌های بالا محدودیت‌هایی سخت‌گیرانه‌تر از بسیاری از قیود موجود ارائه دهد. همچنین با آزاد گذاشتن پارامترهای کیهان‌شناختی و انجام حاشیه‌ای‌سازی روی آنها، محدودیت‌ها ضعیف‌تر می‌شوند اما همچنان در بخشی از بازه جرمی مورد بررسی رقابتی باقی می‌مانند. این نتایج نشان می‌دهند که برش کیهانی اقلیدس می‌تواند ابزاری مؤثر برای آزمودن سناریوهای ماده تاریک مبتنی بر سیاه‌چاله‌های اولیه باشد.

واژه‌های کلیدی: *سیاه‌چاله‌های اولیه، ماده تاریک، برش کیهانی، همگرایی گرانشی ضعیف، کاوشگر اقلیدس، ساختار بزرگ‌مقیاس، طیف توان ماده، تحلیل فیشر*

Abundance of Primordial Black Holes from Euclid Cosmic Shear

Safi, Sarah; Farhang, Marzieh[۱،۲]

[۱،۲] *Department of Physics, Shahid Beheshti University, Evin, Tehran, ۱۹۸۳۹۶۳۱۱۳, Iran*

Abstract

Abstract

Primordial black holes (PBHs) are among the candidates for dark matter and can be studied through various methods. In this research, we investigate these objects via their imprints on the large-scale structure of the universe. Using simulated data based on the observational characteristics of the Euclid mission and the cosmic shear probe, we examine Euclid's capability to constrain the dark matter fraction in the form of primordial black holes, denoted as f_{PBH}. The presence of PBHs modifies the matter power spectrum through Poisson noise arising from their discrete distribution, thereby affecting the gravitational lensing signal. By computing the Fisher matrix, we obtain expected constraints on this parameter for different PBH masses. The results indicate that if cosmological parameters are constrained by other observations, Euclid cosmic shear is capable of providing tighter constraints at high masses than many existing limits. Furthermore, when cosmological parameters are allowed to vary and marginalized over, the constraints become weaker but remain competitive over part of the mass range considered. These findings indicate that Euclid cosmic shear can serve as an effective tool for testing dark matter scenarios based on primordial black holes.

Keywords*: Primordial Black Holes, Dark Matter, Cosmic Shear, Weak Gravitational Lensing, Euclid Mission, Large-Scale Structure, Matter Power Spectrum, Fisher Forecast*

مقدمه

سیاه‌چاله‌های اولیه[۱] (PBH) دسته‌ای از سیاه‌چاله‌ها هستند که در اثر رمبش نواحی پرچگال در کیهان اولیه تشکیل شده‌اند. برخلاف سیاه‌چاله‌های ستاره‌وار که از فرگشت ستارگان به وجود می‌آیند، این اجرام می‌توانند در گستره وسیعی از جرم‌ها شکل بگیرند و از این رو به عنوان یکی از نامزدهای ماده تاریک مطرح هستند.

در دهه‌های اخیر، مطالعات متعددی برای مقیدسازی فراوانی سیاه‌چاله‌های اولیه انجام شده است. این محدودیت‌ها از روش‌های گوناگونی شامل تبخیر هاوکینگ[۲]، ریزهمگرایی گرانشی[۳]، امواج گرانشی[۴]، اثرات دینامیکی[۵] و فرایند برافزایش[۶] به دست آمده‌اند[۱]. در کنار این روش‌ها، اثر سیاه‌چاله‌های اولیه بر میدان چگالی ماده و شکل‌گیری ساختارهای کیهانی نیز مورد توجه قرار گرفته است. افشردی و همکاران [۳] نشان دادند که توزیع گسسته PBHها از طریق نوفه پواسونی[۷]، مؤلفه‌ای اضافی به طیف توان ماده در مقیاس‌های کوچک اضافه می‌کند. بر پایه این ایده، مطالعات بعدی با استفاده از مشاهدات جنگل لایمن-آلفا و ساختار بزرگ‌مقیاس محدودیت‌هایی بر فراوانی PBH ها به دست آورده‌اند [۷]. همچنین قیود مستقلی از داده‌های تابش زمینه کیهانی نیز گزارش شده است [۶]. با این حال، توانایی کاوش برش کیهانی نسل جدید، به ویژه کاوشگر اقلیدس، برای مقیدسازی f_{PBH} هنوز به طور کامل بررسی نشده است. کاوشگر اقلیدس[۲] با بهره‌گیری از دو کاوش اصلی، یعنی خوشگی کهکشان‌ها و برش کیهانی، امکان مطالعه دقیق توزیع ماده در کیهان را فراهم می‌کند. از آنجا که PBH ها از طریق مؤلفه نوفه پواسونی طیف توان ماده را تغییر می‌دهند، انتظار می‌رود این مشاهدات بتوانند قیدهای مستقلی بر فراوانی این اجرام ارائه کنند.

در این پژوهش، با استفاده از داده‌های شبیه‌سازی‌شده مبتنی بر مشخصات رصدی اقلیدس، توانایی مورد انتظار این کاوشگر در مقیدسازی کسر سیاه‌چاله‌های اولیه f_{PBH}، بررسی می‌شود. برای این منظور، قیدهای قابل دستیابی از تحلیل فیشر کاوش برش کیهانی محاسبه شده و با در نظر گرفتن سناریوهای مختلف پارامترهای کیهان‌شناسی مورد ارزیابی قرار می‌گیرند.

مبانی نظری

اگر بخشی از ماده تاریک از سیاهچاله‌های اولیه با جرم ثابت تشکیل شده باشد، توزیع گسسته این اجرام باعث ایجاد نوسانات اضافی در میدان چگالی ماده می‌شود وطیف توان ماده تحت تأثیر حضور PBHها قرار می‌گیرد.

در این حالت طیف توان ماده را می‌توان به صورت

$$P_m(k) = P_{LCDM}(k) + P_{PBH}(k) \qquad (۱)$$

در حضور PBH، چگالی کل ماده از دو بخش تشکیل می‌شود: ماده تاریک سرد و PBHها.

کسر جرمی سیاهچاله های اولیه به صورت زیر تعریف می شود

$$f_{PBH} = \frac{\Omega_{PBH}}{\Omega_{DM}} \qquad (۲)$$

نوفه پواسونی و اثر آن بر طیف توان

یکی از نکات کلیدی در تحلیل PBHها، اثر نوفه پواسونی است. PBHها به عنوان ذرات گسسته در نظر گرفته می‌شوند که منجر به افزایش توان در مقیاس‌های کوچک می‌شوند. این اثر به صورت جمله‌ای ثابت به طیف توان ماده اضافه می‌شود:

$$P_{PBH} \approx f^{۲} P_{Poisson}$$

۱ Primordial Black Holes
۲ Hawking Evaporation
۳ Microlensing
۴ Gravitational Waves
۵ Dynamical Effects
۶ Accretion
۷ Poisson Noise

به طوری که

$$P_{Poisson} = \frac{1}{n_{PBH}} \qquad (۳)$$

[۳] که در آن n_{PBH} چگالی عددی PBHها است و به جرم و کسر آن‌ها وابسته است:

$$n_{PBH} = \frac{(f_{PBH}\rho_{DM})}{M_{PBH}} \qquad (٤)$$

با افزایش جرم PBH، چگالی عددی کاهش می‌یابد و نوفه پواسونی افزایش می‌یابد. این اثر در جرم‌های بزرگ ($M > 10^4 M_\odot$) قابل توجه است و می‌تواند با استفاده از داده‌های همگرایی گرانشی اقلیدس ردیابی شود.

برش کیهانی

در کاوش برش کیهانی ، کهکشان‌ها بر اساس انتقال به سرخ در چندین بازه سرخ گرایی دسته‌بندی می‌شوند. مطالعه آماری اعوجاج‌های نور این کهکشان‌ها که هنگام عبور از پتانسیل گرانشی ساختارهای میان‌راهی ایجاد می‌شود، اطلاعاتی درباره توزیع سه‌بعدی ماده فراهم می‌کند.

در تحلیل برش کیهانی، کمیت قابل مشاهده طیف توان همگرایی است که از مجموع سیگنال کیهان‌شناختی و نوفه مشاهده‌ای تشکیل می‌شود:

$$C_{ij}(\ell) = P_{ij}(\ell) + N_{ij} \qquad (٥)$$

که در آن $P_{ij}(\ell)$ طیف توان همگرایی بین بازه های انتقال به سرخ (i) و (j) و به صورت زیر تعریف می شود [٤].

$$P_{ij}(\ell) \simeq \frac{9H_0^4}{4c^3}\int dz \frac{W_i(z)W_j(z)(\Omega_m(1+z))^2}{H(z)} \times P_m\left[\frac{\ell}{r(z)}, z\right] \qquad (٦)$$

به طوری که

$$W_i(z) = \int_z^{z_{max}} \mathrm{d}z'\, n_i(z')\left[1 - \frac{r(z)}{r(z')}\right]$$

که در آن $n_i(z)$ توزیع بهنجار شده کهکشان ها در بازه i ام است و از تابع توزیع

$$n(z) \propto \left(\frac{z}{z_0}\right)^2 exp\left[-\left(\frac{z}{z_0}\right)^{3/2}\right]$$

به دست می آید[٤] .

از آنجا که $P_{ij}(\ell)$ مستقیماً به طیف توان ماده وابسته است، هر تغییری در توزیع ماده، از جمله اثر سیاهچاله‌های اولیه در سیگنال همگرایی منعکس می‌شود. بنابراین برش کیهانی اقلیدس ابزاری مناسب برای محدود کردن فراوانی سیاهچاله‌های اولیه فراهم می‌کند.

N_{ij} نیز نوفه ناشی از پراکندگی ذاتی شکل کهکشان‌ها است که به چگالی کهکشان‌ها $(\bar{n}_i)$ وابسته است و این نوفه با نوفه پواسونی ناشی ازPBH ها (معادله ۳) که در طیف توان ماده $P_m(k)$ ظاهر می‌شود، تفاوت ماهیتی دارد. N_{ij} یک اثر مشاهده‌ای و وابسته به ویژگی‌های رصدی (چگالی سطحی کهکشان‌ها) است که به عنوان عامل محدودکننده دقت اندازه‌گیری ظاهر می‌شود و اطلاعات فیزیکی جدیدی در بر ندارد. در مقابل، نوفه پواسونی یک اثر فیزیکی است که از توزیع گسسته سیاه‌چاله‌های اولیه ناشی می‌شود به عنوان بخشی از سیگنال کیهانی محسوب می‌شود که حاوی اطلاعاتی درباره ماهیت ماده تاریک است.

در این پژوهش، از آنجا که تحلیل صرفاً بر روی کاوش برش کیهانی متمرکز است، اثر اغتشاشات فضای سرخ‌گرایی (RSD) لحاظ نشده است. زیرا همگرایی گرانشی یک اثر هندسی وابسته به شکل کهکشان‌هاست و به حرکت خاص آن‌ها حساس نیست. در واقع RSD موقعیت ظاهری کهکشان را در امتداد خط دید جابه‌جا می‌کند، در حالی که برش کیهانی اعوجاج در شکل (بیضوی) ناشی از خمیدگی نور را اندازه‌گیری می‌کند. ازآنجا که این دو کمیت مستقل هستند، تأثیر RSD بر طیف توان برش کیهانی ناچیز بوده و در مشاهدات نورسنجی با خطای اندازه گیری در فضای سرخ گرایی(σ_z) بسیار بزرگ‌تر، قابل‌چشم‌پوشی است.

همچنین در این پژوهش، از داده‌های شبیه‌سازی‌شده مبتنی بر مشخصات رصدی کاوشگر اقلیدس استفاده شد. اگرچه اقلیدس در

سال ۲۰۲۳ پرتاب شده است، نتایج ارائه‌شده بر اساس شبیه‌سازی داده‌ها و مشخصات طراحی این کاوشگر به دست آمده‌اند. این کاوشگر با کسر آسمانی معادل $f_{sky} = ۰٫۳۶۶$ و با استفاده از ۱۰ بازه سرخ گرایی در بازه $۰٫۰۰۱ < z < ۲٫۵$ و چگالی تعداد کهکشان $n_{gal} = ۳۰\ arcmin^{-۲}$ به رصد کهکشان‌ها می‌پردازد.

شبیه سازی داده ها و روش تحلیل

در تحلیل خود از طیف توان ماده ساخته شده با این مقادیر مرجع به عنوان داده ساختار بزرگ مقیاس استفاده می کنیم و پارامترهای استاندارد کیهانی را مطابق با نتایج پلانک ۲۰۱۸ در نظر می‌گیریم[۵] .

$$\Omega_c h^۲, \Omega_b h^۲, H., n_s, \ln(۱۰^{۱۰} A_s) =$$
$$۰/۱۱۹۸, ۰/۰۲۲۳۳, ۰/۶۸۵, ۶۷/۳۷, ۰/۹۶۵۲, ۳/۰۴۳$$

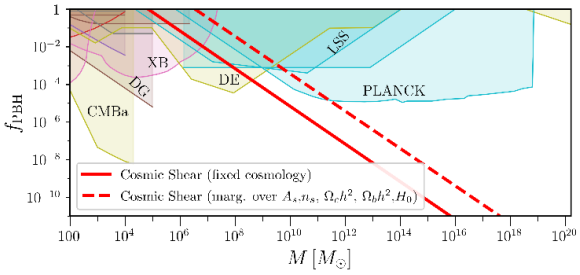
برای استخراج قیود پارامترها از روش ماتریس فیشر استفاده شده است. پارامتر اصلی مورد بررسی $f_{\rm PBH}$ است. جرم سیاهچاله‌های اولیه در تمام تحلیل‌ها ثابت فرض شده و تنها قید را روی فراوانی آن‌ها تخمین زده می شود.

برای بررسی تأثیر هم‌بستگی میان $f_{\rm PBH}$ و پارامترهای کیهان‌شناسی، تحلیل را در دو حالت انجام می‌دهیم. در حالت نخست، تنها $f_{\rm PBH}$ به عنوان پارامتر آزاد در نظر گرفته شده و سایر پارامترهای کیهان‌شناسی روی مقادیر مرجع ثابت نگه داشته می‌شوند. این حالت بیشترین توان مقیدسازی توسط کاوشگر را نشان می‌دهد.

در حالت دوم، علاوه بر $f_{\rm PBH}$ پارامترهای استاندارد کیهان شناسی $(\Omega_c h^۲, \Omega_b h^۲, H., n_s, A_s)$ نیز آزاد در نظر گرفته می‌شوند. این رویکرد واقع‌بینانه‌تر بوده و اثر هم‌بستگی میان پارامترهای کیهان‌شناسی و فراوانی سیاهچاله‌های اولیه را در بر می‌گیرد.

نتایج

همان‌طور که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، در حالتی که سایر پارامترهای کیهان‌شناختی ثابت نگه داشته شوند، حد بالای $f_{\rm PBH}$(منحنی قرمز) در جرم‌های بزرگ‌تر از $۱۰^۶ M_\odot$به طور قابل توجهی پایین‌تر از قیدهای موجود قرار می‌گیرد. این نتیجه نشان می‌دهد که تحلیل حاضر در این بازه جرمی قادر است قیود سخت‌گیرانه‌تری بر فراوانی سیاه‌چاله‌های اولیه اعمال کند. با آزاد گذاشتن پارامترهای کیهان‌شناختی و انجام حاشیه‌ای‌سازی[۸]، حد بالای $f_{\rm PBH}$ به **سمت مقادیر بزرگ‌تر** جابه‌جا می‌شود. این رفتار مورد انتظار است، **زیرا** هم‌بستگی میان $f_{\rm PBH}$ و پارامترهای کیهان‌شناختی موجب افزایش عدم قطعیت در برآورد آن می‌شود. با این وجود، حتی در این حالت نیز قیدهای به‌دست‌آمده در بخشی از بازه جرمی مورد بررسی، از برخی قیود پیشین [۱] سخت‌گیرانه‌تر هستند.



شکل ۱. مقایسه حدود بالای ۳σ به‌دست‌آمده بر $f_{\rm PBH}$ بر حسب جرم سیاه‌چاله‌های اولیه. منحنی قرمز پیوسته حد بالای حاصل از این پژوهش با استفاده از کاوش برش کیهانی کاوشگر اقلیدس را در حالت ثابت بودن پارامترهای کیهان‌شناختی نشان می‌دهد، در حالی که منحنی قرمز خط‌چین مربوط به حالت حاشیه‌ای‌سازی روی پارامترهای کیهان‌شناختی است. سایر منحنی‌ها بیانگر قیود پیشین حاصل از روش‌های مختلف رصدی هستند. نتایج نشان می‌دهند که در جرم‌های بالا، قیدهای حاصل از برش کیهانی اقلیدس از بسیاری از قیود موجود سخت‌گیرانه‌تر بوده و بخش بزرگ‌تری از فضای پارامتر $f_{\rm PBH}$را طرد می‌کنند.

[۸] Marginalization

جمع‌بندی

در این پژوهش، توانایی مورد انتظار کاوشگر اقلیدس برای مقیدسازی فراوانی سیاه‌چاله‌های اولیه با استفاده از کاوش برش کیهانی بررسی شد. برای این منظور، اثر سیاه‌چاله‌های اولیه بر طیف توان ماده از طریق مؤلفه نوفه پواسونی در نظر گرفته شد و قیدهای قابل دستیابی بر f_{PBH} با استفاده از تحلیل فیشر محاسبه گردید. نتایج نشان دادند که در حالت ثابت بودن پارامترهای کیهان‌شناختی، داده‌های برش کیهانی اقلیدس قادر خواهند بود در جرم‌های بالا قیدهایی سخت‌گیرانه‌تر از بسیاری از قیود موجود ارائه دهند. همچنین با در نظر گرفتن حاشیه‌ای‌سازی روی پارامترهای کیهان‌شناختی، اگرچه قدرت محدودکنندگی کاهش می‌یابد، اما قیدهای حاصل همچنان در بخشی از بازه جرمی مورد بررسی رقابتی باقی می‌مانند. این نتایج نشان می‌دهند که مشاهدات برش کیهانی اقلیدس می‌توانند مکمل مهمی برای سایر روش‌های جستجوی سیاه‌چاله‌های اولیه بوده و نقش مؤثری در بررسی سناریوهای ماده تاریک مبتنی بر این اجرام ایفا کنند.

مرجع‌ها

[۱] Carr, B., et al. ۲۰۲۶, Riv. Nuovo Cim., ٤۹, ۲۲٥
[۲] Laureijs, R., et al. ۲۰۱۱, arXiv:۱۱۱۰,۳۱۹۳
[۳] Afshordi, N., McDonald, P., & Spergel, D. N. ۲۰۰۳, ApJ, ٥۹٤, L۷۱
[٤] Blanchard, A., et al. ۲۰۲۰, A&A, ٦٤۲, A۱۹۱
[٥] Planck Collaboration (Aghanim, N., et al.) ۲۰۲۰, A&A, ٦٤۱, A٦
[٦] Ali-Haïmoud, Y., & Kamionkowski, M. ۲۰۱۷, Phys. Rev. D, ۹٥, ۰٤۳٥۳٤
[۷] Murgia, R., Scelfo, G., Viel, M., & Raccanelli, A. , Phys. Rev.Lett, ۱۲۳, ۰۷۱۱۰۲

کیهان‌شناسی با مساحی‌هایِ کهکشانیِ انتقال‌به‌سرخ بالا

انصاری فرد، محمد[1]؛ نیکبخت، بهار[2]؛ نامجو، محمدحسین[2]

[1]دانشکده فیزیک دانشگاه خواجه نصیر الدین طوسی ، خیابان شریعتی، خیابان مجتبایی، خیابان کاویان، تهران
[2]پژوهشکده فیزیک، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی، باغ لارک، بزرگراه ارتش، تهران

چکیده

در این مقاله، ارزش اطلاعاتی مساحی‌های کهکشانی در انتقال‌به‌سرخ‌های بالا با استفاده از آنالیز فیشر و اطلاعات متقابل بررسی می‌شود. فرض می‌کنیم طیف توان اولیه دارای یک عارضه لگاریتمی-نرمال با دامنه α است و هدف، ارزیابی توانایی رصدهای آینده در مقید کردن این پارامتر است. با محاسبه ماتریس فیشر برای طیف توان کهکشان‌ها و در نظر گرفتن احتمال پیشینی یکنواخت برای α، اطلاعات متقابل بین پارامتر و داده‌ها برای مساحی‌های پیشنهادی MegMapper و LSST به‌دست می‌آید. نتایج نشان می‌دهد که عارضه‌های موجود در مقیاس‌های بزرگ در انتقال‌به‌سرخ‌های پایین‌تر و عارضه‌های موجود در مقیاس‌های کوچک در انتقال‌به‌سرخ‌های بالاتر ($z>3$) بهتر قابل تشخیص هستند. بنابراین، مساحی در انتقال‌به‌سرخ بالا عمدتاً برای کشف عارضه‌های مقیاس‌کوچک در طیف توان اولیه ارزشمند است.

واژه های کلیدی: *مساحی‌های کهکشانی، کهکشان‌های انتقال‌به‌سرخ بالا، اطلاعات متقابل، آنالیز فیشر، طیف توان کهکشانی*

Cosmology with high redshift galaxy surveys

Ansarifard, Mohammad[1]; Nikbakhr, Bahar[2], Namjoo, Mohammad Hossein[2]

[1] Department of Physics, K. N. Toosi University of Technology, Tehran
[2]Astronomy Department, Institute for Research in Fundamental Science, Tehran

Abstract

In this paper, we investigate the information content of high-redshift galaxy surveys using Fisher analysis and mutual information. Assuming a log-normal feature in the primordial power spectrum with amplitude α, we evaluate the ability of future surveys to constrain this parameter. Computing the Fisher matrix for the galaxy power spectrum and assuming a uniform prior for α, we obtain the mutual information between the parameter and the data for the proposed MegaMapper and LSST surveys. Results show that large-scale features are best constrained at low redshifts, while small-scale features become detectable only at high redshifts (z>3). Hence, high-z surveys are particularly valuable for probing small-scale features in the primordial power spectrum.
***Keywords**: galaxy surveys, high-redshift galaxies, mutual information, fisher analysis, galaxy power spectrum*

PACS No. 98

مقدمه

کهکشان‌ها یکی از مهم‌ترین رصدهای کیهان‌شناسی به شمار می‌روند. چگالی جرمی کهکشان‌ها و تابع دو نقطه‌ای مربوط به آن، ارتباط نزدیکی با تابع دو نقطه‌ای ماده (تاریک و باریونی) دارد. از طرفی، تابع دو نقطه‌ای ماده (یا همان طیف توان آن) از طریق تابع رشد و تابع انتقال به طیف توان اولیه مرتبط می‌شود. به این ترتیب، اندازه‌گیری آن می‌تواند اطلاعات مفیدی درباره جهان اولیه در اختیار ما بگذارد.

رصدهایی مانند LSST و EUCLID برای مشاهده کهکشان‌ها تا انتقال‌به‌سرخ ۳ طراحی شده‌اند. در کنار اینها، پیشنهادهایی برای آینده مطرح است که کهکشان‌ها را در انتقال‌به‌سرخ‌های بالاتری رصد کنند. در اینجا می‌توان پرسید که

رفتن به انتقال‌به‌سرخ‌های بالاتر چه مقدار اطلاعات جدید به همراه دارد و آیا این کار ارزش سرمایه‌گذاری و هزینه را دارد؟

برای پاسخ به این پرسش، از روش آنالیز فیشر برای محاسبه توانایی رصدهای آینده استفاده می‌کنیم و ارزیابی می‌کنیم که این رصدها تا چه اندازه می‌توانند مدل کیهان‌شناسی را مقید کنند. برای سادگی، یک عارضه[1] به شکل لگاریتمی-نرمال روی طیف توان اولیه در نظر می‌گیریم، و توان یک رصد را در مقید کردن دامنه این عارضه محاسبه می‌کنیم. معادله طیف توان و عارضه مربوط به آن در زیر آمده است.

$$P_R(k) = A_s\left(\frac{k}{k_p}\right)^{n_s-1}\left[1+\alpha\exp\left(-\frac{\ln^2(k/k_*)}{2\Delta^2}\right)\right] \quad (1)$$

که در این رابطه A_s و n_s دامنه و اندیس طیفی طیف توان اولیه و α ، k_* و Δ پارامترهای مربوط به عارضه هستند. همچنین $k_p = 0.5h/Mpc$ مقیاس مشخصه است.

عارضه‌ای که در اینجا در نظر گرفته‌ایم طیف توان را به صورت موضعی تغییر می‌دهد. مدل‌های تورمی مختلفی می‌توانند عارضه‌های موضعی ایجاد کنند. به عنوان نمونه قرار دادن یک پله در پتانسیل تورمی، عارضه‌های موضعی در طیف توان ایجاد می‌کند[2]. البته معادله(۱) یک نمی‌تواند تمام جزئیات چنین عارضه‌ای را باز تولید کند، اما شکل کلی آن و موضعی بودن را در خود دارد.

تحلیل فیشر

تحلیل فیشر روشی است که با آن می‌توانیم توانایی رصدهای آینده را برای مقید کردن پارامترهای مدل پیش‌بینی کنیم. در این مقاله کمیت رصدی مورد نظر طیف توان کهکشان‌ها می‌باشد که ارتباط آن با طیف توان ماده به صورت زیر برقرار است[2].

$$P_g(k,\mu,z) = (1+\beta\mu^2)^2 b^2 e^{-(c\sigma_z k\mu/H)^2} P_m(k,z) \quad (2)$$

در رابطه بالا z انتقال به سرخ، μ کسینوس زاویه بین خط دید و بردار موج و $H(z)$ پارامتر هابل است. در این عبارت دو اثر متفاوت وجود دارد. اثر اول سوگیری چگالی کهکشان‌ها به چگالی ماده است که در کمیت سوئیدگی $b(z)$ آمده است. اثر دوم اعوجاجات فضای انتقال به سرخ است که قسمت خطی آن در $\beta = f(z)/b(z)$ و قسمت غیرخطی آن در $\sigma_z = \sigma_{0z}(1+z)$ (پراکندگی سرعت کهکشان‌ها) وجود دارد. همچنین $f = d\ln D/d\ln(1+z)$ نرخ رشد و $D(z)$ تابع رشد است. ارتباط طیف توان ماده و طیف توان اولیه، معادله(۱)، در معادله زیر آمده است.

$$P_m(k,z) = \frac{8\pi^2}{25}k\frac{T^2(k)D^2(z)}{\Omega_m^2 H_0^4}P_R(k) \quad (3)$$

که در این رابطه $T(k)$ تابع انتقال است. تابع رشد و تابع انتقال به مدل کیهان‌شناسی و پارامترهای آن بستگی دارند.

در نهایت با مشخص کردن مدل کیهان‌شناسی و طیف توان اولیه با استفاده از معادله(۳) طیف توان ماده و با استفاده از معادله(۲) طیف توان کهکشان‌ها به صورت نظری محاسبه می‌شود. در تحلیل فیشر اطلاعات مربوط به رصد آینده در ماتریس فیشر قرار دارد. در این مقاله برای سادگی تنها پارامتر α را متغیر می‌گیریم و بقیه پارامترهای مدل کیهان‌شناسی و مدل عارضه را ثابت در نظر می‌گیریم. در این صورت ماتریس فیشر تنها یک عنصر دارد و یک عدد می‌شود. این عدد را می‌توان با کمک معادله زیر محاسبه نمود[2].

$$F(\alpha,z) = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1}d\mu\int_{k_{\min}}^{k_{\max}}\frac{k^2dk}{(2\pi)^2}\left(\frac{\partial\ln P_g}{\partial\alpha}\right)^2 V_{eff}(k,\mu,z) \quad (4)$$

که در این رابطه $V_{\rm eff}$ به صورت زیر تعریف شده است.

$$V_{eff}(k,\mu,z) = \left[\frac{n_g(z)P_g(k,\mu,z)}{n_g(z)P_g(k,\mu,z)+1}\right]V(z) \quad (5)$$

در این عبارت $n_g(z)$ چگالی تعداد کهکشان‌ها و $V(z)$ حجم قابل مشاهده در بازه مشخصی از انتقال‌به‌سرخ است.

$$V(z) = \frac{4\pi}{3}f_{sky}\left[\chi^3(z_{\max})-\chi^3(z_{\min})\right] \quad (6)$$

در این رابطه f_{sky} کسری از آسمان است که در رصد مشاهده می‌شود و $\chi(z)$ طول همراه است. همچنین z_{min} و z_{max} ابتدا و انتهای بازه انتقال‌به‌سرخ است که مشاهده کهکشان‌ها در آن بازه انجام می‌شود. در معادله(٤) بازه انتگرال روی بردار موج از k_{min} تا k_{max} انجام می‌شود. k_{min} کوچک‌ترین بردار موج (بزرگ‌ترین مقیاس) قابل مشاهده است که با توجه به محدود بودن حجم

مساحی محاسبه می‌شود. همچنین k_{max} بزرگ‌ترین بردار موج (کوچک‌ترین مقیاس) قابل مشاهده است و با توجه به غیرخطی شدن مقیاس‌های خیلی کوچک تعیین می‌شود. در این مقیاس‌ها تقریب استفاده شده در معادله(۲) خراب می‌شود و این معادله قابل استفاده نخواهد بود.

برای محاسبه ماتریس فیشر برای یک رصد مشخص ابتدا لازم است که f_{sky} و بازه‌های انتقال‌به‌سرخ آن رصد مشخص شود. با این اطلاعات می‌توانیم k_{min} و k_{max} را برای هر بازه انتقال‌به‌سرخ محاسبه کنیم. در ادامه باید چگالی تعداد کهکشان‌ها و کمیت سوئیدگی مربوط به کهکشان‌های مورد نظر را در هر انتقال‌به‌سرخ پیدا کنیم.

با در نظر گرفتن احتمال پیشینی برای کمیت α به صورت یک توضیع همگن در بازه (-1,1)، می‌توانیم کمیت اطلاعات متقابل را نیز با کمک معادله زیر محاسبه کنیم[3].

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}d\alpha'\int_{-1}^{1}\frac{d\alpha}{2}P(\alpha'|\alpha)\ln\left(\frac{P(\alpha'|\alpha)}{P(\alpha')}\right) \qquad (7)$$

که در این رابطه $P(\alpha'|\alpha)$ تابع درست نمایی به صورت زیر است.

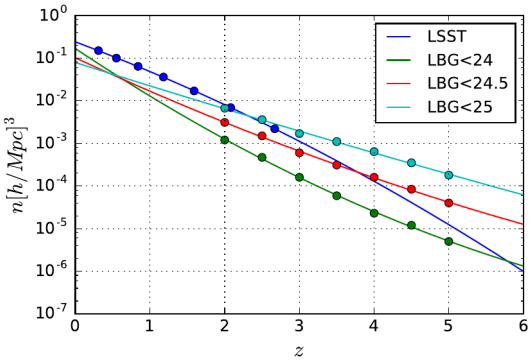
$$P(\alpha'|\alpha)=\sqrt{\frac{F(\alpha,z)}{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}F(\alpha,z)(\alpha'-\alpha)^2\right) \qquad (9)$$

همچنین تابع $P(\alpha')$ از انتگرال زیر محاسبه می‌شود.

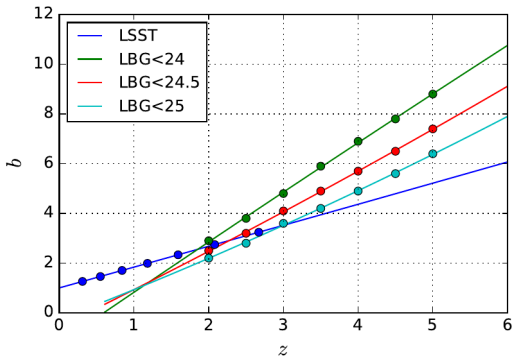
$$P(\alpha')=\int_{-1}^{1}\frac{d\alpha}{2}P(\alpha'|\alpha) \qquad (10)$$

کمیت اطلاعات متقابل، با توجه به احتمال پیشینی کمیت α توانایی رصد را برای مقید کردن کمیت α محاسبه می‌کند و هر چقدر اندازه آن بیشتر باشد به معنای وجود اطلاعات بیشتر است.

لازم به ذکر است که توسعه ماتریس فیشر برای دربرگیری کمیت‌های دیگری مانند k_*، از جنبه نظری مهم است و می‌تواند ضرورت استفاده از اطلاعات متقابل را برجسته‌تر سازد. با این حال، این رویکرد حجم محاسبات را به‌شدت افزایش می‌دهد، زیرا مستلزم محاسبه انتگرال دوگانه در معادله (۷) و تشکیل ماتریس فیشر برای تمام مقادیر روی شبکه‌ای در صفحه α - k_* خواهد بود. در نتیجه، زمان محاسبات ممکن است تا صد برابر افزایش یابد. انجام این محاسبات به پروژه‌های آتی موکول می‌شود.



شکل ۱: چگالی کهکشان‌های قابل مشاهده توسط رصدهای مختلف



شکل ۲: سوئیدگی کهکشان‌های قابل مشاهده توسط رصدهای مختلف

نتایج

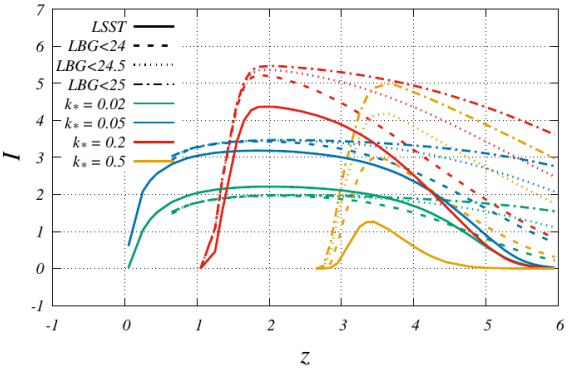
کهکشان‌های دارای گسست لیمان (LBG) نوعی کهکشان دوردست است که به دلیل وجود هیدروژن خنثی در محیط کهکشان، در طول‌موج‌های کوتاه‌تر از خط لیمان شار نوری به شدت کاهش می‌یابد. با توجه به پدیده انتقال‌به‌سرخ برای کهکشان‌های دوردست این گسست به طول‌موج‌های قابل مشاهده و فروسرخ جابه‌جا می‌شود. در نتیجه با اندازه‌گیری طول‌موج گسست می‌توانیم انتقال‌به‌سرخ تقریبی کهکشان را محاسبه کنیم.

رصدهای پیشنهادی مختلفی برای استفاده از این کهکشان‌ها برای مساحی آسمان در انتقال‌به‌سرخ‌های بالا وجود دارد. در این‌جا ما ویژگی‌های مربوط به مساحی پیشنهادی MegaMapper را به عنوان رصد پیشنهادی در می‌گیریم. چگالی تعداد LBG ها و بایاس مربوط به آن‌ها در شکل(۱) و (۲) آمده است. در این نمودار نقاط از مقاله [4] استخراج شده است و خطوط، برازش بر این داده‌ها است. سه حالت متفاوت $m<24$ و $m<24.5$ و $m<25$ را

در نظر گرفته‌ایم که m قدر قابل مشاهده توسط تلسکوپ است. همچنین برای مقایسه با انتقال‌به‌سرخ‌های پایین اطلاعات مربوط به مساحی LSST نیز از مقاله[5] استخراج شده است. f_{sky} و σ_{0z} به ترتیب برای MegaMapper 0.34 و 0.001 و برای LSST 0.58 و 0.04 است.

در شکل(۳) نمودار کمیت اطلاعات متقابل برحسب انتقال‌به‌سرخ برای حالت‌های مختلف رسم شده است. برای محاسبه این نمودارها 60 بازه انتقال‌به‌سرخ با عرض 0.1 از انتقال‌به‌سرخ 0 تا 6 در نظر گرفته شده است.

به طور کلی دو عامل مهم در نمودارها تاثیر دارند. عامل اول چگالی تعداد کهکشان‌ها است که در انتقال‌به‌سرخ‌های بالاتر کم می‌شود و عامل دوم بازه میان k_{min} و k_{max} /ست که در انتقال‌به‌سرخ‌های بالاتر به دلیل کوچک‌تر شدن اثرات غیرخطی این بازه بزرگ‌تر می‌شود. عامل اول مشاهده را سخت‌تر و عامل دوم مشاهده را تسهیل می‌کند. در نتیجه اطلاعات متقابل در انتقال‌به‌سرخ مشخصی بیشینه می‌شود.



شکل ۳: کمیت اطلاعات متقابل برحسب انتقال‌به‌سرخ برای رصدهای مختلف. رنگ‌ها k_* های متفاوت است و پارامتر Δ=0.1 ثابت است.

زمانی که عارضه در مقیاس‌های بزرگ باشد (نمودار آبی و سبز در شکل (۳)) قله نمودار پهن‌تر می‌شود اما برای عارضه‌های اتفاق افتاده در مقیاس‌های کوچک، قله باریک‌تر شده و این عارضه‌ها در انتقال‌به‌سرخ‌های بزرگ‌تر قابل مشاهده هستند. علت این اتفاق این است که در انتقال‌به‌سرخ‌های پایین اثرات غیرخطی در مقیاس‌های کوچک‌تری ظاهر می‌شوند و درنتیجه این نوع عارضه‌ها در انتقال‌به‌سرخ‌های بالاتر قابل مشاهده خواهند بود. به عنوان نمونه برای $k_* = 0.5h/Mpc$ (رنگ زرد) این نوع عارضه در انتقال‌به‌سرخ‌های کوچک‌تر از 3 قابل مشاهده نیست.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، با استفاده از آنالیز فیشر و کمیت اطلاعات متقابل، توانایی مساحی‌های کهکشانی در انتقال‌به‌سرخ‌های بالا برای مقید کردن عارضه‌های طیف توان اولیه بررسی شد. نتایج نشان می‌دهد که دو عامل اصلی در مقدار اطلاعات متقابل نقش دارند: اول چگالی تعداد کهکشان‌ها که در انتقال‌به‌سرخ‌های بالا کاهش می‌یابد، و دوم بازه‌ی قابل مشاهده بردار موج که در انتقال‌به‌سرخ‌های بالا به دلیل کاهش اثرات غیرخطی بزرگتر می‌شود. برهم‌کنش این دو عامل باعث می‌شود که اطلاعات متقابل در یک انتقال‌به‌سرخ میانی بیشینه شود.

همچنین مشاهده شد که عارضه‌های مقیاس‌بزرگ (با k_* کوچک) در انتقال‌به‌سرخ‌های پایین‌تر و عارضه‌های مقیاس‌کوچک (با k_* بزرگ) در انتقال‌به‌سرخ‌های بالاتر (حدود z بزرگتر از سه) بهتر قابل تشخیص هستند. بنابراین، طراحی مساحی‌های آینده باید متناسب با مقیاس عارضه‌ی مورد نظر، انتقال‌به‌سرخ بهینه را انتخاب کند. به طور خاص، اگر هدف جستجوی عارضه‌های مقیاس‌کوچک باشد، رفتن به انتقال‌به‌سرخ‌های بالا ارزش سرمایه‌گذاری را دارد.

مرجع‌ها

[1] Fard, Mohammad Ansari, and Shant Baghram. "Late time sky as a probe of steps and oscillations in primordial Universe." Journal of Cosmology and Astroparticle Physics 2018.01 (2018): 051-051.
[2] Chen, Xingang, et al. "The future of primordial features with large-scale structure surveys." Journal of Cosmology and Astroparticle Physics 2016.11 (2016): 014-014..
[3] Namjoo, Mohammad Hossein. "Bayesian forecasting with information theory." arXiv preprint arXiv:2409.13802 (2024).
[4] Schlegel, David J., et al. "The MegaMapper: A stage-5 spectroscopic instrument concept for the study of inflation and dark energy." arXiv preprint arXiv:2209.04322 (2022).
[5] Ivezić, Željko, et al. "LSST: from science drivers to reference design and anticipated data products." The Astrophysical Journal 873.2 (2019): 111.

طیف توان شار جنگل لیمان آلفا در طیف اختروش‌ها

رضائی دارستانی ، سارا[۱] ؛ پژوهش ،رضا؛ آقائی، علیرضا[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه بیرجند ، بیرجند

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان

چکیده

در این مطالعه، طیف توان یک‌بعدی شار جنگل لیمان آلفا با استفاده از مجموعه‌ای شامل ۹۱ طیف اختروش با وضوح بالای طیف‌سنج UVES رصدخانه‌ی جنوبگان اروپا اندازه‌گیری و تحلیل شده است. این طیف‌ها بازه‌ی وسیعی از انتقال به سرخ نشری۱٫۸۹–۴٫۸ را پوشش می‌دهند و میانگین نسبت سیگنال به نویز آن‌ها در ناحیه‌ی جنگل لیمان آلفا بزرگ‌تر از ۱۰ است. داده‌ها به بازه‌ی طول‌موجی۱۰۵۰–۱۱۸۰ آنگستروم محدود شده‌اند تا اثرات نزدیکی اختروش به حداقل برسد. طیف توان در بازه‌ی عدد موج ۰.۰۰۳–۰.۱ {(s/km)} اندازه‌گیری شده است. به‌ویژه مدهای با k بزرگ که در پیمایش‌هایی نظیر SDSS-BOSS قابل دسترس نیستند و حساسیت بالایی به وضعیت حرارتی محیط میان‌کهکشانی دارند. روش لومب–اسکارگل به‌عنوان یک برآوردگر طیفی تعمیم‌یافته برای داده های نامنظم به‌کار گرفته شده است.. نتایج نشان می‌دهد که طیف توان اندازه‌گیری‌شده در مقیاس‌های بزرگ (اعداد موج کوچک) به‌طور سیستماتیک اندکی بالاتر از برخی اندازه‌گیری‌های پیشین قرار می‌گیرد، در حالی که در مقیاس‌های کوچک (اعداد موج بزرگ) دامنه‌ی طیف توان کمتر از مقادیر گزارش‌شده در مطالعات مشابه است (با اختلاف ۱–۲ سیگما). با این حال، شکل کلی طیف توان و روند تکامل انتقال‌به‌سرخی آن با نتایج پیشین سازگاری بسیار خوبی دارد. سرکوب نسبی توان در مقیاس‌های کوچک را می‌توان به حذف مؤثر خطوط فلزی، کاهش آلودگی نویز و استفاده از پنجره‌ی طیفی نسبت داد که بازتابی از کنترل بهتر اثرات سیستماتیک در این مقیاس‌ها است. از منظر فیزیکی، این رفتار با هموارشدگی گاز میان‌کهکشانی تحت تأثیر فشار گرمایی و پخش حرارتی سازگار است، در حالی که در مقیاس‌های بزرگ‌تر، نوسانات عمدتاً توسط چگالی ماده و رشد ساختارهای بزرگ‌مقیاس کنترل می‌شوند.

واژه های کلیدی: *جنگل لیمان آلفا، طیف توان، اختروش، خطوط فلزی ،محیط میان‌کهکشانی.*

Power Spectrum of Lyman-Alpha Forest Flux in Quasar Spectra

Rezaee Darestanee, Sara [1]; Pazhouhesh, Reza [1]; Aghaee, Alireza[2]

[1] *Department of Physics, university of Birjand, Birjand*

[2] *Department of Physics, University of Sistan and Balochestan, Zahedan*

Abstract

In this study, the one-dimensional power spectrum of the Lyman-alpha forest flux is measured and analyzed using a dataset comprising 91 quasar spectra with high resolution from the UVES spectrograph at the European Southern Observatory. These spectra cover a broad range of emission redshifts from 1.89 to 4.8, with an average signal-to-noise ratio in the Lyman-alpha forest region greater than 10. The data are restricted to the wavelength range of 1050–1180 Å to minimize proximity effects. The power spectrum is measured over the wavenumber range k = 0.003–0.1 s/km. In particular, the large-k modes, which are not accessible in surveys such as SDSS-BOSS and are highly sensitive to the thermal state of the intergalactic medium, are probed. The Lomb–Scargle method is employed as a generalized spectral estimator for irregularly sampled data. The results show that the measured power spectrum on large scales (small wavenumbers) is systematically slightly higher than some previous measurements, while on small scales (large wavenumbers), the power spectrum amplitude is lower than the values reported in similar studies (with a discrepancy of 1–2 sigma). Nevertheless, the overall shape of the power spectrum and its redshift-evolution trend are in very good agreement with previous findings. The relative suppression of power on small scales can be attributed to the effective removal of metal lines, reduced noise contamination, and the adopted spectral window function, which reflect better control over systematic effects at these scales. From a physical perspective, this behavior is consistent with the smoothing of the intergalactic gas under the influence of thermal pressure and thermal broadening, whereas on larger scales, the fluctuations are predominantly governed by matter density and the growth of large-scale structures.

***Keywords**: Lyman-alpha forest, Power Spectrum, Quasar, Metal Line, Intergalactic Medium*

PACS 98

مقدمه

جنگل لیمان آلفا مجموعه‌ای از خطوط جذبی است که درسمت آبی خط نشری لیمان آلفا طیف اختروش‌های دوردست دیده می‌شود. این خطوط ناشی از جذب فوتون‌های زمینه توسط گاز هیدروژن خنثی پراکنده در محیط میان کهکشان‌ها(IGM) هستند. این ساختارهای جذبی، در ناحیه بین (Å)۱۰۲۶–۱۲۱۶ (در چهارچوب مرجع اختروش) ظاهر می‌شوند. از آنجایی که گاز میان کهکشانی اثر گرانشی ماده تاریک را دنبال می‌کند، بررسی ویژگی‌های آماری جنگل لیمان آلفا می‌تواند اطلاعات ارزشمندی درباره توزیع ماده، تحول کیهانی و پارامترهای بنیادی کیهان‌شناسی فراهم آورد.

برای مطالعه خواص آماری این ساختارها، یکی از ابزارهای اصلی، طیف توان یک‌بعدی شار نرمال‌شده P(k) است. این تابع نشان‌دهنده توزیع قدرت نوسانات در کسر شار عبوری به‌عنوان تابعی از عدد موج k در راستای خط دید است و اطلاعاتی درباره توزیع ماده در مقیاس‌های مختلف در فواصل کیهانی، به‌ویژه در مقیاس‌های کوچک یعنی $k \gtrsim ۰,۰۱ s/km$ ارائه می‌دهد.

مطالعات متعددی طی دو دهه گذشته تلاش کرده‌اند تا P(k) را با دقت بیشتری اندازه‌گیری کنند. با استفاده از طیف‌های با وضوح بالا از ابزارUVES، Kim_۲۰۰۴ مقادیرP(k) را برای چند بازه‌ی انتقال به سرخ گزارش کردند. تحلیل دقیق‌تری توسط Irsic_۲۰۱۷ بر اساس داده‌های XQ-۱۰۰ انجام شد که در آن اثرات سیستماتیک مختلف مدل‌سازی شد. در همین راستا، Walther_۲۰۱۷ طیف توان را با استفاده از طیف ۷۴ اختروش از مجموعه طیف‌های HIRES و UVES در مقیاس‌های کوچک با دقت بالایی اندازه‌گیری کردند. اخیراً Day_۲۰۱۹ با استفاده از طیف‌های ۸۷ اختروش با وضوح بالا طیف توان را در مقیاس‌های کوچک اندازه‌گیری کردند، که به عنوان یکی از جامع‌ترین اندازه‌گیری‌ها در این زمینه شناخته می‌شود. تحلیل‌های اخیر نشان داده‌اند که اختلافاتی در دامنه‌ی طیف توان به ویژه در مقیاس‌های کوچک میان داده‌های مختلف وجود دارد که ریشه در نحوه‌ی برخورد با خطوط جذبی ضعیف فلزی و نوسانات باقی‌مانده‌ی پیوستار دارد. با توجه به اینکه طیف توان شار مستقیماً به طیف توان خطی ماده و تاریخچه‌ی گرمایش فضای میان‌کهکشانی گره خورده است، رفع این ابهامات سیستماتیک برای آزمون مدل‌های فیزیک (به‌ویژه ماهیت ذرات ماده تاریک) از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. برآیند نهایی این کار، نه‌تنها ارائه‌ی یک مجموعه‌داده‌ی طیف توان برای داده‌های همگن از طیف سنج UVES فراهم می آورد، بلکه امکان اعمال قیود جدید بر روی جرم قطع ماده تاریک گرم واندازه‌گیری دما و شیب رابطه‌ی دما–چگالی (γ) را برای جامعه‌ی کیهان‌شناسی فراهم می‌آورد.

در مطالعات جنگل لیمان آلفا، طیف توان شارP(k) نوسانات شار عبوری از خط دید اختروش را به عنوان تابعی از عدد موج نشان می‌دهد. از نظر ریاضی، این طیف توان، تبدیل فوریه تابع همبستگی شار است. تابع همبستگی، همبستگی نوسانات شار در دو نقطه با اختلاف سرعت Δv را اندازه می‌گیرد:

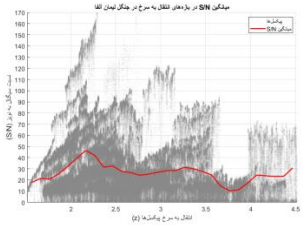
$$\xi(\Delta v) = \langle \left(\frac{F(v)}{F} - ۱\right)\left(\frac{F(v+\Delta v)}{F} - ۱\right) \rangle \quad (۱)$$

که در آن F(v) شار عبوری در طول موج یا سرعت متناظر، F میانگین شار در همان بازه انتقال به سرخ، و <...> نشان‌دهنده میانگین‌گیری است. با اعمال تبدیل فوریه$\xi(\Delta v)$ ، به P(k) می‌رسیم:

$$P_F(k) = \int \xi(\Delta v) e^{-ik\Delta v} d(\Delta v) \quad (۲)$$

داده‌ها

طیف‌ها مورد استفاده در اندازه‌گیری طیف توان شامل ۹۱ طیف در بازه انتقال به سرخی ۱/۸۶–۴/۸ می‌باشند. پیشتر، مشخصات بخشی از داده‌ها پیش‌تر در مقاله‌ای با عنوان *"The Study of AutoCorrelation Function on Lyman Alpha Forest of QSOs"* گردآوری و پردازش اولیه شده‌اند و در مرجع [۱۱] تشریح و منتشرشده است. در شکل ۱ پراکندگی S/Nبر حسب z نمایش داده شده است. میانگین S/N در binهای با عرض ۰/۱ به‌صورت منحنی قرمز روی نمودار ترسیم شده است.



شکل ۱.پراکندگی نسبت سیگنال به نویز بر حسب انتقال به سرخ پیکسل‌ها

محاسبه نوسات شار

روش‌های تعیین طیف پیوستار، نرمال‌سازی طیف، جداسازی ناحیه‌ی جنگل لیمان آلفا، و حذف خطوط فلزی و جاذب‌های پرچگال، پیشتر در مقاله‌ی مرجع [۱۱]به تفصیل ارائه شده است. برای استخراج اطلاعات آماری محیط میان‌کهکشانی از طریق طیف توان شار در جنگل لیمان آلفا، لازم است ابتدا نوسانات نسبی شار در هر پیکسل طیف به‌درستی تعریف و محاسبه شود. $\delta_F = \frac{F(v)-F}{F}$ در این کار دو رویکرد جهت تعیین نوسانات شار در جنگل لیمان آلفا استفاده گردید. نخست **رویکرد مستقل و مبتنی بر داده‌ها**: همانطور که در مرجع [۱۱] آورده شده بازسازی پیوستار هر طیف به‌صورت مستقل و با استفاده از برازش Spline نرم انجام شده است. با این حال، برای اطمینان از دقت بازسازی پیوستار و برآورد بایاس احتمالی ناشی از آن در داده‌های مورد استفاده، یک تحلیل مونت‌کارلو بر پایه‌ی طیف‌های اختروش انجام شد. در این روش، با افزودن نویز تصادفی به شار مشاهده‌شده و بازسازی مجدد پیوستار در ۱۰۰ تکرار مستقل برای هر طیف، میانگین و بیشینه‌ی خطای نسبی تخمین پیوستار محاسبه گردید. نتایج این تحلیل نشان داد که برای طیف‌ها در دسترس میانگین خطای نسبی در تخمین پیوستار حدود $\langle \delta C/C \rangle \approx ۲.٤٪$ است. این مقادیر با نتایج گزارش‌شده در مطالعات پیشین از جمله لی و همکارانش ۲۰۱۲همخوانی دارد و نشان‌دهنده‌ی قابل اعتماد بودن روش بازسازی پیوستار به‌کاررفته در این مطالعه است. خطای سیستماتیک ناشی از عدم‌قطعیت پیوستار به طیف‌توان نهایی، از روش بوت‌استرپ پارامتری استفاده شد. در رویکرد نخستین، مقدار میانگین نرمال‌شده‌ی شار، به صورت زیر محاسبه می‌شود: $F = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{F_{obs,i}}{F_{cont,i}}$ که در آن: N تعداد نقاط طیفی در ناحیه جنگل است، $F_{cont,i}$ و $F_{obs,i}$ به ترتیب مقدار پیوستار بازسازی‌شده و مقدارشار جذبی در نقطه i می‌باشند. این تعریف از میانگین شار نرمال‌شده در یک طیف خاص است که به‌صورت تجربی (و بدون وابستگی به مدل‌های کیهانی) از همان داده طیفی استخراج می‌شود. مزیت این روش در استقلال آن از مدل‌های جهانی میانگین شار است، اما به‌دلیل سرکوب طبیعی نوسانات بزرگ‌مقیاس توسط فرآیند نرمال‌سازی، منجر به کاهش توان در مقیاس‌های پایین در طیف توان خواهد شد. در مواردی که دقت کیهان‌شناسی مورد نظر است، از مدل‌های میانگین شار کیهانی برای تصحیح این اثر استفاده می‌شود. در رویکرد دوم **تعریف نوسانات شار به کمک میانگین شار کیهانی با کمک مدل بکر و همکارانش ۲۰۱۳** تنظیم می‌شود. این مدل بر پایه تحلیل طیف‌های با کیفیت بالا و برای محدوده ردشیفتی $۲<z<٥$ استخراج شده است. فرم تابعی F با رابطه $F = e^{-\tau}$ بیان می‌شود، τ عمق اپتیکی مؤثر جنگل لیمان آلفا است ودر مدل بکر ۲۰۱۳ با یک رابطه توانی مدل به صورت رابطه ۳ تعریف می‌شود:

$$\tau_{eff}(z) = \tau_{,} \left(\frac{۱+z}{۱+z_{,}}\right)^{\beta} + C \qquad (۳)$$

تصحیح سیستماتیک با رگرسیون خطی: برای هر طیف نسبت $F_{norm,z}$ ، نسبت به مدل F به صورت $F_{ratio}(z) = \frac{F_{norm,z}}{F}$ محاسبه می‌شود. در صورت عدم وجود خطاهای سیستماتیک، انتظار می‌رود که F_{ratio} در حدود ۱ پراکنده شود. با این حال، وجود شیب یا انحراف در این نسبت نشان‌دهنده خطای باقی‌مانده در نرمال‌سازی اولیه است. برای حذف این خطای سیستماتیک، در این پژوهش رابطه خطی بر روی نقاط $F_{ratio}(z)$ به عنوان تابعی از انتقال به سرخ جذب‌کننده z_{abs} تطبیق داده می‌شود: $F(z) = A \times z_{abs} + B$ از تقسیم شار نرمال‌شده اولیه بر این تابع خطی رابطه $F_{regulated} = \frac{F_{norm,z}}{A \times z + B}$ به دست می‌آید. نوسانات شار δ_F که ورودی اصلی برای تحلیل طیف توان است، به صورت انحراف از میانگین تعریف می‌شود($\delta_F = F_{regulated} - ۱$) . این آرایه برای هر پیکسل در جنگل لیمان آلفا محاسبه می شود.

محاسبه طیف توان شار

طیف‌های موجود بر اساس انتقال‌به‌سرخ به ۹ بازه تقسیم شده‌اند (جدول ۱). برای هر طیف در یک بازه‌های انتقال به‌سرخ، سه مؤلفه اصلی طول‌موج، نوسانات شار و نویز مورداستفاده قرار می‌گیرد. برای محاسبه طیف توان در فضای سرعت، داده‌های طول‌موج با استفاده از رابطه دوپلری $v = c.\ln\left(\frac{\lambda}{\lambda_{ref}}\right)$ به فضای سرعت تبدیل می‌شوند. میانگین فاصله پیکسلی در فضای سرعت $\Delta v_i = v_{i+1} - v_i$ به صورت $\Delta v = \langle \Delta v_i \rangle$ محاسبه می‌شود.

جدول ۱. تعداد طیف های استفاده شده در هر بازه انتقال به سرخ برای تحلیل آماری جنگل لیمان آلفا و میانگین انتقال به سرخ داده ها در هر بازه

$\langle z \rangle$	تعداد طیف‌ها	بازه انتقال به سرخ z
۱٫۸۷	۱۱	[۱٫۸، ۲٫۲)
۱٫۹۹	۱۲	[۲٫۲، ۲٫۴)
۲٫۲۰	۱۲	[۲٫۴، ۲٫۶)
۲٫۴۲	۱۱	[۲٫۶، ۲٫۸)
۲٫۵۶	۱۰	[۲٫۸، ۳٫۰)
۲٫۷۴	۹	[۳٫۰، ۳٫۲)
۲٫۹۵	۸	[۳٫۲، ۳٫۴)
۳٫۲۷	۸	[۳٫۴، ۳٫۸)
۳٫۹۵	۱۰	[۳٫۸، ۴٫۵]

در فرآیند تحلیل طیفی، نشت طیفی رخ می‌دهد. استفاده از پنجره، به ویژه پنجره سهموی، این اثر را کاهش می‌دهد. پنجره سهموی ولچ یکی از انواع پنجره‌های کاربردی در پردازش سیگنال است که برای کاهش اثرات لبه‌ای در تحلیل پنجره سهموی اعمال شده به داده‌های نوسان شار توسط رابطه $w(i) = 1 - \left(\frac{i - (N-1)/2}{(N+1)/2}\right)^2$ تعریف می‌شود. و به شکل $\delta F_{\text{windowed}} = \delta F \cdot w$ پنجره بر نوسانات شار اعمال خواهد شد.

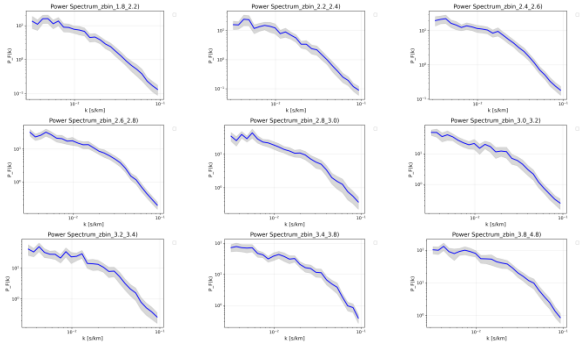
تحلیل سری‌های زمانی برای شناسایی الگوهای دوره‌ای در داده‌ها، به‌ویژه در اخترشناسی، بسیار مهم است. در مطالعه جنگل لیمان آلفا، با وجود تغییراتی که با حذف بخشی از داده‌ها به عنوان آلاینده‌های انجام گرفته است، داده‌ها به‌صورت نامنظم نمونه‌برداری می‌شوند. این موضوع باعث می‌شود که تبدیل فوریه، که برای داده‌های منظم طراحی شده، با چالش‌هایی مواجه شود. روش لومب–اسکارگل به طور خاص برای رفع این محدودیت‌ها توسعه یافته است. روش لومب–اسکارگل یک روش **برازش** است: به‌جای انتگرال‌گیری، برای هر فرکانس (عدد موج) یک **مدل سینوسی** در نظر می‌گیرد. طیف توان برای هر بازه‌ی انتقال‌به‌سرخ با دوره‌نگار لومب–اسکارگل با استفاده از کتابخانه‌ی LombScargle در پکیج astropy محاسبه شده است .

در محاسبه طیف توان نوسانات شار، مقادیر مشاهده‌شده همواره حاوی نویز آماری هستند. پس از محاسبه طیف توان خام $P_{raw}(k)$ طیف توان نویز $P_{noise}(k)$ از آن کسر می‌شود.

یکی از گام‌های اساسی استخراج طیف توان ، تصحیح اثرات ناشی از محدودیت تفکیک طیفی ابزار است. برای مدل‌سازی این اثر، از **تابع پنجره ابزار** استفاده می‌شود. و به‌صورت رابطه (٤) تعریف می‌شود:

$$W_R(k) = \exp\left(-\frac{1}{2}(kR)^2\right) \cdot \left[\frac{\sin(k\Delta v_{pix}/2)}{k\Delta v_{pix}/2}\right]^2, \qquad (٤)$$

در عمل، طیف توان که از تک تک داده‌ها به‌دست می‌آید، بعد از کاهش اثرات نویز باید بر $W_R(k)$ تقسیم شود تا اثرات ابزار حذف گردد: $P(k) = \frac{P_{raw}(k) - P_{noise}(k)}{(W_R(k))^2}$ در نهایت، پس از محاسبه طیف توان برای تمام طیف ها در یک بازه، میانگین گیری از طیف توان اختروش های موجود در هر k محاسبه می شود. به جای استفاده از فرمول کلاسیک انحراف معیار، در این پژوهش از روش بوت استرپ بازنمونه گیری برای تخمین عدم قطعیت استفاده شده است.



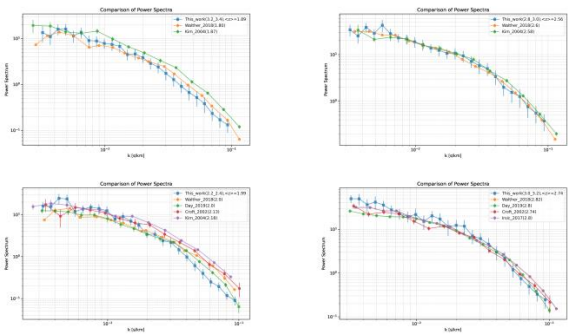
شکل۲. منحنی آبی، میانگین طیف توان محاسبه شده از اختروش‌های موجود در هر بازه را نشان می دهد. ناحیه ی سایه دار خاکستری، انحراف معیار حاصل از نمونه گیری تصادفی bootstrapرا نمایش می دهد

در ادامه در شکل ۳. تابع طیف توان اندازه‌گیری‌شده در این کار با نتایج حاصل از مطالعات پیشین همچون [۵،٦،۹] مقایسه می‌شود. این مقایسه در بازه‌ی انتقال‌به‌سرخ ۱٫۸ تا ۳.۹۵ انجام شده . در تمامی بازه‌های انتقال‌به‌سرخ مورد بررسی، شکل کلی طیف‌توان $P(k)$ به‌عنوان تابعی از عدد موج k با رفتار مورد انتظار نظری همخوانی دارد، به‌طوری‌که با افزایش k کاهش تدریجی توان مشاهده می‌شود. این افت تدریجی توان که بیانگر اثرمستقیماً

دمای محیط میان‌کهکشانی است، و به کیهان‌شناسان اجازه می‌دهد تا تاریخچه‌ی گرمایش و یونش کیهان را در دوران پس از مهبانگ بازسازی کنند.

این روند در تمامی مطالعات مرجع نیز دیده می‌شود و صحت کلی استخراج طیف‌توان را تأیید می‌کند.

نتایج این پژوهش در انتقال‌به‌سرخ‌های پایین‌تر ($z \lesssim ۲.۰$) با اندازه‌گیری‌های اخیر و به روزهمچون کارهای انجام شده توسط والتر و همکارانش۲۰۱۸ و دی و همکارانش۲۰۱۹ همخوانی بسیار خوبی در سطح ۲–۱ σ نشان می‌دهد. هرچند در برخی اعداد موج دامنه‌ی طیف‌توان اختلاف بیشتر مشاهده میشود که ناشی از تفاوت در نمونه‌ی داده‌ها (بازه‌ی انتقال‌به‌سرخ و کیفیت طیف‌ها) و روش‌های حذف آلاینده‌ها و همچنین استفاده از رگرسیون خطی در بخش محاسبه نوسانات شار می‌باشد.



شکل۳. مقایسه طیف توان محاسبه شده در چند بازه با مطالعات مربوط به والتر ۲۰۱۸، دی ۲۰۱۹، کیم ۲۰۰۴ .

جهت کمی سازی اثرات آماری و فیزیکی فرآیند پاک‌سازی، مقایسه‌ای بین طیف توان خام و طیف توان پاک‌سازی‌شده صورت گرفته است (جدول۲). نسبت $P_{\text{cleaned}}(k)/P_{\text{raw}}(k)$ محاسبه شده است.

جدول۲. میانگین $P_{\text{cleaned}}(k)/P_{\text{raw}}(k)$ در مقیاس‌های بزرگ $k < ۰٫۰۲ \text{s/km}$ و در مقیاس های کوچک $k \geq ۰٫۰۲ \text{s/km}$ را نشان می دهد

بازه انتقال به سرخ z	میانگین نسبت $(k < ۰٫۰۲)$	میانگین نسبت $(k > ۰٫۰۲)$
[۱٫۸, ۲٫۲)	۱٫۰۸۳	۰٫۸۲۱
[۲٫۲, ۲٫۴)	۱٫۰۵۵	۰٫۶۰۴
[۲٫۴, ۲٫۶)	۰٫۸۹۹	۰٫۶۸۰
[۲٫۶, ۲٫۸)	۱٫۰۴۲	۰٫۷۳۰
[۲٫۸, ۳٫۰)	۰٫۸۳۰	۰٫۷۳۸
[۳٫۰, ۳٫۲)	۰٫۸۴۲	۰٫۴۶۶
[۳٫۲, ۳٫۴)	۰٫۸۰۵	۰٫۵۲۷
[۳٫۴, ۳٫۸)	۰٫۹۳۸	۰٫۶۳۰
[۳٫۸, ۴٫۸]	۰٫۸۶۵	۰٫۶۲۲

بـرای بررسـی طیف توان نوسانات شار جنگل لیمان آلفا استخراج شده با دو روش محلی و تنظیم شده با یکدیگر مقایسه می شود.

نتیجه گیری

در این پژوهش، طیف‌توان یک‌بعدی نوسانات شار جنگل لیمان آلفا با استفاده از داده‌های طیف‌نگار UVES با قدرت تفکیک طیفی بالا و نسبت سیگنال به نویز متوسط بیشتر از ۱۰، در بازه‌ی انتقال‌به‌سرخ ۱٫۹۸ تا ٤.٥ اندازه‌گیری شده است. هدف اصلی این کار، کاهش خطاهای سیستماتیک مؤثر بر طیف‌توان در مقیاس‌های کوچک ($k \gtrsim ۰.۰۲ \ (\text{km/s})^{-۱}$) از طریق به‌کارگیری ترکیبی از روش‌های پیشرفته‌ی پردازش داده بود.

جدول۳. میانگین، $P_{\text{Regulated}}/P_{\text{Local}}$

بازه انتقال به سرخ z	میانگین نسبت $(k < ۰٫۰۲)$	میانگین نسبت $(k > ۰٫۰۲)$
[۱٫۸, ۲٫۲)	۰٫۸۸۱	۰٫۸۷۲
[۲٫۲, ۲٫۴)	۰٫۸۸۲	۰٫۹۰۹
[۲٫۴, ۲٫۶)	۰٫۹۶۴	۰٫۹۷۷
[۲٫۶, ۲٫۸)	۰٫۹۶۳	۰٫۹۷۳
[۲٫۸, ۳٫۰)	۰٫۹۲۷	۰٫۹۵۷
[۳٫۰, ۳٫۲)	۰٫۸۸۴	۰٫۹۳۴
[۳٫۲, ۳٫۴)	۰٫۹۲۲	۰٫۹۵۸
[۳٫۴, ۳٫۸)	۰٫۹۵۵	۰٫۹۷۴
[۳٫۸, ۴٫۸]	۰٫۹۶۴	۱٫۰۰۵

اصول اجرایی این کار بر سه محور اصلی استوار است: (۱) حذف فیزیکی خطوط فلزی بر اساس روش والتر و همکارانش ۲۰۱۸ که به‌طور مؤثر آلودگی‌های ناشی از خطوط جذبی فلزی ضعیف ـنظیر CII، SiIIو ـ OVI را حذف می‌کند. (۲) تصحیح نشت طیفی با استفاده از روش دی و همکارانش ۲۰۱۹ که با اعمال توابع پنجره‌ای ولچ ، از انتقال توان از مقیاس‌های بزرگ به کوچک جلوگیری می‌کند و (۳) محاسبه نوسانات شار به روش رگرسیون خطی با کمک مدل بکر۲۰۱۳ و تخمین طیف‌توان با روش لومب–اسکارگل که برای داده‌های نامنظم (پس از حذف بخش‌های آلوده) بهینه است. برآورد خطاها با ترکیبی از بوت‌استرپ استاندارد بر روی خطهای دید و بوت‌استرپ پارامتری مبتنی بر عدم‌قطعیت مدل‌سازی پیوستار انجام شد. تحلیل مونت‌کارلو بر پایه‌ی طیف‌های واقعی نشان داد که میانگین خطای نسبی بازسازی پیوستار حدود ۲٫٤٪ است که با مطالعات پیشین همخوانی دارد و قابلیت اطمینان روش را تأیید می‌کند.

مقایسه‌ی طیف‌توان پیش و پس از حذف خطوط فلزی نشان داد که در مقیاس‌های بزرگ ($k \lesssim ۰.۰۱$) نسبت توان‌ها نزدیک به ۱ است، اما در مقیاس‌های کوچک ($k \gtrsim ۰.۰۳$) این نسبت به‌طور میانگین به ۰٫۵–۰٫۷ کاهش می‌یابد. این کاهش بیانگر حذف مؤثر

نویز و خطوط جذبی باریک فلزی است که عمدتاً در اعداد موج بزرگ تأثیر دارند. همچنین، بررسی اثر تصحیح نشت طیفی نشان داد که این تصحیح می‌تواند دامنه‌ی طیف‌توان را در $k \sim ۰.۰۲$ تا ۲۰٪ کاهش دهد که تأکیدی بر ضرورت آن در تحلیل‌های دقیق است. طیف‌توان نهایی در انتقال‌به‌سرخ‌های پایین‌تر ($z \lesssim ۲.۵$) همخوانی مناسب در سطح ۱–۲سیگما با نتایج والترو همکاران نشان داد.

در مجموع، این کار گامی در جهت استانداردسازی روش‌های اندازه‌گیری طیف‌توان جنگل لیمان آلفا و فراهم آوردن داده‌های قابل‌اطمینان برای آزمون مدل‌های کیهان‌شناسی در مقیاس‌های کوچک است. می‌توان با ترکیب داده‌های UVES با داده‌های مساحی‌های بزرگ مانند DESI می‌تواند پوشش وسیع‌تری از مقیاس‌های موجی و انتقال‌به‌سرخ فراهم آورد و امکان اعمال قیود هم‌زمان بر پارامترهای کیهان‌شناسی و اخترفیزیکی را با دقت بالاتری میسر سازد. همچنین، استفاده از شبیه‌سازی‌های هیدرودینامیکی پیشرفته مانند Nyx یا Illustris-TNG برای مدل‌سازی دقیق‌تر اثر خطوط فلزی و پیوستار، می‌تواند به کاهش سیستماتیک‌های باقی‌مانده کمک کند.

مرجع‌ها

[۱] J. Hawley, ”Foundations of Modern Cosmology”, Oxford University Press, ISBN ۰-۱۹-۸۵۳۰۹۶-X (Hbk), (۲۰۰۵).
[۲] A, Ghribi. ”Advances In Modern Cosmolog”, Publishing Process Martina Blecic, (۲۰۱۱).
[۳] A.Liddle, ”An Introduction to Modern Cosmology, Institute for Astronomy ”, Univer sity of Edinburgh, Third edition, ISBN: ۹۷۸۱۱۱۸۵۰۲۰۹۹, (۲۰۱۵).
[٤] M. Viel,”Cosmological and astrophysical constraints from the Lyman α forest flux probability distribution function,” Monthly Notices of the Royal Astronomical Society (MNRAS), vol. ۳۹۹, pp. L۳۹–L٤۳, ۲۰۰۹..
[٥] T.S. Kim, The power spectrum of the flux distribution in the Lyman-alpha forest of a large sample of UVES QSO ab sorption spectra (Luqas), Monthly Notices of the Royal Astronomical Society (MNRAS), vol. ۳٤۷, pp. ۳٥٥, ۲۰۰٤.
[٦] A. Day, & Bharat Kambalur, Power spectrum of the flux in the Lyman alpha forest from high-resolution spectra of ۸۷ QSOs, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society (MNRAS), vol. ٤۸۹, no. ۲, pp. ۲٥۳٦–۲٥٥٤, ۲۰۱۹.
[۷] P. McDonald، ”THE Ly α FOREST POWER SPECTRUM FROMTHE SLOAN DIGITAL SKY SURVEY”, (ApJ), ۱٦۳, ۸۰–۱۰۹, ۲۰۰٦.
[۸] G. D. Becker,”A refined measurement of the mean transmitted flux in the Lyα forest over ۲<z<٥ using composite quasar spectra,” (MNRAS), vol. ٤۳۰, no. ۳, pp. ۲۰٦۷–۲۰۸۱, ۲۰۱۳..
[۹] M. Walther, ”A New Precision Measurement of the Small-Scale Line-of-Sight Power Spectrum of the Lyα Forest,” (ApJ), vol. ۸٥۲, p. ۲۲, ۲۰۱۸.
[۱۰] K.-G. Lee, N. Suzuki, and D. N. Spergel, "Mean-flux-regulated principal component analysis continuum fitting of Sloan Digital Sky Survey Lyα forest spectra", The Astronomical Journal, vol. ۱٤۳, pp۱٤., ۲۰۱۲.
[۱۱] S.Rezaee, R. Pazhouhesh, A.Aghaee, “The Study of AutoCorrelation Function on Lyman Alpha Forest of QSOs”, (ijaa) Vol. ۱۱, No. ۳, ۲۰۲٤, ۲۳۱–۲٤۳
[۱۲] A. Dall’Aglio, L. Wisotzki, and G. Worseck, "An unbiased measurement of the UV background and its evolution via the proximity effect in quasar spectra", Astronomy and Astrophysics, vol. ٤۹۱, pp. ٤٦٥–٤۸۱, ۲۰۰۸.
[۱۳]C.Chen, F.Hamann, B.Ma, \& M.Murphy,"A Catalog of High-velocity CIV Mini-broad Absorption Lines in the VLT-UVES and Keck-HIRES Archives", The Astrophysical Journal (ApJ), vol. ۹۰۷, ۸٤, ۲۰, (۲۰۲۱).
[۱٤] T. Zafar, C. Péroux, A. Popping, B. Milliard, J.-M. Deharveng, S. Frank, "The ESO UVES advanced data products quasar sample. II. Cosmological evolution of the neutral gas mass density", Astronomy and Astrophysics, vol. ٥٥٦, A۱٤۱, ۲۰۱۳.
[۱٥] M. M. Ivanov, "Lyman alpha forest power spectrum in effective field theory," Physical Review D, ۱۰۹(۲): ۰۲۳٥۰۷, ۲۰۲٤.

تبخیر کوانتومی کرمچاله JNW در حضور پتانسیل کلمن - واینبرگ

سمیرا ، دهقانی ؛ حسین، غفارنژاد

[1] دانشکده فیزیک دانشگاه سمنان، ، سمنان، صندق پستی 19111-35131

چکیده

در این پژوهش، برهم‌کنش میدان اسکالر کلاین-گوردون با کرم‌چاله پایا در حضور پتانسیل خودبرهم‌کنشی کلمن-واینبرگ بررسی می‌گردد. متریک JNW موجود در این پژوهش که از معادلات اینشتین به دست می‌آید، در واقع حالت مرزی خاصی از خانواده وسیع‌تر متریک‌های سه‌پارامتری و فضا-زمان‌های تعمیم‌یافته گاما (از جمله مدل‌های دایونیک، شتاب‌دار و دارای تک‌قطبی گرانومغناطیسی) است که پارامتر گاما در آن‌ها نقش کلیدی در کنترل تکینگی عریان و ساختار هندسی فضا-زمان ایفا می‌کند [۱۰، ۱۱، ۱۲، ۱۳، ۱۴]. پتانسیل خودبرهم‌کنشی کلمن-واینبرگ از تصحیحات تک‌حلقه‌ای قطبش خلاء نمودارهای فاینمن حاصل می‌شود و در واقع تصحیح لگاریتمی پتانسیل هیگز است. با محاسبهٔ ضرایب بوگولیوبوف، فرآیند خلق و گسیل ذرات تحلیل شده است. از آنجایی که متریک JNW فاقد افق رویداد متعارف است، فرآیند گسیل ذرات به عنوان یک فرآیند خلق ذرات شبه‌کلاسیک در فضازمان خمیده بررسی شده و دمای مؤثر این کرم‌چاله از روی تابع توزیع آماری ذرات خلق‌شده (که شبیه تابع توزیع پلانک است) به دست آمده است. به عنوان هدف بعدی، تأثیر تنش این ذرات هاوکینگ را بر روی متریک زمینه کرم‌چاله JNW مطالعه خواهیم کرد.این مطالعه تحت عنوان مسأله پس‌زنی معروف شده است. پس از بررسی حالات نهایی این کرم‌چاله تبخیری می توان رفتار ترمودینامیکی این سیستم در سه سناریوی مختلف تبخیر محض، باقی‌ماندهٔ پایدار و یا تشکیل افق رویدادبررسی کرد .

واژه های کلیدی: *تابش هاوکینگ- تانسور انرژی تکانه بهنجارشده- پتانسیل کولمن- واینبرگ – کرم‌چاله JNW- پس زنی*

Evaporation of JNW wormhole in presence of the Coleman-Weinberg potential

Samira, Dehghani[1]; Hossein, Ghaffarnejad[2]

Faculty of Physics, Semnan University, P.O.Box:35131-19111, Semnan, Iran

Abstract

In this research, the interaction of a Klein–Gordon scalar field with a static wormhole in the presence of the Coleman–Weinberg self-interaction potential is investigated. The JNW metric considered in this study, which is obtained as a solution of Einstein's field equations, is in fact a particular limiting case of a broader family of three-parameter metrics and generalized gamma spacetimes (including dyonic, accelerating, and gravitomagnetic monopole models), in which the gamma parameter plays a crucial role in controlling the naked singularity and the geometrical structure of spacetime [10–14].The Coleman–Weinberg self-interaction potential arises from the one-loop vacuum polarization corrections represented by Feynman diagrams and can be regarded as a logarithmic correction to the Higgs potential. By calculating the Bogoliubov coefficients, the process of particle creation and emission is analyzed. Since the JNW metric does not possess a conventional event horizon, the particle emission process is studied as a semiclassical particle-creation phenomenon in curved spacetime. The effective temperature of this wormhole is then derived from the statistical distribution function of the created particles, which exhibits a Planck-like spectrum.As a subsequent objective, we shall investigate the effect of the stress-energy tensor of these Hawking particles on the background JNW wormhole metric. This problem is commonly known as the backreaction problem. After examining the final states of this evaporating wormhole, the thermodynamic behavior of the system can be explored within three different scenarios: complete evaporation, the formation of a stable remnant, or the emergence of an event horizon.

***Keywords**: Hawking Radiation - renormalized stress-energy tensor - Coleman-Weinberg potential - JNW Wormhole- Backreaction*
PACS No:98

مقدمه

در فیزیک نظری معاصر، تدوین یک نظریه غیراختلالی و بدون واگرایی برای گرانش کوانتومی همچنان یک چالش اساسی است. برخلاف موفقیت نظریه‌های میدان پیمانه‌ای در تبیین برهم‌کنش‌های

الکتروضعیف و قوی، اعمال رهیافت‌های استاندارد کوانتومی به گرانش اینشتین به دلیل بعددار بودن ثابت گرانش نیوتون G به عنوان جفت‌شدگی اختلالی، منجر به یک نظریه بازبهنجارش‌ناپذیر در انرژی‌های بالا می‌شود[1].این ویژگی باعث می‌شود که در مرتبه‌های بالای اختلال، واگرایی‌های فرابنفش ظاهر شوند که با تعداد متناهی جمله متقابل قابل حذف نیستند.بر اساس تحلیل‌های ابعادی،انتظار می‌رود که یک نظریه کامل و همه‌جانبه از گرانش کوانتومی تنها در مقیاس‌های بسیار کوچک،یعنی در محدوده طول و زمان پلانک،کاربرد داشته باشد.در سناریوهای استاندارد کیهان‌شناسی اولیه و فیزیک انرژی‌های بالا،فرآیندهای شکست تقارن در پتانسیل‌های خودبرهم‌کنشی،نقشی اساسی در توصیف گذارهای فاز عالم ایفا می‌کنند.با این حال،بر اساس اصل عدم قطعیت هایزنبرگ،در عصر پلانک،نوسانات شدید کوانتومی خلأ باعث شدند که توپولوژی فضا–زمان دچار آشفتگی‌های موضعی و غیرخطی شدید شود.در این شرایط که دمای انحنای جهان از دمای پلانک تجاوز می‌کند،خمینه فضا–زمان کلاسیک،پیوستگی و متمایز بودن خود را از دست داده و ترتیب زمانی رویدادها به دلیل افت‌وخیز شدید متریک، فاقد تعریف دقیق ساختاری می‌شود[2].اگرچه نسبیت عام اینشتین در توصیف ساختار ماکروسکوپی فضا–زمان بسیار موفق بوده است،اما در انرژی‌های بالا با چالش عدم بازبهنجارش‌پذیری روبرو می‌شود [۱].نظریه‌های کوانتومی پیشرفته‌تر مانند نظریه ریسمان تلاش می‌کنند تا این مشکل را برطرف سازند [3].از سوی دیگر، نظریه میدان‌های کوانتومی در فضا–زمان خمیده بستر مناسبی برای بررسی پدیده‌های گرانش نیمه‌کلاسیک فراهم می‌آورد[5].در این رویکرد، پس‌زمینه گرانش همچنان به صورت یک خمینه لورنتسی کلاسیک می‌باشد و از طریق هندسه دیفرانسیل نسبیت عام توصیف می‌شود، در حالی که میدان‌های ماده به صورت کوانتومی توصیف می‌شوند. این رویکرد نقش بسیار مهمی در توصیف توزیع ساختار بزرگ‌مقیاس کیهانی و منشأ ناهمسانگردی‌های تابش زمینه کیهانی در طی فاز تورم کیهانی ایفا می‌کند.در این رهیافت شبه کوانتومی، معادلات میدان اینشتین به صورت $G_{\mu\nu} = 8\pi G_N \left\langle \hat{T}_{\mu\nu} \right\rangle_{ren}$ نوشته می‌شوند[4]: که سمت چپ تانسور هندسی اینشتین و سمت راست مقدار چشم‌داشتی بازبهنجارشده تنش میدان مادی کوانتومی اندرکنشی با گرانش است. نکته هایز اهمیت این رهیافت این است که مسأله بازبهنجارش تنش میدان مادی کوانتومی $\left\langle \hat{T}_{\mu\nu} \right\rangle_{ren}$ با هر روشی که بازبهنجار کرده باشیم مثلا روش ابعادی، روش تابع زتای ریمان ، روش هادامارد و یا هر روش دیگر نهایتا هنوز رابطه پایستگی تنش بازبهنجار شده برقرار است $\nabla_\mu \left\langle \mathrm{T}^{\mu}_{\nu} \right\rangle_{ren} = 0$ و از این رو سازگاری اتحاد بیانجی در معادله‌ی میدان بر قرار می‌شود.اما رد مقدار چشم‌داشتی تانسور انرژی–تکانه بازبهنجارشده حتی برای میدان‌های بدون جرم نیز غیرصفرو بر حسب اسکالرهای انحنای مرتبه بالاتر متریک ظاهر می‌یابد که به ناهنجاری رد معروف است:

$$\left\langle \mathrm{T}^{\mu}_{\mu} \right\rangle_{ren} = \alpha \Box R + \beta R_{\mu\nu} R^{\mu\nu} + \gamma R_{\mu\nu\rho\sigma} R^{\mu\nu\rho\sigma} \quad (1)$$

منشأ فیزیکی این پدیده،عدم یکتایی حالت خلأ کوانتومی در فضا–زمان‌های خمیده است که با استفاده از ضرایب بوگولیوبوف و نگاشت عملگرهای خلق و نابودی $\hat{b}_k = \sum_i \left(\alpha_{ki} \hat{a}_i + \beta_{ki} \hat{a}_i^\dagger \right)$ بین ناظرهای مختلف طبقه‌بندی می‌شود[5].اگرچه این تکنیک شبه‌کلاسیک نخستین بار برای اثبات گسیل گرمایی از افق رویداد سیاهچاله‌ها و محاسبه دمای مراجع آن‌ها به کار گرفته شد [۲]، اما کاربرد این روش در هندسه‌های فاقد افق رویداد مانند کرم‌چاله‌های قابل عبور و تکینگی‌های عریان،ابعاد جدیدی از فرآیند گسیل انرژی و ناپایداری‌های کوانتومی را آشکار می‌سازد. در این راستا، یکی از کلیدی‌ترین بسترها برای مطالعه این پدیده‌ها در غیاب افق، متریک JNW است.این متریک یک پاسخ دقیق، پایا و با تقارن کروی از معادلات اینشتین جفت‌شده با یک میدان اسکالر بدون جرم کلاسیکی می‌باشد.شایان ذکر است که از منظر فضازمان‌های تعمیم‌یافته،متریک سه‌پارامتری JNW حالت خاصی از خانواده بزرگتری از هندسه‌های وابسته به پارامتر تغییر شکل گاما است.در پژوهش‌های اخیر، این ساختارهای گاما–اسکالر به فضازمان‌های پیچیده‌تر حاوی بارهای دایونیک و طعم‌های گرانومغناطیس(Taub-NUT)[0,11,12] و حتی جفت‌شدگی‌های انحنا–اسکالر ناهموردا [13]تعمیم یافته‌اند. همچنین بر اساس تبدیل‌های بوخدال، فضازمان‌های شتاب‌دار

مبتنی بر گاما–متریک‌ها توسعه یافته‌اند که در آن‌ها پتانسیل مؤثر و پایداری مدارهای دایره‌ای به شدت به توان‌های مختلف پارامتر وابسته است [۱۴]. با این حال، علی‌رغم این تعمیم‌های هندسی، بررسی برهم‌کنش میدان کلاین–گوردون در حضور پتانسیل کلمن–واینبرگ بر روی حدّ خالص کرم‌چاله‌ای این خانواده (متریک JNW)کماکان مسأله‌ای بکر است که در این مقاله در بستر آن به محاسبات نیمه‌کلاسیک می‌پردازیم. شکل صریح هندسه این فضا–زمان به صورت زیر تعریف می‌شود.[6]

$$ds^2=(1-\frac{b}{r})^{\gamma}dt^2-(1-\frac{b}{r})^{-\gamma}dr^2-(1-\frac{b}{r})^{1-\gamma}r^2(d\theta^2+\sin^2\theta d\varphi^2) \quad (2)$$

در این متریک، پارامتر بی‌بعد γ با جرم M و بار اسکالر q به صورت زیر مرتبط است: $\gamma=\frac{M}{\sqrt{M^2+q^2}}$ ازآنجایی که جرم فیزیکی سیستم همواره مقداری مثبت و غیرصفر است،پارامتر گاما نیز در این پژوهش شرط مثبت بودن را ارضا می‌کند.از منظر هندسه فضا–زمان‌های تعمیم‌یافته سه‌پارامتری،این ساختار متناظر با حالتی است که شرط ابعادی جفت‌شدگی‌ها در نزدیک گلوگاه، منجر به برقراری رابطه هندسی $\gamma^2+\sigma^2=1$ (که در آن σ بار اسکالر عریان است) می‌گردد و ماهیت تکینگی عریان سیستم را مشخص می‌کند [10,14]شایان ذکر است که رفتار هندسی این فضا زمان به ماهیت میدان اسکالر وابسته است،در حالت استاندارد با بار اسکالر حقیقی،بازه‌ی $0\prec\gamma\prec 1$ توصیف کننده‌ی یک تکینگی عریان است،اما در سناریوهای کرمچاله‌ی عبورپذیر JNW که در این پژوهش مورد بررسی قرار داده ایم،با تغییر متغیر به دستگاه مختصات هموردا و با فرض موهومی بودن بار اسکالر جهت تامین ماده ی عجیب در گلوگاه،ساختار مخرج تغییر کرده و شرط $\gamma\succ 1$ برقرار شده و هندسه به یک کرمچاله‌ی عبور پذیر تبدیل خواهد شد[2].طبق تحلیل‌های بنیادی موریس و ثورن، برای باز نگه داشتن گلوی یک کرمچاله قابل عبور،نیازمند یک ماده عجیب هستیم که شرط انرژی ضعیف را نقض کرده و فشار منفی عظیمی اعمال نماید[7].شرط انرژی ضعیف عبارت است از: $\rho\geq 0,\rho+P_i\geq 0$ از آنجایی که میدان اسکالر جفت‌شده در متریک JNW (به ویژه در حالت پخشی با گاما بزرگتر از یک) می‌تواند شرط انرژی را نقض کند،این خمینه بستری ایده‌آل برای مدل‌سازی کرم‌چاله در یک سناریوی فیزیکی واقع‌گرایانه فراهم می‌آورد.نکته اساسی و محور اصلی این پژوهش آن است که فرآیند تولید ذرات کوانتومی و قطبش خلا، یک پدیده یک‌طرفه و منفعل نمی‌باشد. ذرات هاوکینگ خلق‌شده از خلا کوانتومی، همگی دارای انرژی و تکانه هستند؛این ذرات به دلیل دارا بودن تکانه بازبهنجارشده، یک چگالی تانسور انرژی–تکانه مؤثری را پدید می‌آورند که بر اساس اصول نسبیت عام،مستقیماً وارد سمت راست معادلات میدان نیمه‌کلاسیک اینشتین می‌شود .این سهم کوانتومی خلا،به عنوان یک چشمه گرانش،متریک زمینه و هندسه فضا–زمان JNWرا مختل می‌کند .تانسور انرژی–تکانه مؤثر ناشی از این ذرات را می‌توان به صورت $T_{\mu\nu}^{eff}=T_{\mu\nu}^{classical}+\langle\hat{T}_{\mu\nu}\rangle_{ren}$ نوشت[5].در فضازمان‌های کرم‌چاله‌ایJNW ،پایداری ساختار سیستم در گرو ورود همین تانسور انرژی–تکانه ذرات خلق‌شده به سمت راست معادله انیشتین می‌باشد .از آنجایی که پایداری کرم‌چاله به تعادل دقیق بین فشار میدان‌های چشمه و انحنای گرانشی بستگی دارد،ورود تکانه بازبهنجارشده‌ی ذرات تولیدشده از خلا به درون منبع گرانش می‌تواند این تعادل را برهم بزند .این اختلال مشخص می‌کند که آیا یک کرمچاله JNW در مواجهه با قطبش خلا و تولید ذرات پایدار می‌ماند یا اینکه دچار ناپایداری‌های دینامیکی شده و به یک فاز هندسی دگرگون‌شده فرو می‌پاشد.همچنین وجود پتانسیل کلمن و اینبرگ به عنوان یک منبع اختلالی به لاگرانژین میدان اسکالر بدون جرم افزوده می‌شود تا نقش آن در کنار تکانه ذرات هاوکینگ بر فضا–زمان کرمچاله JNWظاهر شود .شکل عمومی این پتانسیل به صورت زیر است[8]:

$$V_{CM}(\phi)=\lambda\left[\phi^4\ln\left(\frac{\phi}{\phi_0}\right)-\frac{1}{4}\phi^4+\frac{1}{4}\phi_0^4\right] \quad (3)$$

در این رابطه، λ ثابت جفت‌شدن بدون بعد و Φ_0 یک ثابت است. این پتانسیل که نسخه تعمیم‌یافته پتانسیل هیگز است و ساختاری لگاریتمی دارد،نقش مهمی در تورم کیهان‌شناسی و گذار فاز کیهانی تابش به ماده ایفا می‌کند.محاسبات نشان می‌دهند که این پتانسیل سهمی قابل توجه روی تصحیح دمای موثر سیستم دارد[9]: $T_{eff}=T_H\left(1+\delta(\Phi,\lambda,\sigma)\right)$ و نیز چگونگی تغییر شرط

انرژی ضعیف در ناحیه گلوگاه کرم‌چاله تحت تأثیر جمله پتانسیل[7]:

$$\rho + p_r = \rho_{GNW} + \rho_{CW} + p_r^{GNW} + p_r^{CW} \leq 0 \qquad (4)$$

در واقع برای تعیین حالت نهایی تبخیر متریک JNW باید معادله اینشتین را با لحاظ کردن شکل دقیق تانسور انرژی تکانه میدان کولنتومی کلاین‌گوردون متاثر از پتانسیل کلمن‌واینبرک به توسط معادله پایستگی انرژی تکانه $\nabla_\mu \left\langle T^\mu_\nu \right\rangle_{ren} = 0$ و ناهنجاری رد (1) تعیین کرد این هدف کار بعدی است و در این مقاله تنها به بررسی پدیده تبخیر کرم‌چاله و ناپایداری کوانتومی آن پرداختیم اما تحلیل کیفی نشان می‌دهد که ورود این ذرات با تکانه بازبهنجارشده به معادله میدان، کرم‌چاله JNW را به کدام‌یک از سناریوهای هندسی محتمل هدایت خواهد کرد:

سناریوی اول (فروپاشی به سیاهچاله) :اگر تکانه بازبهنجارشدهٔ ذرات و جملهٔ پتانسیل،چگالی انرژی را به گونه‌ای تغییر دهند که شرط انرژی ضعیف (WEC) در گلوگاه برقرار شده و خاصیت ماده غریب ازدست برود،گلوگاه کرم‌چاله فروریخته و با شکل‌گیری افق رویداد، ساختار نهایی به یک سیاهچالهٔ معمولی با جرم کوچک تبدیل می‌شود.

سناریوی دوم (تشکیل تکینگی عریان) :اگر پارامتر گاما در طی فرآیند تبخیر و اختلال متریک به مقداری کوچکتر از یک کاهش یابد، سیستم دیگر یک کرم‌چاله نبوده و به یک تکینگی عریان تبدیل می‌شود که اصل سانسور کیهانی را نقض می‌کند.

سناریوی سوم (رسیدن به یک باقی‌مانده پایدار کوانتومی) : محتمل‌ترین سناریو از منظر گرانش نیمه‌کلاسیک این است که زوال ساختار در مقیاس پلانک متوقف شده و سیستم به یک پسماند میکروسکوپی پایدار یا یک ساختار توپولوژیکی کوانتومی برسد که دیگر انرژی گسیل نمی‌کند.

نتیجه گیری

در این پژوهش، برهم‌کنش میدان اسکالر کلاین‌گوردون با کرم‌چاله JNWدر حضور پتانسیل کلمن–واینبرگ بررسی شد.از آنجایی که متریک JNW فاقد افق رویداد متعارف است،امکان استفاده از روش‌های رایج مبتنی بر گرانش سطحی برای تعیین دمای سیستم وجود ندارد.در این راستا،فرآیند گسیل به عنوان یک مکانیسم شبه‌کلاسیکِ خلق ذرات در فضازمان خمیده مدل‌سازی گردید؛به طوری که با محاسبه صریح ضرایب بوگلیوبوف و استخراج تابع توزیع آماری طیف پلانک،دمای مؤثر (هاوکینگ) این کرم‌چاله مستقیماً حاصل شد.همچنین مشخص گردید که تصحیحات پتانسیل کلمن–واینبرگ سهم مهمی در اصلاح این دما و تغییر شرط انرژی ضعیف در گلوگاه دارند.در نهایت،اگرچه تعیین قطعی سرنوشت سیستم مستلزم حل صریح معادله پس‌زنیِ تانسور انرژی–تکانه بازبهنجار شده است،اما بر مبنای تحلیل کیفی،ورود تکانه بازبهنجار شده‌ی این ذرات خلق‌شده می‌تواند هندسه کرم‌چاله را به یکی از سه سناریوی گفته شده هدایت کند که هدف اصلی پژوهش آینده می‌باشد.

مرجع‌ها

[1]Goroff, M. H., & Sagnotti, A. (1986). The ultraviolet behavior of Einstein gravity. *Nuclear Physics B*, 266(3-4), 709-736
[2]Ghaffarnejad, H. (2025). Coleman-Weinberg potential and creation of boson particles at the JNW wormhole. *Spacetime*, 50, 102105
[3] Green, M. B., Schwarz, J. H., & Witten, E. (2012). *Superstring theory: Volume 1, Introduction*. Cambridge University Press.
[4]Ghaffarnejad, H. (2007). *Physical Review D*, 75(8), 084009
[5]Birrell, N. D., & Davies, P. C. (1984). *Quantum fields in curved space*. Cambridge University Press..
[6]Janis, A. I., Newman, E. T., & Winicour, J. (1968). Reality of the Schwarzschild singularity. *Physical Review Letters*, 20(16), 878.
[7]Morris, M. S., & Thorne, K. S. (1988). Wormholes in spacetime and their use for interstellar travel: A tool for teaching general relativity. American Journal of Physics, 56(5), 395-412.
[8]Coleman, S., & Weinberg, E. (1973). Radiative corrections as the origin of spontaneous symmetry breaking. Physical Review D, 7(6), 1888.
[9]Parker, L., & Toms, D. (2009). Quantum field theory in curved spacetime: Quantized fields and gravity. Cambridge University Press
[10]A. Azizallahi, B. Mirza, A. Hajibarat, and H. Anjomshoa, Three parameter metrics in the presence of a scalar field in four and higher dimensions, arXiv:2307.09328.(2023)
[11]A. Derekeh, B. Mirza, P. Heidari, F. Sadeghi, and R. Bahani, A class of Taub-NUT-scalar metrics via Ehlers transformations, arXiv:2406.05458 .(2024)
[12]M. T. Kachi, B. Mirza, and F. Sadeghi, A class of charged-Taub-NUT-scalar metrics via Harrison and Ehlers transformations, arXiv:2501.11934.(2025)
[13]F. Sadeghi, B. Mirza, and M. Moradzadeh, A class of charged and charged-Taub-NUT metrics in the presence of a massless scalar field and some of their astrophysical aspects, arXiv:2506.09922.(2025)
[14] H. Anjomshoa, B. Mirza, and A. Azizallahi, Accelerating FJNW Metric, arXiv:2512.22328 (2025).

پیشرفت نظامند گرمایش شراره‌ای از نقطه تهی مغناطیسی تا پایه‌های نورسپهری

راضیه حسینی[۱]، دینگ یوآن[۲]، احسان توابی[۳]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه زابل، زابل

[۲] آزمایشگاه کلیدی پیش‌بینی عددی طوفان فضایی شنژن، موسسه علوم فضایی و فناوری کاربردی، موسسه فناوری هاربین، شنژن، گوانگدونگ، جمهوری خلق چین

[۳] گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور ، تهران

چکیده

این پژوهش، یک مطالعه‌ی رصدی در مورد بررسی عدم تعادل شار مغناطیسی مثبت و منفی و چگونگی توالی گرمایش در شراره‌های خورشیدی مشاهده‌شده در فیلترگرام‌های اس‌دی‌او/ای‌آی‌ای ارائه می‌دهد. در یک ناحیه‌ی ۲۵ × ۲۵ ثانیه قوسی که بر روی یک نقطه‌ی روشن شراره‌ای متمرکز شده است، نسبت $\frac{\Phi_+ + \Phi_-}{\Phi_+ + |\Phi_-|}$ *چندین ساعت قبل از شروع شراره به کم‌ترین مقدار یعنی کم‌تر از ۰/۵ می‌رسد، که بیشترین تعادل بین دو شار منفی و مثبت در این سیستم را نشان می‌دهد و پس از آن این نسبت روند صعودی پیدا می‌کند و شروع یک عدم تعادل را نشان می‌دهد. بازسازی‌های اندازه‌گیری تابش تفاضلی در محدوده‌ی ۰/۳ تا ۱۰ میلیون کلوین، یک توالی گرمایش نظام‌مند را در سراسر زیرساخت‌های شراره نشان داد. نقطه تهی مغناطیسی قبل از روشن شدن نوار (تقریبا ۲۶ ثانیه) و پایه‌های نورسپهری (بیش از ۲ دقیقه) به اوج خود می‌رسند.*

واژه های کلیدی: *فعالیت – خورشید: جو – خورشید: تاج خورشیدی – خورشید: میدان‌های مغناطیسی – خورشید: نورسپهر*

Systematic Progression of Flare Heating from Magnetic Null Points to Photospheric Footpoints

Razieh Hosseini[1], Ding Yuan[2], Ehsan Tavabi[3]

[1] Department of Physics, Faculty of Science, University of Zabol, 98613-35856, Zabol, Iran

[2] Shenzhen Key Laboratory of Numerical Prediction for Space Storm, Institute of Space Science and Applied Technology, Harbin Institute of Technology, Shenzhen, Guangdong, People's Republic of China

[3]Physics Department, Payame Noor University (PNU), 19395-3697 Tehran, Iran

Abstract

This study presents an observational study investigating the imbalance of positive and negative magnetic flux and how the heating sequence in solar flares is observed in AIA/SDO filtergrams. Within a 25 × 25 arcsec region centred on a flare bright point, The $\frac{\Phi_+ + \Phi_-}{\Phi_+ + |\Phi_-|}$ *ratio reaches its lowest value, less than 0.5, several hours before the flare begins, which indicates the greatest balance between the two negative and positive fluxes in this system, and then this ratio starts to increase and it shows the beginning of an imbalance. Differential emission measure (DEM) reconstructions spanning 0.3–10 MK revealed a systematic heating sequence across flare substructures. Magnetic null point peaked before ribbon brightenings (~ 26 s) and photospheric footpoints (more than 2 min).*

***Keywords**: activity – Sun: atmosphere – Sun: corona – Sun: magnetic fields – Sun: photosphere*

مقدمه

شراره‌های خورشیدی[۱] از جمله چشم‌گیرترین و پرانرژی‌ترین جلوه‌های فعالیت خورشیدی هستند که نشان‌دهنده آزادسازی ناگهانی انرژی مغناطیسی ذخیره شده در تاج خورشیدی می‌باشند [۱]. آن‌ها زمانی رخ می‌دهند که میدان‌های مغناطیسی تاج خورشیدی با تنش بالا، دچار تغییر ناگهانی پیکربندی شده و به حالت کم‌انرژی‌تری منتقل می‌شوند [۲]. تبدیل سریع انرژی مغناطیسی به گرمایش پلاسما و حرکت توده‌ای، تابش در فام‌سپهر و تاج را در گستره وسیعی از طول‌موج‌ها افزایش می‌دهد. بنابراین، اندازه‌گیری‌های مستقیم میدان‌های مغناطیسی قبل و بعد از شروع

[۱] Solar flare

شراره از نظر علمی و عملی اهمیت دارند و بینش مهمی در مورد فرآیندهای اتصال مجدد و پیامدهای آن‌ها برای محصورسازی پلاسما ارائه می‌دهند [۳]. تشخیص انتقال انرژی شراره به‌طور ویژه مهم است؛ همچنین زمان‌بندی نسبی گرمایش در زیرساختارهای متمایز مانند: نقاط تهی[۲] مغناطیسی، بالای حلقه‌های تاجی، روبان‌های شراره، پایه‌های فام‌سپهری و صفحات پلاسمای فوق قوسی. مدل استاندارد شراره پیش‌بینی می‌کند که اتصال مجدد ابتدا در تاج خورشیدی رخ می‌دهد و پس از آن رسوب انرژی در فام‌سپهر ادامه می‌یابد [٤]. تجزیه و تحلیل اندازه‌گیری تابش و اندازه‌گیری تابش تفاضلی[۳] با اس‌دی‌او/ای‌آی‌ای ابزاری قدرتمند برای یافتن این اختلافات زمانی در آهنگ‌های بالا ارائه می‌دهد. نقاط تهی مغناطیسی و صفحات جریان مرتبط، مکان‌های ترجیحی برای اتصال مجدد هستند [۵]. این اختلاف زمانی در گرمایش یک نکته کلیدی در تعیین چگونگی انتشار انرژی است. همچنین مشخص می‌کند که چقدر طول می‌کشد تا پلاسمای جو خورشید در اثر پدیده‌ی شراره‌ای دستخوش تغییر شود. همچنین برای کالیبره کردن و اعتبارسنجی مدل‌های پیچیده مگنتوهیدرودینامیک[٤] استفاده می‌شود.

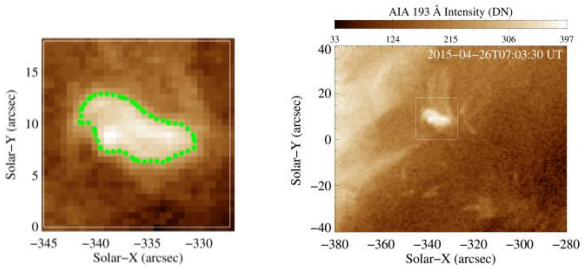
مشاهده و تحلیل داده‌ها

رصدخانه دینامیک خورشیدی (اس‌دی‌او؛ [٦]) مجهز به مجموعه تصویربرداری جوی (ای‌آی‌ای؛ [٦]) به همراه تصویرگر لرزه‌نگاری و مغناطیسی (اچ‌ام‌ای؛ [۷]) است. در این پژوهش از داده‌های ابزار ای‌آی‌ای و اچ‌ام‌ای استفاده می‌شود. ابزار ای‌آی‌ای تصاویر را در هشت باند عبور مجزا (به عنوان مثال دو باند آن، ۳۰٤ آنگستروم، ۱۹۳ آنگستروم) با اندازه سلولی ۰/٦ ثانیه قوسی ثبت می‌کند. پلاسمای جو خورشید در دماهای مختلف این تصاویر را برای تابش فرابنفش و فرابنفش شدید ایجاد می‌کند. آهنگ زمانی تصاویر فرابنفش شدید ۱۲ ثانیه است. برای این تحقیق، از مغناطیس‌نگارهای راستای خط دید با آهنگ تقریبی ٤۵ ثانیه و اندازه سلولی ۰/۵ ثانیه قوسی استفاده می‌شود. هدف، بررسی یک نقطه روشن در مرز حفره تاجی در ۲٦ آوریل ۲۰۱۵ است. اهمیت این داده قرارگیری نقطه‌روشن در یک پس‌زمینه تاریک در مرز حفره تاجی و خورشید آرام، همچنین در ناحیه مناسبی نسبت به مرکز خورشید است. عنصر مغناطیسی با قطبیت مخالف مجزا، در پس‌زمینه‌ی تاریک حفره‌ی تاجی قرار گرفته و نمایی بدون مانع از ابتدایی‌ترین ساختار پلاسمای گرم‌شده ارائه می‌دهد. کادر سفید در شکل ۱ (پنجره سمت راست) میدان دید نقطه روشن را نسبت به مرکز خورشید نشان می‌دهد. پنجره سمت چپ شکل ۱ نمای نزدیکی از کادر سفید را به همراه مرز نقطه روشن (نقاط سبز) در ۱۵۰ DN نشان می‌دهد.

تحول شدت نقطه روشن و تحول شار مغناطیسی

یک ناحیه ۲۵×۲۵ ثانیه قوسی را با مرکزیت نقطه روشن در نظر گرفته شد که کاملا آن را پوشش می‌دهد و میانگین شدت این ناحیه در تصاویر ای‌آی‌ای ۱۹۳ آنگستروم و ۳۰٤ آنگستروم به دست آمد. برای آماده‌سازی تصاویر خام و غیرکالیبره‌ی، ای‌آی‌ای و اچ‌ام‌آی جهت بررسی و تحلیل، از دستورهای aia_prep.pro و hmi_prep.pro از بسته نرم‌افزاری اس‌اس‌دبلیو[۵] برای تبدیل داده‌ها از سطح ۱ به سطح ۱/۵ استفاده شد. همچنین دستور drot_map.pro برای هم‌مکان‌سازی تصاویر نقطه روشن در زمان‌های مختلف به‌کارگیری شد. طبق شکل ۲، شش بیشینه واضح از ساعت ۰۳:٤۳:۳۰ تا ۲۰:۲۲:۳۰ به وقت جهانی مشاهده می‌شود. همانطور که از شکل ۲ مشخص است، بیشینه‌ها (Stage 1, …, Stage 6) در هر دو طول موج ۱۹۳ آنگستروم و ۳۰٤ آنگستروم همزمان هستند. با استفاده از مگنتوگرام‌های اچ‌ام‌آی/اس‌دی‌او، در ناحیه‌ای با اندازه ۲۵×۲۵ ثانیه قوسی به مرکزیت نقطه روشن، شارهای مغناطیسی مثبت و منفی کل بدون علامت در همان بازه زمانی شکل ۲ برای میدان‌های $|B|>30G$ به دست آمد. شکل ۳ شار مغناطیسی نورسپهری در راستای خط دید (پنجره بالا) و تعادل شار (پنجره پایین) را نشان می‌دهد، که در آن شار با ضریب $1/\cos(\alpha)$ اصلاح می‌شود و α زاویه بین محل نقطه روشن و

[۲] Null points
[۳] Differential emission measures (DEM)
[۴] Magnetohydrodynamics
[۵] SolarSoftWare (SSW)

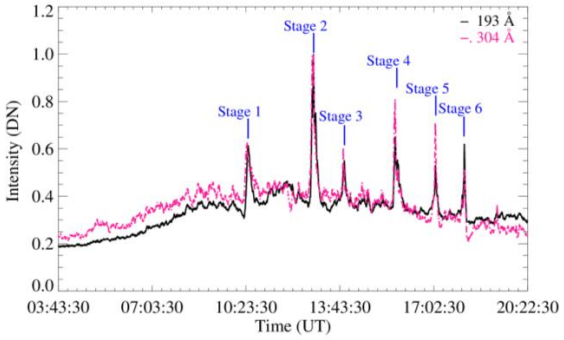


شکل ۱. پنجره سمت راست تصویر ۱۹۳ آنگستروم ای‌آی‌ای با مقیاس ثانیه قوسی در تاریخ ۲۶ آوریل ۲۰۱۵، ساعت ۰۷:۰۳:۳۰ به وقت جهانی را نشان می‌دهد، کادر سفید رسم شده روی آن، میدان دید نقطه روشن مدنظر را مشخص می‌کند و پنجره سمت چپ نمای نزدیکی از کادر سفید و مرز (نقاط سبز، (نقاط سبز، DN ۱۵۰) نقطه روشن در حال ظهور را ارائه می‌دهد. DN ۱۵۰) نقطه روشن در حال ظهور را ارائه می‌دهد.

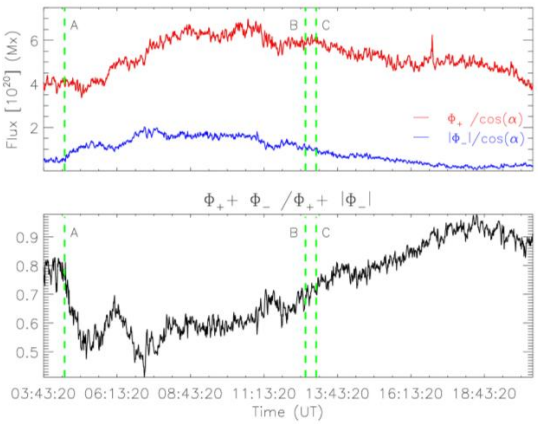
مرکز قرص خورشیدی است [۸]. این تصحیح به دلیل انحنای سطح خورشید و زاویه بین راستای خط دید ناظر با خط عمود بر سطح خورشید در محل نقطه روشن انجام می‌شود. خط‌چین عمودی سبز A شروع افزایش شار منفی و خط‌چین‌های عمودی B و C حدود زمان شروع و پایان Stage 2 را مشخص می‌کنند.

تحلیل اندازه‌گیری تابش Stage 2

تمرکز بر Stage 2 قرار گرفت، به عنوان قوی‌ترین مرحله آزادسازی انرژی و سپس از تحلیل اندازه‌گیری تابش تفاضلی قابل محاسبه به روش‌های مختلف، استفاده شد. این تحلیل اجازه می‌دهد که توزیع انرژی حرارتی در پدیده‌های پویای تاج خورشید قابل ردیابی باشد. در واقع یک روش وارون‌سازی است که با توجه به شدت در طول‌موج‌های مختلف یک دید دمایی از پدیده ایجاد می‌کند. یکی از بهترین روش‌ها برای این منظور، روش وارونگی پراکنده است. در این روش با کمک شش باند طول‌موجی اس‌دی‌او/ای‌آی‌ای (۹۴، ۱۳۱، ۱۷۱، ۱۹۳، ۲۱۱ و ۳۳۵ آنگستروم) و دستور aia_sparse_em_init.pro برای یک بازه دمایی لگاریتمی برابر با ۰/۱ با حدود دمایی ۰/۷–۵/۵ = logT[K]، یک راه‌حل اندازه‌گیری تابش تفاضلی بر اساس سلول به سلول از ناحیه منتخب حاصل شد (شکل ٤، پنجره سمت چپ، بالا) [۹]. ویژگی‌های این روش شامل استفاده از توابع پایه‌ای و شرط مثبت بودن و تنک‌سازی‌ست. محبوبیت این روش به دلیل سرعت بالا، پایداری در برابر نویز و کد در دسترس آن است. تحلیل اندازه‌گیری تابش تفاضلی تجسم منسجمی از تحول حرارتی در سراسر زیرساخت‌های شراره در مراحل پیش از شراره، شراره و پس ازشراره ارائه می‌دهند و تحول مکانی و زمانی گرمایش پلاسما را برجسته می‌کنند. برای این منظور با بررسی بصری دقیق پدیده در زمان‌های متوالی سعی شد نقطه‌ی تهی مغناطیسی (R2)، نوار شراره (R3)، نواحی پایه فام‌سپهری (R1 و R4) به دقت شناسایی شوند.

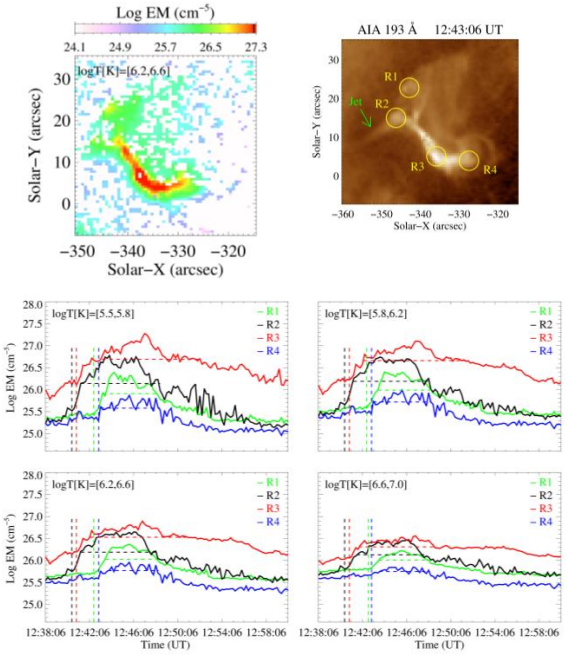


شکل ۲. سری زمانی میانگین شدت نقطه روشن در میدان دید ۲۵×۲۵ ثانیه قوسی با مرکزیت نقطه روشن برای ای‌آی‌ای ۱۹۳ آنگستروم و ۳۰٤ آنگستروم. پیک‌های میانگین شدت با Stage 1, …, Stage 6 مشخص شده‌اند.



شکل ۳. تحول زمانی قدر مطلق شار مغناطیسی کل مثبت و منفی را در بازه زمانی شکل ۲. ارائه می‌دهد. پنجره پایین، منحنی تعادل شار نسبت به زمان را نشان می‌دهد. خط‌چین سبز A شروع افزایش شار منفی و خط‌چین‌های B و C حدود زمان شروع و پایان Stage 2 را مشخص می‌کنند.

برای رسم منحنی‌های اندازه‌گیری تابش بر حسب زمان برای این چهار نقطه، مساحت‌های یکسانی بر اساس مراکز دایره‌های زرد رنگ مشخص‌شده در شکل ٤ برای R1، R2، R3 و R4 در نظر گرفته شد و میانگین اندازه‌گیری تابش برای این نواحی از ساعت ۱۲:۳۸ تا ۱۳:۰۰ محاسبه گردید (پنجره پایین شکل٤). خط‌چین‌های عمودی در پنجره پایین شکل ٤ شروع افزایش هر منحنی را نشان می‌دهد.



شکل ٤. پنجره سمت راست (بالا) چهار ناحیه‌ی منتخب برای بررسی توالی زمانی گرمایش پلاسما را نشان می‌دهد: نقطه‌ی تهی مغناطیسی (R2)، نوار شراره (R3)، نواحی پایه فام‌سپهری (R1 و R4). پیکان سبز، جت فورانی از نقطه‌ی تهی (R2) را مشخص می‌کند. پنجره سمت چپ (بالا) نمونه‌ای از محاسبات اندازه‌گیری تابش را نشان می‌دهد. پنجره پایین تحول زمانی اندازه‌گیری تابش مربوط به R1، R2، R3 و R4 در مقیاس لگاریتمی محدوده دمایی ۵/۸–۵/۵ (پنجره بالا سمت چپ)، ۶/۲–۵/۸ (پنجره بالا سمت راست)، ۶/۶–۶/۲ (پنجره پایین سمت چپ) و ۷/۰–۶/۶ (پنجره پایین سمت راست). خط‌چین‌های عمودی و افقی به ترتیب نقاط شروع افزایش منحنی‌های اندازه‌گیری تابش و پهنا در نصف مقدار بیشینه مربوط به اندازه‌گیری تابش هستند.

نتیجه‌گیری

در یک ناحیه‌ی ۲۵ × ۲۵ ثانیه قوسی که بر روی یک نقطه‌ی روشن شراره‌ای متمرکز شده است، شارهای مغناطیسی علامت‌دار و بدون علامت برای تعیین کمیت تحول و همبستگی آن‌ها با گرمایش تاج خورشیدی ردیابی شدند. نسبت $\frac{\Phi_+ + \Phi_-}{\Phi_+ + |\Phi_-|}$ چندین ساعت قبل از شروع شراره به کم‌ترین مقدار یعنی کم‌تر از ۰/۵ می‌رسد، که بیشترین تعادل بین دو شار منفی و مثبت در این سیستم را نشان می‌دهد و پس از آن این نسبت روند صعودی پیدا می‌کند. یعنی قبل از شروع شراره (خط‌چین‌های سبز B و C در شکل ۳، Stage 2) روند عدم تعادل بین شار مثبت و منفی آغاز می‌شود. بازسازی‌های اندازه‌گیری تابش تفاضلی (شکل ٤، پنجره پایین) در محدوده‌ی ۰/۳ تا ۱۰ میلیون کلوین، یک توالی گرمایش نظام‌مند را در سراسر زیرساخت‌های شراره نشان داد. نقطه تهی (R2) قبل از سایر قسمت‌های شراره گرمایش را نشان می‌دهد، تقریبا ۲٦ ثانیه قبل از R3 و بیشتر از ۲ دقیقه پیش از R1 و R4.

مرجع‌ها

[1] David F. Webb and Timothy A. Howard; **"**Coronal Mass Ejections: Observations**"**; *Living Reviews in Solar Physics*, **vol. 9** (2012) 3.
[2] J. J. Sudol and J. W. Harvey, **"**Longitudinal Magnetic Field Changes Accompanying Solar Flares**"**; *The Astrophysical Journal*, **vol. 635** (2005) 647.
[3] J. Qiu, J. Lee, D. E. Gary, H. Wang, "Motion of Flare Footpoint Emission and Inferred Electric Field in Reconnecting Current Sheets"; *The Astrophysical Journal*, **vol. 565** (2002) 1335.
[4] R. O. Milligan, B. R. Dennis, "Velocity Characteristics of Evaporated Plasma Using Hinode/EUV Imaging Spectrometer"; *The Astrophysical Journal*, **vol. 699** (2009) 968.
[5] G. Aulanier, M. Janvier, B. Schmieder, "The Standard Flare Model in Three Dimensions. I. Strong-to-weak Shear Transition in Post-flare Loops"; *Astronomy & Astrophysics*, **vol. 543** (2012) A110.
[6] J. R. Lemen, et al., "The Atmospheric Imaging Assembly (AIA) on the Solar Dynamics Observatory (SDO)"; *Solar Physics*, **vol. 275** (2012) 17.
[7] P. H. Scherrer, et al., "The Helioseismic and Magnetic Imager (HMI) Investigation for the Solar Dynamics Observatory (SDO)"; *Solar Physics*, **vol. 275** (2012) 207.
[8] S. Matsumoto, E. Verwichte, C. Foullon, "Co-existence of Slow Magnetoacoustic Waves and Thermal Limit Cycles in a Coronal Bright Point"; *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **vol. 544** (2025) 587.
[9] M. C. M. Cheung, P. Boerner, C. J. Schrijver, P. Testa, F. Chen, H. Peter, A. Malanushenko, "Thermal Diagnostics with the Atmospheric Imaging Assembly on board the Solar Dynamics Observatory: A Validated Method for Differential Emission Measure Inversions"; *The Astrophysical Journal Supplement*, **vol. 807** (2015) 143.

بهینه‌سازی دقت زاویه‌ای آرایه بهمن هوایی البرز

خالقی ماکلوانی، سعید[۱] ؛ بهمن‌آبادی، محمود[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شریف ، تهران

چکیده

در این مقاله، راهکار های مختلفی برای آرایه بهمن هوایی البرز با هدف بهینه‌سازی دقت جهت‌یابی بهمن‌های هوایی مورد بررسی قرار گرفتند. شبیه‌سازی بهمن‌ها در سه انرژی و سه زاویه مختلف با استفاده از نرم‌افزار CORSIKA انجام شد. عملکرد آرایه بر اساس نرخ ثبت بهمن و خطای زاویه‌ای جهت‌یابی ارزیابی گردید. نتایج نشان می‌دهد که در نهایت می‌توان با استفاده از چیدمان خوشه‌ای با اعمال شرط مبتنی بر میانگین مربعات خطا(MSE) به دقت زاویه‌ای بهتری حدود 2° دست یافت. هرچند این بهبود با کاهش نرخ ثبت بهمن‌ها همراه است.

واژه‌های کلیدی: *آرایه بهمن هوایی، بهمن‌های هوایی گسترده، دقت جهت‌یابی، چیدمان آشکارساز، شبیه‌سازی کورسیکا*

Optimizing the Angular Accuracy of the Alborz Air Shower Array

Khaleghi maklavani, Saeed[1]; Bahmanabadi, Mahmud[1]

[1] Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran

Abstract

In this paper, various approaches were proposed for the Alborz air shower array, aiming to optimize the accuracy of shower direction reconstruction. Air showers were simulated using the CORSIKA software for three different energies and three angular ranges. The performance of Array was evaluated based on the shower detection rate and the angular reconstruction error. The results indicate that, ultimately, the clustered layout when the mean square error (MSE)-based criterion is applied achieves a better angular accuracy of about 2°; although, this improvement is accompanied by a reduction in the shower detection rate.

Keywords: *Air shower array, Extensive air shower, direction reconstruction accuracy, detector layout, CORSIKA simulation*

PACS No. (۹۴)

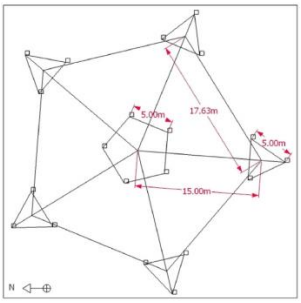
مقدمه

هنگامی که یک ذره کیهانی وارد جو زمین می‌شود، بر اثر واکنش‌های متوالی ذرات جدیدی تولید شده که به آن بهمن هوایی گفته می‌شود. از آنجا که در پژوهش‌های پیشین در این رصد خانه به خطای جهت‌سنجی ناشی از هندسه بهمن‌های هوایی پرداخته نشده است، در این مقاله سعی در بهینه‌سازی دقت زاویه‌ای بهمن با استفاده از نحوه‌ی آرایش آشکارسازها است، به‌گونه‌ای که ضمن دستیابی به نرخ ثبت مناسب، بالاترین دقت ممکن در جهت‌یابی بهمن‌ها نیز حاصل شود. از طرفی چون هدف بهبود خطای ناشی از هندسه جبهه بهمن‌ها است، زمان‌های اندازه گیری شده در آشکارسازها به صورت ایده‌ال در نظر گرفته شده و زمان اولین ذره عبوری ملاک قرار می‌گیرد و از خطای سیستماتیک مرتبط با اندازه‌گیری زمان آشکارساز صرف نظر شده است. به منظور بررسی الگوهای مختلف چینش آشکارسازها و شروط اعمالی، از شبیه‌ساز CORSIKA [1] برای تولید بهمن‌های هوایی استفاده شده است. این رصد خانه به دلیل خصوصیات و ارتفاع ۱۲۰۰ متری که در آن قرار دارد می‌تواند در محدوده انرژی زانو، ذرات کیهانی و بهمن‌های هوایی ناشی از آنها را اندازه بگیرد. از

این رو ذره اولیه مورد استفاده پروتون و انرژی اولیه این ذرات در سه حالت 3×10^{14}، 10^{15} و 3×10^{15} الکترون‌ولت و در سه بازه زاویه سرسویی θ شامل -15° ،0°، -30° ،15° و -45° ،30° در نظر گرفته شدند؛ بنابراین، در مجموع ۹ مجموعه بهمن و برای هر مجموعه ۳۰۰ بار شبیه‌سازی انجام شد. سپس با بهره‌گیری از بهمن‌های شبیه‌سازی‌شده، عملکرد آرایش‌های پیشنهادی از نظر نرخ ثبت و دقت جهت‌یابی مورد ارزیابی قرار گرفت.

نحوه چیدمان آشکارسازها و شروط اعمالی بر آنها

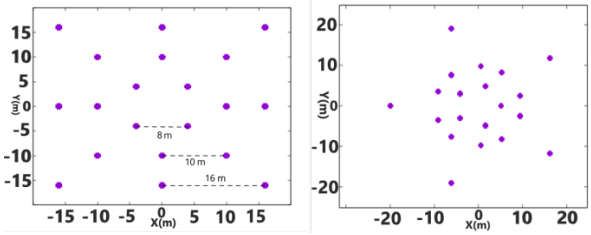
چیدمان اولیه مورد بررسی، ساختار خوشه‌ای است که در آن پنج آشکارساز در مرکز آرایه قرار دارند و پنج خوشه‌ی سه‌تایی از آشکارسازها در پیرامون آن‌ها مستقر شده‌اند.



شکل۱ : نحوه چیدمان آرایه البرز با ساختار خوشه‌ای.

دومین چیدمان، ساختار مربعی است که در آن آشکارسازها در سه لایه‌ی مربعی متحدالمرکز با فواصل منظم از یکدیگر چیده شده‌اند.

و سومین چیدمان ، ساختار خوشه‌ای معکوس نام دارد که در آن برخلاف چیدمان خوشه‌ای اول، پنج خوشه‌ی سه‌تایی به مرکز آرایه منتقل شده‌اند و پنج آشکارساز منفرد در اطراف آن قرار گرفته‌اند.



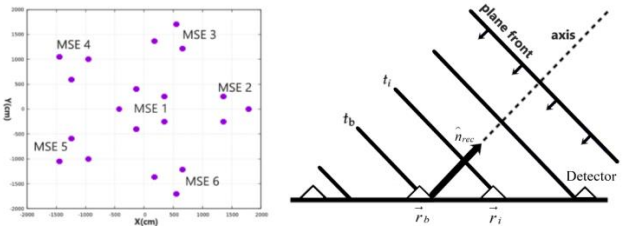
شکل۲ : نحوه چیدمان آرایه البرز. شکل سمت چپ ساختار مربعی، شکل سمت راست ساختار خوشه‌ای معکوس.

علاوه بر نحوه چیدمان آشکارسازها، برای هر ساختار، شرطی برای ثبت بهمن هوایی می‌گذاریم. این شرط موجب می‌شود بهمن‌هایی که هسته آن‌ها در فاصله‌ی زیادی از مرکز آرایه قرار دارند، با احتمال کمتری در محاسبات وارد شوند. این رویکرد موجب افزایش دقت در رصد و تحلیل داده‌ها خواهد شد. این شرط به‌گونه‌ای تعریف شده است که برای ثبت بهمن، ذرات باردار حداقل از ۱۵ آشکارساز ذرات بهمن هوایی عبور کنند و در این میان، آشکارسازهای مرکزی نیز الزاماً باید شامل این شرط باشند. به طوریکه در ساختار خوشه‌ای ۵ آشکارساز مرکزی و در ساختار مربعی نیز ۱۲ آشکارساز مرکزی باید جزو ۱۵ آشکارساز روشن باشند. در ساختار خوشه‌ای معکوس، ثبت بهمن مشروط به عبور ذرات از ۱۵ آشکارساز مرکزی است.

شرط مبتنی بر کمیت میانگین مربعات خطا

در بخش قبل سه رویکرد برای ثبت بهمن در نظر گرفته شد. در این بخش یک رویکرد چهارم معرفی می‌شود که آن استفاده از شرط مبتنی بر کمیت میانگین مربعات خطا، MSE، در چیدمان خوشه‌ای است.

کمیت MSE پیش‌تر در فرایند جهت‌سنجی نیز به‌کار گرفته شده است؛ به‌گونه‌ای که جهت بهمن با استفاده از مدل جبهه تخت برازش داده می‌شود.



شکل۳ : شکل سمت راست نمای دو بعدی از جبهه بهمن تخت به هنگام برخورد به آشکارسازها، شکل سمت چپ نام‌گذاری MSE های نسبت داده شده برای هر بخش از چیدمان خوشه‌ای

مطابق شکل ۳ در صورتی که جبهه بهمن در جهت $-\hat{n}_{rec}$ و تقریبا با سرعت ثابت نور به زمین برخورد کند، رابطه مدل بصورت زیر است:

$$t_i - t_b = -\frac{1}{c}\hat{n}_{rec}.(\vec{r}_i - \vec{r}_b) \qquad (۱)$$

در این رابطه $\vec{r}_i$ و t_i مکان و زمان آشکارسازها، $\vec{r}_b$ و t_b نیز مکان و زمان آشکارساز مرجع است. با استفاده از این مدل، می‌توان MSE را حساب کرد:

$$MSE = \frac{1}{N}\sum_i (t_i - t_i')^2 \quad (۲)$$

که در آن t_i زمان پیش‌بینی مدل و t_i' زمانی است که آشکارساز اندازه گرفته است. بعد از کمینه کردن این کمیت و یافتن جهت ذره اولیه می‌توان این کمیت را به‌صورت جزئی حساب کرد؛ بدین صورت که با استفاده از جهت تعیین شده با مدل صفحه‌ی تخت و مقدار متناظر $\hat{n}_{rec}$، مقدار میانگین مربعات خطا برای هر کدام از خوشه‌ها به صورت جداگانه بدست آورد. هر کدام مطابق شکل سمت چپ ۳ به‌صورت جداگانه $MSE\,i, i = 2,3,...,6$ نام‌گذاری می‌شوند.

در بهمن‌های هوایی، چگالی ذرات در نواحی نزدیک به هسته بیشتر است و از سوی دیگر، پهنای زمانی و پراکندگی زمانی ذرات(که می‌توان آن‌ها را در کمیت MSE خلاصه کرد) در نزدیکی هسته مقدار کمتری دارد. می‌توان از این ویژگی بهره گرفت تا بهمن‌هایی که هسته آن‌ها در نزدیکی مرکز آرایه قرار دارد با احتمال بیشتری و برعکس بهمن‌هایی که هسته آن‌ها در فواصل دورتری از مرکز آرایه واقع شده‌اند با احتمال کمتری ثبت شوند. ازاین‌رو، می‌توان برای بهمن‌هایی که موفق به فعال‌سازی پنج آشکارساز مرکزی شده‌اند، شروط خاصی را در نظر گرفت:

$$\begin{aligned} &MSE1 < \text{Other MSEs} \\ &MSE1 < C_1 \\ &\sigma(MSE[2:6]) < C_2 \end{aligned} \quad (۳)$$

مقادیر $C_1 = 0.7$ و $C_2 = 20$ ثابت‌هایی هستند که برای محدود کردن مقادیر MSE به کار می‌روند و $\sigma(MSE[2:6])$ نیز نشان دهنده انحراف معیار مقدارهای MSE از ۲ تا ۶ است. این ثابت‌ها به‌گونه‌ای انتخاب شده‌اند که احتمال ثبت بهمن‌ها در حالتی که هسته آن‌ها به مرکز آرایه برخورد می‌کند، دچار افت قابل‌توجهی نشود و بیشتر از ۱۰ درصد پایین‌تر نیاید.

شبیه‌سازی برخورد بهمن‌ها به آرایه در فواصل مختلف

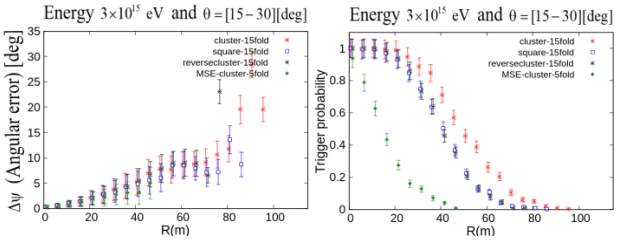
در مجموع چهار رویکرد معرفی شد. برای مقایسه آنها، ابتدا لازم است عملکرد هر یک از آن‌ها در برابر بهمن‌هایی که در فواصل گوناگون به آرایه وارد می‌شوند، مورد ارزیابی قرار گیرد. بدین منظور، سطح رصدخانه به مجموعه‌ای از حلقه‌های هم‌مرکز تقسیم می‌شود؛ به‌طوری‌که هر حلقه نمایانگر فاصله‌ی ثابتی از مرکز آرایه است. سپس، بهمن‌های موجود در هر بسته به‌گونه‌ای شبیه‌سازی می‌شوند که نقطه برخورد آن‌ها با زمین در مرکز هر یک از این حلقه‌ها قرار گیرد.

در ادامه، برای هر یک از بسته‌های بهمن در هر یک از فواصل و برای هر یک از رویکردهای معرفی‌شده، جهت ورود هر بهمن با فرض تخت بودن جبهه آن و با استفاده از اختلاف زمانی ورود ذرات بهمن به آشکارسازها نسبت به یکی از آشکارسازها به دست آمده و دقت آن محاسبه می‌شود.

برای تعیین دقت جهت‌یابی از زاویه میان راستای ذره‌ی اولیه $\hat{n}_{true}$ که از کورسیکا به دست می آید و جهت بازسازی شده $\hat{n}_{rec}$ که با روش مدل جبهه تخت محاسبه می‌شود، استفاده می‌شود. این زاویه از رابطه هندسی زیر به دست می‌آید:

$$\Delta\psi = \cos^{-1}\left[\hat{n}_{true}.\hat{n}_{rec}\right] = \quad (۴)$$
$$\cos^{-1}[\sin(\theta_{true})\sin(\theta_{rec})\cos(\varphi_{true}-\varphi_{rec})+\cos(\theta_{true})\cos(\theta_{rec})]$$

می‌توان برای هر کدام از حلقه‌ها و بسته‌های ۳۰۰ تایی مقدار میانگین کمیت ۴ را حساب کرد. در شکل ۴، اطلاعات مربوط به یکی از این بسته‌ها به‌صورت نمودار ارائه شده است.



شکل۴:. چپ: نمودار خطای $\Delta\psi$ برحسب فاصله، راست: نمودار احتمال رصد شدن بهمن بر حسب فاصله.

همچنین احتمال ثبت بهمن در شکل سمت راست ۴ نشان داده شده است، برای محاسبه آن کافیست در هر کدام از حلقه‌ها تعداد بهمن‌هایی که شرط مورد نظر را ارضا می‌کنند را بر تعداد کل بهمن‌ها در همان حلقه تقسیم کنیم.

با توجه به نمودار شکل ۴، میزان خطای زاویه‌ای در جهت‌یابی $\Delta\psi$ به‌طور مستقیم با فاصله‌ی هسته‌ی بهمن از مرکز آرایه مرتبط است. تنها در نواحی انتهایی منحنی، به دلیل کاهش احتمال برخورد بهمن‌ها با این نواحی و در نتیجه کاهش آمار، نوسانات قابل‌توجهی در میزان خطا مشاهده می‌شود.

همچنین، اختلاف چشم‌گیری در میزان خطای زاویه‌ای جهت‌یابی میان رویکردهای مختلف ۱۵تایی مشاهده نمی‌شود اما در رویکرد خوشه‌ای مبتنی بر MSE مقدار خطاها اندکی کمتر است. با این حال، آنچه تمایز میان این رویکردها را آشکار می‌سازد، نمودار احتمال رصد بهمن بر حسب فاصله از مرکز آرایه است؛ جایی که دو ساختار مربعی و خوشه‌ای معکوس، به‌ویژه در فواصل زیاد، دارای احتمال رصد کمتری نسبت به ساختار خوشه‌ای معمولی هستند و در طرف دیگر در ساختار خوشه‌ای مبتنی بر MSE این اثر با شدت بیشتری دیده می‌شود. این کاهش احتمال نشان‌دهنده‌ی فیلترشدن مؤثرتر بهمن‌های دورتر است که با توجه به خطای بالاتر این بهمن‌ها، به بهبود دقت کلی جهت‌یابی منجر می‌شود.

با وجود این، عملکرد چیدمان‌های مربعی و خوشه‌ای معکوس از نظر الگوی فیلتر شدن بهمن‌ها بسیار به یکدیگر نزدیک است. بنابراین، برای انجام مقایسه‌ای جامع‌تر و کمّی، مناسب است از معیاری مانند میانگین کلی خطا در جهت‌یابی استفاده شود که در ادامه به تفصیل معرفی خواهد شد.

محاسبه خطای میانگین برای هر کدام از چیدمان‌ها

به منظور یک مقایسه اجمالی بین ساختارها، تعداد بهمن‌های ثبت شده در بازه انرژی 1.6×10^{14} eV تا 5.3×10^{15} eV و در مدت زمان یک روز با استفاده از فرمول ۵ حساب می‌شود:

$$N = \int_{1day}\sum_{i=0}^{\infty} A(R_i)\iint_{\Omega}\int_{E=10^{14}ev}^{4.5\times10^{15}ev} P(R_i,E,[\theta])F(E)dE\,d\Omega\,dt \qquad (۵)$$

در این رابطه، $P(R_i,E,[\theta])$ بیانگر احتمال ثبت بهمن‌ها در فواصل، انرژی‌ها و بازه‌های زاویه‌ای θ مختلف است که از تحلیل نتایج شبیه‌سازی به‌دست آمده‌اند. همچنین، $A(R_i)$ نمایانگر مساحت متناظر با هر یک از حلقه‌های هم‌مرکز تعریف‌شده در صفحه آشکارساز است.

کمیت دیگری که در رابطه‌ی انتگرالی مورد استفاده قرار می‌گیرد، شار دیفرانسیلی ($F(E)$) ذرات کیهانی است. که مطابق با رابطه‌ی (۶) محاسبه می‌شود.

$$F \equiv \frac{dN}{dE} = F_0 E^{-\gamma} \quad [m^2.s.sr.ev]^{-1} \qquad (۶)$$

که در آن F_0 ضریب بهنجارش بوده و γ نیز شاخص طیفی است که مقدار آن تقریبا 2.67 است.[2]

در ادامه محدوده انرژی را به سه زیر بازه انرژی $[1.6\times10^{14}-5.5\times10^{14}]$، $[5.5\times10^{14}-1.7\times10^{15}]$ و $[1.7\times10^{15}-5.3\times10^{15}]$ الکترون‌ولت تقسیم می‌شود، به طوری که انرژی بسته‌های شبیه‌سازی کورسیکا در میانه بازه قرار گرفته و در هر بازه انرژی بتوان $P(R_i,E,[\theta])$ را به عنوان یک عدد ثابت از انتگرال خارج کرد.

با انجام محاسبات فوق، می‌توان تعداد کل بهمن‌های ثبت‌شده در طول یک روز را برای هر یک از ساختارهای مورد بررسی به‌دست آورد.

از سوی دیگر، با استفاده از روابط (۵) و (۶)، می‌توان مقدار میانگین کل خطای جهت‌یابی را محاسبه کرد.

$$\overline{\Delta\psi} = \frac{1}{N}\left(\int_{1day}\sum_{i=0}^{\infty} A(R_i)\iint_{\Omega}\int_{E=1.6\times10^{14}\,eV}^{5.3\times10^{15}\,eV}\Delta\psi(R_i,E,\theta)\right.$$
$$\left.\times P(R_i,E,[\theta]).F(E)dE\,d\Omega\,dt\right) \qquad (۷)$$

در نهایت، دو کمیت N_{1day} و $\overline{\Delta\psi}$ برای هر یک از ساختارهای مورد بررسی محاسبه شدند و نتایج در جدول (۱) ارائه شد.

جدول ۱ : عملکرد و دقت جهت‌یابی آرایه البرز برای هر کدام از ساختارها (خطای زاویه‌ای برحسب درجه بیان شده‌است)

ساختار	$\overline{\Delta\psi}$	N_{1day}
خوشه‌ای	4.7°	1881
مربعی	3.7°	888
خوشه‌ای معکوس	3.9°	899
خوشه‌ای مبتنی بر MSE	2.0°	378

با توجه به اطلاعات جدول، مشاهده می‌شود که چیدمان خوشه‌ای دارای ثبت بهمن‌های بیش‌تری است؛ به‌گونه‌ای که تعداد بهمن‌های ثبت‌شده در آن به مقدار قابل توجهی از چیدمان‌های دیگر بیشتر است. با این حال، این افزایش نرخ ثبت به قیمت کاهش دقت در جهت‌یابی منجر شده است. از طرف دیگر ساختار خوشه‌ای مبتنی بر MSE با وجود نرخ ثبت بهمن کمتر دارای دقت جهت‌یابی بهتری نسبت به سایر رویکردها تا ۲ درجه است.

نتیجه گیری

در این مقاله، چهار رویکرد متفاوت برای آرایه‌ی البرز پیشنهاد و مورد بررسی قرار گرفت. به‌منظور ارزیابی عملکرد و دقت جهت‌یابی هر یک از این چیدمان‌ها، مجموعه‌ای از بهمن‌های

شبیه‌سازی‌شده با فواصل مختلف از مرکز آرایه، مورد استفاده قرار گرفتند. در شرایط یکسان(شرط ۱۵ تایی) دو چیدمان مربعی و خوشه‌ای معکوس عملکرد دقیق‌تری نسبت به چیدمان خوشه‌ای دارند. اما اگر شرط مبتنی بر MSE را که تنها در چیدمان خوشه‌ای می‌توان اعمال کرد را در نظر بگیریم دقت بالاتری تا ۲ درجه دارد. هر چند استفاده از این رویکرد منجر به کاهش نرخ ثبت بهمن می‌شود.

مرجع‌ها

[۱] *D. Heck , T. Pierog , Extensive Air Shower Simulation with CORSIKA: A User's Guide ; version 7.7410 , (2021) .*

[۲] *L. A. Fisk and G. Gloeckler, Acceleration of Galactic Cosmic Rays in the Interstellar Medium, The Astrophysical Journal, Volume 744, Number 2,2012, ApJ **744** 127*

مطالعه جریان‌های هم‌راستا با میدان (FAC) طی توفان ژئومغناطیسی می ۲۰۲۴ با استفاده از داده‌های Swarm و AMPERE

صابرنیا، محمد[۱]؛ صبری، سمیه[۱]

[۱] موسسه ژئوفیزیک، دانشگاه تهران، تهران، ایران

چکیده

جریان‌های هم‌راستا با میدان (FAC) یا جریان‌های بیرکلند، نقش کلیدی در انتقال انرژی و تکانه از مغناطیس‌سپهر به یونوسفر–ترموسفر ایفا می‌کنند. در این پژوهش، پاسخ این جریان‌ها به توفان ژئومغناطیسی۱۰ می ۲۰۲۴ که یکی از شدیدترین توفان‌های چرخه خورشیدی ۵ با Dst ~ −۴۱۲ نانوتسلا بود، با استفاده از داده‌های ماهواره‌ای AMPERE و Swarm مورد مطالعه قرار گرفته است. بدین منظور، دو کمیت اصلی مورد تحلیل قرار گرفت: (۱) شاخص ژئومغناطیسی AE و مؤلفه Bz میدان بین‌سیاره‌ای به عنوان نمایانگرهای شدت توفان و (۲) تغییرات زمانی چگالی جریان FAC محاسبه‌شده با روش دو ماهواره‌ای (Swarm C-A) و تغییرات مکانی چگالی جریان محاسبه شده از ماهواره AMPERE . نتایج نشان می‌دهد که در بازه توفان (عصر ۱۰ می تا اواسط ۱۱ می)، همزمان با کاهش شدید Bz تا ۵۰− نانوتسلا و افزایش ناگهانی AE به بیش از ۲۰۰۰ نانوتسلا، چگالی FAC نیز به حداکثر مقدار خود یعنی حدود ۲۰± میکروآمپر بر متر مربع ($\mu A/m^2$) می‌رسد. در مقابل، در روزهای آرام، چگالی FAC به مقادیر زمینه بین ۵− تا ۵+ $\mu A/m^2$ کاهش می‌یابد. این تغییرات همزمان بین افزایش فعالیت ژئومغناطیسی و تشدید جریان‌های FAC، مؤید نقش کلیدی فرآیندهای بازاتصال مغناطیسی و تزریق انرژی باد خورشیدی در دینامیک جریان‌های یونوسفری–مغناطیس‌سپهری است.

واژه های کلیدی: *توفان ژئومغناطیسی، جریان‌های هم‌راستا با میدان (FAC)، Swarm، AMPERE ، شاخص‌های ژئومغناطیسی*

Study of Field-Aligned Currents (FAC) During the May 2024 Geomagnetic Storm Using Swarm and AMPERE Data

Sabernia, Mohammad [1]; Sabri, Somaiyeh[1]

[1] *Institute of Geophysics, University of Tehran, Tehran, Iran*

Abstract

Field-Aligned Currents (FACs), also known as Birkeland currents, play a key role in transferring energy and momentum from the magnetosphere to the ionosphere-thermosphere. In this study, the response of these currents to the May 10, 2024 geomagnetic storm, one of the most intense storms of solar cycle 25 with Dst ~ -412 nT, has been investigated using AMPERE and Swarm satellite data. For this purpose, two main quantities were analyzed: (1) geomagnetic index AE, and the interplanetary magnetic field Bz component as indicators of storm intensity, and (2) temporal variations of FAC density calculated using the dual-satellite method (Swarm A and C) and spatial variations of current density derived from AMPERE satellite. The results show that during the storm period (evening of May 10 to midday of May 11), coincident with a sharp decrease in Bz to -50 nT and a sudden increase in AE to over 2000 nT, the FAC density reaches its maximum value of approximately ±20 μA/m². In contrast, during quiet days, the FAC density decreases to background levels between -5 and +5 μA/m². These simultaneous variations between increased geomagnetic activity and intensified FACs confirm the key role of magnetic reconnection processes and solar wind energy injection in the dynamics of ionospheric-magnetospheric currents.

Keywords: *Geomagnetic Storm, Field-Aligned Currents (FAC), Swarm, AMPERE, Geomagnetic Indices, Space Weather*
PACS No. *92*

مقدمه

یونوسفر به دلیل وجود الکترون‌های آزاد، نقش اساسی در انتشار امواج رادیویی و عملکرد سامانه‌های ناوبری ماهواره‌ای ایفا می‌کند [۱]. یکی از مهم‌ترین پدیده‌هایی که باعث اختلال در یونوسفر می‌شود، توفان‌های ژئومغناطیسی هستند که در اثر برهم‌کنش باد خورشیدی با مغناطیس‌سپهر زمین رخ می‌دهند [۲].

جریان‌های هم‌راستا با میدان (FAC) یا جریان‌های بیرکلند، شاهرگ اصلی ارتباط دینامیکی بین مغناطیس‌سپهر و یونوسفر هستند [۳]. این جریان‌ها مسئول انتقال بخش عظیمی از انرژی و تکانه ناشی از برهم‌کنش باد خورشیدی–مغناطیس‌سپهر به نواحی شفقی هستند. توفان ۱–۱۰ می ۲۰۲۴ یکی از شدیدترین توفان‌های چرخه خورشیدی ۲۵ بود [۴].

فرآیند بازاتصال مغناطیسی، مکانیسم اصلی تزریق انرژی باد خورشیدی به مغناطیس‌سپهر است که در لحظه‌ی منفی شدن (جنوب‌سو شدن) مولفه Z میدان مغناطیسی بین‌سیاره‌ای رخ می‌دهد. [۵]. در طی توفان‌های ژئومغناطیسی، سیستم جریان‌های FAC دستخوش تغییرات شدیدی می‌شود که شامل افزایش چگالی جریان، جابه‌جایی مرزهای ناحیه شفقی و تغییر در تقارن فضا–زمانی آن‌هاست [۶]. توفان می ۲۰۲۴ در اثر برخورد چندین خروج جرم از تاج خورشیدی (CME) ایجاد شد و فرصت استثنایی برای مطالعه پاسخ سیستم جریان‌های مغناطیس‌سپهری–یونوسفری فراهم کرد [۷]. برای مطالعه جریان‌های FAC، دو مجموعه داده ماهواره‌ای اصلی در دسترس هستند. مأموریت Swarm آژانس فضایی اروپا با سه ماهواره مجهز به مغناطیس‌سنج، امکان محاسبه چگالی جریان FAC با دقت بالا و تفکیک زمانی عالی را فراهم می‌کند [۸]. پروژه AMPERE نیز نقشه‌های جهانی و دوبعدی چگالی جریان FAC را با پوشش مکانی پیوسته و تفکیک زمانی حدود ۱۰ دقیقه ارائه می‌دهد [۹, ۱۰].

هدف اصلی این پژوهش، محاسبه و تحلیل جریان‌های FAC در بازه زمانی ۵ تا ۱۹ می ۲۰۲۴ با استفاده از داده‌های Swarm و مقایسه نتایج با مشاهدات AMPERE است.

روش و ابزار

مأموریت Swarm شامل سه ماهواره (Swarm A, B, C) است که توسط آژانس فضایی اروپا (ESA) به فضا پرتاب شده‌اند. این ماهواره‌ها میدان مغناطیسی زمین را با دقت بالا اندازه‌گیری می‌کنند. در این پژوهش، از داده‌های مغناطیس‌سنج‌های این ماهواره‌ها برای محاسبه جریان‌های FAC استفاده شده است.

در این پژوهش، از روش دو ماهواره‌ای Swarm A و C که به صورت موازی در کنار هم پرواز می‌کنند برای محاسبه چگالی جریان عمودی استفاده شده است. اساس این روش، استفاده از قانون آمپر در فرم انتگرالی است. چگالی جریان متوسط برای یک چهارضلعی که توسط چهار نقطه اندازه‌گیری متوالی (دو نقطه از هر ماهواره) تشکیل شده است، محاسبه می‌شود [۸].

رابطه اصلی مورد استفاده به صورت زیر است:

$$j_{IRC} = \frac{1}{2\mu_0 A}\left[\left(B_x^{t_1} + B_x^{t_2}\right)dl_1 + \left(B_y^{t_2} + B_y^{t_3}\right)dl_2 - \left(B_x^{t_3} + B_x^{t_4}\right)dl_3 - \left(B_y^{t_4} + B_y^{t_1}\right)dl_4\right] \qquad (1)$$

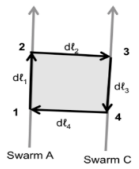
که در آن $B_x^{t_{1(3)}}$ و $B_x^{t_{2(4)}}$ مولفه‌های در امتداد مسیر حرکت ماهواره (along-track) هستند که از دو نقطه‌ی اندازه‌گیری متوالی 1(3) و 2(4) با اختلاف زمانی ۵ ثانیه که متناظر با فاصله‌ای در حدود 38km است، به دست آمده‌اند($dl_{1(3)} = 38\text{km}$). همچنین $B_y^{t_{2(4)}}$ و $B_y^{t_{3(1)}}$ مولفه‌های عمود بر راستای حرکت ماهواره (cross-track) هستند که به اندازه‌ی 1.4° در طول جغرافیایی که متناظر است با فاصله‌ی حدود ۵۰km در عرض جغرافیایی 70°، از یکدیگر فاصله دارند. A مساحت محصور شده توسط چهار المان خطی dl است (شکل ۱).

چگالی FAC با تصحیح زاویه میل مغناطیسی از چگالی جریان عمودی به دست می‌آید:

$$j_{FAC} = -\frac{j_{IRC}}{\sin I}\left[\frac{\mu A}{m^2}\right] \qquad (2)$$

که در آن I زاویه‌ی میل مغناطیسی است. در عرض‌های جغرافیایی بالا که میدان مغناطیسی تقریبا دارای جهت عمودی است، چگالی FAC تقریبا برابر با چگالی IRC است.عدم قطعیت در داده‌های *Swarm* به صورت ۲۵ نانوآمپر بر متر مربع می‌باشد. اطلاعات بیشتر در لینک زیر قابل مشاهده است:

https://swarmhandbook.earth.esa.int/catalogue/sw_fac_lls_2f

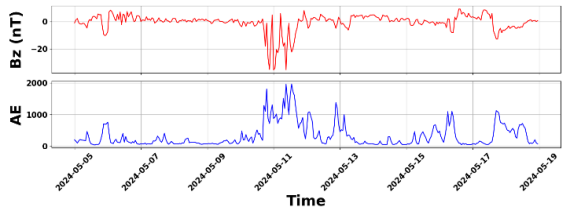


شکل ۱: طرح شماتیک یک چهارضلعی متشکل از چهار نقطه‌ی اندازه‌گیری و المان‌های مسیر مورد نیاز برای محاسبه‌ی چگالی جریان. نقاط ۱ تا ۴ موقعیت‌هایی بر روی مسیر مداری ماهواره‌های Swarm A و Swarm C هستند که توسط المان‌های مسیر dl به یکدیگر متصل شده‌اند.

تحلیل و نتایج

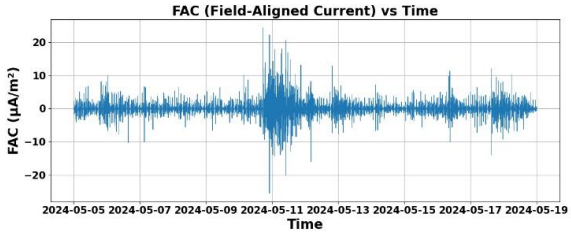
توفان ژئومغناطیسی مورد مطالعه در این پژوهش، در عصر روز ۱۰ می ۲۰۲۴ آغاز شده و تا اواسط روز ۱۱ می ۲۰۲۴ ادامه یافته است. شکل ۲ تغییرات زمانی مؤلفه Bz میدان بین‌سیاره‌ای و شاخص AE را در بازه زمانی ۵ تا ۱۹ می ۲۰۲۴ نشان می‌دهد.همان‌طور که از شکل ۲ مشاهده می‌شود، در روز ۱۰ می (اوج توفان) تغییرات چشمگیری در شاخص‌ها رخ داده است.مؤلفه Bz از مقدار حدود ۵- نانوتسلا در روزهای قبل به حدود ۵۰- نانوتسلا کاهش یافته است. منفی شدن پایدار این مؤلفه، شرایط لازم برای وقوع بازاتصال مغناطیسی در سمت روز مرز مغناطیس‌سپهر را فراهم کرده و موجب انتقال مؤثر انرژی باد خورشیدی به محیط مغناطیسی زمین می‌شود [۲].

شاخص AE افزایش بسیار چشمگیری به بیش از ۲۰۰۰ نانوتسلا در روز ۱۰ می داشته است. این افزایش نشان‌دهنده فعالیت شدید الکتروجت شفقی و وقوع زیرطوفان‌های مغناطیسی متعدد در طول فاز اصلی توفان است. شکل ۳ تغییرات زمانی چگالی جریان FAC محاسبه‌شده از داده‌های Swarm را در همان بازه زمانی ۵ تا ۱۹ می ۲۰۲۴ نشان می‌دهد. بررسی همزمان شکل ۲ (شاخص‌های ژئومغناطیسی) و شکل ۳ (چگالی FAC) تغییرات همزمان فعالیت ژئومغناطیسی و جریان‌های FAC را آشکار می‌سازد. بازه توفان (عصر ۱۰ می تا اواسط ۱۱ می)، در این بازه زمانی که Bz به حدود ۵۰- nT و AE به بیش از ۲۰۰۰ nT می‌رسد، چگالی FAC نیز به حداکثر مقدار خود یعنی حدود ۲۰± میکروآمپر بر متر مربع ($\mu A/m^2$) می‌رسد. این همزمانی نشان‌دهنده رابطه مستقیم بین تزریق انرژی به مغناطیس‌سپهر و تشدید جریان‌های FAC است. منفی شدن Bz منجر به وقوع بازاتصال مغناطیسی و تزریق انرژی به مغناطیس‌سپهر شده و تشدید جریان‌های FAC باعث افزایش AE می‌گردد.

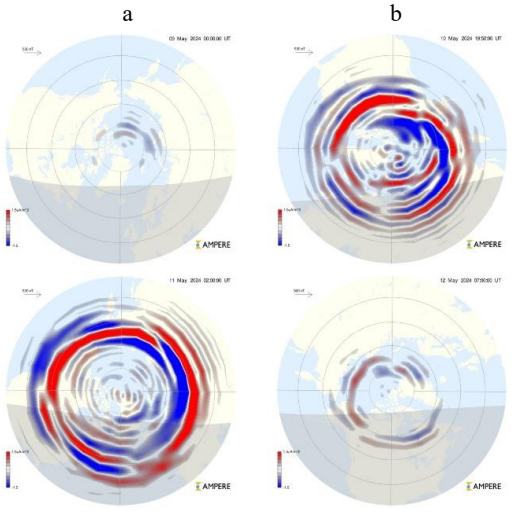


شکل ۲: تغییرات زمانی شاخص‌های ژئومغناطیسی در بازه ۵ تا ۱۹ می ۲۰۲۴: (الف) مؤلفه Bz میدان بین‌سیاره‌ای و (ب) شاخص AE (بر حسب نانوتسلا). توفان ۱۰–۱۱ می در کاهش شدید Bz (تا ۵۰- نانوتسلا) و افزایش ناگهانی AE (به بیش از ۲۰۰۰ نانوتسلا) مشهود است.

به منظور اعتبارسنجی نتایج به‌دست‌آمده از داده‌های Swarm و بررسی ساختار فضایی جریان‌ها، از تصاویر چگالی جریان ارائه‌شده توسط پروژه AMPERE استفاده شده است (شکل ۴). همان‌طور که در شکل ۴(a) مشهود است، در روز ۹ مه (پیش از وقوع توفان)، الگوی جریان‌ها ضعیف است.



شکل ۳: تغییرات زمانی چگالی جریان‌های هم‌راستا با میدان (FAC) محاسبه‌شده با روش دو ماهواره‌ای Swarm A و C در بازه ۵ تا ۱۹ می ۲۰۲۴. چگالی جریان بر حسب میکروآمپر بر متر مربع نشان داده شده است. در طی توفان ۱۰–۱۱ می، چگالی FAC به حداکثر مقدار خود (حدود ۲۰± میکروآمپر بر متر مربع) می‌رسد، در حالی که در روزهای آرام به مقادیر زمینه (کمتر از ۵± میکروآمپر بر متر مربع) کاهش می‌یابد.



شکل ۴: تکامل الگوهای جریان‌های FAC در نیمکره شمالی از داده‌های AMPERE در چهار مرحله از توفان مه ۲۰۲۴: (a) شرایط آرام (۹ مه ۰۰:۰۰ UT) با شدت جریان پایین؛ (b) فاز رشد (۱۰ مه ۱۹:۵۰ UT) با افزایش شدت جریان و گسترش به عرض‌های پایین‌تر؛ (c) اوج توفان (۱۱ مه ۲:۰ UT) با الگوی دو–سلولی قوی و گسترش بیضی شفقی؛ (d) فاز بازیابی (۱۲ مه ۰۷:۰۰ UT) با کاهش شدت جریان. رنگ‌های قرمز و آبی به ترتیب نشان‌دهنده جریان‌های خروجی (Upward) و ورودی (Downward) هستند.

با شروع طوفان در عصر ۱۰ مه (شکل ۴پنلb)، چگالی جریان‌ها به طور چشمگیری افزایش می‌یابد. در ساعت‌های پایانی ۱۰ مه و اوایل ۱۱ مه، همزمان با شدیدترین کاهش مؤلفه Bz، بیضی شفقی به سمت استوا جابه‌جا می‌شود (شکل c۴). در این زمان (ساعت ۰۲:۰۰ UT روز ۱۱ مه)، شدت جریان‌ها به حداکثر مقدار خود می‌رسد.

سرانجام، در روز ۱۲ مه (شکل ۴پنلd)، با بهبود شرایط میدان، شدت جریان‌ها کاهش یافته و سیستم یونوسفر–مغناطیس‌سپهر وارد فاز بازیابی می‌شود؛ هرچند هنوز آثار جریان‌ها نسبت به شرایط آرام قابل مشاهده است.

نتیجه گیری

در این پژوهش، دینامیک جریان‌های هم‌راستا با میدان (FAC) در توفان شدید می ۲۰۲۴ با استفاده از داده‌های Swarm و AMPERE بررسی شد. یافته‌های اصلی عبارتند از:

۱.در فاز اصلی توفان، همزمان با کاهش شدید مؤلفه Bz و افزایش شدید شاخص AE، چگالی جریان FAC به حداکثر مقدار ±۲۰ میکروآمپر بر متر مربع رسید. این پدیده نشان‌دهنده نقش کلیدی بازاتصال مغناطیسی در تزریق انرژی به مغناطیس‌سپهر و تقویت جریان‌های یونوسفری است.

۲.مقایسه نتایج با نقشه‌های AMPERE نشان داد که تشکیل الگوی دو–سلولی قوی و گسترش بیضی شفقی به عرض‌های میانی در اوج توفان، با پیک‌های چگالی جریان ثبت‌شده توسط Swarm مطابقت کامل دارد. این تطابق فضایی–زمانی، دقت روش دو ماهواره‌ای Swarm را در بازتولید دینامیک واقعی جریان‌ها تأیید می‌کند.

۳. پس از گذر فاز اصلی توفان، شدت جریان‌ها به تدریج کاهش یافته و سیستم یونوسفر–مغناطیس‌سپهر با بازگشت چگالی FAC به مقادیر زمینه (کمتر از میکروآمپر بر متر مربع)، به شرایط آرام بازیابی می‌شود که در هر دو شکل ۳ و ۴ قابل مشاهده بود.

۴. در این مطالعه تطابق زمانی اولیه داده‌های جریان موازی با میدان SWARM و AMPERE تولید شده در اثر توفان می ۲۰۲۴ مورد بررسی قرار گرفت؛ در کارهای آینده میزان همبستگی و تطابق کمی بین آن‌ها به طور دقیق‌تر مطالعه و بررسی خواهد شد.

مرجع‌ها

[1] Sabri, S. (2025). Production of Field-Aligned Electric Current Density in the Ionosphere Due to Geomagnetic Storm on May 12, 2024. *21th Iranian Geophysical Conference*.
[2] Sabri, S., Mahmoudian, A., & Poedts, S. (2025). Investigation of the May 2024 solar storm through EUHFORIA/GORGON-space simulations and global SuperDARN observations. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 130(11), e2024JA033554.
[3] Sabri, S., & Poedts, S. (2025). CME-Earth Interaction Dynamics: Magnetic Field Strength and Arrival Time as Key Determinants of Geoeffectiveness. *23rd International Conference of Iranian Aerospace Society*.
[4] Tulasi Ram, S., et al. (2024). Super-intense geomagnetic storm on 10-11 May 2024: Possible mechanisms and impacts. *Space Weather*, 22, e2024SW004126.
[5] Dungey, J. W. (1961). Interplanetary Magnetic Field and the Auroral Zones. *Physical Review Letters*, 6(2), 47-48.
[6] Iijima, T., & Potemra, T. A. (1982). The relationship between field-aligned currents and the auroral electrojets. *Journal of Geophysical Research*, 87(A8), 6371-6382.
[7] Maletckii, B., et al. (2025). Electrodynamic and Ionospheric Puzzles of the 10–11 May 2024 Geomagnetic Superstorm. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 130(5), e2024JA033284.
[8] Friis-Christensen, E., Lühr, H., & Knudsen, D. (2008). Swarm—An Earth Observation Mission investigating Earth's magnetic field. *Advances in Space Research*, 41(1), 210-216.
[9] Anderson, B. J., Takahashi, K., & Toth, B. A. (2000). Sensing global Birkeland currents with Iridium satellites magnetometer data. *Geophysical Research Letters*, 27(24), 4045-4048.
[10] Waterscheid, B., Anderson, B. J., Korth, H., et al. (2012). The dynamic behavior of the auroral current system derived from AMPERE. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 117, A05201.

بازنمایی نهان داده‌های نورسنجیِ تلسکوپ اقلیدس با استفاده از خودرمزگذار ماسک‌شده

برهمن ، مهسا[۱] ؛ وجودی سلمانی، ریحانه[۲] ؛ انصاری فرد، سعید[۳]؛ موحد، سید محمد صادق[۴،۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه شهید بهشتی ، صندوق پستی ۱۹۸۳۹۶۴۱۱، تهران، ایران
[۲]دانشکده فیزیک دانشگاه خواجه نصرالدین طوسی، صندوق پستی ۴۴۱۶-۱۵۸۷۵ ، تهران، ایران
[۳]پژوهشکده فیزیک، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی، صندوق پستی ۵۵۳۱-۱۹۳۹۵، تهران، ایران
[۴]پژوهشکده نجوم، پژوهشگاه دانش های بنیادی، ، صندوق پستی ۵۵۳۱-۱۹۳۹۵، تهران، ایران

چکیده

با رشد سریع حجم و پیچیدگی داده‌های نورسنجی چندباندی در پیمایش‌های نسل جدید، روش‌های مرسوم مبتنی بر مهندسی دستی ویژگی‌ها یا فرضیات آماری ساده‌سازانه توان محدودی در استخراج بازنمایی‌های تعمیم‌پذیر از این داده‌ها دارند. در این پژوهش یک چارچوب یادگیری خودنظارتی برای استخراج بازنمایی‌های فشرده و معنادار از اندازه‌گیری‌های نورسنجی چندباندی مأموریت اقلیدس ارائه می‌شود. مدل پیشنهادی در قالب یک خودرمزگذار ماسک شده طراحی شده است که با بازسازی تصادفی مقادیر پنهان‌شده شار و خطای شار در ۹۴ کانال نورسنجی آموزش می‌بیند. این رویکرد به مدل اجازه می‌دهد بدون استفاده از داده‌های برچسب‌خورده، وابستگی‌ها و ساختار آماری میان اندازه‌گیری‌های نورسنجی را بیاموزد. هر اندازه‌گیری علاوه بر مقادیر عددی شار و خطای آن، با اطلاعات رده‌ای شامل باند نورسنجی ، پیمایش منبع داده و نوع اندازه‌گیری توصیف می‌شود. مدل بر روی حدود ۱۰۰ هزار منبع از داده‌های Q1 مأموریت اقلیدس آموزش داده شده است و در بازسازی مقادیر به همبستگی ۰/۹۸۷ برای شار و ۰/۹۵۳ برای خطای شار دست می‌یابد. همچنین، توکن CLS یک بازنمایی فشرده از ویژگی‌های هر جرم فراهم می‌کند که می‌تواند به‌عنوان یک نمایش نهان امیدوارکننده برای کاربردهای پایین‌دستی در نظر گرفته شود. ارزیابی جامع این قابلیت‌ها، که نیازمند آزمایش‌های پایین‌دستی مستقل است، به عنوان گام بعدی این پژوهش تعریف می‌شود و در این مقاله صرفاً بر کیفیت بازسازی خودرمزگذار متمرکز شده‌ایم.

واژه های کلیدی: *نورسنجی چندباندی، یادگیری بازنمایی، خودرمزگذار ماسک شده*

Latent Representation of Euclid Photometry Data Using a Masked Auto Encoder (MAE)

Berahman, Mahsa[1]; Reyhaneh, Vojoudi Salman[2]; Ansarifard, Saeed [3]; Movahed, Seyed Mohammad Sadegh[1,4]

[1] Department of Physics, Shahid Beheshti University, P.O. Box 1983963113, Tehran, Iran
[2] Department of Physics, K.N. Toosi University of Technology, P.O. Box 15875-4416, Tehran, Iran
[3] School of Physics, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), P.O.Box 19395-5531, Tehran, Iran
[4] School of Astronomy, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), P.O. Box 19395-5531, Tehran, Iran

Abstract

As multiband photometric data from next-generation surveys continue to grow in volume and complexity, conventional methods based on manual feature engineering or simplified statistical assumptions become increasingly limited in their ability to capture informative and transferable representations. We present a self-supervised masked autoencoder designed to learn compact representations of multi-band photometric measurements from the first Euclid data release (Q1). The model is trained by reconstructing randomly masked flux and flux-error values across 94 photometric channels, enabling it to capture correlations between measurements without requiring labelled data. Each measurement is represented by its flux, flux error, and categorical metadata, including photometric band, survey origin, and measurement type. The model is trained on approximately 100,000 Euclid sources and achieves reconstruction correlations of 0.987 for flux and 0.953 for flux errors. Furthermore, the CLS token provides a compact representation of each source and may serve as a promising latent representation for downstream applications. However, a comprehensive assessment of this capability requires independent downstream experiments and is therefore left for future work. In the present paper, we focus exclusively on the reconstruction performance of the masked autoencoder.

***Keywords**: multi-band photometric; representation learning; masked autoencoder*

مقدمه

مأموریت فضایی اقلیدس با هدف مطالعه ساختار بزرگ‌مقیاس کیهان و بررسی ماهیت ماده تاریک و انرژی تاریک طراحی شده است. تلسکوپ اقلیدس اخیرا اولین مجموعه از داده‌های نورسنجی را به صورت عمومی منتشر کرده است که پردازش آنها تصویری در مقیاس بی سابقه از کیهان ارائه خواهد کرد [1]. تحلیل مؤثر این حجم عظیم داده نیازمند روش‌هایی است که بتوانند اطلاعات موجود در اندازه‌گیری‌های نورسنجی چندباندی را به بازنمایی‌های فشرده و معنادار تبدیل کنند.

روش‌های سنتی تحلیل داده‌های نورسنجی معمولاً بر استخراج ویژگی‌های مهندسی‌شده، مانند شاخص‌های رنگی، یا بر مدل‌های یادگیری نظارت‌شده متکی هستند. این روش‌ها به داده‌های برچسب‌خورده وابسته‌اند و تهیه‌ی چنین برچسب‌هایی در بسیاری از کاربردهای نجومی پرهزینه یا حتی غیرممکن است [2]. در مقابل، یادگیری خودنظارتی امکان یادگیری الگوهای پنهان در داده‌ها را بدون نیاز به برچسب‌های خارجی فراهم می‌کند و در سال‌های اخیر در حوزه‌های مختلف یادگیری ماشین موفقیت قابل‌توجهی داشته است [3]. در مطالعات اخیر، از مدل‌های مبتنی بر ترنسفورمر و یادگیری خودنظارتی در برخی مسائل نجومی استفاده شده است. با این حال، بخش عمده‌ای از این پژوهش‌ها بر داده‌های تصویری یا وظایف پایین‌دستی مشخص، مانند شناسایی عدسی‌های گرانشی یا برآورد انتقال‌به‌سرخ، متمرکز بوده‌اند [4,5]. در نتیجه، کمتر پژوهشی به یادگیری بازنمایی نهان عمومی از داده‌های نورسنجی کاتالوگی چندپیمایشی، مانند داده‌های اقلیدس، پرداخته است.

این پژوهش، از یک رویکرد خودنظارتی مبتنی بر خودرمزگذار ماسک‌شده برای استخراج بازنمایی‌های غنی از داده‌های نورسنجی مأموریت اقلیدس استفاده کرده است؛ بازنمایی‌هایی که می‌توانند بدون نیاز به برچسب‌گذاری، در طیف گسترده‌ای از وظایف پایین‌دستی به‌کار گرفته شوند. در این روش، بخشی از اندازه‌گیری‌های ورودی به‌صورت تصادفی پنهان می‌شود و مدل موظف است مقادیر حذف‌شده را بر اساس اطلاعات باقی‌مانده بازسازی کند. این فرایند باعث می‌شود مدل روابط آماری میان باندهای نورسنجی و پیمایش‌های مختلف را بیاموزد.

در ادامه مقاله ابتدا داده‌ها و مراحل پیش‌پردازش معرفی می‌شوند، سپس معماری مدل و روش آموزش توضیح داده می‌شود و در نهایت کیفیت بازسازی داده‌های نورسنجی ارزیابی می‌گردد.

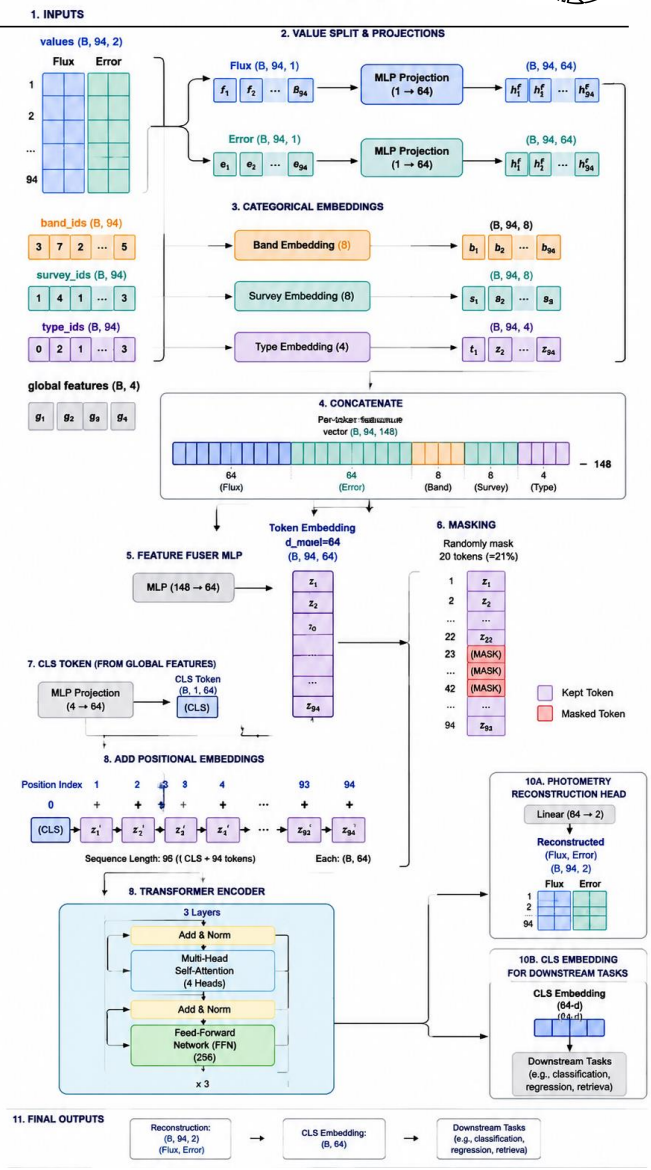
داده‌ها و پیش‌پردازش

داده‌های مورد استفاده در این پژوهش از انتشار Q1 مأموریت اقلیدس استخراج شده‌اند [6]. نمونه داده شامل حدود ۱۰۰ هزار جرم است که اندازه‌گیری‌های نورسنجی آن‌ها از جدول‌های MER و PHZ بازیابی شده است[1]. برای هر جرم حداکثر ۹۴ جفت اندازه‌گیری شار و خطای شار در باندهای مختلف در نظر گرفته شده است. ستون‌های مربوط به اندازه‌گیری‌ها به‌صورت خودکار و بر اساس قراردادهای نام‌گذاری موجود در مدل داده اقلیدس شناسایی می‌شوند. هر اندازه‌گیری با سه ویژگی رده‌ای مشخص می‌شود: باند نورسنجی ، پیمایش منبع داده و نوع اندازه‌گیری شار. برای افزایش کیفیت داده‌ها چندین برش کیفی اعمال می‌شود. منابعی که دارای پرچم‌های کیفی نامعتبر هستند یا به‌عنوان منابع کاذب علامت‌گذاری شده‌اند حذف می‌شوند. همچنین ستون‌هایی که به‌طور کامل شامل مقادیر ناموجود هستند کنار گذاشته می‌شوند. پس از اعمال این مراحل پاک‌سازی، مجموعه‌داده نهایی شامل حدود ۹۰ هزار جرم است که با نسبت ۹۰ به ۱۰ به مجموعه‌های آموزش و اعتبارسنجی تقسیم می‌شوند.

برای فشرده‌سازی دامنه دینامیکی داده‌ها، تبدیل arcsinh به هر دو کمیت شار و خطای شار اعمال می‌شود. این تبدیل در نزدیکی صفر رفتار تقریباً خطی دارد و بنابراین سیگنال‌های کم‌نور را حفظ می‌کند، در حالی که برای مقادیر بزرگ شار و خطای شار، رفتاری مشابه تبدیل لگاریتمی از خود نشان می‌دهد. اگر هر دو مقدار شار و خطای شار متناهی باشند، اندازه‌گیری معتبر در نظر گرفته می‌شود که شامل مقادیر صفر نیز می‌شود. تعداد اندازه‌گیری‌های معتبر برای هر جرم بین ۳۱ تا ۹۴ متغیر است.

علاوه بر اندازه‌گیری‌های نورسنجی، مجموعه‌ای از ویژگی‌های سراسری شامل بُعد راست آسمانی (RA)، میل (DEC) و شار کل آشکارسازی نیز برای هر جرم استخراج می‌شود که در شکل (۱) نیز نمایش داده شده‌اند. با این حال، در فاز آموزش و بازسازی مدل MAE، تمرکز اصلی بر ورودی‌های نورسنجی چندباندی بوده و از این ویژگی‌های سراسری مستقیماً استفاده نشده است.

[1]https://www.cosmos.esa.int/web/euclid/q1-data
https://irsa.ipac.caltech.edu/ibe/data/euclid/q1/



شکل ۱: معماری پیشنهادی برای بازسازی خودنظارتی داده‌های نورسنجی اقلیدس

معماری مدل

مدل پیشنهادی بر اساس چارچوب خودرمزگذار ماسک شده طراحی شده است (شکل ۱). هر اندازه‌گیری شامل دو مقدارعددی (شار و خطای شار) و سه ویژگی رده‌ای (باند، پیمایش و نوع اندازه‌گیری) است. از آنجا که رفتار آماری شار و خطای شار متفاوت است، این دو کمیت ابتدا از طریق دو مسیر نگاشت جداگانه به فضای ویژگی منتقل می‌شوند. هر مسیر شامل یک پرسپترون دولایه‌ای است که مقدار ورودی را به برداری با بُعد ۶۴ نگاشت می‌کند.

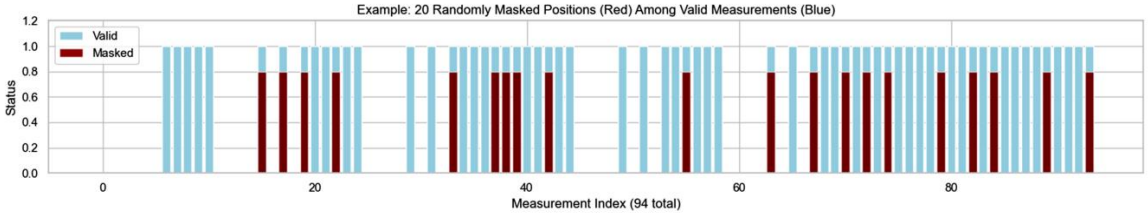
در ادامه بازنمایی‌های حاصل با بردارهای تعبیه مربوط به باند نورسنجی ، پیمایش و نوع اندازه‌گیری ترکیب می‌شوند. ابعاد تعبیه رای باند، پیمایش و نوع اندازه‌گیری به‌ترتیب برابر با ۸، ۸ و ۴ در نظر گرفته شده است. سپس بردار حاصل توسط یک لایه خطی به بُعد مدل یعنی ۶۴ نگاشت می‌شود. برای مدل‌سازی وابستگی‌های میان اندازه‌گیری‌ها از یک ترنسفورمر با سه لایه رمزگذار، چهار سر توجه و بُعد ۲۵۶ در بخش feed-forward استفاده شده است. به‌منظور جلوگیری از تأثیر اندازه‌گیری‌های نامعتبر، در محاسبات از ماسک پدینگ استفاده می‌شود تا این موقعیت‌ها در فرایند توجه نادیده گرفته شوند.

راهبرد پوشاندن اندازه‌گیری‌ها

در هر مرحله از آموزش، برای هر جرم ابتدا موقعیت اندازه‌گیری‌های معتبر مشخص می‌شود. سپس از میان آن‌ها تعداد ثابتی از موقعیت‌ها به‌طور تصادفی انتخاب و با یک توکن ماسک قابل‌یادگیری جایگزین می‌شوند. برای هر جرم ۲۰ اندازه‌گیری به‌عنوان موقعیت‌های پوشانده‌شده انتخاب شده است (شکل ۲). تابع خطا تنها بر روی همین موقعیت‌های پوشانده‌شده محاسبه می‌شود. در نتیجه مدل نمی‌تواند صرفاً ورودی را کپی کند، بلکه باید با استفاده از اطلاعات زمینه‌ای موجود در سایر اندازه‌گیری‌ها مقادیر حذف‌شده را تخمین بزند.

توکن CLS و ویژگی‌های سراسری

یک توکن CLS قابل‌یادگیری به ابتدای دنباله اندازه‌گیری‌ها افزوده می‌شود. پیش از ورود دنباله به ترنسفورمر، ویژگی‌های سراسری هر جرم توسط یک شبکه کوچک به فضای مدل نگاشت شده و به این توکن افزوده می‌شوند. در طول لایه‌های خودتوجهی، این توکن با تمام اندازه‌گیری‌ها تبادل اطلاعات انجام می‌دهد و به‌تدریج بازنمایی فشرده‌ای از کل جرم ایجاد می‌کند.



شکل ۲: نمونه‌ای از نحوه انتخاب تصادفی موقعیت‌های پوشانده‌شده (قرمز) از میان اندازه‌گیری‌های معتبر (آبی).

فرآیند آموزش

پس از عبور دنباله از لایه‌های ترنسفورمر، یک لایه خطی خروجی مدل را به دو مقدار پیش‌بینی‌شده برای شار و خطای شار نگاشت می‌کند. مدل با استفاده از تابع هزینه میانگین مربعات خطا آموزش داده می‌شود و این خطا تنها بر روی موقعیت‌های پوشانده‌شده محاسبه می‌گردد.

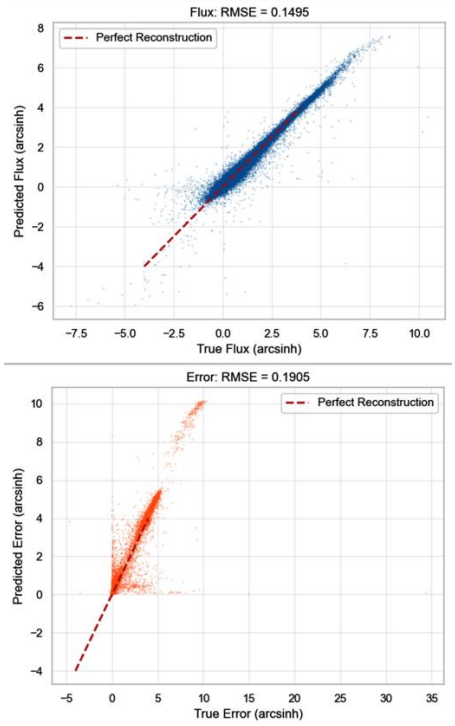
نتایج بازسازی

در جدول ۱، برای ارزیابی عملکرد مدل، مقایسه مقادیر واقعی در موقعیت‌های پوشانده‌شده نمایش داده شده است و نشان می‌دهد که مدل قادر است ساختار آماری داده‌های نورسنجی را با دقت بالایی بازسازی کند.

ضریب همبستگی پیرسون برای بازسازی شار و خطای شار به‌ترتیب ۰/۹۸۷ و ۰/۹۵۳ به دست آمد که نشان‌دهنده توانایی بالای مدل در یادگیری وابستگی میان باندهای نورسنجی است. همچنین، مدل به کمینه‌ی تابع هزینه‌ی اعتبارسنجی ۰/۰۲۶۵ رسید که از همگرایی پایدار و تعمیم‌پذیری مناسب آن به داده‌های دیده‌نشده حکایت دارد. هرچند مدل در بازسازی مقادیر حدی تمایل به کم‌برآوردی دارد، اما الگوی کلی داده‌ها را با دقت بالا بازسازی می‌کند (شکل ۳).

جمع بندی و چشم‌انداز

در این پژوهش یک چارچوب یادگیری خودنظارتی مبتنی بر ترنسفورمر برای داده‌های نورسنجی مأموریت اقلیدس ارائه شد. این مدل با استفاده از راهبرد خودرمزگذار پوششی قادر است بدون نیاز به داده‌های برچسب‌خورده روابط میان اندازه‌گیری‌های نورسنجی را بیاموزد. نتایج نشان می‌دهد که مدل می‌تواند مقادیر پنهان‌شده شار و خطای شار را با دقت بالایی بازسازی کند. بازنمایی‌های حاصل از توکن CLS نیز می‌توانند به‌عنوان توصیف فشرده‌ای از ویژگی‌های هر جرم در مسائل مختلف اخترفیزیکی مورد استفاده قرار گیرند. در آینده می‌توان از این بازنمایی‌ها برای کاربردهایی مانند برآورد انتقال به سرخ نورسنجی، دسته‌بندی کهکشان‌ها، شناسایی کوازارها و آشکارسازی ناهنجاری‌ها بهره گرفت.



شکل ۳: مقایسه مقادیر واقعی و پیش‌بینی‌شده برای شار و خطای شار

مرجع‌ها

[1] Aussel, H., et al. "Euclid Quick Data Release (Q1)--Data release overview." *arXiv preprint arXiv:2503.15302* (2025).
[2] Soriano, Jonathan, et al. "Improving Generalization and Uncertainty Quantification of Photometric Redshift Models." *The Astronomical Journal* 171.2 (2026): 114.
[3] He, Kaiming, et al. "Masked autoencoders are scalable vision learners." *Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition*. 2022.
[4] Vincken, S. H., et al. "Euclid Quick Data Release (Q1). AstroVink: A vision transformer approach to find strong gravitational lens systems." *arXiv preprint arXiv:2604.21977* (2026).
[5] Fathkouhi, Amirreza Dolatpour, and Geoffrey Charles Fox. "Astromae: Redshift prediction using a masked autoencoder with a novel fine-tuning architecture." *2024 IEEE 20th International Conference on e-Science (e-Science)*. IEEE, 2024.
[6] Romelli, E., et al. "Euclid Quick Data Release (Q1): From images to multiwavelength catalogues: the Euclid MERge Processing Function." (2025).

جدول۱ : کیفیت بازسازی داده های پنهان شده

کمیت	همبستگی	RMSE	MAE	R^2	میانگین داده های واقعی	میانگین داده های بازسازی شده	پراکندگی داده های واقعی	پراکندگی داده های بازسازی شده
شار	۰/۹۸۶۶	۰/۱۴۹۵	۰/۰۶۶۲	۰/۹۸۲۸	۰/۶۹۹۴	۰/۶۷۵۳	۰/۹۰۴۱	۰/۸۸۲۴
خطای شار	۰/۹۵۳۱	۰/۱۹۰۵	۰/۰۴۱۵	۰/۹۲۹۴	۰/۲۲۳۰	۰/۲۳۰۱	۰/۶۱۴۶	۰/۶۲۶۲

تشخیص همگرایی گرانشی در فوران‌های پرتو گاما با استفاده از شبکه‌های عصبی ترکیبی

ناهیدی ، علی[۱] ؛ ژولیده حقیقی، محمدحسین[۱]؛ و کلانتری، زینب[۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی ، ۱۵۸۷۵۴۱۶، تهران، ایران

[۲] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شریف، ۱۱۳۶۵۹۱۶۱، تهران، ایران

چکیده

تشخیص همگرایی گرانشی در فوران‌های پرتو گاما (GRBs) به دلیل ماهیت پیچیده و نویزدار منحنی‌های نوری چالش‌برانگیز است. در این پژوهش، یک معماری عمیق ترکیبی مبتنی بر شبکه‌های پیچشی یک‌بعدی (1D-CNN) و حافظه طولانی کوتاه‌مدت (LSTM) برای پردازش و شناسایی خودکار این رویدادها توسعه یافته است. این مدل با استخراج همزمان ویژگی‌های ساختاری توسط CNN و مدل‌سازی وابستگی‌های زمانی به کمک LSTM ، منحنی‌های نوری را تحلیل می‌کند. ارزیابی روی مجموعه‌ای شامل ۲۰۹۹ نمونه شبیه‌سازی‌شده نشان می‌دهد که رویکرد پیشنهادی با موفقیت به دقت ۹۵.۲۴٪ و امتیاز اف-یک (F1-Score) معادل ۰.۹۵ دست یافته است. این نتایج، ظرفیت و کارایی بالای شبکه‌های عصبی ترکیبی را در تحلیل خودکار داده‌های نجومی تایید می‌کند.

واژه های کلیدی: ***فوران‌های پرتو گاما، همگرایی گرانشی، یادگیری عمیق، شبکه‌های عصبی ترکیبی، سری‌های زمانی***

Gravitational Lensing Detection in Gamma-Ray Bursts Using Hybrid Neural Networks

Nahidi, Ali[1]; Zhoolideh Haghighi, Mohammad Hossein[1]; and Kalantari, Zeinab[2]

[1] Department of Physics, K.N.Toosi University of Technology, Tehran, 15875-4416, Iran
[2] Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran, 11365-9161, Iran

Abstract

Detecting gravitational lensing in Gamma-Ray Bursts (GRBs) is challenging due to the complex and noisy nature of their light curves. In this research, a hybrid deep architecture based on 1D-CNN and LSTM networks is developed for the automatic identification of these events. By simultaneously extracting structural features via CNN and modeling temporal dependencies using LSTM, the model analyzes the light curves effectively. Evaluation on a dataset of 2099 simulated samples shows that the proposed approach achieves an accuracy of 95.24% and an F1-Score of 0.95. These results confirm the high potential and efficiency of hybrid neural networks in the automatic analysis of astronomical data.

***Keywords**: Gamma-Ray Bursts, Gravitational Lensing, Deep Learning, Hybrid Neural Networks, Time Series.*

PACS No. 90, 94

مقدمه

فوران‌های پرتو گاما (GRBs) درخشان‌ترین و پرانرژی‌ترین انفجارهای الکترومغناطیسی شناخته‌شده در کیهان هستند. این پدیده‌های گذرا که معمولاً در فواصل بسیار دور رخ می‌دهند، اطلاعات ارزشمندی از مراحل ابتدایی کیهان، مرگ ستارگان پرجرم و ادغام اجرام فشرده به همراه دارند [۱].

بر اساس نظریه نسبیت عام، میدان گرانشی اجرام پرجرم می‌تواند مسیر نور را خم کند. چنانچه یک جرم پرجرم در مسیر امتداد دید ناظر به یک منبع دوردست مانند GRB قرار گیرد، پدیده همگرایی

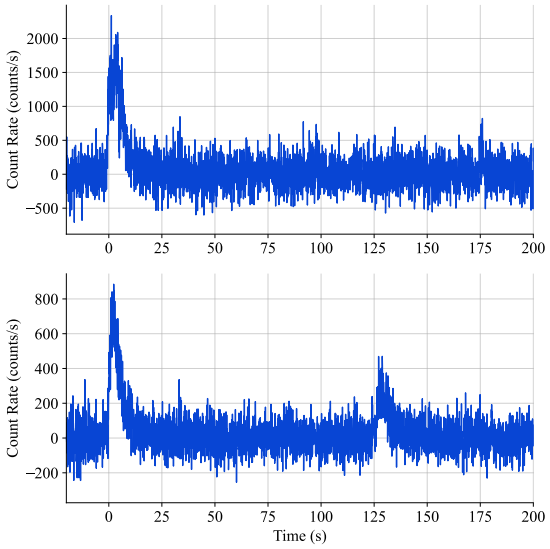
گرانشی رخ می‌دهد و ممکن است چندین تصویر از یک رویداد با تاخیرهای زمانی مشاهده شود. تشخیص دقیق این سیگنال‌های لنزشده ابزار قدرتمندی برای مطالعه ساختار کیهان و محاسبه پارامترهای کیهان‌شناختی فراهم می‌کند [۲].

با رشد حجم داده‌های نجومی، یادگیری عمیق برای تحلیل این داده‌ها با استقبال مواجه شده است [۳, ٤]. شبکه‌های عصبی پیچشی یک‌بعدی (1D CNN) در شناسایی الگوهای محلی، و شبکه‌های حافظه طولانی کوتاه‌مدت (LSTM) در درک وابستگی‌های زمانی عملکرد فوق‌العاده‌ای دارند [۵, ٦]. در بسیاری از رهیافت‌های یادگیری ماشین، نیاز به استخراج و به دست آوردن برخی ویژگی‌ها از داده‌های در دسترس است. برای غلبه بر این محدودیت، در این مقاله یک معماری ترکیبی یکپارچه CNN-LSTM پیشنهاد شده است که به طور خودکار ویژگی‌های ساختاری و زمانی را استخراج کرده و با دقت بالایی رویدادهای دارای همگرایی گرانشی را شناسایی می‌کند.

داده

مجموعه داده‌های مورد استفاده در این پژوهش، شامل منحنی‌های نوری فورانهای پرتو گاما (GRBs) است که بر پایه داده‌های ثبت‌شده توسط ابزار GBM در تلسکوپ فضایی فرمی و در بازه انرژی ۸ تا ۱۵۰ کیلوالکترون‌ولت استخراج شده‌اند. این مجموعه شامل ۲۰۹۹ نمونه از رویدادهای فضایی در دو دسته همگراشده (Lensed) و غیرهمگرا (Non-lensed) است.

از آنجا که رویدادهای پرتو گاما دارای بازه‌های زمانی و طول‌های متفاوتی هستند، در نخستین گام از فرآیند پیش‌پردازش جهت تطبیق با ساختار شبکه‌های عصبی، طول تمامی سری‌های زمانی با بهره‌گیری از تکنیک برش (truncating)، به یک اندازه ثابت برابر با ۲۲۰ گام زمانی یکسان‌سازی شد. در گام بعدی داده‌ها با استفاده از روش نمونه‌برداری طبقه‌ای (Stratified Split) به منظور حفظ تناسب توزیع کلاس‌ها، به سه مجموعه کاملاً مستقلِ آموزش (۷۰ درصد، معادل ١٤٦٩ نمونه)، اعتبارسنجی (۱۵ درصدو معادل ۳۱۵ نمونه) و آزمون (۱۵ درصد، معادل ۳۱۵ نمونه) تقسیم گردیدند.



شکل ۱: نمونه‌ای از منحنی نوری شبیه‌سازی شده؛ بالا: GRB بدون همگرایی، پایین: GRB همگرایی شده.

همچنین جهت ارتقای پایداری و سرعت همگرایی در طول آموزش شبکه، استانداردسازی داده‌ها صورت گرفت. در نهایت، تمامی داده‌ها به فرمت تانسورهای سه‌بعدی با ابعاد $(N, ۲۲۰, ۱)$ تغییر شکل یافتند تا ساختار ورودی مناسب برای تغذیه به لایه‌های شبکه عصبی پیچشی (CNN) و لایه‌های بازگشتی فراهم شود.

روش‌شناسی

شبکه‌های عصبی پیچشی دسته‌ای از مدل‌های یادگیری عمیق هستند که با اعمال عملگر ریاضی پیچش[۱] و استفاده از فیلترهای قابل آموزش، توانایی استخراج خودکار ویژگی‌های محلی و مکانی داده‌ها را دارند [۳]. اگرچه CNNها در اصل برای پردازش تصویر و بینایی ماشین طراحی شده‌اند، اما نسخه‌های یک‌بعدی آن‌ها ($1D\ CNN$) امروزه به طور گسترده در پردازش سیگنال و تحلیل سری‌های زمانی نجومی برای شناسایی الگوهای ساختاری کوتاه‌مدت (مانند قله‌های منحنی نوری) کاربرد دارند [٦]. شبکه حافظه کوتاه‌مدت ماندگار ($LSTM$) یک معماری پیشرفته از شبکه‌های عصبی بازگشتی (RNN) است که برای حل مشکل محوشدگی گرادیان[۲] در یادگیری توالی‌های طولانی توسعه یافته

[۱] Convolution

[۲] vanishing gradient

است [۳]. این الگوریتم با استفاده از یک ساختار سلولی ویژه مجهز به دروازه‌های کنترلی (دروازه‌های ورودی، خروجی و فراموشی)، جریان اطلاعات را تنظیم کرده و وابستگی‌های زمانی بلندمدت را با دقت بالایی به خاطر می‌سپارد. کاربرد اصلی LSTM در پردازش داده‌های متوالی و سری‌های زمانی است و در فیزیک نجومی به طور ویژه برای یافتن الگوهای تکرارشونده، شناسایی حافظه سیستم و کشف تاخیرهای زمانی (مانند Δt در پژواک‌های همگرایی گرانشی) استفاده می‌شود [۵ ,٦]. در این مطالعه در معماری مدل پیشنهادی از ترکیب دو بلوک پیچشی یک‌بعدی و یک لایه LSTM تشکیل شده است. در ابتدا، داده‌های ورودی (منحنی‌های نوری) با ابعاد (N,220,1) به اولین لایه Conv1D با ۳۲ فیلتر و اندازه هسته ۵ وارد می‌شوند که ابعاد خروجی آن به (N,216,32) تغییر می‌یابد. تابع فعال‌سازی اعمال شده در تمامی لایه‌های پیچشی از نوع ReLU می‌باشد. سپس، به منظور تسریع در همگرایی شبکه و جلوگیری از تغییرات کوواریانس داخلی، از یک لایه نرمال‌سازی دسته‌ای (BatchNormalization) استفاده شده است. پس از آن، برای استخراج ویژگی‌های برجسته و کاهش ابعاد محاسباتی، یک لایه ادغام بیشینه (MaxPooling1D) با اندازه ۲ به کار رفته است که ابعاد داده‌ها را به (N,108,32) کاهش می‌دهد. در بلوک دوم CNN، داده‌ها وارد یک لایه Conv1D دیگر با ٦٤ فیلتر و اندازه هسته ۳ می‌شوند که ابعاد آن‌ها به (N,106,64) می‌رسد. مشابه بلوک اول، پس از عبور از لایه نرمال‌سازی دسته‌ای، یک لایه MaxPooling1D با اندازه ۲ روی داده‌ها اعمال می‌شود که خروجی آن دارای ابعاد (N,53,64) خواهد بود. ویژگی‌های مکانی و ساختاری استخراج‌شده از این بلوک‌ها، به عنوان دنباله‌ای از اطلاعات به لایه LSTM با ٦٤ واحد حافظه تغذیه می‌گردند. این لایه وظیفه دارد وابستگی‌های زمانی، الگوهای تکرارشونده و تاخیرهای احتمالی موجود بین پالس‌های منحنی نوری را به دقت مدل‌سازی کند. از آنجا که این لایه تنها خروجی آخرین گام زمانی را برمی‌گرداند، بعد زمانی در خروجی حذف شده و ابعاد داده‌ها به (N,64) تبدیل می‌شود. در ساختار شبکه از تکنیک حذف تصادفی (Dropout) با نرخ ۰/۵ استفاده شده است. در نهایت، خروجی بخش تحلیل زمانی به یک لایه Dense با ۱ نورون و تابع فعال‌سازی Sigmoid منتقل می‌شود. این لایه احتمال وقوع پدیده همگرایی گرانشی را به صورت یک عدد پیوسته در بازه [۰,۱] محاسبه می کند.

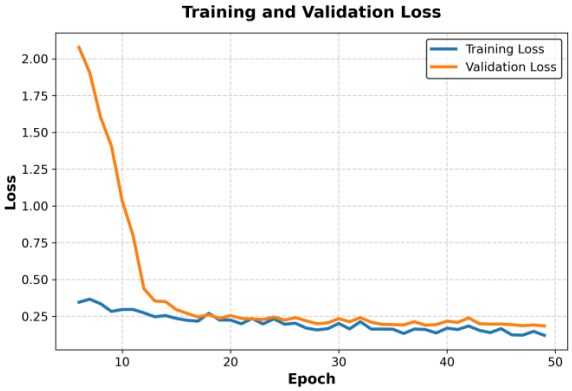
نتایج

پس از آماده‌سازی داده‌های ورودی، مدل ترکیبی پیشنهادی با استفاده از بهینه‌ساز آدام و تابع هزینه آنتروپی متقاطع دودویی آموزش داده شد. ارزیابی مدل بر روی داده‌های آزمون نشان می‌دهد که تنها ۱۵ نمونه از ۳۱۵ فوران پرتو گامای تست‌شده، نادرست دسته‌بندی شده‌اند. همان‌طور که در جدول ۱ گزارش شده، دقت کلی سیستم به ٪۹۵.۲٤ رسیده که بهبود چشمگیری نسبت به بیشینه دقت ٪۸٦ در مدل‌های کلاسیک (مانند مدل جنگل تصادفی در [٤]) دارد. همچنین، دست‌یابی به نرخ فراخوانی بالای ۰.۹۸ برای کلاس «لنز شده» نشان‌دهنده کمترین میزان خطای نوع دوم است.

جدول ۱: نتایج ارزیابی مدل ترکیبی CNN-LSTM

کلاس	دقت (Precision)	فراخوانی (Recall)	امتیاز F1
لنز شده (Lensed)	۰.۹۳	۰.۹۸	۰.۹۵
لنز نشده (Nonlensed)	۰.۹۸	۰.۹۲	۰.۹۵

روند همگرایی مدل در مراحل آموزش و ارزیابی در شکل (۲) نمایش داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود پایداری نمودار اعتبارسنجی در کنار نمودار آموزش، نشان‌دهنده تعمیم‌پذیری بالای مدل و عدم وقوع بیش‌برازش است.

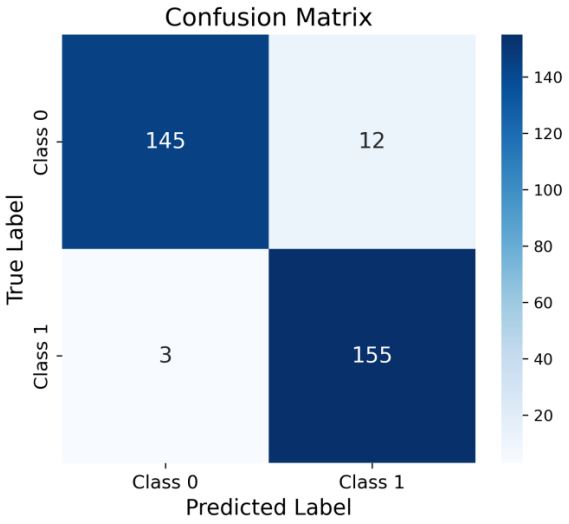


شکل ۲: منحنی تغییرات تابع هزینه (Loss) برای داده‌های آموزش و اعتبارسنجی بر حسب تعداد تکرار (epochs).

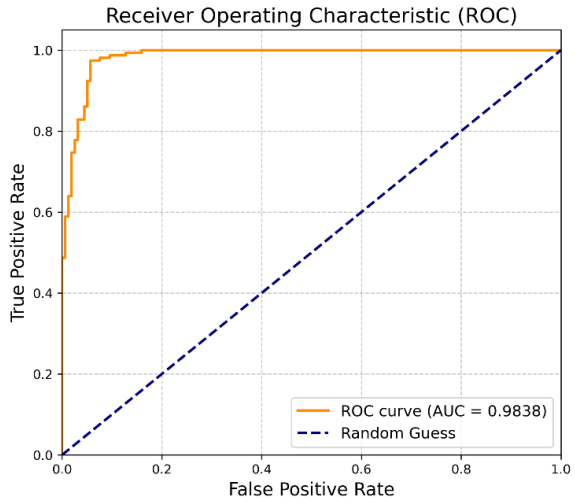
توانایی بالای مدل در تفکیک کلاس‌ها در ماتریس درهم‌آمیختگی (شکل ۳) به وضوح قابل مشاهده است. افزون بر این، منحنی مشخصه عملکرد سیستم در شکل ٤ رسم شده که مقدار AUC آن ۰.۹۸ است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، یک معماری ترکیبی یکپارچه متشکل از 1D CNN و LSTM برای تشخیص خودکار همگرایی گرانشی در منحنی‌های نوری فوران‌های پرتو گاما معرفی شد و چالش استخراج دستی ویژگی‌ها را برطرف گردید. ارزیابی‌ها نشان داد این شبکه می‌تواند با دقت ۹۵/۲٤٪ تفکیک کند. دستیابی به نرخ فراخوانی ۰/۹۸ برای رویدادهای لنز شده ثابت می‌کند که مدل پیشنهادی کاندیداهای واقعی را با ضریب اطمینان بالایی و با حداقلِ خطای نوع دوم شناسایی می‌کند. این دستاورد مسیر را برای تحلیل خودکار داده‌های حجیم تلسکوپ‌های فضایی هموار می‌سازد.



شکل ۳: ماتریس درهم‌آمیختگی (Confusion Matrix)؛ نشان دهنده عملکرد عالی مدل در تفکیک صحیح کلاس‌ها و تعداد بسیار پایین خطاهای دسته‌بندی.



شکل ٤: منحنی مشخصه عملکرد سیستم (ROC)؛ نزدیک شدن نمودار به گوشه بالا سمت چپ، نشان‌دهنده توانایی و حساسیت بسیار بالای مدل پیشنهادی در تفکیک صحیح رویدادها است.

مرجع‌ها

[۱] B. Zhang, *The Physics of Gamma-Ray Bursts*. Cambridge: Cambridge University Press, 2018.

[۲] G. J. Wang *et al.*, "Reconstructing the Hubble diagram of gamma-ray bursts using deep learning," *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 509, no. 1, pp. 78-86, 2021.

[۳] Y. LeCun, Y. Bengio, and G. Hinton, "Deep learning," *Nature*, vol. 521, no. 7553, pp. 436-444, 2015. DOI: 10.1038/nature14539.

[۴] M. H. Zhoolideh Haghighi *et al.*, "Machine Learning Identification of Gravitationally Microlensed Gamma-Ray Bursts," *The Astrophysical Journal*, vol. 992, no. 2, p. 189, 2024.

[۵] S. Hochreiter and J. Schmidhuber, "Long short-term memory," *Neural Computation*, vol. 9, no. 8, pp. 1735-1780, 1997.

[٦] D. M. Hosenie *et al.*, "Classification of Variable Stars Light Curves Using Long Short Term Memory Network," *Frontiers in Astronomy and Space Sciences*, vol. 8, 2021.

تخمین انتقال‌به‌سرخ فوران‌های پرتو گاما با استفاده از یادگیری ماشین

قنبری ، آرمین [۱] ؛ ژولیده حقیقی، محمد حسین [۱، ۲]

[1] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، ۱۵۸۷۵۴۴۱۶، تهران، ایران
[2] پژوهشکده نجوم، پژوهشگاه دانش های بنیادی، ۱۹۳۹۵۵۵۳۱، تهران، ایران

چکیده

اندازه‌گیری انتقال‌به‌سرخ فوران‌های پرتو گاما برای مطالعه جهان اولیه ضروری است. در این مقاله، برای پرداختن به این مسئله، روشی مبتنی بر یادگیری ماشین برای تخمین انتقال‌به‌سرخ فوران‌های پرتو گاما ارائه می‌دهیم. با استفاده از ۴۳۶ فوران پرتو گاما با انتقال‌به‌سرخ مشخص که توسط ماهواره سوئیفت مشاهده شده‌اند، ویژگی‌های سری‌های زمانی آماری را از منحنی‌های نوری تابش آنی با استفاده از کتابخانه سزیوم استخراج می‌کنیم. این ویژگی‌ها برای آموزش یک مدل رگرسیون به کار می‌روند که در نتیجه، با ضریب تعیین ۰/۹۴ و میانگین خطای مطلق ۰/۲، قادر به تخمین انتقال‌به‌سرخ است.

واژه های کلیدی: *فوران‌های پرتو گاما، ماهواره سوئیفت، انتقال‌به‌سرخ، یادگیری ماشین، کتابخانه سزیوم.*

Estimating the Redshift of Gamma-Ray Bursts using Machine Learning

Ghanbari, Armin[1]; Zhoolideh Haghighi, Mohammad Hossein[1,2]

[1] Department of Physics, Khajeh Nasir Toosi University of Technology, 158754416, Tehran, Iran
[2] School of Astronomy, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), 19395-5531, Tehran, Iran

Abstract

Measuring the redshift of Gamma-Ray Bursts(GRB) is essential for studying the early universe. In this paper, to address this, we present a machine learning-based method for estimating the redshift of GRBs. Using 436 GRBs with known redshifts observed by the Swift satellite, we extract statistical time-series features from the prompt emission light curves using the cesium package. These features are used to train a regression model, which, with an R^2 of 0.94 and a mean absolute error of 0.2, is capable of estimating redshift.

***Keywords**: Gamma-Ray Bursts, Swift satellite, Redshift, Machine Learning, Cesium package*

PACS No. 94, 97

مقدمه

فوران‌های پرتوی گاما[1] از پرانرژی‌ترین و درخشان‌ترین رویدادهای گذرای جهان هستند که در سراسر طیف الکترومغناطیسی، از پرتوهای گاما گرفته تا طول‌موج‌های رادیویی، تابش می‌کنند. فوران پرتوهای گاما دو فاز تابشی متمایز از خود نشان می‌دهند، تابش آنی[2] که با تشعشع شدیدی از پرتوهای گامای پرانرژی گرفته تا پرتوهای ایکس سخت و نرم و گاهی در طیف مرئی مشخص می‌شود، و به دنبال آن پس‌تاب[3] که با گسیل گسترده چندطول‌موجی در پرتوهای ایکس، مرئی و گاهی فرکانس‌های رادیویی همراه است[۱] . اهمیت کیهان‌شناختی فوران‌های پرتوی گاما وابسته به اندازه‌گیری دقیق انتقال‌به‌سرخ است که برای تعیین فاصله، انرژی و تحلیل‌های جمعیتی مهم می‌باشد. با این‌حال، تنها حدود ۲۳٪ از فوران‌گرهای گامای کشف‌شده توسط تلسکوپ سوئیفت[4] دارای انتقال‌به‌سرخ

[1] Gamma Ray Bursts
[2] Prompt emission
[3] After glow
[4] Swift satellite

اندازه‌گیری شده هستند[۲]. امروزه با کاربرد روبه رشد روش‌های یادگیری ماشین در تحلیل داده‌های رصدی و حوزه اخترفیزیک، شاهد پیشرفت‌های چشمگیری هستیم.

برای نمونه، در زمینه تخمین انتقال‌به‌سرخ فوران‌گرها، رویکردهای متنوعی شامل شبکه‌های عصبی عمیق توانایی مدل‌های یادگیری عمیق را در استخراج الگوهای پیچیده از داده‌های فوران‌گرها به نمایش گذاشته‌اند[۳]، همچنین روش‌های مبتنی بر طبقه‌بندی ارائه داده‌اند که با استفاده از یادگیری نظارت‌شده، امکان دسته‌بندی فوران‌گرهای نوری را بر اساس بازه‌های انتقال‌به‌سرخ فراهم می‌سازد [٤]، علاوه بر موارد ذکر شده، نشان داده شده است که با ترکیب چندین الگوریتم یادگیری ماشین می توان به توسعه مدل‌های آنسامبل پرداخته و انتقال‌به‌سرخ فوران‌گر را تخمین زد [٥] و [٦]. برخلاف پژوهش‌های پیشین، مقاله حاضر فقط با بهره‌گیری از منحنی نوری تابش آنی ثبت‌شده توسط ماهواره سوئیفت که برای اکثر فوران‌گرها در دسترس است، و استخراج ویژگی‌های زمانی و آماری با الهام‌گیری از [۷]، به تخمین مستقیم و عددی انتقال‌به‌سرخ به عنوان یک مسئله رگرسیون می‌پردازد.

پیش‌پردازش داده‌ها و تبدیل به درخشندگی

رصدخانه سوئیفت[۸] تابش آنی فوران‌های پرتوی گاما را در چهار باند انرژی از ۱۵ الی ۳۵۰ کیلوالکترون‌ولت ثبت می‌کند. در این مقاله، تنها فوران‌گرهایی با انتقال‌به‌سرخ معتبر و اندازه‌گیری‌شده انتخاب شده‌اند. استفاده از منحنی نوری تابش آنی به ما امکان این را می‌دهد تا مدلی با پوشش وسیع‌تر داده ارائه دهیم. تابش آنی فوران‌های پرتو گاما تقریباً برای تمام رویدادهای شناسایی‌شده توسط رصدخانه سوئیفت ثبت می‌شود، در حالی که داده‌های پس‌تاب تنها برای کسری از فوران‌گرها موجود است. از سوی دیگر، منحنی نوری تابش آنی مستقیماً به فیزیک چشمه و مکانیسم‌های گسیل در لحظه انفجار مرتبط است و ویژگی‌های زمانی آن مانند زمان اوج، پهنای پالس، و نرخ تغییرات شار، اطلاعات موردنیاز درباره انرژی آزادشده و ساختار چشمه در اختیار می‌گذارد. [۹]

به دلیل انبساط کیهان، منحنی‌های نوری رصدشده دچار اتساع زمانی و کشیدگی می‌شوند. برای حذف این اثرات، آن‌ها را با استفاده از یک حلقه تکرارشونده بر اساس رابطه آماتی به درخشندگی ذاتی در چارچوب سکون تبدیل می‌کنیم این کار را با استفاده از یک حلقه تکرار و بکارگیری رابطه تجربی آماتی[۵] [۱۰] انجام می‌دهیم.

(1) رابطه آماتی

$$E_{p,rest} \propto E_{iso}^{\cdot\cdot 5}$$

پس از همگرایی، درخشندگی ذاتی فوران پرتو گاما به دست می‌آید.

(2) درخشندگی ذاتی در مرجع

$$L_{iso}^{bol}(t) = Rate_{band}(t) \cdot ECF_{final}, band \cdot \varepsilon\pi\, D_L^{\cdot\cdot} \cdot k_{corr}, total$$

نتیجه نهایی، منحنی نوری تبدیل‌شده ای است که نمایانگر انتشار واقعی انرژی، عاری از اتساع زمانی کیهانی است و این امکان را می‌دهد که صدها فوران پرتو گاما بدون وابستگی به فاصله، مستقیماً مقایسه و تحلیل شوند.

استخراج ویژگی و انتخاب مدل یادگیری ماشین

جهت کشف رابطه میان انتقال‌به‌سرخ و منحنی نوری فوران‌های پرتو گاما، مجموعه‌ای از ویژگی‌های آماری و زمانی از منحنی نوری این فوران‌ها استخراج کردیم. ویژگی‌ها با استفاده ازکتابخانه‌ی سزیوم[۱۱] استخراج شدند، از منحنی‌های نوری تبدیل‌شده به درخشندگی ذاتی، ویژگی‌های کلیدی استخراج می‌شوند، از جمله انحراف معیار[٦]، میانگین وزنی[۷]، آزمون‌های اندرسون دارلینگ و شاپیرو ویلک، شاخص‌های استتسون (Stetson J & K)، میانه‌ی انحراف مطلق، درصد نزدیکی به میانه[۸] ، و دوره‌ی تناوب سریع . این ویژگی‌ها به مدل در تشخیص رفتار فوران‌گر کمک می‌کنند.

ویژگیهای مورد استفاده در این پژوهش عمدتاً از نوع آماری هستند و مستقیماً کمیتهای اخترفیزیکی محسوب نمیشوند. هدف این مطالعه بررسی این موضوع بوده است که آیا اطلاعات موجود در شکل و رفتار زمانی منحنی نوری پرتوهای گاما، بدون استفاده از مدلسازی فیزیکی پیچیده، حاوی اطلاعات کافی برای تخمین سرخگرایی هستند یا خیر.

[5] Amati relation
[6] Standard Deviation
[7] Weighted Average
[8] Percent Close to Median

اگرچه ویژگیهایی نظیر دامنه تغییرات، چولگی، پراکندگی، نسبتهای صدکی و سایر شاخصهای آماری ماهیت آماری دارند، اما این ویژگیها به طور غیرمستقیم ویژگیهای فیزیکی تابش را بازتاب میدهند. به عنوان مثال ساختار زمانی فوران، میزان تغییرپذیری، عدم تقارن پالسها و توزیع شار مشاهدهشده میتوانند در مقادیر این ویژگیها منعکس شوند. از این رو انتظار میرود که این ویژگیها تا حدی با سرخگرایی منبع همبستگی داشته باشند.

پس از استخراج ویژگی‌ها، داده‌های پرت با استفاده از روش فاصله بین‌چارکی شناسایی و حذف شدند و داده‌های ازدست‌رفته با روش میانه‌نگاری بازسازی گردیدند. همچنین ویژگی‌های انتخاب‌شده با اعمال تبدیل لگاریتمی به محدوده عددی پایدارتری منتقل شدند.

آموزش مدل

یادگیری ماشین به رایانه‌ها این امکان را می‌دهد تا با شناسایی الگوهای موجود در داده‌ها، بدون اینکه به طور مستقیم برنامه‌ریزی شده باشند، یکسری وظایف را انجام دهند. رگرسیون یک تکنیک در یادگیری ماشین است که برای پیش‌بینی مقادیر عددی پیوسته به کار می‌رود. این روش با یافتن بهترین رابطه بین متغیرهای ورودی و هدف خروجی عمل می‌کند. فرآیند پیش‌بینی سرخ‌گرایی به این صورت انجام می‌شود که برای هر فوران‌گر، مدل با ویژگی‌های زمانی و آماری استخراج شده به عنوان ورودی آموزش می‌بیند و سپس مقدار عددی انتقال‌به‌سرخ را به عنوان خروجی پیش‌بینی می‌کند. در ادامه، به توضیح فرایند انتخاب و پیاده‌سازی یک مدل رگرسیون یادگیری ماشین برای تخمین انتقال‌به‌سرخ فوران‌های پرتو گاما می‌پردازیم. هدف ما یک مدل پیش‌بینی‌کننده هوشمند است که بتواند ارتباط بین ویژگی‌های زمانی و آماری منحنی‌های نوری و انتقال‌به‌سرخ آنها را کشف کند. در این مطالعه از مدل LightGBM استفاده می‌کنیم. مدل LightGBM، دنباله‌ای از درخت‌های تصمیم[9] می‌سازد، به طوری که هر درخت جدید یاد می‌گیرد خطاهای تمام درخت‌های قبلی را به صورت ترکیبی تصحیح کند. درخت تصمیم، الگوریتمی است که داده را بر اساس پرسش‌های پشت‌سرهم از روی ویژگی‌های مختلف، در گره‌هایی شاخه‌شاخه تقسیم می‌کند تا به یک پیش‌بینی نهایی برسد. برخلاف تقویت گرادیان سنتی مانند(XGBoost) که درختان را عمق به عمق رشد می‌دهد، درختان را برگ به برگ رشد می‌دهد، به این معنی که همیشه برگی را گسترش می‌دهد که بیشترین کاهش در خطای پیش‌بینی را ایجاد کند، که این امر باعث می‌شود مدل با تعداد درخت‌های کمتری سریع‌تر همگرا شود. این برتری‌ها LightGBM را برای تخمین انتقال‌به‌سرخ فوران‌پرتوهای گاما گزینه خوبی می‌کند. بدین ترتیب که انتقال‌به‌سرخ به عنوان خروجی یا برچسب و ویژگی‌های استخراج شده به عنوان ورودی یا ماتریس ویژگی به مدل معرفی می‌گردند. در مرحله پیاده‌سازی، بعد از فراخوانی کتابخانه‌های مورد نیاز برای محاسبات عددی و مدیریت داده‌ها، از کتابخانه(sklearn)جهت تقسیم‌بندی داده‌ها به دو بخش آموزش و آزمایش تقسیم می‌کنیم. نسبت تقسیم داده‌ها به صورت ۷۰ درصد برای آموزش و ۳۰ درصد برای آزمایش در نظر گرفته شده است. همچنین برای دستیابی به تخمینی بدون سوگیری از عملکرد مدل، از اعتبارسنجی متقاطع ۵ تایی استفاده شد.

دستاوردها

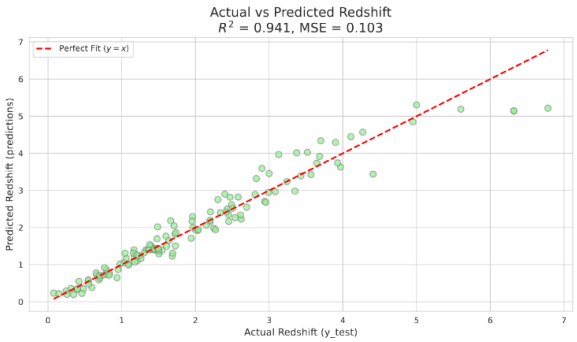
عملکرد مدل LightGBM را با استفاده از سه معیار اصلی ارزیابی می‌کنیم: ضریب تعیین R^2، میانگین خطای مطلق MAE و مربع میانگین خطا MSE. ابتدا مقدار R^2 برای مدل محاسبه گردید. R^2 میزان برازش مدل با داده‌های مشاهده‌شده را می‌سنجد و نشان میدهد که پیش‌بینی‌های مدل تا چه حد با نقاط داده‌های واقعی مطابقت دارد. مقدار محاسبه‌شده برای مدلLightgbm برابر با ۰/۹٤به دست آمد. این مقدار بسیار نزدیک به ۱ است و به این معناست که مدل سطح بالایی از همبستگی بین مقادیر واقعی و پیش‌بینی‌شده را نشان می‌دهد؛ فرمول محاسبه R^2 به صورت زیر است:

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

y_i مقدار واقعی، $\hat{y}_i$ مقدار پیش‌بینی‌شده توسط مدل، و $\bar{y}$ میانگین مقادیر واقعی است. در واقع، R^2 نشان می‌دهد که مدل چقدر از خطای کل را کاهش داده است. MAE، اندازه متوسط بزرگی

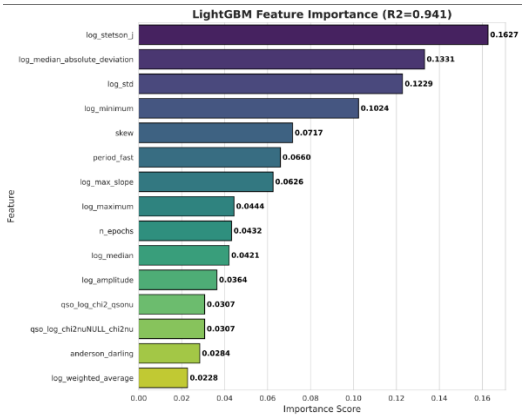
[9] Decision Trees

اشتباهات در پیش‌بینی‌ها را بدون توجه به مثبت یا منفی بودن خطا محاسبه می‌کند، مقدار بدست امده برای MAE برابر ۰/۲۰۷ است. یعنی پیش‌بینی‌ها به طور متوسط ۰/۲۰۷ واحد با مقادیر واقعی اختلاف دارند و MSE برابر ۰/۱۰۳ است. این معیارهای ارزیابی بدست امده، عملکرد مطلوب مدل و ارتباط بین ویژگی‌های استخراج‌شده از منحنی‌های نوری و انتقال‌به‌سرخ فوران‌ها را نشان می‌دهد. همچنین لازم به ذکر است که به دلیل در دسترس نبودن سرخ‌گرایی واقعی برای فوران‌گرهای مجهول، امکان ارزیابی مستقیم پیش‌بینی‌ها برای این دسته از منابع وجود ندارد. از این رو، ارزیابی عملکرد مدل بر اساس نمونه‌هایی انجام شده است که سرخ‌گرایی آن‌ها از قبل با روش‌های طیفی اندازه‌گیری شده و در مجموعه آزمون مورد استفاده قرار گرفته‌اند.



شکل ۱ : مقایسه مقادیر واقعی و پیش‌بینی‌شده توسط مدل بر روی مجموعه آزمایشی. نقاط نزدیک به خط قطری نشان‌دهنده دقت بالای مدل هستند.

همچنین، اهمیت ویژگی‌های استخراج‌شده برای شناسایی تأثیرگذارترین ویژگی‌های منحنی نوری در شکل(۲) بررسی گردید. همانطور که مشاهده می‌شود، لگاریتم Median ، Stetson J Absolute Deviation و Standard Deviation سه ویژگی اثرگذار به ترتیب اهمیت هستند.



شکل ۲: اهمیت نسبی هر یک از ویژگی‌های استخراج شده را نشان می‌دهد.

نتیجه‌گیری

در این مطالعه به استخراج ویژگی های آماری مهم منحنی های نوری فوران گرهای پرتو گاها پرداختیم پس از آموزش مدل یادگیری ماشین، نشان دادیم چگونه می‌توان سرخ‌گرایی این اجرام را با استفاده از ویژگی‌های استخراج شده و یادگیری ماشین پیش‌بینی کرد. این رهیافت می تواند به عنوان روشی بدیل در کنار طیف سنجی به تخمین سرخ گرایی فوران گرهای پرتو گاما کمک کند. همچنین پژوهش‌های آینده می‌توانند با بهره‌گیری از ویژگی‌های فیزیکی، تفسیرپذیری مدل را افزایش دهند.

مرجع‌ها

[1] Zhang, B. (2018). VizieR Online Data Catalog: Short gamma-ray bursts (sGRBs) data (Zhang+, 2018). VizieR Online Data Catalog, J/ApJ/861/111.
[2] Dainotti, M. G.,et al. (2024). Gamma-ray bursts as distance indicators by a statistical learning approach. The Astrophysical Journal.
[3] Aldowma, T., & Razzaque, S. (2024). Deep Neural Networks for estimation of gamma-ray burst redshifts. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 529(3), 2676–2685.
[4] Sarkar, M., et al. (2025). Redshift Classification of Optical Gamma-Ray Bursts using Supervised Learning. arXiv preprint, arXiv:2512.13038.
[5] Dainotti, M. G., et al. (2024). Inferring the redshift of more than 150 GRBs with a machine-learning ensemble model. The Astrophysical Journal Supplement Series, 271(1), 22.
[6] Narendra, Aditya, et al. "Gamma-ray burst redshift estimation using machine learning and the associated web app." Astronomy Astrophysics 698 (2025): A92.
[7] Zhoolideh Haghighi, M., Kalantari, Z., Rahvar, S., & Ibrahim, A. (2025). Machine learning identification of gravitationally microlensed gamma-ray bursts. The Astrophysical Journal, 992.
[8] Lien, A. Y., et al. (2016). The third Swift Burst Alert Telescope gamma-ray burst catalog. The Astrophysical Journal, 829(1), 7.
[9] Enrico Costa and Filippo Frontera. Gamma-ray bursts origin and their afterglow: Story of a discovery and more. La Rivista del Nuovo Cimento, 34:585–615, 2011.
[10] Amati, L., et al. (2002). Intrinsic spectra and energetics of BeppoSAX gamma-ray bursts with known redshifts. Astronomy & Astrophysics, 390, 81–89
[11] Cesium Development Team. (2019). Cesium: A Python library for time-series feature extraction. Astrophysics Source Code Library, ascl:1903.012.

کاربست یادگیری ماشین در طبقه‌بندی ستارگان شیمیایی غیرمعمول

بلوکی ، اکرم[۱] ؛ وثیق ، فاطمه[۱] ؛ کومار ، نیتش[۲] ؛ گوش، سورات چاندرا[۳] ؛ ضیاء علی ، الهام[۴] ؛ جوشی ، سانتوش[۳] ؛ صفری ، حسین[۱،۵]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه زنجان، بلوار دانشگاه، زنجان

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه مطالعات انرژی و نفت(UPES) ، بیدهولی، دهلی نو، ۲۴۸۰۰۷، اوتاراکند، هند.

[۳] مؤسسه تحقیقاتی آریابهاتا علوم رصدی(ARIES) ، نینیتال، ۲۶۳۰۰۱، اوتاراکند، هند.

[۴] مؤسسه فیزیک نظری آندلس(CSIC) ، گلوریته ده لا استرونومیا، ۱۸۰۰۸ گرانادا، اسپانیا

[۵] رصدخانه، دانشکده علوم، دانشگاه زنجان، بلوار دانشگاه، زنجان

چکیده

در این پژوهش، یک چارچوب مبتنی بر یادگیری ماشین برای طبقه‌بندی ستارگان شیمیایی غیرمعمول نوع اول و نوع دوم با استفاده از منحنی‌های نوری کوتاه‌زمان مأموریت تِس ارائه شده است. مجموعه داده شامل ۱۹۳۹ ستاره شامل ۹۹۴ ستاره نوع اول و ۹۴۵ ستاره نوع دوم است که برای آموزش و ارزیابی مدل‌ها استفاده شده‌اند. از منحنی‌های نوری، مجموعه‌ای از ویژگی‌های آماری، فرکانسی، خودهمبستگی زمانی و چندمقیاسی استخراج شده و چهار الگوریتم یادگیری ماشین شامل جنگل تصادفی، ماشین بردار پشتیبان، گرادیان تقویتی شدید و شبکه عصبی پیچشی برای طبقه‌بندی به کار گرفته شده‌اند. نتایج نشان داد که الگوریتم گرادیان تقویتی شدید بهترین عملکرد را داشته و در مجموعه ارزیابی مستقل به دقت ۰/۸۹، امتیاز F1 برابر ۰/۸۹ و شاخص‌های مهارت حقیقی و هایدکه برابر ۰/۷۸ دست یافته است. این نتایج نشان می‌دهد که ترکیب ویژگی‌های استخراج‌شده از منحنی‌های نوری با روش‌های یادگیری ماشین می‌تواند جایگزینی سریع، خودکار و مقیاس‌پذیر برای روش‌های سنتی مبتنی بر تحلیل طیفی در شناسایی ستارگان شیمیایی غیرمعمول باشد.

واژه های کلیدی: *ستارگان شیمیایی غیرعادی، یادگیری ماشین، نورسنجی، منحنی نوری، طبقه‌بندی ستارگان.*

Application of Machine Learning in Classifying Chemically Peculiar Stars

Bolouki, Akram[1]; Vasigh, Fatemeh[1]; Kumar, Nitesh[2]; Ghosh, Surath Chandra[3]; Ziaali, Elham[4]; Joshi, Santosh[3]; Safari, Hossein[1,5]

[1] Department of Physics, Faculty of Science, University of Zanjan, University Blvd., Zanjan, Iran.
[2] Department of Physics, University of Petroleum and Energy Studies (UPES), Bidholi, Dehradun, 248007, Uttarakhand, India.
[3] Aryabhatta Research Institute of Observational Sciences (ARIES), Nainital, 263001, Uttarakhand, India.
[4] Instituto de Astrofísica de Andalucía (CSIC), Glorieta de la Astronomía s/n, E-18008 Granada, Spain.
[5] Observatory, Faculty of Science, University of Zanjan, University Blvd., Zanjan, Iran.

Abstract

In this study, a machine learning-based framework is presented for classifying chemically peculiar stars of types CP1 and CP2 using short-cadence light curves from the TESS mission. The dataset consists of 1,939 stars, including 994 CP1 stars and 945 CP2 stars, used for training and evaluating the models. From the light curves, a set of statistical, frequency-domain, temporal autocorrelation, and multiscale features is extracted, and four machine learning algorithms—Random Forest, Support Vector Machine, Extreme Gradient Boosting (XGBoost), and Convolutional Neural Network—are employed for classification.
The results showed that the Extreme Gradient Boosting algorithm achieved the best performance, reaching an accuracy of 0.89, an F1-score of 0.89, and True Skill Statistic (TSS) and Heidke Skill Score (HSS) of 0.78 on the independent evaluation set. These findings demonstrate that combining features extracted from light curves with machine learning methods can provide a fast, automated, and scalable alternative to traditional spectrum analysis-based methods for identifying chemically peculiar stars.

***Keywords**: Chemically peculiar stars, Machine learning, Photometry, Light curve, Stellar classification*

مقدمه

ستارگان شیمیایی غیرمعمول[۱] عمدتاً از رده‌های طیفی A و B هستند که به دلیل تفاوت در فراوانی عناصر سطحی مانند آهن، نیکل، استرانسیوم، یوروپیم و هلیوم نسبت به ستارگان معمولی شناخته می‌شوند. این ویژگی‌ها معمولاً به فرآیندهایی مانند نفوذ اتمی، میدان‌های مغناطیسی قوی و سرعت چرخش پایین مرتبط هستند[۱–٤]. بر اساس طبقه‌بندی پرستون، ستارگان شیمیایی غیرمعمول به چهار گروه اصلی تقسیم می‌شوند که در این مطالعه تمرکز بر دو گروه ستارگان نوع۱ (Am/Fm) وستارگان نوع۲ (Ap)است [۵]. ستارگان نوع اول معمولاً فاقد میدان مغناطیسی قوی هستند و با افزایش عناصر گروه آهن و کاهش کلسیم و اسکاندیم مشخص می‌شوند. [۷–٦]. اگرچه طیف‌سنجی همچنان روش استاندارد برای شناسایی و مطالعه این ستارگان به شمار می‌رود، در سال‌های اخیر روش‌های یادگیری ماشین با بهره‌گیری از داده‌های نجومی، در طبقه‌بندی اجرام، تحلیل منحنی‌های نوری و تخمین پارامترهای ستاره‌ای عملکرد موفقی نشان داده‌اند [۸]. در این پژوهش، برای نخستین‌بار قابلیت منحنی‌های نوری ماهواره نقشه‌بردار سیارات فراخورشیدی عبوری[۲] (تِس) در جداسازی ستارگان نوع۱ و نوع۲، تنها بر اساس تغییرات نورسنجی و بدون استفاده از اطلاعات طیفی، مورد بررسی و ارزیابی قرار می‌گیرد.

داده‌ها

برای تشکیل مجموعه داده آموزش و آزمون، ستارگان نوع ۱ و نوع ۲ از مطالعات پیشین انتخاب شدند [۹–۱۱]. در این پژوهش تنها داده‌های حاصل از مشاهدات کوتاه‌مدت ۲ دقیقه‌ای که توسط خط لوله رسمی مرکز پردازش و آرشیو داده‌های تس[۳]استفاده شد و سه سکتور ابتدایی هر ستاره در نظر گرفته شد. پس از اعمال این معیارهای انتخاب، مجموعه نهایی شامل ۹۹٤ ستاره نوع ۱ و ۹٤۵ ستاره نوع ۲ با منحنی‌های نوری باکیفیت و پوشش زمانی یکنواخت به دست آمد. در مرحله پیش‌پردازش، به منظور افزایش کیفیت سیگنال‌های نوری و حذف اثرات نویزی، یک روش حذف داده‌های پرت بر اساس برش مبتنی بر سیگمابه منظور کاهش اثر نویزهای ناشی از خطاهای ابزاری، برخورد پرتوهای کیهانی و نوسانات غیرستاره‌ای اعمال شد.

روش‌ها

برای تحلیل و مدل‌سازی منحنی‌های نوری تِس، یک چارچوب جامع استخراج ویژگی از سری‌های زمانی هموارسازی‌شده توسعه داده شد که هدف آن استخراج اطلاعات آماری، فرکانسی، زمانی و چندمقیاسی سیگنال‌ها بود. در این چارچوب، در مجموع ٤۰ ویژگی از هر منحنی نوری استخراج شد که شامل چهار گروه اصلی ویژگی‌های آماری، خودهمبستگی، فوریه و موجک بود [۱۲]. در بخش آماری، ۹ ویژگی شامل انحراف معیار، کمینه، بیشینه، میانه، چارک‌های اول و سوم، دامنه بین‌چارکی، چولگی و کشیدگی محاسبه شدند. این ویژگی‌ها برای توصیف توزیع شار نوری، میزان پراکندگی و ساختار کلی تغییرات سیگنال مورد استفاده قرار گرفتند و اطلاعاتی درباره رفتار دامنه‌ای و ویژگی‌های غیرگاوسی منحنی‌های نوری فراهم کردند. برای بررسی وابستگی‌های زمانی و ساختارهای حافظه‌دار موجود در سیگنال، ۵ ضریب اول تابع خودهمبستگی پس از حذف مقدار صفرمک محاسبه شد. همچنین، به منظور استخراج الگوهای تناوبی در حوزه فرکانس، تبدیل فوریه سریع بر روی سری‌های زمانی اعمال شد و ۱۰ مؤلفه ابتدایی طیف دامنه نرمال‌شده به عنوان ویژگی‌های فرکانسی استخراج شدند [۱۳]. به منظور تحلیل رفتار سیگنال در مقیاس‌های زمانی مختلف، تبدیل موجک گسسته با موجک Daubechies-4 و سطح تجزیه ۳ به کار گرفته شد. از ضرایب تقریب و جزئیات موجک، چهار شاخص آماری شامل میانگین، انحراف معیار، کمینه و بیشینه استخراج شدند که در مجموع ۱٦ ویژگی چندمقیاسی را تشکیل دادند. در نهایت، مجموعه ویژگی‌های استخراج‌شده به عنوان ورودی مدل‌های یادگیری ماشین شامل جنگل تصادفی، ماشین بردار پشتیبان و الگوریتم‌های تقویتی مورد استفاده قرار گرفتند [۱٤–۱۷]. عملکرد مدل‌های طبقه‌بندی نیز با استفاده از معیارهای دقت، صحت، بازخوانی، امتیاز F1و شاخص‌های مهارت حقیقی و هایدکه ارزیابی شد.

---

۱ chemically peculiar stars
۲ TESS: Transiting Exoplanet Survey Satellite
۳ SPOC: Science Processing Operations Center

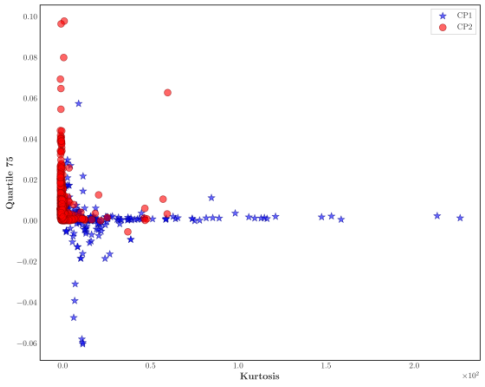
نتایج

در این پژوهش، مجموعه داده شامل ۹۹٤ ستاره نوع ۱ و ۹٤٥ ستاره نوع ۲ پس از استخراج ویژگی از منحنی‌های نوری هموارسازی‌شده تس مورد تحلیل قرار گرفت. داده‌ها به‌صورت تصادفی به دو بخش آموزش (۸۰ درصد) و آزمون داخلی (۲۰ درصد) تقسیم شدند. به‌منظور کاهش اثر نامتوازنی ناشی از تفاوت تعداد منحنی‌های نوری، نمونه‌های دارای تعداد کمتر منحنی در مرحله آموزش با روش تکرار متوازن اصلاح شدند. علاوه بر این، ۸۰ ستاره مستقل (٤۰ ستاره از هر کلاس) از فرآیند آموزش جدا و به‌عنوان مجموعه آزمون خارجی برای ارزیابی توانایی تعمیم مدل‌ها استفاده شدند. برای طبقه‌بندی، چهار الگوریتم شامل جنگل تصادفی، ماشین بردار پشتیبان، تقویت گرادیانی شدید و شبکه عصبی پیچشی به کار گرفته شدند. تمامی مدل‌ها بر اساس بردار ویژگی‌های استخراج‌شده آموزش داده شدند؛ به‌طوری‌که در مدل شبکه عصبی پیچشی نیز ویژگی‌های استانداردسازی‌شده پس از تغییر شکل به ساختار یک‌بعدی به عنوان ورودی لایه‌های پیچشی استفاده شدند. به‌منظور بررسی پایداری نتایج، هر مدل در ۱۰۰ تکرار مستقل آموزش و ارزیابی شد و میانگین و انحراف معیار معیارهای عملکرد محاسبه گردید. نتایج آزمون داخلی در جدول ۱ ارائه شده است. مقایسه مدل‌ها نشان داد که تمامی روش‌ها توانایی مناسبی در تفکیک ستارگان نوع ۱ و نوع ۲ دارند. نرخ بازخوانی ستارگان نوع ۱ در مدل‌های مختلف در محدوده ۰/۸۸ تا ۰/۹٦ قرار داشت، در حالی که مدل تقویت گرادیانی شدید بهترین عملکرد را در شناسایی ستارگان نوع ۲ ارائه داد و به نرخ بازخوانی ۰/۹٤ و دقت ۰/۹٥ دست یافت.

Metric	RF	SVM	XGB	CNN
Accuracy	0.94 ± 0.01	0.87 ± 0.01	0.95 ± 0.01	0.88 ± 0.01
Recall CP1	0.94 ± 0.01	0.88 ± 0.01	0.96 ± 0.01	0.90 ± 0.02
Recall CP2	0.94 ± 0.01	0.87 ± 0.01	0.94 ± 0.01	0.86 ± 0.03
Precision CP1	0.94 ± 0.01	0.87 ± 0.01	0.95 ± 0.01	0.87 ± 0.02
Precision CP2	0.95 ± 0.01	0.88 ± 0.01	0.95 ± 0.01	0.89 ± 0.02
Recall	0.95 ± 0.01	0.87 ± 0.01	0.95 ± 0.01	0.88 ± 0.01
Precision	0.95 ± 0.01	0.88 ± 0.01	0.95 ± 0.01	0.88 ± 0.01
F1-score	0.94 ± 0.01	0.87 ± 0.01	0.95 ± 0.01	0.88 ± 0.01
HSS	0.90 ± 0.01	0.75 ± 0.02	0.90 ± 0.01	0.76 ± 0.02
TSS	0.90 ± 0.01	0.75 ± 0.02	0.90 ± 0.01	0.76 ± 0.02

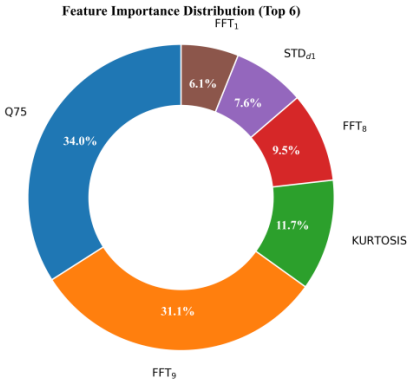
جدول۱: میانگین و انحراف معیار معیارهای عملکرد چهار مدل طبقه‌بندی در ۱۰۰ تکرار مستقل روی مجموعه آزمون داخلی (۲۰ درصد داده‌ها).

برای بررسی قابلیت جداسازی اولیه ویژگی‌های آماری، رابطه بین چارک ۷۵ درصدی توزیع قدر و کشیدگی منحنی‌های نوری بررسی شد. همان‌طور که در شکل ۱ نشان داده شده است، ترکیب این دو ویژگی توانست تفاوت اولیه میان ستارگان نوع ۱ و نوع ۲ را آشکار کند و نشان دهد که ویژگی‌های آماری ساده نیز دارای اطلاعات تفکیکی قابل توجهی هستند.



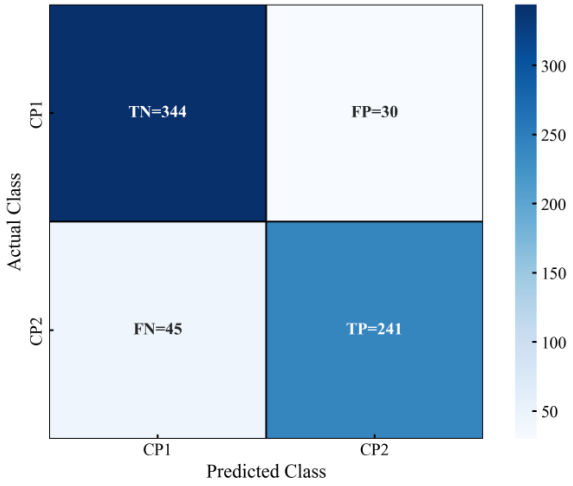
شکل ۱ نمودار پراکندگی چارک ۷۵ درصد برحسب کشیدگی برای دو گروه ستارگان نوع۱ وستارگان نوع۲

به‌منظور تعیین سهم هر ویژگی در فرآیند طبقه‌بندی، اهمیت ویژگی‌ها با استفاده از مدل تقویت گرادیانی شدید محاسبه شد. نتایج نشان داد که ویژگی‌های آماری، فرکانسی، خودهمبستگی و موجک بیشترین نقش را در تفکیک دو کلاس دارند. در میان ویژگی‌ها، چارک ۷۵ درصدی مهم‌ترین ویژگی بود و پس از آن کشیدگی، مؤلفه‌های تبدیل فوریه، ضرایب خودهمبستگی و ویژگی‌های چندمقیاسی موجک بیشترین تأثیر را داشتند.



شکل ۱: شناسایی٦ ویژگی برتر با استفاده از گرادیان تقویت شدید و میانگین‌گیری روی ۱۰۰ تکرار.

برای بررسی جزئی‌تر عملکرد مدل منتخب، ماتریس درهم‌ریختگی مدل تقویت گرادیانی شدید محاسبه شد. این ماتریس تعداد نمونه‌های صحیح و اشتباه طبقه‌بندی‌شده در هر کلاس را نشان می‌دهد و میزان توانایی مدل در تفکیک ستارگان نوع ۱ و نوع ۲ را مشخص می‌کند.



شکل ۳: ماتریس درهم‌ریختگی مدل تقویت گرادیانی شدید برای طبقه‌بندی ستارگان نوع ۱ و نوع ۲.

در مرحله نهایی، توانایی تعمیم مدل‌ها با استفاده از مجموعه آزمون خارجی شامل ۸۰ ستاره مستقل ارزیابی شد. این نمونه‌ها در هیچ مرحله‌ای از آموزش استفاده نشده بودند. نتایج این ارزیابی در جدول ۲ ارائه شده است. مدل تقویت گرادیانی شدید در این مرحله نیز بهترین عملکرد را نشان داد و به دقت ۰/۸۹ دست یافت که بیانگر توانایی مناسب آن در طبقه‌بندی نمونه‌های مشاهده‌نشده است.

Metric	RF	SVM	XGB	CNN
Accuracy	085 ± 0.01	0.81 ± 0.01	0.89 ± 0.01	0.84 ± 0.01
Recall CP1	0.85 ± 0.01	0.80 ± 0.01	0.91 ± 0.01	0.84 ± 0.01
Recall CP2	0.86 ± 0.01	0.81 ± 0.01	0.86 ± 0.02	0.84 ± 0.02
Precision CP1	0.86 ± 0.02	0.81 ± 0.01	0.87 ± 0.02	0.84 ± 0.01
Precision CP2	0.85 ± 0.02	0.80 ± 0.00	0.91 ± 0.01	0.84 ± 0.01
Recall	0.85 ± 0.01	0.81 ± 0.01	0.89 ± 0.01	0.84 ± 0.01
Precision	0.85 ± 0.01	0.81 ± 0.01	0.89 ± 0.01	0.84 ± 0.01
F1-score	0.84 ± 0.01	0.81 ± 0.01	0.89 ± 0.01	0.84 ± 0.01
HSS	0.71 ± 0.02	0.61 ± 0.01	0.78 ± 0.03	0.68 ± 0.01
TSS	0.71 ± 0.02	0.61 ± 0.01	0.78 ± 0.03	0.68 ± 0.01

جدول ۲: معیارهای عملکرد مدل‌های طبقه‌بندی در مجموعه آزمون خارجی شامل ۸۰ ستاره مستقل.

نتیجه گیری

در این پژوهش، ترکیب ویژگی‌های استخراج‌شده از منحنی‌های نوری تس با روش‌های یادگیری ماشین برای طبقه‌بندی ستارگان نوع ۱ و نوع ۲ بررسی شد. نتایج نشان داد که ویژگی‌های آماری، فرکانسی، خودهمبستگی و موجک اطلاعات مؤثری برای تفکیک این دو گروه فراهم می‌کنند و مدل تقویت گرادیانی شدید بهترین عملکرد را در میان روش‌های بررسی‌شده ارائه داد. تحلیل اهمیت ویژگی‌ها نشان داد که ویژگی‌هایی مانند چارک ۷۵ درصدی، کشیدگی، مؤلفه‌های تبدیل فوریه و ویژگی‌های چندمقیاسی موجک بیشترین نقش را در فرآیند طبقه‌بندی دارند. همچنین، اجرای ۱۰۰ تکرار مستقل و ارزیابی مدل‌ها روی مجموعه آزمون خارجی شامل ۸۰ ستاره مستقل، پایداری عملکرد و توانایی تعمیم مناسب مدل‌ها را نشان داد. این نتایج بیانگر نبود شواهدی از بیش‌برازش شدید در محدوده داده‌های بررسی‌شده است، اگرچه حذف کامل احتمال بیش‌برازش نیازمند ارزیابی‌های گسترده‌تر روی داده‌های مستقل‌تر خواهد بود. در مجموع، چارچوب پیشنهادی نشان می‌دهد که ترکیب ویژگی‌های چندحوزه‌ای منحنی‌های نوری با یادگیری ماشین می‌تواند روشی مؤثر و مقیاس‌پذیر برای طبقه‌بندی خودکار ستارگان شیمیایی خاص در داده‌های بزرگ تس باشد.

[1] Smith, K. C. (1996). Chemically Peculiar Hot Stars. *Astrophysics and Space Science*, *237*(1-2), 77-105.
[2] Bychkov, V. D., Bychkova, L. V., & Madej, J. (2009). Catalogue of averaged stellar effective magnetic fields - II. Re-discussion of chemically peculiar A and B stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, *394*(3), 1338-1350.
[3] Pöhnl, H., Maitzen, H. M., & Paunzen, E. (2003). On the evolutionary status of chemically peculiar stars of the upper main sequence. *Astronomy & Astrophysics*, *402*, 247-252.
[4] Kochukhov, O., & Ryabchikova, T. A. (2018). Putting atomic diffusion theory of magnetic ApBp stars to the test: evaluation of the predictions of time-dependent diffusion models. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, *474*(2), 2787-2795.
[5] Preston, G. W. (1974). The chemically peculiar stars of the upper main sequence. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, *12*, 257-277.
[6] Paunzen, E. (2024). The astrophysical parameters of chemically peculiar stars from automatic methods. *Astronomy & Astrophysics*, *683*, Article L7.
[7] Paunzen, E., Hensberge, H., Maitzen, H. M., Netopil, M., Trigilio, C., Fossati, L., Heiter, U., & Pranka, M. (2011). A photometric long-term study of chemically peculiar stars in open clusters. *Astronomy & Astrophysics*, *525*, Article A16.
[8] Paunzen, E., Stütz, C., & Maitzen, H. M. (2005). On the detection of chemically peculiar stars using Δa photometry. *Astronomy & Astrophysics*, *441*(2), 631-640.
[9] Chen, P. S., Liu, J. Y., & Shan, H. G. (2017). A New Photometric Study of Ap and Am Stars in the Infrared. *The Astronomical Journal*, *153*(5), Article 218.
[10] Kobzar, O., Khalack, V., Bohlender, D., Mathys, G., Shultz, M. E., Bowman, D. M., Paunzen, E., Lovekin, C., David-Uraz, A., Sikora, J., Lampens, P., & Richard, O. (2022). Analysis of eight magnetic chemically peculiar stars with rotational modulation. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, *517*(4), 5340-5357.
[11] Zhang, Y., Liu, C., Wu, Y., Wang, H., Zhang, H., Wang, Y., Zhang, Y., Wang, L., Luo, A., Zhao, Y., Zong, W., Bai, Z., Cui, X., Du, C., Gong, X., Guo, J., Hou, Y., Hu, Z., Jiang, Y., ... Zhu, Z. (2025). The Catalog of Stellar Spectral Energy Distributions from the LAMOST Survey. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, *259*(2), Article 63.
[12] Bolouki, A., Hasanzadeh, A., & Safari, H. (2026). Ensemble Machine Learning Approach to Estimate the Asteroseismic Indices for δ Scuti Stars Observed by TESS. *The Astronomical Journal*, *171*(5), Article 313.
[13] Bergland, G. D. (1969). A guided tour of the fast Fourier transform. *IEEE Spectrum*, *6*(7), 41-52.
[14] Breiman, L. (2001). Random Forests. *Machine Learning*, *45*, 5-32
[15] Jakkula, V. (2006). Tutorial on support vector machine (svm). *School of EECS, Washington State University*, *37*(2.5), 3.
[16] Chen, T., & Guestrin, C. (2016). XGBoost: A Scalable Tree Boosting System. *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining* (pp. 785–794). Association for Computing Machinery.
[17] Krichen, M. (2023). Convolutional Neural Networks: A Survey. *Computers*, *12*(8), Article 151.

کنفرانس فیزیک ایران

دانشگاه قم – ۲ الی ۵ شهریور ۱۴۰۵

مجموعه مقالات شاخه

هسته‌ای

www.psi.ir/f/physics1405

بررسی ضخامت پوسته نوترونی هسته ^{208}Pb توسط برهم‌کنش اسکایرم *OMGA

ناصر قدسی ، امید[۱]؛ مقدری امیری، مرتضی[۱]

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

چکیده

*در این پژوهش ضخامت پوسته نوترونی برای هسته ^{208}Pb با استفاده از محاسبات خودسازگار هارتری – فوک – بوگلیوبوف بر پایه نیروهای اسکایرم مورد بررسی قرار گرفته شده است. این پژوهش، از برهم‌کنش‌های اسکایرم SLy4 و*SkM* که برای هسته‌هایی با لایه بسته جادویی پارامترسازی شده‌اند، به همراه برهم‌کنش اسکایرم جدیدی تحت عنوان *OMGA که برای بازتولید بهتر خواص عناصر جادویی و فوق سنگین معرفی گردیده است، بهره گرفته است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهند که ضخامت پوسته نوترونی حاصل توسط برهم‌کنش اسکایرم *OMGA برابر با 0.212 fm می‌باشد. علاوه بر این، برهم‌کنش اسکایرم *OMGA سازگاری بهتری در بازتولید داده‌های تجربی مربوط به انرژی بستگی، شعاع باری و همچنین خواص ماده هسته‌ای نامحدود را در مقایسه با دو برهم‌کنش دیگر نشان می‌دهد.*

واژه های کلیدی: *ضخامت پوسته نوترونی، هسته فوق سنگین، فرمالیسم هارتری – فوک – بوگلیوبوف ، برهم‌کنش اسکایرم*

Investigation of neutron skin thickness of ^{208}Pb through OMGA* Skyrme interaction

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

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

Abstract

In this study, the neutron skin thickness of the nucleus ^{208}Pb is investigated using self-consistent Hartree-Fock-Bogoliubov calculations based on Skyrme interactions. The well-established Skyrme parameterizations, SLy4 and SkM, which have been optimized for closed-shell magic nuclei, are employed for comparison. In addition, the newly developed Skyrme interaction, OMGA, which has been parameterized to provide an improved description of magic and superheavy nuclei, is also utilized. The results indicate that the neutron skin thickness predicted by the OMGA* interaction is 0.212 fm. Furthermore, compared with the SLy4 and SkM* interactions, OMGA* provides better agreement with the experimental data for the binding energy, charge radius, and the properties of infinite nuclear matter.*

***Keywords**: Super heavy nucleus, Hartree-Fock-Bogoliubov, Skyrme interaction, Neutron skin thickness*

PACS No. 25

مقدمه

در دهه اخیر، بررسی خواص عناصر سنگین و فوق سنگین آلفا توجه بسیاری را به خود جلب نموده است [۱, ۲]. به توجه به مد غالب واپاشی عناصر فوق سنگین، واپاشی آلفا می‌تواند به عنوان ابزاری موثر بر شناسایی عناصر جدید در ناحیه فوق سنگین استفاده گردد.

از طرفی، مدل میدان متوسط بر پایه نیروهای اسکایرم، یکی از روش‌های موفق در توصیف میکروسکوپیکی خواص حالت پایه هسته‌ها می‌باشد . از آنجا که مدل مذکور بر پایه خواص هسته‌ای

عناصری می‌باشد که در آن نواحی آزمایشات و اندازه‌گیری تجربی محکمی صورت گرفته است، لذا داده‌هایی که با استفاده از محاسبات خودسازگار هارتری – فوک – بوگلیوبوف بر پایه نیروهای اسکایرم حاصل می‌شوند می‌توانند قابل اتکا باشند [۳].

اساسا، یک برهم‌کنش اسکایرم بر پایه بازتولید هرچه بهتر خواص حالت پایه هسته‌های محدود و پایدار در نزدیک خط پایداری بتا مانند انرژی بستگی، شعاع بازی و همچنین سدهای شکافت و همجوشی برای ماده هسته‌ای متقارن و نامتقارن پارامترسازی می‌شود.

در این میان، شماری از برهم‌کنش‌های اسکایرم مانند SLy4 و SkM* برای هسته‌هایی با لایه بسته جادویی و غنی از نوترون معرفی گردیده‌اند. باید در نظر داشت که اغلب برهم‌کنش‌های اسکایرم، عدد جادویی نوترونی $N = 128$ را در میگیرند[۴, ۵]. لذا، توسعه مطالعات در حوزه عناصر فوق سنگین مستلزم به کارگیری یک برهم‌کنش اسکایرم اختصاصی می‌باشد که حتی عدد جادویی نوترونی بعدی $N = 184$ را نیز در بر گیرد.

متعاقبا، در این پژوهش قصد داریم توابع توزیع نوکلئونی و ضخامت پوسته نوترونی هسته ^{208}Pb و تاثیر آن بر روی واپاشی آلفا را با استفاده از برهم‌کنش اسکایرم اختصاصی جدید OMGA* که توانایی بازتولید خواص ماده هسته‌ای نامحدود و از سوی دیگر انرژی بستگی، شعاع باری و خواص واپاشی آلفا مربوط به ماده هسته‌ای محدود (عناصر فوق سنگین) را دارد [۲]، بررسی نماییم.

محاسبات و نتایج

پیشرفت دانش در ناحیه فوق سنگین می‌تواند به توسعه جزایر پایداری کمک شایانی نماید. لذا، می‌توان برای مطالعات دقیق‌تر در این حوزه از مشاهده پذیرهای تجربی مانند، انرژی بستگی، شعاع باری، ضخامت پوسته نوترونی و نیمه‌عمر واپاشی خوشه‌های گوناگون استفاده نمود.

همانطور که پیش‌تر بیان شد، در این پژوهش از برهم‌کنش‌های اسکایرم SLy4 و SkM* رایج برای هسته‌های جادویی و سیستم‌های غنی از نوترون استفاده شده است. همچنین، در پژوهش اخیری که انجام داده‌ایم، برای عملکردی موثر برای هسته‌های جادویی و برای ناحیه فوق سنگین برهم‌کنش جدید OMGA* بر اساس خواص هسته‌های کروی جادویی ^{16}O، ^{40}Ca، ^{48}Ca، ^{56}Ni، ^{90}Zr، ^{100,120,124}Sn، ^{140}Ce، ^{208}Pb، ^{210}Po، ^{212}Rn، ^{214}Ra، ^{216}Th، ^{292}Hs، ^{296}Cn، ^{298}Fl، ^{300}Lv، ^{294}Og و ^{302}Og طوری پارامترسازی شده است که تا عدد جادویی $N = 184$ را نیز در بر گیرد و به طور همزمان خواص ماده هسته‌ای نامحدود را نیز تولید نماید [۲].

در واقع جامعه آماری در نظر گرفته شده برای پارامترسازی OMGA*، یک سیستم مرکب غیرخطی و ناهمگن از مشاهده – پذیرهایی می‌باشد که امکان پارامترسازی مذکور با برازش ساده محاسبات بر داده‌های تجربی آنها وجود ندارد. خوشبختانه با استفاده از روش بهینه سازی الگوریتم ژنیک برای پایه ساختار DNA ژنتیکی امکان برای پارامترسازی برهم‌کنش اسکایرم جدید OMGA* در دسترس قرار میگیرد. باید در نظر داشت که برهم‌کنش استاندارد پایه اسکایرم دارای ده پارامتر می‌باشد که می‌توان ساختاری شبیه به DNA را برای آن در نظر گرفت. در این الگوریتم با استفاده از فرآیندهای ترکیب ژن‌ها، جهش، جایگزینی، شکست و تولید ژن و ارزیابی همزمان بر اساس تابع هدف زیر می‌توان به نسلی منتخبی رسید که در جریان محاسبات تکراری به کمترین میزان انحراف از داده‌های تجربی مورد نظر رسید.

$$\chi^2 = \omega_{INM} \sum_i^N \left(\frac{o_i^{ref} - o_i^{calc}}{\sigma_{INM}} \right)^2 + \omega_{Rch} \sum_i^N \left(\frac{R_{ch,i}^{ref} - R_{ch,i}^{calc}}{\sigma_{ch}} \right)^2 + +\omega_E \sum_i^N \left(\frac{E_i^{ref} - E_i^{calc}}{\sigma_E} \right)^2 \quad (۱)$$

در رابطه فوق ω_i و σ_i به ترتیب بیانگر وزن و عدم قطعیت داده‌ها در محاسبات می‌باشند. لازم به ذکر که از وزن یکسان برای تمامی داده‌ها استفاده شده است. پارامترسازی و محاسبات ارزیابی به صورت یک چرخش تکراری تا زمانی که کمترین χ^2 حاصل شود در جریان می‌باشد تا پارامتر نهایی حاصل شود. خواص ماده هسته‌ای نامحدود برای OMGA*، SLy4 و SkM* در جدول۱ لیست شده‌اند.

نتایج ارائه شده در جدول۱ نشان میدهند که نیروی OMGA* به خوبی می‌تواند در بازتولید خواص ماده هسته‌ای نامحدود عمل کند. باید در نظر داشت انرژی تقارنی S_0 و شیب انرژی تقارنی L_0 حاصل برای OMGA* با مقادیر $S_0 = 34.3 \pm 1.7$ MeV و $L_0 = 83.1 \pm 24.7$ MeV که از آزمایشات اخیر گزارش شده است در تطابق بسیار خوبی قرار دارد [۶].

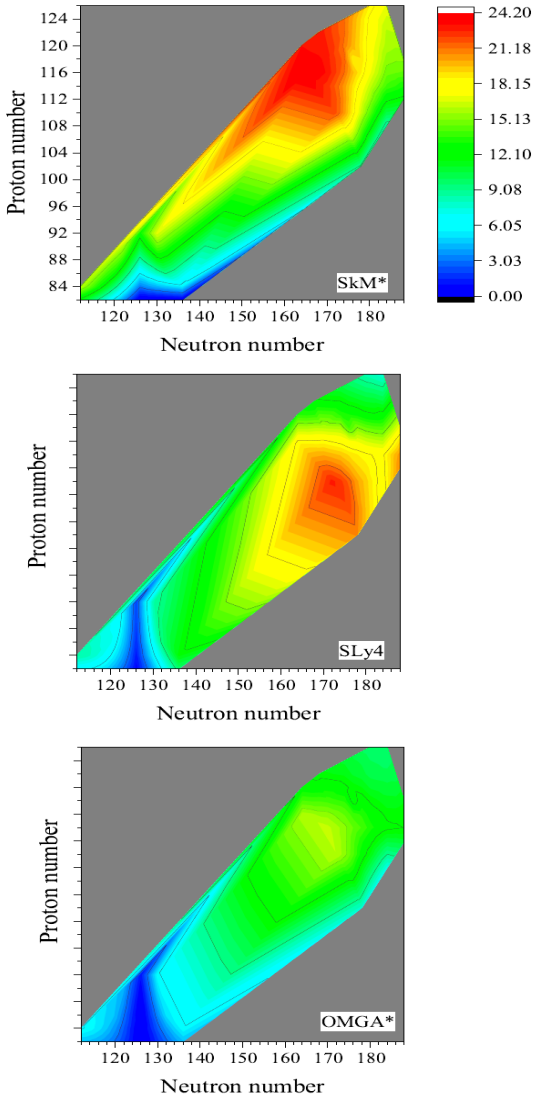
به منظور ارزیابی بیشتر توانایی این سه برهم‌کنش در بازتولید خواص ماده هسته‌ای محدود (عناصر فوق سنگین)، توانایی این سه برهم‌کنش در بازتولید انرژی بستگی فوق سنگین با اعداد اتمی $82 \leq Z \leq 126$ را در شکل۱ نشان داده شده است. باید بیان شود که از مقادیر انرژی بستگی و شعاع باری تئوری برای عناصر فوق سنگین شناخته نشده در کنار مقادیر تجربی و گزارش شده استفاده شده است .

جدول۱: خواص ماده هسته‌ای نامحدود.

Parameters	SkM*	SLy4	OMGA*
ρ_0	0.160	0.160	0.157
E_0	-15.770	-15.970	-15.920
S_0	30.030	32.000	32.964
L_0	45.780	45.940	77.907
K_0	216.610	229.910	251.925
m^*/m	0.788	0.694	0.776

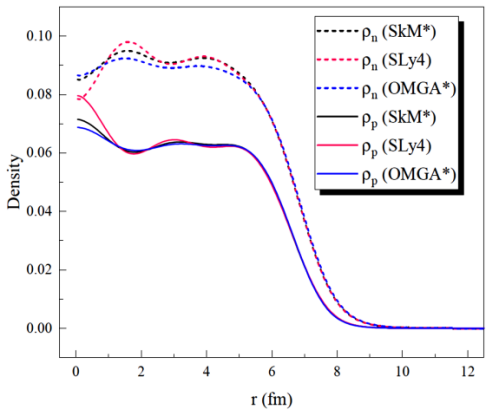
نتایج در شکل۱ به خوبی روند بهبود بازتولید انرژی بستگی هسته‌ها را برای OMGA* نسبت به SLy4 و SkM* نشان می‌دهد. مقادیر انحراف از معیار از مقادیر متناظر تئوری و تجربی برای SkM*، SLy4 و OMGA* به ترتیب 15.61، 14.13 و 10.15 می‌باشد و مابقی اختلاف میتواند به دلیل عدم نظرگیری انرژی تغییر شکل هسته باشد که چیزی حدود 10 تا 15 مگاالکترون ولت می‌باشد.

همچنین، مقادیر انحراف از معیار مقادیر متناظر محاسبه شده و تجربی شعاع‌های باری برای SkM*، SLy4 و OMGA* به ترتیب 0.04، 0.04 و 0.03 می‌باشد که به وضوح بهبود عملکرد در برهم‌کنش جدید را مشاهده می‌نماییم.



شکل۱: گراف‌های گرمایی برای مقادیر انحراف مطلق انرژی بستگی تئوری حاصل از سه برهمکنش با مقادیر تجربی و تئوری.

حال به منظور ارزیابی تاثیر میدان متوسط (نیروهای اسکایرم) بر روی توابع توزیع نوکلئونی، توابع توزیع پروتونی و نوترونی مربوط به هسته ^{208}Pb را در شکل۲ برای نمونه ارائه شده‌اند. با توجه به نتایج بدست آمده مشاهده می‌شود که انتخاب یک میدان متوسط (برهم‌کنش اسکایرم) می‌تواند تاثیر قابل ملاحظه ای در تخمین خواص هسته‌ها داشته باشد.



شکل۲: مقایسه توابع توزیع نوکلئونی حاصل از سه برهمکنش.

ضخامت پوسته نوترونی، $\Delta r_{np} \equiv R_n - R_p$، می‌تواند اطلاعات ارزشمندی درباره توزیع فضایی نوترون‌ها و پروتون‌ها در هسته فراهم کرده و به عنوان یکی از حساسترین مشاهده پذیرها نسبت به بخش ایزووکتوری برهمکنش هسته‌ای شناخته می‌شود. این کمیت به طور تجربی قابل اندازه‌گیری است که می‌تواند با خواص ماده هسته‌ای مانند انرژی تقارنی و شیب آن در ارتباط باشد. حال، ضخامت پوسته نوترونی، هسته ^{208}Pb را می‌توان با استفاده ازتوابع توزیع حاصل از سه برهمکنش مذکور را با مقادیر متناظر اندازه‌گیری شده در آزمایشگاه مدرن PREX-II مقایسه نمود [۷].

مقدار اندازه گیری شده ضخامت پوسته نوترونی 0.278 ± 0.078 fm می‌باشد در حالی که مقادیر 0.168 fm، 0.159 fm و 0.212 fm به ترتیب توسط نیروهای اسکایرم *SkM، SLy4 و *OMGA تخمین زده شده است.

متعاقبا، تاثیرات میدان‌های متوسط گوناگون می‌تواند بر روی محاسبه پتانسیل برهمکنشی نیز ادامه داشته باشد. از آنجا که توابع توزیع نوکلئونی نقش مهمی را در محاسبات نیمه عمر واپاشی آلفا توسط تئوری تابع چگالی DFT بر پایه برهم کنش اسکایرم ایفا میکنند. برای بررسی این تاثیرات می‌توان توانایی این سه برهمکنش را در بازتولید نیمه عمر واپاشی آلفای ^{212}Po→ α+^{208}Pb ارزیابی نمود. در حالی که نیمه عمر واپاشی 299 ns برای این سیستم گزارش شده است، به ترتیب مقادیر 0.125 ns، 0.102 ns و 0.195 ns برای برهم‌کنش‌های اسکایرم *SkM، SLy4 و *OMGA حاصل شده است.

نتیجه گیری

در این مطالعه ضخامت پوسته نوترونی هسته ^{208}Pb توسط محاسبات خود سازگار خودسازگار هارتری- فوک-بوگلیوبوف بر پایه برهم‌کنش‌های اسکایرم *SkM و SLy4 مورد بررسی قرار گرفته شده است. همچنین، در این پژوهش به منظور بازتولید واقع گرایانه‌تر ضخامت پوسته نوترونی هسته ^{208}Pb از برهم‌کنش جدیدی تحت عنوان *OMGA نیز استفاده شد است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهند که ضخامت پوسته نوترونی حاصل توسط برهم‌کنش اسکایرم *OMGA برابر با 0.212 fm می‌باشد. علاوه بر این، نتایج نشان می‌دهند که برهم‌کنش اسکایرم *OMGA سازگاری بهتری در بازتولید داده‌های تجربی را در مقایسه با دو برهم‌کنش دیگر برخوردار است.

مرجع‌ها

1. Wang, Z. and Z. Ren, *Investigating α decays of recently discovered heavy and superheavy nuclei within the improved density-dependent cluster model.* Physical Review C, 2024. **110**(6): p. 064307.
2. Amiri, M.M. and O.N. Ghodsi, *Toward a dedicated Skyrme interaction for alpha decay of superheavy nuclei.* Physical Review C, 2026. **114**(1): p. 014601.
3. Yoshida, K., *Cranked Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov approach for a mean-field description of nuclear rotations near the drip line.* Physical Review C, 2022. **105**(2): p. 024313.
4. Chabanat, E., et al., *A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities Part II. Nuclei far from stabilities.* Nuclear Physics A, 1998. **635**(1-2): p. 231–256.
5. Bartel, J., et al., *Towards a better parametrisation of Skyrme-like effective forces: A critical study of the SkM force.* Nuclear Physics A, 1982. **386**(1): p. 79–100.
6. Reed, B.T., et al., *Implications of PREX-2 on the equation of state of neutron-rich matter.* Physical Review Letters, 2021. **126**(17): p. 172503.
7. Adhikari, D., et al., *Accurate determination of the neutron skin thickness of Pb 208 through parity-violation in electron scattering.* Physical review letters, 2021. **126**(17): p. 172502.

استخراج فراکتال-آنتروپی داده های پرتو ایکس به منظور تشخیص تومور مغز با رویکرد یادگیری عمیق

رضائی ، رضا[۱] ؛ طیبی، جواد[۲] ؛ رضائی ، محمدرضا[۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان، ایران

[۲] گروه مهندسی هسته ای، دانشکده علوم و فناوری های نوین، دانشگاه تحصیلات تکمیلی فناوری پیشرفته، کرمان، ایران

چکیده

در این مقاله، روشی برای تشخیص تومور مغزی بر پایه استخراج ویژگی‌های فراکتال-آنتروپیک از طیف پراکندگی پرتو ایکس و طبقه‌بندی با شبکه عصبی عمیق ارائه شده است. با شبیه‌سازی مونت‌کارلوی فانتوم سر سالم و توموری در کد(MCNPX)، آنتروپی جهانی، آنتروپی موضعی (۱۷ پنجره انرژی همپوشان) و بعد فراکتال هر طیف محاسبه و یک بردار ۱۹ بعدی تشکیل گردید. شبکه عصبی پرسپترون چندلایه با دو لایه پنهان و تکنیک‌های منظم‌سازی، دقت ۹۷/۸٪، حساسیت ۹۷٪، ویژگی۹۸/۶٪ و (AUC) برابر ۰/۹۴۴ را نشان داد. این رویکرد غیرتهاجمی، کم‌دز و کم‌هزینه، پتانسیل بالایی برای کاربرد در سیستم‌های پشتیبان تشخیص پزشکی دارد.

واژه های کلیدی: تومور مغزی، پراکندگی پرتو ایکس، آنتروپی شانون، بعد فراکتال، یادگیری عمیق

Fractal-Entropic Extraction from X-Ray Data for Brain Tumor Diagnosis Using Deep Learning Approach

Rezaee, Reza[1]; Tayebi, Javad[2]; Rezaie, Mohammadreza[2]

[1] *Department of Physics, Isfahan University of Technology (IUT), Isfahan, Iran*

[2] *Department of Nuclear Engineering, Faculty of Modern Sciences and Technologies, University of Advanced Technology, Kerman, Iran*

Abstract

In this paper, a method for brain tumor detection based on extracting fractal-entropic features from X-ray scattering spectra and classification by a deep neural network is presented. Using Monte Carlo simulation of a healthy and tumorous head phantom in MCNPX code, global entropy, local entropy (17 overlapping energy windows), and fractal dimension of each spectrum were calculated, forming a 19-dimensional feature vector. A multilayer perceptron neural network with two hidden layers and regularization techniques achieved 97.8% accuracy, 97.0% sensitivity, 98.6% specificity, and an AUC of 0.994. This non-invasive, low-dose, and low-cost approach shows high potential for application in medical diagnostic support systems.

***Keywords**: Brain tumor, X-ray scattering, Shannon entropy, Fractal dimension, Deep learning*

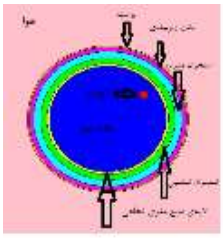
مقدمه

تشخیص زودهنگام تومور مغزی نقش حیاتی در افزایش شانس درمان و کاهش عوارض دارد. روش‌های تصویربرداری متداول مانند (MRI) و (CT) علی‌رغم دقت بالا، دارای محدودیت‌هایی نظیر هزینه‌ی زیاد، زمان بر بودن و در مورد (CT)، مواجهه با دز نسبتاً بالای پرتو یونیزان هستند[1]. از این رو، توسعه‌ی روش‌های تشخیصی غیرتهاجمی، کم‌دز و سریع مبتنی بر پرتو ایکس با انرژی پایین، همواره مورد توجه فیزیک پزشکی بوده است. در سال‌های اخیر، استفاده از ویژگی‌های آماری و هندسی طیف پراکندگی پرتو ایکس برای تمایز بافت سالم از توموری مورد بررسی قرار گرفته

است. آنتروپی شانون به عنوان معیاری از بی‌نظمی توزیع انرژی فوتون‌ها، توانسته است تغییرات بافتی را کمّی کند[2]. همچنین، بعد فراکتال که بیانگر خودهمانندی و پیچیدگی ساختاری یک سیگنال است[3]، در تحلیل سیگنال‌های زیستی کارایی بالایی نشان داده است. با این حال، بیشتر پژوهش‌های پیشین صرفاً از یکی از این ویژگی‌ها به صورت مجزا استفاده کرده‌اند. در این مقاله، مفهوم داده‌های فراکتال–آنتروپیک معرفی می‌شود که ترکیبی از بعد فراکتال و آنتروپی شانون طیف پراکندگی پرتو ایکس است. با استفاده از شبیه‌سازی مونت‌کارلوی کد (MCNPX) برای فانتوم سر سالم و حاوی تومور، این داده‌ها استخراج شده و سپس به عنوان ورودی یک شبکه عصبی مصنوعی ساده جهت تشخیص حضور تومور به کار می‌روند. هدف اصلی، ارزیابی توانایی این داده‌های ترکیبی در افزایش دقت تشخیص نسبت به استفاده از هر ویژگی به تنهایی است. نوآوری این کار در بهره‌گیری همزمان از آنتروپی و بعد فراکتال به عنوان یک نمایهٔ تشخیصی جدید و پیاده‌سازی آن با شبکه عصبی می‌باشد.

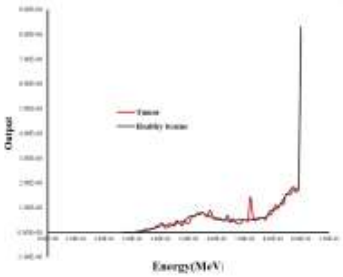
روش کار

در شبیه‌سازی انجام شده با کد (MCNPX)، فانتوم سر به صورت هشت لایه‌ی کروی متحدالمرکز مدل شد: مرکز (با شعاع داخلی صفر و چگالی ۱/۰۳ گرم بر سانتی‌متر مکعب) برای جایگذاری تومور یا بافت تغییر یافته (مواد مشابه مغز) در نظر گرفته شد؛ سپس لایه‌ی مغز سالم از شعاع داخلی ۳ تا ٦/٥ سانتی‌متر با چگالی ۱/۰٤ (بافت مغز)؛ لایه‌ی مایع مغزی–نخاعی (CSF)از شعاع ٦/٥ تا ٦/٨ سانتی‌متر با چگالی ۱ (آب خالص)؛ استخوان اسفنجی (دیپلویه) از ٦/٨ تا ۷/٥ سانتی‌متر با چگالی ۱/۰۳ (استخوان متخلخل)؛ استخوان فشرده (کورتیکال) از ۷/٥ تا ۸/۳ سانتی‌متر با چگالی ۱/۰٤ (استخوان متراکم)؛ بافت زیرجلدی از ۸/۳ تا ۸/۸ سانتی‌متر با چگالی ۱/۰٤(بافت نرم)؛ پوست از ۸/۸ تا ۹ سانتی‌متر با چگالی ۱/۰۹ (پوست انسان) و در نهایت لایه‌ی هوا از شعاع ۹ تا ٤۰ سانتی‌متر با چگالی ۰/۰۰۰۱۲۲٥ (هوا) تعریف گردید، که در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱: فانتوم شبیه سازی همراه با تومور در بافت مغز با استفاده از کد (MCNPX)

پرتو های خروجی برای دو رخداد بافت مغز دارای تومور و بدون تومور در شکل ۲، نشان داده شد است.



شکل۲: پرتو های ایکس خروجی از بافت مغز سالم و بافت مغز دارای تومور شبیه سازی شده در کد هسته ای MCNPX.

برای استخراج ویژگی‌های آنتروپیک، ابتدا طیف شمارش هر اجرای شبیه‌سازی (شامل ۱۰۰ کانال انرژی) نرمال‌سازی می‌شود تا توزیع احتمال به دست آید. اگر C_i شمارش کانال i-ام $i = 1$ تا ۱۰۰ باشد، توزیع احتمال به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$p_i = \frac{C_i}{\sum_{j=1}^{100} C_j}, \sum_{i=1}^{100} p_i = 1$$

آنتروپی جهانی شانون کل طیف از روی همین توزیع احتمال به دست می‌آید:

$$H_{\text{global}} = -\sum_{i=1}^{100} p_i \cdot \log_2(p_i)$$

(این کمیت، بی‌نظمی کلی توزیع انرژی فوتون‌های پراکنده را نشان می‌دهد. سپس برای محاسبه آنتروپی موضعی، طیف با پنجره‌هایی به عرض ۲۰ کانال و گام ٥ کانال اسکن می‌شود که حاصل آن ۱۷ پنجره همپوشان است. برای پنجره k-ام (شامل

کانال‌های $i = m_k$ تا $m_k + 19$)، توزیع احتمال داخل آن پنجره به صورت زیر محاسبه می‌گردد:)

$$q_i^{(k)} = \frac{C_i}{\sum_{j=m_k}^{m_k+19} C_j}$$

و آنتروپی موضعی آن پنجره عبارت است از:

$$H_k = -\sum_{i=m_k}^{m_k+19} q_i^{(k)} \cdot \log_2(q_i^{(k)})$$

(به این ترتیب یک بردار ۱۷ بعدی از آنتروپی‌های موضعی، یعنی $\mathbf{H}_{\text{local}} = [H_1, H_2, \dots, H_{17}]$، برای هر طیف حاصل می‌شود. در مرحله بعد، **بعد فراکتال** همان سیگنال طیف (پیش از نرمال‌سازی) با استفاده از روش جعبه‌شماری محاسبه می‌گردد. سیگنال یک‌بعدی C_i در نظر گرفته شده و برای اندازه‌های مختلف جعبه $\varepsilon = 2,3, \dots, 50$ کانال، تعداد جعبه‌های لازم برای پوشش کل سیگنال، یعنی $N(\varepsilon)$، شمارش می‌شود. سپس نقاط $(\log(1/\varepsilon), \log N(\varepsilon))$ با یک خط راست برازش می‌شوند؛ شیب این خط، بعد فراکتال D_f است:

$$D_f = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\log N(\varepsilon)}{\log(1/\varepsilon)}$$

(برای هر اجرا یک مقدار D_f به دست می‌آید.) در نهایت، بردار ویژگی نهایی برای هر نمونه (مجموعاً ۱۰۰ نمونه شامل ۵۰ سالم و ۵۰ توموری) به صورت تلفیق آنتروپی جهانی، آنتروپی‌های موضعی و بعد فراکتال ساخته می‌شود:

$$\mathbf{X} = [H_{\text{global}}, H_1, H_2, \dots, H_{17}, D_f]$$

که برداری ۱۹ بعدی است و برچسب خروجی آن(۰) برای سالم و (۱) برای توموری می‌باشد. این بردارها پس از نرمال‌سازی، وارد شبکه عصبی عمیق برای طبقه‌بندی می‌شوند. در مورد شبکه عصبی به کار رفته برای طبقه‌بندی، معماری از نوع پرسپترون چندلایه (MLP)با دو لایه پنهان طراحی شده است. لایه ورودی دارای ۱۹ گره است که معادل ۱۹ ویژگی استخراج شده (یک آنتروپی جهانی، ۱۷ آنتروپی موضعی و یک بعد فراکتال) می‌باشد. لایه پنهان اول شامل ۳۲ نورون با تابع فعال‌سازی (ReLU) تعریف می‌شود و به منظور کاهش بیش‌برازش، یک لایه (Dropout) با نرخ ۰/۳به دنبال آن قرار می‌گیرد. لایه پنهان دوم دارای ۱۶ نورون با تابع فعال‌سازی (ReLU) و به دنبال آن (Dropout) با نرخ ۰/۲ است. لایه خروجی شامل یک نورون با تابع فعال‌سازی سیگموئید می‌باشد که احتمال توموری بودن نمونه را در بازه (۰,۱) خروجی می‌دهد[4]:

$$\hat{y} = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

که (در آن z خروجی) خطی لایه پیشین است. برای آموزش شبکه، تابع هزینه باینری آنتروپی متقاطع به کار می‌رود:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}[y_n \log(\hat{y}_n) + (1 - y_n)\log(1 - \hat{y}_n)]$$

که (در آن y_n برچسب) واقعی (۰ برای سالم، ۱ برای توموری) و($\hat{y}_n$ خروجی پیش‌بینی شده مدل است. بهینه‌ساز (Adam) با نرخ یادگیری ۰/۰۰۱ استفاده می‌شود. به منظور جلوگیری از بیش‌برازش و توقف زودهنگام، از (Early Stopping) با پایش تلفات روی داده‌های اعتبارسنجی و (patience) برابر ۱۰ استفاده می‌گردد. ارزیابی مدل با روش اعتبارسنجی متقاطع ۵ لایه انجام می‌شود و داده‌ها پیش از ورود به شبکه با (StandardScaler) نرمال‌سازی می‌گردند. معیارهای ارزیابی شامل دقت، حساسیت، ویژگی و سطح زیر منحنی (ROC) (AUC) می‌باشند.

نتایج

در این بخش، نتایج حاصل از اجرای شبکه عصبی بر روی داده‌های شبیه‌سازی ارائه می‌شود. در مجموع ۱۰۰ نمونه (۵۰ سالم و ۵۰ توموری) با روش اعتبارسنجی متقابل ۵ لایه ارزیابی گردید. جدول ۱ عملکرد مدل را در ترکیب‌های مختلف ویژگی‌ها نشان می‌دهد و جدول ۲ نیز ماتریس درهم‌ریختگی نهایی برای مدل برتر (ترکیب کامل آنتروپی جهانی، آنتروپی موضعی و بعد فراکتال) را نمایش می‌دهد.

جدول ۱: مقایسه عملکرد مدل با ترکیب‌های مختلف ویژگی‌ها (مقدارها بر حسب درصد)

ترکیب ویژگی‌ها	دقت	حساسیت	ویژگی	AUC
فقط آنتروپی جهانی (۱ ویژگی)	۷۸/۲	۷۵	۸۱/۴	۰/۸۵
فقط آنتروپی موضعی (۱۷ ویژگی)	۹۴	۹۲/۵	۹۵/۵	۰/۹۷
فقط بعد فراکتال (۱ ویژگی)	۸۸/۵	۸۷	۹۰	۰/۹۲
جهانی + موضعی (۱۸ ویژگی)	۹۵/۳	۹۴.۲	۹۶/۴	۰/۹۸۱
جهانی + موضعی + فراکتال (۱۹ ویژگی)	۹۷/۸	۹۷	۹۸/۶	۰/۹۹۴

جدول ۲: ماتریس درهم‌ریختگی مدل برتر (۱۹ ویژگی) بر روی کل داده‌ها پس از اعتبارسنجی متقابل

وضعیت واقعی / پیش‌بینی شده	*سالم*	*توموری*
سالم	۴۹	۱
توموری	۱	۴۹

همان‌طور که مشاهده می‌شود، تنها یک نمونه سالم به اشتباه توموری و یک نمونه توموری به اشتباه سالم طبقه‌بندی شده‌اند که نشان‌دهنده دقت تفکیک بسیار بالای روش پیشنهادی است. افزودن بعد فراکتال به آنتروپی‌های جهانی و موضعی، نسبت به حالت بدون فراکتال (جدول ۱، سطر چهارم) بهبودی معنادار (p-value < 0.05) در همه معیارها ایجاد کرده است.

نتیجه گیری

در این مطالعه، یک روش ترکیبی مبتنی بر استخراج ویژگی‌های آنتروپیک (جهانی و موضعی شانون) و بعد فراکتال از طیف پراکندگی پرتو ایکس، همراه با طبقه‌بندی توسط شبکه عصبی عمیق برای تشخیص تومور مغزی ارائه شد. نتایج نشان داد که آنتروپی موضعی در پنجره‌های انرژی میانی بیشترین حساسیت را به تغییرات بافتی دارد و افزودن آنتروپی جهانی و بعد فراکتال به بردار ویژگی، دقت تشخیص را به میزان قابل توجهی افزایش می‌دهد. مدل نهایی با بردار ویژگی ۱۹ بعدی (شامل یک آنتروپی جهانی، ۱۷ آنتروپی موضعی و یک بعد فراکتال) توانست به دقت ٪۹۷/۸، حساسیت ٪۹۷، ویژگی ٪۹۸/۶ و (AUC) برابر ۰/۹۹۴دست یابد که به طور معناداری بهتر از مدل‌های مبتنی بر ویژگی‌های تکی و نیز رگرسیون لجستیک بود. ماتریس درهم‌ریختگی نشان داد که از ۱۰۰ نمونه، تنها دو نمونه (یک سالم و یک توموری) به اشتباه طبقه‌بندی شدند که گویای تکرارپذیری بالا و قدرت تفکیک عالی روش پیشنهادی است.

مراجع

[1] Salam, Babak, et al. "Large language models for error detection in radiology reports: a comparative analysis between closed-source and privacy-compliant open-source models." *European Radiology* 35.8 (2025): 4549-4557.

[2] Dehkordi, Mohammad Fattahian, Seyed Morteza Hatefi, and Jolanta Tamošaitienė. "An Integrated Fuzzy Shannon Entropy and Fuzzy ARAS Model Using Risk Indicators for Water Resources Management Under Uncertainty." *Sustainability* 17.11 (2025): 5108.

[3] Moaveninejad, Sadaf, Simone Cauzzo, and Camillo Porcaro. "Fractal dimension and clinical neurophysiology fusion to gain a deeper brain signal understanding: A systematic review." *Information Fusion* 118 (2025): 102936.

[4] Ostovar, Amirhossein, Danial Davani Davari, and Maciej Dzikuć. "Determinants of design with multilayer perceptron neural networks: A comparison with logistic regression." *Sustainability* 17.6 (2025): 2611.

بررسی دزیمتری پیش‌بالینی [^{113m}In]In-somatostatin analogue در تصویربرداری SPECT از تومورهای نوروآندوکرین مثبت

ذوالقدری، سمانه* ؛ صابری، فاطمه ؛ یوسف نیا ، حسن

پژوهشکده کاربرد پرتوها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، سازمان انرژی اتمی ایران، صندوق پستی: ۱۴۳۹۵-۸۳۶ تهران ، ایران

چکیده

تومورهای نوروآندوکرین به‌دلیل بیان بالای گیرنده‌های سوماتواستاتین، اهداف مناسبی برای تصویربرداری مولکولی هستند. در این مطالعه، [^{113m}In]In-somatostatin analogue به‌عنوان رادیوداروی بالقوه SPECT تهیه و ارزیابی پیش‌بالینی شد. این ترکیب با خلوص رادیوشیمیایی بالای ۹۹٪ تولید شد و در PBS و سرم انسانی تا حداقل ۳ ساعت پایداری مناسبی نشان داد. مطالعات توزیع زیستی، پاک‌سازی سریع خون، برداشت بالا در پانکراس و غدد آدرنال، و دفع عمدتاً کلیوی را نشان داد. دوز جذب‌شده در کبد، طحال و کلیه‌ها در مقایسه با سایر ترکیبات نشاندار مورد استفاده در تصویربرداری از NET های مثبت، کمتر برآورد شد . این یافته‌ها نشان می‌دهد که [^{113m}In]In-somatostatin analogue می‌تواند گزینه‌ای مناسب برای تصویربرداری SPECT از تومورهای نوروآندوکرین مثبت باشد.

واژه های کلیدی: تومورهای نوروآندوکرین ، تصویربرداری SPECT، دوزیمتری پیش‌بالینی، آنالوگ سوماتواستاتین ^{113m}In

Preclinical Dosimetric Evaluation of [^{113m}In]In-somatostatin analogue for SPECT Imaging of SSTR-Positive Neuroendocrine Tumors

Zolghadri, Samaneh* ; Saberi, Fateme; Yousefnia, Hassan

Radiation Application Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.Box: 14395-836, Tehran, Iran

Abstract

Neuroendocrine tumors are suitable targets for molecular imaging because of their high expression of somatostatin receptors. In this study, [^{113m}In]In-somatostatin analogue was prepared and preclinically evaluated as a potential SPECT radiopharmaceutical. The compound was obtained with radiochemical purity greater than 99% and showed good stability in PBS and human serum for at least 3 h. Biodistribution studies demonstrated rapid blood clearance, high uptake in the pancreas and adrenal glands, and predominantly renal excretion. The absorbed doses in the liver, spleen, and kidneys were estimated to be lower compared with other radiolabeled compounds used for imaging of NET-positive tumors. These findings suggest that [^{113m}In]In-somatostatin analogue may be a promising agent for SPECT imaging of SSTR-positive neuroendocrine tumors.

***Keywords*: neuroendocrine tumors, SPECT imaging, Preclinical dosimetry, 113mIn]In-somatostatin analogue**

PACS No. *87*

مقدمه

سرطان همچنان یکی از مهم‌ترین چالش‌های سلامت جهانی است و در سال ۲۰۲۰ موجب نزدیک به ۱۰ میلیون مرگ، معادل یک مورد از هر شش مرگ، شد. همچنین، در سال ۲۰۲۲ حدود ۲۰ میلیون مورد جدید سرطان گزارش گردید که بار بیشتری در کشورهای با درآمد کم و متوسط داشت [۱]. از آنجا که تشخیص زودهنگام نقش مهمی در بهبود پیامد بیماران دارد، پزشکی هسته‌ای به‌دلیل توانایی شناسایی بیماری در مراحل اولیه، اهمیت ویژه‌ای یافته است.

در سال‌های اخیر، تصویربرداری مبتنی بر گیرنده‌های پپتیدی به‌عنوان روشی حساس و اختصاصی مطرح شده است. در این روش، پپتیدهای رادیونشان‌دار به گیرنده‌های بیش‌بیان‌شده در سلول‌های توموری متصل می‌شوند. گیرنده‌های سوماتواستاتین، به‌ویژه SSTR2[1]، در بسیاری از تومورها از جمله تومورهای نورواندوکرین بیان بالایی دارند و اهداف مناسبی برای تصویربرداری مولکولی محسوب می‌شوند [۲]. اگرچه [^{111}In-pentetreotide] برای تصویربرداری NET[2]، تأیید شده است، محدودیت‌هایی مانند رزولوشن پایین و انرژی گامای بالا دارد [۳]. در مقابل، آنالوگ‌های سوماتواستاتین نشان‌دارشده با ^{68}Ga به استاندارد بالینی تصویربرداری NET های مثبت از نظر SSTR تبدیل شده‌اند [۴]؛ بااین‌حال، چالش‌های دسترسی به برخی رادیونوکلئیدها توجه را به سامانه‌های ژنراتوری جایگزین مانند ^{113}Sn/^{113m}In جلب کرده است.

رادیونوکلئید ^{113m}In با نیمه‌عمر کوتاه ۱/۶۶ ساعت، گسیل گامای مناسب و تولید ژنراتوری، گزینه‌ای جذاب برای توسعه رادیوداروهای تشخیصی است [۵]. بنابراین، این مطالعه با هدف توسعه و ارزیابی پیش‌بالینی [^{113m}In]In-somatostatin analogue به‌عنوان رادیوداروی بالقوه SPECT[3]، برای تصویربرداری از NET های مثبت از نظر SSTR2 انجام شد. توزیع زیستی در موش‌های صحرایی سالم بررسی و دوزهای جذب‌شده انسانی با فرمالیسم MIRD[4]، برآورد گردید.

مواد و روش

^{113m}In از ژنراتور داخلی ^{113}Sn/^{113m}In ساخت شرکت پارس ایزوتوپ تهیه شد. مواد شیمیایی و کاغذ Whatman شماره ۲ به‌ترتیب از شرکت‌های Sigma-Aldrich و Whatman خریداری شدند.

تهیه و کنترل کیفی [^{113m}In]In-somatostatin analogue

برای تهیه [^{113m}In]In-somatostatin analogue، ۱۵ میکروگرم آنالوگ سوماتواستاتین به ۳۷۰ مگابکرل [^{113m}In]$InCl_3$ افزوده و pH با HEPES روی ۳/۸ تنظیم شد. مخلوط به‌مدت ۱۵ دقیقه در ۹۵°C حرارت داده، سپس با کارتریج C18 Sep-Pak خالص‌سازی و پس از شست‌وشو با اتانول/نرمال‌سالین از فیلتر ۰/۲۲ میکرون عبور داده شد. خلوص رادیوشیمیایی با RTLC[5] و HPLC[6]، با استفاده از فازهای متحرک و گرادیان تعیین‌شده، ارزیابی گردید.

مطالعات پایداری

پایداری [^{113m}In]In-somatostatin analogue در PBS[7]، در دمای ۴°C و در سرم انسانی در دمای ۳۷°C بررسی شد. برای این منظور، رادیودارو به‌مدت ۳ ساعت در PBS نگهداری شد و خلوص رادیوشیمیایی در فواصل زمانی مختلف با RTLC ارزیابی گردید. پایداری سرمی نیز با انکوباسیون ۳۷ مگابکرل رادیودارو در ۵۰۰ میکرولیتر سرم انسانی به‌مدت ۳ ساعت و آنالیز نمونه‌ها با RTLC تعیین شد.

توزیع زیستی [^{113m}In]In-somatostatin analogue

توزیع زیستی رادیودارو در موش‌های صحرایی طبیعی پس از تزریق وریدی ۷/۴ مگابکرل از طریق ورید دمی بررسی شد. حیوانات، n=5، در زمان‌های مشخص قربانی شدند و اندام‌های اصلی جدا،

1. Somatostatin Receptor Type 2
2. Neuroendocrine Tumor
3. Single Photon Emission Computed Tomography
4. Medical Internal Radiation Dose
5. Radio Thin-Layer Chromatography
6. High-Performance Liquid Chromatography
7. Phosphate-Buffered Saline

شست‌وشو و وزن‌کشی شدند. اکتیویته هر اندام با آشکارساز HpGe[1]، اندازه‌گیری و درصد اکتیویته تصحیح‌نشده به ازای هر گرم بافت محاسبه گردید.

اکتیویته‌های تجمع‌یافته زمانی در اندام‌های انسانی

اکتیویته تجمع‌یافته زمانی اندام‌های مبدأ انسانی بر اساس داده‌های توزیع زیستی حیوانی و مطابق مطالعات پیشین برآورد شد. منحنی‌های زمان اکتیویته ، بدون تصحیح واپاشی، برای هر اندام رسم و با رگرسیون غیرخطی به تابع نمایی برازش داده شدند. برای همه اندام‌ها به‌جز خون، اکتیویته اولیه در $t = 0$ صفر فرض شد. منحنی‌های برازش‌شده با در نظر گرفتن واپاشی فیزیکی ^{113m}In تا بی‌نهایت برون‌یابی و سطح زیر منحنی $(\bar{A}_{Animal\ organ})$ حاسبه شد. سپس $(\bar{A}_{human\ organ})$ با استفاده از روش برون‌یابی جرمی و معادله ۱ تعیین گردید [۶].

$$\bar{A}_{Human\ organ} = \bar{A}_{Animal\ organ} \times \frac{\frac{Organ\ mass_{Human}}{Body\ mass_{Human}}}{\frac{Organ\ mass_{Animal}}{Body\ mass_{Animal}}} \quad (۱)$$

دوز جذب‌شده در اندام‌های هدف انسانی با استفاده از فرمالیسم MIRD، معادله ۲، محاسبه شد [۷]:

$$\tilde{D}(r_k) = \Sigma_h \tilde{A}_h S(r_{k\leftarrow} r_h) \quad (۲)$$

که $\tilde{A}_h$ اکتیویته تجمع‌یافته زمانی در اندام مبدأ و $S(r_k \leftarrow r_h)$ مقدار S-value برای انتقال دوز از اندام مبدأ به اندام هدف است. در این مطالعه، کسرهای جذب‌شده اختصاصی، SAFs[2]، با استفاده از پلتفرم RADAR محاسبه شدند و S-value ها بر اساس معادله ۳ تعیین گردیدند [۸]:

$$S(T\leftarrow S) = \frac{1}{m_T}\sum_i E_i Y_i \varphi_i(T \leftarrow S) \quad (۳)$$

در این رابطه، ان جرم m_T دام هدف، E_i انرژی تابش، Y_i بازده گسیل و $\phi_i(T \leftarrow S)$ کسر انرژی جذب‌شده در اندام هدف از تابش گسیل‌شده از اندام مبدأ است.

نتایج

تهیه و کنترل کیفی [113m]In-somatostatin analogue

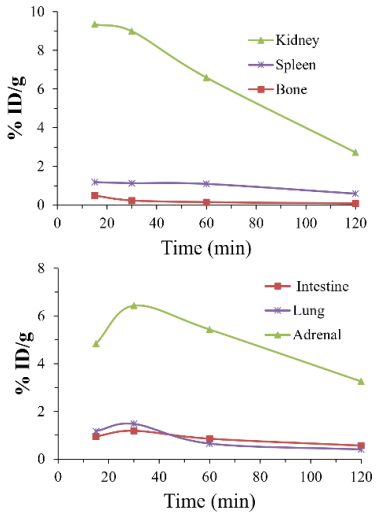
آنالیز RTLC نشان داد که $[^{113m}In]InCl_3$ به سمت Rf بالاتر مهاجرت می‌کند، درحالی‌که ترکیب نشان‌دار در مبدأ باقی می‌ماند. آنالیز HPLC نیز نشان داد که $[^{113m}In]InCl_3$ به‌دلیل ماهیت آب‌دوست‌تر، زودتر و در زمان۰/۶۲دقیقه از ستون خارج می‌شود. درحالی‌که جزء سنگین‌تر، یعنی $[^{113m}In]$In-somatostatin analogue، در زمان ۶/۴۵ دقیقه شسته شد. بر اساس این یافته‌ها، $[^{113m}In]$In-somatostatin analogue با خلوص رادیوشیمیایی بیش از ۹۹٪ تهیه گردید.

مطالعات پایداری

خلوص رادیوشیمیایی در PBS پس از ۱، ۲ و ۳ ساعت به‌ترتیب۱ ±۹۹%، ۱ ±۹۹% و۲ ±۹۹% بود. در سرم انسانی نیز مقادیر متناظر ۱ ±۹۹%، ۲ ±۹۸% و۲ ±۹۷% گزارش شد. این نتایج نشان‌دهنده پایداری برون‌تنی مناسب ترکیب تا ۳ ساعت است.

توزیع زیستی [113m]In-somatostatin analogue

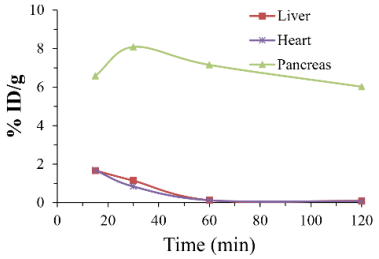
اکتیویته هر اندام با آشکارساز HpGe اندازه‌گیری و درصد اکتیویته تصحیح‌نشده به ازای هر گرم بافت محاسبه گردید. نتایج شکل ۱ نشان داد که ردیاب پاک‌سازی خونی سریع، برداشت بالاتر در پانکراس و غدد آدرنال، و دفع عمدتاً کلیوی دارد؛ الگویی که با گزارش‌های پیشین برای آنالوگ‌های سوماتواستاتین رادیونشان‌دار همخوانی دارد [۹،۱۰].



1. High-Purity Germanium

2. Specific Absorbed Fractions

Target organs	Human Absorbed Dose (mGy/MBq)		
	^{68}Ga-DOTATATE	^{111}In-pentetreotide	^{113m}In-somatostatin analogue
Kidneys	0.093	0.052	0.0032
Liver	0.050	0.065	0.0008
Spleen	0.109	0.34	0.0015
Adrenals	0.086	0.060	0.0021
Red Marrow	0.015	0.029	0.0004
Total Body	0.014	0.03	0.0003
Reference	[27]	[28]	This study



شکل۱ : منحنی پاک‌سازی تصحیح‌نشده بر اساس واپاشی برای هر بافت پس از تزریق^{113m}In]In-somatostatin analogue[

اکتیویته‌های تجمع‌یافته زمانی در اندام‌های انسانی

دز جذب‌شده اندام‌های هدف انسانی با استفاده از فرمالیسم MIRD برآورد شد، بیشترین دز جذب‌شده مربوط به پانکراس (۰/۰۰۱۱ ±۰/۰۰۵۱ mGy/MBq) و غدد آدرنال (۰/۰۰۱۳ ± ۰/۰۰۲۱ mGy/MBq) بود که با بیان SSTR در این بافت‌ها مطابقت دارد. دزهای متوسط در طحال، کلیه‌ها و کبد مشاهده شد و مقادیر پایین در سایر اندام‌ها نشان‌دهنده پروفایل دزیمتری مطلوب و ایمنی بالقوه ^{113m}In]In- somatostatin analogue[بر اساس استانداردهای ICRP103 است. دز جذب‌شده انسانی برای ارگان‌های حیاتی در جدول ۱ ارائه شده و با سایر ترکیبات رادیونشان‌دار مورد استفاده در تصویربرداری از NET های مثبت از نظر SSTR مقایسه شده است.

بر طبق این نتایج، کلیه‌ها، کبد و طحال، که معمولاً اندام‌های حیاتی (بحرانی) برای آنالوگ‌های سوماتواستاتین محسوب می‌شوند، دز جذب شده به مراتب کمتری را دریافت کردند. این یافته‌ها نشان می‌دهد که ^{113m}In]- somatostatin analogue[می‌تواند در مقایسه با عوامل مورد استفاده فعلی مانند ^{68}Ga]- DOTATATE[و ^{111}In]-pentetreotide[، منجر به کاهش چشمگیر در دز تابشی شود و از این طریق، ایمنی بیمار را ارتقا داده و امکان انجام مطالعات تصویربرداری مکرر را فراهم کند.

جدول۱: دز جذب‌شده اندام‌های حیاتی انسانی برای ^{113m}In]In-somatostatin analogue[و مقایسه آن با سایر رادیوداروهای رایج تصویربرداری از NET های مثبت از نظر SSTR

نتیجه‌گیری

این مطالعه تولید، کنترل کیفی و ارزیابی دزیمتری پیش‌بالینی ^{113m}In]In-somatostatin analogue[را به‌عنوان یک رادیوداروی بالقوه برای تصویربرداری SPECT از تومورهای نوروآندوکرین مثبت از نظر SSTR2 نشان داد. این ترکیب با خلوص رادیوشیمیایی بالا و پایداری مناسب تهیه شد. مطالعات توزیع زیستی، پاک‌سازی خونی سریع، برداشت در اندام‌های غنی از SSTR مانند پانکراس و غدد آدرنال، و دفع عمدتاً کلیوی را تأیید کرد. آنالیز دزیمتری نیز دز جذب‌شده پایین‌تر در اندام‌های بحرانی نسبت به ^{68}Ga-DOTATATE و را نشان داد. در مجموع، این یافته‌ها ^{113m}In]In- somatostatin analogue[را به‌عنوان گزینه‌ای ایمن و کارآمد برای تصویربرداری SPECT از تومورهای نوروآندوکرین معرفی می‌کند که نیازمند ارزیابی بیشتر در مدل‌های توموری و مطالعات بالینی است.

مرجع‌ها

[۱] F. Bray, M. Laversanne, H. Sung, J. Ferlay, R. L. Siegel, I. Soerjomataram and A. Jemal; "Global cancer statistics 2022: GLOBOCAN estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries"; *CA a cancer journal for clinicians* **74,** No. 3 (2024): 229-263.

[۲] R. Terlević and et al; "Somatostatin receptor SSTR2A and SSTR5 expression in neuroendocrine breast cancer"; *Annals of diagnostic pathology* **38,** No. 1 (2019): 62-66.

[۳] A. Chiaravalloti and et al; "111In-Pentetreotide SPECT/CT in pulmonary carcinoid"; *Anticancer Research* **35,** No. 7 (2015): 4265-4270.

[۴] S. Zolghadri, M. Naderi, H. Yousefnia, B. Alirezapour, D. Beiki; "Evaluation of the possible utilization of 68Ga-DOTATOC in diagnosis of adenocarcinoma breast cancer"; *Asia Oceania Journal of Nuclear Medicine and Biology* **6,** No. 1 (2018): 41.

[۵] M. Mostafa and et al; "99Mo/99mTc-113Sn/113mIn dual radioisotope generator based on 6-tungstocerate (IV) column matrix"; *Journal of Nuclear and Radiochemical Sciences* **10,** No. 1 (2009): 1-2.

[۶] EY. Han, E. B. Wesley and K. F. Eckerman; "Revisions to the ORNL series of adult and pediatric computational phantoms for use with the MIRD schema"; *Health Physics* **90,** No. 4 (2006): 337-356.

[۷] W. S. Snyder; " " S" absorbed dose per unit cumulated activity for selected radionuclides and organs"; *MIRD Pamphlet no.* ***11,*** (1975).

[۸] A. Sinha, N. Singh, B. M. Dixit, N. K. Painuly; "Assessment of S values for I131 and Y90 based on the Digimouse voxel phantom"; *Journal of Cancer Research and Therapeutics* **14,** No. 6 (2018): 1298-1302.

[۹] M. Sandstrom, and et al; "Comparative biodistribution and radiation dosimetry of 68 Ga-DOTATOC and 68 Ga-DOTATATE in patients with neuroendocrine tumors"; *Journal of Nuclear Medicine* **54,** No. 10 (2013): 1755-1759.

[۱۰] M. G. Stabin and et al; "Radiation dosimetry for indium-111-pentetreotide"; *Journal of Nuclear Medicine* **38,** No. 12 (1997): 1919-1922.

برآورد دز جذبی اندام‌ها برای رادیوداروی بمبزین اصلاح‌شده نشان‌دار با گالیوم-۶۸ بر اساس داده‌های تجربی

یوسف نیا ، حسن ؛ کریمیان، آرزو؛ ذوالقدری، سمانه*

پژوهشکده کاربرد پرتوها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، سازمان انرژی اتمی ایران، صندوق پستی: ۱۴۳۹۵-۸۳۶ تهران ، ایران

چکیده

در این مطالعه، رادیوداروی آنالوگ اصلاح‌شده پپتید بمبزین نشاندار شده با گالیوم-۶۸ (68Ga-Modified BBN) به‌منظور ارزیابی ویژگی‌های کیفی، پایداری، توزیع زیستی و دزیمتری مورد بررسی قرار گرفت. رادیودارو با خلوص رادیوشیمیایی بیش از ۹۹٪ و فعالیت مولی حداقل ۴۵GBq/µmol تهیه شد. بررسی پایداری در بافر فسفات سالین(PBS) و سرم انسانی نشان داد که ترکیب تا ۲ ساعت پایداری بالای ۹۵٪ دارد. مطالعات توزیع زیستی در مدل حیوانی بیانگر تجمع قابل‌توجه در پانکراس و دفع عمدتاً کلیوی بود. با استفاده از داده‌های تجربی و روش دز پرتوگیری داخلی پزشکی (MIRD)، فعالیت تجمعی اندام‌ها محاسبه و دز جذبی انسانی با نرم‌افزار OLINDA/EXM برآورد شد. بیشترین دز جذبی مربوط به پانکراس (۰/۱۹۳ mGy/MBq) و پس از آن کلیه‌ها (۰/۰۶۵mGy/MBq) بود، در حالی که سایر اندام‌ها دزهای پایین‌تری دریافت کردند. مقایسه با سایر رادیوداروهای مبتنی بر ^{68}Ga نشان داد که پروفایل دزیمتری این ترکیب در محدوده قابل قبول برای تصویربرداری توموگرافی گسیل پوزیترون(PET) قرار دارد. بر اساس نتایج حاصل، ^{68}Ga- Modified BBN می‌تواند به‌عنوان یک گزینه امیدبخش برای تصویربرداری هدفمند گیرنده آزادکننده گاسترین(GRPR) مطرح باشد، هرچند انجام مطالعات تکمیلی پیش‌بالینی و بالینی ضروری است.

واژه های کلیدی: *دز جذب شده، گالیوم-۶۸، روش MIRD، گیرنده آزادکننده گاسترین، توزیع زیستی.*

Estimation of Organ Absorbed Doses for a ^{68}Ga–Labeled Modified Bombesin Radiopharmaceutical Based on Experimental Data

Yousefnia, Hassan; Karimian, Arzoo; Zolghadri, Samaneh*

Radiation Application Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.Box: 14395-836, Tehran, Iran

Abstract

In this study, a modified bombesin peptide analog was radiolabeled with ^{68}Ga (^{68}Ga-Modified BBN) and underwent comprehensive evaluation, including radiochemical profiling, metabolic stability assays, preclinical biodistribution, and dosimetry studies. The radiotracer was successfully prepared with a radiochemical purity exceeding 99% and a minimum molar activity of 45 GBq/µmol. Stability studies performed in phosphate-buffered saline (PBS) and human serum demonstrated that the radioconjugate remained stable (>95%) for up to 2 h. Biodistribution studies in animal models revealed a pronounced uptake in the pancreas together with predominant renal clearance. Based on the experimental biodistribution data and the Medical Internal Radiation Dose (MIRD) formalism, time-integrated activity coefficients were determined and the absorbed doses to human organs were estimated using the OLINDA/EXM software. The highest absorbed dose was calculated for the pancreas (0.193 mGy/MBq), followed by the kidneys (0.065 mGy/MBq), whereas lower dose values were observed for other organs.Comparison with other ^{68}Ga-based radiopharmaceuticals indicated that the dosimetric profile of this tracer lies within the acceptable range for positron emission tomography (PET) imaging. These findings suggest that ^{68}Ga-Modified BBN may represent a promising radiotracer for targeted imaging of the gastrin-releasing peptide receptor (GRPR), although further comprehensive preclinical and clinical investigations are required.

Keywords: *Absorbed Dose, ^{68}Ga, MIRD Method, GRPR, Biodistribution*

PACS No. *87*

مقدمه

سرطان همچنان یکی از مهم‌ترین چالش‌های سلامت بشر در سراسر جهان به شمار می‌رود و هر ساله زندگی میلیون‌ها نفر را تحت تأثیر قرار می‌دهد. در این میان، تشخیص زودهنگام نقش تعیین‌کننده‌ای در بهبود پیش‌آگهی بیماران و افزایش اثربخشی درمان‌ها دارد [۱].

در سال‌های اخیر تصویربرداری‌های مولکولی برای بهبود تشخیص تومورها مورد توجه قرار گرفته است. یکی از این اهداف، گیرنده GRPRاست که در بسیاری از بدخیمی‌ها از جمله سرطان پروستات، پستان، ریه و پانکراس بیش‌بیان می‌شود. بیان بالای این گیرنده در بافت‌های توموری نسبت به بافت‌های طبیعی، GRPRرا به یک هدف مناسب برای تصویربرداری هدفمند تومورها تبدیل کرده است [۲].

در میان لیگاندهای هدف‌گیرندهGRPR، آنالوگ‌های پپتید BBN به دلیل میل اتصال بالا به این گیرنده، توجه قابل‌توجهی را در تصویربرداری مولکولی و درمان‌های هدفمند به خود جلب کرده‌اند. یکی از آنالوگ‌های بهینه‌سازی شده این پپتید، یک مشتق اصلاح‌شده با آمینومتیل بنزوئیک اسید است که با هدف بهبود ویژگی‌های فارماکوکینتیکی و افزایش تمایل اتصال به گیرنده‌های GRPR طراحی شده است. وجود لینکر اصلاح‌شده گلیسیل-۴-آمینوبنزوئیک اسید در ساختار این پپتید، علاوه بر بهبود پایداری و افزایش کارایی اتصال به گیرنده، امکان نشاندارسازی بهینه با رادیونوکلئیدهای مختلف از جمله گالیوم-۶۸ را فراهم می‌کند. این ویژگی‌های ساختاری، پپتید مذکور را به گزینه‌ای ایده‌آل برای کاربردهای تشخیصی تبدیل کرده است [۳].

مطالعات اخیر نشان داده‌اند که نشاندارسازی آنالوگ‌های BBN با رادیونوکلئیدهای مختلف، از جمله ^{68}Ga، نتایج امیدوارکننده‌ای در کاربردهای تشخیصی و درمانی به همراه داشته است [۴]. در این میان، تصویربرداری تومورها با استفاده از رادیوداروها در توموگرافی گسیل پوزیترون (PET) امکان ارزیابی و تعیین دقیق محل ضایعات را فراهم می‌کند. ^{68}Gaبه دلیل دسترسی از طریق ژنراتور ^{68}Ge/^{68}Ga، نیمه‌عمر کوتاه (۶۸ دقیقه) و ویژگی‌های مناسب گسیل پوزیترون، به‌عنوان یکی از رادیونوکلئیدهای پرکاربرد برای نشاندارسازی در تصویربرداری PET مطرح است [۵،۶].

مطالعات پیش‌بالینی و محاسبات دقیق دز جذبی نقش اساسی در توسعه و ارزیابی ایمنی رادیوداروها ایفا می‌کنند. ارائه نتایج دزیمتری پیش‌بالینی از الزامات نهادهای نظارتی بین‌المللی نظیر سازمان غذا و داروی ایالات متحده آمریکا (FDA)و انجمن اروپایی پزشکی هسته‌ای (EANM) بوده و شرط لازم برای ورود یک رادیودارو به مراحل بالینی محسوب می‌شود [۷]. بر این اساس، هدف از مطالعه حاضر پس از نشاندارسازی ^{68}Ga- Modified BBN و ارزیابی پایداری آن، توزیع زیستی ترکیب در مدل حیوانی بررسی و در نهایت دز جذبی اندام‌ها بر اساس روش MIRD محاسبه شد.

مواد و روش

مواد و تجهیزات

ژنراتور ^{68}Ga/^{68}Ge (فعالیت اسمی۱۴۸۰ MBq) از شرکت پارس ایزوتوپ (ایران). سایر مواد شیمیایی از شرکت Sigma-Aldrich (آلمان) تأمین گردید. همچنین سرم انسانی و موش‌های مورد مطالعه از پژوهشگاه رویان (ایران) تهیه شدند.ارزیابی ناخالصی‌های فلزی با دستگاه طیف‌سنجی جرمی با پلاسمای جفت‌شده القایی(ICP-MS) (مدل Turbo-AX-150-Liberty) و اندازه‌گیری فعالیت نمونه‌ها با آشکارساز آشکارساز ژرمانیومِ فوق‌خالص (HPGe) (مدل EGPC 80-200R) انجام شد. جهت تعیین خلوص رادیوشیمیایی و پایداری ترکیب از روش کروماتوگرافی لایه نازک (RTLC) و اسکنر Bioscan AR2000 استفاده گردید.

تهیه، کنترل کیفی و بررسی پایداری^{68}Ga- Modified BBN

ابتدا رادیونوکلئید گالیوم-۶۸ به صورت محلول $^{68}GaCl_3$ از ژنراتور^{68}Ge/^{68}Ga دوشیده شد. سپس، خلوص رادیونوکلئیدی آن با آشکارسازHPGe ، خلوص شیمیایی با ICP-MS و خلوص رادیوشیمیایی آن با روش RTLC بررسی گردید. جهت نشاندارسازی، مقدار ۳۰µg پپتید به محلول $^{68}GaCl_3$ افزوده شد و واکنش در شرایط pH حدود ۳، دمای۹۵ °C و زمان ۱۰ دقیقه انجام گرفت. درنهایت، ^{68}Ga- Modified BBNبا فعالیت مولی حداقل ۴۵GBq/µmol تهیه گردید. خلوص رادیوشیمیایی محصول نهایی با دو روش HPLC و RTLC احراز شد. در آنالیز RTLC از دو سیستم شامل: ۱) آمونیوم استات ۱۰٪:متانول (۱:۱) بر روی کاغذ واتمن شماره ۱و ۲) محلول ۱۰ میلی مولار اسید

دی‌اتیلن‌تری‌آمین‌پنتااستیک(DTPA) بر روی کاغذ Silica gel (ITLC-SG)استفاده گردید. ارزیابی پایداری ترکیب در محیط‌های PBS(۴°C) و سرم انسانی (۳۷°C) تا ۲ ساعت انجام شد.

بررسی توزیع زیستی ^{68}Ga- Modified BBN

به‌منظور انجام مطالعات توزیع زیستی، مقدار ۱۵۰±۱۰ µL از رادیودارو با فعالیت ۷/۵ ±۰/۵MBq از طریق ورید دمی به‌صورت داخل‌وریدی به موش‌های صحرایی سالم تزریق شد. الگوی توزیع بافتی در زمان‌های ۳۰، ۶۰ و ۹۰ دقیقه پس از تزریق مورد بررسی قرار گرفت. پس از برداشت و توزین اندام‌ها، میزان فعالیت هر نمونه اندازه‌گیری و درصد دز تزریق‌شده بر واحد جرم بافت محاسبه گردید.

تخمین فعالیت تجمعی در اندام‌های انسانی

برای برآورد فعالیت تجمعی در اندام‌های هدف، مقادیر درصد دز تزریق‌شده بر واحد جرم بافت بدون اعمال تصحیح واپاشی بر حسب زمان ترسیم شد. فعالیت تجمعی ($\tilde{A}$) از انتگرال فعالیت اندام در طول زمان با رابطه (۱) به‌دست می‌آید:

$$\tilde{A} = \int_0^\infty A(t)dt \qquad (۱)$$

که در آن A(t) نشان‌دهنده فعالیت اندازه‌گیری‌شده در اندام در زمان t است. برای محاسبه مساحت زیر منحنی زمان-فعالیت، بین نقاط داده تجربی از درون‌یابی خطی استفاده شد و بخش انتهایی منحنی با استفاده از یک تابع واپاشی نمایی تک‌جزئی تا بی‌نهایت برون‌یابی گردید.

به‌منظور تبدیل فعالیت تجمعی از مدل حیوانی به انسان، روش مقیاس‌بندی بر اساس نسبت جرم اندام به جرم بدن طبق رابطه (۲) به‌کار گرفته شد:

$$\tilde{A}_{\text{Human organ}} = \tilde{A}_{\text{Animal organ}} \times \frac{\text{Organ mass}_{\text{Human}}/\text{Body mass}_{\text{Human}}}{\text{Organ mass}_{\text{Animal}}/\text{Body mass}_{\text{Animal}}} \qquad (۲)$$

در نهایت، دز جذبی معادل اندام‌های انسانی با استفاده از رابطه (۳) محاسبه شد[۸]:

$$D=\tilde{A} \times DF \qquad (۳)$$

که در آن DF فاکتور دز است و مقادیر آن از نرم‌افزار OLINDA/EXM استخراج گردید.

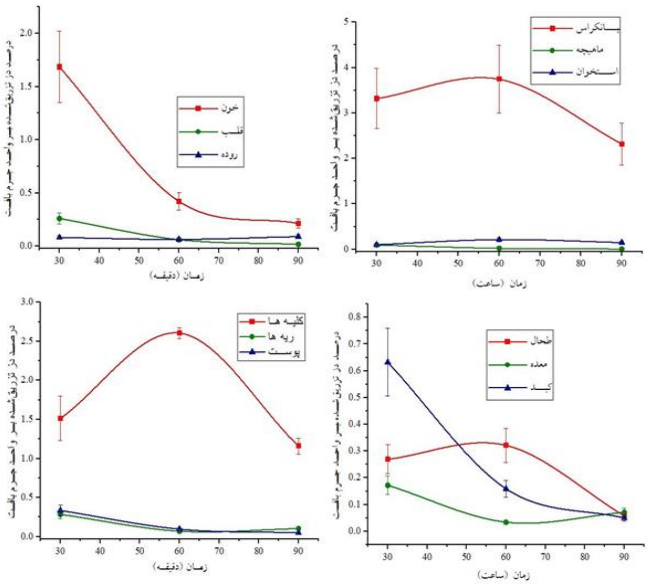
نتایج و بحث

تهیه، کنترل کیفی و بررسی پایداری ^{68}Ga- Modified BBN

خلوص رادیونوکلئیدی ^{68}Ga برابر ۹۹/۹٪ خلوص رادیوشیمیایی آن بالاتر از ۹۹٪ و میزان ناخالصی‌های فلزی ۰/۱ppm تعیین شد. همچنین، رادیوداروی نشاندارشده با خلوص رادیوشیمیایی بالای ۹۹٪ تهیه گردید. بررسی پایداری این ترکیب در PBS و سرم انسانی نشان داد که رادیودارو تا ۲ ساعت از پایداری مطلوب و بیش از ۹۵٪ برخوردار است.

بررسی توزیع زیستی ^{68}Ga- Modified BBN

منحنی‌های توزیع زیستی رادیوداروی ^{68}Ga- Modified BBN پس از تزریق، بدون اعمال تصحیح واپاشی، در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱ : منحنی‌های توزیع زیستی رادیوداروی ^{68}Ga- Modified BBN

دز جذبی برآوردشده در اندام‌های انسان

جدول۱ : برآورد دز جذبی(mGy/MBq) اندام‌های انسان پس از تزریق رادیوداروی ^{68}Ga- Modified BBN

اندام	دز(mGy/MBq)	اندام	دز(mGy/MBq)
غدد فوق‌کلیوی	۰/۰۰۳	مغز استخوان قرمز	۰/۰۱۴
روده کوچک	۰/۰۰۷	استخوان	۰/۰۱۴

روده بزرگ	۰/۰۱۲	طحال	۰/۰۱۱
معده	۰/۰۰۳	کبد	۰/۰۱۲
قلب	۰/۰۰۶	ریه‌ها	۰/۰۰۸
کلیه‌ها	۰/۰۶۵	عضلات	۰/۰۰۱
پانکراس	۰/۱۹۳	بقیه بدن	۰/۰۰۳

جدول۲ : مقایسه دز جذبی برآوردشده اندام‌های انسان (mGy/MBq) برای رادیوداروی ^{68}Ga- Modified BBN با سایر رادیوداروهای مبتنی بر ^{68}Ga

اندام	^{68}Ga-Modified BBN	68Ga-BPAMD	68Ga-DOTATOC
ریه‌ها	۰/۰۰۸	۰/۰۰۹	۰/۰۰۱
کبد	۰/۰۱۲	۰/۰۰۹	۰/۰۱۰
مغز استخوان قرمز	۰/۰۱۴	۰/۲۵۰	۰/۰۰۳
قلب	۰/۰۰۶	۰/۰۰۶	۰/۰۰۴
کلیه‌ها	۰/۰۶۵	۰/۰۱۴	۰/۰۷۴
پانکراس	۰/۱۹۳	۰/۰۰۸	۰/۱۰۴
منابع	این مطالعه	[۹]	[۱۰]

نتایج (جدول ۱) نشان داد که بیشترین دز جذبی مربوط به پانکراس (۰/۱۹۳ mGy/MBq) و پس از آن کلیه‌ها (۰/۰۶۵mGy/MBq) است، در حالی که دز سایر اندام‌ها مقادیر پایین‌تری داشتند. همچنین به‌منظور ارزیابی بهتر نتایج، مقادیر دز جذبی به‌دست‌آمده با برخی رادیوداروهای مبتنی بر گالیوم-۶۸ شامل ^{68}Ga-BPAMD و ^{68}Ga-DOTATOC (مطابق جدول ۲) مقایسه شد. این مقایسه نشان داد که علی‌رغم تفاوت در ساختار مولکولی این ترکیبات (BPAMD به‌عنوان یک مولکول و DOTATOC به‌عنوان یک پپتید)، دز جذبی اندام‌ها در ^{68}Ga-Modified BBN در محدوده مقادیر گزارش‌شده برای این رادیوداروها قرار دارد که بیانگر قابل قبول بودن پروفایل دزیمتری این ترکیب برای کاربردهای تصویربرداری PET است.

نتیجه گیری

در این پژوهش، رادیوداروی ^{68}Ga-Modified BBN با خلوص رادیوشیمیایی بالا تهیه شد. بررسی‌های پایداری نشان داد که این ترکیب در محیط‌های PBS و سرم انسانی تا مدت ۲ ساعت از پایداری مناسبی داشته است. همچنین، نتایج مطالعات توزیع زیستی در مدل حیوانی نشان‌دهنده برداشت تجمع توجه رادیودارو در پانکراس و دفع غالب از مسیر کلیوی بود. محاسبات دزیمتری بر اساس روش MIRD نیز نشان داد که بیشترین دز جذبی مربوط به پانکراس و پس از آن کلیه‌ها است، در حالی که دز جذبی در سایر اندام‌ها مقادیر نسبتاً پایینی داشته و در محدوده قابل قبول برای رادیوداروهای مبتنی بر ^{68}Ga در تصویربرداری PET قرار دارد. بر اساس این نتایج، ^{68}Ga-Modified BBN می‌تواند به‌عنوان یک رادیوداروی امیدبخش برای تصویربرداری مولکولی گیرنده GRPRمطرح باشد. هرچند انجام مطالعات بیشتر در مدل‌های پیش‌بالینی و بالینی برای ارزیابی دقیق‌تر ایمنی و کارایی آن ضروری است.

مرجع‌ها

[۱] H. Sung, J. Ferlay, R. L. Siegel, M. Laversanne, I. Soerjomataram, A. Jemal, F. Bray; "Global Cancer Statistics 2020: GLOBOCAN Estimates of Incidence and Mortality Worldwide for 36 Cancers in 185 Countries"; *CA: A Cancer Journal for Clinicians* **71**, No. 3 (2021) 209–249.

[۲] L. Baratto, H. Duan, H. Mäcke, A. Iagaru; "Imaging the Distribution of Gastrin-Releasing Peptide Receptors in Cancer"; *Journal of Nuclear Medicine* **61**, No. 6 (2020) 792–798.

[۳] S. Zolghadri, A. Karimian, M. Mehrabi, H. Yousefnia; "Estimation of Human Absorbed Dose for [113mIn]In-AMBA Using Animal Experimental Data and Monte Carlo Simulation"; *Iranian Journal of Nuclear Medicine* **33**, No. 2 (2025) 116.

[۴] R. Baum, V. Prasad, N. Mutloka, M. Frischknecht, H. Maecke, J. Reubi; "Molecular Imaging of Bombesin Receptors in Various Tumors by Ga-68 AMBA PET/CT: First Results"; *Journal of Nuclear Medicine* **48**, Suppl. 2 (2007).

[۵] I. Velikyan; "Prospective of ^{68}Ga-Radiopharmaceutical Development"; *Theranostics* **4**, No. 1 (2014) 47–80.

[۶] F. Rösch; "Past, Present and Future of ^{68}Ge/^{68}Ga Generators"; *Applied Radiation and Isotopes* **76** (2013) 24–30.

[۷] C. Stokke, S. Gnesin, J. Tran-Gia, F. Cicone, S. Holm, M. Cremonesi, J. Blakkisrud, T. Wendler, N. Gillings, K. Herrmann, F. M. Mottaghy; "EANM Guidance Document: Dosimetry for First-in-Human Studies and Early Phase Clinical Trials"; *European Journal of Nuclear Medicine and Molecular Imaging* **51** (2024) 1253–1276.

[۸] S. Zolghadri, A. Karimian, H. Yousefnia; "Human Absorbed Dose Estimation of ^{89}Zr-Anti-HER2 Complex Based on Animal Data"; *Iranian Journal of Medical Physics* **22**, No. 3 (2025) 203–208.

[۹] A. Rabiei, M. Shamsaei, H. Yousefnia, A. R. Jalilian; "Pharmacokinetic Studies and Human Absorbed Dose Estimation of ^{68}Ga-(4{[(bis(phosphonomethyl))carbamoyl]methyl}-7,10-bis(carboxymethyl)-1,4,7,10-tetraazacyclododec-1-yl)acetic Acid"; *International Journal of Radiation Research* **16**, No. 4 (2018) 473–480.

[۱۰] M. Naderi, S. Zolghadri, H. Yousefnia, A. Ramazani, A. R. Jalilian; "Preclinical Study of ^{68}Ga-DOTATOC: Biodistribution Assessment in Syrian Rats and Evaluation of Absorbed Dose in Human Organs"; *Asia Oceania Journal of Nuclear Medicine and Biology* **4**, No. 1 (2016) 19–29.

بررسی مقایسه‌ی رسوب انرژی پروتون در بافت‌های ماده‌ی سفید و ماده‌ی خاکستری مغز با استفاده از شبیه‌سازی TRIM/SRIM

پاشا زاده، مهدی[۱]؛ الماسی فرد، فاطمه[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه تبریز، بلوار۲۹ بهمن، تبریز

چکیده

پروتون‌تراپی به دلیل ویژگی‌های فیزیکی منحصربه‌فرد خود، به‌عنوان یکی از روش‌های پیشرفته پرتودرمانی در درمان تومورهای مغزی مورد توجه قرار گرفته است. ویژگی مهم پروتون‌ها، آزادسازی بخش عمده انرژی در عمق مشخصی از بافت و ایجاد پدیده قله براگ است که موجب کاهش آسیب به بافت‌های سالم اطراف ناحیه هدف می‌شود. از آنجا که ماده سفید و ماده خاکستری مغز دارای تفاوت‌هایی از نظر ساختار و ترکیب شیمیایی هستند، انتظار می‌رود برهم‌کنش پروتون با این بافت‌ها نیز دارای تفاوت‌هایی باشد.

در این پژوهش، رفتار پروتون در بافت‌های ماده سفید و ماده خاکستری مغز با استفاده از نرم‌افزار SRIM/TRIM مورد بررسی قرار گرفت. بافت‌ها بر اساس ترکیب شیمیایی و چگالی مربوطه در محیط نرم‌افزار تعریف شدند و شبیه‌سازی برای یک سطح انرژی پروتون انجام شد. سپس پارامترهایی شامل برد پروتون، افت انرژی، توان توقف و میزان رسوب انرژی استخراج و مورد مقایسه قرار گرفتند..

هدف از این مطالعه، بررسی تأثیر ویژگی‌های فیزیکی و ترکیب شیمیایی بافت‌های مغزی بر نحوه انتقال انرژی پروتون و تحلیل تفاوت‌های موجود میان ماده سفید و ماده خاکستری است. نتایج این پژوهش می‌تواند در شناخت بهتر رفتار پروتون در بافت‌های مغزی و بهینه‌سازی روش‌های پرتودرمانی مبتنی بر پروتون مؤثر باشد.

واژه های کلیدی: *پروتون‌تراپی، قله براگ، شبیه‌سازی TRIM/SRIM، انرژی پروتون*

Comparative study of proton energy deposition in the brain’s white and gray matter using TRIM/SRIM simulation

Pashazadeh, Mahdi[1]; Almasifard, Fatemeh[1]

[1] *Department of Physics, University of Tabriz, Tabriz*

Abstract

Proton therapy has attracted considerable attention as one of the advanced radiotherapy techniques for the treatment of brain tumors due to its unique physical properties. The most important characteristic of protons is the release of a major portion of their energy at a specific depth within tissue, producing the Bragg peak phenomenon, which helps reduce damage to healthy tissues surrounding the target region. Since white matter and gray matter in the brain differ in terms of structure and chemical composition, it is expected that the interaction of protons with these tissues may also differ.

In this study, the behavior of protons in brain white matter and gray matter was investigated using the SRIM/TRIM software. The tissues were defined in the software environment based on their chemical composition and corresponding density, and the simulation was performed for a selected proton energy level. Then, parameters including proton range, energy loss, stopping power, and energy deposition were extracted and compared.

The aim of this study was to investigate the effect of the physical properties and chemical composition of brain tissues on proton energy transfer and to analyze the differences between white matter and gray matter. The results of this research can contribute to a better understanding of proton behavior in brain tissues and to the optimization of proton-based radiotherapy methods

***Keywords**: Proton therapy, Bragg peak, TRIM/SRIM simulation, Proton energy*

***PACS No.** 87.53.-j, 87.56.-v, 34.50.Bw, 87.55.-x.*

مقدمه

پرتودرمانی یکی از مهم ترین روش‌های درمان سر طان به ویژه تومورهای مغزی محسوب می‌شود [۱]. با پیشرفت فناوری در حوزه‌ی فیزیک پزشکی روش‌های نوین پرتو درمانی با هدف افزایش دقت درمان و کاهش آسیب به بافت‌های سالم توسعه یافته اند. یکی از روش‌ها پروتون تراپی است که به دلیل ویژگی‌های فیزیکی خاص خود در سال‌های اخیر توجه زیادی را به خود جلب کرده است [۱،۲]. پروتون‌ها در هنگام عبور از ماده انرژی خود را به صورت تدریجی از دست میدهند و بیشترین مقدار انرژی را در عمق مشخصی از بافت‌ها آزاد میکنند، این پدیده که به قله ی براگ معروف است به همین دلیل استفاده از پروتون در درمان تومورهای مغزی و سایر نواحی حساس بدن اهمیت زیادی دارد [۲]. بافت مغز از دو بخش اصلی ماده‌ی سفید و ماده‌ی خاکستری تشکیل شده است که هرکدام از نظر ساختار و ترکیب شیمیایی تفاوت‌هایی دارند. ماده‌ی سفید به دلیل وجود میلین دارای مقدار بیشتری چربی بوده در حالی که ماده‌ی خاکستری بیشتر شامل اجسام سلولی نورون هاست [٤]، این تفاوت‌ها میتوانند بر نحوه‌ی برهم کنش پروتون با بافت و میزان رسوب انرژی در آن تاثیر گذار باشد [۳،٤]، برسی رفتار پروتون در بافت‌های مختلف مغزی می‌تواند به درک بهتر توزیع انرژی و بهینه سازی فرآیند پرتو درمانی کمک کند در این پژوهش برهم کنش پروتون با بافت‌های ماده‌ی سفید و ماده‌ی خاکستری مغز با استفاده از شبیه سازی در نرم افزار TRIM/SRIM مورد برسی قرار می‌گیرد [۳]. هدف اصلی این مطالعه مقایسه‌ی میزان رسوب انرژی پروتون و تغییرات مربوط به انتقال انرژی در این دو نو ع بافت مغزی است.

روش کار

در این پژوهش، برای بررسی رفتار برهم‌کنش پرتو پروتون با دو نوع ماده (ماده سفید و ماده خاکستری)، از نرم‌افزار SRIM و ماژول TRIM استفاده شد. شبیه‌سازی بر پایه مدل Monte Carlo انجام شد تا پارامترهای انتقال انرژی، عمق نفوذ، پراکندگی و بازپاشی ذرات تحلیل شوند.

تنظیمات شبیه‌سازی: نوع یون: Proton (H^+)، انرژی اولیه: ۵۰MeV ، تعداد یون‌ها: (مطابق فایل‌های خروجی، مثلاً ۱۰/۰۰۰ یون)، ضخامت لایه هدف: بر اساس ساختار تعریف‌شده در SRIM، ترکیب ماده هدف: نمونه اول: ماده سفید، نمونه دوم: ماده خاکستری.

نتایج

نتایج شبیه‌سازی SRIM/TRIM نشان داد که برهم‌کنش یون‌های فرودی با ماده هدف از سه منظر اصلی شامل بازپاشی سطحی، پراکندگی برگشتی و عبور ذرات قابل ارزیابی است.

تحلیل پراکندگی نشان داد که بازده کندوپاش سطحی در ماده سفید نسبتاً پایین است، که بیانگر پایداری مناسب ساختار سطحی در برابر بمباران یونی می‌باشد. این موضوع نشان می‌دهد که بخش عمده انرژی یون‌های ورودی صرف فرآیندهای نفوذ و اتلاف انرژی درون ماده شده و سهم کمتری در جدا شدن اتم‌های سطحی دارد. بررسی نتایج یون های برگشتی مشخص کرد که درصد یون‌های پس زده شده محدود بوده و بیشتر یون‌ها به داخل ماده نفوذ کرده‌اند. این نتیجه نشان‌دهنده ضریب توقف مناسب ماده و احتمال جذب بالاتر انرژی در لایه‌های داخلی است. توزیع انرژی یون‌های برگشتی نیز نشان می‌دهد که بخشی از انرژی اولیه در اثر برخوردهای هسته‌ای از دست رفته است.

نتایج گذر بیانگر آن است که تعداد مشخصی از یون‌ها موفق به عبور از ضخامت ماده شده‌اند، که این امر وابسته به ضخامت و چگالی هدف می‌باشد. کاهش انرژی یون‌های عبوری نسبت به انرژی اولیه نشان‌دهنده اتلاف مؤثر انرژی در مسیر نفوذ است. این موضوع تأیید می‌کند که ماده مورد مطالعه دارای قابلیت مناسب در تعدیل و کاهش انرژی ذرات پرانرژی است.

در مجموع، ترکیب نتایج سه خروجی نشان می‌دهد که ماده سفید رفتار مناسبی در جذب و کاهش انرژی یون‌های فرودی داشته و از نظر مقاومت سطحی، کاهش بازپراکندگی و کنترل عبور ذرات، عملکرد مطلوبی از خود نشان می‌دهد.

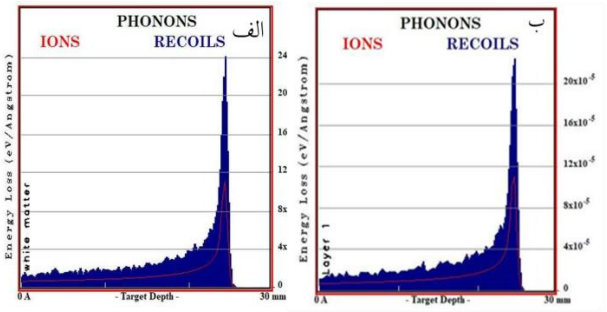
نتایج شبیه‌سازی نشان داد که رفتار پروتون‌ها در دو ماده سفید و خاکستری تفاوت قابل توجهی دارد. ماده سفید به دلیل ساختار متراکم‌تر و یا ترکیب اتمی متفاوت، موجب کاهش عمق نفوذ و

افزایش اتلاف انرژی پروتون‌ها شد. در مقابل، ماده خاکستری برد نفوذ بیشتری برای پروتون‌ها فراهم کرد همچنین نرخ پراگندگی برگشتی در ماده سفید بیشتر بود که نشان‌دهنده احتمال بالاتر برخوردهای الاستیک در سطح است.

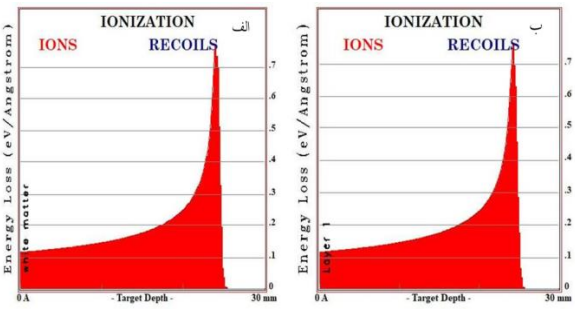
ماده خاکستری عبور بیشتری از ذرات را نشان داد که بیانگر چگالی مؤثر کمتر یا قدرت توقف پایین‌تر است.

در تحلیل نتایج پراکندگی مشاهده شد که میزان کنده‌شدن اتم‌ها در ماده سفید اندکی بیشتر بود که به برهم‌کنش قوی‌تر سطحی مربوط می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که انتخاب ماده هدف تأثیر مستقیمی بر برد، توزیع انرژی و کارایی جذب پروتون دارد. این موضوع می‌تواند در کاربردهایی مانند پروتون تراپی، محافظت پرتویی و طراحی مواد زیستی اهمیت بالایی داشته باشد. در ماده ی خاکستری برخورد های اتمی و ایجاد نقص ساختاری کمی بیشتر است و در ماده ی سفید بخش بیشتری از انرژی به صورت ارتعاشات شبکه ای متمرکز می‌شود. ماده خاکستری قله کمی پهن‌تر، ارتفاع کمتر و توزیع گسترده‌تر. این موضوع با نتایج یون های برگشتی که قبلاً محاسبه شده است نیز هماهنگ است. ماده خاکستری پراکندگی بیشتری دارد اما ماده سفید انرژی را در حجم کوچک‌تری متمرکز می‌کند. طبق شکل ۱، در ماده سفید قله بلندتر، باریک‌تر، متمرکزتر و در تفسیر فیزیکی نتایج نشان می‌دهد، در ماده خاکستری برخوردهای اتمی و ایجاد نقص ساختاری کمی بیشتر است. نتایج حاصل از یونیزاسیون ماده ی سفید و خاکستری مغز با استفاده از پرتو دهی پروتون ۵۰ مگا الکترون ولت که در شکل ۲ آورده شده است، پروتون در ماده خاکستری کمی بیشتر نفوذ می‌کند. در ماده خاکستری برخوردهای اتمی و ایجاد نقص ساختاری بیشتر است.

در ماده سفید انرژی یونش و فونونی در حجم کوچک‌تری متمرکز می‌شود و ماده سفید رفتار نزدیک‌تر به یک پیک براگ ایده‌آل دارد. یونیزاسیون مهم‌ترین پارامتر برای پرتودرمانی است، چون بخش عمده آسیب زیستی ناشی از یونش مولکول‌ها و به‌ویژه DNA است. در هر دو نمودار شکل ۲ مشاهده می‌شود که با افزایش عمق، یونش افزایش می‌یابد. در انتهای مسیر پروتون یک قله تیز تشکیل می‌شود. پس از قله، مقدار یونش تقریباً به صفر می‌رسد.



شکل ۱: انرژی از دست رفته برای پروتون با انرژی ۵۰ مگا الکترون ولت برحسب ضخامت الف: سفید، ب: خاکستری.



شکل ۲: نمودار یونیزاسیون ماده ی سفید و خاکستری مغز با استفاده از پرتو دهی پروتون ۵۰ مگا الکترون ولت (الف: سفید، ب: خاکستری)

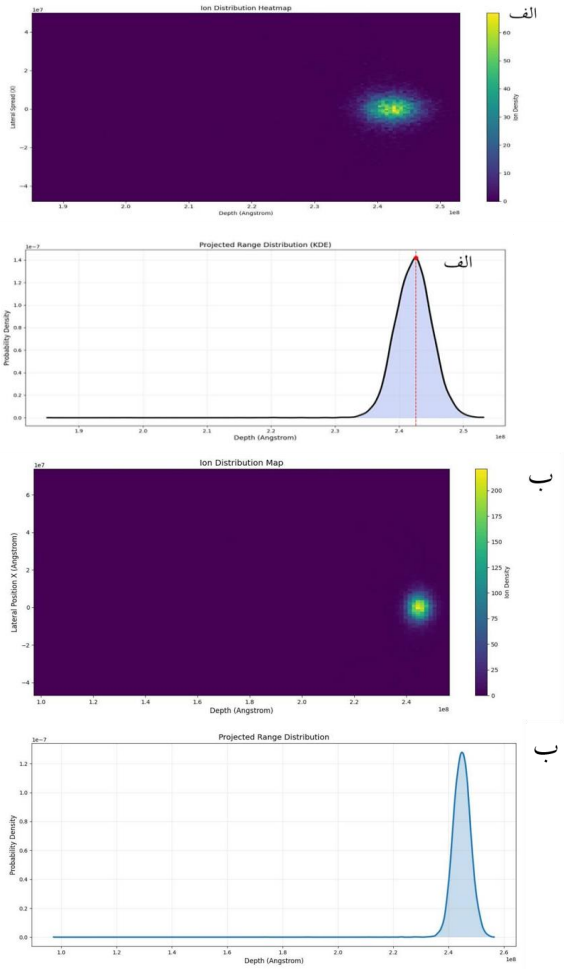
نتایج حاصل از تحلیل برد پروتون، نشان میدهد که برد متوسط برد پروتون در بافت ماده خاکستری برابر با ۲٤/٤ میلی‌متر و در بافت ماده سفید برابر با ۲٤/۲ میلی‌متر است. این اختلاف نشان می‌دهد که پروتون در ماده خاکستری نفوذ اندکی بیشتر دارد.

بررسی پارامتر عدم تقارن توزیع احتمالی نشان داد که توزیع برد پروتون در ماده خاکستری دارای عدم تقارن بیشتری نسبت به ماده سفید است. این مقدار در ماده خاکستری به‌مراتب بیشتر از ماده سفید محاسبه شد که نشان‌دهنده تمرکز بیشتر توقف پروتون در ناحیه قله براگ است. این نتایج بیانگر آن است که ماده خاکستری در مقایسه با ماده سفید دارای رفتار پیچیده‌تر و پراکندگی بیشتری در فرآیند توقف پروتون است.

۱. برد متوسط[۱]: اختلاف mm ۲/ یعنی پروتون در ماده خاکستری کمی بیشتر نفوذ کرده است. تفسیر فیزیکی این پدیده می‌تواند به

[۱] Ion Range

تفاوت در ترکیب عنصری برگردد؛ ماده خاکستری اکسیژن بیشتری دارد و چگالی مؤثر توقف کمی متفاوت است، بنابراین افت انرژی در مسیر کمی ملایم‌تر شده و برد بیشتر شده است.



شکل ۳: نمودار برد پروتون در ماده‌ی سفید و خاکستری مغز با انرژی ۵۰ مگا الکترون ولت (الف: سفید، ب: خاکستری)

۲. یون های برکشتی: اختلاف ٦٢ mm یعنی در ماده خاکستری عدم قطعیت مکانی پایان مسیر پروتون بیشتر است. هرچه یون های برگشتی بیشتر باشد، موقعیت دقیق پیک براگ کمتر قابل پیش‌بینی است.

۳. عدم تقارن توزیع[۲]: تقارن توضیع داده های منفی یعنی توزیع به سمت عمق‌های کمتر کشیده شده است. اما مقدار خیلی بزرگ‌تر این پارامتر در ماده خاکستری نشان می‌دهد، توزیع توقف پروتون بسیار نامتقارن‌تر است. بخش زیادی از پروتون‌ها نزدیک انتهای مسیر متوقف می‌شوند ولی با پراکندگی شدیدتر.

٤. تیزی توزیع[۳]: این اختلاف بسیار زیاد است. در ماده خاکستری توقف پروتون در یک ناحیه بسیار متمرکز رخ می‌دهد، اما به دلیل یون های برگشتی بالا اطراف آن پراکندگی بیشتری هم وجود دارد، یعنی، قله شدیدتر، اما ناحیه مؤثر گسترده‌تر.

جدول۱: مقایسه عددی نتایج شبیه سازی در دو بافت سفید و خاکستری مغز

	خاکستری	سفید
Staggle	۳۵۸μm	۲۹۷μm
Range	۲٤/۲mm	۲٤/٤
Skewness	−۸/٤۰۷۲	−۱/۳۷۷۰
kurtosis	۳۱/۰۳	۲٤/۰۹

بحث و نتیجه گیری

نتایج نشان می‌دهد که انتخاب ماده هدف تأثیر مستقیمی بر برد، توزیع انرژی و کارایی جذب پروتون دارد. این موضوع می‌تواند در کاربردهایی مانند پروتون تراپی، محافظت پرتویی و طراحی مواد زیستی اهمیت بالایی داشته باشد. در ماده ی خاکستری برخورد های اتمی و ایجاد نقض ساختاری کمی بیشتر است و در ماده ی سفید بخش بیشتری از انرژی به صورت ارتعاشات شبکه ای متمرکز می‌شود. به طور کلی، تفاوت در ترکیب شیمیایی و ساختار این دو بافت می‌تواند نقش مهمی در الگوی انتقال انرژی و میزان آسیب پرتویی در پروتون‌تراپی ایفا کند.

مراجع

[۱] R. Mohan; “A Review of Proton Therapy—Current Status and Future Directions”; Precis. Radiat. Oncol. (2022) doi:10.1002/pro6.1149.
[۲] “Proton Beam Therapy for Pediatric Brain Tumor”; review article, PMC.
[۳] J. F. Ziegler; “SRIM-2008, Stopping and Range of Ions in Matter”; SRIM/TRIM documentation, srim.org.
[٤] ICRU; “Photon, Electron, Proton and Neutron Interaction Data for Body Tissues”; ICRU Report 46, International Commission on Radiation Units and Measurements. (1992).

[۲] Skewness

[۳] Kurtosis

مطالعه مونت‌کارلو اثر محتوای اکسیژن سلول بر بازده آسیب پروتون‌ها

معینی، حسین[۱]؛ مکاری، مجتبی[۲]

[۱] بخش فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز، شیراز

[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی خاتم الانبیاء بهبهان، بهبهان

چکیده

این مطالعه با استفاده از شبیه‌سازی‌های مونت‌کارلو و کدهای Geant4-DNA و MCDS اثر محتوای اکسیژن سلول بر انواع آسیب DNA را بررسی کرد. نتایج نشان دادند که افزایش اکسیژن سلول، به ویژه در محدوده ۰ تا ۱۰٪، فرکانس شکست‌های تک و دورشته‌ای DNA را افزایش می‌دهد و بیش از ۱۰٪ تقریباً ثابت می‌ماند. افزایش اکسیژن باعث افزایش نسبت شکست‌های رشته‌ای به آسیب بازی و کاهش آسیب بازی می‌شود. اثر قطر سلول و هسته بر فرکانس آسیب‌ها ناچیز بود. این یافته‌ها با شواهد تجربی و بالینی همخوانی دارد و نشان می‌دهد که هیپوکسی تومور پیش‌بینی‌کننده نتایج ضعیف رادیوتراپی است. بنابراین، محتوای اکسیژن سلولی باید در برنامه‌ریزی و محاسبات دوز رادیوتراپی لحاظ شود. این مطالعه می‌تواند به بهبود پیش‌بینی اثر تابش پروتون و بهینه‌سازی درمان با حداقل دوز و بیشترین خنثی‌سازی سلول‌های سرطانی در پروتون درمانی کمک کند.

واژه های کلیدی: پروتون تراپی، محتوای اکسیژن سلول، هسته سلول، کد Geant4-DNA، کد MCDS.

Monte Carlo Study on the Effect of Cellular Oxygen Content on Proton Damage Efficiency

Moeini, Hossein[1]; Mokari, Mojtaba[2]

[1] Department of Physics, Faculty of Science, Shiraz University, Shiraz,
[2] Department of Physics, Faculty of Science, Behbahan Khatam Alanbia University of Technology, Behbahan

Abstract

This study employed Monte Carlo simulations using Geant4-DNA and MCDS to investigate the effect of cellular oxygen content on DNA damage. Results showed that increasing oxygen, particularly from 0% to 10%, elevated the frequency of single- and double-strand DNA breaks, while beyond 10% the effect plateaued. Higher oxygen also increased the ratio of strand breaks to base damage and reduced base damage probability. The size of the cell and nucleus had negligible impact on DNA damage frequencies. These findings are consistent with experimental and clinical evidence, highlighting that tumor hypoxia is a predictor of poor radiotherapy outcomes. Therefore, cellular oxygen content should be considered in radiotherapy dose planning. The results provide insights for predicting proton irradiation effects more accurately and optimizing cancer treatments, aiming for minimal dose exposure while maximizing cancer cell neutralization in the proton therapy.

***Keywords**: Proton Therapy, Oxygen Content, Cell Nucleus, Geant4-DNA Code, MCDS Code.*

PACS No. 20, 87

مقدمه

پرتوهای یونیزان کاربردهای گسترده‌ای در بیوفیزیک تابشی، پزشکی و زیست‌شناسی تابشی دارند. این تابش‌ها می‌توانند آسیب‌های بیوفیزیکی اولیه و بلندمدت ایجاد کنند که به تغییرات ساختاری سلول، انسداد عملکردی یا حتی سرطان منجر می‌شوند. از این رو، درک تعاملات تابش با سلول‌ها و مواد ژنتیکی آن‌ها اهمیت بالایی دارد. آسیب‌های DNA ناشی از قرار گرفتن بافت در معرض تابش یونیزان شامل آسیب‌های قند–فسفات و بازی هستند.

آسیب‌های قند–فسفات به صورت شکست‌های تک‌رشته‌ای و دورشته‌ای رخ می‌دهند که نوع دوم در صورت عدم ترمیم می‌تواند به مرگ سلولی منجر شود [۱]. مطالعات تجربی متعددی اثر تابش یونیزان را بر سلول‌ها بررسی کرده‌اند؛ از جمله روی سلول‌های مخمر [۲] و سلول‌های همستر چینی [۳]. با توجه به اینکه اندازه‌گیری مستقیم پارامترهای مهم در مقیاس سلولی هنوز عملی نشده است، شبیه‌سازی‌های مونت‌کارلو برای مدل‌سازی تعاملات تابش–ماده و پیش‌بینی آسیب DNA به کار می‌روند. کدهای متداول در این زمینه شامل Geant4 [٤]، MCDS [٥] و KURBUC [٦] هستند. پارامترهای متعددی می‌توانند میزان آسیب DNA را تحت تأثیر قرار دهند؛ از جمله نوع و انرژی تابش برخوردی، سطح مقطع برخورد فیزیکی، انرژی آستانه برای آسیب مستقیم و احتمال آسیب غیرمستقیم ناشی از واکنش رادیکال‌های شیمیایی با DNA [٦]. مطالعات شبیه‌سازی با پرتوهای پروتون شامل بررسی آسیب سلولی [۷] با استفاده از Geant4-DNA و همچنین بررسی‌های آسیب سلولی با KURBUC [۸] بوده است. در برنامه‌ریزی درمانی، ارزیابی آسیب DNA و مقادیر دوزیمتری در مقیاس میکرومتری اهمیت دارد. با توجه به پیچیدگی برهمکنش‌های تابش با ساختارهای زیستی و زمان‌بر بودن محاسبات، رویکردهای ساده‌سازی برای ارتباط دادن ویژگی‌های جذب تابش به نوع و اندازه بافت توسعه یافته‌اند. این رویکرد برای اولین بار توسط Rossi و همکاران اتخاذ شد [۹] و امکان بررسی دقیق توزیع مکانی و زمانی انرژی‌های انباشت‌شده در مقیاس میکروسکوپی را فراهم کرد. در مطالعه حاضر، پروتون‌هایی با انرژی ۲ تا ۲۳۰ MeV در آب با استفاده از Geant4-DNA شبیه‌سازی شدند و با کمک MCDS، آسیب DNA محاسبه شد. هدف اصلی این مطالعه، ارزیابی اثر محتوای اکسیژن سلول بر فراوانی انواع آسیب‌های DNA ناشی از تابش پروتون است. نتایج این پژوهش می‌تواند بینش جدیدی در خصوص نقش اکسیژن در پاسخ سلول به تابش فراهم کرده و زمینه را برای توسعه مدل‌های دقیق‌تر پیش‌بینی بازده آسیب DNA و مطالعات آینده در بهینه‌سازی پروتون‌درمانی بر اساس وضعیت اکسیژن‌رسانی تومور فراهم سازد.

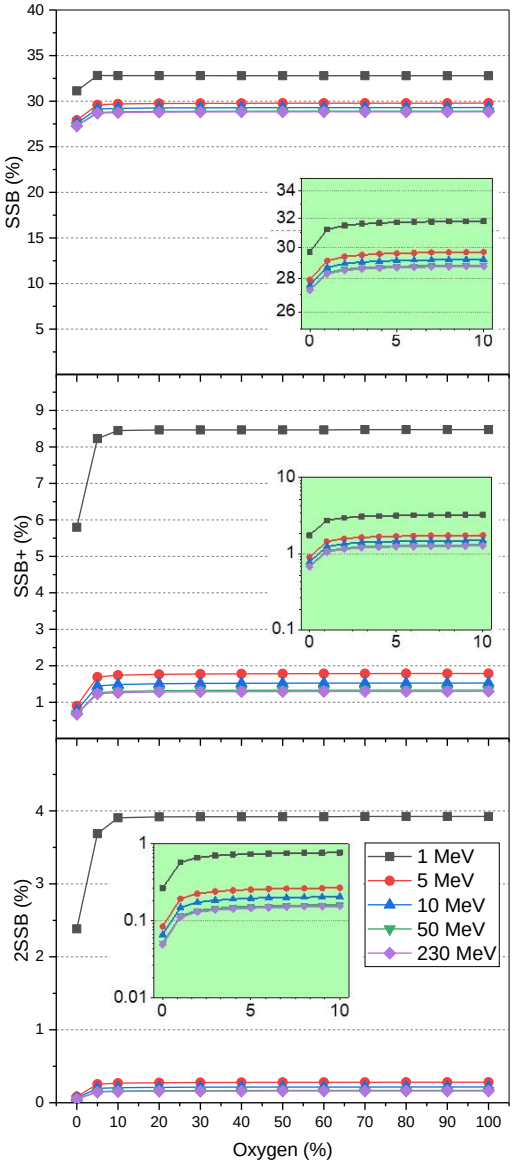
مواد و روش‌ها

این مطالعه با استفاده از شبیه‌سازی‌های مونت‌کارلو به کمک کدهای Geant4-DNA و MCDS انجام شد تا اثر محتوای اکسیژن سلول بر آسیب DNA و مقادیر میکرودوزیمتری بررسی‌شود. Geant4-DNA [٥و٤] امکان شبیه‌سازی برهمکنش‌های فیزیکی و شیمیایی انواع تابش‌ها در مقیاس نانومتری، شامل DNA و ذرات ثانویه، را فراهم می‌کند. پروتون‌ها با انرژی ۲ تا ۲۳۰ MeV به طور موازی و از نیم‌کره سلول‌های مدل شده، که به شکل کره‌های آبی با قطرهای ۱۰۰ و ٦ µm برای سلول و هسته در نظر گرفته شده بودند، تابانده شدند که در مرجع [۷] مشخصات کد Geant4-DNA، Physics list انتخابی، برش انرژی، نوع آسیب‌ها و صحت سنجی روش کار توضیح داده شده است. برای هر انرژی، ۱۰۰۰ پروتون اولیه تولید شد تا مواجهه تصادفی و کیفیت تابش تضمین گردد (مطابق مرجع [۷]). از کد Geant4-DNA انرژی‌های انباشت‌شده و مکان آن‌ها استخراج و به MCDS وارد شدند تا انواع آسیب DNA ، شامل شکست‌های تک و دورشته‌ای و آسیب بازی محاسبه شود [٦]. انرژی آستانه برای ایجاد آسیب مستقیم یا شکست تک‌رشته‌ای eV ۱۷٫۵ در نظر گرفته شد و احتمال ایجاد آسیب غیرمستقیم توسط رادیکال‌های هیدروکسیل برای نوکلئوتیدها و بازها به ترتیب ۱۳ و ۸۰٪ فرض شد [٦] شبیه‌سازی‌ها به صورت موازی بر روی یک کلاستر کامپیوتری اجرا شدند و محاسبات هر انرژی به طور متوسط به ۵ روز زمان نیاز داشت.

بحث و بررسی نتایج

اثر مقدار اکسیژن سلول بر فرکانس انواع آسیب DNA، به ویژه ضایعات پیچیده با پتانسیل بالا برای کشندگی سلول‌های سرطانی، مهم است. شکل ۱ نشان می‌دهد که محتوای اکسیژن چگونه فرکانس انواع شکست‌های تک‌رشته‌ای را تحت تأثیر قرار می‌دهد. این شامل شکست تک‌رشته‌ایSSB، دو شکست در یک رشته با فاصله کمتر از ۱۰ bp یا ۳٫٤ nm به نام +SSB و دو شکست، یکی در هر رشته، با فاصله بیشتر از ۱۰ bp به نام 2SSB است [٦]. بر اساس شکل ۱، سلول‌های دارای اکسیژن، افزایش در

شکست‌های تک‌رشته‌ای را نشان می‌دهند. بیشترین افزایش فرکانس در ٪۱ اکسیژن سلولی رخ می‌دهد و بالاتر از ٪۱۰ تقریباً ثابت باقی می‌ماند. میانگین تغییر فرکانس SSB، SSB+ و 2SSB با افزایش اکسیژن از ٪۰ تا ٪۱۰ به ترتیب حدود ٪۱٫۴۸ ، ٪۰٫۵۹ و ٪ ۰/۱۱ است. شکل ۲ اثر اکسیژن بر فرکانس انواع شکست‌های دورشته‌ای را نشان می‌دهد که شامل دو شکست، یکی در هر رشته با فاصله کمتر از ۱۰ bp به‌نام DSB، شکست DSB+ که شامل یک DSB و یک شکست تک‌رشته‌ای اضافی در همان رشته با فاصله کمتر از ۱۰ bp است و شکست DSB++ با دو یا چند DSB با فاصله کمتر از ۱۰ bp. مشابه شکست‌های تک‌رشته‌ای، بیشترین افزایش فرکانس در ٪۱ افزایش اکسیژن رخ داده و در حدود ٪۲۰ اشباع می‌شود. میانگین افزایش فرکانس DSB، DSB+ و DSB++ با افزایش اکسیژن از ٪۰ تا ٪۱۰ به ترتیب ٪۰٫۴۹، ٪۰٫۱۰ و ٪ ۰/۰۱ است. افزایش تدریجی آسیب‌های DNAبا افزایش غلظت اکسیژن را می‌توان به نقش اکسیژن در مرحله شیمیایی پس از رادیولیز آب نسبت داد. حضور اکسیژن با تثبیت آسیب‌های ناشی از رادیکال‌های آزاد و تشکیل گونه‌های فعال اکسیژن دار (ROS)، احتمال تبدیل آسیب‌های اولیه به آسیب‌های پایدار DNA را افزایش می‌دهد و در نتیجه موجب افزایش فراوانی شکست‌های رشته‌ای می‌شود. شکل ۳ اثر اکسیژن بر فرکانس آسیب باز DNA را نشان می‌دهد و افزایش اکسیژن از ٪۰ تا ٪۱۰ بیشترین کاهش فرکانس آسیب باز را با حدود ٪۲٫۸ ایجاد می‌کند. در این مطالعه، از هر دو کد Geant4-DNA و MCDS برای بررسی وابستگی آسیب DNA به محتوای اکسیژن سلول استفاده شد و هیچ مطالعه مشابهی در ادبیات علمی که اثر اکسیژن بر مقادیر ناشی از تابش پروتون را بررسی کند یافت نشد. با این حال، مطالعاتی وجود دارند که یا اثر پرتوهای آلفا و گاما Co-۶۰ را بررسی کرده‌اند [۱۰] یا نتایج خود را با اثرات زیستی ترکیب کرده‌اند که امکان مقایسه مستقیم را فراهم نمی‌کنند. یافته‌ها نشان دادند که هر دو عامل انتقال انرژی خطی (LET) و اثر غیرمستقیم، نقش مهمی در میزان القای DSB دارند و کارایی زیستی نسبی (RBE) تابش‌های با LET بالاتر نسبت به پرتوهای گاما Co-۶۰ با کاهش غلظت اکسیژن تمایل به‌افزایش دارد.

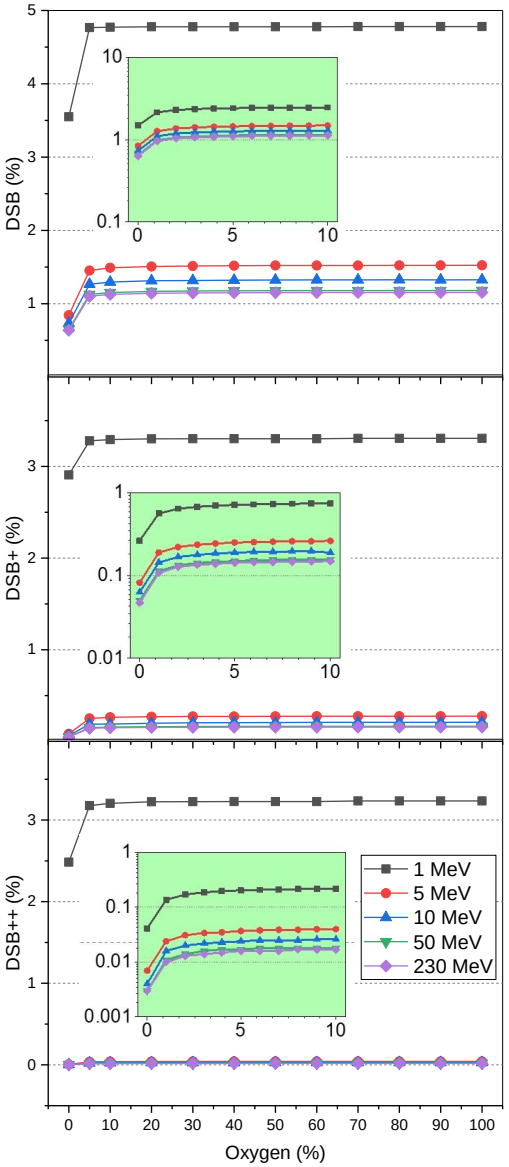


شکل ۱: احتمال ایجاد شکست‌های تک‌رشته‌ای DNA شامل SSB، SSB+ و 2SSB به عنوان تابعی از محتوای اکسیژن سلول.

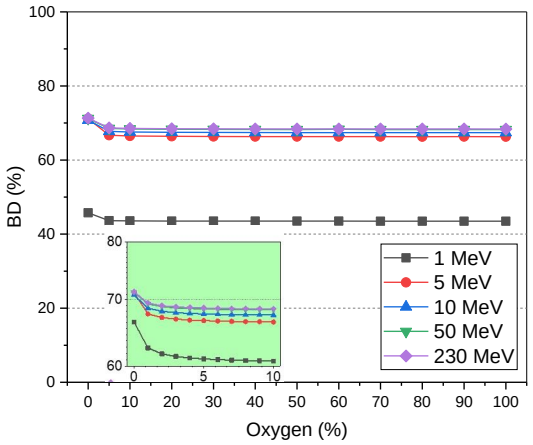
نتیجه‌گیری

در این مطالعه با استفاده از شبیه‌سازی‌های مونت‌کارلو و کدهای Geant4-DNA و MCDS اثر محتوای اکسیژن سلول بر انواع آسیب DNA بررسی شد. نتایج نشان دادند که افزایش اکسیژن، به ویژه در محدوده ۰ تا ٪۱۰، فرکانس شکست‌های تک و دورشته‌ای DNA و نسبت آسیب‌های رشته‌ای به آسیب باز را افزایش

می‌دهد و در مقادیر بالاتر از ۱۰٪ تقریباً اشباع می‌شود. تحلیل نتایج نشان داد که آسیب‌های DNA تحت تأثیر مستقیم اکسیژن هستند. بنابراین، محتوای اکسیژن سلولی باید در محاسبات دوز و برنامه‌ریزی درمانی لحاظ شود. شبیه‌سازی‌ها امکان ارزیابی دقیق اثر اکسیژن بر کارایی آسیب DNA و پیامدهای بالینی پروتون‌درمانی را فراهم می‌کند و به بهینه‌سازی درمان با حداقل دوز و بیشترین خنثی‌سازی سلول‌های سرطانی کمک کند.



شکل ۲: احتمال ایجاد شکست‌های دورشته‌ای DNA شامل DSB، DSB+ و DSB++ به عنوان تابعی از محتوای اکسیژن سلول.



شکل ۳: احتمال ایجاد آسیب بازی DNA به عنوان تابعی از محتوای اکسیژن سلول.

مرجع‌ها

[1]. D. T. Goodhead, “Initial events in the cellular effects of ionizing radiations: clustered damage in DNA,” Int. J. Radiat. Biol., 65, 7–17, 1994.
[2]. D. Frankenberg, M. Frankenberg-Schwager, M. Bloecher, R. Harbich, “Evidence for DNA Double-Strand Breaks as the Critical Lesions in Yeast Cells Irradiated with Sparsely or Densely Ionizing Radiation under Oxic or Anoxic Conditions,” Radiat. Res., 88, 524, 1981.
[3]. C. M. de Lara, M. A. Hill, 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 Ultrasoft X Rays,” Radiat. Res., 155, 440–448, 2001.
[4]. S. Agostinelli, et al., “Geant4—a simulation toolkit,” Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A, 506, 250–303, 2003. [5]. V. A. Semenenko, R. D. Stewart, “Fast Monte Carlo simulation of DNA damage formed by electrons and light ions,” Phys. Med. Biol., 51, 1693–1706, 2006.
[6]. H. Nikjoo, D. Emfietzoglou, T. Liamsuwan, R. Taleei, D. Liljequist, S. Uehara, “Radiation track, DNA damage and response—a review,” Rep. Prog. Phys., 79, 116601, 2016.
[7]. M. Mokari, M. H. Alamatsaz, H. Moeini, R. Taleei, “A Simulation Approach for Determining the Spectrum of DNA Damage Induced by Protons,” Phys. Med. Biol., 63, 175003, 2018.
[8]. H. Nikjoo, R. Taleei, T. Liamsuwan, D. Liljequist, D. Emfietzoglou, “Perspectives in radiation biophysics: From radiation track structure simulation to mechanistic models of DNA damage and repair,” Radiat. Phys. Chem., 128, 3–10, 2016.
[9]. H. H. Rossi, “Specification of radiation quality,” Radiat. Res., 10, 522, 1959.
[10]. J. Y. Tsai, F. H. Chen, T. Y. Hsieh, Y. Y. Hsiao, “Effects of indirect actions and oxygen on relative biological effectiveness: estimate of DSB induction and conversion induced by gamma rays and helium ions,” J. Radiat. Res., 56, 691–699, 2015.

مقایسه مواد کندکننده در شکل‌دهی طیف نوترونی مولد D–T برای کاربرد BNCT با استفاده از MCNPX

سنا اصغری[۱]، علیرضا علوی[۱]، مریم قپانوری[۲]*، وحید دهقانی[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران

[۲] سازمان انرژی اتمی ایران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده گداخت هسته ای

چکیده

در درمان جذب نوترون توسط بور، نوترون‌های ۱۴.۱ MeV تولیدشده از مولد دوتریوم–تریتیوم برای استفاده مستقیم مناسب نیستند و باید پیش از رسیدن به محل هدف کند شده و طیف آنها شکل‌دهی شود. در این پژوهش، عملکرد شش ماده کندکننده شامل آب سبک، آب سنگین، پارافین، پلی‌استایرن، تری‌فلوراید آلومینیوم و بیسموت در شکل‌دهی طیف نوترونی چشمه D–T برای کاربرد BNCT با استفاده از MCNPX بررسی شد. نتایج نشان داد که نوع ماده کندکننده تأثیر قابل توجهی بر نرخ شمارش و توزیع انرژی نوترون‌ها دارد. مواد هیدروژنی، به‌ویژه پارافین، به دلیل انتقال مؤثر انرژی در برخوردهای کشسان، قابلیت مناسبی برای کاهش مؤلفه نوترون‌های سریع نشان دادند. همچنین بررسی ضخامت‌های مختلف پارافین نشان داد که ضخامت کندکننده نیز بر شکل طیف خروجی اثرگذار است. بنابراین، انتخاب همزمان نوع ماده و ضخامت مناسب برای طراحی مقدماتی مجموعه شکل‌دهنده پرتو ضروری است.

واژه های کلیدی: *درمان جذب نوترون توسط بور، مولد نوترونی D–T، کندکننده نوترون، شکل‌دهی طیف نوترونی، MCNPX*

Comparison of Moderator Materials for Shaping the Neutron Spectrum of a D–T Generator for BNCT Applications Using MCNPX

Sana Asghari[1], Alireza Alavi[1], Maryam Ghapanvary *[2], Vahid Dehghani[1]

[1] *Faculty of Physics, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, Iran.*
[2] *Plasma and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran.*

Abstract

In Boron Neutron Capture Therapy (BNCT), 14.1 MeV neutrons produced by a deuterium–tritium generator are not directly suitable for irradiation and must be moderated before reaching the target. In this study, the performance of six moderator materials, including light water, heavy water, paraffin, polystyrene, aluminum trifluoride, and bismuth, was investigated for neutron spectrum shaping of a D–T source using MCNPX. The results showed that the moderator material significantly affects the neutron count rate and energy distribution at the target position. Hydrogen-rich materials, especially paraffin, showed suitable capability for reducing the fast-neutron component due to efficient energy transfer in elastic scattering interactions. The investigation of different paraffin thicknesses also indicated that moderator thickness plays an important role in shaping the outgoing neutron spectrum. Therefore, the simultaneous selection of the moderator material and thickness is important in the preliminary design of a beam shaping assembly.

Keywords: *Boron Neutron Capture Therapy, D–T neutron generator, neutron moderator, shaping the neutron spectrum, MCNPX.*
PACS No. *(۲۸)*

مقدمه

درمان جذب نوترون توسط بور (BNCT) یکی از روش‌های هدفمند پرتودرمانی است که بر پایه جذب نوترون توسط ایزوتوپ بور-۱۰ در سلول‌های توموری انجام می‌شود. پس از تجمع ترکیبات حاوی بور در بافت سرطانی، ناحیه درمان با باریکه نوترونی تابش‌دهی شده و در نتیجه واکنش هسته‌ای، ذرات پرانرژی با برد کوتاه تولید می‌شوند. به دلیل برد محدود این ذرات، آسیب عمدتاً در سلول‌های حاوی بور متمرکز شده و آسیب به بافت‌های سالم اطراف کاهش می‌یابد [۱].

یکی از چالش‌های اصلی در BNCT، تأمین باریکه نوترونی با انرژی و شدت مناسب است. اگرچه در گذشته راکتورهای هسته‌ای به‌عنوان چشمه نوترونی استفاده می‌شدند، اما به دلیل ابعاد بزرگ، هزینه بالا و الزامات ایمنی، مولدهای نوترونی فشرده و شتاب‌دهنده‌محور مورد توجه قرار گرفته‌اند [۲]. در این میان، مولدهای دوتریوم–تریتیوم (D–T) به دلیل تولید نوترون‌های سریع با انرژی حدود ۱۴.۱MeV و قابلیت کنترل شرایط کاری، گزینه‌ای قابل بررسی برای کاربردهای BNCT هستند [۳].

با این حال، نوترون‌های ۱۴.۱ MeV برای استفاده مستقیم در BNCT مناسب نیستند و باید پیش از رسیدن به ناحیه درمان، انرژی آن‌ها کاهش یافته و طیف نوترونی شکل‌دهی شود. در این مقاله، با استفاده از کد MCNPX، عملکرد چند ماده کندکننده شامل آب سبک، آب سنگین، پارافین، پلی‌استایرن، تری‌فلوراید آلومینیوم و بیسموت برای شکل‌دهی طیف نوترونی مولد D–T بررسی و مقایسه شده است [۴].

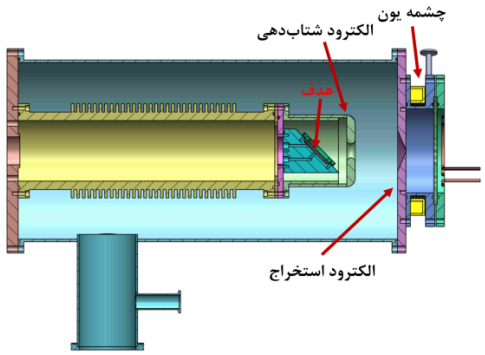
مواد و روش‌ها (روش کار)

در این پژوهش، عملکرد مواد کندکننده در شکل‌دهی طیف نوترونی مولد دوتریوم–تریتیوم با استفاده از کد مونت‌کارلوی MCNPX بررسی شد. چشمه نوترونی به‌صورت یک چشمه نقطه‌ای D–T در امتداد محور باریکه مدل‌سازی گردید و نوترون‌های خروجی به‌صورت تک‌انرژی با انرژی ۱۴.۱ MeV در نظر گرفته شدند. از آنجا که این نوترون‌های سریع برای استفاده مستقیم در BNCT مناسب نیستند، کاهش انرژی و شکل‌دهی طیف آن‌ها با استفاده از مواد کندکننده ضروری است.

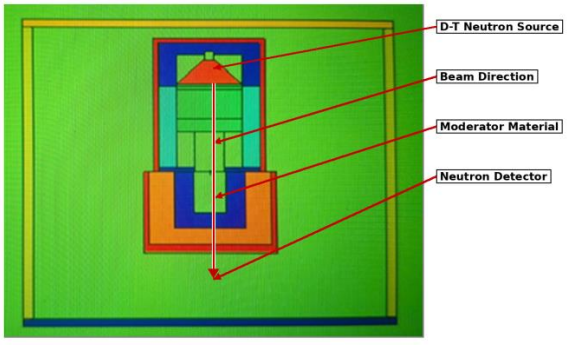
هندسه مورد بررسی به‌صورت یک مجموعه شکل‌دهنده پرتو چندلایه مدل‌سازی شد. در این ساختار، چشمه نوترونی در ابتدای مسیر باریکه قرار گرفت و ماده کندکننده در مسیر خروجی نوترون‌ها جانمایی شد. هندسه شامل چشمه نوترونی، ناحیه ماده کندکننده، مسیر انتقال باریکه و آشکارساز نوترونی در محل هدف بود. نمای مقطع طولی هندسه شبیه‌سازی‌شده و اجزای اصلی آن در شکل ۲ نشان داده شده است.

برای مقایسه عملکرد مواد مختلف، شرایط چشمه، هندسه کلی، محل آشکارساز و سایر پارامترهای شبیه‌سازی در همه حالت‌ها ثابت نگه داشته شد و تنها جنس ماده کندکننده تغییر یافت. مواد بررسی‌شده شامل آب سبک، آب سنگین، پارافین، پلی‌استایرن، تری‌فلوراید آلومینیوم و بیسموت بودند. بیسموت اگرچه کندکننده اصلی نوترون‌های سریع محسوب نمی‌شود، اما به‌منظور مقایسه رفتار یک ماده سنگین و بررسی نقش احتمالی آن در تضعیف نوترون‌ها در کنار مواد کندکننده در نظر گرفته شد.

در مرحله نخست، ضخامت مؤثر همه مواد برابر با ۱۰ سانتی‌متر انتخاب شد و نرخ شمارش نوترونی و توزیع انرژی نوترون‌ها در محل هدف محاسبه گردید. معیار اصلی مقایسه، توانایی مواد در کاهش مؤلفه نوترون‌های سریع و تغییر شکل طیف نوترونی خروجی بود. سپس برای ماده منتخب، یعنی پارافین، اثر ضخامت‌های ۱۰، ۱۵ و ۲۵ سانتی‌متر بر طیف انرژی نوترون‌ها در محل هدف بررسی شد.



شکل ۱. تصویر مولد نوترونی D–T موجود در آزمایشگاه IECF و مورد استفاده به‌عنوان چشمه نوترونی در این مطالعه.



شکل ۲. نمای مقطع طولی هندسه شبیه‌سازی‌شده در MCNPX شامل محل چشمه نوترونی D–T ، امتداد باریکه، ناحیه ماده کندکننده و محل آشکارساز نوترونی.

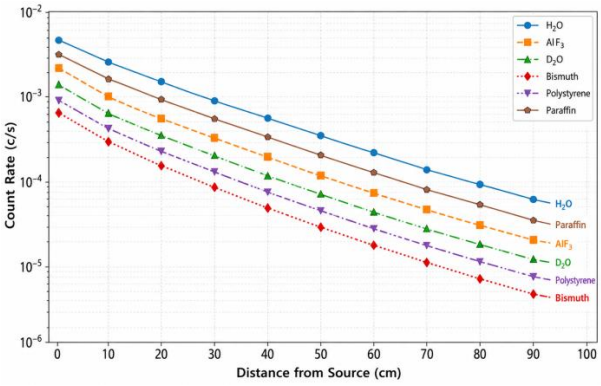
نتایج و بحث

به‌منظور بررسی عملکرد مواد مختلف در شکل‌دهی طیف نوترونی، تغییرات نرخ شمارش نوترونی بر حسب فاصله از چشمه بررسی شد. همان‌طور که در شکل ۳ نشان داده شده است، با افزایش فاصله، نرخ شمارش برای همه مواد کاهش می‌یابد که می‌تواند ناشی از تضعیف باریکه، پراکندگی نوترون‌ها و برهم‌کنش آن‌ها با ماده کندکننده باشد. اختلاف میان منحنی‌ها نشان می‌دهد که نوع ماده بر میزان تضعیف و انتقال نوترون‌ها در مسیر باریکه اثرگذار است. در میان مواد بررسی‌شده، مواد هیدروژنی مانند پارافین، پلی‌استایرن و آب سبک به دلیل انتقال مؤثر انرژی در برخوردهای کشسان، توانایی مناسبی در کاهش انرژی نوترون‌های سریع حاصل از چشمه D–T دارند. در مقابل، کاهش نرخ شمارش در موادی مانند بیسموت الزاماً به معنی کندسازی بهتر نیست و بیشتر می‌تواند ناشی از تضعیف، پراکندگی یا حذف بخشی از نوترون‌ها از راستای باریکه باشد.

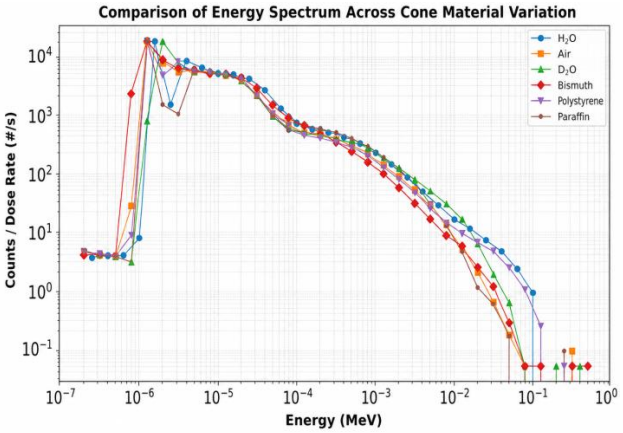
شکل ۴ مقایسه توزیع انرژی نوترون‌ها را برای مواد مختلف در محل هدف نشان می‌دهد. نتایج بیانگر آن است که تغییر ماده کندکننده باعث تغییر محسوس در طیف انرژی خروجی می‌شود. مواد هیدروژنی، به‌ویژه پارافین، به دلیل توان کندسازی مناسب، نقش مؤثری در کاهش مؤلفه نوترون‌های سریع و انتقال نسبی طیف به نواحی انرژی پایین‌تر دارند. با این حال، انتخاب ماده مناسب برای کاربرد BNCT تنها بر اساس کاهش نرخ شمارش یا بیشترین کندسازی انجام نمی‌شود، بلکه باید عواملی مانند حفظ شار نوترونی مفید، کاهش مؤلفه نوترون‌های سریع، کنترل آلودگی گاما و شکل‌دهی مناسب طیف انرژی نیز هم‌زمان در نظر گرفته شوند. از این رو، پارافین می‌تواند به‌عنوان یکی از گزینه‌های مناسب برای کندسازی اولیه مطرح شود، در حالی که موادی مانند بیسموت بیشتر می‌توانند در نقش فیلتر یا ماده کمکی در چیدمان‌های چندلایه بررسی شوند.

به‌منظور بررسی اثر ضخامت ماده کندکننده منتخب، توزیع انرژی نوترون‌ها برای ضخامت‌های مختلف پارافین ارزیابی شد که نتایج آن در شکل ۵ نشان داده شده است.

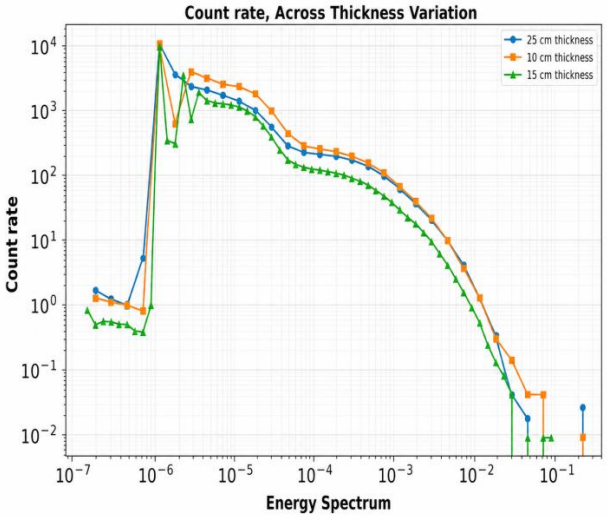
نتایج نشان می‌دهد که تغییر ضخامت پارافین بر شکل طیف خروجی و نرخ شمارش نوترونی در محل هدف اثرگذار است؛ بنابراین، علاوه بر نوع ماده، ضخامت کندکننده نیز در شکل‌دهی طیف نوترونی نقش مهمی دارد. در برخی بازه‌های انرژی، نرخ شمارش مربوط به ضخامت ۲۵ سانتی‌متر از ضخامت ۱۵ سانتی‌متر بیشتر است. این رفتار به معنی افزایش نرخ شمارش کل نیست، بلکه می‌تواند ناشی از بازتوزیع طیف انرژی در اثر افزایش ضخامت پارافین باشد؛ به‌گونه‌ای که بخشی از نوترون‌های سریع به کانال‌های انرژی پایین‌تر منتقل می‌شوند. بر این اساس، پارافین می‌تواند به‌عنوان یکی از گزینه‌های مناسب برای کندسازی اولیه نوترون‌های سریع در طراحی مقدماتی مجموعه شکل‌دهنده پرتو مطرح شود، اما انتخاب نهایی ماده و ضخامت بهینه باید با توجه به شکل کلی طیف خروجی، حفظ شار نوترونی مفید، کاهش مؤلفه نوترون‌های سریع و کنترل آلودگی پرتویی انجام گیرد. با توجه به اینکه در این مقاله شاخص‌های کامل کیفیت پرتو BNCT به‌صورت جداگانه محاسبه نشده‌اند، نتایج حاضر به‌عنوان یک ارزیابی مقدماتی در نظر گرفته می‌شوند.



شکل ۳. مقایسه تغییرات نرخ شمارش نوترونی بر حسب فاصله از چشمه برای مواد مختلف با ضخامت مؤثر ۱۰ سانتی‌متر. محور افقی به‌صورت خطی نمایش داده شده است.



شکل ۴. مقایسه نرخ شمارش نوترونی بر حسب انرژی نوترون در محل هدف برای مواد مختلف با ضخامت مؤثر ۱۰ سانتی‌متر.



شکل ۵. مقایسه نرخ شمارش نوترونی بر حسب انرژی برای ضخامت‌های مختلف پارافین در محل هدف.

نتیجه گیری

در این پژوهش، عملکرد چند ماده کندکننده برای شکل‌دهی طیف نوترونی مولد دوتریوم–تریتیوم در سامانه درمان جذب نوترون توسط بور با استفاده از کد MCNPX بررسی شد. نتایج نشان داد که نوع ماده کندکننده تأثیر قابل توجهی بر نرخ شمارش نوترونی خروجی و توزیع انرژی نوترون‌ها در محل هدف دارد. در میان مواد بررسی‌شده، مواد هیدروژنی، به‌ویژه پارافین، به دلیل توان مناسب در کاهش انرژی نوترون‌های سریع، می‌توانند به‌عنوان گزینه‌ای مناسب برای کندسازی اولیه نوترون‌های MeV 14.1 حاصل از چشمه D–T در طراحی مقدماتی مجموعه شکل‌دهنده پرتو مورد توجه قرار گیرند. با این حال، انتخاب نهایی ماده کندکننده تنها بر اساس کاهش نرخ شمارش انجام نمی‌شود و باید با در نظر گرفتن شکل طیف خروجی، حفظ شار نوترونی مفید، کاهش مؤلفه نوترون‌های سریع و کنترل آلودگی پرتویی انجام گیرد.

همچنین بررسی ضخامت‌های مختلف پارافین نشان داد که علاوه بر نوع ماده، ضخامت کندکننده نیز نقش مهمی در شدت و طیف انرژی نوترون‌های خروجی دارد. افزایش ضخامت می‌تواند باعث انتقال بخشی از نوترون‌های سریع به ناحیه‌های انرژی پایین‌تر شود، اما در صورت انتخاب نامناسب ممکن است به افت بیش از حد شدت باریکه مفید منجر گردد. بنابراین، انتخاب همزمان نوع ماده و ضخامت مناسب برای دستیابی به طیف نوترونی مطلوب ضروری است. با توجه به اینکه در این مقاله شاخص‌های کامل کیفیت پرتو BNCT مانند شار اپی‌ترمال، مؤلفه نوترون‌های سریع و آلودگی گاما به‌صورت جداگانه محاسبه نشده‌اند، نتایج حاضر به‌عنوان یک ارزیابی مقدماتی از عملکرد مواد مختلف در شکل‌دهی طیف نوترونی در نظر گرفته می‌شود. نتایج این مطالعه می‌تواند به‌عنوان گامی مقدماتی در طراحی و بهینه‌سازی مجموعه شکل‌دهنده پرتو برای سامانه‌های BNCT مبتنی بر مولد نوترونی D–T مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع‌ها

[1] M. Suzuki; “Boron neutron capture therapy (BNCT): A unique role in radiotherapy with a view to entering the accelerator-based BNCT era”; *International Journal of Clinical Oncology* **25**, No. 1 (2020) 43-50.
[2] T. E. Blue and J. C. Yanch; “Accelerator-based epithermal neutron sources for boron neutron capture therapy of brain tumors”; *Journal of Neuro-Oncology* **62** (2003) 19-31.
[3] F. S. Rasouli and S. F. Masoudi; “Design and optimization of a beam shaping assembly for BNCT based on D–T neutron generator and dose evaluation using a simulated head phantom”; *Applied Radiation and Isotopes* **70**, No. 12 (2012) 2755-2762.
[4] D. B. Pelowitz; “MCNPX User’s Manual, Version 2.6.0”; Los Alamos National Laboratory, LA-CP-07-1473 (2008).

بررسی پراکندگی مزون‌های π^0 و $\pi^{\pm}$ از هسته Pb در چارچوب اصل عدم قطعیت تعمیم یافته

آرمات، آیدا[۱]؛ موسوی نژاد، سید محمد[۲]

[۱]گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه هرمزگان، صندوق پستی ۳۹۹۵، بندرعباس، ایران

[۲]*دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد*

چکیده

در این کار، پراکندگی پیون توسط هسته Pb را بررسی شده است. این پراکندگی، کاوش دقیقی از توزیع بار و ماده هسته‌ای را فراهم می‌کند و نقش مهمی در آزمایش مدل‌های ساختار هسته‌ای و اصلاح نظریه‌های برهمکنش بنیادی ایفا می‌کند. برای این منظور، پراکندگی پیون را در چارچوب اصل عدم قطعیت تعمیم‌یافته بررسی می‌کنیم. ابتدا معاله نسبیتی اصلاح‌شده در چاچوب GUP را استخراج می‌کنیم و سپس با اعمال پتانسیل مناسب، تابع موج ذره فرودی را تعیین می‌کنیم. در نهایت، ضرایب عبور و بازتاب را محاسبه شده است.

Study of the scattering of π^0 and $\pi^{\pm}$ mesons from the Pb nucleus in the generalized uncertainty principle

Armat, Aida[1]; Moosavi Nejad, S. Mohammad[2]

[1]*Department of Physics, Faculty of Science, University of Hormozgan, P.O. Box 3995, Bandar Abbas, Iran*

[۲]*Department of Physics, Yazd University, Yazd*

Abstract

In this work, pion scattering by the Pb nucleus has been investigated. This scattering provides a detailed probe of the nuclear charge and matter distribution and plays an important role in testing nuclear structure models and refining fundamental interaction theories. For this purpose, we investigate pion scattering in the framework of the generalized uncertainty principle. First, we derive the modified relativistic equation in the GUP framework, and then, by applying an appropriate potential, we determine the wave function of the incident particle. Finally, the transmission and reflection coefficients have been calculated.

PACS No. ۲٤

مقدمه

نظریه پراکندگی یک چارچوب ریاضی مناسب برای بررسی ساختار بنیادی مواد، کشف ذرات جدید، مطالعه برخورد بین ذرات است. به عنوان مثال، از طریق آزمایش‌های پراکندگی غیرالاستیک ساختار داخلی نوکلئون‌ها کشف شد. همچنین، از طریق برخورد بین پروتون‌ها و پادپروتون‌ها که بوزون‌های پیمانه‌ای W و Z را تولید می‌کنند، که در سال ۱۹۸۳ در CERN محقق شد، مدل وحدت واینبرگ–سلام–گلاشو تأیید شد [۱]. مدل‌ها و روش‌های مختلفی برای بررسی حالت‌های پراکندگی وجود دارد. برای مثال، جواب‌های حالت پراکندگی معادله کلاین–گوردون با پتانسیل‌های برداری و اسکالر نوع هالزن، توسط تالوکدار و همکارانش به دست آمده است[۲،۳]. در مرجع [٤]، حالت پراکندگی در GUP با استفاده از معادله دیفرانسیل میلن بررسی شده است. در مرجع [۵]، پراکندگی الکترون‌ها و پوزیترون‌ها از آرگون و کریپتون مورد مطالعه قرار گرفته است و در مرجع [٦]، پراکندگی الکترون‌ها و پوزیترون‌های کم‌انرژی توسط بریلیم اتمی بررسی شده است. در

مرجع [۷]، اثر پنهان رامساور–تاونزند در پراکندگی پوزیترون توسط اتم‌های گاز نادر ارائه شده است.

در این کار، هدف ما بررسی رفتار پراکندگی مزون‌های پیون در چارچوب GUP توسط هسته سرب می‌باشد. این کار با محاسبه ضرایب انتقال و بازتاب صورت گرفته است. برای این منظور، ابتدا معادله موج دیفرانسیلی نسبیتی را در چارچوب GUP در یک بعد استخراج می‌کنیم، سپس تابع موج پیون با در نظر گرفتن چاه پتانسیل مربعی تعیین می‌شود. در نهایت، ضرایب عبور و بازتاب محاسبه می‌شود و رفتار پراگندگی در GUP بررسی می‌گردد.

حل معادله دیراک در چارچوب GUP

برای بررسی پراکندگی مزون‌های پیون توسط هسته‌ها از اصل عدم قطعیت، از تعریف $\Delta X\,\Delta P \geq \hbar/2\times(1+\beta(\Delta P)^2)$ استفاده می‌کنیم[۸]. چنین رابطه‌ای مربوط به یک طول کمینه $(\Delta x)_{\min}=\hbar\sqrt{\beta}$ است که از مرتبه طول پلانک $\ell_p=(\hbar G/c^3)^{1/2}$ است. در فضا یک بعدی رابطه اصلاح شده جابه جایی X و P به صورت $[X,P]=i\hbar(1+\beta P^2)$ است. عملگرها به صورت زیر تعریف می‌شوند [۹]

$$\hat{P}=(1+\beta P^2/3)p,\qquad \hat{X}=x \tag{1}$$

معادله دیراک برای ذره ای با اسپین ½ عبارت است از :

$$[\vec{\alpha}.\vec{p}+\beta(m+U_0(x))]\Psi(x,t)=[\varepsilon-V_0(x)]\Psi(x,t) \tag{2}$$

که در آن ε و "m" انرژی و جرم فرمیون‌ها می‌باشند، $U_0(x)$ و $V_0(x)$ به ترتیب پتانسیل‌های اسکالر و برداری هستند. به α و β در معادله دیراک ماتریس‌های دیراک گفته می‌شود. تابع موج را به صورت $\Psi(x,t)=\psi(x)\exp(-i\varepsilon t)$ تعریف می‌کنیم که $\psi(x)$ شامل اسپینورهای دیراک $\psi(x)=\begin{pmatrix}\Omega_1(x),\ \Omega_2(x)\end{pmatrix}$ است. با جایگذاری این تعاریف در معادله دیراک دو معادله دیفرانسیل زیر به‌دست می‌آید:

$$\begin{aligned}&(\vec{\sigma}.\vec{p})\Omega_2(x)+(m+U_0+V_0)\Omega_1(x)=\varepsilon\Omega_1(x),\\&(\vec{\sigma}.\vec{p})\Omega_1(x)-(m+U_0-V_0)\Omega_2(x)=\varepsilon\Omega_2(x).\end{aligned} \tag{3}$$

با در نظر گرفتن $(\vec{\sigma}.\vec{p})(\vec{\sigma}.\vec{p})=p^2$، معادله‌ی شبه شرودینگر زیر به‌دست می‌آید:

$$p^2\Omega_1(x)+(2mU_0+U_0^2-V_0^2+2\varepsilon V_0)\Omega_1(x)=(\varepsilon^2-m^2)\Omega_1(x) \tag{4}$$

برای حالتی که برهمکنش‌های اسکالر و برداری برابر باشند، داریم:

$$p^2\Omega_1(x)+2U_0(m+\varepsilon)\Omega_1(x)=(\varepsilon^2-m^2)\Omega_1(x) \tag{5}$$

همان‌طور که قبلاً گفته شد، عملگر تکانه توسط معادله (۱) تعریف شده است. برای حل معادله (۵)، یک تابع موج کمکی به صورت زیر معرفی می‌کنیم:

$$\Omega_1(x)=(1-2\beta p^2/3)f(x) \tag{6}$$

با جایگزینی این تعریف در معادله (۵) و صرف نظر از عبارات β مرتبه بالاتر، داریم:

$$\begin{aligned}&p^2\left(1-\frac{2}{3}\beta\left(2U_0(\varepsilon+m)-\varepsilon^2+m^2\right)\right)f(x)\\&=\left(\varepsilon^2-m^2-2U_0(\varepsilon+m)\right)f(x)\end{aligned} \tag{7}$$

U_0 را به عنوان یک چاه پتانسیل مربعی در نظر می‌گیریم

$$\begin{aligned}&U_0=-V_0+V_1\frac{N-Z}{N+Z}\quad(-a<x<a),\\&U_0=0\quad(\text{elsewhere})\end{aligned} \tag{8}$$

که $V_0=50MeV$ و $V_1=33MeV$ ، "N" و "Z" به ترتیب اعداد نوترونی و اتمی هستند[۱۰]. برای تعیین جواب‌های این معادله دیفرانسیل در حضور چاه پتانسیل داده شده در معادله (7)، با ناحیه $x<-a$ شروع می‌کنیم که معادله دیراک برای آن به صورت زیر است:

$$f_1''(x)+\lambda^2 f_1(x)=0,\qquad \lambda^2=\frac{\varepsilon^2-m^2}{1+\frac{2}{3}\beta(\varepsilon^2-m^2)} \tag{9}$$

این ساده‌ترین معادله دیفرانسیل مکانیک کوانتومی که جواب آن بدین صورت است:

$$f_1(x)=\exp(i\lambda x)+\rho_1\exp(-i\lambda x) \tag{10}$$

برای داخل چاه پتانسیل، یعنی $-a<x<a$، معادله حاکم عبارت است از:

$$\begin{aligned}&f_2''(x)+\eta^2 f_2(x)=0,\\&\eta^2=\frac{\varepsilon^2-m^2+2(-V_0+V_1\frac{N-Z}{N+Z})(\varepsilon+m)}{1+\frac{2}{3}\beta[2(-V_0+V_1\frac{N-Z}{N+Z})(\varepsilon+m)+\varepsilon^2-m^2]}\end{aligned} \tag{11}$$

جواب آن به صورت زیر می‌باشد:

$$f_2(x)=\rho_2\exp(i\eta x)+\rho_3\exp(-i\eta x) \tag{12}$$

برای سمت راست چاه ($x > a$) داریم:

$$f_3''(x) + \lambda^2 f_3(x) = 0 \qquad (13)$$

تابع موج تعمیم‌یافته در این ناحیه برابر است با $\Omega_1(x) = (1 - 2\beta p^2/3) f_3(x)$ که

$$f_3(x) = \rho_4 \exp(i\lambda x) \qquad (14)$$

برای به‌دست آوردن عبارات صریح برای ضرایب ، از شرط پیوستگی توابع موج در مرزها، یعنی $f_1(-a) = f_2(-a)$ ، $f_2(a) = f_3(a)$ و مشتقات آنها، یعنی $f_1'(-a) = f_2'(-a)$ و $f_2'(a) = f_3'(a)$ استفاده می‌کنیم و ضرایب را به دست می‌آوریم که عبارتند از

$$\rho_1 = \frac{\left(\eta^2 - \lambda^2\right)\left(e^{2i\eta a} - e^{-2i\eta a}\right)e^{-2i\lambda a}}{\left(\eta+\lambda\right)^2 e^{-2i\eta a} - \left(\eta-\lambda\right)^2 e^{2i\eta a}},$$

$$\rho_4 = \frac{4\lambda\eta e^{-2i\lambda a}}{\left(\eta+\lambda\right)^2 e^{-2i\eta a} - \left(\eta-\lambda\right)^2 e^{2i\eta a}} \qquad (15)$$

برای تعیین ضرایب عبور (T) و انعکاس (R) توجه می‌کنیم ضرایب J_{inc}، J_{ref} و J_{tr} به صورت به‌دست آمده‌اند:

$$J_{inc} = \frac{2\lambda}{m+\varepsilon}\left(1 - \frac{2}{3}\beta\lambda^2\right)^2, \qquad (16)$$

$$J_{ref} = \frac{2\lambda}{m+\varepsilon}\left(1 - \frac{2}{3}\beta\lambda^2\right)^2 |\rho_1|^2, \qquad (17)$$

$$J_{tr} = \frac{2\lambda}{m+\varepsilon}\left(1 - \frac{2}{3}\beta\lambda^2\right)^2 |\rho_4|^2 . \qquad (18)$$

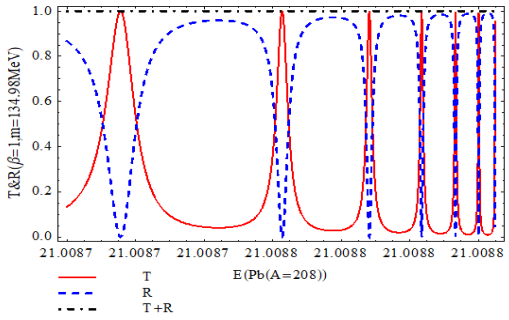
در نهایت، ضرایب T و R می‌شوند:

$$T = \left|\frac{j_{tr}}{j_{inc}}\right| = |\rho_4|^2 = \left|\frac{4\lambda\eta}{\left(\eta+\lambda\right)^2 e^{-2i\eta a} - \left(\eta-\lambda\right)^2 e^{2i\eta a}}\right|^2, \qquad (19)$$

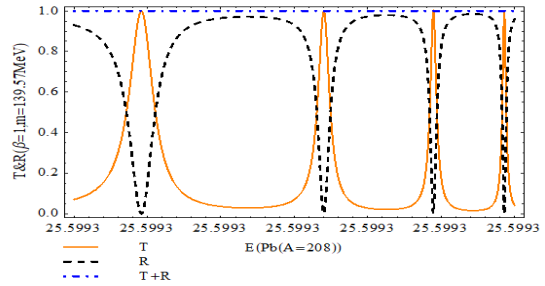
و

$$R = \left|\frac{j_{ref}}{j_{inc}}\right| = |\rho_1|^2 = \left|\frac{(\eta^2 - \lambda^2)(e^{2i\eta a} - e^{-2i\eta a})}{\left(\eta+\lambda\right)^2 e^{-2i\eta a} - \left(\eta-\lambda\right)^2 e^{2i\eta a}}\right|^2 \qquad (20)$$

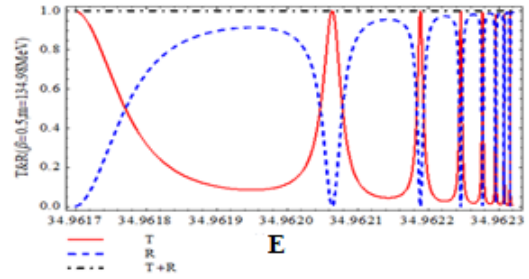
با توجه به ضرایب به‌دست آمده، در شکل های ۱ تا ٤ ضرایب بازتاب و عبور مزون‌های پیون با جرم‌های $\pi^0 = 134.98\text{MeV}$ و $\pi^{\pm} = 139.57\text{MeV}$ تحت تاثیر پتانسیل هسته Pb رسم شده است.



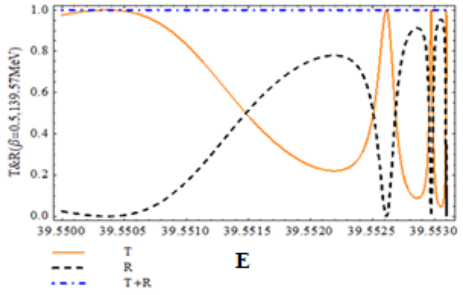
شکل ۱: رفتار ضریب بازتاب و عبور برحسب انرژی برای مزون π^0 توسط هسته Pb با ضریب $\beta = 1$



شکل ۲: رفتار ضریب بازتاب و عبور برحسب انرژی برای مزون $\pi^{\pm}$ توسط هسته Pb با ضریب $\beta = 1$



شکل ۳: رفتار ضریب بازتاب و عبور برحسب انرژی برای مزون π^0 توسط هسته Pb با ضریب $\beta = 0.5$



شکل ٤: رفتار ضریب بازتاب و عبور برحسب انرژی برای مزون $\pi^{\pm}$ توسط هسته Pb با ضریب $\beta = 0.5$

مشاهدات نشان می‌دهد که هر دو ضریب T و R با افزایش انرژی نوسانات قابل توجهی دارند که نشان دهنده وجود پدیده تشدید (رزونانس) در برهم‌کنش پیون با هسته سرب است. در برخی انرژی‌ها، ضریب عبور به بیشینه و ضریب بازتاب به کمینه می‌رسد که حاکی از احتمال عبور به جای بازتاب در آن انرژی‌هاست. در پراکندگی با انرژی پایین ضریب بازتاب به‌طور ناگهانی افت شدید پیدا می‌کند. ضریب عبور به‌طور غیرمنتظره بالا می‌رود. این پدیده در بازه‌های خاصی از انرژی رخ می‌دهد و به رزونانس در تونل‌زنی یا تداخل سازنده موج در چاه پتانسیل مربوط است. مجموع T+R در تمام گستره انرژی برابر با یک است.

نتیجه‌گیری

در این کار، پراکندگی پیون‌ها از هسته در چارچوب مکانیک کوانتومی اصلاح‌شده توسط اصل عدم قطعیت تعمیم‌یافته انجام داده‌ایم. با استخراج و حل معادله نسبیتی (دیراک) در حضور یک مقیاس طول حداقل، ضرایب عبور و انعکاس را برای پراکندگی پیون‌ها از هسته Pb محاسبه کرده‌ایم.

اگرچه مزون‌های پیون ذراتی با اسپین صفر هستند و معادله استاندارد نسبیتی برای آنها معادله کلاین–گوردون می‌باشد، اما در این کار به‌پیروی از رویکرد رایج در برخی مراجع نظیر [٤] و [٥]، از فرمول‌بندی معادله دیراک استفاده کرده‌ایم. این انتخاب صرفاً به‌عنوان یک روش محاسباتی مؤثر برای استخراج معادله‌ی موجی اصلاح‌شده در چارچوب GUP مد نظر است؛ به‌طوری که با نادیده گرفتن مؤلفه‌های اسپینی و اعمال شرط هم‌ارزی در حد غیرنسبیتی، معادله‌ی نهایی (معادله ۷) عملاً به معادله‌ای اسکالر (شبه‌کلاین–گوردون) تبدیل می‌شود که توصیف مناسبی برای پراکندگی پیون‌ها در حضور پتانسیل مرکزی ارائه می‌دهد. همچنین، نتایج نهایی برای ضرایب عبور و بازتاب با نتایج حاصل از معادله کلاین–گوردون در حد کلاسیک ($\beta\to 0$) سازگاری کامل نشان می‌دهد که صحت این رویکرد را تأیید می‌کند.

نتایج در شکل‌های ۱ تا ٤ نشان داده شده است. پارامتر β منجر به اصلاح قابل توجهی در الگوهای رزونانس می‌شود. به عنوان مثال در شکل‌های ۱ و ۳ به ترتیب رفتار ضرایب بازتاب و عبور مزون π^0 از هسته سرب را برای دو مقدار $\beta=1$ و $\beta=0.5$ نشان می‌دهند. تفاوت اصلی در شدت نوسانات و توزیع قله‌ها و دره‌های تشدید مشاهده می‌شود. برای $\beta=1$ (شکل ۱)، نوسانات T و R نسبتاً ملایم و هموار است و قله‌ها پهن‌تر هستند؛ در حالی که برای $\beta=0.5$ (شکل ۳)، نوسانات تیزتر، پرتکرارتر و با دامنه بیشتری دیده می‌شوند. این رفتار نشان می‌دهد که کاهش β (نزدیک‌تر شدن به حالت کلاسیک بدون GUP) باعث احیای ساختارهای ظریف تشدید می‌شود. در β کوچک‌تر (۰,۵)، سامانه حساسیت بیشتری به تغییرات انرژی نشان می‌دهد و نقاط بیشینه عبور و کمینه بازتاب بارزترند. در مقابل، β بزرگتر (۱) اثر هموارسازی قوی‌تری بر پتانسیل مؤثر دارد و نوسانات را میرا می‌کند. بنابراین، افزایش β نه تنها نوسانات را نرم می‌کند، بلکه احتمال عبور و بازتاب را در حد بالایی به سمت برابری و مقدار ثابت سوق می‌دهد. این مشاهدات مؤید آن است که پارامتر GUP به طور مستقیم بر شدت تشدیدها و توزیع مجانبی ضرایب کوانتومی اثر می‌گذارد و می‌توان از اختلاف این دو نمودار برای تخمین مقدار β در محیط‌های هسته‌ای استفاده کرد.

مرجع ها

[۱] L. N. Chang, D. Minic, N. Okamura and T. Takeuchi, *Phys. Rev. D* 65, 125028 (2002).
[۲] B. Talukdar, A. Yunus, M.R. Amin, Phys. Lett. A 141, 326 (1989).
[۳] W. M. Castilho, A.S. de Castro, *Ann. Phys*. (N.Y.) 340, 1 (2014).
[۴] A. Armat and S. M. Moosavi Nejady, *Modern Physics Letters A*, 33, No. 39 (2018) 1850231.
[۵] S. M. Moosavi Nejad1, and A. Armat, *Indian J Phys*, 96, pages 1433–1441, (2022).
[۶] David D Reid and J M Wadehra 2014 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 47 225211.
[۷] Felipe Arretche, et. al., *Brazilian Journal of Physics* 50(6):1-13(2020).
[۸] L. N. Chang, D. Minic, N. Okamura and T. Takeuchi, Phys. Rev. D 65, 125028 (2002).
[۹] S. Haouat, Phys. *Lett. B* 729, 33 (2014).
[۱۰] B. Talukdar, A. Yunus, M.R. Amin, *Phys. Lett*. A 141, 326 (1989).

تحلیل توزیع دز هوای شتاب‌دهنده رادوترون یزد با استفاده از ابزار Geant4

جلیل پور ، شاهین[۱] ؛ رضایی راینی‌نژاد ، محمدرضا*[۲] ؛ شیرمردی ، سیدپژمان[۳] ؛ ریاحی ، آرزو[۴] ؛ حافظی مقدم، رضا[۵]

[۱] دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی هسته‌ای، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران

[۲] عضو هیأت علمی، گروه مهندسی هسته‌ای، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران

[۳] عضو هیات علمی (استاد راهنمای دوم)، سازمان انرژی اتمی ایران (AEOI)، تهران، ایران

[۴] دانشجوی دکتری(مشاور اول) ، گروه مهندسی هسته‌ای، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران

[۵] عضو هیات علمی (مشاور دوم)، سازمان انرژی اتمی ایران (AEOI)، تهران، ایران

چکیده

دزیمتری دقیق برای بهره‌برداری ایمن و طراحی حفاظ شتاب‌دهنده‌های الکترون پرانرژی ضروری است. در این پژوهش، نرخ دز هوای تولیدشده توسط شتاب‌دهنده رادوترون یزد با استفاده از شبیه‌سازی مونت‌کارلو در Geant4 نسخه ۱۱.۲.۲ بررسی شد. یک چشمه الکترون تک‌انرژی ۱۰ مگاالکترون‌ولت با ۲×۱۰^{۹} ذره مدل‌سازی گردید و نتایج به واحد $kGy\cdot min^{-1}\cdot mA^{-1}$ تبدیل شدند.برای نزدیک‌تر شدن مدل به شرایط واقعی، چهار ضریب تصحیح با حاصل‌ضرب نهایی ٦٦/٦٪ اعمال شد. نرخ دز خام در فواصل ۱۰ و ۵۰ سانتی‌متری از خروجی هورن به‌ترتیب $kGy\cdot min^{-1}\cdot mA^{-1}$ ۰/۱۱ ۱۰/۴۵ ± و ۰/۱۰ ۸/۱۷ ± به‌دست آمد که پس از اعمال ضرایب تصحیح به $kGy\cdot min^{-1}\cdot mA^{-1}$ ۰/۰۰۸ ۰/۶۹۶ ± و ۰/۰۰۷ ۰/۵۴۴ ± کاهش یافت. نتایج، کاهش یکنواخت نرخ دز با افزایش فاصله را نشان دادو می‌تواند مبنایی برای ارزیابی اولیه حفاظ پرتوی باشد، هرچند اعتبارسنجی نهایی مستلزم اندازه‌گیری‌های تجربی است.

واژه های کلیدی: *شبیه‌سازی مونت‌کارلو، جینت۴، نرخ دز هوا، شتاب‌دهنده رادوترون، حفاظت در برابر پرتو*

Analysis of Air Dose Distribution for the Yazd Rhodotron Accelerator Using Geant4 Toolkit

Jalilpour, Shahin [1]; Rezaei Raieni Nezhad, Mohammad Reza [2]; Shirmardi, Seyed Pejman [3]; Riahi, Arezoo [4]; Hafezi Moghaddam, Reza [5]

[1] *M.Sc. student , Department of Nuclear Engineering, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran*

[2] *Faculty Member, Department of Nuclear Engineering, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran*

[3] *Faculty Member (Second Thesis Supervisor), Atomic Energy Organization of Iran (AEOI), Tehran, Iran*

[4] *Ph.D. Student (First Advisor), Department of Nuclear Engineering, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran*

[5] *Faculty Member (Second Advisor), Atomic Energy Organization of Iran (AEOI), Tehran, Iran*

Abstract

Accurate dosimetry is essential for the safe operation and shielding design of high-energy electron accelerators. In this study, the air dose rate produced by the Yazd Rhodotron accelerator was evaluated using Monte Carlo simulation with Geant4 version 11.2.2. A monoenergetic 10 MeV electron source with 2×10^9 simulated particles was modeled, and the results were converted to $kGy\cdot min^{-1}\cdot mA^{-1}$. To better represent actual operating conditions, four correction factors with a combined value of 6.66% were applied. The raw dose rates at distances of 10 cm and 50 cm from the horn exit were 10.45 ± 0.11 and 8.17 ± 0.10 $kGy\cdot min^{-1}\cdot mA^{-1}$, respectively, which decreased to 0.696 ± 0.008 and 0.544 ± 0.007 $kGy\cdot min^{-1}\cdot mA^{-1}$ after applying the correction factors. The results demonstrated a monotonic decrease in air dose rate with increasing distance and provide a basis for the preliminary assessment of radiation shielding. However, final validation of the calculated dose rates requires experimental measurements.

***Keywords**: Monte Carlo simulation, Geant4, air dose rate, Rhodotron accelerator, radiation protection*

PACS No. 28

مقدمه

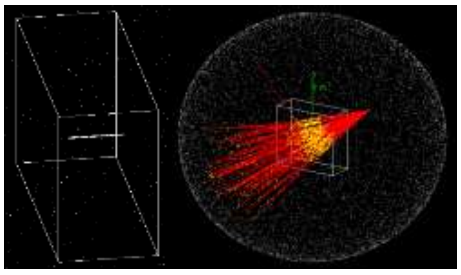
شتاب‌دهنده‌های الکترون پرانرژی، به‌ویژه سامانه‌های رادوترون، در کاربردهایی مانند استریلیزاسیون، اتصال عرضی پلیمرها و پرتودهی مواد غذایی کاربرد گسترده‌ای دارند. در تأسیسات رادوترون یزد با انرژی اسمی ۱۰ مگاالکترون‌ولت، تعیین دقیق نرخ دز برای ایمنی پرتوی و طراحی حفاظ ضروری است. با وجود مشخصات ارائه‌شده توسط سازنده، پیچیدگی هندسه و برهم‌کنش الکترون‌ها با محیط، استفاده از مدل‌سازی اختصاصی را ضروری می‌سازد.

شبیه‌سازی مونت‌کارلو یکی از معتبرترین روش‌ها برای محاسبه توزیع دز در هندسه‌های پیچیده است و کارایی آن در مطالعات مختلف نشان داده شده است [۱–۳]. با این حال، ساده‌سازی‌های مدل و شرایط واقعی بهره‌برداری می‌توانند موجب اختلاف بین نتایج شبیه‌سازی و عملکرد واقعی شوند؛ ازاین‌رو در این پژوهش، علاوه بر خروجی خام شبیه‌سازی، ضرایب تصحیح محافظه‌کارانه نیز اعمال شده‌اند [٤].

هدف این پژوهش تعیین توزیع نرخ دز هوای خروجی هورن شتاب‌دهنده رادوترون یزد با استفاده از Geant4 نسخه ۱۱.۲.۲ و ارائه مبنایی برای ارزیابی اولیه حفاظ پرتوی است [۵].

بخش مواد و روش‌ها

شبیه‌سازی‌ها با استفاده از Geant4 نسخه ۱۱.۲.۲ انجام شد. برای مدل‌سازی فرآیندهای فیزیکی از Physics List پایه FTFP_BERT استفاده گردید که فیزیک الکترومغناطیسی آن با G4EmStandardPhysics_option4 جایگزین شد. همچنین G4EmExtraPhysics و G4DecayPhysics به مدل افزوده شدند. مقدار Production Cut برابر ۰/۰۰۱ میلی‌متر در نظر گرفته شد.مدل G4EmStandardPhysics_option4 شامل مدل Urban برای پراکندگی چندگانه الکترون‌ها بوده و تولید الکترون‌های ثانویه (δ-ray) مطابق تنظیمات پیش‌فرض این بسته فیزیکی انجام شده است.چشمه به صورت یک پرتو الکترون تک‌انرژی ۱۰ مگاالکترون‌ولت با جهت اولیه الکترون‌ها با توزیع یکنواخت روی زاویه فضایی مخروط و نیم‌زاویه حداکثر ۱۱/۵ درجه تعریف شد. مقدار نیم‌زاویه بر اساس ویژگی‌های سامانه اسکن شتاب‌دهنده رادوترون یزد و مطابق مرجع [٦] انتخاب گردید. تا واگرایی فیزیکی هورن رادوترون را نشان دهد. جهت پرتو در راستای منفیz (به سمت آشکارساز) قرار داده شد. برای بررسی همگرایی آماری، شبیه‌سازی اولیه با $۱۰^۹$ ذره نیز انجام شد. مقایسه نتایج نشان داد اختلاف نرخ دز محاسبه‌شده در مقایسه با اجرای ۲×۱۰^۹ ذره ناچیز بوده و در محدوده عدم‌قطعیت آماری قرار دارد؛ بنابراین تعداد ۲×۱۰^۹ذره برای ادامه محاسبات انتخاب شد. هندسه شامل یک جهان مکعبی به ابعادنصف ۲۰۰×۲۰۰×۲۰۰ سانتی‌متر پر از هوا (چگالی ۰.۰۰۱۲۲۵ g/cm^3) است. مش دوزیمتری با ابعادنصف ۲۲.۵ × ۰.٤ × ۰.٦۲۵ سانتی‌متر تعریف شد که به ۳٦۰۰ سلول در راستای Z تقسیم شده است.ابعاد مش امتیازدهی بر اساس هندسه ناحیه پرتودهی و با الگوگیری از روش ارائه‌شده در مرجع [۲] انتخاب شد تا امکان استخراج تغییرات نرخ دز در امتداد محور پرتو با تفکیک مکانی مناسب فراهم شود. آزمون مستقل بودن پاسخ از مش (Mesh Independence Test) در این مطالعه انجام نشد؛ با این حال، با توجه به انطباق نتایج با روند تجربی مرجع [۳]، ابعاد انتخاب‌شده برای هدف این پژوهش مناسب ارزیابی شد. مرکز مش در نقطه (۷.۵, ۰, ۰) سانتی‌متر نسبت به مبدأ مختصات قرار گرفت.(شکل ۱)



شکل ۱ : سمت راست: هندسه کلی به همراه پراکندگی ذرات چشمه(به رنگ قرمز) در جعبه هوایی. و سمت چپ: جعبه هوایی به همراه مش اندازگیری در مرکز آن

تبدیل واحد و عوامل تصحیح

خروجی خام مش (Gy) ابتدا با ضریب ۱.۸۷۲٦×۱۰^۵ به $kGy \cdot min^{-1} \cdot mA^{-1}$ تبدیل شد(معادله۱).معادلات۲ و۳ محاسبات معادله ۱ هستن . سپس برای جبران ساده‌سازی‌های مدل، عملکرد واقعی سیستم‌های الکتریکی و مغناطیسی، برهمکنش با بدنه هورن و محدودیت‌های ذاتی کد، چهار ضریب تصحیح (شامل ضریب

داتی ۲۰٪ و سایر ضرایب با حاصل‌ضرب ۳۳.۳٪) در نظر گرفته شد که حاصل‌ضرب نهایی آن‌ها به ٦.٦٦٪ رسید(معادله٤). در این مطالعه، ضرایب تصحیح از اندازه‌گیری تجربی مستقیم در تأسیسات رادوترون یزد استخراج نشده‌اند، بلکه به‌منظور نزدیک‌تر کردن نتایج شبیه‌سازی به شرایط واقعی بهره‌برداری، به‌صورت محافظه‌کارانه اعمال شده‌اند. مبنای این تصحیح، داده‌های تجربی گزارش‌شده توسط Chilkulwar و همکاران [۳] برای یک شتاب‌دهنده صنعتی الکترونی ۱۰ مگاالکترون‌ولت است. در آن مطالعه، نرخ دز در در فواصل مختلف از پنجره خروجی با استفاده از فیلم‌های رادیوکرومیک B3 اندازه‌گیری شده و شکل ٦ مقاله، روند تغییرات نرخ دز برحسب فاصله را ارائه می‌کند. در پژوهش حاضر، مقدار نرخ دز محاسبه‌شده در فاصله ۱۰ سانتی‌متری خروجی هورن با این روند تجربی مقایسه و ضرایب تصحیح به‌گونه‌ای انتخاب شدند که مدل محاسباتی به رفتار تجربی نزدیک شود. بنابراین این ضرایب به‌عنوان ضرایب کالیبراسیون محافظه‌کارانه در نظر گرفته شده‌اند و اعتبار نهایی آن‌ها منوط به اندازه‌گیری تجربی در تأسیسات رادوترون یزد خواهد بود. محاسبه انحراف پس از اعمال ضریب تصحیح (معادله ٥)و برای محاسبه خطای نسبی(درصد عدم قطعیت) (معادله٦) درنظر گرفته شد.

$$D_{rate(^{KGy}/_{min,mA})} = D_{(Gy)} \times \frac{N_{real}}{N_{sim}} = D_{(Gy)} \times 1.8726 \times 10^5 \quad (1)$$

$$N_{real} = \frac{It}{e} = \frac{1\times10^{-3}(mA)\times1(s)}{1{,}602176634\times10^{-19}} \approx 6{,}242 \times 10^{15} \times 60(s) \approx 3{,}7452 \times 10^{17} \quad (2)$$

$$\frac{N_{real}}{N_{sim}} = \frac{3{,}7452\times10^{17}}{2\times10^{9}\times1000} \approx 1.8726 \times 10^5 \quad (3)$$

$$D_{rate(^{KGy}/_{min,mA})} \times 6.66\% = D_{(Gy)} \times 1.8726 \times 10^5 \times 20\% \times 33.3\% \quad (4)$$

$$\sigma_{final} = \sqrt{total(val^2) - \frac{D_{(Gy)}{}^2}{entry}} \times 1.8726 \times 10^5 \times 6.66\% \quad (5)$$

$$\text{Relative error } \% = \frac{\sigma_{final}}{D_{rate(^{KGy}/_{min,mA})} \times 6{,}66\%} \times 100 \quad (٦)$$

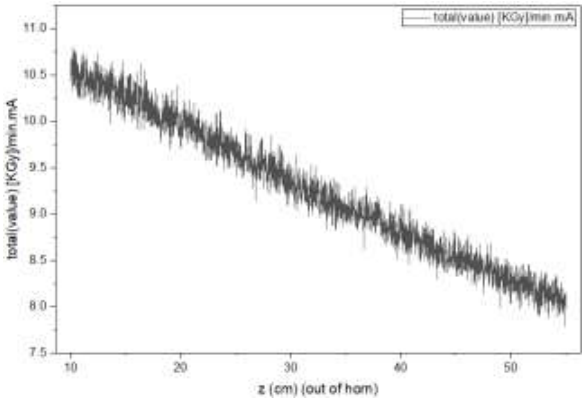
نتایج و بحث

نتایج نرخ دز هوا بر حسب $kGy\cdot min^{-1}\cdot mA^{-1}$ محاسبه شد. جدول زیر مقادیر خام و تصحیح‌شده را نشان می‌دهد (جدول۱).

جدول۱ : مقایسه نرخ دوز هوای اصلاح نشده و اصلاح شده($kGy\cdot min^{-1}\cdot mA^{-1}$) مقادیر برای خوانایی گرد شده‌اند به همراه درصد خطای نسبی

فاصله (سانتی متر)	آهنگ دوز اصلاح نشده(کیلوگری بر دقیقه .میلی آمپر)	آهنگ دوز اصلاح شده(کیلوگری بر دقیقه .میلی آمپر)	درصد خطای نسبی (٪)
۱۰	۱۰/٤٥ ±۰/۱۱	۰/٦٩٦ ±۰/۰۰۸	۱/۰۹٦
۲۰	۱۰/۰۹ ± ۰/۱۲	۰/٦٧٢ ±۰/۰۰۸	۱/۱٦۰
۳۰	۹/۳٤ ± ۰/۱۱	۰/٦۲۲ ±۰/۰۰۷	۱/۱٥٦
٤۰	۸/۹۳ ± ۰/۱۱	۰/٥۹٤ ±۰/۰۰۷	۱/۱۹۷
٥۰	۸/۱۷ ± ۰/۱۰	۰/٥٤٤ ±۰/۰۰۷	۱/۲۱٥

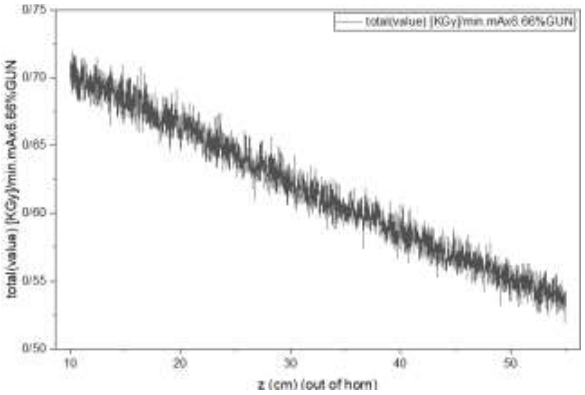
کاهش نرخ دز مشاهده‌شده تابع مجموع دو اثر اصلی، شامل واگرایی هندسی پرتو و تضعیف ناشی از برهم‌کنش الکترون‌ها با هوا است. با توجه به انرژی اولیه ۱۰ مگاالکترون‌ولت و فاصله‌های کوتاه بررسی‌شده، سهم غالب کاهش نرخ دز ناشی از پخش هندسی پرتو است و اثر تضعیف در هوا نسبتاً کوچک‌تر است. از آنجا که هدف این مطالعه تعیین نرخ دز کل در شرایط واقعی بهره‌برداری بود، تفکیک کمی این دو مؤلفه انجام نشد و می‌تواند موضوع پژوهش مستقلی باشد.نرخ دز هوای تصحیح‌نشده (خام) در فواصل مختلف از خروجی هورن در (شکل ۲) امده است.



شکل۲ : توزیع دوز هوای اصلاح نشده بر حسب کیلوگری بر دقیقه .میلی آمپر از خروجی هورن شتابدهنده رودترون یزد

خروجی خام شبیه‌سازی به دلیل ساده‌سازی ذاتی در هندسه و فیزیک، معمولاً شرایط واقعی تأسیسات صنعتی را به‌طور کامل

بازتاب نمی‌دهد. نتایج نهایی پس از اعمال ضرایب تصحیح ویژه تأسیسات در (شکل۳) امده است.



شکل۳ : توزیع دوز هوای اصلاح شده بر حسب کیلوگری بر دقیقه .میلی آمپر از خروجی هورن شتابدهنده رودترون یزد

در غیاب داده‌های تجربی مستقیم برای تأسیسات رادوترون یزد، نتایج این پژوهش از نظر روند کاهش نرخ دز با فاصله و مرتبه بزرگی مقادیر محاسبه‌شده با مطالعات انجام‌شده روی شتاب‌دهنده‌های صنعتی ۱۰ مگاالکترون‌ولت مقایسه شد. همچنین، نتایج با مدل حفاظ زیستی ارائه‌شده برای رادوترون یزد در مرجع [۵] از نظر رفتار کلی میدان تابش سازگاری دارد، هرچند مرجع [۵] مستقیماً به اندازه‌گیری نرخ دز هوای خروجی هورن نپرداخته است. عدم‌قطعیت‌های گزارش‌شده در این پژوهش صرفاً از نوع آماری بوده و مطابق رابطه (۵) از خروجی تالی Geant4 محاسبه شده‌اند. منابع عدم‌قطعیت سیستماتیک، از جمله تغییرات شرایط محیطی، تلرانس هندسی و ضرایب تصحیح، به‌دلیل نبود داده‌های تجربی قابل اندازه‌گیری، به‌صورت کمی برآورد نشدند. برای کاهش اثر این عوامل، ضرایب تصحیح محافظه‌کارانه در مدل اعمال گردید.

نتیجه گیری

با توجه به محدودیت‌های عملیاتی موجود، امکان انجام اندازه‌گیری تجربی هم‌زمان با این پژوهش فراهم نشد. برنامه اولیه پژوهش انجام اعتبارسنجی نتایج شبیه‌سازی با استفاده از فیلم‌های رادیوکرومیک در تأسیسات رادوترون یزد بود، اما اجرای آن تاکنون امکان‌پذیر نشده است. ازاین‌رو نتایج حاضر به‌عنوان یک ارزیابی اولیه مبتنی بر شبیه‌سازی ارائه شده و اعتبارسنجی تجربی آن به‌عنوان ادامه این پژوهش در نظر گرفته می‌شود. این پژوهش، نقشه دزیمتری هوای شتاب‌دهنده رادوترون یزد با استفاده از شبیه‌سازی مونت‌کارلو در Geant4 تهیه شد. نتایج نشان داد نرخ دز هوا با افزایش فاصله از خروجی هورن به‌صورت منظم کاهش می‌یابد و این روند با رفتار مورد انتظار پرتو در هوا سازگار است. همچنین، اعمال ضرایب تصحیح ویژه تأسیسات، نتایج این پژوهش می‌توانند به‌عنوان مبنایی برای برآورد اولیه نرخ دز و مطالعات طراحی حفاظ پرتوی مورد استفاده قرار گیرند. استفاده مستقیم از این نتایج در طراحی نهایی حفاظ مستلزم اعتبارسنجی تجربی مدل محاسباتی در تأسیسات رادوترون یزد است.

همچنین بررسی اثر عواملی مانند دما و رطوبت هوا می‌تواند به بهبود مدل و کاهش عدم قطعیت‌ها کمک کند.

مرجع‌ها

[۱] Kasmudin, K., Rezon, K., & Satmoko, A. (2022, November). Determination of Optimum Materials Thickness for Converting E-Beam Energy into Bremsstrahlung X-Rays on a 10 MeV High Energy Electron Accelerator Using MCNP. In Journal of Physics: Conference Series (Vol. 2377, No. 1, p. 012048). IOP Publishing.

[۲] Kang, C. M., Jung, S. T., Pyo, S. H., Seo, Y., Kang, W. G., Kim, J. K., ... & Choi, J. H. (2023). Characterization of the 2.5 MeV ELV electron accelerator electron source angular distribution using 3-D dose measurement and Monte Carlo simulations. Nuclear Engineering and Technology, 55(12), 4678-4684.

[۳] Chilkulwar, R. H., Sharma, S. D., Chaudhary, N., Acharya, S., Mayya, Y. S., Mittal, K. C., & Gantayet, L. M. (2012). Dosimetric evaluation of an indigenously developed 10áMeV industrial electron beam irradiator. Radiation measurements, 47(8), 628-633.

[۴] Korenev, S. (2001). Electron beam curing of composites. Vacuum, 62(2-3), 233-236.

[۵] Khalafi, H., Ghane, A., Arshi, S. S., & Tabakh, F. (2012). Biological shield design for a 10 MeV Rhodotron. Annals of Nuclear Energy, 50, 111-116.

[۶] Salehi, M., Davani, F. A., Ghasemi, B., Beheshty, S., Ghasemy, F., & Poursaleh, F. (2018). The study of the length and shape of beam in a high power electron accelerator. In The 29th Linear Accelerator Conference, LINAC 2018 (p. 585). JACow Publishing

ارزیابی مشخصات دز جذب‌شده در آب برای باریکه‌ی پروتونی ۱۷۰ مگاالکترون‌ولت: مقایسه تحلیلی و مونت‌کارلو

نعمت‌الله، حیدرلو [۱،*]؛ فاطمه، کاظم‌تبریزی [۱]، سیدمحمودرضا، آقامیری [۱]

[۱] گروه مهندسی پرتوپزشکی، دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران

*نویسنده مسئول: n_heidarloo@sbu.ac.ir

چکیده

ارزیابی دقیق توزیع دز جذب‌شده پروتون‌ها، نقش مهمی در دزیمتری و طراحی درمان در طراحی درمان پروتون‌درمانی دارد. در پژوهش حاضر، مشخصات عمق- دز ناشی از باریکه‌ی پروتونی ۱۷۰ مگاالکترون‌ولت در آب با استفاده از مدل تحلیلی بورتفلد و شبیه‌سازی مونت‌کارلو توسط کد مونت‌کارلو MCNP بررسی شد. فانتوم آب تحت تابش باریکه‌ی پروتونی موازی مدل‌سازی شد و توزیع عمق- دز استخراج و با نتایج تحلیلی مقایسه گردید. همچنین کمیت‌های میکرودزیمتری شامل دز جذب‌شده در عمق ۷۰ µm، انتقال خطی انرژی (LET) و دز معادل جهتی H'(0.07) با استفاده از تالی‌های مناسب در کد محاسبه گردید. نتایج نشان داد که مدل تحلیلی و شبیه‌سازی مونت‌کارلو تطابق مناسبی در بازتولید منحنی براگ پروتون دارند. مقدار دز جذب‌شده در عمق ۷۰ µm به ترتیب برابر با ۰/۹۵ و ۰/۹۲ nGy.cm² برای مدل تحلیلی و شبیه‌سازی مونت‌کارلو به‌دست آمد که اختلافی کمتر از ٤٪ را نشان می‌دهد. نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که ترکیب مدل تحلیلی و شبیه‌سازی مونت‌کارلو می‌تواند چارچوب مناسبی برای ارزیابی دزیمتری و میکرودزیمتری باریکه‌های پروتونی فراهم آورد.

واژه های کلیدی: *پروتون‌درمانی، MCNP، انتقال خطی انرژی، قله براگ، میکرودزیمتری.*

Evaluation of Absorbed Dose Characteristics in Water for 170 MeV Proton Beams: Analytical and Monte Carlo Comparison

Nematollah, Heidarloo[1,*]; Fatemeh, Kazemtabrizi[1]; Seyed Mahmoudreza Aghamiri[1]

[1] Department of Medical Radiation Engineering, University of Shahid Beheshti, Tehran, Iran.
** Corresponding author Email: n_heidarloo@sbu.ac.ir*

Abstract

Accurate evaluation of proton absorbed dose distributions plays a key role in dosimetry and treatment planning in proton therapy. In this study, the depth–dose characteristics of a 170 MeV proton beam in water were investigated using the analytical Bortfeld model and Monte Carlo simulation with MCNP MC code. A water phantom irradiated by a parallel proton beam was modeled, and the depth–dose distribution was extracted and compared with analytical results. In addition, microdosimetric quantities including absorbed dose at a depth of 70 µm, linear energy transfer (LET), and directional dose equivalent H'(0.07) were evaluated using MCNP tally techniques. The results showed good agreement between the analytical model and Monte Carlo simulation approaches in reproducing the proton Bragg peak. The absorbed dose at 70 µm depth was found to be 0.95 and 0.92 nGy·cm² for the analytical model and Monte Carlo simulation, respectively, showing a discrepancy of less than 4 %. The findings indicate that the combined use of analytical and Monte Carlo methods provides an effective framework for proton dosimetric and microdosimetric evaluation of proton beams.
***Keywords**: Proton therapy, MCNP, linear energy transfer, Bragg peak, Microdosimetry.*

PACS No. 87.53.Pb

مقدمه

پروتون‌درمانی در دهه‌های اخیر به‌عنوان یکی از پیشرفته‌ترین روش‌های پرتودرمانی موردتوجه گسترده درمانگران سرطان قرار گرفته است. ویژگی فیزیکی منحصربه‌فرد باریکه‌های پروتونی که در ایجاد قله براگ[1] نمایان می‌شود، امکان رساندن دز بالا به حجم تومور و کاهش قابل‌توجه دز دریافتی بافت‌های سالم و اندام‌های حساس مجاور را فراهم می‌سازد [۳-۱]. به لطف این مزیت، پروتون‌تراپی به‌ویژه در درمان تومورهای عمقی، ضایعات نزدیک به ساختارهای بحرانی و سرطان‌های کودکان کاربرد روزافزونی یافته است [٤].

دقت در محاسبه و پیش‌بینی توزیع دز جذب‌شده، از مهم‌ترین الزامات طراحی درمان و دزیمتری باریکه‌های پروتونی به شمار می‌رود. در این میان، تعیین دقیق موقعیت قله براگ، برد[2] پروتون و ناحیه افت دز پس از قله، نقشی اساسی در تضمین تطابق دز درمانی با حجم هدف دارد [۵]. به همین دلیل، مدل‌های تحلیلی[3] و نیمه‌تجربی[4] متعددی برای توصیف توزیع عمقی دز پروتون‌ها در محیط‌های معادل بافت و آب ارائه شده‌اند [۳, ٦]. در این میان، مدل نیمه‌تحلیلی بورتفلد [۷] به دلیل دقت مناسب، سادگی محاسباتی و توانایی بازتولید منحنی براگ، کاربرد گسترده‌ای در مطالعات دزیمتری پروتون یافته است.

با وجود مزایای مدل‌های تحلیلی، ضروری است که این مدل‌ها در برابر روش‌های دقیق‌تر انتقال اعتبارسنجی شوند [۸]. روش مونت‌کارلو به‌عنوان دقیق‌ترین ابزار شبیه‌سازی برهم‌کنش تابش با ماده شناخته می‌شود و توانایی مدل‌سازی فرآیندهای تصادفی انتقال و اتلاف انرژی ذرات باردار و تابش‌های ثانویه را با استفاده از داده‌های فیزیکی پایه فراهم می‌سازد [۹]. در میان کدهای مونت‌کارلو موجود، کد مونت‌کارلوی MCNPX2.7 [۱۰] به دلیل توانایی در مدل‌سازی همزمان انتقال نوترون، فوتون و ذرات باردار، یکی از پرکاربردترین کدها در حوزه دزیمتری و حفاظت پرتویی به شمار می‌رود [۱۱, ۱۲]. این کد افزون بر محاسبه دز جذب‌شده، امکان ارزیابی کمیت‌های دزیمتریک همچون انتقال خطی انرژی[5] (LET) و دز معادل جهتی[6] را نیز از طریق تالی‌های اختصاصی فراهم می‌کند [۱۳]. این کمیت‌ها از مهم‌ترین شاخص‌های مرتبط با ارزیابی پاسخ زیستی و مشخصه‌سازی باریکه‌های پروتونی در مطالعات میکرودزیمتری[7] محسوب می‌شوند [۱٤, ۱۵]. با کاهش سرعت پروتون‌ها در نزدیکی قله براگ، توان توقف[8] و مقدار LET افزایش می‌یابد و درنتیجه احتمال بروز آسیب زیستی مؤثرتر در بافت بیشتر می‌شود [۱۵]. ازاین‌رو، تحلیل همزمان توزیع دز و پارامترهای مرتبط با LET می‌تواند درک جامع‌تری از رفتار فیزیکی و زیستی باریکه‌های پروتونی در محیط‌های آبی فراهم سازد.

با توجه به اهمیت دقت دزیمتری در پرتودرمانی پروتونی و نقش پارامترهای میکرودزیمتری در ارزیابی اثرات زیستی باریکه‌های پروتونی، توسعه و اعتبارسنجی روش‌های محاسباتی دقیق امری ضروری است. در این راستا، استفاده همزمان از مدل‌های تحلیلی و روش‌های مونت‌کارلو می‌تواند درک جامع‌تری از رفتار دزیمتری و میکرودزیمتری پروتون‌ها در محیط‌های معادل بافت فراهم سازد. هدف پژوهش حاضر، ارزیابی مشخصات دز جذب‌شده و برخی کمیت‌های میکرودزیمتری باریکه پروتونی با انرژی ۱۷۰ مگاالکترون‌ولت در آب و بررسی میزان تطابق نتایج حاصل از مدل تحلیلی و شبیه‌سازی مونت‌کارلو است.

مواد و روش‌ها

مدل تحلیلی

به‌منظور محاسبه تحلیلی توزیع عمق-دز جذب‌شده ناشی از پروتون‌های ۱۷۰ MeV در آب، از مدل نیمه‌تجربی بورتفلد [۷] استفاده شد. این مدل با درنظرگرفتن کاهش انرژی، تفرق برد[9] و برهم‌کنش‌های هسته‌ای، امکان بازسازی منحنی براگ را فراهم

1 Bragg peak
2 Range
3 Analytical models
4 Semi-emperical
5 Linear Energy Transfer
6 Directional dose equivalent
7 Microdosimetry
8 Stopping power
9 Range Straggling

می‌کند. برد میانگین[1] پروتون‌ها با رابطه $R = \alpha E^{p}$ محاسبه شد و توزیع عمقی دز به‌صورت زیر بیان گردید:

$$D(z) = \frac{1}{\rho P \alpha^{1/p} (R - z)^{1-1/p}} \qquad (1)$$

شبیه‌سازی مونت‌کارلو

به‌منظور اعتبارسنجی نتایج تحلیلی، شبیه‌سازی مونت‌کارلو با استفاده از کد MCNPX2.7 انجام شد. فانتوم آب با ابعاد ۳۰ cm^3 × ۳۰ × ۳۰ مدل‌سازی شد و باریکه پروتونی موازی با انرژی MeV ۱۷۰ در امتداد محور z به آن تابانده شد. فانتوم در راستای عمق به ۲۰۰ سلول تا عمق ۲۵ cm تقسیم شد تا پروفایل دز با تفکیک مناسب در ناحیه قله براگ استخراج گردد. در شبیه‌سازی، مد انتقال ذرات باردار، نوترون و پروتون فعال شد و تعداد 10^8 تاریخچه ذره برای کاهش خطای آماری روش مونت‌کارلو مورداستفاده قرار گرفت. محاسبه توزیع دز با استفاده از مش تالی[2] انجام شد و سهم ذرات ثانویه شامل پروتون‌ها، نوترون‌ها، ذرات آلفا و یون‌های سنگین به‌صورت جداگانه ارزیابی گردید.

همچنین برای محاسبه دز جذب‌شده در عمق ۷۰ µm، از تالی *F8 استفاده شد. در این روش، انرژی نهشت‌شده در یک حجم حساس استوانه‌ای در عمق متوسط ۷۰ µm محاسبه و با تقسیم بر جرم به دز جذب‌شده تبدیل شد. به‌منظور ارزیابی کمیت‌های میکرودزیمتری، طیف انتقال خطی انرژی با استفاده از قابلیت FT LET استخراج شد. انتقال خطی انرژی از طیف حاصل محاسبه و سپس دز معادل جهتی $H'(0,0.07)$ با استفاده از ضرایب کیفیت[3] تعیین شد. در نهایت، نتایج مدل تحلیلی و شبیه‌سازی مونت‌کارلو با یکدیگر مقایسه گردید.

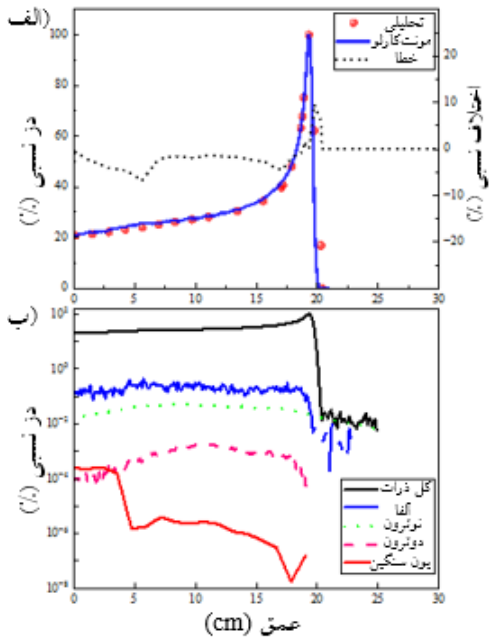
نتایج و بحث

شکل ۱، توزیع عمقی دز جذب‌شده ناشی از باریکه پروتونی با انرژی MeV ۱۷۰ در فانتوم آب را نشان می‌دهد. بررسی نتایج حاصل از مدل تحلیلی بورتفلد و شبیه‌سازی مونت‌کارلو، همراه با محاسبه خطای نسبی بین دو روش، تطابق مناسبی را در کل ناحیه انتقال پروتون نشان می‌دهد. در هر دو روش، افزایش تدریجی دز تا ناحیه قله براگ و سپس افت شدید آن پس از برد پروتون مشاهده شد که با رفتار فیزیکی مورد انتظار برای باریکه‌های پروتونی مطابقت دارد. مقادیر اختلاف نسبی نمایش داده شده در محور ثانویه شکل ۱ الف) نشان می‌دهد که اختلاف بین دو روش در طول مسیر پروتون محدود بوده و بیشینه آن به ۹/۵۶٪ می‌رسد. این اختلاف عمدتاً در نواحی نزدیک به قله براگ مشاهده می‌شود که حساسیت بیشتری به تفرق برد، برهم‌کنش‌های هسته‌ای و تقریب‌های به‌کاررفته در مدل تحلیلی دارند. شکل ۱ ب) سهم ذرات باردار مختلف را در دز جذب‌شده کل نشان می‌دهد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، بیشترین سهم دز مربوط به پروتون‌ها است، در حالی که سهم دوتریون‌ها، هلیون‌ها و ذرات آلفا در مقایسه با پروتون‌ها بسیار کمتر بوده و عمدتاً در ناحیه انتهایی مسیر پروتون ظاهر می‌شوند. این رفتار ناشی از تولید ذرات ثانویه در اثر برهم‌کنش‌های هسته‌ای پروتون با محیط آب است.

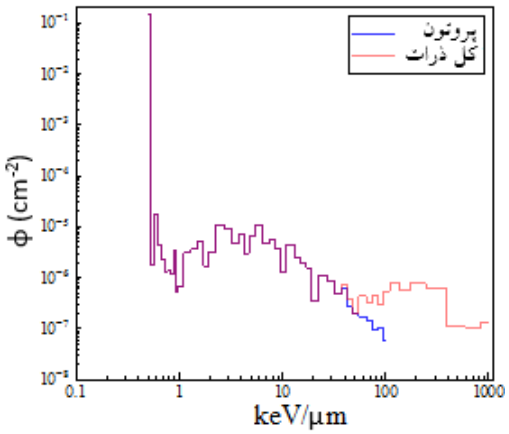
نتایج مربوط به دز جذب‌شده در عمق ۷۰ µm نشان داد که مقدار محاسبه‌شده با مدل تحلیلی برابر با ۰/۹۵ $nGy.cm^2$ و مقدار حاصل از شبیه‌سازی MCNP برابر با ۰/۹۲ $nGy.cm^2$ است. اختلاف کمتر از ٤٪ بین دو روش، بیانگر دقت مناسب مدل تحلیلی در تخمین دز جذب‌شده در مقیاس‌های میکرودزیمتری است.

شکل ۲، طیف LET محاسبه‌شده با کد مونت‌کارلوی MCNPX2.7 نشان می‌دهد. بر اساس این طیف، مقدار میانگین LET در عمق ۷۰ µm، ۰/۳۵ $keV.\mu m^{-1}$ به‌دست آمد. ازآنجاکه این کمتر از ۱۰ $keV.\mu m^{-1}$ است، ضریب کیفیت میانگین برابر با ۱ در نظر گرفته شد [۱٦]؛ بنابراین مقدار دز معادل جهتی برابر با ۹/۲ × 10^{-10} $Sv.cm^2$ محاسبه شد.

[1] Mean range
[2] Mesh Tally
[3] Quality factor



شکل ۱: الف) مقایسه توزیع عمق–دز کل حاصل از مدل تحلیلی بورتفلد و شبیه‌سازی مونت‌کارلو برای باریکه پروتونی. ب) توزیع عمقی دز جذب‌شده کل و سهم ذرات ثانویه شامل ذرات آلفا، دوترون‌ها، یون‌های سنگین و نوترون‌ها در فانتوم آب، محاسبه‌شده با استفاده از شبیه‌سازی مونت‌کارلو.



شکل ۲: ذرات باردار برحسب انتقال خطی انرژی (LET) در میکرواستوانه آب، محاسبه‌شده با استفاده از مونت‌کارلو.

نتیجه‌گیری

مدل تحلیلی بورتفلد تطابق خوبی با نتایج حاصل از شبیه‌سازی مونت‌کارلو برای ارزیابی توزیع عمقی دز باریکه پروتونی MeV ۱۷۰ در آب نشان داد. اختلاف اندک مشاهده‌شده در محاسبات میکرودزیمتری، قابلیت رویکرد تحلیلی را برای تخمین دز جذبی با دقت قابل‌قبول تأیید کرد. نتایج نشان داد که استفاده ترکیبی از رویکردهای تحلیلی و مونت‌کارلو می‌تواند چارچوبی کارآمد برای ارزیابی دزیمتری و میکرودزیمتری باریکه پروتونی فراهم سازد. این رویکرد می‌تواند در بهبود دقت محاسبات دز و ارزیابی ویژگی‌های فیزیکی باریکه‌های پروتونی در طراحی درمان و کاربردهای بالینی پرتودرمانی پروتونی مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع‌ها

[۱] Durante M, Loeffler JS. Charged particles in radiation oncology. Nature reviews Clinical oncology. 2010;7(1):37-43.
[۲] Paganetti H. Proton Therapy Physics. 2nd ed. Boca Raton: CRC Press; 2025.
[۳] Wilson RR. Radiological use of fast protons. Radiology. 1946;47(5):487-91.
[۴] Suit H, DeLaney T, Goldberg S, Paganetti H, Clasie B, Gerweck L, et al. Proton vs carbon ion beams in the definitive radiation treatment of cancer patients. Radiotherapy and Oncology. 2010;95(1):3-22.
[۵] Jones D, Suit H, Kanematsu N, Tatsuzaki H, Tsujii H. ICRU Report No. 78, Prescribing, recording, and reporting proton-beam therapy. Prescribing, Recording, and Reporting Proton-Beam Therapy (ICRU report; 78)(Journal of the ICRU; vol 7 no 2). 2007;7(2):1-210.
[۶] Bortfeld T, Schlegel W. An analytical approximation of depth-dose distributions for therapeutic proton beams. Physics in Medicine & Biology. 1996;41(8):1331-9.
[۷] Bortfeld T. An analytical approximation of the Bragg curve for therapeutic proton beams. Medical physics. 1.۲۰۲۴-۳۳:(۱۲)۲۴;۹۹۷
[۸] Andreo P. Monte Carlo techniques in medical radiation physics. Physics in Medicine & Biology. 1991;36(7):861-920.
[۹] Rogers D. Fifty years of Monte Carlo simulations for medical physics. Physics in Medicine & Biology. 2006;51(13):R287-R301.
[۱۰] Pelowitz D. MCNPXTM User's Manual, Version 2.7. 0. Los Alamos National Laboratory Tech. Rep. LA-CP-11-00438. Los Alamos, NM, USA; 2011.
[۱۱] Pelowitz DB, Durkee JW, Elson JS, Fensin ML, Hendricks JS, James MR, et al. Mcnpx 2.7 e extensions .Los Alamos National Laboratory (LANL); 2011.
[۱۲] Werner CJ, Armstrong J, Brown FB. MCNP users manual-code version 6.2. Los Alamos national laboratory. 2017;108.
[۱۳] Pelowitz DB. MCNPX User's Guide, Version 2.6.0, Report LA-CP-08-00503. Los Alamos, NM: Los Alamos National Laboratory; 2008.
[۱۴] Kase Y, Kanai T, Matsumoto Y, Furusawa Y, Okamoto H, Asaba T, et al. Microdosimetric measurements and estimation of human cell survival for heavy-ion beams. Radiation research. 2006;166(4):629-38.
[۱۵] Paganetti H. Relative biological effectiveness (RBE) values for proton beam therapy. Variations as a function of biological endpoint, dose, and linear energy transfer. Physics in Medicine & Biology. 2014;59(22):R419-R72.
[۱۶] Smith H. International Commission on Radiological Protection. 1990 recommendations of the International Commission on Radiological Protection. ICRP Publication.60.

شبیه‌سازی افزایش دز تومور چشمی حاصل از نانوذرات مختلف در پروتون‌درمانی با قله براگ گسترش‌شده ۶۲٫۸ مگاالکترون‌ولت

حبیبی، فاطمه[۱*]؛ پرنگ، زهره[۱*]؛ حسینی مطلق، نسرین[۱]؛ کشاورز، علیرضا[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی، مرکز شیراز ، شیراز، ایران

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی شیراز، شیراز، ایران

چکیده

یکی از روش‌های کاربردی در پرتودرمانی برای درمان تومورهای چشمی، پروتون‌درمانی است. نشان داده شده است که تزریق نانوذرات در تومور می‌تواند بهره درمان پرتودرمانی را بهبود بخشد. در این مطالعه، با استفاده از کد Geant4 و Geant4-DNA، میزان افزایش دز در دو مقیاس ماکروسکوپی و میکروسکوپی، ناشی از پروتون‌درمانی با قله براگ گسترش‌یافته از پروتون‌های ۶۲٫۸ MeV با حضور نانوذرات مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. نانوذرات Au، ^{11}B، Pt، Gd و Co با غلظت ۳ درصد وزنی و با دو قطر مختلف ۵۰ و ۱۰۰ نانومتر تعریف شد. بالاترین نسبت افزایش دز برای نانوذرات Co تا ۲٫۵٪ در مقیاس ماکروسکوپی و تا ۳۶۰٪ در مقیاس میکروسکوپی مشاهده شد، در حالی که کمترین افزایش دز برای نانوذرات Gd تا ۱۴۵٪ در قطر ۱۰۰ نانومتر و برای ^{11}B تا ۱۹۰٪ در قطر ۵۰ نانومتر ایجاد شد. به‌عنوان نتیجه، از دید شبیه‌سازی، نانوذرات Co می‌تواند به عنوان یک گزینه مطلوب برای درمان تومورهای چشمی در پروتون‌درمانی معرفی گردد.

واژه های کلیدی: *پروتون‌درمانی، نانوذرات، تومور چشمی، شبیه‌سازی مونت‌کارلو*

Simulation of Eye Tumor Dose Enhancement due to Different Nanoparticles Under Proton Therapy with Spread-out Bragg Peak of 62.8 MeV

Fatemeh Habibi[1*], Zohreh Parang[1*], Nasrin Hoseini-Motlagh[1], Alireza Keshavarz[2]

[1] *Department of Physics, Shi. C., Islamic Azad University, Shiraz, Iran*
[2] *Department of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz, Iran*

Abstract

One of the practical methods in the field of radiation therapy for the treatment of eye tumors is proton therapy. It has been shown that the injection of nanoparticles (NPs) in the tumor can improve the therapeutic gain. In this study, the dose enhancement in both macroscopic and microscopic scales, caused by proton therapy with a spread-out Bragg peak of 62.8 MeV protons with the presence of different NPs, has been investigated using the Geant4 and Geant4-DNA code. Au, ^{11}B, Pt, Gd and Co NPs were defined with a concentration of 3% by weight and with two different diameters of 50 and 100 nm. The highest ratio of dose enhancement was observed for Co NPs up to 2.5% on a macroscopic scale and up to 360% on a microscopic scale, while the lowest dose enhancement was observed for Gd NPs up to 145% in 100 nm diameter and for ^{11}B up to 190% in 50 nm diameter. As a result, from the simulation standpoint, Co NPs can be introduced as a favorable option for the treatment of eye tumors in proton therapy.

***Keywords**: Protontherapy, Nanoparticles, Eye tumor, Monte Carlo Simulation.*
PACS No. 20, 28

مقدمه

پرتودرمانی با استفاده از تابش یونساز یکی از راه‌های درمان تومورهای چشمی یووال (Uveal) است که به شیوه‌های مختلفی از جمله پروتون‌درمانی انجام می‌گردد [۱]. پروتون در ابتدای مسیر خود، انرژی اندکی در بافت بدن بر جای گذاشته و در انتهای برد خود که می‌رسد بالاترین انرژی را بر جای می‌گذارد. این به قله براگ معروف است که در آن مکان اوج سپارش انرژی رخ می‌دهد [۲]. وقتی قله براگ بر روی تومور قرار بگیرد، حداکثر دز به تومور تحویل داده می‌شود و اندام‌ها و بافت‌های حساس نزدیک تومور در برابر تابش حفظ می‌شوند. نشان داده شده است که از نانوذرات طلا می‌توان برای افزایش دز تومور و در نتیجه افزایش بهره درمان در پرتودرمانی استفاده کرد [۳]. در زمینه افزایش دز حاصل از

نانوذرات در پروتون‌درمانی، مطالعاتی در مقیاس ماکروسکوپی (تومور) و میکروسکوپی (سلولی) برای محاسبه نسبت افزایش دز[1] (DER) انجام شده است [٤–١٠]. اختلاف زیادی در نتایج وجود دارد که به دلیل تفاوت در تعریف و توزیع نانوذرات می‌باشد. رویکردهای متفاوتی از محققان ارائه شده است که منجر به تفاوت‌های فاحش در نتایج DER گردیده است. نحوه تعریف باریکه پروتون نیز حائز اهمیت است که در بسیاری از مقالات، پروتون تک‌انرژی تعریف شده است، که با وضعیت بالینی که در آن از قله براگ گسترش‌یافته[2](SOBP) برای پوشش کل تومور استفاده می‌شود، متفاوت است. در برخی مطالعات نیز پروتون تنها در محدوده نانوذرات ترابرد شده است که با شرایط واقعی در تضاد است [۹، ۱۰]. در مطالعه حاضر، یک شبیه‌سازی مونت‌کارلوی چندمقیاسی برای بررسی افزایش دز حاصل از نانوذرات Au، ^{11}B، Pt، Gd و Co در پروتون‌درمانی تومورهای یووال انجام شد.

مواد و روش‌ها

شبیه‌سازی در دو مقیاس ماکروسکوپی (تومور) و میکروسکوپی (یک نانوذره) با استفاده از ابزار شبیه‌ساز Geant4 [۱۱] و افزونه Geant4-DNA [۱۲] انجام شده است. در مقیاس ماکروسکوپی، فانتوم سر اشنایدر [۱۳] در Geant4 تعریف شد که حاوی پوست، جمجمه و مغز است. پوست، جمجمه و مغز به ترتیب به صورت یک بیضی‌گون با ابعاد cm^3 ۷×۱۰×۸/۵، cm^3 ٦/۸×۹/۸×۸/۳ و cm^3 ٦×۹×٦/۵ تعریف شدند. فانتوم چشم نیز به صورت یک کره از بافت نرم با شعاع ۱۲ cm به همراه قرنیه، لنز و عصب نوری تعریف شد. تومور به صورت یک مکعب با ابعاد ۱ cm در زجاجیه چشم تعریف شد. تومور توسط نانوذرات کروی با غلظت نوعی ۳۰ mg/g پر شد. غلظت‌های بالینی از ۵ mg/g تا ۳۰ mg/g در مطالعات گذشته گزارش شده است که رایج‌ترین آن‌ها ۷ mg/g و ۱۸ mg/g می‌باشد [۳–۷]. با این حال، از آنجا که احتمال برهمکنش پروتون با نانوذرات بسیار پایین است، از بیشینه غلظت ممکن در این مطالعه استفاده شده است تا اثر تفاوت پارامترهای مورد بررسی (جنس و قطر نانوذره) بهتر بررسی شود. دو قطر ۵۰ و ۱۰۰ نانومتر و مواد Au، ^{11}B، Pt، Gd و Co برای نانوذرات انتخاب گردید تا اثر اندازه و جنس نانوذرات نیز بررسی گردد. قرنیه به صورت یک بیضی‌گون ناقص با ارتفاع ۱/۷ cm و ضخامت ۰/۲۵ cm در سطح بیرونی زلالیه طراحی شد که توسط صلبیه محدود شده است. لنز یک بیضی‌گون با ابعاد cm^3 ۱/٤۵×۰/۵×۰/٤۵ و عصب نوری به صورت یک استوانه با ارتفاع ۱/۱ cm و قطر ۰/۲۵ cm تعریف شد. تکثیر نانوذرات به این صورت بود که هر نانوذره یگانه درون یک وکسل قرار گرفت. ضلع هر وکسل حامل نانوذره، متغیر است و به میزان غلظت وابسته است. سپس، این وکسل مکعبی با چینش سه‌بعدی در کنار هم، تمام حجم تومور را پر می‌کند. اگر غلظت نانوذره به صورت درصد وزنی برای یک وکسل حامل یک نانوذره تنظیم شود، همان غلظت برای کل تومور نیز اعمال می‌شود.

برای تعریف منبع تابش در مقیاس تومور، مثال Hadrontherapy [١٤] از مثال‌های پیشرفته Geant4 استفاده شد. این مثال بر اساس سیستم شتابدهنده پروتون، یک SOBP را برای انرژی اولیه MeV ٦۲/۸ ارائه کرده است. خروجی این شتابدهنده (یعنی SOBP) در یک فایل متنی به عنوان یک فضای فاز ذخیره گردید. سپس، این فضای فاز به عنوان منبع تابش به منظور دزیمتری تومور چشمی با و بدون نانوذرات استفاده شد. برای پرتودهی تومور، مکان SOBP خروجی از شتابدهنده، به شکلی تنظیم شد که کاملا بر تومور قرار گیرد. روش ساخت SOBP به این صورت است که تمام ناحیه تومور توسط قله‌های براگ مجزا پوشش داده می‌شود. به این صورت که یک بار، یک قله براگ یگانه در ابتدای تومور و یک بار در انتهای تومور ایجاد می‌شود. آنگاه، با تغییر برد پروتون اولیه، قله‌های یگانه متعددی در نواحی مختلف تومور تشکیل می‌شوند [۱۵]. برای تعریف چشمه در مقیاس میکروسکوپی، یک فضای فاز دیگر ایجاد شد. یک آشکارساز نازک در وسط ناحیه SOBP (در عمق mm ٢٦/٤) تعریف شد و انرژی جنبشی پروتون‌ها و ذرات ثانویه در یک فایل متنی ذخیره شد. این فضای فاز جدید به عنوان چشمه در مرحله بعد یعنی پرتودهی یک نانوذره یگانه به کار رفت. از فیزیک QGSP_BIC_HP در مقیاس ماکروسکوپی استفاده شد که شامل مدل الکترومغناطیس استاندارد، فیزیک هادرونی

[1] Dose Enhancement Ratio
[2] Spread-Out Bragg Peak

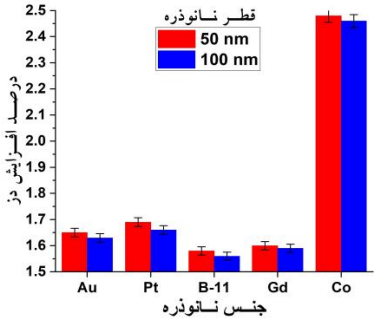
(برهمکنش‌های کشسان و ناکشسان هسته‌ای)، فیزیک واپاشی و فیزیک یون‌ها و نوترون‌ها است. آستانه انرژی تولید ذرات ثانویه ۱۰ nm انتخاب شد که تمام ذرات ثانویه‌ای که دارای برد کمتر از آن ترابرد نمی‌شوند. در مقیاس میکروسکوپی، از مدل فیزیکی G4EmDNAPhysics_option4 در فضای آب اطراف نانوذره و از فیزیک QGSP_BIC_HP در داخل نانوذره بهره گرفتیم. DER به صورت مقدار دز جذب‌شده در تومور با حضور نانوذرات تقسیم بر همان دز بدون حضور نانوذرات تعریف شد. با ترابرد 10^8 و 10^6 ذره اولیه (به ترتیب در مقیاس ماکروسکوپی و میکروسکوپی)، خطای آماری کمتر از ۱٪ در این دو مقیاس حاصل شد. برای محاسبه خطای آماری از روش ریشه میانگین مربعات استفاده گردید که طبق رابطه ۱ بیان می‌شود:

$$\Delta D = \sqrt{\frac{1}{N-1}\left(\frac{\sum_{i=1}^{N} D_i^2}{N} - \left(\frac{\sum_{i=1}^{N} D_i}{N}\right)^2\right)} \qquad (۱)$$

که در آن ΔD خطای دز، N تعداد ذرات اولیه و D_i دز نهشت‌شده حاصل از ذره iام می‌باشد. هر اجرای شبیه‌سازی، سه بار تکرار شد و مقدار میانگین به عنوان نتیجه نهایی ثبت شد.

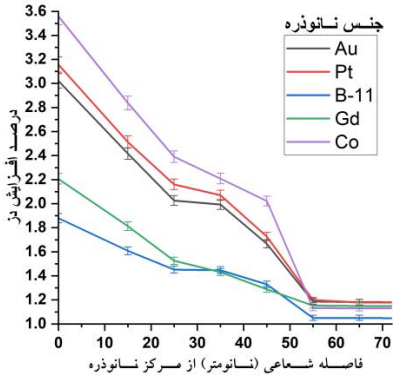
نتایج و بحث

شکل ۱ نمودار DER را برای نانوذرات مختلف با قطر ۵۰ nm و ۱۰۰ nm را (با غلظت ۳۰ mg/g) نشان می‌دهد. در این شکل، عدم قطعیت آماری با میله‌های خطا که تا بیشینه ۱٪ داده‌ها تعیین شده‌اند، مشخص گردید. طبق شکل ۱، افزایش دز ناشی از نانوذرات Co و سپس Pt، بیشتر از بقیه نانوذرات به دست آمد. برخلاف فوتون که عدد اتمی و انرژی آن به دلیل سطح‌مقطع بالای جذب فوتوالکتریک ($\sim Z^4/E^5$) عامل اصلی موثر بر DER است، در مورد پروتون برهمکنش‌های هسته‌ای اهمیت بیشتری پیدا می‌کنند. به ویژه در مورد نانوذره ^{11}B که برهمکنش‌های هسته‌ای منجر به گسیل ذرات سنگین آلفا می‌شود. البته در این گستره انرژی و در فرم SOBP، سطح‌مقطع برهمکنش پروتون با ^{11}B بسیار پایین است. این نکته با داده‌های مرجع [۱۶] کاملاً منطبق است و نشان داده شده است که به طور کلی سطح‌مقطع برهمکنش پروتون با ^{11}B در محدوده وسیع‌تر انرژی و حتی با غلظت‌های بیشتر نانوذرات نیز قابل توجه نمی‌باشد. طبق مراجع [۱۷] پروتون‌های در حدود انرژی ۵۰–۱۰ MeV دارای سطح‌مقطع به نسبت بالایی در برخورد با عنصر Co دارند و همین عامل سطح‌مقطع منجر به افزایش نسبی DER برای نانوذرات Co شده است. بنابراین، می‌توان گفت که سطح‌مقطع برهمکنش پروتون با عنصر هدف، عامل اصلی تغییر در DER است.

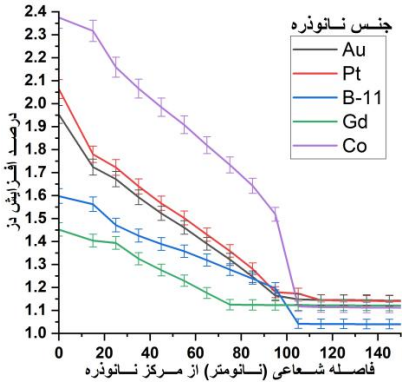


شکل ۱. نسبت افزایش دز در تومور به دلیل حضور ۳۰ mg/g نانوذرات مختلف با شعاع ۵۰ nm و ۱۰۰ nm.

اینکه آیا افزایش دز تومور به میزان ۲/۵ درصد (شکل ۱) از لحاظ بالینی حائز اهمیت باشد یا نه، نیازمند مطالعات تجربی است. در مطالعات تجربی که از نانوذرات طلا استفاده کردند، DER برابر با ۵٪ و ۹٪ گزارش شده است [۵، ۶] که با DER حاصل‌شده از این مطالعه (کمتر از ۲٪) اختلاف بارزی دارد. علت اصلی این تفاوت به اختلاف در انرژی پروتون اولیه بر می‌گردد که آن‌ها انرژی پروتون ۱۵۰ MeV را که برای تومورهای عمیق‌تر و غیرچشمی مورد مطالعه قرار دادند. شکل ۲ و ۳، DER را در راستای شعاعی از مرکز یک نانوذره به ترتیب با قطر ۵۰ nm و ۱۰۰ nm به نمایش گذاشته است. در شکل ۲ و ۳، میله‌های خطا حداکثر ۲ درصد داده‌ها را به عنوان عدم قطعیت آماری نشان می‌دهد.



شکل ۲. نسبت افزایش دز شعاعی از مرکز یک نانوذره با قطر ۵۰ nm.



شکل ۳. نسبت افزایش دز شعاعی از مرکز یک نانوذره با قطر ۱۰۰ nm.

طبق شکل‌های ۲ و ۳، در مقیاس میکروسکوپی، DER بالاتری نسبت به مقیاس ماکروسکوپی حاصل شد. علت آن این است که در این حالت تعداد پروتون‌های بسیار بیشتری به طور مستقیم به یک نانوذره برخورد می‌کنند و سطح‌مقطع واکنش‌های هسته‌ای، افزایش پیدا می‌کند. در نتیجه، میزان افزایش دز حاصل از ذرات ثانویه تولیدی، خود را بیشتر نشان می‌دهد. با مقایسه شکل ۲ و ۳، اثر قطر نانوذره در مقیاس میکروسکوپی ظاهر شده است. مثلاً در مورد نانوذرات Co، با افزایش ابعاد نانوذره از ۵۰ nm به ۱۰۰ nm، DER به میزان ۳۳٪ کاهش پیدا می‌کند. این کاهش دز برای دیگر نانوذرات نیز در همین حدود و در برخی موارد که عدد اتمی پایین‌تر دارند، اندکی کمتر است. نانوذرات ^{11}B در شعاع ۵۰ nm و نانوذرات Gd در شعاع ۱۰۰ nm کمترین میزان DER را در بین نانوذرات مورد مطالعه، از خود نشان دادند. اینکه با افزایش قطر نانوذره، مقدار DER کاهش یابد، کاملاً با نتایج دیگران سازگاری دارد [۳، ٤]. برتری نانوذرات Pt در افزایش دز تومور نسبت به نانوذرات Au نیز با نتایج منتشرشده مطابقت دارد [۱۸]. نکته دیگر اینکه نانوذرات مورد مطالعه به ویژه Co، Pt و Au در مقیاس میکروسکوپی، DER بیشتری را نسبت به بقیه نانوذرات در مقیاس ماکروسکوپی ارائه کردند. نکته جالب توجه آن است که در مقیاس میکروسکوپی نیز نانوذره Co برتری خود را به عنوان یک نانوذره مناسب در پروتون درمانی تومورهای چشمی نشان داده است.

نتیجه‌گیری

نتایج نشان داد که نانوذرات Co می‌تواند عامل به نسبت امیدوارکننده‌تری برای درمان تومور چشمی با پروتون ٦٢/٨ MeV باشند، زیرا می‌توانند دز تومور را تا ۲/۵ درصد افزایش دهند. این مطالعه با معرفی نانوذرات جدید Co برای اولین بار، اهمیت مطالعات بالینی بیشتر در این زمینه را برجسته کرد. برای تایید نتایج شبیه‌سازی، مطالعات آزمایشگاهی برای ادامه کار توصیه می‌شود.

مرجع‌ها

[1] M. J. Jager, C. L. Shields, C. M. Cebulla, et al. “Uveal melanoma”. *Nature reviews Disease primers*, **6**(1), 24, (2020).
[2] R. Mohan. “A Review of Proton Therapy - Current Status and Future Directions”. *Precision radiation oncology*, **6**(2), (2022) 164–176.
[3] B. Rudek, A. McNamara, J. Ramos-Méndez, et al. “Radio-enhancement by gold nanoparticles and their impact on water radiolysis for x-ray, proton and carbon-ion beams”. *Physics in medicine and biology*, **64**(17), (2019)175005.
[4] D. Peukert et al. “Gold nanoparticle enhanced proton therapy: A Monte Carlo simulation of the effects of proton energy, nanoparticle size, coating material, and coating thickness on dose and radiolysis yield”. *Medical physics*, **47**(2), (2020) 651–661.
[5] C. L. Smith, et al. The effects of gold nanoparticles concentrations and beam quality/LET on dose enhancement when irradiated with X-rays and protons using alanine/EPR dosimetry. *Radiation Measurements*, **106**, (2017) 352-356.
[6] N. N. T. Sisin, et al. “Gafchromic™ EBT3 Film measurements of dose enhancement effects by metallic nanoparticles for 192Ir brachytherapy, proton, photon and electron radiotherapy. *Radiation*, **2**(1), (2022) 130-148.
[7] I. Martínez-Rovira, and Y. Prezado “Evaluation of the local dose enhancement in the combination of proton therapy and nanoparticles”. *Medical physics*, **42**(11), (2015) 6703–6710
[8] H. N. Tran, et al. “Geant4 Monte Carlo simulation of absorbed dose and radiolysis yields enhancement from a gold nanoparticle under MeV proton irradiation”. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, **373**, (2016) 126-139.
[9] S. Rajabpour, et al. “Comparing Geant4 physics models for proton-induced dose deposition and radiolysis enhancement from a gold nanoparticle”. *Scientific Reports*. **12**(1), (2022) 1779.
[10] E. Mansouri, G., Almisned, H. O., Tekin, et al. “Radiosensitization with metallic nanoparticles under MeV proton beams: local dose enhancement”. *Radiation and Environmental Biophysics*, (2024), 1-7.
[11] S. Agostinelli, et al., “GEANT4—a simulation toolkit”. *Nuclear instruments and methods in physics research section A*, **506**(3), (2003) 250-303.
[12] S. Incerti, G. Baldacchino, M. Bernal, et al. “The geant4-dna project”. *International Journal of Modeling, Simulation, and Scientific Computing*, **1**(02), (2010) 157-178.
[13] W. S. Snyder “Estimates of absorbed fractions for monoenergetic photon sources uniformly distributed in various organs of a heterogeneous phantom, MIRD Pamphlet No. 5. *J. nucl. Med.* (1969).
[14] G. A. P. Cirrone, G. Cuttone, et al. “Hadrontherapy: a Geant4-based tool for proton/ion-therapy studies”. *Progress in nuclear science and technology*, **2**, (2011) 207-212.
[15] S. B. Jia, F. Romano, G. A. Cirrone, et al. “Designing a range modulator wheel to spread-out the Bragg peak for a passive proton therapy facility”. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, **806**, (2016) 101-108.
[16] Z. A. Ganjeh and M. A. Mosleh-Shirazi. “Macroscopic and microscopic investigation of maximum effectiveness of proton-boron capture therapy using Monte Carlo simulation”. *Radiation Physics and Chemistry*, **214**, (2024) 111289.
[17] M. Yiğit, Theoretical study of cross sections of proton-induced reactions on cobalt. *Nuclear Engineering and Technology*, **50**(3), (2018) 411-415.
[18] J. Ma et al “Enhancing ProtonTherapy Efficacy Through Nanoparticle - Mediated Radiosensitization”. *Cells*, **13**(22), (2024), 1841.

ارزیابی عملکرد حفاظ کامپوزیت پلیمری چندلایه سبک در برابر پرتوهای گامای فضا با استفاده از شبیه‌سازی Geant4

دارم، زهرا[۱] ؛ کریمیان، علیرضا[۲]
[۱] دانشکده فیزیك دانشگاه اصفهان ،اصفهان
[۲] دانشکده مهندسی، دانشگاه اصفهان،اصفهان

چکیده
در این پژوهش، عملکرد یک حفاظ پلیمری سه‌لایه سبک در برابر پرتوهای گامای محیط فضایی در مدار پایین زمین با استفاده از شبیه‌سازی Geant4 بررسی شد. ساختار شامل لایه‌های HDPE/hBN ، PDMS/WO_3 و HDPE/Graphene با ضخامت کل ۲٫۸ میلی‌متر و پرکننده های هیبریدی بود. شبیه‌سازی با 10^7 فوتون در بازه انرژی ۰٫۰۱ تا ۱۰ MeV انجام شد و پارامترهای تضعیف و انرژی ذخیره شده برای ارزیابی عملکرد استفاده شدند. نتایج نشان داد درصد فوتون‌های عبوری در حفاظ پیشنهادی (۱۸٫۶۹٪) کمتر از آلومینیوم (۲۶٫۸۶٪) است. همچنین ضریب تضعیف خطی آن ۵٫۹۹ cm^{-1} در برابر ۴٫۷۰ cm^{-1} آلومینیوم به‌دست آمد. علاوه بر این، جرم سطحی ساختار پیشنهادی حدود ۵۵٪ کمتر از آلومینیوم بوده و انرژی ذخیره شده در آشکارساز نیز کاهش یافت. این نتایج نشان می‌دهد ساختار پیشنهادی گزینه‌ای سبک و کارآمد برای کاربردهای حفاظتی فضایی است.

واژه های کلیدی: حفاظ چندلایه، پرتوهای گاما، کامپوزیت پلیمری، Geant4، انرژی تخلیه‌شده

Performance Evaluation of a Lightweight Multilayer Polymeric Composite Shield Against Space Gamma Radiation Using Geant4 Simulation

Daram, Zahra[1]; Karimian, Alireza[2]

[1] Department of Physics, University of Isfahan, Isfahan
[2] Faculty of Engineering, University of Isfahan, Isfahan

Abstract
In this study, the performance of a lightweight three-layer polymeric shield against gamma radiation in the Low Earth Orbit (LEO) space environment was investigated using Geant4 simulations. The proposed structure consisted of HDPE/hBN, PDMS/WO_3, and HDPE/Graphene layers with a total thickness of 2.8 mm and hybrid fillers. The simulation was carried out using 10^7 photons in the energy range of 0.01 to 10 MeV, and attenuation parameters and deposited energy were used to evaluate the shielding performance. The results showed that the fraction of transmitted photons through the proposed shield (18.69%) was lower than that of aluminum (26.86%). In addition, the linear attenuation coefficient of the proposed structure was 5.99 cm^{-1} compared to 4.70 cm^{-1} for aluminum. Furthermore, the areal density of the structure was about 55% lower than that of aluminum, and the energy deposited in the detector was also reduced. These results indicate that the proposed structure is a lightweight and efficient option for space radiation shielding applications.

Keywords: Multilayer shielding, Gamma rays, Polymeric composite, Geant4, Deposited energy

مقدمه
حفاظت از سامانه‌های الکترونیکی فضایی در برابر محیط تابشی مدار پایین زمین[۱] یکی از چالش‌های مهم در طراحی ماهواره‌ها و تجهیزات فضایی است. این محیط شامل پروتون‌ها، الکترون‌ها، یون‌های سنگین و فوتون‌های گاما است که می‌توانند به‌طور مستقیم یا غیرمستقیم موجب آسیب به قطعات الکترونیکی شوند. در میان این مؤلفه‌ها، فوتون‌های گاما به دلیل قدرت نفوذ بالا و توانایی عبور از حفاظ‌های متداول، نقش مهمی در ایجاد دز یونیزان تجمعی در تجهیزات حساس دارند. از این رو، توسعه حفاظ‌های سبک و کارآمد برای کاربردهای فضایی اهمیت ویژه‌ای دارد.
در سال‌های اخیر، کامپوزیت‌های پلیمری بدون سرب به‌عنوان جایگزینی سبک و قابل مهندسی برای حفاظ‌های فلزی مورد توجه قرار گرفته‌اند. افزودن پرکننده‌های با عدد اتمی بالا مانند WO_3، ZrO_2 و ترکیبات بیسموت می‌تواند با افزایش احتمال برهمکنش فوتون–ماده، کارایی تضعیف پرتوهای گاما را بهبود دهد(Alabsy et al., 2024 ؛Kassim et al., 2024) . با این حال، محدودیت‌هایی مانند افت خواص مکانیکی در درصدهای بالای پرکننده و چالش توزیع یکنواخت آن‌ها همچنان مطرح است. مطالعات پیشین نشان داده‌اند که استفاده از پرکننده های سنگین و ساختارهای چندلایه می‌تواند عملکرد حفاظتی را بهبود دهد. Shahzad et al (2022) در یک مرور جامع به نقش مهم ساختارهای چندلایه و کامپوزیت‌های پلیمری در افزایش کارایی حفاظتی اشاره کرده است. همچنین، Isazadeh و Abdi Saray (2025) و Mokhtari Dorostkar و Saray (2025)بهبود قابل توجه پارامترهای حفاظتی در کامپوزیت‌های حاوی WO_3 را گزارش کردند، هرچند این مطالعات عمدتاً به ساختارهای تک‌لایه محدود بوده‌اند. علاوه بر این، Alharbi et al. (2025)، Alsalmi و Alraddadi (2026) و Alshipli et al. (2023) نیز به بررسی

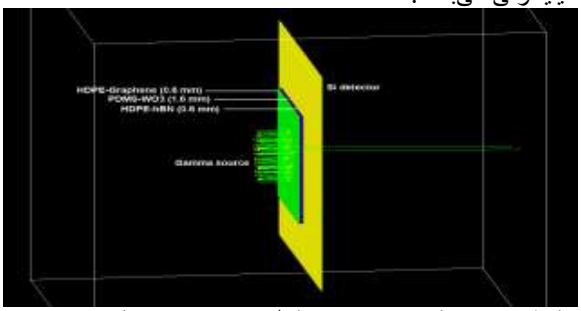
[۱] Low Earth Orbit (LEO)

کامپوزیت‌های مختلف با پرکننده های منفرد در چارچوب شبیه‌سازی مونت‌کارلو پرداخته‌اند. با این وجود، طراحی ساختارهای چندلایه هیبریدی با ترکیب فیلرهای سبک و سنگین در محیطهای فضایی کمتر مورد بررسی قرار گرفته است.
بر این اساس، هدف این پژوهش بررسی عملکرد حفاظتی یک ساختار پلیمری سه‌لایه سبک‌وزن حاوی پرکننده‌های هیبریدی در برابر پرتوهای گاما با استفاده از شبیه‌سازی مونت‌کارلو در Geant4 است. در این مطالعه، پارامترهای کلیدی شامل ضریب تضعیف خطی(LAC)[۲] و جرمی(MAC)[۳]، ضخامت نیم‌مقدار(HVL)[۴] ، ضخامت یک‌دهم مقدار(TVL)[۵] ، مسیر آزاد میانگین(MFP)[۶] ، شار عبوری و انرژی ذخیره شده در آشکارساز سیلیکونی ارزیابی شده و عملکرد ساختار پیشنهادی با آلومینیوم به‌عنوان ماده مرجع مقایسه می‌شود. نتایج این پژوهش می‌تواند درک بهتری از نقش طراحی چندلایه و فیلرهای هیبریدی در توسعه حفاظهای سبک و کارآمد برای کاربردهای فضایی فراهم سازد.

بخش دوم: روش پیشنهادی

شبیه‌سازی‌های مونت‌کارلو با استفاده از نرم‌افزار Geant4 نسخه ۱۱/۳/۲ تحت سیستم‌عامل AlmaLinux 9 و به زبان برنامه‌نویسی C++ انجام شد. در این مطالعه، برهمکنش فوتون‌های گاما با ماده، انتقال انرژی و تولید ذرات ثانویه در یک ساختار حفاظ چندلایه مدل‌سازی گردید. به‌منظور دستیابی به دقت آماری مناسب، تعداد ۱۰[۷] فوتون اولیه در هر اجرای شبیه‌سازی در نظر گرفته شد.
ساختار حفاظ پیشنهادی از سه لایه با ضخامت‌های ۰/۶، ۱/۶ و ۰/۶ میلی‌متر تشکیل شد. لایه بیرونی شامل HDPE[۷] حاوی ۵ درصد وزنی hBN[۸] ، لایه میانی شامل PDMS[۹] حاوی ۳۵ درصد وزنی WO_3 و لایه داخلی شامل HDPE حاوی ۵ درصد وزنی Graphene بود. یک آشکارساز سیلیکونی با ضخامت ۰/۵ میلی‌متر در فاصله ۰/۵ سانتی‌متر پشت حفاظ قرار گرفت تا نقش یک قطعه الکترونیکی حساس را شبیه‌سازی کند و فوتون‌های عبوری، انرژی ذخیره شده و ذرات ثانویه را ثبت نماید. زیرا این پارامترها ارتباط مستقیمی با میزان آسیب‌پذیری و قابلیت اطمینان تجهیزات الکترونیکی در محیطهای پرتویی دارند. برای مقایسه، حفاظ آلومینیومی با ضخامت ۳ میلی‌متر نیز در همان شرایط شبیه‌سازی مورد ارزیابی قرار گرفت؛ زیرا این ضخامت در بسیاری از مطالعات به‌عنوان ضخامت مرجع آلومینیوم استفاده شده است.

همان‌طور که در شکل ۱ نشان داده شده است، این چیدمان شامل منبع گامای ورودی، ساختار سه‌لایه حفاظ و آشکارساز سیلیکونی می‌باشد.



شکل ۱: نمای شماتیک ساختار حفاظ سه‌لایه و چیدمان شبیه‌سازی در Geant4

در این مطالعه، پرکننده‌ها به‌صورت یکنواخت در ماتریس پلیمری توزیع شدند تا اثر ناهمگنی‌های موضعی حذف و رفتار ذاتی ساختار چندلایه بررسی شود. همچنین چگالی مؤثر هر لایه محاسبه گردید. در این میان، WO_3 به‌عنوان پرکننده اصلی به دلیل عدد اتمی و چگالی بالا و hBN و Graphene به‌عنوان پرکننده های مکمل برای بهبود خواص حفاظتی و کنترل تولید ذرات ثانویه مورد استفاده قرار گرفتند.
در این پژوهش، شبیه‌سازی بر اساس روش مونت‌کارلو در Geant4انجام شد که یکی از معتبرترین روش‌ها برای مدل‌سازی برهمکنش تابش با ماده در گستره وسیعی از انرژی‌ها محسوب می‌شود. به‌منظور افزایش دقت محاسبات، از لیست فیزیکی G4EmStandardPhysics_option3 استفاده شد(این لیست فیزیکی به دلیل ایجاد تعادل مناسب میان دقت محاسبات و زمان شبیه‌سازی انتخاب شد). این بسته شامل مدل‌های دقیق برای فرآیندهای الکترومغناطیسی از جمله یونیزاسیون، پراکندگی چندگانه، تابش ترمزی، پراکندگی کامپتون، جذب فوتوالکتریک و انتقال انرژی به الکترون‌های ثانویه است و در مطالعات دزیمتری و حفاظتی به‌عنوان گزینه‌ای قابل اعتماد مورد استفاده قرار می‌گیرد (Alsalmi and Alraddadi, 2026; Alharbi et al., 2025).

مدل‌سازی چشمه تابش

برای شبیه‌سازی شرایط واقع‌گرایانه محیط فضایی در مدار پایین زمین ، چشمه فوتون‌های گامای ورودی در Geant4 به‌صورت یک منبع صفحه‌ای با توزیع مکانی دایره‌ای تعریف شد. مرکز چشمه در موقعیت (۲-, ۰, ۰)سانتی متر و با شعاع ۲/۵ سانتی متر در نظر گرفته شد و جهت تابش در راستای محور z مثبت (۱, ۰, ۰) تنظیم گردید تا تابش به‌صورت عمود بر سطح حفاظ اعمال شود. فاصله ۲ سانتی‌متری میان چشمه و سطح حفاظ به‌منظور جلوگیری از همپوشانی هندسی چشمه با ساختار حفاظ و تضمین انتشار یکنواخت پرتوها انتخاب شد.
به‌منظور ارزیابی عملکرد حفاظ در یک بازه انرژی گسترده و نزدیک به شرایط تابش فضایی، طیف انرژی فوتون‌های گاما با

---

[۲] Linear Attenuation Coefficient
[۳] Mass Attenuation Coefficient
[۴] Half Value Layer
[۵] Tenth Value Layer
[۶] Mean Free Path
[۷] High-Density Polyethylene
[۸] Hexagonal Boron Nitride
[۹] Polydimethylsiloxane

استفاده از مدل CDG [۱۰] Geant4 در تعریف شد. بازه انرژی فوتون‌ها از ۰/۰۱ تا ۱۰ MeV انتخاب گردید تا فرآیندهای اصلی برهمکنش فوتون با ماده، شامل جذب فوتوالکتریک، پراکندگی کامپتون و تولید زوج الکترون–پوزیترون، به‌طور کامل پوشش داده شوند.

پارامترهای حفاظتی

برای تحلیل عملکرد حفاظ، از قانون بیر–لامبرت استفاده شد:

$$I = I_0 e^{-\mu x} \qquad (۱)$$

که در آن I_0 شدت اولیه، I شدت عبوری، x ضخامت و μ ضریب تضعیف خطی است. ضریب تضعیف جرمی نیز از رابطه زیر محاسبه شد، که در آن ρ چگالی ماده است.

$$\mu_m = \frac{\mu}{\rho} \qquad (۲)$$

همچنین پارامترهای حفاظتی مکمل شامل ضخامت نیم‌مقدار (HVL)، ضخامت یک‌دهم مقدار (TVL) و مسیر آزاد میانگین (MFP) از روابط زیر به دست آمدند:

$$HVL = \frac{\ln(2)}{\mu} \qquad (۳)$$

$$TVL = \frac{\ln(10)}{\mu} \qquad (۴)$$

$$MFP = \frac{1}{\mu} \qquad (۵)$$

این پارامترها به‌طور گسترده برای ارزیابی عملکرد مواد حفاظتی در برابر تابش گاما استفاده می‌شوند.

جرم سطحی [۱۱] : جرم سطحی به‌عنوان یکی از معیارهای کلیدی در کاربردهای فضایی، از رابطه زیر محاسبه شد:

$$A = \rho \times t \qquad (۶)$$

که در آن ρ چگالی و t ضخامت لایه است. این پارامتر نقش مهمی در ارزیابی نسبت کارایی حفاظ به وزن دارد.

کارایی حفاظ بر اساس میزان کاهش شار فوتون‌های عبوری و انرژی تخلیه شده در آشکارساز سیلیکونی ارزیابی شد. به‌منظور مقایسه نسبی، عملکرد ساختار پیشنهادی با آلومینیوم به‌عنوان ماده مرجع مقایسه گردید، زیرا آلومینیوم با ضخامت ۳میلی متر یکی از متداول‌ترین مواد مورد استفاده در سازه‌ها و حفاظ‌های غیرفعال فضاپیماها محسوب می‌شود.

بخش سوم: نتایج

جدول ۱ مقایسه پارامترهای حفاظتی ساختار سه‌لایه پیشنهادی و حفاظ آلومینیومی را نشان می‌دهد. این پارامترها شامل ضریب تضعیف خطی، ضخامت نیم‌مقدار، ضخامت یک‌دهم مقدار، مسیر آزاد میانگین، جرم سطحی، درصد فوتون‌های عبوری و انرژی کل ذخیره شده در آشکارساز سیلیکونی هستند که برای ارزیابی جامع کارایی حفاظ در برابر تابش گاما مورد استفاده قرار گرفته‌اند.

جدول ۱. مقایسه پارامترهای حفاظتی ساختار سه‌لایه پیشنهادی و حفاظ آلومینیومی در برابر تابش گاما

پارامتر	حفاظ سه‌لایه	آلومینیوم
ضریب تضعیف خطی(cm^{-1})	۵/۹۹	۴/۷۰
ضخامت نیم مقدار(cm)	۰/۱۱۶	۰/۱۴۷
یک‌دهم ضخامت لایه(cm)	۰/۳۸۴	۰/۴۹۰
مسیر آزاد میانگین(cm)	۰/۱۶۷	۰/۲۱۳
جرم سطحی(g/cm^2)	۰/۳۴۲	۰/۷۵۶
درصد فوتون‌های عبوری (%)	۱۸/۶۹	۲۶/۸۶

نتایج ارائه‌شده در جدول ۱ نشان می‌دهد که ضریب تضعیف خطی ساختار سه‌لایه پیشنهادی برابر با ۵/۹۹ cm^{-1} است که در مقایسه با مقدار ۴/۷۰ cm^{-1} برای آلومینیوم، حدود ۲۷/۴٪ افزایش را نشان می‌دهد. این موضوع بیانگر توان بالاتر ساختار پیشنهادی در تضعیف پرتوهای گاما است. همچنین، مقادیر ضخامت نیم‌مقدارو ضخامت یک‌دهم مقدار برای حفاظ سه‌لایه به‌ترتیب ۰/۱۱۶ و ۰/۳۸۴ cm به‌دست آمد که نسبت به آلومینیوم به‌ترتیب حدود ۲۱/۱٪ و ۲۱/۶٪ کمتر هستند. این نتایج نشان می‌دهد که برای دستیابی به میزان مشخصی از تضعیف تابش، ضخامت کمتری از ساختار پیشنهادی مورد نیاز است.

علاوه بر این، مسیر آزاد میانگین در حفاظ سه‌لایه برابر با ۰/۱۶۷ cm محاسبه شد که در مقایسه با مقدار ۰/۲۱۳ cm برای آلومینیوم، حدود ۲۱/۶٪ کاهش یافته است. این کاهش نشان می‌دهد که احتمال برهمکنش فوتون‌ها در ساختار پیشنهادی بیشتر بوده و فوتون‌ها در فاصله کوتاه‌تری با ماده برهمکنش می‌کنند. از سوی دیگر، جرم سطحی حفاظ سه‌لایه برابر با ۰/۳۴۲ g/cm^2 و برای آلومینیوم ۰/۷۵۶ g/cm^2 است که بیانگر کاهش حدود ۵۴/۸٪ در جرم سطحی می‌باشد. این ویژگی از دیدگاه کاربردهای فضایی اهمیت ویژه‌ای دارد، زیرا کاهش وزن از عوامل کلیدی در طراحی سامانه‌های فضایی محسوب می‌شود.

همچنین، درصد فوتون‌های عبوری از حفاظ سه‌لایه ۱۸/۶۹٪ و برای آلومینیوم ۲۶/۸۶٪ به‌دست آمد که نشان‌دهنده کاهش حدود ۳۰/۴٪ در شار فوتون‌های عبوری است. بنابراین، ساختار پیشنهادی علاوه بر برخورداری از جرم سطحی کمتر، عملکرد حفاظتی بهتری نسبت به آلومینیوم ارائه می‌دهد و می‌تواند گزینه‌ای مناسب برای کاربردهای فضایی باشد.

به‌منظور ارزیابی حفاظت از تجهیزات الکترونیکی، انرژی ذخیره شده در آشکارساز سیلیکونی قرارگرفته در پشت حفاظ محاسبه شد. این پارامتر نشان‌دهنده انرژی منتقل‌شده به آشکارساز در اثر برهمکنش تابش با حفاظ بوده و به‌عنوان شاخصی از میزان تابش رسیده به تجهیزات حساس در نظر

[۱۰] Cosmic Diffuse Gamma
[۱۱] Areal density

گرفته می‌شود. جدول ۲ مقادیر انرژی ذخیره شده را برای ساختار سه‌لایه پیشنهادی و حفاظ آلومینیومی مقایسه می‌کند.

جدول ۲. مقایسه انرژی تخلیه‌شده در آشکارساز سیلیکونی برای حفاظ سه‌لایه و حفاظ آلومینیومی

نوع حفاظ انرژی تخلیه شده (MeV/event)	حفاظ سه‌لایه	آلومینیوم
ذرات اولیه	۱/ ۵۰۱۵× ۱۰$^{-۵}$	۳/ ۵۹۷۲ ×۱۰$^{-۵}$
ذرات ثانویه	۳ /۳۹۳۸ × ۱۰$^{-۴}$	۶ /۲۵۲۱ × ۱۰$^{-۴}$
کل	۳ / ۵۴۳۹ × ۱۰$^{-۴}$	۶/۶۱۱۹ × ۱۰$^{-۴}$

همان‌گونه که در جدول ۲ مشاهده می‌شود، انرژی کل ذخیره شده برای حفاظ سه‌لایه برابر با MeV ۱۰$^{-۴}$ ×۳/۵۴۳۹ و برای آلومینیوم MeV ۱۰$^{-۴}$ ×۶/۶۱۱۹ است، که نشان می دهد انرژی تخلیه‌شده در آشکارساز در ساختار پیشنهادی حدود ٪۴۶/۴ کمتر از آلومینیوم است. این کاهش در تمامی مؤلفه‌های فوتونی، ذرات اولیه و ثانویه نیز مشاهده می‌شود و بیانگر عملکرد مؤثر ساختار چندلایه در تضعیف تابش و کاهش انرژی منتقل‌شده به آشکارساز است .

بخش چهارم: بحث

برتری حفاظ سه‌لایه پیشنهادی ناشی از هم‌افزایی عدد اتمی بالای WO_3 ، معماری چندلایه و توزیع همگن فیلرها است. در این ساختار، WO_3 نقش اصلی را در افزایش احتمال برهمکنش‌های فوتوالکتریک و کامپتون و در نتیجه تضعیف پرتوها ایفا می‌کند، در حالی‌که hBN و Graphene بیشتر در بهبود پایداری ساختاری، یکنواختی پاسخ و خواص مکانیکی نقش دارند. بنابراین، عملکرد حفاظ صرفاً وابسته به افزایش چگالی نیست، بلکه ناشی از طراحی لایه‌ای و ایجاد مرزهای متعدد برای افزایش احتمال برهمکنش فوتون‌ها است.

کاهش ضخامت نیم مقدار و مسیر آزاد میانگین نشان می‌دهد که فوتون‌ها در مسیر کوتاه‌تری تضعیف یا جذب می‌شوند؛ موضوعی که بیانگر کارایی بالای ترکیب WO_3 با ماتریس‌های پلیمری سبک است، به‌گونه‌ای که افزایش عملکرد حفاظتی بدون افزایش قابل توجه جرم سطحی حاصل شده و برای کاربردهای فضایی بسیار مهم است. در مقایسه با آلومینیوم، حفاظ سه‌لایه عملکرد بهتری در تضعیف پرتوهای گاما نشان داد، زیرا آلومینیوم فاقد ساختار چندلایه و فیلرهای عملکردی است و تضعیف در آن به‌صورت یکنواخت و کم‌کارآمدتر انجام می‌شود. نتایج شبیه‌سازی Geant4 نیز این موضوع را تأیید می‌کند؛ به‌طوری‌که در لایه میانی، فراوانی بالای فرآیندهای فوتوالکتریک و یونش الکترونی نشان‌دهنده جذب مؤثر فوتون‌ها در حضور WO_3 است، در حالی‌که کاهش شدید این فرآیندها در لایه داخلی بیانگر افت قابل توجه شدت تابش پس از عبور از لایه‌های اولیه است. در مقابل، در آلومینیوم احتمال نفوذ فوتون‌ها به لایه‌های داخلی بیشتر بوده و در نتیجه فوتون‌های عبوری و انرژی تخلیه شده بالاتری مشاهده شده است.مطالعات پیشین نیز این نتایج را تأیید می‌کنند و نشان داده‌اند که استفاده از WO_3 و همچنین ساختارهای چندلایه موجب بهبود عملکرد حفاظتی می‌شود. تفاوت این پژوهش در بهره‌گیری همزمان از پرکننده های سنگین و سبک در قالب یک معماری هیبریدی چندلایه است که موجب بهبود نسبت کارایی به وزن شده است. انتخاب ضخامت ۳ میلی‌متری برای آلومینیوم بر اساس ضخامت‌های متداول در حفاظ‌های غیرفعال فضایی انجام شد، درحالی‌که هدف این مطالعه ارزیابی امکان دستیابی به عملکرد حفاظتی بهتر با ضخامت و جرم کمتر در ساختار پیشنهادی بود.

بخش پنجم: نتیجه‌گیری

در این پژوهش، عملکرد یک حفاظ سه‌لایه پلیمری سبک حاوی پرکننده های هیبریدی با استفاده از شبیه‌سازی Geant4 بررسی شد. نتایج نشان داد وجود آنکه ضخامت کل حفاظ سه‌لایه (۲/۸ میلی‌متر) کمتر از ضخامت حفاظ آلومینیومی مرجع (۳ میلی‌متر) بود، ساختار پیشنهادی عملکرد حفاظتی بهتری از خود نشان داد. که این ساختار نسبت به آلومینیوم دارای ضریب تضعیف بالاتر، ضخامت نیم مقدار و مسیر آزاد میانگین کمتر، جرم سطحی پایین‌تر و عبور فوتونی کمتر است. همچنین کاهش انرژی تخلیه شده در آشکارساز سیلیکونی نشان‌دهنده کارایی بهتر آن در حفاظت از تجهیزات حساس است. بهبود عملکرد حفاظ نه تنها ناشی از افزایش تضعیف مطلق، بلکه حاصل بهینه‌سازی نسبت عملکرد به جرم است. در این میان، WO_3 نقش کلیدی در تضعیف پرتوها داشته و لایه‌های پلیمری هیدروژن‌دار به همراه hBN و Graphene به بهبود ساختار، کنترل برهمکنش‌ها و افزایش پایداری کمک کرده‌اند. بنابراین، عملکرد برتر این سیستم نتیجه هم‌افزایی طراحی چندلایه و پرکننده های هیبریدی است.با این حال، این مطالعه مبتنی بر شبیه‌سازی و با فرض توزیع یکنواخت پرکننده ها بوده و اثرات واقعی مانند نقص‌های ساخت، ناپیوستگی بین‌لایه‌ای و شرایط محیطی در نظر گرفته نشده است. در نتیجه، بررسی تجربی، بهینه‌سازی درصد و ضخامت لایه‌ها و ارزیابی خواص مکانیکی و حرارتی در پژوهش‌های آینده ضروری خواهد بود.

مرجع‌ها

1. *Shahzad, K., Kausar, A., Manzoor, S., Rakha, S. A., Uzair, A., Sajid, M., … Ahmad, I. (2022). Views on radiation shielding efficiency of polymeric composites/nanocomposites and multi-layered materials: Current state and advancements. Radiation.*
2. *Isazadeh, F., & Abdi Saray, A. (2025). Experimental and simulation assessment of gamma-radiation shielding properties of the polyester polymer reinforced with WO_3. Scientific Reports.*
3. *Alharbi, A., Alnagran, H., & Alashrah, S. (2025). Simulation of gamma-ray attenuation in zeolite–polymer composites for low-cost sustainable radiation shielding. Polymers.*
4. *Alsalmi, S., & Alraddadi, R. (2026). First-principles simulation of radiation shielding performance in TaS_2–HDPE composites using Geant4. Scientific Reports.*
5. *Kassim, H., Aldawood, S., Prasad, S., Asemi, N. N., Aziz, A. A., & AlSalhi, M. S. (2024). Advanced polymeric matrix utilizing nanostructured bismuth and tungsten oxides for gamma rays shielding. Heliyon.*
6. *Mokhtari Dorostkar, M., & Abdi Saray, A. (2025). Development of PMMA based polymer composite incorporating WO_3 for gamma radiation shielding using synthesis and Monte Carlo simulation. Scientific Reports.*

نقشه‌برداری مکانی دز نوترون و گاما و ارزیابی کارایی حفاظ پرتوی دستگاه IR-IECF با استفاده از شبیه‌سازی Geant4

مریم قپانوری [۱*]، فاطمه بخشوده پور [۲]

[۱] سازمان انرژی اتمی ایران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای ، پژوهشکده گداخت هسته ای

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

چکیده

در این پژوهش، توزیع مکانی نرخ دز نوترون و گاما و کارایی حفاظ پرتوی در دستگاه همجوشی محصورسازی الکترواستاتیکی لختی ایرانی، IR-IECF، با استفاده از شبیه‌سازی مونت‌کارلوی Geant4 بررسی شد. دستگاه مورد مطالعه در مد دوتریوم–دوتریوم کار می‌کند و نوترون‌هایی با انرژی متوسط ۲.۴۵ MeV تولید می‌نماید. در مدل شبیه‌سازی، هندسه اصلی دستگاه، موقعیت دزیمترها و حفاظ اطراف سامانه در نظر گرفته شد. نرخ دز نوترون و گاما در نقاط مختلف، پیش و پس از حفاظ‌گذاری، محاسبه و مقایسه گردید. نتایج نشان داد که حفاظ مورد استفاده باعث کاهش قابل توجه نرخ دز نوترون در بیشتر نقاط دزیمتری شده و در برخی موقعیت‌ها فاکتور کاهش به چند ده برابر می‌رسد. نرخ دز گاما نیز پس از حفاظ‌گذاری کاهش یافت، هرچند به دلیل تولید گامای ثانویه و پراکندگی در مواد اطراف، رفتار مکانی آن یکنواخت نبود. نتایج نشان می‌دهد که Geant4 ابزار مناسبی برای نقشه‌برداری دز و ارزیابی اولیه حفاظ پرتوی در دستگاه‌های IECF آزمایشگاهی است.

واژه های کلیدی: *دستگاه محصورسازی الکتروستاتیکی لختی ایرانی، دزیمتری نوترون، دز گاما، حفاظ پرتوی، شبیه‌سازی مونت‌کارلو Geant4.*

Geant4-Based Spatial Mapping of Neutron–Gamma Dose and Shielding Effectiveness in the IR-IECF Device

Maryam Ghapanvari[1]*, Fatemeh Bakhshoodeh Pour [2]

[1] *Plasma and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran.*

[2] *Amirkabir University of Technology, Faculty of Physics and Energy, Nuclear Engineering, Tehran, Iran.*

Abstract

In this study, the spatial distribution of neutron and gamma dose rates and the radiation shielding effectiveness of the Iranian Inertial Electrostatic Confinement Fusion device, IR-IECF, were investigated using the Geant4 Monte Carlo simulation toolkit. The device operates in deuterium–deuterium mode and produces neutrons with an average energy of 2.45 MeV. In the simulation model, the main device geometry, dosimeter positions, and surrounding shielding were considered. Neutron and gamma dose rates were calculated and compared at different locations before and after shielding. The results show that the applied shielding significantly reduces the neutron dose rate at most dosimetry points, with attenuation reaching factors of ten in selected locations. The gamma dose rate also decreased after shielding; however, its spatial behaviour was not uniform due to secondary gamma production and scattering in surrounding materials. The results indicate that Geant4 is a suitable tool for dose mapping and preliminary radiation shielding assessment in laboratory-scale IECF devices.

***Keywords**: Iranian Inertial Electrostatic Confinement device, neutron dosimetry, gamma dose, radiation shielding, Monte Carlo Simulation Geant4.*

PACS No. (۲۸)

مقدمه

دستگاه‌های همجوشی محصورسازی الکترواستاتیکی لختی به‌عنوان منابع فشرده نوترون در پژوهش‌های هسته‌ای و کاربردهای آزمایشگاهی مورد توجه قرار گرفته‌اند [1]. در مد دوتریوم–دوتریوم، این سامانه‌ها نوترون‌هایی با انرژی متوسط حدود (2.45MeV) تولید می‌کنند. برهم‌کنش نوترون‌ها با مواد سازه‌ای، حفاظ و محیط اطراف می‌تواند باعث تولید پرتوهای گاما شود؛ بنابراین میدان تابشی اطراف دستگاه IECF یک میدان مختلط

نوترون–گاما است و ارزیابی آن برای طراحی حفاظ اهمیت دارد. دستگاه مورد بررسی در این پژوهش، سامانه IR-IECF است که نمای آزمایشگاهی آن در شکل ۱ نشان داده شده است. هندسه واقعی دستگاه، شامل محفظه خلأ استوانه‌ای، الکترودها، تجهیزات جانبی و حفاظ اطراف سامانه، مبنای پیاده‌سازی مدل محاسباتی در Geant4 قرار گرفت [2،3]. حفاظ مورد بررسی شامل سه بلوک پلی‌اتیلن بوراته با ضخامت (20 cm) بود که برای کندسازی و جذب نوترون‌های نشت‌یافته در اطراف محفظه قرار داده شد. در سامانه‌هایIECF، مقدار دز تنها در یک نقطه نمی‌تواند عملکرد حفاظ را به‌طور کامل نشان دهد، زیرا هندسه دستگاه، چیدمان حفاظ و پراکندگی از اجزای محیط باعث تغییرات مکانی میدان تابشی می‌شود. از این رو، در این پژوهش با استفاده ازGeant4، توزیع مکانی نرخ دز نوترون و گاما در اطراف دستگاه IR-IECF پیش و پس از حفاظ‌گذاری بررسی شد. هدف اصلی، ارزیابی فاکتور کاهش حفاظ، بررسی توزیع شعاعی دز و شناسایی نواحی نیازمند توجه بیشتر در طراحی حفاظ یا کنترل دسترسی است.



شکل ۱– نمای آزمایشگاهی دستگاه IR-IECF شامل محفظه خلأ استوانه‌ای، گذرگاه ولتاژ بالا و تجهیزات جانبی.

مواد و روش‌ها (روش کار)

در این پژوهش، توزیع مکانی نرخ دز نوترون و گاما در اطراف دستگاه IR-IECF با استفاده از شبیه‌سازی مونت‌کارلوی Geant4 بررسی شد. نمای آزمایشگاهی دستگاه مورد مطالعه در شکل ۱ نشان داده شده است. هندسه اصلی سامانه شامل محفظه خلأ استوانه‌ای، الکترودهای کروی، ناحیه تولید نوترون، حفاظ اطراف دستگاه و موقعیت دزیمترها بر اساس ابعاد واقعی در محیط Geant4 پیاده‌سازی شد. محفظه دستگاه به‌صورت یک استوانه فولادی با شعاع خارجیcm ۳۰ و ارتفاعcm ۶۳ در نظر گرفته شد و منبع تابش در مرکز محفظه، در ناحیه همجوشی، قرار داده شد. منبع نوترونی بر اساس واکنش دوتریوم– دوتریوم تعریف گردید. در این مدل، نوترون‌ها به‌صورت همسانگرد از مرکز دستگاه گسیل شدند و انرژی متوسط آن‌ها برابر ۲.۴۵ MeV در نظر گرفته شد. گاماها به‌عنوان مؤلفه ثانویه میدان تابشی، ناشی از برهم‌کنش نوترون‌ها با مواد سازه‌ای، حفاظ و محیط اطراف، در محاسبات لحاظ شدند.. برای بررسی اثر حفاظ، دو حالت شبیه‌سازی شد: حالت بدون حفاظ و حالت با حفاظ. در هر دو حالت، نرخ دز نوترون و گاما در نقاط دزیمتری یکسان محاسبه و مقایسه گردید. برای شبیه‌سازی برهم‌کنش‌های نوترون و گاما از فهرست فیزیکی QGSP_BERT_HP استفاده شد. در محاسبه دز، انرژی انباشت شده در حجم دزیمتری به‌عنوان مبنای محاسبه دز جذبی در نظر گرفته شد:

$$D(Gy)=\frac{E_{\mathrm{dep}}(J)}{m(kg)} \qquad (1)$$

که در آن E_{dep} انرژی انباشت شده و (m) جرم حجم دزیمتری است. انرژی انباشت شده خروجی Geant4 پیش از محاسبه دز، به واحد ژول تبدیل شد. برای گاما، به دلیل برابر بودن ضریب وزنی تابش با یک، دز معادل با دز جذبی برابر در نظر گرفته شد. برای نوترون‌ها، دز معادل با اعمال ضریب وزنی تابش محاسبه شد:

$$H_{\gamma}=D_{\gamma}, \qquad H_{n}=D_{n}w_{R,n} \qquad (2)$$

در رابطه(۲)، D_R دز جذبی ناشی از تابش نوع R و W_R ضریب وزنی تابش است که برای تبدیل دز جذبی به دز معادل به‌کار می‌رود. برای فوتون‌ها مقدار $W_R = 1$ در نظر گرفته شد. برای نوترون‌های سریع حاصل از واکنش D-D با انرژی اولیه حدود ۲.۴۵ MeV، مقدار $W_R = 10$ بر اساس توصیه ICRP-60 برای نوترون‌های با انرژی بیش از ۲ MeV تا ۲۰ MeV انتخاب گردید[4]. خروجی Geant4 ابتدا به‌صورت دز به ازای هر ذره اولیه به‌دست آمد. سپس با استفاده از شدت منبع، نرخ دز معادل به واحد $(\mu Sv/h)$ تبدیل شد:

$$\dot{H}(\mu Sv/h)=H_{\mathrm{per\ primary}}\times S\times 3600\times 10^{6} \qquad (3)$$

که در آن $(H_{\mathrm{per\ primary}})$ دز معادل به ازای هر ذره اولیه و (S) شدت منبع بر حسب تعداد نوترون بر ثانیه است. برای ارزیابی

کارایی حفاظ، فاکتور کاهش دز در هر نقطه از نسبت نرخ دز پیش از حفاظ‌گذاری به نرخ دز پس از حفاظ‌گذاری محاسبه شد:

$$RF_i = \frac{\dot{H}_{\text{before},i}}{\dot{H}_{\text{after},i}} \qquad (4)$$

همچنین درصد کاهش دز از رابطه زیر به‌دست آمد:

$$\eta_i = \left(1 - \frac{\dot{H}_{\text{after},i}}{\dot{H}_{\text{before},i}}\right) \times 100 \qquad (5)$$

در این روابط، $\dot{H}_{\text{before},i}$ و $\dot{H}_{\text{after},i}$ به‌ترتیب نرخ دز در نقطه (i) پیش و پس از حفاظ‌گذاری هستند. پس از محاسبه نرخ دز در نقاط مختلف، نقشه‌های دوبعدی توزیع نوترون و گاما، توزیع شعاعی، نمودار نرخ دز بر حسب فاصله و فاکتور کاهش حفاظ استخراج شد. این روش امکان بررسی هم‌زمان تغییرات مکانی دز، سهم مؤلفه‌های نوترونی و گامایی، و میزان اثرگذاری حفاظ در اطراف دستگاه IR-IECF را فراهم می‌کند. شدت منبع نوترونی در نرمال‌سازی نتایج برابر $10^8\ n/s$ در نظر گرفته شد. برای شبیه‌سازی انتقال نوترون و گاما از فهرست فیزیکی مناسب شامل برهم‌کنش‌های نوترونی کم‌انرژی استفاده شد.

نتایج و بحث

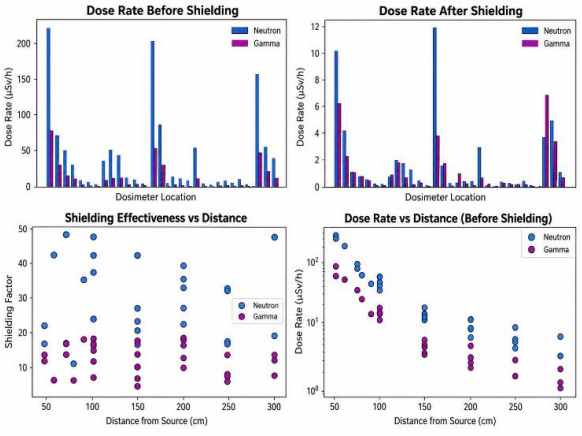
شکل ۲ مقایسه نرخ دز نوترون و گاما را پیش و پس از حفاظ‌گذاری در نقاط مختلف اطراف دستگاه IR-IECF نشان می‌دهد. نتایج نشان می‌دهد که پیش از قرارگیری حفاظ، مؤلفه نوترونی سهم غالب میدان تابشی را تشکیل می‌دهد و در نقاط نزدیک‌تر به دستگاه، نرخ دز مقدار بیشتری دارد. پس از اعمال حفاظ، نرخ دز نوترون در بیشتر نقاط دزیمتری به‌طور قابل توجهی کاهش یافته است که بیانگر نقش مؤثر مواد هیدروژنی و بوراته در کندسازی نوترون‌های سریع و جذب بخشی از نوترون‌های کندشده است. در مقابل، کاهش دز گاما رفتار کاملاً یکنواختی ندارد و در برخی نقاط افت آن کمتر از مؤلفه نوترونی است. این موضوع می‌تواند ناشی از تولید گامای ثانویه در اثر برهم‌کنش نوترون‌ها با مواد حفاظ، محفظه فولادی و اجزای اطراف دستگاه باشد. همچنین، فاکتور کاهش حفاظ در نقاط مختلف یکسان نیست و به موقعیت دزیمتر نسبت به منبع، هندسه حفاظ و مسیرهای پراکندگی وابسته است. بنابراین، نتایج نشان می‌دهد که برای ارزیابی دقیق عملکرد حفاظ در میدان مختلط نوترون–گاما، بررسی چند نقطه محدود کافی نیست و نقشه‌برداری مکانی دز می‌تواند در شناسایی نقاط پر دز و نواحی دارای نشتی پرتوی نقش مهمی داشته باشد. شکل ۳ توزیع مکانی نوترون و گاما را در صفحه‌های مختلف و همچنین توزیع شعاعی شمارش ذرات نشان می‌دهد. نتایج بیانگر آن است که شدت میدان تابشی در نزدیکی مرکز دستگاه بیشتر بوده و با افزایش فاصله از منبع کاهش می‌یابد. با این حال، کاهش دز صرفاً از قانون ساده فاصله پیروی نمی‌کند، زیرا پراکندگی از محفظه، حفاظ و اجزای محیط آزمایشگاه باعث تغییر در توزیع مکانی تابش می‌شود. توزیع شعاعی نیز نشان می‌دهد که سهم نوترون‌ها نسبت به گاماها در بیشتر نواحی بیشتر است و میدان تابشی دستگاه عمدتاً ماهیت نوترونی دارد. افزایش مشاهده‌شده در آخرین bin هیستوگرام شعاعی عمدتاً ناشی از اثر مرزی حجم شبیه‌سازی است؛ زیرا رخدادهای ثبت‌شده در نزدیکی مرز World Volume در آخرین بازه شعاعی تجمیع می‌شوند. بنابراین، این افزایش به‌عنوان یک اثر عددی و هندسی مرتبط با مرز دامنه محاسباتی تفسیر می‌شود و بیانگر افزایش واقعی شار تابش در فاصله‌های دور نیست.به‌طور کلی، نتایج نشان می‌دهد که حفاظ مورد بررسی توانسته است نرخ دز نوترون و گاما را در اطراف دستگاه IR-IECF کاهش دهد، اما میزان کاهش برای دو مؤلفه تابشی و در نقاط مختلف یکسان نیست. بیشترین اثر حفاظ در کاهش مؤلفه نوترونی مشاهده شد، در حالی که مؤلفه گاما به دلیل تولید ثانویه و پراکندگی، رفتار پیچیده‌تری نشان داد. این نتایج تأکید می‌کند که برای دستگاه‌های IECF، تحلیل هم‌زمان نوترون و گاما و بررسی مکانی دز، روش مناسب‌تری برای ارزیابی کارایی حفاظ نسبت به بررسی تک‌نقطه‌ای است. همان‌گونه که در شکل ۴ مشاهده می‌شود، بیشتر باقیمانده‌های نرمال‌شده در محدوده $\pm 2\sigma$ قرار دارند و خطای نسبی نتایج عمدتاً در بازه قابل قبول باقی مانده است. این موضوع نشان می‌دهد که نتایج شبیه‌سازی از پایداری آماری مناسبی برای تحلیل مکانی دز برخوردارند.

برای استخراج نتایج شکل ۴، باقیمانده نرمال‌شده و خطای نسبی به‌ترتیب از روابط زیر محاسبه شدند

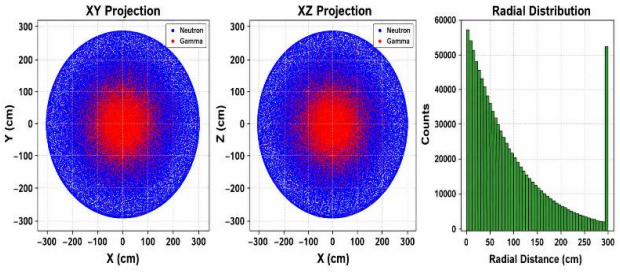
$$R_i = \frac{D_{sim,i} - D_{exp,i}}{\sqrt{u_{exp,i}^2 + u_{sim,i}^2}} \qquad (6)$$

$$\text{Relative Error (\%)} = \frac{D_{sim,i} - D_{exp,i}}{D_{exp,i}} \times 100 \qquad (7)$$

که در آن $D_{sim,i}$ و $D_{exp,i}$ به‌ترتیب دز شبیه‌سازی‌شده و دز تجربی در نقطه i هستند و $u_{sim,i}$ و $u_{exp,i}$ عدم‌قطعیت‌های متناظر آن‌ها را نشان می‌دهند.



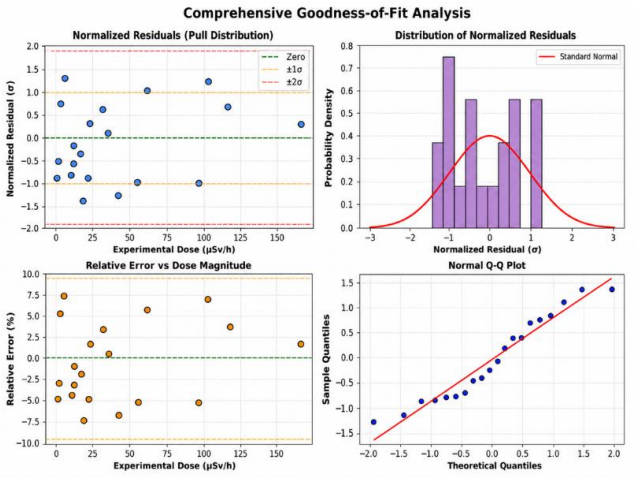
شکل ۲. مقایسه نرخ دز نوترون و گاما پیش و پس از حفاظ‌گذاری و تغییرات فاکتور کاهش حفاظ در فواصل مختلف از منبع.



شکل ۳. تصویر توزیع مکانی نوترون و گاما در صفحه‌های مختلف و توزیع شعاعی شمارش ذرات در اطراف دستگاه IR-IECF . هیستوگرام شعاعی مربوط به مجموع ذرات نوترون و گاما است.

نتیجه گیری

در این پژوهش، توزیع مکانی نرخ دز نوترون و گاما و کارایی حفاظ پرتوی دستگاه IR-IECF با استفاده از شبیه‌سازی مونت‌کارلوی Geant4 بررسی شد. نتایج نشان داد که میدان تابشی اطراف دستگاه ماهیت مختلط نوترون–گاما دارد و مؤلفه نوترونی در بیشتر نقاط غالب است. مقایسه حالت‌های پیش و پس از حفاظ‌گذاری نشان داد که حفاظ مورد استفاده نرخ دز نوترون را در بیشتر نقاط به‌طور قابل توجهی کاهش می‌دهد و در برخی موقعیت‌ها فاکتور کاهش به چند ده برابر می‌رسد. دز گاما نیز کاهش یافت، اما به دلیل تولید گامای ثانویه و پراکندگی، رفتار مکانی پیچیده‌تری نشان داد. این نتایج بیانگر آن است که نقشه‌برداری مکانی دز، نسبت به ارزیابی تک‌نقطه‌ای، دید دقیق‌تری از عملکرد حفاظ و نواحی دارای نشتی پرتوی فراهم می‌کند.



شکل ۴. تحلیل باقیمانده‌ها و خطای نسبی برای بررسی سازگاری آماری نتایج شبیه‌سازی.

مرجع‌ها

[1] Hirsch, R. L. (1967). Inertial-electrostatic confinement of ionized fusion gases. *Journal of Applied Physics*, *38*(11), 4522–4534. https://doi.org/10.1063/1.1709162

[2] Agostinelli, S., Allison, J., Amako, K., Apostolakis, J., Araujo, H., Arce, P., ... Zschiesche, D. (2003). Geant4—a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*, *506*(3), 250–303. https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8

[3] Allison, J., Amako, K., Apostolakis, J., Arce, P., Asai, M., Aso, T., ... Yoshida, H. (2016). Recent developments in Geant4. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*, *835*, 186–225. https://doi.org/10.1016/j.nima.2016.06.125

[4] ICRP, 1991 Recommendations of the International Commission on Radiological Protection, ICRP Publication 60, Annals of the ICRP, 21(1–3), 1991.

اندازه‌گیری غیرمخرب ضخامت و چگالی نئوپان با سامانه عبوری پرتوی گامای Am-241: مطالعه تجربی و اعتبارسنجی مونت‌کارلو

نعمت الله، حیدرلو[۱،*]؛ محمد، محمدزاده[۱]؛ فاطمه، کاظم‌تبریزی[۱]

[۱] گروه مهندسی پرتوپزشکی، دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران

*نویسنده مسئول: n_heidarloo@sbu.ac.ir

چکیده

اندازه‌گیری دقیق و غیرمخرب ضخامت نئوپان از الزامات مهم در کنترل کیفیت و پایش فرآیندهای تولید در صنایع محصولات چوبی به شمار می‌رود. در این پژوهش، قابلیت یک سامانه عبوری پرتوی گامای چشمه ^{241}Am با انرژی ۵۹/۵۴ کیلوالکترون‌ولت و آشکارساز سوسوزن NaI(Tl) برای تعیین ضخامت و برآورد چگالی نئوپان ارزیابی شد. سیزده نمونه با ضخامت‌های ۲/۹۰ تا ۳۷/۳۴ میلی‌متر به‌صورت تجربی اندازه‌گیری شدند و هندسه سامانه با استفاده از کد مونت‌کارلوی MCNPX شبیه‌سازی گردید. منحنی کالیبراسیون تجربی انطباق بسیار مطلوبی با مدل خطی نشان داد (R^2 = ۰/۹۹۹۷) و میانگین خطای اندازه‌گیری برابر ۱/۱۲ درصد بود. مقایسه نتایج تجربی و شبیه‌سازی اختلاف ۱/۲۷ درصد را نشان داد که بیانگر توافق مناسب میان مدل و سامانه می‌باشد. یافته‌های این پژوهش نشان داد که روش عبوری پرتوی گاما ظرفیت کافی برای پیاده‌سازی به‌عنوان ابزاری دقیق، سریع و غیرمخرب در پایش برخط ضخامت و چگالی نئوپان در فرآیندهای تولید محصولات چوبی را دارا می‌باشد.

واژه‌های کلیدی: *عبور پرتوی گاما، نئوپان، تخمین ضخامت، شبیه‌سازی مونت‌کارلو.*

Nondestructive Thickness and Density Measurement of Particleboard Using Am-241 Gamma-Ray Transmission: Experimental Study and Monte Carlo Validation

Nematollah, Heidarloo[1,*]; Mohammad, Mohammadzadeh [1]; Fatemeh, Kazemtabrizi [1]

[1] Department of Medical Radiation Engineering, University of Shahid Beheshti, Tehran, Iran.
** Corresponding author Email: n_heidarloo@sbu.ac.ir*

Abstract

Accurate and nondestructive measurement of chipboard thickness is essential for quality control and process monitoring in the wood products industry. In this study, the performance of a gamma-ray transmission system consisting of a 59.54 keV ^241Am source and a NaI(Tl) scintillation detector was evaluated for thickness measurement and density estimation of chipboard. Thirteen chipboard samples with thicknesses ranging from 2.90 to 37.34 mm were measured experimentally, and the measurement geometry was simulated using the MCNPX Monte Carlo code. The experimental calibration curve showed excellent agreement with a linear model (R^2 = 0.9997), and the mean measurement error was 1.12%. Comparison between the experimental and simulated results showed a difference of 1.27%, indicating good agreement between the model and the experimental system. The results demonstrate that the proposed gamma-ray transmission technique has the potential to serve as an accurate, rapid, and nondestructive method for inline monitoring of chipboard thickness and density in wood product manufacturing.

***Keywords**: Gamma-ray transmission, Chipboard, Thickness measurement, Monte Carlo simulation.*
PACS No. 28.20.-v

مقدمه

نئوپان[1] یکی از پرکاربردترین فرآورده‌های چوبی مهندسی‌شده است که در صنایع مبلمان، ساختمان و دکوراسیون داخلی به‌طور گسترده مورد استفاده قرار می‌گیرد [۱, ۲]. خواص مکانیکی و کیفیت نهایی این محصول به پارامترهایی نظیر ضخامت و چگالی وابسته است؛ ازاین‌رو، اندازه‌گیری دقیق و سریع این پارامترها در خطوط تولید از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است [۳, ٤]. در ساختار متداول نئوپان، سطوح خارجی دارای چگالی بیشتری نسبت به لایه مرکزی هستند و هرگونه تغییر در توزیع چگالی یا ضخامت می‌تواند بر استحکام و عملکرد نهایی محصول تأثیر بگذارد [۳, ٤].

روش‌های متداول اندازه‌گیری ضخامت و چگالی دارای محدودیت‌هایی هستند [۲]. روش‌های وزنی و آزمایشگاهی اگرچه از دقت مناسبی برخوردارند، اما ماهیتی مخرب داشته و برای پایش برخط فرآیند تولید مناسب نیستند [۲]. همچنین ابزارهای تماسی نظیر کولیس تنها ضخامت را اندازه‌گیری می‌کنند و قادر به تعیین چگالی یا تغییرات داخلی ماده نیستند [۵]. روش‌های پیشرفته‌تری مانند توموگرافی کامپیوتری[2] پرتوی ایکس نیز اگرچه اطلاعات دقیقی از ساختار داخلی ارائه می‌دهند، اما هزینه بالا و پیچیدگی عملیاتی، کاربرد آن‌ها را در محیط‌های صنعتی محدود می‌سازد [۵, ٦]. بنابراین توسعه روش‌های غیرمخرب، سریع و قابل استفاده در خطوط تولید همچنان مورد توجه پژوهشگران و صنعت قرار دارد.

یکی از روش‌های مناسب برای این منظور، اندازه‌گیری تضعیف پرتوی گامای کم‌انرژی در هنگام عبور از نئوپان است. شدت پرتوی عبوری تابعی از ضخامت و چگالی ماده بوده و می‌تواند برای تعیین این پارامترها مورد استفاده قرار گیرد [۷, ۸]. مطالعات پیشین عمدتاً بر طراحی و به‌کارگیری سامانه‌های پرتوی گاما برای اندازه‌گیری چگالی چوب و فرآورده‌های چوبی متمرکز بوده‌اند [۷, ۸]. در این پژوهش، با تمرکز بر اندازه‌گیری غیرمخرب ضخامت نئوپان و اعتبارسنجی نتایج به کمک شبیه‌سازی مونت‌کارلو، کارایی سامانه عبوری پرتو گاما مبتنی بر چشمه ^{241}Am مورد ارزیابی قرار گرفت.

مواد و روش‌ها

برای اندازه‌گیری ضخامت از یک سامانه عبوری پرتوی گاما شامل چشمه ^{241}Am با فعالیت ۲۵۰ mCi و آشکارساز سوسوزن NaI(Tl) سه اینچی استفاده شد. چشمه ^{241}Am به دلیل انتشار فوتون‌های ۵۹/۵٤ keV انتخاب گردید؛ انرژی‌ای که به علت تفوق برهم‌کنش فوتوالکتریک در مواد کم‌چگال نظیر نئوپان، حساسیت بالایی نسبت به تغییرات ضخامت و چگالی فراهم می‌کند [۹]. چشمه و آشکارساز در آرایش باریکه[3] و با فاصله ثابت ٤۰ cm از یکدیگر قرار گرفتند. به‌منظور کاهش سهم فوتون‌های پراکنده، از کولیماتورهای سربی در مسیر باریکه استفاده شد. سیزده نمونه نئوپان با ضخامت‌های ۲/۹۰ تا ۳۷/۳٤ mm مورد بررسی قرار گرفتند. مبنای تعیین ضخامت و چگالی، قانون تضعیف نمایی پرتو گاما بود [۹]:

$$(۱) I = I_o e^{-\mu t}$$

که در آن I_0 و I به ترتیب شدت پرتو فرودی و عبوری، μ ضریب تضعیف خطی و t ضخامت نمونه است. طیف‌های انرژی به مدت ۱۲۰ ثانیه ثبت شدند و تعداد شمارش‌های مورد استفاده در محاسبات از انتگرال‌گیری ناحیه متناظر با قله فوتوالکتریک ۵۹/۵٤ keV در طیف انرژی استخراج شد. ضریب تضعیف جرمی ماده نیز با استفاده از داده‌های پایگاه XCOM محاسبه گردید [۱۰].

به‌منظور اعتبارسنجی نتایج تجربی، هندسه سامانه اندازه‌گیری در کد MCNPX v2.6 شبیه‌سازی شد [۱۱]. در شبیه‌سازی، چشمه، کولیماتورها، نمونه و آشکارساز مطابق شرایط آزمایشگاهی مدل‌سازی شدند و برای هر حالت، ۳×۱۰^{۸} تاریخچه ذره اجرا شد تا عدم قطعیت آماری کمتر از ۱٪ حاصل شود. در نهایت، مقادیر تجربی و شبیه‌سازی با استفاده از روش حداقل مربعات وزن‌دار[4] تحلیل و منحنی‌های کالیبراسیون استخراج شدند [۱۲].

---

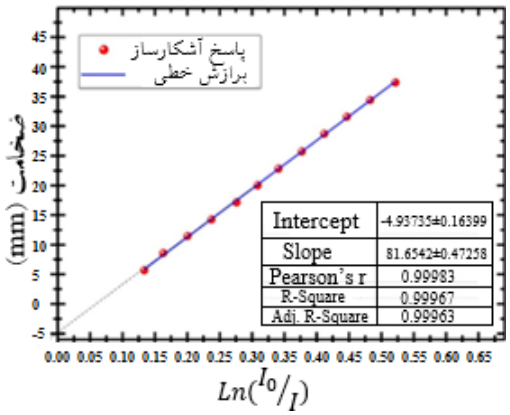
1 chipboard
2 computed tomography
3 narrow beam
4 weighted least-squares

نتایج و بحث

کالیبراسیون و ارزیابی ضخامت

منحنی کالیبراسیون ضخامت حاصل از رگرسیون حداقل مربعات وزن‌دار در شکل ۱ ارائه شده است. رابطه به‌دست‌آمده دارای ضریب تعیین R^2=۰/۹۹۹۷ بود که بیانگر خطی بودن بسیار مناسب پاسخ سامانه در بازه ضخامت ۲/۹۰ تا ۳۷/۳٤ mm است. این نتیجه نشان می‌دهد که تضعیف فوتون‌های ۵۹/۵٤ keV در نمونه‌های نئوپان با مدل نمایی تضعیف مورد استفاده در این پژوهش سازگاری بسیار خوبی دارد.

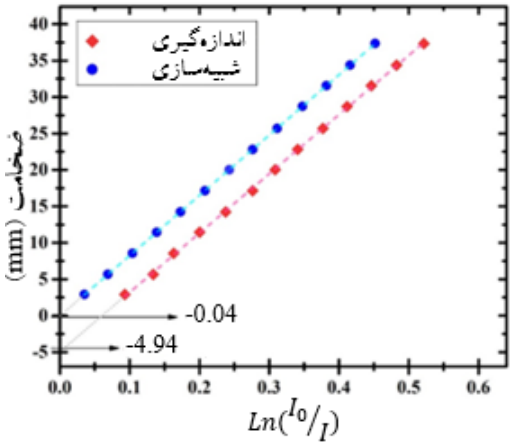
مقایسه ضخامت‌های پیش‌بینی‌شده با مقادیر مرجع نشان داد که میانگین خطای نسبی مطلق برای نمونه‌های ضخیم‌تر از ۵ mm برابر ۱/۱۲٪ است. کمترین و بیشترین خطا در این محدوده به‌ترتیب ۰/۰٤٪ و ۳/۷٤٪ به‌دست آمد. دقت حاصل با نتایج گزارش‌شده در مطالعات پیشین مبتنی بر تضعیف پرتو گاما برای مواد چوبی همخوانی مناسبی دارد [۷, ۸].



شکل ۱ : منحنی کالیبراسیون ضخامت نئوپان برحسب $\ln(I_0/I)$.

اعتبارسنجی مدل مونت‌کارلو و توسعه محدوده اندازه‌گیری

به‌منظور اعتبارسنجی نتایج تجربی، منحنی کالیبراسیون حاصل از شبیه‌سازی MCNPX v2.6 با داده‌های تجربی مقایسه شد (شکل ۲). نتایج نشان داد که اختلاف شیب دو منحنی تنها ۱/۲۷٪ است که بیانگر توافق مناسب میان مدل شبیه‌سازی و سامانه تجربی است. اگرچه اختلاف ثابتی در عرض از مبدأ مشاهده شد، اما این اختلاف مستقل از ضخامت بوده و به‌صورت یک تصحیح سیستماتیک در نظر گرفته شد. توافق مناسب بین نتایج تجربی و شبیه‌سازی نشان می‌دهد که مدل توسعه‌یافته قادر است رفتار سامانه را با دقت قابل قبولی بازتولید کند و برای بررسی شرایطی فراتر از محدوده اندازه‌گیری آزمایشگاهی مورد استفاده قرار گیرد.



شکل ۲ : مقایسه منحنی‌های کالیبراسیون تجربی و شبیه‌سازی MCNPx2.6.

نتیجه گیری

در این پژوهش، یک سامانه غیرمخرب مبتنی بر عبور پرتوی گامای ^{241}Am و آشکارساز NaI(Tl) برای تعیین ضخامت و برآورد چگالی نئوپان مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج نشان داد که منحنی کالیبراسیون حاصل از اندازه‌گیری‌های تجربی از انطباق بسیار مطلوبی با مدل خطی برخوردار است. و میانگین خطای نسبی مطلق برای نمونه‌های ضخیم‌تر از ۵ میلی‌متر برابر ۱/۱۲٪ به‌دست آمد. همچنین مقایسه داده‌های تجربی با نتایج شبیه‌سازی MCNPX، تطابق مناسبی را نشان داد؛ به‌طوری‌که اختلاف شیب منحنی‌های کالیبراسیون تنها ۱/۲۷٪ بود. مجموعه نتایج حاصل بیانگر آن است که روش پیشنهادی از دقت و قابلیت مناسبی برای اندازه‌گیری ضخامت و برآورد چگالی نئوپان برخوردار بوده و می‌تواند به‌عنوان ابزاری غیرمخرب در کاربردهای کنترل کیفیت و پایش فرآیندهای تولید مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع‌ها

[۱] Lee SH, Lum WC, Boon JG, Kristak L, Antov P, Pędzik M, et al. Particleboard from agricultural biomass and recycled wood waste: A review. Journal of Materials Research and Technology. 2022;20:4630-58.
[۲] Rowell RM. Handbook of wood chemistry and wood composites: CRC press; 2005.
[۳] Loxton C. Resin distribution in medium density fiberboard. Quantification of UF resin distribution on blowline-and dry-blended MDF fiber and panels. Wood and Fiber Science. 2007.
[۴] Pędzik M, Auriga R, Kristak L, Antov P, Rogoziński T. Physical and mechanical properties of particleboard produced with addition of walnut (Juglans regia L.) wood residues. Materials. 2022;15(4):1280.
[۵] Laskowska A. Characteristics of the pressing process and density profile of MUPF-bonded particleboards produced from waste plywood. Materials. 2024;17(4):850.
[۶] Witomski P, Krajewski A, Narojek T. Measurements of wood density using X-ray computer tomography. Faculty of Wood Technology, Warsaw University of Life Scieces–SGGW (WULS-SGGW). 201۰
[۷] Beigzadeh AM, Vaziri MRR, Soltani Z, Afarideh H. Design and improvement of a simple and easy-to-use gamma-ray densitometer for application in wood industry. Measurement. 2019;138:157-61.
[۸] Malan F, Marais P. Direct gamma ray densitometry of wood. South African Forestry Journal. 1991;157(1):1-6.
[۹] Knoll GF. Radiation detection and measurement: John Wiley & Sons; 2010.
[۱۰] Berger M. XCOM: photon cross sections database. http://www nist gov/pml/data/xcom/index cfm. 2010.
[۱۱] Pelowitz D. MCNPX user's manual, version 2.6. 0, LA-CP-07-1473. Los Alamos Natl Lab Los Alamos. 2008.
[۱۲] Bevington PR, Robinson DK. Data reduction and error analysis for the physical sciences McGraw-Hill. New York. 1969;19692:235-42.

محاسبه افت انرژی و اتلاف توان باریکه الکترون در پنجره خروجی یک شتابدهنده صنعتی 800 کیلو الکترون ولت

طالبی ، سارا[1] ؛ قاسمی ، بهجت[1] ؛ قاسمی، فرشاد[2] ؛ آقایان، عبدالمهدی[2]

[1] دانشکده مهندسی هسته‌ای دانشگاه شهید بهشتی ، تهران

[2] پژوهشکده فیزیک و شتابگر، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، تهران

چکیده

در یک شتابدهنده های صنعتی الکترون، لازم است تا باریکه الکترون تولید شده و شتاب گرفته در خلاء، در انتها خارج شده و به نمونه های مورد نظر برخورد کند. برای این منظور از یک فویل نازک استفاده می‌شود. استحکام زیاد برای تحمل اختلاف فشار، انتقال حرارت خوب و افت انرژی کم، مهمترین ویژگی این پنجره خروجی است. در این مقاله . توزیع توان تلف‌شده در فویل‌هایی با ضخامت‌های مختلف و طیف انرژی باریکه پس از عبور از فویل برای باریکه الکترون با انرژی0/8 مگاالکترون‌ولت و جریان 30 میلی‌آمپر تولیدشده توسط یک شتابدهنده صنعتی الکترواستاتیک، با استفاده از کد مونت کارلو لو MCNP محاسبه شده است. محاسبه گردید. نتایج نشان می‌دهد که این کمیت ها در شتابدهنده های صنعتی انرژی پایین از چالش بیشتر برخوردار است. با افزایش ضخامت فویل، توان تلف‌شده به طور خطی افزایش یافته‌است. این یافته‌ها برای بهینه‌سازی طراحی فویل خروجی و افزایش بازده شتابدهنده بخصوص برای کاربردهایی مانند تصفیه فاضلاب با پرتودهی الکترون حائز اهمیت است.

Calculation of energy loss and power dissipation of the electron beam in the output window of an 800 keV industrial accelerator

Sara, Talebi[1]; Ghasemi, Behjat[1]; Ghasemi, Farshad[2] ; Aghayan, AbdulMahdi[2]

[1] *Department of Nuclear Engineering, University of Shahid Beheshti, Tehran*

[2] *Department of Physics and Accelerator, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran*

Abstract

In industrial electron accelerators, it is necessary for the electron beam, which is generated and accelerated under vacuum conditions, to exit the accelerator at the end of the beamline and irradiate the target samples. For this purpose, a thin foil is used as the exit window. High mechanical strength to withstand the pressure differential, good thermal conductivity, and low energy loss are the most important characteristics of this exit window. In this study, the distribution of power dissipated in foils with different thicknesses and the energy spectrum of the electron beam after passing through the foil were calculated for an 0.8 MeV electron beam with a current of 30 mA generated by an industrial electrostatic accelerator, using the MCNP Monte Carlo code. The results indicate that these parameters pose greater challenges in low-energy industrial accelerators. Furthermore, the dissipated power increases linearly with increasing foil thickness. These findings are important for optimizing the design of the exit foil and improving accelerator efficiency, particularly in applications such as electron beam wastewater treatment.

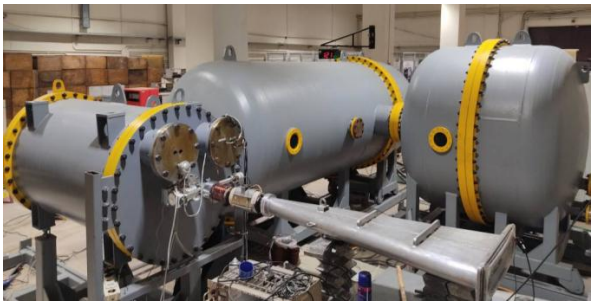
مقدمه

شتابدهنده‌های ذرات در ابتدا به‌عنوان تجهیزاتی تخصصی در حوزه فیزیک شناخته می‌شدند، اما امروزه با گسترش کاربرد آن‌ها در علوم، صنعت و پزشکی، ، انواع مختلفی از شتاب‌دهنده‌ها در زمینه‌های متنوع مورد استفاده قرار گرفته‌اند. هدف از توسعه فناوری‌های پیشرفته، تولید محصولات باکیفیت و مقرون‌به‌صرفه از طریق فرآیندهای سازگار با محیط زیست و با حداقل پسماند است. در این میان، روش‌های هسته‌ای نقش مهمی در بهینه‌سازی فرآیندهای صنعتی، آزمون‌های غیرمخرب، آنالیز مواد، عمل‌آوری با پرتوهای پرانرژی و ارزیابی اثرات زیست‌محیطی توسعه صنعتی ایفا می‌کنند.

شتاب‌دهنده‌های الکترونی از دهه ۱۹۳۰ توسعه یافته‌اند و امروزه به دلیل قابلیت‌های گسترده، در کاربردهای متنوع صنعتی مورد استفاده قرار می‌گیرند. انتخاب نوع شتاب‌دهنده، از جمله سیستم‌های DC و رادیوفرکانسی، به انرژی و توان باریکه الکترونی مورد نیاز هر کاربرد بستگی دارد[1].

اولین بار شرکت Radiation Dynamics موفق به توسعه نوعی شتاب‌دهنده کوچک با توان بالا شد که به دینامیترون معروف است. شتاب‌دهنده‌های الکترونی از نوع دینامیترون با حداقل ولتاژ ۰/۴ و حداکثر ۵ مگاولت و توان باریکه الکترونی تا ۲۵۰ کیلووات، با استفاده از گاز عایق SF_6 تولید شده‌اند[1]. یکی از مهم‌ترین کاربردهای این شتاب‌دهنده‌ها، تصفیه فاضلاب است. به‌ویژه در دوران شیوع ویروس کرونا، استفاده از فناوری شتاب‌دهنده الکترونی، به‌ویژه شتاب‌دهنده‌های دینامیترون، به عنوان روشی نوین و مؤثر برای تصفیه فاضلاب مورد توجه ویژه قرار گرفت.

نمونه بومی سازی شده شتابدهنده دینامیترون در پژوهشکده فیزیک و شتابگر پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای در شکل نشان داده شده است. این شتابدهنده دارای توان 50 kW است که قادر است باریکه الکرتون را تا انرژی 1 MeV شتاب دهد.



شکل 1 شتابدهنده دینامیترون ساخته شده در پژوهشکده فیزیک وشتابگر پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای

کاربرد شتابدهنده الکترون در تصفیه فاضلاب

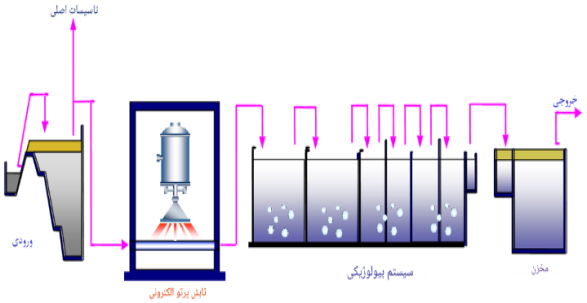
در تصفیه‌خانه‌های فاضلاب معمول، حذف ناقص مواد شیمیایی پایدار و میکروآلاینده‌های سمی می‌تواند موجب آلودگی منابع آبی و تهدیدی برای سلامت انسان و محیط زیست شود، حتی در غلظت‌های بسیار پایین. پژوهش‌های اخیر، کاربرد فرایندهای اکسیداسیون پیشرفته (AOP) را برای حذف مؤثر این آلاینده‌ها نشان داده‌اند، که در آن‌ها از روش‌هایی مانند تابش پرتوهای یونیزان، نظیر باریکه الکترون یا پرتو گاما، برای فعال‌سازی واکنش‌های شیمیایی استفاده می‌شود[2].

طبق گزارش وزارت انرژی آمریکا در سال ۲۰۱۵، هرچند فناوری پرتو الکترونی در کاهش آلودگی‌های آب مؤثر بوده، اما تجاری‌سازی آن با موانع فنی روبرو بوده است. تجهیزات پرتودهی در مقیاس بزرگ توسعه نیافته و هزینه این سیستم‌ها نسبت به روش‌های مرسوم بالا بود. همچنین، آشنایی صنعت محیط زیست با این فناوری کم بوده و برای تجاری‌سازی گسترده، به شتاب‌دهنده‌های الکترونی قدرتمند نیاز بود.

در سال‌های اخیر، فناوری پرتو الکترونی (EB) به عنوان روشی نوین و سازگار با محیط زیست برای تصفیه فاضلاب، به ویژه در چین، رشد زیادی داشته است. اولین مرکز پایلوت این فناوری در سال ۲۰۱۷ با ظرفیت تصفیه روزانه ۱۵۰۰ مترمکعب در یک کارخانه نساجی در شهر Jinhua راه‌اندازی شد و توانست کارایی این روش را در محیط‌های صنعتی به خوبی نشان دهد[3].

توسعه فناوری پرتو الکترونی با سرعت بیشتری ادامه یافت و در ژوئن ۲۰۲۰، بزرگ‌ترین تأسیسات تصفیه فاضلاب صنعتی با این فناوری و ظرفیت ۳۰٬۰۰۰ مترمکعب در روز در چین افتتاح شد. این رویداد نقطه عطفی در کاربرد صنعتی این روش است و آمادگی زیرساختی برای استفاده گسترده‌تر از آن را نشان می‌دهد[4].

در ادامه این مسیر، چین در سال ۲۰۲۱ نخستین مرکز تصفیه فاضلاب پزشکی در آسیا را نیز با بهره‌گیری از فناوری پرتو الکترونی و ظرفیت ۴۰۰ مترمکعب در روز راه‌اندازی کرد. این پروژه‌ها همزمان با افزایش توجه به مسأله بازچرخانی آب و رشد فناوری، مسیر را برای استفاده پایدارتر از منابع آبی هموار کرده‌اند. طی شش سال گذشته، بیش از ۱۲ مرکز پرتودهی فاضلاب با استفاده از شتاب‌دهنده‌ها در چین به بهره‌برداری رسیده و در حال حاضر ۷ مرکز دیگر نیز در دست تجهیز و راه‌اندازی است. این روند رشد، مؤید جایگاه رو به گسترش فناوری پرتو الکترونی در مدیریت هوشمند منابع آب و فاضلاب در سطح بین‌المللی، به‌ویژه در شرق آسیاست.



شکل 2 فرآیند تصفیه فاضلاب با استفاده از پرتودهی

محاسبه افت انرژی و اتلاف توان باریکه در پنجره تیتانیومی

باریکه شتاب‌گرفته پس از خروج از تیوب شتاب‌دهی وارد هورن جاروب از جنس فولاد ضدزنگ می‌شود و تحت میدان مغناطیسی نوسانی قرار می‌گیرد که باعث انحراف سریع آن در زاویه‌ای خاص (معمولاً تا ±۳۰ درجه) می‌شود. سپس این باریکه جاروب‌شده از پنجره نازک تیتانیومی در انتهای هورن عبور کرده و مواد عبوری از زیر آن را بمباران می‌کند. در همه انواع شتاب‌دهنده‌ها، برای جلوگیری از تداخل باریکه با هوای داخل اجزا و جلوگیری از اتلاف آن، لازم است فضای درونی شتاب‌دهنده با استفاده از پمپ‌های خلأ تا حد مناسبی تخلیه شود[5].



شکل 3 تصویر هورن

پنجره خروجی پرتو الکترونی با ضخامت ۱۰ تا ۱۰۰ میکرومتر، یکی از اجزای حیاتی و در عین حال شکننده خط پرتو و سامانه خلأ است. این پنجره ممکن است در اثر تابش مداوم، برخورد مواد یا شرایط محیطی نامناسب دچار آسیب شود. عبور پرتو از پنجره باعث تحریک اتم‌های آن و انتقال انرژی به فویل می‌شود که افزایش دما و در نهایت سوختن فویل را به دنبال دارد.



شکل 4 تصویر اثر پرتو بر پنجره خروجی در اثر جذب باریکه الکترونی

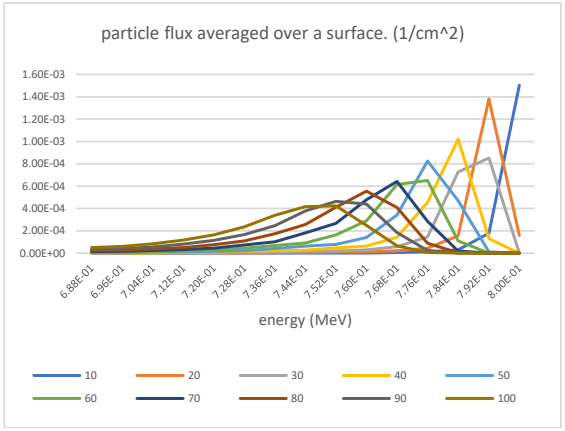
میزان افت انرژی الکترون در برخوردها، به انرژی الکترون و دانسیته الکترونی محیط جاذب وابسته است که بر واحد گرم و مجذور سانتی‌متر، توان ایستادگی جرمی نامیده می‌شود. توان ایستانندگی جرمی برخوردی بر حسب $MeV cm^2 g^{-1}$ تعریف می‌شود:

$$\frac{1}{\rho}\left(\frac{dE}{dx}\right)_{col} = 0.1535\frac{1}{\beta^2}\left(\frac{Z}{A}\right)\left\{ln\left[\frac{\tau^2(\tau+2)}{2\left(\frac{I}{m_e c^2}\right)^2}\right] + F(\tau) - \delta\right\} MeV\ cm^2\ g^{-1}$$

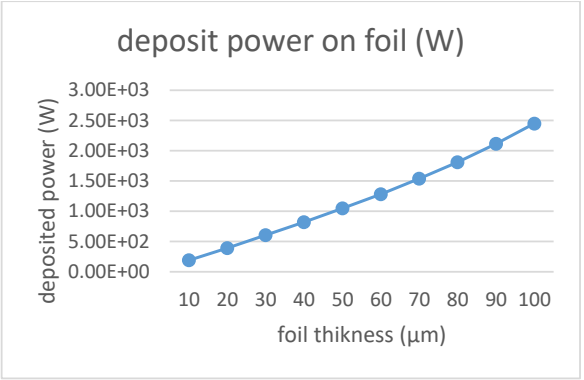
که در آن $F(\tau) = 1-\beta^2+\left[\frac{\tau^2}{8}-(2\tau+1)\ln 2\right]/\tau+1^2$ ؛ $m_e c^2$ انرژی جرم سکون الکترون؛ $\beta = V/c$ انرژی برانگیزش میانگین، $\tau = {}^{T}/_{m_e c^2}$ (T، انرژی جنبشی الکترون) و δ تصحیح اثر چگالی می باشد[5].

شبیه سازی جهت بررسی میزان انرژی جذب شده و تحلیل رفتار حرارتی پنجره تحت تابش باریکه انجام شد. در این پژوهش، ازکد MCNPX برای باریکه الکترونی با انرژی 0/8 MeV و جریان 30mA با پنجره خلا تیتانیومی استفاده شده است. میزان افت انرژی و توان اتلافی باریکه در پنجره تیتانیومی برای ضخامت های 10 تا 100 میکرومترمحاسبه شده است. چشمه به صورت توزیع یکنواخت بر روی تمام سطح پنجره و تک انرژی در نظر گرفته شده است. میزان توان اتلافی بر روی پنجره و افت انرژی باریکه خروجی از پنجره تیتانیومی محاسبه شده است.

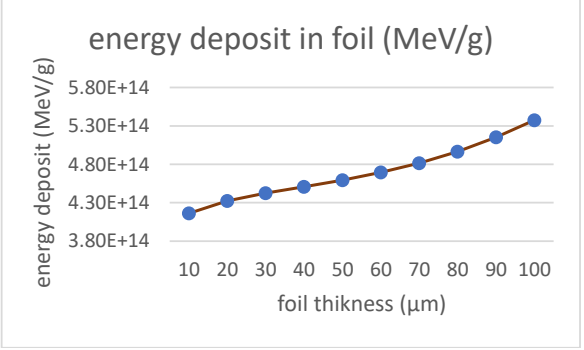
نتایج و بحث



شکل 5 طیف انرژی باریکه خروجی از پنجره تیتانیومی با ضخامت های 10 تا 100 میکرومتر



شکل 6 نمودار افت توان باریکه در ضخامت های مختلف تیتانیوم



شکل 7 نمودار میزان انرژی تلف شده در ضخامت های مختلف تیتانیوم

با توجه به نمودار نمایش داده شـــده در شـــکل 5، انرژی باریکه الکترون 800 کیلوالکترون ولت بعد از عبور از فویل افت می‌کند. هرچه ضخامت فویل افزایش پیدا می کند، میزان افت انرژی باریکه بیشتر شده و متوسط انرژی باریکه خروجی از فویل کمتر می‌شود. همچنین با افزیش انرژی میزان پهن شدگی انرژی بیشتر می‌شود.

شـــکل 6 میزان توان اتلاف شـــده باریکه بر روی پنجره تیتانیومی نمایش داده شـده اسـت. در ضـخامت های بالای فویل میزان توان اتلافی از باریکه در فویل افزایش یافته است.

با توجه به نمودار نشان داده شده در شکل 7، در ضخامتهای بالای فویل مقدار انرژی باقی مانده در فویل بیشتر می شود.

ضـخامت‌های پایین پنجره تیتانیومی، به لحاظ مکانیکی توان تحمل اختلاف فشـار بین خلا درون تجهیزات شـتابدهنده و هوای محیط رو ندارند. گرچه افزایش ضـخامت فویل تیتانیومی، منجر به استحکام مکانیکی بهتر می‌شود، اما باعث اتلاف باریکه خواهدشد. لذا ضـخامت بهینه برای فویل تیتانیومی در حدود 40 تا 50 میکرومتر خواهدبود.

مرجع‌ها

[1] M. Cleland; “ industrial applications of electron accelerators”; physics, 2006.
[2] R. O. Abdel Rahman and Y. T. Hung, ‘Application of ionizing radiation in wastewater treatment: An overview’, Jan. 01, 2020.
[3] ‘China’s First Wastewater Plant Using Radiation Opens | IAEA’. Accessed: Aug. 20, 2023. [Online].
[4] S. Wang, J. Wang, C. Chen, S. He, J. Hu, and Y. Zhang, ‘First full-scale application of electron beam technology for treating dyeing wastewater (30,000 m3/d) in China’, *Radiation Physics and Chemistry*, Jul. 2022,
[5] ‘China Opens Asia’s First Facility to Treat Medical Wastewater Using Electron Beam Technology | IAEA’. Accessed: Aug. 20, 2023.

بررسی تأثیر مواد ترمیمی دندانی بر دوز فوتون ثانویه در درمان با الکترون تراپی

کاراموزیان ، مرضیه[۱]؛ رضایی ، محمدرضا[۲]* ؛طیبی،جواد [۳]؛ زیدآبادی ، مجید[۲] ؛ اتقایی، مرجان [۴]

[۱] دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی هسته‌ای، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران
[۲] عضو هیأت علمی، گروه مهندسی هسته‌ای، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران
[۳] کارشناسی ارشد، گروه مهندسی هسته‌ای، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران
[۴] دانشجوی دکتری، گروه مهندسی هسته‌ای، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران

چکیده

درمان با پرتو الکترون یکی از روش‌های مؤثر برای سرطان‌های ناحیه سر و گردن است. وجود مواد ترمیمی دندانی (مانند آمالگام، سرامکو و اکلیپس) به دلیل چگالی و ترکیب عنصری متفاوت، باعث پراکندگی الکترون و تولید فوتون‌های ثانویه می‌شود .عمق قرارگیری دندان در فانتوم (۳ تا ۷ سانتی‌متر) و انرژی الکترون (۵ تا ۲۰ مگاالکترون‌ولت) نیز بر میزان این اثرات مؤثرند. مطالعات پیشین نشان داده‌اند که مواد با عدد اتمی بالا مانند طلا در اکلیپس، مقطع برهمکنش بیشتری برای تولید فوتون دارند .در این مطالعه با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو کد MCNPX، تأثیر این مواد بر دوز عمقی الکترون و دوز سطحی فوتون ثانویه ارزیابی شد. نتایج نشان می‌دهد که ماده اکلیپس بیشترین تأثیر را داشته و دوز فوتون ثانویه حاصل از آن تا ۹ برابر دوز الکترون است. از این رو اصلاح دزیمتری با در نظر گرفتن نوع ماده ترمیمی در درمان بالینی ضروری است.

واژه های کلیدی: درمان با الکترون، مواد دندانی، شبیه‌سازی مونت کارلو، فوتون ثانویه، دزیمتری.

Impact of Dental Restorative Materials on Secondary Photon Dose in Electron Beam Therapy

Karamozian, Marzieh[۱]; Rezaie, Mohammad Reza[۲]*;Tayebi,Javad [۳]; Zeidabadi ,Majid[۲] ;Atghaie,Marjan [۴]

[۱] *M.Sc. Student , Department of Nuclear Engineering, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran*
[۲] *Faculty Member, Department of Nuclear Engineering, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran*
[۳] *M.Sc. ,Department of Nuclear Engineering, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran*
[۴] *Ph.D. Student ,Department of Nuclear Engineering, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran*

Abstract

Electron beam therapy is one of the effective methods for head and neck cancers. The presence of dental restorative materials (such as amalgam, Ceramco, and Eclipse) due to their different density and elemental composition causes electron scattering and production of secondary photons. The depth of the tooth in the phantom (۳ to ۷ cm) and the electron energy (۵ to ۲۰ MeV) also affect these effects. Previous studies have shown that materials with high atomic number, such as gold in Eclipse, have a larger interaction cross-section for photon production. In this study, using Monte Carlo simulation (MCNPX code), the effect of these materials on electron depth dose and secondary photon surface dose was evaluated. The results show that Eclipse material has the greatest impact, and the secondary photon dose from it is up to ۹ times higher than the electron dose. Therefore, dosimetric correction considering the type of restorative material is necessary in clinical therapy.

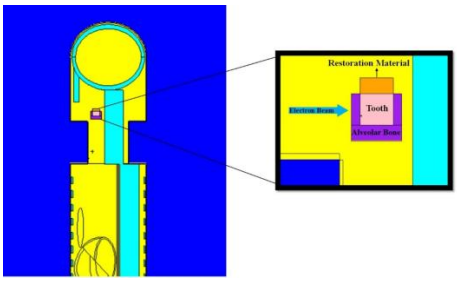
***Keywords**: Electron Therapy, Dental Materials, Monte Carlo Simulation, Secondary Photon, Dosimetry.*
PACS No. ۲۸

مقدمه

درمان با پرتو الکترون به دلیل افت سریع دوز در عمق، روشی مؤثر برای تومورهای سطحی ناحیه سر و گردن است [۱،۴]. با این حال، وجود ناهمگنی‌های بافتی مانند دندان‌های ترمیم شده با مواد فلزی، می‌تواند توزیع دوز را به شدت تحت تأثیر قرار دهد [۲،۵]. مواد ترمیمی دندانی شامل آمالگام، سرامکو و اکلیپس به دلیل چگالی بالا و ترکیب عناصر با عدد اتمی متفاوت، باعث پراکندگی الکترون و تولید فوتون‌های ثانویه می‌شوند [۵،۸]. این پدیده هم بر دوز رسیده به تومور و هم بر دوز بافت‌های سالم اطراف اثر می گذارد و ممکن است عوارض جانبی را افزایش دهد [۲،۹].مطالعات پیشین نشان داده‌اند که نوع ماده ترمیمی نقش مهمی در میزان پراکندگی دارد [۵،۹]. به عنوان مثال، آمالگام حاوی نقره و قلع، سرامکو حاوی سیلیسیم و آلومینیوم، و اکلیپس حاوی طلا و پالادیم با چگالی بسیار بالا است [۸]. هر یک از این مواد برهم‌کنش متفاوتی با الکترون‌های پرانرژی (۵ تا ۲۰ مگاالکترون‌ولت) دارند [۴،۱۰]. به ویژه ماده اکلیپس به دلیل عدد اتمی بالای طلا (۷۹)، مقطع برهم‌کنش بیشتری برای تولید فوتون‌های ترمزی دارد [۸،۱۰]. همچنین عمق قرارگیری دندان در فانتوم (از ۳ تا ۷ سانتی‌متر) می‌تواند بر میزان دوز دریافتی تأثیر بگذارد [۵،۹].با وجود پژوهش‌های انجام شده، مطالعات محدودی به مقایسه همزمان این سه ماده از نظر دوز عمقی الکترون، توزیع دوز سطحی و به ویژه دوز فوتون ثانویه در اندام‌های مختلف پرداخته‌اند [۲،۹]. در این پژوهش، با استفاده از شبیه‌سازی مونت‌کارلو کد MCNPX و فانتوم MIRD، تأثیر آمالگام، سرامکو و اکلیپس بر دزیمتری الکترون و فوتون ثانویه برای انرژی های ۵، ۱۰، ۱۵ و ۲۰ مگاالکترون‌ولت و در اعماق مختلف دندان بررسی شده است [۵،۱۱،۱۳]. نتایج این مطالعه می‌تواند به اصلاح محاسبات دزیمتری در درمان بالینی بیماران دارای ترمیم‌های دندانی کمک کند [۴،۷،۱۰].

روش کار

شبیه‌سازی با کد MCNPX و فانتوم MIRD انجام شد. چشمه الکترون به صورت سطحی به ابعاد ۲×۲ سانتی‌متر مربع در نظر گرفته شد که به طور عمود بر ناحیه دندانی فانتوم تابیده می‌شود. عمق دندان در فانتوم ۴ سانتی‌متر فرض شد. ترکیب مواد دندان (شامل مینا و عاج) و سه ماده ترمیمی شامل آمالگام، سرامکو و اکلیپس به این شرح است: در آمالگام عناصر اصلی نقره (۶۹/۳٪)، قلع (۱۷/۹٪)، مس (۱۱/۸٪) و روی (۱٪) وجود دارد .**سرامکو** عمدتاً از سیلیسیم (۱۵/۲۴٪)، آلومینیوم (۱۴/۶۵٪)، پتاسیم (۷/۰۷٪) و سدیم (۸/۳۲٪) تشکیل شده است .**اکلیپس** حاوی طلا (۵۲٪)، پالادیم (۳۷/۵٪)، ایندیم (۳٪) و رنیوم (۰/۵٪) است. همچنین **دندان طبیعی** (مینا و عاج) شامل کلسیم، فسفر، اکسیژن، کربن و هیدروژن می‌باشد. انرژی الکترون در چهار سطح ۵، ۱۰، ۱۵ و ۲۰ مگاالکترون‌ولت تنظیم گردید. برای محاسبه دوز عمقی الکترون از تالی F۶ (مقدار انرژی بر حسب مگاالکترون‌ولت بر گرم) و برای دوز سطحی فوتون از تالی نوع ۱ (pedep) استفاده شد. تعداد ذرات اولیه ۱۰میلیون در نظر گرفته شد تا خطای آماری زیر ۱٪ حفظ شود. در شکل ۱، فانتوم شبیه سازی نشان داد ه شده است.

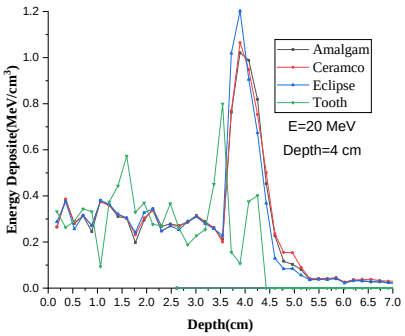


شکل۱: فانتوم شبیه سازی در کد هسته ای MCNPX

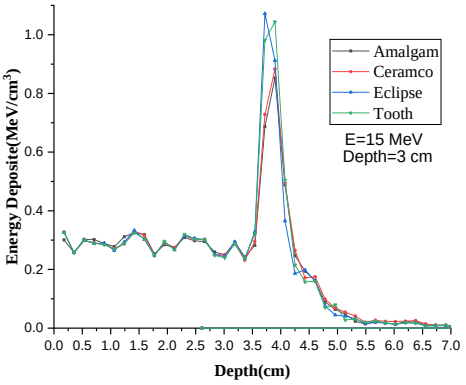
نتایج

محاسبات نشان داد که ماده اکلیپس بیشترین دوز بیشینه را ایجاد می‌کند. برای انرژی ۲۰ مگاالکترون‌ولت و عمق دندان ٤ سانتی‌متر، مقدار بیشینه دوز الکترون در عمق ۳/۹ سانتی‌متری به ۱/۲۰مگاالکترون‌ولت بر سانتی‌متر مکعب رسید. برای دندان بدون ترمیم این مقدار ۰/٤۲ مگاالکترون‌ولت بر سانتی‌متر مکعب

بود .شکل ۲و ۳ تغییرات دوز عمقی را برای ماده اکلیپس در مقایسه با دندان طبیعی نشان می‌دهد.

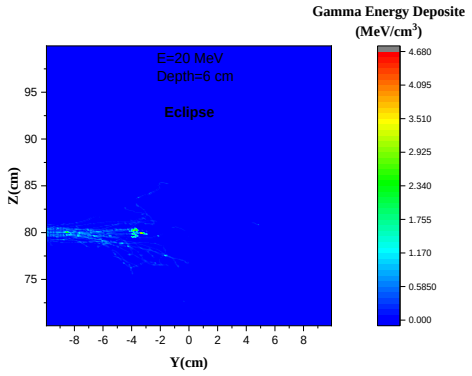


شکل ۲: مقایسه دوز عمقی الکترون بین ماده اکلیپس و دندان بدون ترمیم در انرژی ۲۰ مگاالکترون‌ولت



شکل۳: مقایسه دوز عمقی الکترون بین ماده اکلیپس و دندان بدون ترمیم در انرژی ۱۵ مگاالکترون‌ولت در عمق ۳ سانتی متری

الکترون‌های پرانرژی هنگام برهمکنش با مواد دندانی، فوتون‌های ثانویه (گاما) تولید می‌کنند که در سطح اطراف دندان توزیع می‌شوند .**شکل ۲** توزیع دوز فوتون ثانویه را برای ماده اکلیپس در انرژی ۲۰ مگاالکترون‌ولت نشان می‌دهد. دوز بیشینه فوتون در این حالت حدود ٤/٧ مگاالکترون‌ولت بر سانتی‌متر مکعب به دست آمد که نزدیک به ۹ برابر دوز بیشینه الکترون در همان شرایط است. سطح توزیع فوتون برای اکلیپس حدود ٨×٦ سانتی‌متر مربع و برای دندان طبیعی حدود ٧×٥ سانتی‌متر مربع محاسبه شد.



شکل ٤: توزیع دوز فوتون ثانویه

نتیجه‌گیری

در این مطالعه با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو کد MCNXP و فانتومMIRD ، تأثیر سه ماده ترمیمی دندانی رایج (آمالگام، سرامکو و اکلیپس) بر دزیمتری درمان با پرتو الکترون در ناحیه سر و گردن بررسی شد. نتایج نشان داد که ماده اکلیپس به دلیل داشتن عناصر با عدد اتمی بالا طلا با Z=٧٩ و پالادیم باZ=٤٦ ، بیشترین پراکندگی الکترون و تولید فوتون ثانویه را ایجاد می‌کند. حداکثر دوز عمقی الکترون برای اکلیپس در عمق ٤ سانتی‌متری دندان و انرژی ۲۰ مگاالکترون‌ولت برابر ١/٢٠٢٥٦مگاالکترون‌ولت بر سانتی‌متر مکعب به دست آمد که حدود ۲/۹برابر دندان بدون ترمیم (٠/٤١٨٢) است. همچنین دوز فوتون ثانویه ناشی از اکلیپس تا ۹ برابر دوز الکترون در همان شرایط بود که از نظر بالینی بسیار قابل توجه است.

مقایسه مواد نشان داد که آمالگام و سرامکو تأثیر کمتری نسبت به اکلیپس دارند، اما همچنان نسبت به دندان طبیعی باعث افزایش دوز عمقی و پراکندگی فوتون می‌شوند. با افزایش عمق دندان از ٤ به ٦ سانتی‌متر، حداکثر دوز عمقی برای اکلیپس از ١/١٢٠ به ٠/٤٥ مگاالکترون‌ولت بر سانتی‌متر مکعب کاهش یافت. همچنین با افزایش انرژی الکترون از ٥ به ٢٠ مگاالکترون‌ولت، سطح توزیع فوتون ثانویه از ابعاد ٧×٥ به ٨×٦ سانتی‌متر مربع گسترش یافت. از نظر دوز در اندام‌های مختلف، پوست (دوز نسبی ٠/١١٧) و

اسکلت صورت (دوز نسبی ۰/۰۲۱) بیشترین دوز فوتون ثانویه را دریافت کردند.

محدودیت اصلی این پژوهش، سادگی فانتوم MIRD و فرض چشمه الکترون ایده‌آل به جای چشمه واقعی یک شتابدهنده خطی بالینی است. همچنین آناتومی پیچیده حفره دهان (مانند زبان، بزاق و حرکت بیمار) در نظر گرفته نشده است. با وجود این محدودیت‌ها، نتایج این مطالعه به وضوح نشان می‌دهد که نادیده گرفتن اثر مواد ترمیمی دندانی می‌تواند منجر به خطای قابل توجه در دزیمتری (تا ۹ برابر برای فوتون ثانویه) شود.

توصیه می‌شود در برنامه‌ریزی درمان بیماران دارای ترمیم دندانی با ماده اکلیپس، یک ضریب اصلاحی حدود ۷ تا ۹ برای دوز فوتون ثانویه در نظر گرفته شود و در صورت امکان، از شبیه‌سازی مونت کارلو اختصاصی برای هر بیمار استفاده گردد. پیشنهاد می‌شود در مطالعات آینده از فانتوم واقعی‌تر سر و گردن و شبیه‌سازی چشمه واقعی شتابدهنده مانند Siemens Primus استفاده شود و همچنین اثر همزمان چندین دندان ترمیم شده و زوایای مختلف تابش بررسی گردد. در مجموع، این پژوهش گامی به سوی شخصی‌سازی دزیمتری در الکترون تراپی بر اساس نوع ماده ترمیمی دندانی است.

مرجع‌ها

[۱]T. Kutuk, E. Atak, A. Villa, N. S. Kalman, and A. Kaiser, “Interdisciplinary Collaboration in Head and Neck Cancer Care: Optimizing Oral Health Management for Patients Undergoing Radiation Therapy,” Current Oncology, vol. ۳۱, no. ٤, pp. ۲۰۹۲-۲۱۰۸, ۲۰۲٤.

[۲]L. Gao, C. Li, Z. Lu, K. Xie, T. Lin, J. Sui, and X. Ni, “Comparison of different treatment planning approaches using VMAT for head and neck cancer patients with metallic dental fillings,” Radiation Medicine and Protection, vol. ۲, no. ۳, pp. ۱۲۸-۱۳۳, ۲۰۲۱.

[۳]J. Iannucci and L. J. Howerton, Dental Radiography-E-Book. St. Louis, MO: Elsevier Health Sciences, ۲۰۲۱.

[٤]F. M. Khan, Khan's Physics of Radiation Therapy, ٥th ed. Philadelphia, PA: Lippincott Williams & Wilkins, ۲۰۱٤.

[٥]J. Seco and F. Verhaegen, Monte Carlo Techniques in Radiation Therapy. Boca Raton, FL: CRC Press, ۲۰۱۳.

[٦]H. E. Johns and J. R. Cunningham, The Physics of Radiology, ٤th ed. Springfield, IL: Charles C Thomas, ۱۹۸۳.

[۷]International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU), Prescribing, Recording, and Reporting Electron Beam Therapy, ICRU Report ۷۱. Bethesda, MD: ICRU, ۲۰۰۷.

[۸]R. J. McConn Jr., C. J. Gesh, R. T. Pagh, R. A. Rucker, and R. G. Williams III, Compendium of Material Composition Data for Radiation Transport Modeling. Richland, WA: Pacific Northwest National Laboratory, ۲۰۱۱.

[۹]D. Berger, J. F. Chaillet, and P. Helmer, “Effects of dental metallic restorations on radiation dose distribution in head and neck radiotherapy,” Physics in Medicine and Biology, vol. ٥۲, no. ۲۰, pp. ٦۲۰٥-٦۲۱٦, ۲۰۰۷.

[۱۰]International Atomic Energy Agency (IAEA), Radiation Oncology Physics: A Handbook for Teachers and Students. Vienna, Austria: IAEA, ۲۰۰٥.

[۱۱]X. G. Xu and K. F. Eckerman, Handbook of Anatomical Models for Radiation Dosimetry. Boca Raton, FL: CRC Press, ۲۰۱۰.

[۱۲]F. Verhaegen and J. Seuntjens, “Monte Carlo modelling of external radiotherapy photon beams,” Physics in Medicine and Biology, vol. ٤۸, no. ۲۱, pp. R۱۰۷-R۱٦٤, ۲۰۰۳.

[۱۳]D. B. Pelowitz, MCNPX User's Manual Version ۲,٦,۰. Los Alamos, NM: Los Alamos National Laboratory, ۲۰۰۸.

تحلیل پاسخ الکتریکی مس تحت تابش یون‌ساز از طریق تلفیق شبیه‌سازی مونت‌کارلو و مدل *Drude*

شعبان ، امین[۱]؛ رضایی ، محمدرضا[۲*] ؛ زیدآبادی ، مجید[۲]؛ عباسی، یاسر[۳]؛ دریجانی ،رضا[۴]

[۱] دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی هسته‌ای، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران
[۲]عضو هیأت علمی، گروه مهندسی هسته‌ای، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران
[۳]عضو هیأت علمی، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه اصفهان،اصفهان، ایران
[۴]عضو هیأت علمی، گروه فیزیک، دانشگاه ملی مهارت ، کرمان، ایران

چکیده

این پژوهش یک چارچوب نیمه‌تجربی برای تحلیل پاسخ الکتریکی مس تحت تابش یون‌ساز ارائه می‌دهد که از طریق تلفیق شبیه‌سازی ترابرد تابش مونت‌کارلو با مدل کلاسیک «درود» (Drude) برای رسانش الکتریکی حاصل شده است. هدف اصلی این مطالعه، ایجاد یک پیوند فیزیکی قابل‌تفسیر بین مقادیر میکروسکوپی استخراج‌شده از ترابرد ذرات (مانند بازده تولید حامل‌های ثانویه و پارامتر مربوط به زمان واهلش) و تغییرات ماکروسکوپی جریان مستقیم در یک نمونه مس بایاس‌شده است. در رویکرد پیشنهادی، تاریخچه ذرات و مسیرهای برهم‌کنش با استفاده از قابلیت PTRAC در کد MCNP6 به دست می‌آید که امکان برآورد آماری مقادیر مربوط به ترابرد را برای پاسخ رسانشی فراهم می‌کند. سپس این مقادیر در یک فرمول‌بندی عملیاتی مبتنی بر مدل درود ادغام می‌شوند تا تغییرات القاشده در رسانندگی مؤثر و در نتیجه تغییرات جریان مستقیم برآورد گردد. این چارچوب برای سامانه‌های فلزی رسانایی در نظر گرفته شده است که در آن‌ها پاسخ الکتریکی به‌صورت تغییر در رسانش حالت پایدار تحت تابش تعریف می‌شود، نه به‌عنوان مکانیسم تولید پالس که در آشکارسازهای تابش مرسوم مشاهده می‌گردد. روش پیشنهادی، مسیری مقیاس‌پذیر برای اتصال داده‌های برهم‌کنش تابش–ماده به رفتار الکتریکی قابل‌اندازه‌گیری فراهم می‌کند و می‌تواند پایه‌ای برای مطالعات کمی بیشتر روی اختلالات رسانندگی ناشی از تابش در فلزات باشد.

کلمات کلیدی: *مس، MCNP6، PTRAC، مدل درود، تابش یون‌ساز، رسانندگی الکتریکی، جریان ناشی از تابش.*

Electrical Response of Copper Under Ionizing Radiation: A Combined Monte Carlo and Drude Model Approach

Shaban, Amin [۱]; Rezaie, Mohammad Reza[۲*] ;Zeidabadi ,Majid[2] ;Abbasi,Yaser [3];Darijani,Reza[4]

[۱] *M.Sc. Student , Department of Nuclear Engineering, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran*
[۲] *Faculty Member, Department of Nuclear Engineering, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran*
[3] *Faculty Member, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, University of Isfahan, Isfahan, Iran*
[4] *Faculty Member, Department of Physics, National University of Skill, Kerman, Iran*

Abstract

This study presents a semi-empirical framework for analyzing the electrical response of copper subjected to ionizing radiation, achieved by integrating Monte Carlo radiation transport simulations with the classical Drude model for electrical conduction. The primary objective is to establish an interpretable physical link between microscopic quantities extracted from particle transport (such as the secondary carrier production yield and relaxation time parameters) and macroscopic direct current (DC) variations in a biased copper sample. In the proposed approach, particle histories and interaction tracks are acquired using the PTRAC feature within the MCNP6 code, enabling the statistical estimation of transport-related variables relevant to the conduction response. These quantities are subsequently incorporated into an operational formulation based on the Drude model to estimate the induced changes in effective conductivity and the resulting DC variations. This framework is designed for conductive metallic systems where the electrical response manifests as an alteration in steady-state conduction under irradiation, distinct from the pulse generation mechanisms characteristic of conventional radiation detectors. The proposed methodology offers a scalable pathway to connect radiation-matter interaction data with measurable electrical behavior, providing a foundation for further quantitative investigations into radiation-induced conductivity perturbations in metals.

Keywords : *Copper, MCNP6, PTRAC, Drude model, Ionizing radiation, Electrical conductivity, Radiation-induced current*
PACS No. 28

مقدمه

برهم‌کنش تابش یون‌ساز با ماده چگال از اهمیت مرکزی در فیزیک تابش، علوم آشکارسازی و مطالعه پدیده‌های ترابرد در جامدات برخوردار است [۱، ۲]. در حالی که بخش قابل‌توجهی از ادبیات علمی بر تولید بار و شکل‌گیری سیگنال در آشکارسازهای تابش گازی و نیمه‌رسانا متمرکز بوده است [۲، ۱۱، ۱۲]، توجه کمتری به محیط‌های فلزی رسانا معطوف شده است که در آن‌ها تابش به‌جای تولید یک پالس معمول آشکارساز، ممکن است ویژگی‌های رسانش الکتریکی حالت پایدار ماده را مختل کند. مس به دلیل رسانندگی بالا، اهمیت فناوری و ویژگی‌های فیزیکی به‌خوبی مستندشده، ماده‌ای بسیار مناسب برای چنین مطالعه‌ای است [۱، ۲۰]. به‌عنوان یک فلز با رسانندگی بالا که به‌طور گسترده در مدارهای الکتریکی، ساختارهای حفاظتی، اتصالات و ابزارهای در معرض تابش استفاده می‌شود، مس بستری جذاب برای بررسی چگونگی تأثیر تابش یون‌ساز بر رسانش ماکروسکوپی از طریق مکانیسم‌های ترابرد میکروسکوپی فراهم می‌کند. با این حال، فیزیک زیربنایی آن ساده نیست. تابش فرودی انرژی خود را در ماده از طریق فرآیندهای یونیزاسیون و برانگیختگی رسوب می‌دهد، الکترون‌های ثانویه تولید می‌کند، الگوهای توزیع انرژی محلی را تغییر می‌دهد و ممکن است شرایط پراکندگی مؤثر را تغییر دهد [۲، ۵، ۱۳]. مدل درود یکی از توصیفات بنیادی ترابرد الکترونیکی در فلزات باقی مانده است که رسانندگی را به چگالی حامل‌های آزاد و زمان واهلش مرتبط می‌کند [۱، ٤]. اگرچه این مدل تمام پیچیدگی‌های مکانیک کوانتومی ساختار نواری و اثرات غیرتعادلی در جامدات تحت تابش را در بر نمی‌گیرد [۱، ۳]، اما همچنان به‌عنوان یک چارچوب تفسیری مرتبه اول برای بحث در مورد تغییرات رسانندگی برحسب پارامترهای ترابرد مؤثر مفید است. با این حال، هنگامی که مدل درود به‌تنهایی استفاده می‌شود، دسترسی به اطلاعات ترابرد تابشی میکروسکوپی که برای مشخص کردن منشأ اختلال لازم است، فراهم نمی‌کند. این محدودیت، استفاده از شبیه‌سازی مونت‌کارلو را برمی‌انگیزد. کدهای ترابرد ذره‌ای مونت‌کارلو مانند MCNP6 به‌طور گسترده برای شبیه‌سازی برهم‌کنش تابش با ماده، از جمله رسوب انرژی، تولید ذرات ثانویه، تاریخچه پراکندگی و مسیرهای ترابرد ذرات به کار می‌روند [۸–۱۰]. به‌ویژه، گزینه PTRAC امکان ثبت تاریخچه ذرات به‌صورت رویداد–به–رویداد را فراهم می‌کند که اجازه استخراج طول مسیر، توالی‌های برخورد و اطلاعات مربوط به زمان‌بندی را فراتر از خروجی‌های مرسوم فراهم می‌سازد [۸–۱۰]. این امر MCNP6 را به ابزاری مناسب برای ساخت توصیف‌گرهای مؤثری تبدیل می‌کند که می‌توانند با یک مدل ترابرد الکتریکی جفت شوند. بنابراین، هدف این مطالعه ایجاد یک جفت‌شدگی نیمه‌تجربی بین خروجی‌های MCNP6/PTRAC و توصیف رسانندگی نوع درود به منظور تحلیل پاسخ الکتریکی مس تحت تابش یون‌ساز است. در این کار، عبارت «پاسخ الکتریکی» به‌طور خاص به تغییر جریان DC تحت یک ولتاژ بایاس ثابت اشاره دارد و نباید با فرآیند تشکیل پالس گذرا که در آشکارسازهای هسته‌ای استاندارد رایج است، اشتباه گرفته شود [۲، ۱۱]. بنابراین، چارچوب پیشنهادی به‌عنوان یک روش‌شناسی در مقیاس میانی در نظر گرفته شده است که ترابرد میکروسکوپی تابش را به مشاهدات الکتریکی ماکروسکوپی متصل می‌کند.

مواد و روش‌ها

در چارچوب کلاسیک درود، حرکت حامل‌های بار در میدان الکتریکی اعمال‌شده طبق معادله (۱) بیان می‌شود [۱، ٤]:

$$m^* \frac{dv}{dt} = -eE - \frac{m^* v}{\tau} \qquad (1)$$

که در آن m^* جرم مؤثر حامل، e بار بنیادی، E میدان الکتریکی و τ زمان واهلش متوسط است. در شرایط حالت پایدار، رسانندگی الکتریکی مطابق معادله (۲) نوشته می‌شود [۱، ۴]:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*} \qquad (2)$$

که در آن nچگالی حامل آزاد اســت.برای یک نمونه مس بـه طول lو ســطح مقطع A، که توســط ولتاژ اعمالی Vباياس شــده اســت، جریان طبق قانون اهم به‌صــورت معادله (۳) داده می‌شود:

$$I = \sigma \frac{A}{l} V \qquad (3)$$

و تغییر جریان ناشــی از تابش ممکن اســت به‌صــورت معادله (٤) نوشته شود:

$$\Delta I = \frac{VA}{l} \Delta\sigma \qquad (4)$$

که در آن $\Delta\sigma$تغییر مؤثر در رســانندگی ناشــی از تابش است.

شــبیه‌ســازی مونت‌کارلو و اســتخراج پارامتر مبتنی بر PTRAC

ترابرد تـابش در نمونـه مس بـا اســتفـاده از MCNP6 مدل‌سازی می‌شود [۸–۱۰]. هندسه شامل یک حجم مس با ابعاد مشخص است، در حالی که تعریف چشمه، فیزیک ترابرد و پیکربندی ماده بر اســاس نوع تابش فرودی و انرژی انتخاب می‌شوند. تاریخچه دقیق ذرات با استفاده از گزینـه PTRAC ثبت می‌شــود [۸–۱۰].اولین کمیت مشــتق‌شــده از ترابرد که در نظر گرفته شــده، بازده تولید ثانویه است که در معادله (٥) تعریف می‌شود:

$$g_{\text{sec}} = \frac{N_{\text{sec}}}{N_{\text{prim}}} \qquad (5)$$

که در آن N_{sec}تعداد الکترون‌های ثانویه یا بارهای ثانویه تولیدشــــده در حجم مس و N_{prim}تعداد ذرات اولیه فرودی است.پارامتر دوم از اطلاعات طول مسیر و سرعت استخراج‌شده از PTRAC تعریف می‌شود. برای هر گام ترابرد i، افزایش زمان به‌صورت معادله (٦) بیان می‌شود:

$$\Delta t_i = \frac{\Delta l_i}{v_i} \qquad (6)$$

کـه در آن Δl_iطول گـام و v_iســرعـت ذره اســت. بـا میانگین‌گیری روی یک مجموعه آماری به‌اندازه کافی بزرگ، یک پارامتر ترابرد مؤثر مربوط به زمان به‌صــورت معادله (۷) به دست می‌آید:

$$\tau_{\text{eff}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\Delta l_i}{v_i} \right) \qquad (7)$$

این پارامتر به‌عنوان یک پل آماری بین ترابرد مونت‌کارلو و مدل‌سازی رسانندگی معرفی می‌شود و نباید با زمان واهلش میکروســکوپی ذاتی در نظریه ترابرد الکترونیکی در فلزات یکسان تفسیر شود [۱، ۳].

جفت‌شدگی نیمه‌تجربی بین ترابرد و رسانندگی

برای اتصــال مشــاهدات ترابرد تابش به پاسـخ الکتریکی، تناسب عملیاتی زیر در معادله (۸) معرفی می‌شود:

$$\Delta\sigma \propto g_{\text{sec}} \tau_{\text{eff}} \qquad (8)$$

با معرفی ضریب تناسب C، اختلال رسانندگی ناشی از تابش به‌صورت معادله (۹) نوشته می‌شود:

$$\Delta\sigma_{\text{rad}} = C\, g_{\text{sec}} \tau_{\text{eff}} \qquad (9)$$

جایگذاری معادله (۹) در معادله (۴) منجر به تغییر جریان به‌صورت معادله (۱۰) می‌شود:

$$\Delta I_{\text{MC}} = \frac{VA}{l} C\, g_{\text{sec}} \tau_{\text{eff}} \qquad (10)$$

یا به‌طور صـریح برحسـب مشـاهدات شـبیه‌سـازی، معادله جفت‌شدگی عملیاتی داده‌شده در معادله (۱۱):

$$\Delta I_{\text{MC}} = \frac{VA}{l} C \left(\frac{N_{\text{sec}}}{N_{\text{prim}}} \right) \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{\Delta l_i}{v_i} \right) \qquad (11)$$

میزان تغییر جریان به ازای یک ولت برابر با معادله ۱۲ میباشـد که مقدار C با مقایسه با معادله ۲ برابر C/kg $C=e^2/m$ 2.81E-8 خواهد بود.

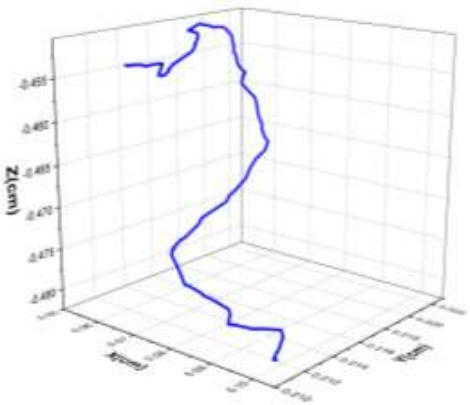
$$\Delta I_{\text{MC}}/V = (2.81\text{E}-8)\, \frac{A}{l} \left(\frac{N_{\text{sec}}}{N_{\text{prim}}} \right) \tau_{\text{eff}} \qquad (12)$$

این رابطه نیمه‌تجربی و عملیاتی اسـت. ΔI_{MC} نیز به ازای یک ذره از چشـمه اسـت.هدف آن مشـتق‌گیری از اصـول اولیه نظریه حالت جامد چندذره‌ای نیســت، بلکه به‌عنوان

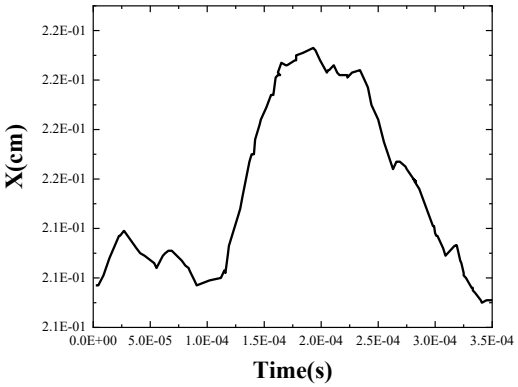
یک قانون جفت‌شدگی با انگیزه فیزیکی است که خروجی‌های شبیه‌سازی را به پاسخ الکتریکی قابل‌اندازه‌گیری متصل می‌کند [۱، ۳، ۸].

نتایج و بحث

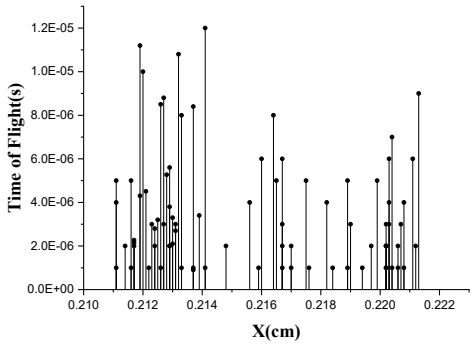
مسیر یک الکترون ثانویه تولید شده در مس در اثر برهمکنش الکترون های چشمه با مس و همچنین نمودار تغییر مکان یک الکترون ثانویه تولید شده در مس برجسب زمان با توجه به داده های فایل ptrac محاسبه شد که نتایج آن در شکل های ۱ و ۲ نشان داده شده است.



شکل۱ : مسیر یک الکترون ثانویه تولید شده در مس در اثر برهمکنش الکترون های چشمه با مس



شکل ۲ : نمودار تغییر مکان یک الکترون ثانویه تولید شده در مس برجسب زمان



شکل ۳: زمان برخورد الکترون در طول مسیر حرکت در مس

میانگین زمان پرواز با توجه به داده های شکل ۳ برابر τ_{eff} = 3.32E-6 s با توجه به خروجی های ptrac محاسبه میشود . نتایج تالی ٤ نشان میدهد که در اثر تابش گاما با انرژی 1.02 MeV تعداد $\frac{N_{\text{sec}}}{N_{\text{prim}}} = 94$ الکترون در مس با ابعاد a×b×c=0.1×1×1 cm^3 تولید میشود .سطح مس برابر A= a ×c=0.1 cm^2 =1E-5 m^2 و طول سیم l=b=1 cm=1E-2 m. طبق معادله ۱۳ میزان I_{MC} به ازای یک ولت و یک ذره از چشمه برابر است با

$$\Delta I_{\text{MC}}/V = (2.81\text{E}-8)\,\frac{1E-5}{1E-2} \times 94 \times 3.32\text{E}-6 = 8.77\text{E}-15\ \text{A/V.sp}$$

میزان $\Delta I_{\text{MC}}/V$ به ازای یک کوری برابر است با 3.33E-4 A/V.Ciمیباشد. بنابراین به ازای یک چشمه الکترونی با اکتیویته یک کوری در یک میلی ولت اعمال شده به مدار در حدود ۰.۳۳ میکرو امپر تغییر در جریان مدار ایجاد میشود.پاسخ الکتریکی مورد انتظار مس تحت تابش یون‌ساز از تعامل بین رسوب انرژی، تولید ذرات ثانویه، توزیع فضایی برهم‌کنش‌ها و اختلال در شرایط ترابرد الکترونیکی ناشی می‌شود [۲، ۵، ۱۳]. در چارچوب حاضر، این اثرات توسط دو توصیف‌گر مؤثر حاصل از شبیه‌سازی نمایش داده می‌شوند: بازده تولید ثانویه و پارامتر مؤثر مربوط به زمان. ترکیب آن‌ها ابزاری عملی برای برآورد تغییر جریان ΔI_{MC} فراهم می‌کند.از منظر فیزیکی، انتظار می‌رود که تولید ثانویه بزرگ‌تر، اختلال قوی‌تری در حالت رسانشی ماده ایجاد کند، زیرا تعداد

بیشتر رویدادهای الکترونیکی ناشی از تابش به معنای انحراف قوی‌تر از شرایط تعادلِ بدون تابش است. با این حال، پاسخ را نمی‌توان تنها به g_{sec}نسبت داد. تاریخچه ترابرد، که در اینجا توسط τ_{eff}نمایش داده می‌شود، نیز مهم است زیرا نشان می‌دهد که چگونه توالی‌های برهم‌کنش در فضا و زمان درون حجم مس توسعه می‌یابند. بر این اساس، دو میدان تابشی با رسوب انرژی مشابه ممکن است همچنان پاسخ‌های الکتریکی متفاوتی ایجاد کنند اگر الگوهای تولید ثانویه و ویژگی‌های ترابرد آن‌ها متفاوت باشد [۸–۱۰].یک موضوع مفهومی مهم، تفسیر تغییر رسانندگی ناشی از تابش در فلزی مانند مس است. از آنجا که مس قبلاً دارای چگالی بسیار بزرگی از الکترون‌های رسانش متحرک است [۱، ۲۰]، از نظر فیزیکی نادرست خواهد بود که مدل پیشنهادی را به‌گونه‌ای تفسیر کنیم که تابش صرفاً یک جمعیت رسانش جدید به همان روش نیمه‌رساناها ایجاد می‌کند. در عوض، تفسیر واقع‌بینانه‌تر این است که تابش حالت رسانشی مؤثر را از طریق برانگیختگی گذرا، توزیع مجدد محلی انرژی و تکانه و اصلاح رفتار مربوط به پراکندگی مختل می‌کند [۱، ۳]. بنابراین، $\Delta\sigma$باید به‌عنوان یک ترم اختلال مؤثر ناشی از تابش در نظر گرفته شود، نه به‌عنوان جایگزینی مستقیم برای فرمول رسانندگی تعادلی.همچنین انتظار می‌رود که پاسخ پیش‌بینی‌شده به‌شدت به نوع تابش فرودی وابسته باشد. ذرات باردار مانند الکترون‌ها، ذرات بتا، پروتون‌ها یا ذرات آلفا به‌طور کلی افت انرژی نسبتاً مداومی را تجربه می‌کنند و می‌توانند یونیزاسیون قابل‌توجهی در طول مسیر خود ایجاد کنند [۲، ۵، ۱۳]. در چنین شرایطی، مقدار g_{sec}ممکن است به‌طور نسبی بزرگ شود که منجر به اختلال رسانندگی مشهودتری می‌گردد. در مقابل، فوتون‌ها از طریق جذب فوتوالکتریک، پراکندگی کامپتون و تولید جفت بسته به انرژی برهم‌کنش می‌کنند که به این معنی است که اثر آن‌ها بر پاسخ الکتریکی از طریق زنجیره غیرمستقیم‌تر و ناهمگن‌تری از تولید ثانویه واسطه‌گری می‌شود [۲، ۱۳]. در نتیجه، تأثیر الکتریکی تابش فوتونی ممکن است به‌طور قابل‌توجهی با تابش ذرات باردار حتی در انرژی‌های فرودی قابل‌مقایسه متفاوت باشد.هندسه و شرایط عملیاتی الکتریکی نیز نقش مهمی در پاسخ قابل‌اندازه‌گیری ایفا می‌کنند. طبق معادله (۱۰)، بزرگی ΔI_{MC}با ولتاژ بایاس اعمالی و هندسه نمونه از طریق فاکتور VA/lمقیاس‌بندی می‌شود. این بدان معناست که دو نمونه مس که در معرض یک میدان تابشی یکسان قرار دارند، اگر ابعاد یا شرایط بایاس آن‌ها متفاوت باشد، ممکن است تغییرات جریان متفاوتی نشان دهند. به همین دلیل، مقایسه‌های مبتنی بر شبیه‌سازی و تجربی آتی باید ضخامت نمونه، سطح مقطع، هندسه تابش و ولتاژ بایاس را به‌طور صریح گزارش کنند.از منظر محاسباتی، ارزش پیش‌بینی چارچوب به کیفیت آماری خروجی‌های مونت‌کارلو بستگی دارد. کمیت‌هایی مانند N، معیارهای انتخاب رویداد و میانگین‌های مشتق‌شده از PTRAC ممکن است همگی به عدم‌قطعیت در برآورد نهایی ΔI_{MC}کمک کنند [۸–۱۰]. بنابراین، هنگامی که شبیه‌سازی واقعی انجام می‌شود، نسخه نهایی مقاله باید تعداد تاریخچه‌های اولیه، خطاهای آماری، معیارهای فیلترینگ اعمال‌شده بر رویدادهای PTRAC و روش میانگین‌گیری دقیق استفاده‌شده برای محاسبه τ_{eff}را گزارش کند. این جزئیات برای تکرارپذیری و ایجاد اطمینان در توصیف‌گرهای ترابرد استخراج‌شده مهم هستند.نکته دیگری که نیازمند بحث دقیق است، معنای τ_{eff}است. در نظریه ترابرد فلزی مرسوم، زمان واهلش به پراکندگی تصادفی‌سازِ تکانه الکترون‌های رسانش در شبکه اشاره دارد [۱، ۳]. در مقابل، کمیتی که در اینجا تعریف شده، یک پارامتر مؤثر مشتق‌شده از شبیه‌سازی است که بر اساس تاریخچه مسیر و سرعت ذرات از ترابرد تابش است. این دو مفهوم تنها در سطح قیاس تفسیری به هم مرتبط هستند، نه هم‌ارزی دقیق. این تمایز باید به‌طور واضح بیان شود تا از مبالغه در دامنه بنیادی مدل جلوگیری شود. در این معنا، چارچوب حاضر بهتر است به‌عنوان یک فرمالیسم پاسخ نیمه‌تجربی در نظر گرفته شود نه یک نظریه میکروسکوپی کامل از رسانندگی مس تحت تابش.هنگامی که داده‌های شبیه‌سازی در دسترس قرار گیرند، آموزنده‌ترین تحلیل احتمالاً تغییر g_{sec}، τ_{eff}و ΔI_{MC}با نوع ذره و انرژی فرودی خواهد

بود. داده‌های توان ترمز مرجع از NIST، ICRU یا SRIM ممکن است سپس به‌عنوان یک بررسی سازگاری خارجی برای روندهای افت انرژی و برهم‌کنش پیش‌بینی‌شده توسط MCNP6 استفاده شوند [٦، ٧، ١٤–١٦]. چنین مقایسه‌ای اعتبار فیزیکی تفسیر ترابرد را تقویت کرده و به روشن شدن اینکه آیا روند پاسخ الکتریکی محاسبه‌شده از توان ترمز، بازده تولید ثانویه یا یک مکانیسم ترکیبی پیچیده‌تر پیروی می‌کند، کمک خواهد کرد.در نهایت، ارزش روش‌شناسی پیشنهادی در پتانسیل آن برای مقایسه با آزمایش نهفته است. اندازه‌گیری جریان DC یک نمونه مس بایاس‌شده تحت تابش کنترل‌شده و مقایسه آن با معادله (۱۰) یا معادله (۱۱) مسیری را برای کالیبره کردن ضریب C، آزمون اعتبار چارچوب و شناسایی اثرات فیزیکی مفقود فراهم می‌کند. اگر مدل با موفقیت روند و مرتبه بزرگی مشاهده‌شده را بازتولید کند، ممکن است روشی عملی برای مطالعه اختلالات رسانشی ناشی از تابش در سامانه‌های فلزی ارائه دهد. اگر انحرافاتی یافت شود، آن‌ها به اهمیت فرآیندهای اضافی مانند گرمایش، انباشت نقص، اثرات تماسی یا اصلاحات ترابرد غیردرود اشاره خواهند کرد [۱–۳، ۱۳].

نتیجه‌گیری

یک چارچوب نیمه‌تجربی برای تحلیل پاسخ الکتریکی مس تحت تابش یون‌ساز با تلفیق شبیه‌سازی مونت‌کارلو MCNP6 با توصیف مبتنی بر درود از رسانش الکتریکی توسعه یافت [۱، ٤، ٨–١٠]. این روش یک پل عملی بین مشاهدات ترابرد میکروسکوپی—به‌ویژه بازده تولید ثانویه و یک پارامتر زمانی مؤثر مربوط به ترابرد—و تغییرات ماکروسکوپی جریان DC تحت بایاس ثابت ایجاد می‌کند.مدل پیشنهادی نشان می‌دهد که در یک فلز با رسانندگی بالا مانند مس، تغییرات جریان ناشی از تابش باید در درجه اول به‌عنوان اختلالات مؤثر در رسانندگی مرتبط با پراکندگی تغییریافته و رفتار ترابرد غیرتعادلی تفسیر شوند، نه به‌عنوان افزایش ساده در چگالی حامل آزاد ذاتی [۱، ۳، ۲۰]. اگرچه رویکرد حاضر نیمه‌تجربی است و نیازمند کالیبراسیون با داده‌های شبیه‌سازی و تجربی واقعی است، اما پایه‌ای ساختاریافته و قابل‌تفسیر فیزیکی برای تحلیل کمی آتی فراهم می‌کند. هنگامی که نتایج MCNP/PTRAC تولید شوند، مدل می‌تواند با داده‌های ترابرد واقعی پر شود و برای بررسی روندها با نوع تابش، انرژی و هندسه و همچنین مقایسه پیش‌بینی‌ها با اندازه‌گیری‌ها استفاده گردد.

مراجع

[1] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*. New York, NY, USA: Holt, Rinehart and Winston, 1976.
[2] G. F. Knoll, *Radiation Detection and Measurement*, 4th ed. Hoboken, NJ, USA: Wiley, 2010.
[3] J. M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids*, 2nd ed. Cambridge, U.K.: Cambridge Univ. Press, 1972.
[4] P. Drude, "Zur Elektronentheorie der Metalle," *Annalen der Physik*, vol. 306, pp. 566–613, 1900.
[5] H. A. Bethe, "Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie," *Annalen der Physik*, vol. 397, no. 3, pp. 325–400, 1930.
[6] M. J. Berger et al., "ESTAR, PSTAR, and ASTAR: Computer Programs for Calculating Stopping-Power and Range Tables," NIST Standard Reference Database 124, 2017.
[7] National Institute of Standards and Technology, "Stopping-Power and Range Tables," 2017. [Online]. Available: https://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/programs.html
[8] C. J. Werner et al., *MCNP® User's Manual Code Version 6.2*, Los Alamos National Laboratory, LA-UR-17-29981, 2017.
[9] J. A. Kulesza et al., *MCNP® Code Version 6.3.1 Theory & User Manual*, Los Alamos National Laboratory, LA-UR-24-24602, 2024.
[10] D. B. Pelowitz et al., *MCNP6 User's Manual*, Los Alamos National Laboratory, LA-CP-13-00634, 2013.
[11] W. R. Leo, *Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments*, 2nd ed. Berlin, Germany: Springer, 1994.
[12] F. Sauli, *Principles of Operation of Multiwire Proportional and Drift Chambers*. Geneva, Switzerland: CERN, 1977.

[13] J. E. Turner, *Atoms, Radiation, and Radiation Protection*, 3rd ed. Hoboken, NJ, USA: Wiley, 2007.
[14] ICRU, *Stopping Powers and Ranges for Protons and Alpha Particles*, ICRU Report 49. Bethesda, MD, USA, 1993.
[15] ICRU, *Stopping of Ions Heavier than Helium*, ICRU Report 73. Bethesda, MD, USA, 2005.
[16] J. F. Ziegler, *SRIM—The Stopping and Range of Ions in Matter*, 2010. [Online]. Available: http://www.srim.org
[17] C. A. Wyatt, *Radiation Detection and Measurement: An Introduction*. New York, NY, USA: Wiley, 1980.
[18] H. Bichsel, "Shell corrections and low-energy stopping powers," relevant stopping-power literature, 1991.
[19] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, discussions on transport properties in metals, in *Solid State Physics*, 1976.
[20] D. R. Lide, ed., *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. Boca Raton, FL, USA: CRC Press, various editions.

سنتز و مشخصه یابی خواص حفاظتی شیشه سرامیک‌های اکسی‌فلوریدی در مقابل تشعشعات گاما: رویکردی نوین در توسعه حفاظ‌های شفاف تابشی

منیجه رحیمی بالکانلو*[۱] آیدا فائقی نیا

[۱] پژوهشکده سرامیک، پژوهشگاه مواد و انرژی ،البرز، کرج، ایران

چکیده

خطرات پرتوهای یونیزان در زندگی انسان، آن را به یک حوزه مطالعاتی حیاتی در مهندسی هسته‌ای تبدیل کرده است. این حوزه نه تنها محافظت کافی در برابر پرتوهای یونیزان را تضمین می‌کند، بلکه از طریق مواد محافظ، دید واضحی را نیز فراهم می‌کند. سپرهای شیشه‌ای، به دلیل مزایایی مانند همگنی و شفافیت عالی، می‌توانند به عنوان سپرهای مؤثر در برابر پرتوهای یونیزان عمل کنند. این مواد ۱۰۰٪ قابل بازیافت هستند، شفافیت را در برابر نور مرئی حفظ می‌کنند و خواص سپر تابشی آنها را می‌توان با ترکیب ترکیبات اضافی اصلاح و افزایش داد. این مطالعه به بررسی کاربرد بالقوه سرامیک‌های شیشه‌ای اکسی‌فلوراید به عنوان سپرهای شفاف در برابر تابش گاما می‌پردازد. در این کار، سرامیک‌های شیشه‌ای با ترکیبات 40-x SiO2·24Al2O3·10LiF·14CaF2·12CaO·x EuF3 (که در آن x از ۰,۵ تا ۱,۵ مول درصد متغیر است)، با استفاده از روش مذاب تهیه شده‌اند. خواص ساختاری و ریخت‌شناسی نمونه‌های تهیه‌شده از طریق آنالیزهای پراش اشعه ایکس (XRD) و میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) ارزیابی شد. خواص محافظتی اشعه گاما مانند ضرایب تضعیف جرمی (μ_m) و ضریب تضعیف خطی (μl) نمونه‌ها به صورت تجربی تعیین شد و مقایسه‌ای با رویکرد نظری با استفاده از برنامه WinXCom و کد MCNPX انجام شد. نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که مقادیر تجربی نمونه‌های شیشه‌ای با مقادیر نظری مطابقت خوبی دارند. علاوه بر این، ضخامت نیم لایه (HVL) و میانگین مسیر آزاد (MFP) برای همه نمونه‌ها در انرژی ٦٦٢ کیلوالکترون‌ولت تعیین شده‌اند. مشخص شد که μ_m و HVL با افزایش غلظت EuF3 کاهش می‌یابند. این یافته، پتانسیل سرامیک‌های شیشه‌ای اکسی‌فلوراید تهیه‌شده را به عنوان یک ماده شفاف حفاظ تابش نشان می‌دهد.

واژه های کلیدی: *شیشه-سرامیک اکسی فلوراید، خواص ساختاری، پرتوهای گاما، حفاظ شفاف، ضرایب تضعیف*

Synthesis and Characterization of Oxyfluoride Glass-Ceramics as Transparent Shields Against Gamma Radiation: A Novel Approach in Developing Transparent Radiation Shielding

Rahimi, Manijeh [1*], Faeghinia Aida

[1]*Ceramic Department, Materials and Energy Research Center (MERC), P. O. Box: 31787-316, Alborz, Islamic Republic of Iran*

Abstract

The hazards of ionizing radiation in human life make it a crucial study field in nuclear engineering. This field not only ensures adequate protection against ionizing radiation but also provides clear visibility through protective materials. Glass shields, due to their advantages such as homogeneity and excellent transparency, can serve as effective shields against ionizing radiation. These materials are 100% recyclable, maintain transparency to visible light, and their radiation shielding properties can be modified and enhanced by incorporating additional compounds. This study investigates the potential application of oxyfluoride glass

Rahimymanijeh860@gmail.com[1]

ceramics as transparent shields against gamma radiation. in this work, glass ceramics with compositions (40−x) SiO_2·24Al_2O_3·10LiF·14CaF_2·12CaO·x EuF3, where x varied from 0.5 to 1.5 mol% have been prepared by using melt-quenching method. The structural and morphological properties of the prepared samples were evaluated through X-ray diffraction (XRD) and scanning electron microscopy (SEM) analyses. The gamma rays-shielding properties such as the mass attenuation coefficients (μ_m) and linear attenuation coefficient (μ_l), of samples have been experimentally determined, and a comparison with a theoretical approach making use of the WinXCom program and MCNPX code has been performed. The obtained results show that the experimental values of the glass samples are found to be in a good agreement with the theoretical values.

Additionally, half-value layer (HVL) and mean free path (MFP) have been determined for all samples at 662 keV energy. It was found that the μ_m and HVL decrease with increasing EuF3 concentration. The finding, indicating the potential of the prepared oxyfluoride glass ceramics as a transparent radiation shielding material.

***Keywords**: Oxyfluoride Glass-ceramic, Structural properties, Gamma rays, Transparent shielding, attenuation coefficients*

PACS No. 29

مقدمه

محافظت رادیولوژیکی در برابر تشعشعات یونیزان از طریق حفاظ‌های شفاف یکی از چالش‌های مهم در صنایع هسته‌ای و پزشکی است. از این منظر، توسعه موادی که نه تنها قابلیت جذب و تضعیف تشعشعات را داشته باشند، بلکه قابلیت دید را نیز فراهم کنند، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. این گروه از مواد را می‌توان یکی از نوآورانه‌ترین زمینه‌های تحقیقاتی در مهندسی هسته‌ای دانست که علاوه بر ارائه حفاظ مؤثر در برابر تشعشعات یونیزان، امکان مشاهده مستقیم فرآیندها را نیز فراهم می‌کنند. سیستم‌های شیشه‌ای به دلیل ویژگی‌های منحصر به فرد خود مانند همگنی ساختاری و شفافیت نوری عالی، پتانسیل قابل توجهی برای کاربرد به عنوان حفاظ تشعشعات نشان می‌دهند. علاوه بر این، قابلیت بازیافت کامل آنها، توانایی حفظ شفافیت در طیف مرئی و انعطاف‌پذیری در اصلاح خواص حفاظتی از طریق افزودن ترکیبات مختلف از دیگر مزایای این سیستم‌ها است [۶-۱].

در حال حاضر، بیشتر تحقیقات در مورد حفاظهای شفاف بر روی سرامیک‌های شیشه‌ای اکسی‌فلوراید متمرکز است. در مقایسه با سایر شیشه‌ها، شیشه‌های اکسی‌فلوراید به دلیل پایداری مکانیکی، شیمیایی و حرارتی بالای آنها در یک ماده قابل شکل‌دهی با اندازه بزرگ، از نظر بنیادی جالب توجه هستند. این خواص منحصر به فرد، آنها را به حفاظهای شفاف عالی تبدیل می‌کند. در این کار، ما سرامیک‌های شیشه‌ای اکسی‌فلوراید شفاف آلاییده شده با Eu^{3+} را تهیه کرده و خواص سپرسازی پرتو گامای آنها را بررسی کرده‌ایم.

روش کار

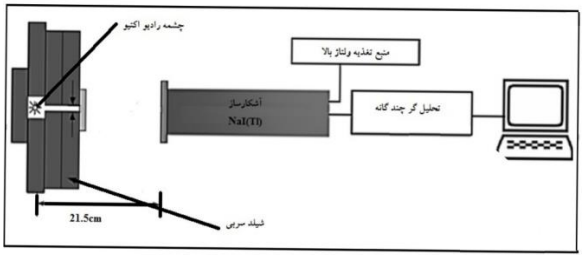
ترکیبات شیشه‌ای که با سه غلظت مختلف ماده آلاییده ($x = 0.5$، ۱,۰ و ۱,۵ مول درصد) تهیه شد، در جدول ۱ آمده است.ترکیبات CaO، SiO_2، Al_2O_3، CaF_2، LiF و EuF3(ساخت شرکت مرک) با دقت وزن شد تا جرم کل بچ ۲۰ گرم به دست آید. مواد اولیه به مدت ۲ ساعت در بوته‌های آلومینا در دماهای بین ۱۴۰۰ تا ۱۴۵۰ درجه سانتیگراد ذوب شدند. هر بوته در طول فرآیند ذوب با یک بوته آلومینای اضافی پوشانده شد تا تبخیر فلوراید کاهش یابد. بلافاصله، شیشه مذاب در قالب‌های برنجی که در دمای ۲۰۰ درجه سانتیگراد پیش گرم شده بودند، ریخته گری شد تا شوک حرارتی باقیمانده به حداقل برسد. سپس به مدت ۳ ساعت در دمای ۵۰۰ درجه سانتیگراد آنیل شد تا تنش حرارتی آزاد شود و در نهایت تا دمای اتاق خنک شد. در نهایت، برای به دست آوردن سرامیک‌های شیشه‌ای شفاف، نمونه‌های شیشه‌ای به مدت ۴۵ دقیقه در دمای ۷۶۰ درجه سانتیگراد عملیات حرارتی شدند. پس از

آن، سرامیک‌های شیشه‌ای آماده شده به ابعاد مناسب برش داده شده و برای مطالعات حفاظ صیقل داده شدند.

جدول ۱. درصد مولی اجزای تشکیل‌دهنده نمونه ها

نمونه	SiO_2	Al_2O_3	$CaCO_3$	CaF_2	EuF_3
GC_1	٤٢	٢٤	١٨	٢٢	٠/٥
GC_2	٤٢	٢٤	١٨	٢٢	١
GC_3	٤٢	٢٤	١٨	٢٢	١/٥

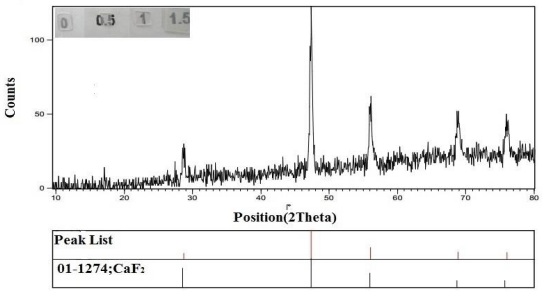
برای شناسایی ساختار فازی نمونه‌های شیشه سرامیک، آنالیز پراش اشعه ایکس (XRD) روی نمونه‌های پودر شده انجام شد. آنالیز XRD با استفاده از دستگاه X'PertPro مجهز به منبع تابش Cu-Kα و طول موج ١/٥٤ Å انجام شد. مورفولوژی نمونه‌های ساخته شده با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) ارزیابی شد. برای ارزیابی خواص حفاظتی نمونه‌ها در برابر تابش گاما، از یک چیدمان آزمایشگاهی که به صورت شماتیک در شکل ۱ نشان داده شده است، استفاده شد. در این آزمایش، از یک منبع رادیواکتیو سزیم-۱۳۷ با فعالیت ۳۰ میکروکوری، که فوتون‌هایی با انرژی ٦٦٢ کیلوالکترون ولت ساطع می‌کند، استفاده شد. از یک آشکارساز سوسوزن NaI(Tl)برای تشخیص تابش عبوری استفاده شد.



شکل ۱. طرحی از چیدمان اجزای آزمایشگاهی برای اندازه‌گیری ضریب تضعیف خطی و کد MCNPX

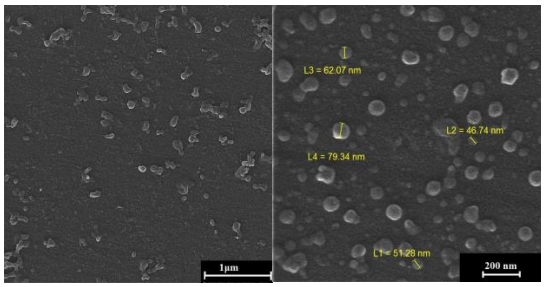
نتایج

الگوهای پراش پرتو ایکس نمونه‌های شیشه سرامیک پس از عملیات حرارتی در شکل ۲ ارائه شده است. بر اساس الگوهای پراش به‌دست‌آمده، وجود نانوذرات کلسیم فلوراید (CaF_2) در ساختار نمونه‌ها تأیید شد. این یافته نشان می‌دهد که نمونه‌های تولید شده کاملاً آمورف نیستند و به صورت شیشه سرامیک‌های شفاف متبلور شده‌اند.



شکل ۲. الگوهای پراش پرتو ایکس نمونه‌های شیشه-سرامیک.

برای تأیید بیشتر ماهیت شیشه-سرامیکی نمونه‌های سنتز شده، مطالعات میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM)انجام شد و تصاویر به‌دست‌آمده در شکل ۳ نشان داده شده است. به وضوح می‌توان مشاهده کرد که اندازه متوسط نانوذرات تشکیل‌شده تقریباً ٦٢ نانومتر است و ذرات توزیع اندازه یکنواخت و همگنی مطلوبی را در ساختار نشان می‌دهند.



شکل ۳. تصویر میکروسکوپ الکترونی عبوری از شیشه سرامیک پس از عملیات حرارتی در دمای ٧٦٠ درجه سانتیگراد به مدت ٤٥ دقیقه.

در این مطالعه برای تعیین کمیت ضریب تضعیف خطی(μ_1)، ابتدا شدت فوتون‌های فرودی(I_0) را بدون هیچ‌گونه نمونه‌ای در مدت زمان ١٥٠ ثانیه و با ١٠ بار تکرار آزمایش با توجه به سطح زیر قله فوتوپیک مشاهده شده حاصل از آشکارساز بر روی صفحه نمایش‌گر شمارش می‌کنیم. سپس با در نظر گرفتن نمونه، مقدار شدت فوتون‌های فرودی (I) را همانند حالت قبل و با شرایط مشابه برای هر نمونه ثبت و شمارش شد. با کمک رابطه

$I = I_0 \exp^{-\mu x}$ که x ضخامت نمونه است مقادیر ضریب تضعیف خطی(μ_l) مطابق جدول ۲ بدست آمد.

ضرایب تضعیف خطی مواد از نظر تئوری با استفاده از کد MCNPX ارزیابی شد. این شبیه سازی برای اندازه گیری شار فوتون ذخیره شده در آشکارساز با Tally F4 استفاده شد. نتایج نشان می دهد که افزایش غلظت EuF3 در نمونه ها منجر به افزایش ضرایب تضعیف می شود. مقایسه مقادیر تجربی و مقادیر به‌دست‌آمده از شبیه‌سازی‌های MCNPX نشان‌دهنده تطابق قابل‌قبول بین داده‌های آزمایشگاهی و مدل‌سازی است.

این نتایج نشان می‌دهد که با افزایش غلظت یون‌های Eu^{3+}، برهمکنش‌های فوتونی افزایش می‌یابد و در نتیجه ضریب تضعیف خطی افزایش می‌یابد. نکته قابل توجه این است که نمونه‌های حاوی۱/۵ درصد مولی EuF_3 در مقایسه با سایر ترکیبات مورد مطالعه، کارایی بالاتری در کاهش شدت تابش گاما نشان دادند.

به منظور بررسی مقادیر تجربی ضرایب تضعیف جرمی از شدت‌های پیک انرژی کامل طیف‌های پرتو گامای تابشی و عبوری محاسبه شدند. مقادیر نظری ضرایب تضعیف جرمی از برنامه WinXCom [7]محاسبه شدند. مقادیر اندازه‌گیری‌ها در جدول ۲ نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش غلظت EuF3، مقادیر ضرایب تضعیف جرمی افزایش یافته است.

HVL شیشه سرامیک‌ها درانرژی ٦٦٢ کیلوالکترون‌ولت محاسبه شد، که در جدول ۲ارائه شده است. با توجه به مقادیرHVL نمونه ها با افزایش EuF3 کاهش یافتند که منجر به افزایش ضریب تضعیف جرم می‌شود. این نتایج، پتانسیل شیشه سرامیک‌های تهیه‌شده را برای استفاده به عنوان ماده محافظ تابش نشان می‌دهد.

MFPپارامتر مهمی برای تعیین سرعت واکنش فوتون گاما است. مقدار MFP نمونه‌ها در جدول ۲ نشان داده شده است. مشخص شده است که MFP با افزایش غلظت EuF_3 کاهش می‌یابد.

جدول ۲:خلاصه‌ای از خواص حفاظتی نمونه ها

نمونه	ضخامت (mm)	$\mu_l\ (cm^{-1})$		$\mu_m(\frac{cm^2}{g})$		HVL(cm)	MFP
		Expriment	MCNPX	Expriment	WinXCom		
GC_1	7.20	0.191	0.192	0.072	0.074	3.6	5.23
GC_2	7.20	0.194	0.196	0.073	0.074	3.5	5.15
GC_3	7.20	0.197	0.198	0.078	0.079	3.3	5.07

نتیجه گیری

در این مطالعه، سه سیستم شیشه سرامیک که با روش مذاب ساخته و مورد بررسی قرار گرفت. یک مطالعه مقایسه‌ای برای بررسی ویژگی‌های فیزیکی، مورفولوژیکی و خواص حفاظی در برابر تابش آنها انجام شد. از نتایج مشخص است که ضرایب تضعیف جرم و ضریب تضعیف خطی با افزایش غلظت EuF_3 افزایش می‌یابد. علاوه بر این، نتایج تجربی نشان داد که نمونه‌هایی با ضخامت ۷/۲۰میلی‌متر عملکردی معادل ۱/۵ میلی‌متر سرب خالص نشان می‌دهند، در حالی که وزن آنها به طور قابل توجهی کمتر از حفاظ های سربی است. علاوه بر این، این مواد عاری از سمیت سرب هستند و از نظر زیست‌محیطی ایمن‌تر در نظر گرفته می‌شوند. در نهایت، با توجه به شفافیت نوری بالا و قابلیت‌های مؤثر در تضعیف تابش گاما، شیشه–سرامیک‌های اکسی‌فلوراید معرفی شده در این مطالعه می‌توانند به عنوان گزینه‌های مناسبی برای تولید حفاظ های شفاف در برابر تابش یونیزان، به ویژه در کاربردهایی که قرار گرفتن مستقیم در معرض منابع تابش امکان‌پذیر نیست، عمل کنند.

مرجع‌ها

[1] S.Ruengsri. *Radiation shielding properties comparison of Pb-based silicate*, borate, and phosphate glass matrices. Science and Technology of Nuclear Installations (2014).

[2] Kaur, K., Singh, K. J., & Anand, V. Structural properties of Bi2O3–B2O3–SiO2–Na2O glasses for gamma ray shielding applications. *Radiation Physics and Chemistry*(2016),**120**, 63-72.

[3] R. agheri, A. K. Moghaddam, & H. Yousefnia, Gamma ray shielding study of barium–bismuth–borosilicate glasses as transparent shielding materials using MCNP-4C code, XCOM program, and available experimental data. *Nuclear Engineering and Technology* (2017),**49(1),** 216-223.

[4] N. Tsoulfanidis. *Measurement and Detection of Radiation*, McGraw-Hill, New York (1983).

[5] G.F. Knoll. *Radiation detection and measurement*. John Wiley & Sons, (2010).

[6] Wang, Zhenlin, and Laifei Cheng. "Gamma ray irradiation-induced variations in structure and optical properties of cerium/titanium-doped oxyfluoride transparent glass-ceramics." *Materials Research Bulletin* **92** (2017): 104-112.

[7] L Gerward, N Guilbert, KB Jensen, and H Levring, X-ray absorption in matter: Reengineering XCOM. *Radiat. Phys. Chem.* **6 0**(2001), 23–24.

بررسی اثر تشدید $\Lambda(1405)$ در طیف تکانه و انرژی دوترون‌های ناشی از برهم‌کنش $K^-_{stopped}+{}^3\mathrm{He}\rightarrow d+(\Sigma+\pi)^0$

مختاری باغکمه، زهرا؛ اسماعیلی، جعفر

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

چکیده

در این پژوهش، اثر حالت تشدیدی $\Lambda(1405)$ روی طیف‌های تکانه و انرژی دوترون حاصل از جذب کائون منفی متوقف‌شده برروی ${}^3\mathrm{He}$ را با استفاده از مدل‌های $\bar{K}N-\pi\Sigma$ مختلف در رهیافت کانال‌های جفت شده بررسی می‌کنیم. علاوه براین، وابستگی طیف‌های تکانه و انرژی دوترون به جرم و پهنای $\Lambda(1405)$ را در قالب مدل آکائیشی-یامازاکی تحلیل می‌کنیم.

واژه های کلیدی: *کائون منفی متوقف شده، هسته‌های کائونی، $\Lambda(1405)$، طیف تکانه و انرژی دوترون.*

Investigation of $\Lambda(1405)$ resonance signature on the momentum and energy spectrum of deuteron due to $K^-_{stopped}+{}^3\mathrm{He}\rightarrow d+(\Sigma+\pi)^0$ reaction

Mokhtari Baghkomeh, Zahra; Esmaili, Jafar

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Shahrekord University, Shahrekord

Abstract

In this study, we investigate the effect of the $\Lambda(1405)$ resonant state on the deuteron momentum and energy spectra resulting from stopped negative kaon absorption on ${}^3\mathrm{He}$, using various $\bar{K}N-\pi\Sigma$ models within a coupled-channel approach. Furthermore, we analyze the dependence of the deuteron momentum and energy spectra on the mass and width of the $\Lambda(1405)$ resonance within the framework of Akaishi-Yamazaki model.

***Keywords**: Stopped negative kaon, Kaonic nuclei, $\Lambda(1405)$, Deuteron momentum and energy spectrum*

PACS No. 25

مقدمه

تا قرن نوزدهم، دیدگاه‌های گوناگونی درباره‌ی ساختار ماده وجود داشت و این ساختار عمدتاً در ابعاد ماکروسکوپی بررسی و مطالعه می‌شد. با توسعه شتاب‌دهنده‌ها و آشکارسازها، فیزیک‌دانان به وجود ذرات بنیادی پی بردند و آن‌ها را شناسایی کردند. امروزه کوارک‌ها بنیادی‌ترین اجزای شناخته‌شده هادرون‌ها هستند. طبق مدل استاندارد، شش طعم کوارکی و پادکوارک‌های متناظرشان ساختار درونی هادرون‌ها را شکل می‌دهند و ذرات زیراتمی به سه دسته هادرون‌ها، لپتون‌ها و شبه ذرات دسته‌بندی می‌شوند.

هادرون‌های حاوی طعم شگفتی می‌توانند به‌عنوان ابزار مناسبی برای مطالعه‌ی ساختار داخلی هسته‌ها مورد استفاده قرار گیرند [۱]. کائون منفی به‌عنوان سبک‌ترین مزون شگفت با اسپین صفر و جرمی در حدود ۱۰۰۰ برابر جرم الکترون می‌تواند با سازوکارهای زیر با نوکلئون‌های هسته برهم‌کنش کند و هسته‌های کائونی شکل بگیرند: الف) کائون در پرواز : در این فرآیند، کائون پرانرژی مستقیماً با یکی از نوکلئون‌های هسته برهم‌کنش می‌کند و در اثر این برهم‌کنش، یکی از نوکلئون‌های هسته اخراج شده و کائون جایگزین نوکلئون اخراجی می‌شود. در ادامه کائون در اثر برهم-کنش با نوکلئون داخل هسته یک حالت شبه‌مقید کائون–نوکلئون یا

حالت تشدیدی $\Lambda(1405)$ را تشکیل می‌دهد. پس از آن کائون به درون هسته نفوذ پیدا کرده و با دیگر نوکلئونها برهم‌کنش می‌کند و هسته کائونی شکل می‌گیرد [۲].

ب) کائون متوقف‌شده : کائون پس از کندسازی بر اثر یونش و برانگیزش الکترون‌های اتمی محیط و تابش ترمزی، انرژی‌اش را از دست می‌دهد. با جایگزینی یکی از الکترون‌های اتمی با کائون کندشده، اتم کائونی تشکیل می‌شود و کائون در ترازهای به‌شدت برانگیخته به دام می‌افتد. در اثر فرآیندهای مختلفی چون فرآیندهای آبشاری، اوژه و استارک، کائون می‌تواند به ترازهای کمتر برانگیخته، واانگیخته شود [۱]. به‌دلیل هم‌پوشانی تابع موج کائون با هسته در ترازهای کمتر برانگیخته، با احتمالی کائون جذب هسته می‌شود که موجب جابه‌جایی و پهن‌شدگی ترازهای اتمی می‌شود. در این شرایط، هسته کائونی با احتمالی تشکیل شده و هسته کائونی از طریق کانال‌های $\pi\Sigma$ و $\pi\Lambda$ واپاشی می‌کند.

$\Lambda(1405)$ به‌عنوان یک حالت میانی تشدیدی نقش کلیدی را در تشکیل هسته‌های کائونی ایفا می‌کند. سنگ بنای تمام هسته‌های کائونی، تشدید $\Lambda(1405)$ است که برهم‌کنش $\bar{K}N$ در نزدیکی آستانه شدیداً تحت تاثیر این تشدید است. این حالت کمی پایین‌تر از آستانه $\bar{K}N$ قرار دارد و به‌صورت صددرصد به $\pi\Sigma$ واپاشی می‌کند. $\Lambda(1405)$ یک مولکول مزون–باریون است که حالت شبه-مقیدی در کانال کائون–نوکلئون و یک حالت تشدیدی در کانال $\pi\Sigma$ در نظر گرفته می‌شود [۳].

اولین بار یامازاکی و آکائیشی $\Lambda(1405)$ را به‌عنوان یک حالت شبه مقید کائون– نوکلئون با آیزواسپین صفر در نظر گرفتند و باتوجه به اینکه برهم‌کنش ایزواسپین صفر کائون–نوکلئون نسبت به ایزواسپین یک آن جاذب‌تر است، نشان دادند که با افزایش نسبت تعداد برهم‌کنش‌های ایزواسپین صفر به یک در هسته‌های کائونی، شکل‌گیری محیط‌های هسته‌ای بسیار چگال ممکن می‌شود [۲].

در مقابل جیدو و همکاران در رهیافتی متفاوت، $\Lambda(1405)$ را به‌عنوان یک ساختار دوقطبی در نظریه دینامیکی کایرال $SU(3)$ توصیف کردند که قطب اول آن با کانال $\bar{K}N$ جفت شده و قله‌ای در حوالی ۱۴۲۰MeV دارد و قطب دوم با کانال $\pi\Sigma$ جفت شده و قله‌ای در حوالی ۱۳۹۰MeV دارد [۴].

در مقایسه برهم‌کنش‌های مختلف برای $\bar{K}N$، برهم‌کنشی با عمق کمتر در حالت ایزواسپین $I=0$، به انرژی قیدی کمتر و پهنای بزرگتر در هسته‌های کائونی منجر می‌شود که عملاً اندازه‌گیری تجربی ترازهای کم عمق و پهن، کاری بس دشوار و یا غیرممکن است [۵]. حال سوال مهمی مطرح می‌شود که محل حالت شبه‌مقید K^-p با ایزواسپین $I=0$ و تکانه زاویه‌ای $L=0$ کجاست؟ به نظر می‌رسد که طیف تکانه و انرژی دوترون حاصل از برهم‌کنش $K^-_{Stopped}+{}^3\mathrm{He}\to d+(\pi+\Sigma)^0$ می‌تواند گزینه مناسبی برای مطالعه $\Lambda(1405)$ باشد.

برهم‌کنش $\bar{K}N-\pi\Sigma$ در رهیافت کانال‌های جفت شده با پتانسیل جداپذیر

در ادامه با استفاده از رهیافت کانال‌های جفت‌شده با پتانسیل‌های جداپذیر به معرفی مدل تک قطبی پدیده‌شناختی می‌پردازیم. در این دسته از مدل‌ها، حالت شبه‌مقید K^-p را می‌توان به‌صورت یک تشدید فشباخ [۶] درنظر گرفت که این تشدید در ناحیه حالت‌های پیوسته $\pi\Sigma$ قرار گرفته است. برای سادگی محاسبات می‌توان تنها دو کانال برهم‌کنش ($\bar{K}N$ و $\pi\Sigma$) را درنظر گرفت [۷–۱۰] که مهم‌ترین کانال‌های غالب برهم‌کنش هستند. برای توصیف برهم‌کنش در کانال‌ها و یا بین کانال‌های ورودی و یا واپاشی تشدید از پتانسیل‌های جداپذیر با توابع ساختار یاماگوچی [۱۱] استفاده می‌کنیم

$$\langle \vec{k}'|v_{ij}|\vec{k}\rangle = g(\vec{k}')U_{ij}g(\vec{k}),\quad g(\vec{k})=\frac{\Lambda^2}{\Lambda^2+\vec{k}^2} \qquad (1)$$

$$U_{ij}=\frac{1}{\pi^2}\frac{\hbar^2}{2\sqrt{\mu_i\mu_j}}\frac{1}{\Lambda}s_{ij} \qquad (2)$$

که $i\,(j)$ برای کانالهای $\bar{K}N$ یا $\pi\Sigma$ به ترتیب، ۱ یا ۲ در نظر گرفته می‌شود. μ_i (μ_j) جرم کاهش یافته در کانال $i\,(j)$، Λ پارامتر برد برهم‌کنش، $\vec{k}$ و $\vec{k}'$ به‌ترتیب تکانه‌های نسبی ذرات برهم‌کنش‌کننده قبل و بعد از برهم‌کنش هستند. هم‌چنین s_{ij} و U_{ij} به‌ترتیب پارامتر بدون بعد شدت پتانسیل و درایه ماتریس پتانسیل هستند که کانال‌های برهم‌کنشی را به یکدیگر مرتبط می‌کنند. معادله‌ی شرودینگر یک سیستم دو کاناله جفت‌شده را می‌توان با یک سیستم تک‌کاناله با پتانسیل اپتیکی متناظر توصیف نمود که

پارامتر شدت پتانسیل اپتیکی در حالت تک کاناله برحسب پارامترهای شدت دوکاناله به‌صورت

$$s_1^{opt}(E) = s_{11} - s_{12}\frac{\Lambda^2}{(\Lambda - i\kappa_2)^2 + s_{22}\Lambda^2}s_{21} \quad (۳)$$

داده می‌شود. در معادله فوق κ_2 عدد موج مختلط در کانال $\pi\Sigma$، به صورت زیر داده می‌شود

$$\frac{\hbar^2}{2\mu_2}\kappa_2^2 = E + \Delta Mc^2 \quad (۴)$$

که در آن $\Delta M = m_{K^-} + M_p - m_{\pi^\pm} - M_{\Sigma^\mp} = 99\ \mathrm{MeV/c^2}$ اختلاف جرم آستانه‌ها است. هم‌چنین انرژی حالت قطب E_{pol} از حل معادله $E_{pol} = \Xi(E_{pol})$ حاصل می‌شود [۱۰]

$$\Xi(z) \equiv -\frac{\hbar^2}{2\mu_1}\Lambda^2\left(\sqrt{-s_1^{opt}(z)} - 1\right)^2 \quad (۵)$$

طیف تکانه و انرژی دوترون در برهم‌کنش کائون متوقف‌شده برروی ^{3}He

در بررسی برهم‌کنش $K^-_{Stopped} + {}^3\mathrm{He} \to d + \pi^\pm + \Sigma^\mp$ یک سیستم سه جسمی به صورت $K^- pd$ در نظر می‌گیریم و تابع توزیع دیفرانسیلی احتمال جذب کائون (آهنگ جزئی گذار) بر حسب المان‌های تکانه‌ی ذرات در کانال واپاشی و ماتریس انتقال به‌صورت

$$d^9\Gamma = d^9(\hbar R) = 2\pi\delta(E_f - E_i)d\vec{k}_\pi d\vec{k}_\Sigma d\vec{k}_d \times \left|T_2\psi^{atom}_{nlm}(\cdot)g(\vec{k})g(\vec{k}')F(\vec{k}_{pd})\right|^2 \delta(\vec{k}_\pi + \vec{k}_\Sigma + \vec{k}_d) \quad (۶)$$

نوشته می‌شود. که در آن $T_{21} = T_{\Sigma\pi\leftarrow\bar{K}N}$ داریه ماتریس گذار، E_i و E_f به‌ترتیب انرژی اولیه و نهایی سیستم $K^- pd$-$\pi\Sigma d$ و $F(\vec{k}_{pd})$ تابع توزیع تکانهٔ سیستم دو ذره‌ای پروتون- دوترون است. المان زاویه فضایی Σ یا d را می‌توان برحسب المان کمیت $X = \hat{k}_\Sigma \cdot \hat{k}_d$ $(d\hat{k} \to d\varphi\, dX)$ نوشت و با انتگرال‌گیری برروی المان‌های فضایی و dX توزیع تکانه‌ی ذرات در کانال واپاشی را به‌صورت

$$\frac{d^2\Gamma}{dk_\Sigma dk_d} = \frac{2(2\pi)^3}{\hbar^2 c^2}\left|\psi^{atom}_{nlm}(\cdot)\right|^2 E_\pi(X,)k_\Sigma k_d \times \left|g(\tfrac{1}{2}(\vec{k}_\pi - \vec{k}_\Sigma))T_{21}(E_2)g(-\tfrac{1}{2}\vec{k}_d)F(-\vec{k}_d)\right|^2 \quad (۷)$$

به‌دست آورد. با انتگرال‌گیری از معادله (۷)، طیف انرژی جنبشی دوترون به‌صورت

$$\frac{d\Gamma}{dE_d} = \frac{m_d}{\hbar^2 k_d}\int_0^\infty dk_\Sigma \frac{d^2\Gamma}{dk_\Sigma dk_d} \quad (۸)$$

نتیجه می‌شود.

در کار حاضر، تابع توزیع تکانه پروتون- دوترون در ^{3}He را با استفاده از پتانسیل نوسانگر هماهنگ به‌صورت

$$F(k_d) = \left(\frac{6\pi}{a}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{3}{4a}k_d^2}, \quad (۹)$$

$$\frac{\hbar^2}{M}a = \hbar\omega = 16\mathrm{MeV}, \quad a = 0.386\, fm^{-2}$$

در نظر گرفته‌ایم که در آن، $r_{rms} = \sqrt{3/a} = 1.61\, fm$ است. توزیع تکانه‌ی دوترون ناظر در برهم‌کنش بر طیف‌های تکانه و انرژی دوترون حاکم شده و اثرات تشدیدی در طیف‌های حاصله مستتر است [۹]. اثرات برهم‌کنش حالت نهایی (FSI) را با استفاده از پتانسیل نوسانگر هماهنگ، حدود ۱۵% برآورد کرده‌ایم.

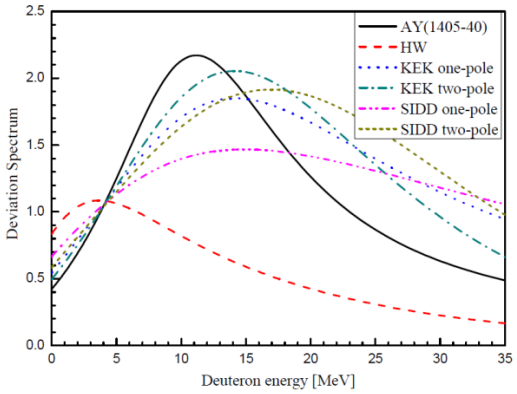
با توجه به این که در طیف‌های معادلات (۷) و (۸) اثرات سینماتیکی مسئله بر طیف حاصله غالب هستند از روش طیف انحراف (DEV) برای حذف اثرات سینماتیکی استفاده خواهیم نمود. برای محاسبه طیف‌های شبه-آزاد، از ماتریس گذار پایه بدون حضور قطب استفاده کرده‌ایم به‌نحوی که T_{21} را با پتانسیل برهم-کنشی U_{21} جایگزین کرده‌ایم.

$$DEV \equiv \frac{\text{طیف تشدیدی}}{\text{طیف شبه آزاد}} \sim \text{اثرات تشدید}$$

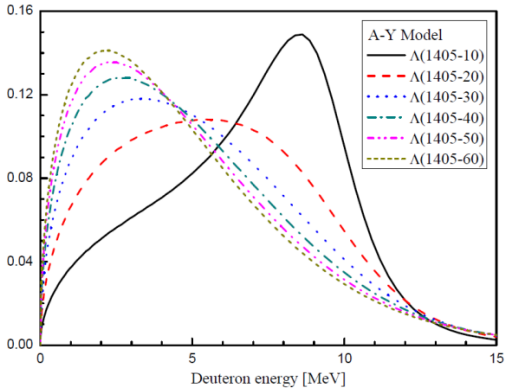
طیف انحراف انرژی دوترون را برای مدل‌های برهم‌کنشی مختلف آکائیشی-یامازاکی (A-Y) [۲]، هیدو وایز (H-W) [۱۲]، مدل کِک تک- و دو-قطبی(KEK) [۱۳] و مدل سیدارتا تک- و دو-قطبی (Siddharta) [۱۴] محاسبه و آنها را با هم در شکل ۱ مقایسه کرده‌ایم.

طیف‌های انحراف در شکل ۱ تقریبا به شکل یک تشدید برایت-ویگنر در مدل‌های مختلف ظاهر می‌شوند [۹] که محل قله و پهنای طیف انحراف را می‌توان مستقیما با انرژی و پهنای حالت شبه‌مقید در کانال $\bar{K}N$ مرتبط نمود [۱۰]. هم‌چنین نتایج حاصله نشان می‌دهند که دومین قطب در مدل‌های دوقطبی نقشی بر طیف‌های حاصله ندارد. از مقایسه طیف‌های انحراف انرژی دوترون ناظر درمی‌یابیم که اثرات تشدید (۱۴۰۵)Λ در طیف انرژی

دوترون ناظر در مدل هیبدو–وایز نسبت سایر مدل‌ها در انرژی‌های کوچک‌تر دوترون ناظر ظاهر می‌شود. این نتیجه دلیلی بر کم عمق بودن تشدید $\Lambda(1405)$ در کانال $\bar{K}N$ در مدل مذکور دارد.

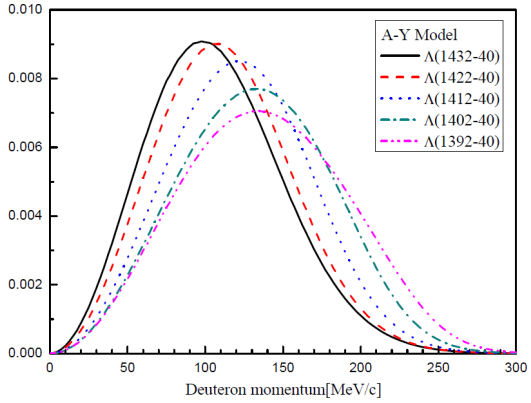


شکل ۱ : طیف انحراف (DEV) مدل‌های نظری مختلف برحسب انرژی دوترون ناظر در توقف کائون بر روی ^{3}He.



شکل ۲ : وابستگی طیف بهنجارشده‌ی توزیع انرژی دوترون در برهم‌کنش کائون–^{3}He در مدل A-Y به تغییرات پهنای $\Lambda(1405)$.

در ادامه به‌منظور بررسی وابستگی طیف‌های تکانه و انرژی دوترون به پارامترهای برهم‌کنش $\bar{K}N-\pi\Sigma$، مدل آکائیشی–یاماژاکی را مبنای کار قرار می‌دهیم. در این مدل پارامتر Λ به گونه‌ای انتخاب شده که با جرم ρ مزون‌ها $\Lambda = ۷۷۰\text{MeV}/\hbar c = ۳/۹\text{fm}^{-1}$ متناظر است. با تغییر پهنای حالت تشدیدی $\Lambda(1405)$، تغییرات طیف انرژی دوترون را محاسبه و در شکل ۲ ارائه نموده‌ایم. نتایج نشان می‌دهند که با کاهش پهنای حالت تشدیدی $\Lambda(1405)$، اثرات تشدیدی در حوالی انرژی‌های دوترون ۹ MeV بر اثرات سینماتیکی غلبه کرده و به صورت یک قله مجزا از قله اثرات سینماتیکی پدیدار می‌شود. با تغییر جرم حالت تشدیدی $\Lambda(1405)$، تغییرات طیف تکانه دوترون را محاسبه و در شکل ۳ نشان داده‌ایم. با کاهش جرم $\Lambda(1405)$ انرژی بیشتری در اختیار دوترون‌های کانال واپاشی قرار می‌گیرد و قله طیف تکانه دوترون به تکانه‌های بزرگ‌تر سوق داده می‌شود.



شکل ۳ : وابستگی طیف بهنجارشده‌ی توزیع تکانه دوترون ناظر در برهم‌کنش کائون–^{3}He در مدل A-Y به تغییرات جرم $\Lambda(1405)$.

نتایج کار حاضر به خوبی نشان می‌دهند که طیف‌های حاصل از برهم‌کنش $K^{-}_{Stopped}+{}^{3}\text{He}\to d+\pi^{\pm}+\Sigma^{\mp}$ به مدل برهم‌کنشی $\bar{K}N-\pi\Sigma$ و پارامترهای مدل‌های پدیده‌شناختی حساس هستند و چنین برهم‌کنشی می‌تواند در تعیین جرم و پهنای $\Lambda(1405)$ نقشی تعیین کننده داشته باشد لذا انجام چنین آزمایشی در J-PARC یا DAΦNE، می‌تواند کمکی در درک صحیحی از مسئله $\Lambda(1405)$ باشد.

مرجع‌ها

[1] Batty, C. J., Friedman, E. and Gal, A., *Phys. Rep.* **287** (1997) 385.
[2] Akaishi, Y. and Yamazaki, T., *Phys. Rev.* C **65** (2002) 044005.
[3] Navas, S. *et al.*, *Phys. Rev.* D **110** (2024) 030001.
[4] D. Jido *et al.*, *Nucl. Phys.* A **725** (2003) 181.
[5] Yamazaki, T. and Akaishi, Y., *Phys. Lett.* B **453** (1999) 1.
[6] H. Feshbach, *Ann. Phys.* **5** (1958) 357; H. Feshbach, *Ann. Phys.***19** (1962) 287.
[7] Akaishi, Y., Khin Swe Myint and Yamazaki T.; *Proc. Jpn. Acad. Ser.* B **84** (2008) 264.
[8] Yamazaki, T. and Akaishi, Y., *Nucl. Phys.* A **792** (2007) 229.
[9] Esmaili, J., Akaishi, Y. and Yamazaki, T., *Phys. Lett.* B **686** (2010) 23.
[10] Esmaili, J., Akaishi, Y. and Yamazaki, T., *Phys. Rev.* C **83** (2011) 055207.
[11] Yamaguchi, Y. and Yamaguchi, Y., *Phys. Rev.* **95** (1954) 1628; Yamaguchi, Y. and Yamaguchi, Y., *Phys. Rev.* **95** (1954) 1635.
[12] Hyodo, T. and Weise, W., *Phys. Rev.* C **77** (2008) 035204.
[13] Shevchenko, N. V., *Phys. Rev.* C **85** (2012) 034001.
[14] Shevchenko, N. V., *Nucl. Phys.* A **890–891** (2012) 50–61.

استفاده از آشکارساز رانش سیلیکونی چهارقسمتی در آنالیز کمی میکروپیکسی با بهره‌گیری از نرم‌افزار GeoPIXE

غلامی حاتم، ابراهیم*

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر، ایران

چکیده

روش نشر پرتو ایکس القایی ذره‌ای[†] (پیکسی) یکی از دقیق‌ترین و حساس‌ترین روش‌های آنالیز عنصری غیرمخرب است که توانایی آشکارسازی عناصر را در غلظت‌های بسیار پایین فراهم می‌کند. ترکیب این روش با میکروپروب هسته‌ای (میکروپیکسی) امکان تصویربرداری دوبعدی و کمی از توزیع عناصر را در ابعاد میکرومتری فراهم ساخته است. با این حال، در آنالیزهای میکروپیکسی، افزایش نرخ شمارش و دستیابی به دقت کمی بالا همواره با چالش‌هایی نظیر زمان‌مرده آشکارساز، انباشت پالس و کاهش کیفیت طیفی همراه بوده است. در این پژوهش، استفاده از آشکارساز رانش سیلیکونی چهارقسمتی به‌منظور بهبود دقت آنالیز کمی و افزایش کیفیت داده‌های پیکسی مورد بررسی قرار گرفته است. ابتدا اصول فیزیکی روش پیکسی و ساختار میکروپروب هسته‌ای معرفی شده و سپس نحوه عملکرد نرم‌افزار GeoPIXE و روش تحلیل دینامیکی برای استخراج تصاویر عنصری کمی تشریح گردیده است. در ادامه، نمونه فلز خالص تیتانیوم با استفاده از آشکارساز چهارقسمتی نصب‌شده در موئسسه ژوزف استفان کشور اسلوونی اندازه‌گیری شد. داده‌های حاصل از هر بخش آشکارساز به‌صورت مجزا و همچنین به‌صورت ترکیبی تحلیل شدند تا تأثیر ادغام داده‌ها بر کیفیت طیف و دقت آنالیز کمی ارزیابی گردد. نتایج نشان داد که استفاده از آشکارساز چندقسمتی موجب کاهش زمان مرده، افزایش نرخ شمارش مؤثر، بهبود نسبت سیگنال به نویز و افزایش دقت آنالیز کمی می‌شود. همچنین نرم‌افزار GeoPIXE با استفاده از روش تحلیل دینامیکی توانست همپوشانی‌های طیفی و زمینه پیوسته را به‌خوبی حذف کرده و تصاویر کمی دقیقی از توزیع عناصر ارائه دهد. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که ترکیب آشکارسازهای چندقسمتی با روش‌های پیشرفته تحلیل طیفی می‌تواند نقش مهمی در آنالیز کمی عناصر ایفا کند.

واژه های کلیدی: *میکروپیکسی، GeoPIXE، آشکارساز رانش سیلیکونی، آنالیز کمی، تصویربرداری عنصری*

Application of a Four-Segment Silicon Drift Detector for Quantitative Micro-PIXE Analysis Using GeoPIXE software

Gholami Hatem, Ebrahim

Department of Physics, Faculty of Science, Malayer University, Malayer, Iran

Abstract

Particle Induced X-ray Emission (PIXE) is one of the most powerful non-destructive elemental analysis techniques capable of detecting trace elements with high sensitivity at micro- and nano-scales. When combined with a Nuclear Microprobe, Micro-PIXE enables high-resolution quantitative elemental imaging. In recent years, the development of multi-segment Silicon Drift Detectors (SDDs) has significantly improved counting statistics, reduced detector dead time, and enhanced spectral quality in micro-PIXE analysis. In this study, the physical principles of Micro-PIXE is first introduced, followed by a detailed description of the Dynamic Analysis approach implemented in the GeoPIXE software package for quantitative elemental imaging. The performance of a four-segment Silicon Drift Detector installed at Jožef Stefan Institute, Slovenia, is then investigated with emphasis on its capability for high-throughput quantitative Micro-PIXE analysis. As an experimental case study, a pure Ti sample was measured using the four independent detector segments positioned at opposite geometrical angles. Spectra from individual detector segments as well as merged spectra were analyzed and compared. The results demonstrate that combining the signals from all detector segments improves signal-to-noise ratio, reduces

*رایانامه نویسنده: e.gholami@malayeru.ac.ir

[†] Particle Induced X-ray Emission (PIXE)

statistical uncertainties, and enhances quantitative accuracy. Furthermore, GeoPIXE dynamic analysis successfully produced quantitative elemental maps with improved spectral deconvolution and background suppression. The study confirms that four-segment Silicon Drift Detectors, combined with GeoPIXE quantitative analysis, provide an efficient and reliable approach for high-resolution quantitative elemental imaging in microanalytical applications.

***Keywords**: Micro-PIXE, GeoPIXE, Silicon Drift Detector, Quantitative Analysis, Elemental Imaging*

PACS No. 23

مقدمه

برهم‌کنش پروتون‌های با انرژی MeV با یک هدف، منجر به یونش اتم‌های هدف و در پی آن گسیل پرتوهای ایکس با انرژی‌هایی می‌شود که طیفی مشخصه‌ای از اتم‌های هدف فراهم می‌کنند. فرآیندهای اتلاف انرژی پروتون و جذب پرتو ایکس درون هدف و آشکارساز پرتو ایکس، امکان مدل‌سازی مستقیم تولید پرتو ایکس و محاسبه‌ی بازده پرتو ایکس را برای یک ترکیب مشخص از هدف فراهم می‌سازد. این موضوع یک رابطه‌ی کمی میان بازده آشکارسازی‌شده‌ی پرتوهای ایکس مشخصه و غلظت عناصر درون هدف ایجاد می‌کند و پایه‌ی روشی برای تحلیل کمی به نام گسیل پرتو ایکس القاشده توسط پروتون (پیکسی) است که این روش را برای تحلیل عناصر کم‌مقدار در غلظت‌های نزدیک یا کمتر از ۱ ppm بسیار مناسب می‌سازد [۱].

پرتوهای پروتونی با انرژی چند مگاالکترون ولت را می‌توان با استفاده از یک سامانه‌ی عدسی چهارقطبی، در نقطه‌ای با قطر حدود چمد میکرومتر متمرکز کرد. این نقطه‌ی پرتویی را می‌توان به‌صورت روبشی روی نمونه حرکت داد تا اطلاعاتی درباره‌ی ترکیب نمونه به‌عنوان تابعی از موقعیت‌های مکانی پرتو به صورت تصاویر دو–بعدی فراهم آورد. با این حال، روش‌های متداول تصویربرداری میکروپیکسی کمتر پالایش‌یافته‌اند. در روش تحلیل دینامیکی برای تصویربرداری، تصویر یک عنصر باید تنها توزیع مکانی همان عنصر را با دقت نمایش دهد و از اثرات مخرب ناشی از سایر عناصر و زمینه عاری باشد [۲].

روش تحلیل دینامیکی در نرم‌افزار GeoPIXE

روش تحلیل دینامیکی که در نرم‌افزار GeoPIXE [۳] پیاده‌سازی شده است، یکی از پیشرفته‌ترین روش‌های پردازش داده‌های پیکسی برای استخراج کمی غلظت عناصر و تولید تصاویر عنصری با تفکیک‌پذیری بالا به شمار می‌رود. در این روش، طیف انرژی پرتو ایکس ثبت‌شده از نمونه به‌صورت یک ترکیب خطی از خطوط مشخصه‌ی عناصر مختلف، مؤلفه‌ی زمینه، قله‌های فرار آشکارساز و مؤلفه‌های ناشی از انباشت الکترونیکی مدل‌سازی می‌شود. برای این منظور، ابتدا یک طیف مرجع طبق شرایط آزمایش اخذ شده و پارامترهای غیرخطی شامل کالیبراسیون انرژی، پهنای قله‌ها، شدت دنباله‌ها و پاسخ آشکارساز از طریق برازش کمترین مربعات غیرخطی تعیین می‌شوند. پس از تثبیت این پارامترها، ضرایب خطی مربوط به شدت خطوط مشخصه‌ی عناصر با استفاده از روش کمترین مربعات خطی محاسبه می‌گردند. این فرآیند منجر به تشکیل ماتریس تبدیل می‌شود که طیف ثبت‌شده را مستقیماً از طریق اندازه‌گیری بار الکتریکی به تصاویر دو–بعدی غلظت عناصر تبدیل می‌کند [٤].

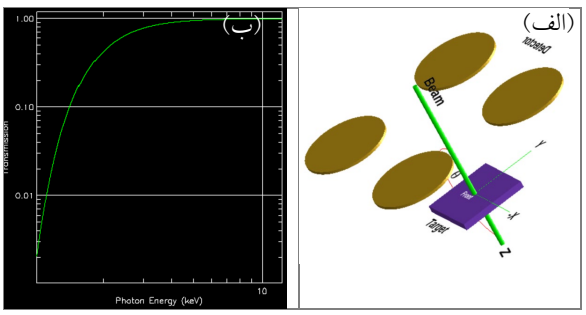
اندازه‌گیری‌های پرتوهای ایکس با آشکارساز چهار قسمتی

آشکارسازهای چندقسمتی واقع در موئسسه ژوزف استفان اسلوونی از چهار بخش مستقل برای ثبت هم‌زمان سیگنال‌های پرتو ایکس استفاده می‌کند که هر بخش به‌طور مستقل سیگنال‌های حاصل از جذب فوتون‌های ایکس را ثبت و پردازش می‌کند. از آنجا که هر بخش ظرفیت شمارش مستقل دارد، بار الکترونیکی و نرخ رویدادها بین چند کانال توزیع می‌شود و در نتیجه احتمال هم‌زمانی سیگنال‌ها و ایجاد پدیده انباشت کاهش می‌یابد.

ماده اصلی هر بخش آشکارساز از سیلیکون رانشی با مساحت فعال ۱۱ mm^2 تشکیل شده که به صورت مرکزی و متقارن اطراف یک حفره به شعاع ۱/۸ mm با فاصله ۸/۳ mm از صفحه

رویی نمونه قرار گرفته‌اند (شکل ۱ (الف)) که در مجموع زاویه فضائی ٤١٥ mSr را در فضای اطراف نمونه پوشش می‌دهد. به منظور متوقف کردن ذرات برگشی و همچنین جلوگیری از عبور پرتوهای ایکس کم‌انرژی هر بخش توسط یک لایه از Be به ضخامت ٦٠ µm روی بخش حساس سلیکونی و آلومینیومی آشکارساز هریک به ضخامت ٠/٥ mm پوشانده شده است. ضریب عبور فوتون‌های کم انرژی برای این نوع فیلتر در شکل ۱ (ب) نشان داده شده است.

نمونه مورد استفاده در این پژوهش، فلز تیتانیوم خالص بود که سطح آن با خراش‌هایی به شکل علامت مثبت (+) آماده‌سازی شده بود. هدف از ایجاد این ناهمواری‌ها، بررسی تأثیر هندسه سطح و جذب پرتو ایکس در زوایای مختلف آشکارسازی بود. از آنجا که هر بخش آشکارساز در موقعیت زاویه‌ای متفاوتی نسبت به نمونه قرار داشت، شدت پرتوهای ایکس ثبت‌شده توسط هر قسمت تحت تأثیر میزان جذب و سایه‌اندازی ناشی از ناهمواری‌های سطحی قرار می‌گرفت. این ویژگی امکان بررسی عملکرد آشکارساز چندقسمتی در شرایط واقعی را فراهم می‌آورد. برای تحریک نمونه از باریکه پروتون با انرژی ۳ MeV استفاده گردید و بر روی ناحیه‌ای به ابعاد μm^2 ۱۲۰۰ × ۱۲۰۰ جاروب شد. داده‌های طیفی و مکانی به‌صورت هم‌زمان ثبت و ذخیره شدند تا امکان بازسازی تصاویر عنصری فراهم شود. تحلیل طیف‌ها، برازش داده‌ها و استخراج تصاویر کمی عنصری با استفاده از روش تحلیل دینامیکی در نرم‌افزار GeoPIXE انجام شد.



شکل ۱: (الف) شمای کلی آشکارساز چهارقسمتی نسبت به باریکه فرودی. (ب) ضریب عبور فوتون‌های کم انرژی از فیلتر هر بخش آشکارساز.

نتایج و بحث

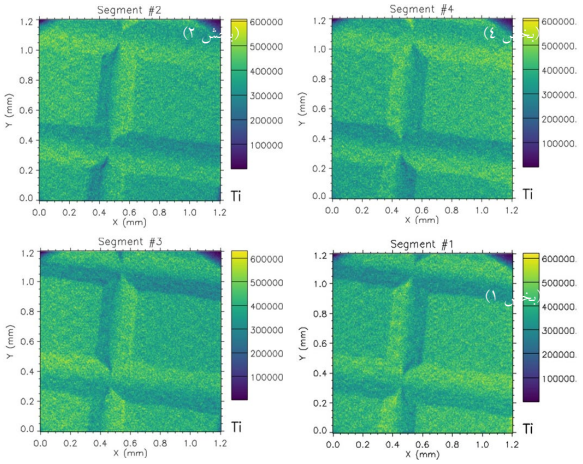
جدول ۱: داده‌های حاصل از برازش طیف پرتوهای ایکس آشکارساز چهاربخشی.

شماره طیف	Ti (ppm)	خطا (ppm)	حدآشکارسازی (ppm)	خطای نسبی	RMS*
بخش ۱	۳۹۲۰٦٦	٤٩٢	٢٨	٠/٠٣٣	٠/١٤١٥
بخش ۲	۳۷۹۳۰۸	٤٧١	٣٠	٠/٠٣٥	٠/١٤٩٨
بخش ۳	۳۹۳٦۱۸	٤٣٤	٣٠	٠/٠٣٤	٠/١٤٨٧
بخش ٤	۳۸٦٤۱۷	٤٢٥	٢٨	٠/٠٣٥	٠/١٦٧١
طیف ترکیبی	۳۸۷۷٥٠	٤١٤	١٥	٠/٠١٩	٠/١١٧٦

* Root Mean Square (جذر میانگین مربعی داده‌های برازش شده).

نتایج حاصل از برازش تک‌تک طیف‌ها و طیف ترکیب‌شده جدول ۱ نشان داد که غلظت Ti در آشکارسازهای جداگانه در بازه ppm ۳۷۹۳۰۸ – ۳۹۳٦۱۸ قرار دارد، در حالی که مقدار حاصل از طیف ترکیبی برابر ppm ۳۸۷۷٥٠ به دست آمد. کمترین حد آشکارسازی از حدود ppm ۲۸–۳۰ در آشکارسازهای منفرد به ppm ۱٥ در طیف ترکیبی کاهش یافت. همچنین مقدار جذر میانگین مربعی حاصل از برازش در طیف برآیند کمتر از طیف‌های منفرد بود که نشان‌دهنده کیفیت بهتر برازش و افزایش دقت آنالیز کمی است. لذا، ادغام داده‌های چهار آشکارساز موجب کاهش عدم قطعیت، کاهش حد آشکارسازی و نیز بهبود خطای نسبی شد.

نتایج برازش طیف‌ها برای تولید تصاویر کمی توزیع عنصری هر بخش آشکارساز استفاده شد (شکل ۲). با وجود اینکه نمونه تنها از Ti خالص تشکیل شده است، تصاویر حاصل از بخش‌های مختلف آشکارساز تفاوت قابل توجهی را در توزیع عنصر Ti نشان می‌دهند. این اختلاف ناشی از ناهمواری سطح نمونه به شکل خراش علامت (+) و تفاوت زاویه فضایی هر بخش آشکارساز نسبت به سطح نمونه است که باعث تغییر میزان جذب و تضعیف پرتوهای ایکس می‌شود. بررسی تصاویر نشان داد که بخش ۱ بیشترین شدت را در ناحیه چپ و بالای علامت ثبت می‌کند، در حالی‌که بخش ۲ که در موقعیت قرینه قرار دارد، شدت بیشتری را در سمت مقابل نشان می‌دهد. رفتار مشابهی نیز میان بخش‌های ۳ و ٤ مشاهده شد. این نتایج نشان می‌دهد در واقع هر بخش آشکارساز با توجه به موقعیت فضایی خود نسبت به باریکه، ناهمواری سطح نمونه و مسیر انتشار پرتوهای ایکس، شدت متفاوتی را ثبت می‌کند. بنابراین، توزیع عنصری

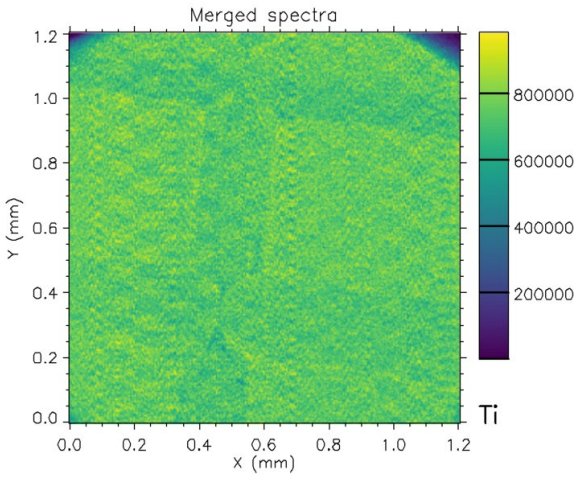


شکل ۲: تصاویر کمی توزیع عنصری Ti (برحسب ppm) حاصل از هر یک از چهار بخش مستقل آشکارساز رانش سیلیکونی (SDD).

مشاهده‌شده در هر تصویر به میزان جذب و تضعیف پرتوهای ایکس در همان راستای آشکارسازی وابسته است. این موضوع به‌ویژه در نواحی خراش‌خورده نمونه که دارای تغییرات هندسی سطح هستند، آشکارتر می‌شود. در مقابل، استفاده همزمان از آشکارساز چندقسمتی و ادغام داده‌های حاصل از تمامی بخش‌ها می‌تواند این اثرات هندسی را تا حد زیادی کاهش داده و تصویری کمی و واقع‌بینانه‌تر از توزیع عناصر ارائه دهد (شکل ۳). این موضوع یکی از مهم‌ترین مزایای آشکارسازهای چندقسمتی در آنالیز کمی میکروپیکسی محسوب می‌شود.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، عملکرد آشکارساز رانش سیلیکونی چهارقسمتی در آنالیز کمی میکروپیکسی با استفاده از نرم‌افزار GeoPIXE بررسی شد. نتایج برازش طیف‌ها نشان داد که ادغام داده‌های چهار بخش آشکارساز موجب کاهش عدم قطعیت، کاهش حد آشکارسازی و بهبود دقت آنالیز کمی می‌شود. تصاویر کمی توزیع عنصری Ti نشان دادند که هر بخش آشکارساز، به دلیل تفاوت زاویه آشکارسازی و ناهمواری سطح نمونه، شدت متفاوتی را ثبت



شکل ۳: تصویر عنصری حاصل از ادغام داده‌های هر چهار بخش آشکارساز.

می‌کند. در مقابل، تصویر حاصل از ادغام داده‌های چهار بخش توانست اثرات هندسی و جذب ناهمسانگرد پرتو ایکس را کاهش داده و توزیع کمی دقیق‌تری از عنصر Ti ارائه دهد. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که استفاده از آشکارسازهای چندقسمتی می‌تواند نقش مهمی در بهبود دقت و کیفیت آنالیز کمی و تصویربرداری عنصری در مطالعات توزیع عنصری داشته باشد.

سپاسگزاری

این پژوهش در چارچوب پروژه RADIATE با شماره ۸۲٤۰۹٦ تحت حمایت اتحادیه اروپا (EU H2020) انجام شده است.

مرجع‌ها

[۱] K. Ishii, "PIXE and Its Applications to Elemental Analysis"; Quantum Beam Science, **3** (2019) 12. https://doi.org/10.3390/qubs3020012

[۲] C.G. Ryan, "PIXE and the nuclear microprobe: Tools for quantitative imaging of complex natural materials"; Nucl .Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B, **269** (2011) 2151-2162. https://doi.org/10.1016/j.nimb.2011.02.046

[۳] C. Ryan, M. Jensen, B. Etschmann, D. Cousens, GeoPIXE, CSIRO, Australian Synchrotron, 2024. https://doi.org/10.25919/ff5b-wr11

[٤] C.G. Ryan, "Quantitative trace element imaging using PIXE and the nuclear microprobe"; International Journal of Imaging Systems and Technology, **11** (2001) 219-230. https://doi.org/10.1002/ima.1007

تعیین تجربی ضریب انرژی سطحی در مدل پتانسیل مجاورت با استفاده از آنالیز سطح مقطع همجوشی واکنش‌های $^{30}Si + ^{142}Ce$, $^{37}Cl + ^{68}Zn$, $^{37}Cl + ^{130}Te$

موسوی چرندابی، میرحسین – قرائی، رضا

دانشگاه فردوسی مشهد، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک

چکیده

ضریب انرژی (کشش) سطحی (γ) یکی از پارامترهای کلیدی در مدل پتانسیل مجاورت برای تحلیل واکنش‌های همجوشی است، با این حال مقادیر معرفی شده برای این ضریب عموما از روی برازش با داده‌های تجربی مثل انرژی بستگی بدست می آیند. در پژوهش حاضر، برای اولین بار مقادیر این ضریب با استفاده از آنالیز مستقیم داده‌های تجربی سطح مقطع همجوشی (به جای برازش با انرژی بستگی) تعیین شده است. برای این منظور، سه واکنش $^{30}Si+^{142}Ce$، $^{37}Cl+^{68}Zn$ و $^{37}Cl+^{130}Te$ با بهره‌گیری از مدل Prox.2010 (یکی از جدیدترین نسخه‌های پتانسیل مجاورت) و کد جفت‌شدگی کانال‌ها (CCFULL) مورد بررسی قرار گرفته‌اند. در این راستا، ضریب انرژی سطحی (γ_0) به جای مقدار پیش‌فرض مدل ($1.4607\ MeV{\cdot}fm^{-2}$) به عنوان یک پارامتر آزاد در نظر گرفته شده تا با کمینه‌سازی اختلاف بین منحنی‌های نظری و داده‌های تجربی (گزارش‌شده در سال‌های ۲۰۲۴-۲۰۲۳)، مقدار بهینه آن تعیین گردد. نتایج نشان می‌دهند که مقادیر بهینه γ_0 برای سه واکنش مذکور به ترتیب 2.06، 1.19 و $1.30\ MeV{\cdot}fm^{-2}$ به دست آمده است که با افزایش جاذبه پتانسیل هسته‌ای، کاهش چشمگیر خطای نسبی (χ) را در پی داشته است. این یافته‌ها مؤید آن است که اصلاح ضریب انرژی سطحی متناسب با جرم و ساختار هسته‌ها، گامی ضروری برای افزایش دقت پیش‌بینی‌های مدل‌های مجاورت در محدوده انرژی‌های زیر سد کولنی است.

واژه های کلیدی: *همجوشی یون سنگین، پتانسیل مجاورت، سطح مقطع همجوشی، جفت‌شدگی کانالها، هسته مرکب*

Experimental determination of the surface energy coefficient in the proximity potential model using fusion cross-section analysis of the reactions $^{30}Si+^{142}Ce$, $^{37}Cl+^{68}Zn$, $^{37}Cl+^{130}Te$

M. H. Moussavi Charandabi, R. Gharaei*

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

Abstract

The surface energy (tension) coefficient (γ) is one of the key parameters in the proximity potential model for analyzing fusion reactions; however, the introduced values for this coefficient are generally obtained from fitting to experimental data such as binding energy. In the present work, for the first time, the values of this coefficient have been determined using direct analysis of experimental fusion cross-section data (instead of fitting to binding energy). For this purpose, three reactions, $^{30}Si+^{142}Ce$, $^{37}Cl+^{68}Zn$, and $^{37}Cl+^{130}Te$, have been investigated using the Prox.2010 model (one of the latest versions of the proximity potential) and the coupled-channels code CCFULL. In this regard, the surface energy coefficient (γ_0), instead of the default value of the model ($1.4607\ MeV{\cdot}fm^{-2}$), has been considered as a free parameter so that its optimal value is determined by minimizing the discrepancy between the theoretical curves and the experimental data (reported in 2023-2024). The results show that the optimal γ_0 values for the three reactions are 2.06, 1.19 and $1.30\ MeV{\cdot}fm^{-2}$, respectively, which, by increasing the nuclear potential attraction, have led to a significant reduction in the relative error (χ). These findings confirm that modifying the surface energy coefficient according to the mass and structure of the nuclei is a necessary step to improve the predictive accuracy of proximity models in the sub-barrier energy region.

***Keywords**: Heavy ion fusion, proximity potential, fusion cross section, channel coupling, compound nucleus.*

PACS No.25

مقدمه

بررسی برهم‌کنش‌های یون‌های سنگین در محدوده انرژی‌های زیرکولنی (چند مگاالکترون‌ولت) از دیرباز یکی از محورهای اصلی پژوهش در فیزیک هسته‌ای تجربی و نظری به شمار می‌رود. در این برخوردها، کانال‌های همجوشی کامل به عنوان فرایندی کلیدی مطرح هستند که منجر به تشکیل سامانه‌ای هسته‌ای با برانگیختگی بالا، موسوم به هسته مرکب، می‌شوند. چنین واکنش‌هایی افزون بر بسط مرزهای جدول تناوبی، امکان شناسایی جزایر پایداری فراتر از اورانیوم را نیز فراهم می‌آورند. درک کمّی پتانسیل برهم‌کنش هسته‌ای، به ویژه در نزدیکی سد کولنی و زیر آن، برای تبیین و درک صحیح از دینامیک این برخوردها ضروری است. در این میان، نظریه پتانسیل مجاورت با تکیه بر پارامترهایی مانند ضریب انرژی سطحی و ضخامت سطحی هسته‌ای، چارچوبی نسبتاً ساده و کارآمد برای برآورد نیروی هسته‌ای ارائه می‌دهد [۳]. بیشتر پژوهش‌های پیشین در چارچوب مدل‌های مجاورت، بر بازتولید ارتفاع و موقعیت سد کولنی متمرکز بوده‌اند. شمار اندکی از این مطالعات به ارزیابی مستقیم سطح مقطع همجوشی پرداخته‌اند و در آن‌ها نیز معمولاً از فرمول وانگ بدون در نظر گرفتن لثرات ساختاری استفاده شده است. با توجه به محدودیت‌های ذکرشده، انجام یک بررسی نظام‌مند برای مقایسه عملکرد نسخه‌های گوناگون پتانسیل مجاورت در تولید سطح مقطع همجوشی – با استفاده از مدل جفت‌شدگی کانال‌ها و با لحاظ کردن درجات آزادی ارتعاشی و چرخشی هسته‌ها [۷] – به منظور معرفی نسخه برتر، ضروری به نظر می‌رسد. اهمیت این موضوع به‌ویژه برای واکنش‌هایی که داده‌های آزمایشگاهی سطح مقطع آن‌ها به‌تازگی گزارش شده است، دوچندان می‌باشد.

در پژوهش حاضر، وابستگی انرژی سطح مقطع همجوشی برای سه واکنش $^{30}Si+^{142}Ce$، $^{37}Cl+^{68}Zn$ و $^{37}Cl+^{130}Te$ با بهره‌گیری از یکی از به‌روزترین نسخه‌های پتانسیل مجاورت یعنی Prox.2010 و با در نظر گرفتن اثرات جفت‌شدگی کانال‌ها با استفاده از کد (CCFULL) ارزیابی شده است. داده‌های تجربی مورد مقایسه نیز از مراجع معتبر بین سال‌های ۲۰۲۳ تا ۲۰۲٤ استخراج شده‌اند.

در ادامه، روش‌های محاسباتی، نتایج و بحث و در نهایت نتیجه‌گیری ارائه می‌شود.

روش کار

برای تعیین پتانسیل برهم‌کنش هسته–هسته، از مدل Prox.2010 استفاده شده است. در این مدل، پتانسیل هسته‌ای به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$V_N^{Prox.2010}(r) = 4\pi\gamma b\bar{R}\Phi\left(\frac{s}{b}\right) \qquad (۱)$$

در این رابطه، $\bar{R}$ شعاع انحنای میانگین و s فاصله جدایی بین دو سطح هسته‌ها است. پارامتر b نشان‌دهنده ضخامت سطحی بوده و مقدار متعارف آن ۱ فمتومتر در نظر گرفته می‌شود. تابع جهانی $\Phi(s)$ مستقل از جرم و شکل هسته‌ها می‌باشد و جزئیات دقیق هر یک از این کمیت‌ها در نسخه‌های مختلف فرمولبندی مجاورت در مراجع [۱۲–۱۰] قابل مشاهده است. ضریب γ که با عنوان انرژی سطحی (یا کشش سطحی) شناخته می‌شود، مطابق رابطه زیر محاسبه می‌گردد:

$$\gamma = \gamma_0\left[1 - k_s\left(\frac{N-Z}{N+Z}\right)^2\right] \qquad (۲)$$

در این رابطه، $\gamma_0 = 1.460734\ \mathrm{MeV\cdot fm^{-2}}$ ثابت انرژی سطحی و $k_s = 4.0$ ثابت عدم تقارن سطحی است. پس از محاسبه بخش هسته‌ای، جمله کولنی $V_c(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$ به آن افزوده می‌شود تا پتانسیل برهم‌کنشی کل در فواصل مختلف بین مراکز هسته‌ها به دست آید. مرحله بعد، محاسبه سطح مقطع همجوشی با استفاده از کد CCFULL (مبتنی بر روش کانال‌های جفت‌شده) است. این کد قادر است با در نظر گرفتن تمام مراتب جفت‌شدگی میان حرکت نسبی هسته‌ها و درجات آزادی جمعی هسته‌ای، سطح مقطع همجوشی و تکانه زاویه‌ای میانگین هسته مرکب را محاسبه کند. مطابق با هدف اصلی پژوهش (تعیین تجربی ضریب γ_0)، مقدار γ_0 به عنوان یک پارامتر آزاد در نظر گرفته شد. با تغییر γ_0 و محاسبه درصد خطای نسبی (χ)، مقدار بهینه آن از طریق کمینه‌سازی اختلاف بین سطح مقطع نظری و تجربی تعیین گردید. این فرآیند برای هر سه واکنش به طور جداگانه انجام شده است. لازم به ذکر است که مقادیر χ از رابطه زیر محاسبه می گردد،

$$\chi = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{(\sigma_{Theo.})_i - (\sigma_{Exp.})_i}{(\sigma_{Theo.})_i + (\sigma_{Exp.})_i}\right)^2} \times 10 \qquad (۳)$$

در اینجا N تعداد داده های تجربی، $\sigma_{Theo.}$ و $\sigma_{Exp.}$ به ترتیب مقادیر تئوری و تجربی سطح مقطع های همجوشی می‌باشند.

نتایج

در گام نخست، رفتار سطح مقطع همجوشی بر حسب انرژی برای واکنش $^{30}Si+^{142}Ce$ با استفاده از مدل Prox.2010 و کد CCFULL مورد ارزیابی قرار گرفت. در این محاسبات، اثرات جفت‌شدگی با حالت‌های ارتعاشی کم‌انرژی 2^+ و 3^- در هر دو هسته برهم‌کنش‌گر در نظر گرفته شد. مشخصات ساختاری این حالت‌ها (انرژی برانگیختگی و پارامترهای تغییر شکل) در جدول (۱) گردآوری شده است. شایان ذکر است که هر دو مد چهارقطبی و هشت‌قطبی به صورت تک‌فونونی در محاسبات لحاظ شده‌اند. نمودارهای حاصل در شکل (a-۱) به همراه داده‌های تجربی متناظر و نیز نتایج مرجع [۸] نمایش داده شده‌اند. نتایج مرجع [۸] بر پایه پتانسیل نوع وودز-ساکسون (با پارامترهای $V0=71.53$ MeV، $r_0=1.18$ fm و $a_0=0.70$ fm و کد CCFULL) با همان ورودی‌های جدول (۱) به دست آمده‌اند. مقایسه منحنی‌ها نشان می‌دهد که مدل اصلی Prox.2010 در همه محدوده انرژی به ویژه در نواحی زیر سد کولنی، سطح مقطع کمتری نسبت به هر دو رویکرد دیگر (مدل WS و داده‌های تجربی) پیش‌بینی می‌کند. این اختلاف بیانگر نیاز فرمول‌بندی مدل مجاورت به اصلاح است. با توجه به نتایج شکل (۱) ، برای بهبود همخوانی لازم است سطح مقطع محاسبه‌شده توسط Prox.2010 افزایش یابد که این افزایش با تقویت پتانسیل هسته‌ای (افزایش جاذبه) حاصل می‌شود. مدل اصلاح شده حاصل تحت عنوان Mod. Prox. 2010 نامگذاری شده است.

برای واکنش $^{37}Cl+^{68}Zn$، همانطور که در شکل (b-۱) مشاهده می‌کنیم، مدل Prox.2010 مثل واکنش قبل می‌تواند پیش بینی قابل قبولی برای رفتار سطح مقطع در محدوده اطراف و بالای سد داشته باشد ولی در ناحیه پایین سد نیاز به اصلاح دارد. افزودن حالت‌های ارتعاشی 2^+ و 3^- در کد CCFULL منجر به بهبود نتایج گردید.

جدول (۱): اطلاعات ساختاری حالات 2^+ و 3^- هسته‌های پرتابه و هدف که در محاسبات سطح مقطع براساس مدل جفت‌شدگی کانال‌ها بکارگرفته شده‌اند[۱۱،۱۲]. این اطلاعات شامل اسپین و پاریته I^{Π} ترازهای برانگیخته، پارامتر تغییرشکل β_I و انرژی برانگیختگی E_I متناظر آنها می باشد.

هسته	I^{Π}	β_I	$E_I(MeV)$
^{30}Si	2^+	- ۰/۲٤	۲/۲٤
	3^-	۰/۲۷	۵/٤۹
^{142}Ce	2^+	۰/۱۲	۰/٦۸
	3^-	۰/۱۳	۱/٦۵
^{37}Cl	2^+	۰/۲٤	۳/۰۹
	3^-	۰/۱۸	۵/۱۵
^{68}Zn	2^+	۰/۲۳	۱/۰۸
	3^-	۰/۱۷	۲/۵۱
^{130}Te	2^+	۰/۱۱	۰/۸٤
	3^-	۰/۱۰	۲/۳۹

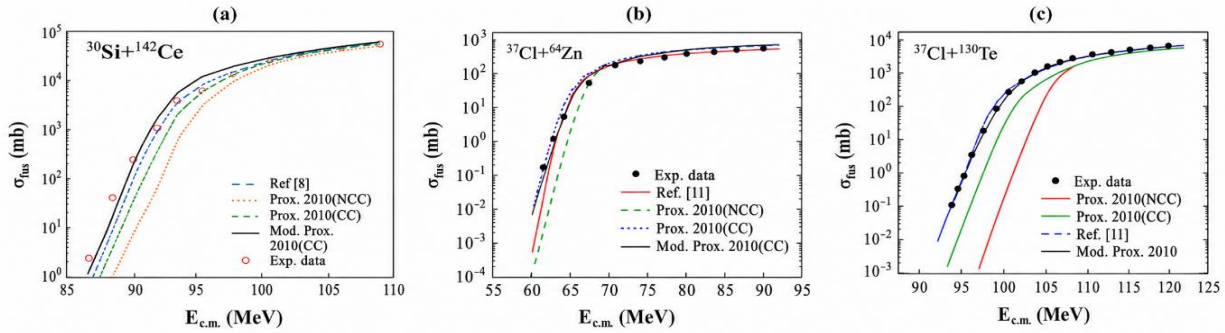
مشخصا، حضور حالت 3^- در ناحیه زیر سد میزان اختلاف داده های تئوری و تجربی را کاهش می‌دهد که حاکی از اهمیت قابل توجه اثرات چندقطبی در واکنش‌های سبک است که در شکل (b-۱) کاملا گویاست. این موارد در سیستم $^{37}Cl+^{130}Te$ در شکل (c-۱) نیز صدق می‌کند. برای واکنش $^{37}Cl+^{130}Te$، بازه انرژی مرکز جرم MeV ۹۳.٦۸ تا MeV ۱۲۰.۱۸ می باشد. مشاهده می‌شود که سطح مقطع در نواحی زیر سد به دلیل مشارکت کانال‌های جفت‌شده (مانند تغییر شکل و برانگیختگی‌های نامنظم) افزایش یافته است.

با توجه به رابطه مستقیم پتانسیل هسته‌ای با ضریب کشش سطحی (γ) در رابطه (۱) و وجود پارامتر قابل تنظیم γ_0 در رابطه (۲)، این پارامتر به عنوان یک کمیت آزاد در نظر گرفته می‌شود. با تغییر γ_0 و محاسبه درصد خطای نسبی (χ) از رابطه (۳)، مقدار بهینه آن از طریق کمینه‌سازی اختلاف بین سطح مقطع نظری و تجربی تعیین میگردد. سهم پارامتر k_s در این فرآیند ناچیز است. در شکل (۲) رفتار درصد خطای نسبی χ بر حسب γ_0 برای هر سه واکنش نشان داده شده است. رفتار مقادیر بدست آمده برای این پارامتر برحسب γ_0 برای واکنش $^{30}Si+^{142}Ce$ در شکل ۲ رسم شده است. می‌بینیم که کمینه اختلاف در $\gamma_0 \approx 2.06$ MeV·fm^{-2} است که بیانگر افزایش قدرت کشش سطحی نسبت به مقدار پیش‌فرض (۱.٤٦۰۷) در این واکنش است. نکته قابل توجه اینکه مقدار χ حاصل از نسخه اصلاح‌شده Prox.2010 به مراتب کمتر (۲۳.٤۹) از مقدار

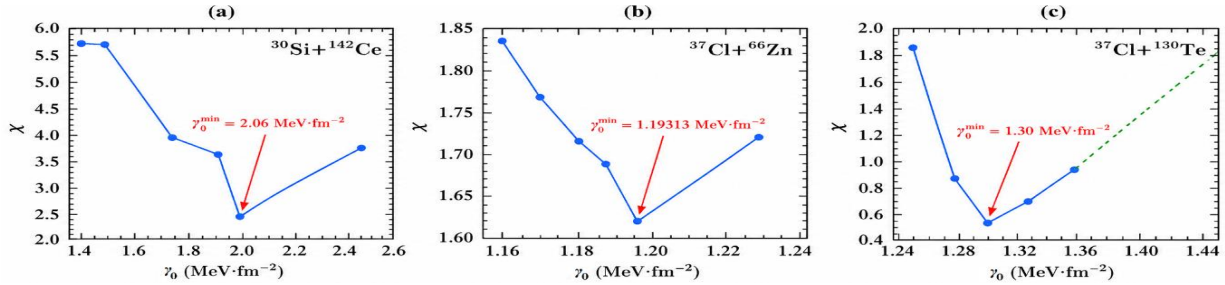
گزارش‌شده در مرجع [۸] یعنی (۳۸.۹٤) بوده است که نشان‌دهنده تطابق بهتر مدل اصلاح شده Prox. 2010 با داده‌های تجربی در کل محدوده انرژی است، شکل (۱) را ملاحظه نمایید. لازم به ذکر است که مطابق شکل (۲) برای دو واکنش دیگر $^{37}Cl+^{68}Zn$ و $^{37}Cl+^{130}Te$ مقدار χ به ترتیب در γ_0=1.19313 MeV·fm^{-2} و $\gamma_0\approx$1.30 MeV·fm^{-2} به کمینه می رسند. به ازای این مقادیر سطح مقطع‌های همجوشی محاسبه شده بیشترین همپوشانی را با داده‌های تجربی متناظر دارد.

بحث و نتیجه گیری:

در پژوهش حاضر، وابستگی انرژی سطح مقطع همجوشی برای سه واکنش یون سنگین $^{30}Si+^{142}Ce$ ، $^{37}Cl+^{68}Zn$ و$^{37}Cl+^{130}Te$ با استفاده از مدل پتانسیل مجاورت Prox.2010 مورد ارزیابی قرار گرفت. یافته‌های اولیه حاکی از آن است که نسخه اصلی این مدل، بدون اعمال اصلاحات، قادر به بازتولید دقیق داده‌های تجربی در گستره کامل انرژی نیست. به منظور بهبود تطابق، پارامتر ضریب انرژی سطحی (γ_0) به عنوان یک کمیت آزاد در نظر گرفته شد و مقدار بهینه آن از طریق کمینه‌سازی اختلاف بین سطح مقطع تئوری و تجربی تعیین گردید. نتایج حاصل نشان می‌دهد که افزایش γ_0 به مقادیر به‌دست‌آمده (به ترتیب ۲.۰٦ MeV·fm^{-2}، ۱.۱۹ و ۱.۳۰ MeV·fm^{-2} برای هر واکنش) منجر به کاهش چشمگیر درصد خطای نسبی و همگرایی مطلوب منحنی‌های نظری با داده‌های تجربی می‌شود. این مشاهدات مؤید آن است که اصلاح ضریب انرژی سطحی متناسب با ساختار و جرم هسته‌ها، گامی ضروری برای افزایش دقت پیش‌بینی‌های مدل‌های مجاورت در محدوده انرژی‌های زیر سد کولنی است.



شکل(۱): مقایسه رفتار وابسته به انرژی مقادیر سطح مقطع همجوشی نسخه اصلی و اصلاح شده فرمولبندی مجاورت با داده های تجربی و مدل های مختلف پتانسیل.



شکل (۲): مقایسه رفتار مقادیر χ برحسب گاما (γ_0) برای واکنش های $^{30}Si+^{142}Ce$، $^{37}Cl+^{68}Zn$ و $^{37}Cl+^{130}Te$.

مراجع:

[1] Rinku Prajapat, et al., *Phys. Rev. C* **107, 064616** (2023).
[2] S. Sanila, et al., *Phys. Rev. C* **106, 024614** (2022).
[3] J. Blocki, J. Randrup, W. J. Swiatecki, and C. F. Tsang, Ann. *Phys. (NY)* **105, 427** (1977).
[4] I. Dutt and R. K. Puri, *Phys. Rev. C* **81, 044615** (2010).
[5] I. Dutt and R. K. Puri, *Phys. Rev. C* **81, 064609** (2010).
[6] I. Dutt and R. K. Puri, *Phys. Rev.* C **81, 047601** (2010).
[7] K. Hagino, N. Rowley, and A. T. Kruppa, Comput. *Phys. Commun*. **123, 143** (1999).
[8] Amninderjeet Kaur et al., *Nucl. Phys. A* **1042, 122791** (2024).
[9] Klus H. *How We Came to Know the Cosmos*: Light & Matter: Lulu. Com (2017).
[10] Amninderjeet Kaur et al., *Nucl. Phys. A* **1042, 122791** (2024).
[11] Amit Chauhan , et al., *Phys. Rev. C* **102, 064606** (2020).
[12] R. N. Sahoo, et al., *Phys. Rev.* **C 99, 024607** (2019).

محاسبه ترازهای انرژی منیزیم در پتانسیل های برهمکنشی مختلف و مقایسه با نتایج تجربی

کوهستانی ، محسن [1]

گروه فیزیک ، دانشگاه پیام نور، تهران- ایران

چکیده

در این پژوهش ترازهای انرژی منیزیم با استفاده از کد مدل لایه‌ای اکسبش در فضای sd محاسبه شده است. به منظور ارزیابی عملکرد هامیلتونی‌های مختلف، محاسبات با استفاده از دوازده پتانسیل برهم‌کنشی انجام گرفت و نتایج به‌دست‌آمده با داده‌های تجربی و همچنین محاسبات نظری براون مقایسه شدند. به منظور ارزیابی کمی دقت برهم‌کنش‌ها، شاخص‌های آماری ریشه میانگین مربعات خطا (RMSE) و خطای استاندارد میانگین (SEM) محاسبه گردید. نتایج نشان داد که پتانسیل W بهترین تطابق را با داده‌های تجربی دارد و با مقادیر RMSE=0.147 MeV و SEM=0.046 MeV کمترین میزان خطا و پراکندگی را در میان تمامی برهم‌کنش‌های مورد بررسی ارائه می‌دهد. در مقابل، پتانسیل SU3SD بیشترین انحراف را از داده‌های تجربی نشان داد. همچنین مقایسه با نتایج براون بیانگر توانایی بالای برهم‌کنش W در بازتولید ساختار طیف انرژی هسته منیزیم-۲۴ است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که انتخاب برهم‌کنش مؤثر مناسب نقش تعیین‌کننده‌ای در توصیف دقیق ساختار هسته‌های ناحیه sd داشته و پتانسیل W یکی از مناسب‌ترین گزینه‌ها برای مطالعه این هسته‌ها محسوب می‌شود.

واژگان کلیدی: *مدل لایه‌ای هسته، کد اکسبش، ترازهای انرژی، فضای sd.*

Calculation of Magnesium Energy Levels at Different Interaction Potentials and Comparison with Experimental Results

Kouhestani, Mohsen

Department of Physics, Payame Noor University, Tehran, Iran

Abstract

In this study, the energy levels of the Mg-24 were calculated using the OXBASH shell-model code within the sd model space. To evaluate the performance of different Hamiltonians, calculations were carried out using twelve effective interaction potentials, and the obtained results were compared with available experimental data as well as Brown's theoretical calculations. To quantitatively assess the accuracy of the interactions, the statistical indicators Root Mean Square Error (RMSE) and Standard Error of the Mean (SEM) were determined. The results showed that the W interaction provides the best agreement with the experimental data, yielding the lowest values of RMSE = 0.147 MeV and SEM = 0.046 MeV among all investigated interactions. In contrast, the SU3SD interaction exhibited the largest deviation from the experimental results. Furthermore, comparison with Brown's calculations confirmed the high capability of the W interaction in reproducing the energy spectrum structure of the Mg-24 nucleus. The findings of this work demonstrate that the choice of an appropriate effective interaction plays a crucial role in the accurate description of nuclear structure in the sd-shell region, and that the W interaction is one of the most suitable candidates for studying nuclei in this region.

Keywords: *Nuclear Shell Model, OXBASH Code, Energy Levels, sd Shell.*

PACS No. 20,21

[1]-m_kouhestani@pnu.ac.ir

مقدمه

بررسی ترازهای انرژی با استفاده از مدل لایه‌ای برای هسته‌های مختلف یکی از مسائل اصلی فیزیک هسته‌ای می‌باشد.کدهای محاسباتی زیادی در این زمینه نوشته و استفاده شده است از جمله کد محاسباتی مدل لایه‌ای اکسبش که یک کد کامپیوتری قوی برای محاسبه ترازهای انرژی هسته‌های سبک و متوسط حداکثر تا عدد جرمی ۵۰ می‌باشد. این کد بر اساس حل معادله شرودینگر و ویژه مقادیر انرژی حاصل از حل معادله برنامه ریزی شده است[۱]، به عبارتی این کد از طریق حل دقیق معادله شرودینگر، ویژه مقادیر انرژی را پیدا میکند برخلاف محاسبات مونت کارلو که به صورت تصادفی می‌باشد. در این مقاله ۱۲ برهم کنش متفاوت جهت انجام محاسبات در فضای لایه sd (شامل مدار ظرفیت $s_{1/2}, d_{3/2}, d_{5/2}$) استفاده شده است. با استفاده از این کد فضاهای مختلف مورد مطالعه قرار گرفته، از جمله لایه HASP در سال ۲۰۰۱ توسط براوون[۲] و همچنین بررسی ایزوتوپ‌های گوگرد با هامیلتونی USD در سال ۲۰۱۵ [۳] انجام شد و نیز محاسبات مربوط به آنالیز ترازهای انرژی طیف فسفر۳۲ که در سال ۲۰۱۷ انجام شده است[٤]. محاسبه ترازهای انرژی منیزیم از آنجا اهمیت دارد که منیزیم هفتمین عنصر فراوان موجود در پوسته زمین، سومین عنصر فراوان محلول در آب دریا و همچنین یازدهمین عنصر فراوان در بدن انسان است. بطوریکه کمبود منیزیم می‌تواند سبب اختلال عملکرد بخش‌های مختلف بدن گردد. منیزیم به طور طبیعی شامل سه ایزوتوپ پایدار با اعداد جرمی ۲٤و۲۵و۲٦ است و همچنین تاکنون ۱۹ ایزوتوپ پرتوزا نیز از این عنصر شناسایی شده است، ایزوتوپ با عدد جرمی ۲۸که خاصیت رادیواکتیو دارد در خلال سال‌های ۱۹۵۰ تا ۱۹۷۰، در بسیاری از راکتورهای هسته‌ای بمنظور مطالعات علمی تولید شد. این ایزوتوپ، نیمه عمری کوتاه و در حدود ۲۱ ساعت داشت.

هسته منیزیم-۲٤ یکی از مهم‌ترین هسته‌های زوج-زوج در ناحیه sdاست که به دلیل ساختار جمعی و وجود حالت‌های برانگیخته شناخته‌شده، بستر مناسبی برای آزمون مدل لایه‌ای هسته محسوب می‌شود. مقایسه نتایج حاصل از برهم‌کنش‌های مختلف با داده‌های تجربی می‌تواند میزان کارایی هر هامیلتونی را در توصیف ساختار هسته‌ای این ناحیه مشخص نماید.

روش محاسبات

برای اجرای این کد اطلاعات پایه‌ای مانند عدد اتمی، عدد نوترونی و عدد جرمی عنصر مورد نظر، ایزواسپین، پاریته، تعداد ذرات ظرفیت و هم چنین تعداد ترازهایی که نوکلئون‌ها می‌توانند در حالت برانگیختگی در آن قرار گیرند، مورد نیاز است. منیزیم۲٤ یکی از سه ایزوتوپ پایدار عنصر منیزیم است از جدول ایزوتوپ های عناصر میتوان خصوصیات لازم برای هر ایزوتوپ را بدست آورد[٦و٥]. تعداد نوکلئون‌های ظرفیت در این ایزوتوپ ٤ است و ایزواسپین صفر و پاریته مثبت است. پس از اجرای برنامه این کد تعدادی فایل در اختیار ما قرار می‌دهد، داده‌های این فایل‌ها نشان می‌دهد که از چه فضای مدلی و همچنین از چه برهم‌کنشی برای اجرای این برنامه استفاده شده است. کد اکسبش، انرژی برانگیختگی حالت پایه، ترازهای انرژی و هم چنین احتمال قرار گیری نوکلئون‌ها در هر یک از ترازها را محاسبه کرده است. اجرای برنامه‌ها هنگامی موفقیت‌آمیز است که با نتایج تجربی مطابقت داشته باشد.

دستاوردها و تحلیل نتایج

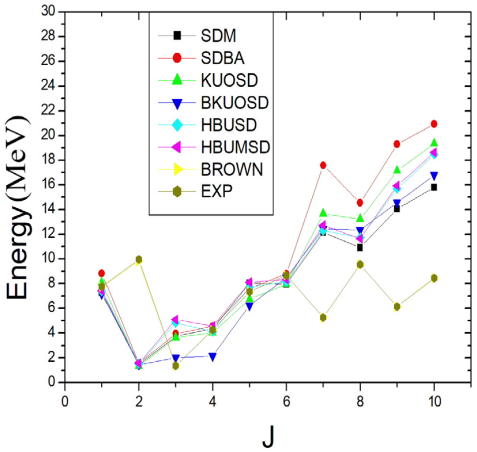
در جدول شماره ۱ نتایج محاسبات ترازهای انرژی برای منیزیم نوشته شده و محاسبات کد با نتایج تجربی و همچنین نتایج تئوری (براوون) مقایسه می‌شود و در شکلهای ۱و۲ این نتایج بر روی نمودار نشان داده شده است که تطابق خوبی میان محاسبات کد و نتایج تجربی و تئوری مشاهده می‌شود. با مقایسه میان نتایج تجربی و داده های بدست آمده، پتانسیل برهم‌کنشی مناسب پتانسیل (W) است که تطابق خوبی میان داده‌های حاصل از اجرای کد با نتایج تجربی را نشان می‌دهد. عملکرد بهتر برهم‌کنش W نشان می‌دهد که عناصر ماتریسی مؤثر این هامیلتونی قادرند همبستگی‌های نوکلئون-نوکلئون را در فضای sd با دقت بیشتری بازتولید کنند. به منظور ارزیابی کمی عملکرد پتانسیل‌های مختلف، مقدار جذر میانگین مربعات خطا (RMSE) بین نتایج محاسباتی و داده‌های تجربی محاسبه و در شکل ۳ نشان داده شده است. نتایج نشان

میدهد که پتانسیل W با (RMSE) برابر ۰.۱۴۷ ،کمترین خطا را در میان تمامی برهم‌کنش‌های مورد بررسی دارد، این امر نشان می‌دهد که برهم‌کنش W توانایی بسیار بالایی در بازتولید طیف انرژی هسته منیزیم دارد. در مقابل، پتانسیل‌های SU3SD و SDBAبه ترتیب با(RMSE) ۹.۳۸۶ و ۷.۶۵۵ بیشترین انحراف را از داده‌های تجربی نشان می‌دهند. بنابراین معیار (RMSE) به‌صورت کمی برتری پتانسیل W را که پیش‌تر از روی نمودار انرژی مشاهده شده بود، تأیید می‌کند. همچنین به منظور ارزیابی آماری دقت محاسبات، علاوه بر(RMSE) ، خطای استاندارد میانگین (SEM) نیز محاسبه و در شکل ٤ نشان داده شده است.

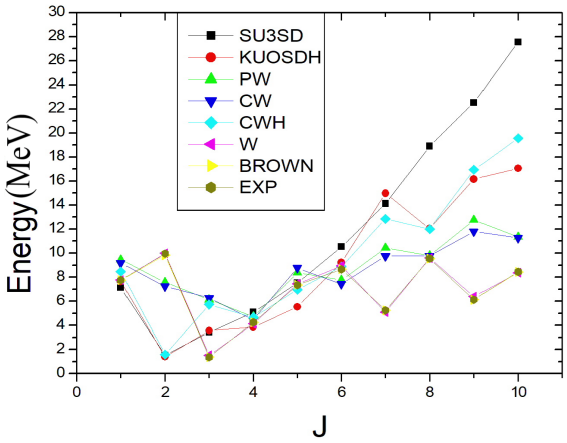
نتایج نشان داد که پتانسیل W با (SEM) برابر ۰.۰٤٦ کمترین پراکندگی خطا را نسبت به داده‌های تجربی دارد. این نتیجه بیانگر عملکرد مطلوب پتانسیل W تنها محدود به چند تراز خاص نبوده، بلکه در کل طیف انرژی مورد مطالعه از پایداری و دقت بالایی برخوردار است. در مقابل، پتانسیل SU3SD با (SEM) برابر ۲.٦٥٥ بیشترین نوسان را در پیش‌بینی ترازهای انرژی نشان می‌دهد به عبارتی خطاهای آن در ترازهای مختلف به شدت پراکنده هستند.

جدول۱ : مقادیر انرژی های بدست آمده بر حسب MeV برای برهم کنش های مختلف ومقایسه با نتایج تجربی [۷] و براوون [۸]

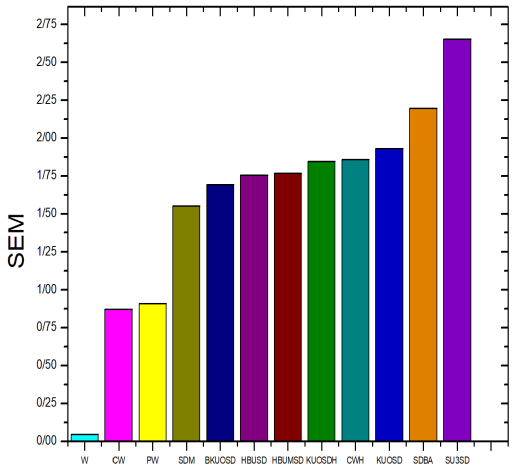
J	SDM	SDBA	KUOSD	BKUOSD	HBUSD	HBUMSD	SU3SD	KUOSDH	PW	CW	CWH	W	BROWN	EXP
۱	۷.۲۵۷	۸.۸۲۲	۸.۰۸٤	۷.۱٤۸	۷.۳٦۸	۷.٤۲٥	۷.۱۲۳	۷.٦٤۱	۹.٤٥۳	۹.۱٦٤	۸.٤۷۱	۷.۷٦٤	۷.۷٤۷	۷.۷٤۷
۲	۱.٤٥۸	۱.٥۸۱	۱.۳۳۱	۱.٤۳۹	۱.٥۳۲	۱.٥۷٦	۱.٥۲۱	۱.۳۹٥	۷.٥٦٤	۷.۲۲۱	۱.٥۸۸	۹.۹۸۷	۹.۸۲۷	۹.۹٦۷
۳	۳.۷۲۱	۳.۹۳۹	۳.٦۲۳	۲.۰۳٦	٤.۸۱٦	٥.۰۸۲	۳.٤۲۱	۳.٥٦۲	٦.۱۲۹	٦.۲٦٤	٥.۷۲٤	۱.٥۰۹	۱.۳٦۹	۱.۳٦۸
٤	٤.۳۳۳	٤.٥۳٤	٤.۰۱۹	۲.۱۳۹	٤.۱۰٦	٤.٥٥۲	٥.۰۸۹	۳.۸۳۸	٤.۷۲٤	٤.٤٦٤	٤.٦۷۲	٤.۱۲۲	٤.۲۳۸	٤.۲۳۸
٥	۸.۰٤۲	۷.٦۰۰	٦.۷۲٦	٦.۲۰۹	۷.۷۱٥	۸.۱۰٦	۷.٥۱۱	٥.٥۳٥	۸.۳۷٦	۸.۷٦٤	٦.۹٦٦	۷.٤٤۲	۷.۳٤۸	۷.۳٤۹
٦	۷.۹۷۲	۸.۷۸٦	۷.۹٤۹	۸.٤۷	۸.۱٤۲	۸.۳۳	۱۰.٥٤٤	۹.۲۱٤	۷.۷٦٤	۷.٤۲۲	۸.۸۷۹	۸.۹٤۱	۸.٦٥۳	۸.٦٥٤
۷	۱۲.۱٤۸	۱۷.٥۹۷	۱۳.٦٥۳	۱۲.٤۳۷	۱۲.۳۱۳	۱۲.۷۲۸	۱٤.۱۲٥	۱٤.۹۸٥	۱۰.٤۳٤	۹.۷٦٤	۱۲.۸٥٦	٥.۰۹۷	٥.۲۳٦	٥.۲۳٥
۸	۱۰.۹۱٦	۱٤.٥٥۱	۱۳.۲۳۱	۱۲.۳۲٦	۱۱.۷۲٥	۱۱.٦۳۷	۱۸.۹۱۲	۱۲.۰۲۳	۹.۷۸۸	۹.۷٦۱	۱۱.۹۹۹	۹.٥۹٦	۹.٥٤٦	۹.٥٤۷
۹	۱٤.۰٥۷	۱۹.۳۰۱	۱۷.۱٤۰	۱٤.٥٦	۱٥.٦۸۷	۱٥.۹۲٦	۲۲.٥۲۱	۱٦.۱٦۲	۱۲.۷٥٥	۱۱.۷۹۹	۱٦.۹٤۷	٦.۳۷۸	٦.۱۲۳	٦.۱۲۲
۱۰	۱٥.۸۱٤	۲۰.۹۳٦	۱۹.۳٥۲	۱٦.۸۰٦	۱۸.٤۷٤	۱۸.٦٤۱	۲۷.٥٤۷	۱۷.۰٦٤	۱۱.۳٤٥	۱۱.۲٦٤	۱۹.٥۷۸	۸.۳۷٤	۸.٤۳۷	۸.٤۳۹



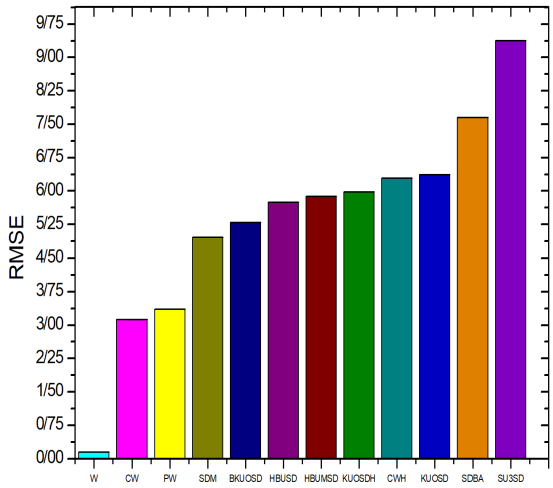
شکل۱: نمودار ترازهای انرژی منیزیم ۲٤بر حسب اسپین برای شش پتانسیل برهم‌کنشی مختلف همراه با داده‌های تجربی و تئوری (براون)



شکل۲: نمودار ترازهای انرژی منیزیم ۲٤ بر حسب اسپین برای شش پتانسیل برهم‌کنشی مختلف دیگر همراه با داده‌های تجربی و تئوری(براون)



شکل٤: مقایسه مقادیر خطای استاندارد میانگین(SEM) برای برهمکنش‌های مختلف با داده‌های تجربی



شکل۳: مقایسه ریشه میانگین مربعات خطا(RMSE) برای برهم‌کنش‌های مختلف با داده‌های تجربی

نتیجه گیری

در این پژوهش ترازهای انرژی برای عنصر منیزیم توسط کد اکسبش در فضای sd برای ۱۲ برهم کنش مختلف محاسبه شده و نتایج با مقادیر تجربی و براون مقایسه گردید. همانطور که نمودارها نشان می‌دهند پتانسیل برهمکنشی مناسب که تطابق خوبی میان نتایج تجربی با داده‌های حاصل از کد را نشان می‌دهد پتانسیل W است که کمترین اختلاف را با مقادیر تجربی دارد، این موضوع بیانگر توانایی بالای این هامیلتونی در بازتولید ساختار هسته‌های ناحیه sd است که درستی نتایج کد را بیان می‌کند. همچنین مشاهده شد که برخی از برهم کنش‌ها در اسپین بالا افزایش خطا دارند که بیانگر محدودیت آنها در توصیف برهم‌کنش‌های موثر نوکلئون‌ها است. پتانسیل W علاوه بر داشتن RMSE بسیار کم (۰.۱٤۷)، دارای SEM برابر (۰.۰٤٦) نیز هست؛ بنابراین نه‌تنها خطای میانگین کمی دارد، بلکه پراکندگی خطاهای آن نیز بسیار ناچیز است .

مرجع‌ها

[1] Oxbash for Windows, B. A. Brown, A. Etchegoyen, N. S. Godwin, W. D. M. Rae, W. A. Richter, W. E. Ormand, E.K. Warburton, J. S. Winfield, L. Zhao and C. H. Zimmerman, MSU-NSCL (2004) 1289.
[2] The Nuclear Shell Model Towards the Drip Lines, B. A. Brown, Progress in Particle and Nuclear Physic (2001) 47,517.
[3] Mohammadi, S., & Sirjani, S. American Journal of Modern Physics, (2015).
[4] Shafeghat, H.,et al, Modern Chemistry, (2017) 5(5), 82-85.
[5] R. B. Firestone; Table of Isotopes; WILEY Interscience (1996).
[6] AUS-e-TUTE for Astute Science Students. Chemistry Tutorial: Summary of Radioactive Particles, Isotopes, Properties (2014), Feb. 24.
[7] http://www.radware.phy.ornl.gov.
[8] https://www.nndc.bnl.gov/ensdf/DatasetFetchServlet

بررسی وابستگی دمایی جرم موثر برای برخی ایزوتوپ‌ها و ایزوتون‌های پایدار، زوج–زوج و کروی با استفاده از مدل میدان میانگین نسبیتی

یغمائی ، بامداد[۱] ؛ دهقانی ، وحید[۱]؛ مهمان‌دوست‌خواجه‌داد، علی‌اکبر[۱]

[۱] گروه فیزیک ، دانشکده علوم ، دانشگاه سیستان و بلوچستان ، زاهدان

چکیده

با استفاده از مدل میدان میانگین نسبیتی (RMF) وابستگی دمایی جرم موثر نوکلئون در تعدادی از ایزوتوپ‌ها (Z=50) و ایزوتون‌های (N=50) پایدار و زوج–زوج و کروی در بازه دمایی T=0.0 MeV تا T=4.0 MeV بررسی شده است. نتایج برای ۹ هسته مورد مطالعه نشان می‌دهند که مدل RMF در مرکز و لبه هسته مقادیر 0.59 تا 0.69 را برای نسبت جرم موثر نوکلئون به جرم نوکلئون برهنه (M/M) پیش‌بینی می‌کند. همچنین مشخص می‌شود با افزایش دما مقادیر M*/M برای ایزوتوپ‌ها (ایزوتون‌ها) در هر فاصله مشخصی از مرکز هسته و در درون آن به یکدیگر نزدیک می‌شوند.*

واژه های کلیدی: *مدل میدان میانگین نسبیتی، جرم موثر، وابستگی دمایی*

Investigation of the temperature dependence of the effective mass for some stable, even–even, and spherical isotopes and isotones using the relativistic mean-field model

Yaghmaei, Bamdad[1]; Dehghani, Vahid [1]; Mehmandoost-Khajeh-Dad, Ali Akbar [1]

[1] Physics Department, Faculty of Science, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan,

Abstract

The temperature dependence of the effective nucleon mass in several stable, even-even, and spherical isotopes and isotones has been investigated using the Relativistic Mean Field (RMF) model in the temperature range from T = 0.0 MeV to T = 4.0 MeV. The results for nine nuclei indicate that the RMF model predicts values for the ratio of effective nucleon mass to bare nucleon mass (M/M) ranging from 0.59 to 0.69 at the center and at the edge of the nucleus. Additionally, It is determined that with increasing temperature, the M*/M values for isotopes (isotones) converge at any given distance from the center of the nucleus and within it.*

***Keywords**: Relativistic Mean Field Model, Effective mass, Temperature dependence*

PACS 21.

مقدمه

جرم مؤثر نوکلئون (M*) که معیاری از تحرک‌پذیری نوکلئون در محیط هسته ای است در اصل توسط بروکنر توسعه داده شد تا حرکت نوکلئون‌ها در یک پتانسیل وابسته به تکانه را با حرکت یک شبه نوکلئون با جرم M* در یک پتانسیل مستقل از تکانه توصیف کند. جرم مؤثر نوکلئون بازتاب دهنده برهم‌کنش نوکلئون با سایر نوکلئون‌های پیرامون است. این کمیت در مطالعه انرژی بستگی هسته‌ای، انرژی فرمی، اثر اسپین–مدار، بررسی مدل پوسته‌ای و معادله حالت هسته‌ای اهمیت دارد. همچنین در مطالعه خواص ترمودینامیکی، گذار فاز مایع–گاز و واکنش‌ها در هسته‌ها مورد توجه قرار می‌گیرد. جرم موثر در ستارگان نوترونی و ابرنواخترها، تعیین‌کننده رفتار ماده در دما و چگالی بالا و همچنین رابطه جرم–شعاع ستاره است.[۱–۳] این کمیت که به صورت جرم موثر اسکالر

(ایزواسکالر) یا جرم موثر وابسته به ایزواسپین (ایزووکتور) تعریف شود تابعی از چگالی و دما و تقارن محیط است. در بسیاری از کارها نسبت (M*/M) مورد بررسی قرار می‌گیرد. M جرم نوکلئون برهنه و تقریبا 939 MeV است. در برخی مطالعات این نسبت 0.7-0.9 و در برخی دیگر 0.58-0.64 به دست آمده است.[۴و۵]

در این تحقیق با استفاده از مدل میدان میانگین نسبیتی [۶] تغییرات جرم موثر در بازه دمایی 0.0-4.0 MeV برای ایزوتوپ‌های ^{112}Sn ، ^{114}Sn ، ^{116}Sn ، ^{122}Sn و ^{124}Sn و همچنین ایزوتون‌های ^{86}Kr ، ^{88}Sr ، ^{90}Zr و ^{92}Mo بررسی شده است. دلیل انتخاب این هسته‌ها جدا از کروی، پایدار و زوج–زوج بودن، آن است که عدد اتمی ایزوتوپ‌ها Z=50 و عدد نوترونی ایزوتون‌ها نیز N=50 است. بنابراین اطمینان خواهیم داشت که هنگام مقایسه ایزوتوپ‌ها و ایزوتون‌ها تفاوت تعداد نوکلئون‌های ثابت در روند تغییرات تاثیر نداشته است. زوجیت به کار رفته در مدل RMF با استفاده از مدل BCS [۷] اعمال شده و مجموعه پارامترهای NLSH [۸] در محاسبات مدل به کار رفته است.

مدل

در مدل میدان میانگین نسبیتی، فوتون و مزون‌های σ، ω و ρ عهده‌دار برهم‌کنش میان نوکلئون‌ها هستند.[۴و۸] برای محاسبات مدل می‌توان به مقالات [۸و۹] مراجعه کرد. لاگرانژی در این مدل به صورت زیر نوشته می‌شود [۶–۹]،

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \bar{\Psi}\left(i\gamma_\mu\partial^\mu - M\right)\Psi + \frac{1}{2}\left(\partial_\mu\sigma\partial^\mu\sigma - m_\sigma^2\sigma^2\right)\\ &-\frac{1}{4}\Omega_{\mu\nu}\Omega^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\omega^2\omega_\mu\omega^\mu - \frac{1}{4}\vec{R}_{\mu\nu}\vec{R}^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\rho^2\vec{\rho}_\mu\vec{\rho}^\mu\\ &-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - \frac{1}{3}g_2\sigma^3 - \frac{1}{4}g_3\sigma^4 - g_\sigma\bar{\Psi}\sigma\Psi\\ &-g_\omega\bar{\Psi}\gamma_\mu\omega^\mu\Psi - g_\rho\bar{\Psi}\gamma_\mu\vec{\tau}\vec{\rho}^\mu\Psi - e\bar{\Psi}\gamma_\mu A^\mu\Psi \end{aligned} \quad (۱)$$

در رابطه (۱) میدان σ تامین کننده نیروی جاذبه میان نوکلئون‌ها است و در محاسبه جرم موثر نقش اصلی را ایفا می‌کند. نیروی دافعه توسط میدان ω و اثر عدم تقارن توسط میدان ρ در محاسبات وارد می‌شوند.. میدان A در بردارنده برهم‌کنش الکترومغناطیس است و m_σ، m_ω و m_ρ جرم مزون‌ها را نشان می‌دهند. g_σ، g_ω و g_ρ و e جفت شدگی‌ها با نوکلئون و g_2 و g_3 خود جفت شدگی‌های میدان σ هستند. تصحیح اثرات سطحی و تراکم ناپذیری با جمله‌های شامل σ^3 و σ^4 وارد شده‌اند. برای تانسورهای میدان‌ها داریم،

$$\xi^{\mu\nu} = \partial^\mu\xi^\nu - \partial^\nu\xi^\mu \quad (۲)$$

با شرط کروی و ایستا بودن هسته‌ها، کاربرد معادله اویلر–لاگرانژ در رابطه (۱)، به معادله کلاین–گوردن برای مزون‌ها و فوتون می‌انجامد که شکل کلی آن به صورت زیر است،

$$\left[-\partial_r^2 - \frac{2}{r}\partial_r + m_\eta^2\right]\eta(r) = S_\eta \quad (۳)$$

در رابطه بالا $\eta(r)$ میدان‌های مزونی یا میدان‌الکترومغناطیس را نشان می‌دهد. چشمه S_η چگالی مربوط به هر میدان و ثابت‌های جفت شدگی را در بر دارد. به کار بردن معادله اویلر–لاگرانژ برای نوکلئون‌ها به معادله دیراک منجر می‌شود که به صورت یک دستگاه معادلات جفت شده به شکل زیر است،

$$\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{k_i+1}{r}\right)f_i + \left(M^* - V + \varepsilon_i\right)g_i = 0 \quad (۴)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{k_i-1}{r}\right)g_i + \left(M^* + V - \varepsilon_i\right)f_i = 0 \quad (۵)$$

در روابط (۴) و (۵)

$$M^* = M + g_\sigma\sigma \quad (۶)$$

$$V = g_\omega\omega + g_\rho\tau_3\rho + e\frac{1-\tau_3}{2}A \quad (۷)$$

که M* جرم موثر و V پتانسیل برداری را نشان می‌دهد. τ_3 مولفه سوم ایزواسپین است که برای پروتون و نوترون به ترتیب مقدارهای 1- و 1+ را دارد. f_i و g_i بخش فضایی اسپینور دیراک (Ψ_i) هستند.

$$\Psi_i = \begin{pmatrix} f_i(r)\varphi_{ljm} \\ ig_i(r)\varphi_{\bar{l}jm}\end{pmatrix}\chi_t \quad (۸)$$

در این مدل باید چگالی‌های اسکالر، باریونی، ایزوبردار و بار محاسبه شوند. رابطه چگالی باریونی شکل زیر را دارد،

$$\rho_v = (4\pi)^{-1}\sum_i (2j_i+1)n_i\left(|f_i|^2 + |g_i|^2\right) \quad (۹)$$

در رابطه اخیر j_i و n_i به ترتیب اسپین و عدد اشغال هر حالت را نشان می‌دهند. پارامتر گاف مدل BCS (Δ) اثر زوجیت میان نوکلئون‌ها را در مدل RMF وارد می کند. این پارامتر از معادله زیر که به معادله گاف [۷] مشهور است به دست می‌آید،

$$\Delta\sum_i\frac{(2j_i+1)}{2E_i}\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_i\right) = \frac{2}{G}\Delta \quad (۱۰)$$

در رابطه (۱۰) β وارون دما (T) و G قدرت زوجیت است. E_i (انرژی شبه ذره) از رابطه زیر به دست می‌آید،

$$E_i = \sqrt{(\varepsilon_i - \lambda)^2 + \Delta^2} \qquad (۱۱)$$

اعداد اشغال به صورت زیر محاسبه می‌شوند،

$$n_i = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{\varepsilon_i - \lambda}{E_i}\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_i\right)\right] \qquad (۱۲)$$

در روابط (۱۱) و (۱۲) λ پتانسیل شیمیایی نامیده می‌شود و از شرط

$$\sum_i (2j_i + 1)n_i = N_{nucleon} \qquad (۱۳)$$

به دست می‌آید.پس از حل خودسازگار معادلات (۳) تا (۱۳)، می‌توان با استفاده از رابطه (۶) جرم موثر را محاسبه نمود.

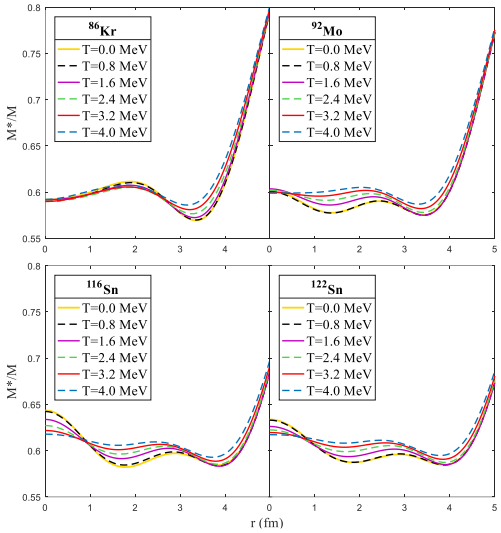
نتایج

در این تحقیق نسبت M*/M با مدل RMF و مجموعه پارامترهای NLSH برای بازه دمایی 0.0-4.0 MeV محاسبه شده است. محاسبات خودسازگار تا همگرایی شعاع‌ها و انرژی‌ها تا چهار رقم و چگالی‌ها تا شش رقم اعشار ادامه یافته است. در جدول ۱ مقادیر شعاع‌های بار و انرژی‌های بستگی به دست آمده از محاسبات مدل و مرجع [۱۰] برای چند هسته آورده شده است. مقایسه اعداد درستی محاسبات مدل را تایید می‌کند

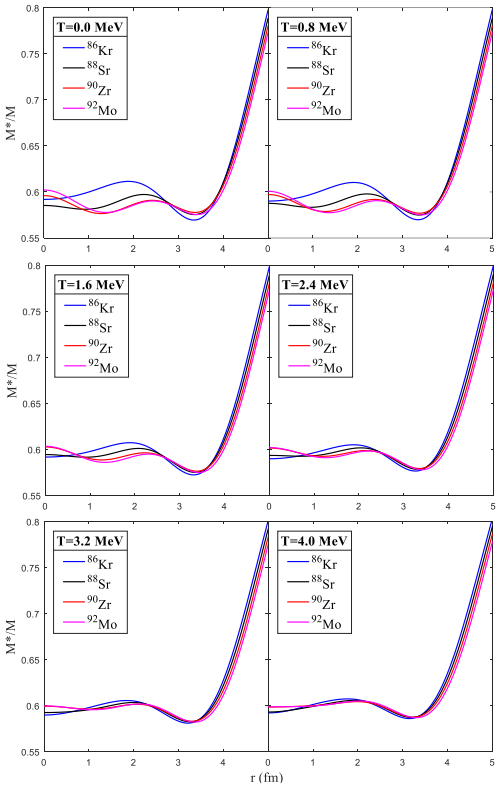
جدول ۱: مقایسه نتایج به دست آمده برای شعاع بار (r_c) و انرژی بستگی بر نوکلئون (B/A) از مدل RMF و مرجع [۱۰]

	r_c (fm)		B/A (MeV)	
هسته	RMF	[۱۰]	RMF	[۱۰]
^{86}Kr	4.1653	4.1835	8.7252	8.7120
^{90}Zr	4.2636	4.2694	8.6986	8.7099
^{112}Sn	4.5735	4.5948	8.5160	8.5136
^{124}Sn	4.6528	4.6735	8.4628	8.4674

شکل ۱ نمودارهای M*/M را بر حسب فاصله از مرکز هسته (r) در دماهای مختلف نشان می‌دهد. بررسی نمودارها مشخص می‌کند در ایزوتون‌ها با افزایش دما مقدار M*/M در مرکز هسته تغییر اندکی (حدود 0.5% تا 1.5%) دارد. به علاوه با افزایش دما مقدار این کمیت درون هسته افزایش می‌یابد. در ایزوتوپ‌ها M*/M در مرکز

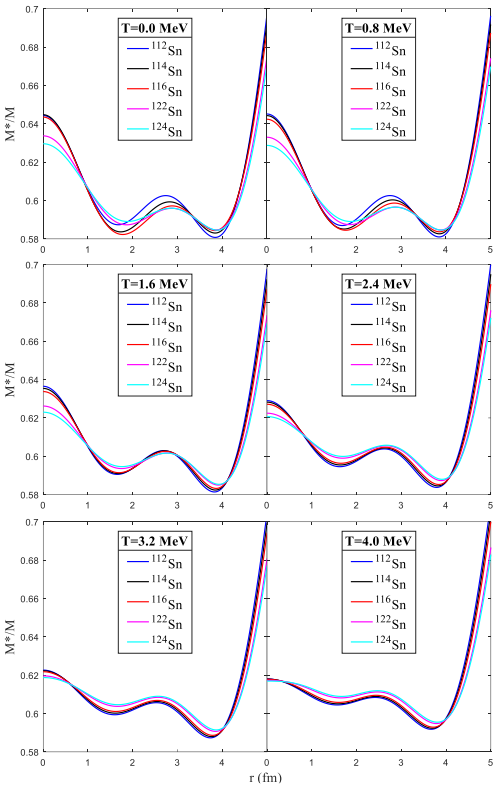


شکل ۱ : نمودار تغییرات M*/M بر حسب فاصله از مرکز هسته در دماهای مختلف برای ^{86}Kr ، ^{92}Mo ، ^{116}Sn و ^{122}Sn .



شکل۲ : نمودار تغییرات M*/M بر حسب فاصله از مرکز هسته برای ^{86}Kr ، ^{88}Sr ، ^{90}Zr و ^{92}Mo در دماهای مختلف.

هسته تغییرات بزرگتری دارد (حدود 2% تا 4%) و با افزایش دما کاهش می یابد و در فواصل 1 fm~ و بزرگتر تا لبه هسته با افزایش دما افزایش می‌یابد. درلبه هسته‌ها تغییرات دمایی M*/M برای ایزوتوپ‌ها و ایزوتون‌ها تقریبا مشابه (حدود 6% تا 7%) است.



شکل۳ : نمودار تغییرات M*/M بر حسب فاصله از مرکز هسته برای ^{112}Sn ، ^{114}Sn ، ^{116}Sn ، ^{122}Sn و ^{124}Sn در دماهای مختلف.

شکل ۲ و شکل ۳ به ترتیب مقدار M*/M را بر حسب r برای ایزوتون‌ها و ایزوتوپ‌ها در مقایسه با یکدیگر و در دماهای مختلف نشان می‌دهند. آن چه به روشنی از مقایسه نمودارها مشخص می‌شود آن است که با افزایش دما نمودارهای M*/M به یکدیگر نزدیک می‌شوند. در T=4.0 MeV ، برای ایزوتون‌ها و در مرکز هسته مقدار M*/M به 0.59~ و در لبه هسته به 0.68~ نزدیک می‌شود. در ایزوتوپ‌ها مقدار این کمیت در مرکز هسته به 0.62~ و در لبه هسته به 0.67~ نزدیک می‌شود.

بررسی نمودارها در T=4.0 MeV نشان می‌دهد که در ایزوتون‌ها با افزایش عدد جرمی، M*/M در مرکز هسته افزایش و در لبه آن کاهش می‌یابد در حالی که در ایزوتوپ‌ها با افزایش عدد جرمی M*/M در مرکز هسته کاهش و در لبه آن افزایش می‌یابد.

نتیجه‌گیری

با بررسی تغییرات M*/M نسبت به دما با استفاده از مدل RMF برای تعدادی ایزوتوپ (Z=50) و تعدادی ایزوتون (N=50) مشخص می‌شود که با افزایش دما مقادیر M*/M در هسته‌ها تغییر می‌کنند. این تغییرات در مرکز و لبه هسته یکسان نیست و در لبه هسته مقادیر بزرگتری دارد. به علاوه همچنان که دما افزایش می‌یابد در هر فاصله معینی از مرکز هسته و در داخل آن (فاصله هایی کمتر از شعاع ماده) مقادیرM*/M برای ایزوتوپ‌ها (ایزوتون‌ها) به مقدار مشخصی در آن فاصله نزدیک می‌شوند. بررسی‌ها نشان می‌دهد تغییرات M*/M با دما نسبت به افزایش تعداد پروتون و نوترون یکسان نیست. به بیان دیگر تغییر M*/M با دما به نامتقارنی ایزواسپینی وابسته است.

مرجع‌ها

[۱] T. Malik, C. Mondal, B. K. Agrawal, J. N. De, and S. K. Samaddar, *Physical Review C*, **98** (2018) 064316.
[۲] B. A. Li, B. J. Cai, L. W. Chen, and J. Xu, *Progress in Particle and Nuclear Physics*, **99** (2018) 29-119.
[۳] K. Sumiyoshi, H. Kuwabara, H. Toki, *Nuclear Physics A*, **581** (1995) 725-746.
[۴] P.-G. Reinhard, *Rep. Prog. Phys*, **52** (1989) 439.
[۵] L.N. Savushkin, H. Toki, *The Atomic Nucleus as a Relativistic System*, Springer Berlin Heidelberg, 2004.
[۶] P. Ring; *Prog. Part. Nucl. Phys* **37** (1996) 193**.**
[۷] P. Ring, P. Schuck, *The nuclear many-body problem*, Springer Science & Business Media 2004.
[۸] W. Pöschl, D. Vretenar, A. Rummel, P. Ring, *Comput. Phys. Commun*, **101** (1997) 75.
[۹] Y. Gambhir, P. Ring, A. Thimet, *Ann. Phys. (NY)*, **198** (1990) 132.
[۱۰] https://www-nds.iaea.org/livechart/

بررسی اثر بار هسته‌ی هدف بر دینامیک فرآیند یونش در برخورد پروتون با اتم هیدروژن و یون اتم هلیوم

امیری بیدوری، سعیده و فتحی، رضا

دانشکده علوم، بخش فیزیک دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران

چکیده

در کار حاضر، سطح مقطع‌های دیفرانسیلی کامل (FDCS) فرآیند یونش در برخورد پروتون با اتم هیدروژن و یون هلیوم مثبت در گستره‌ای از انرژی‌های میانی و بالا مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات سطح مقطع‌های دیفرانسیلی کامل با استفاده از تقریب مرتبه اول بورن–فادیف و در قالب فرمول‌بندی کاملاً تحلیلی انجام شده است. هدف اصلی این مطالعه بررسی تأثیر بار هسته‌ی هدف بر ویژگی‌های دینامیکی فرآیند یونش و سازوکارهای حاکم بر آن است. بدین منظور، نتایج حاصل برای برخورد پروتون با اتم هیدروژن و یون هلیوم مثبت در انرژی‌های فرودی و اندازه‌حرکت‌های انتقال‌یافته‌ی مختلف با یکدیگر مقایسه شده‌اند. تحلیل نتایج نشان می‌دهد که تغییر بار هسته‌ی هدف می‌تواند به‌طور محسوسی بر ساختار زاویه‌ای سطح مقطع‌های دیفرانسیلی کامل و سهم نسبی مکانیزم‌های مختلف یونش اثرگذار باشد.

The Effect of Target Nuclear Charge on Ionization Dynamics in Proton Impact on atomic Hydrogen and positive ion of helium atom

Amiri Bidvari, Saeideh and Fathi, Reza

Faculty of Science, Department of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran.

Abstract

In the present work, the fully differential cross sections (FDCSs) for the ionization process in the proton collision with atomic hydrogen and positive ion of atomic helium has been investigated at the intermediate and high impact energies range. The FDCS calculations are performed within the first-order Born–Faddeev approximation using a fully analytical calculation. The main part of this study is to examine the influence of the target nuclear charge on the dynamical features of the ionization process and the dominant mechanisms affected. At last, the results obtained for proton-impact ionization of hydrogen and He^+ targets are compared at various incident energies and momentum-transfer values. The analysis reveals that variations in the target nuclear charge can significantly affect the angular structure of the fully differential cross sections as well as the relative contributions of different ionization mechanisms.

PACS No. 034

مقدمه

بررسی برخورد یون‌ها و ذرات باردار با اتم‌ها و یون‌ها یکی از مهم‌ترین زمینه‌های پژوهش در فیزیک اتمی و مولکولی به حساب می آید. شناخت دقیق فرآیندهای برخورد، به‌ویژه فرآیند یونش، برای توصیف بسیاری از محیط‌های طبیعی و آزمایشگاهی ضروری است. در سال‌های اخیر، نیاز روزافزون به داده‌های دقیق برخورد موجب شده است که محاسبه سطح مقطع‌های یونش و توسعه روش‌های نظری کارآمد به یکی از موضوعات فعال پژوهش در فیزیک برخوردهای اتمی تبدیل گردد. داده‌های حاصل از سطح

مقطع‌های پراکندگی در بسیاری از شاخه‌های فیزیک از جمله در مدل‌سازی پلاسماهای همجوشی، محاسبات تعادل یونش در محیط‌های اخترفیزیکی، تحلیل انتقال انرژی در جو فوقانی سیارات، مدل‌های برخورد–تابش و همچنین فناوری‌های مبتنی بر پرتوهای یونی با کاربرد در درمان توده های سرطانی مورد استفاده قرار می‌گیرند [1–3].

از طرف دیگر یونش ناشی از برخورد پروتون با اهداف تک‌الکترونی یکی از مناسب‌ترین سیستم‌ها برای بررسی دینامیک برخوردهای چندجسمی است. سادگی نسبی ساختار این اهداف امکان مقایسه دقیق میان نتایج نظری و داده‌های تجربی را فراهم می‌سازد و در نتیجه به آزمون مدل‌های نظری مختلف کمک می‌کند. فرآیندهای برخورد پروتون–هیدروژن و پروتون–یون هلیوم مثبت به دلیل دارا بودن تنها یک الکترون فعال، از جمله مهم‌ترین مدل‌های مرجع برای مطالعه مکانیزم‌های یونش به شمار می‌روند.

در میان کمیت‌های قابل اندازه‌گیری در یک فرآیند پراکندگی، سطح مقطع دیفرانسیلی کامل (FDCS) بالاترین سطح از اطلاعات دینامیکی را در اختیار قرار می‌دهد، زیرا وابستگی همزمان به انرژی و زوایای خروجی ذرات را شامل می‌شود. از این رو، FDCS ابزاری منحصر به فرد برای بررسی جزئیات برهم‌کنش‌های کولنی، انتقال تکانه، سازوکارهای یونش و اثرات همبستگی دینامیکی در برخوردهای یون–اتم به شمار می‌رود. تحلیل ساختارهایی نظیر قله دوتایی و قله پس‌زنی در FDCS می‌تواند اطلاعات ارزشمندی درباره دینامیک حاکم بر فرآیند یونش فراهم سازد.

از دیدگاه نظری، توصیف دقیق فرآیند یونش مستلزم در نظر گرفتن برهم‌کنش‌های چندجسمی در حالت‌های اولیه و نهایی است. در این راستا، روش‌های مبتنی بر معادلات فادیف چارچوبی منسجم برای بررسی سیستم‌های سه‌جسمی فراهم می‌کنند. هنگامی که انرژی برخورد به اندازه کافی بزرگ باشد، تقریب مرتبه اول بورن–فادیف) می‌تواند توصیفی مناسب از فرآیند ارائه دهد، زیرا سهم غالب دامنه پراکندگی از برهم‌کنش مرتبه اول ناشی می‌شود. این تقریب ضمن حفظ ویژگی‌های اصلی دینامیک برخورد، امکان محاسبه دامنه پراکندگی و سطح مقطع دیفرانسلی کامل را با صرفنظر از پیچیدگی‌های محاسباتی به طور قابل قبول فراهم می‌آورد.

در این مقاله، سطح مقطع دیفرانسیلی کامل فرآیند یونش در برخورد پروتون با اتم هیدروژن و یون هلیوم مثبت مورد مطالعه قرار می‌گیرد. هدف اصلی، مقایسه نتایج حاصل برای این دو فرآیند و بررسی تأثیر بار هسته هدف بر ویژگی‌های دینامیکی فرآیند یونش است. بدین منظور، محاسبات در چارچوب تقریب مرتبه اول بورن–فادیف انجام شده و رفتار ساختارهای مختلف موجود در FDCS ، از جمله قله‌های باینری (Binary Peak) و پس‌زنی (Recoil Peak)، مورد تحلیل قرار می‌گیرد. نتایج این پژوهش می‌تواند به درک بهتر نقش پتانسیل کولنی هدف و سازوکارهای حاکم بر یونش در برخوردهای انرژی بالا کمک کند.

تئوری

فرآیند یونش یگانه ناشی از برخورد پروتون با هدف تک‌الکترونی به‌صورت

$$p+(T+e)\rightarrow p+T+e \qquad (۱)$$

در نظر گرفته می‌شود. سطح مقطع دیفرانسیلی کامل در چنین فرآیندی و با استفاده از روش فادیف–واتسون– لاولیس از رابطه‌ی

$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_s d\Omega_e dE_e}=\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{k_s k_e}{k_i}\left|A_{FWL}\right|^2 \qquad (۲)$$

حاصل می‌گردد [۴]. در رابطه بالا $\vec{k}_e$ اندازه‌حرکت الکترون یونیده شده $(E_e=\frac{k_e}{2})$، $\vec{k}_i$ اندازه‌حرکت اولیه ، $\vec{k}_s$ اندازه‌حرکت نهایی پرتابه و A_{FWL} دامنه‌ی پراکندگی فادیف– واتسون– لاولیس به صورت

$$A_{FWL}=\left\langle \psi_{k_e}^{(-)}(\vec{r})e^{i\vec{k}_s\cdot\vec{R}}\middle|\tau\middle|\varphi_i(\vec{r})e^{i\vec{k}_i\cdot\vec{R}}\right\rangle \qquad (۳)$$

می‌باشد.

$\vec{R}$ فاصله‌ی پرتابه تا هسته‌ی هدف، φ_i تابع موج حالت پایه هدف هیدروژن گونه و $\psi_{k_e}^{(-)}(\vec{r})$ تابع موج الکترون آزاد شده است که به صورت موج کولنی

$$\psi_{k_e}^{(-)}(\vec{r}) = N(k_e) e^{i\vec{k}_e\cdot\vec{r}}\, {}_1F_1\left(i\alpha, 1, -i(k_e r + \vec{k}_e\cdot\vec{r})\right) \qquad (۴)$$

در نظر گرفته می‌شود. $\alpha = -\frac{1}{k_e}$ ضریب زومرفلد و $N(k_e) = e^{-\frac{\pi}{2}}\Gamma(1-i\alpha)$ می‌باشد.

همچنین سری پراکندگی فادیف – واتسون– لاولیس برای عملگر گذار متناظر با کانال یونش به صورت

$$\tau = T_{PT} + T_{Pe} + T_{Te}G_0^+T_{PT} + T_{Te}G_0^+T_{Pe} + \cdots \qquad (۵)$$

می‌باشد. T_{ij} عملگر گذار دو جسمی مربوط به برهم‌کنش دو جسم i و j است. اگر پتانسیل برهم‌کنش این دو ذره با V_{ij} نمایش داده شود. عملگر گذار دوجسمی با عبارت

$$T_{ij} = V_{ij} + V_{ij}G_0^+T_{ij} \qquad (۶)$$

تعریف می‌شود. G_0^+ عملگر گرین انتشار آزاد کل دستگاه سه‌ذره‌ای است. در تقریب مرتبه‌ی اول، عملگر گذار فادیف– واتسون– لاولیس به صورت

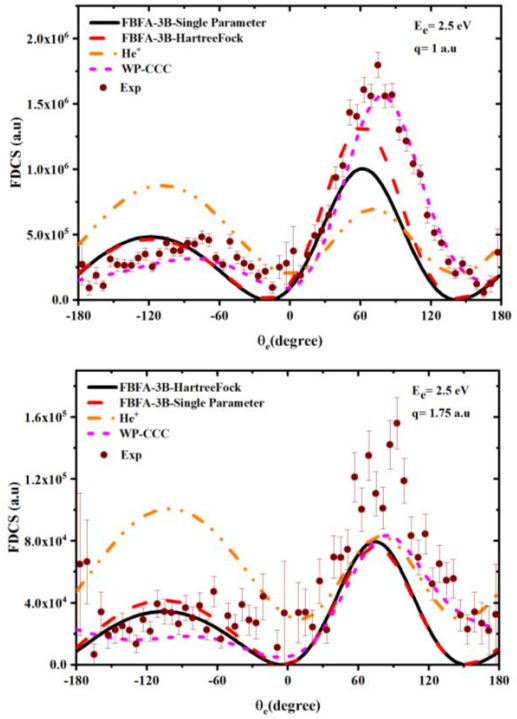
$$\tau = V_{PT} + V_{Pe} + V_{PT}G_0^+T_{PT} + V_{Pe}G_0^+T_{Pe} \qquad (۷)$$

ظاهر می‌گردد. در محاسبات این مقاله عملگرهای گذار دوجسمی در رابطه‌ی (۵) با جمله‌ی اول عملگر گذار یعنی پتانسیل برهم‌کنش جایگزین شده‌اند که تقریب مرتبه‌ی اول بورن– فادیف نامیده می‌شود. در نهایت با جایگذاری تابع موج اتم هیدروژن و تابع موج هیدروژن گونه برای یون هلیوم مثبت دامنه پراکندگی و سطح مقطع دیفرانسیلی کامل به صورت تحلیلی حل گردیده است.

نتیجه‌گیری

در این بخش نتایج حاصل از محاسبات انجام شده برای فرآیند یونش اتم هیدروژن و یون هلیوم مثبت در برخورد با پروتون های با انرژی میانی و بالا در اندازه حرکت‌های انتقالی مختلف ارائه و با نتایج نظری و تجربی در دسترس و با یکدیگر مقایسه شده است.

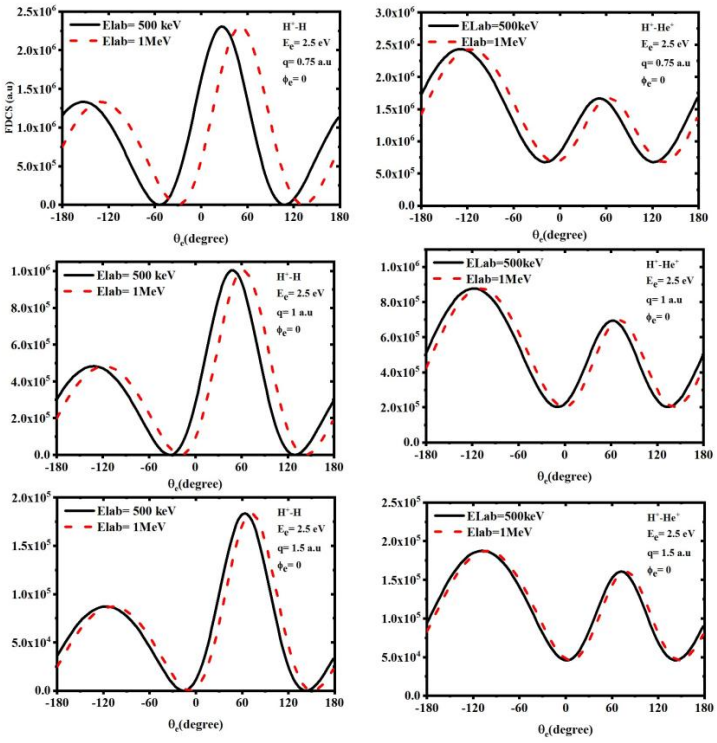
در شکل (۱) به منظور بررسی اعتبار محاسبات و بررسی بهتر اثر بار هسته هدف، نتایج سطح مقطع دیفرانسیلی کامل برای یونش یون هلیوم مثبت با نتایج یونش اتم هلیوم مقایسه شده است. انرژی پروتون فرودی $1MeV$، انرژی الکترون یونیده شده $2.5eV$ و اندازه حرکت‌های انتقال یافته $q = 1,\ 1.75\ a.u$ در نظر گرفته شده است. سطح مقطع‌های اتم هلیوم حاصل از روش‌های تقریب مرتبه اول بورن فادیف[۴]، تقریب $WP-CCC$ [۵] هستند که در مقایسه با نتایج تجربی [۶] پیش بینی مناسبی از محل قله‌های دوتایی و پس زنی ارائه می‌دهند. همان‌طور که مشاهده می‌شود تقریب مرتبه‌ی اول بورن–فادیف که در مقاله‌ی حاضر نیز از آن استفاده شده است به درستی پیش بینی می‌نماید که در یونش اتم هلیوم که از نظر بار الکتریکی خنثی می‌باشد، سهم قله‌ی دوتایی بیشتر از قله پس زنی می‌باشد. اما در هر دو نمودار و در هر دو اندازه حرکت انتقال یافته مشاهده می‌شود که در یونش یون هلیوم مثبت قله پس زنی بزرگتر از قله‌ی دوتایی می‌باشد. این امر با توجه به این موضوع که قله پس زنی حاصل از برهم‌کنش سه تایی پرتابه–الکترون–هسته می‌باشد قابل درک است. به عبارتی در این برهم‌کنش ابتدا پرتابه با الکترون هدف برهم‌کنش کرده و الکترون را از هدف جدا می‌نماید، سپس جاذبه هسته باعث می‌شود که مسیر الکترون به سمت عقب منحرف گردد. طبیعی است که با جدا شدن تنها الکترون یون هلیوم مثبت نسبت به فرآیند یونش اتم هلیوم، هسته با قدرت بیشتری الکترون جدا شده را جذب و منحرف نماید.



شکل (۱): مقایسه نتایج سطح مقطع دیفرانسیلی یونش یون هلیوم مثبت با نتایج نظری و تجربی یونش اتم هلیوم .

در شکل (۲) نتایج سطح مقطع دیفرانسیلی کامل حاصل از یونش اتم هیدروژن و یون هلیوم مثبت در برخورد با پروتون‌های با انرژی $500\ keV$ و $1MeV$ ، انرژی الکترون یونیزه شده $2.5eV$ به ازای اندازه‌حرکت های انتقال یافته‌ی $q=0.75,\ 1,\ 1.5\ a.u$ در مقایسه با یکدیگر ارائه شده است. در هر دو فرآیند، هدف تک الکترونی بوده و تنها تفاوت در بار هسته‌ی هدف می باشد.

نتایج نشان می‌دهد که افزایش بار هسته در فرآیند باعث می‌گردد که برهم‌کنش سه تایی پرتابه–الکترون –هدف نسبت به برهم‌کنش دوتایی پرتابه–الکترون غالب گردد و ارتفاع قله پس زنی در برخورد با یون هلیوم هلیوم بیشتر از قله دوتایی باشد. در حالی که این موضوع برای برخورد پروتون با اتم هیدروژن مانند برخورد پروتون با اتم هلیوم برعکس است.



شکل (۲): مقایسه نتایج سطح مقطع‌های دیفرانسیلی کامل یونش اتم هیدروژن و یون هلیوم مثبت در برخورد با پروتون با انرژی ۵۰۰ الکترون ولت و یک مگا الکترون ولت در اندازه حرکت‌های انتقال یافته‌ی ۰.۷۵ ، ۱ و ۱.۵ در واحد اتمی.

همچنین مشاهده می‌شود که در برخورد با یون هلیوم مثبت در رو انرژی فرودی با افزایش اندازه حرکت انتقال یافته به هدف، سهم برهم‌کنش‌های دوتایی نیز افزایش یافته و ارتفاع قله‌ی باینری به قله پس زنی نزدیک می‌گردد.

به طور خلاصه نتایج حاصل از محاسبات سطح مقطع‌های دیفرانسیلی کامل در چارچوب تقریب مرتبه اول بورن–فادیف نشان می‌دهد که بار هسته‌ی هدف نقش تعیین‌کننده‌ای در دینامیک فرآیند یونش ناشی از برخورد پروتون دارد. مقایسه نتایج مربوط به اتم هیدروژن و یون هلیوم مثبت، که هر دو سامانه‌های تک‌الکترونی هستند، نشان داد که افزایش بار هسته از (Z=1) به (Z=2) موجب تقویت قابل توجه برهم‌کنش سه‌تایی پرتابه–الکترون–هسته و در نتیجه افزایش سهم مکانیزم پس‌زنی در فرآیند یونش می‌شود. در حالی که در برخورد پروتون با اتم هیدروژن، همانند یونش اتم هلیوم، قله دوتایی غالب است، در یونش یون هلیوم مثبت قله پس‌زنی از شدت بیشتری برخوردار بوده و به مکانیزم غالب تبدیل می‌شود. این رفتار ناشی از جاذبه قوی‌تر هسته بر الکترون جداشده و انحراف مؤثرتر آن به ناحیه پس‌زنی است. همچنین نتایج نشان داد که با افزایش اندازه‌حرکت انتقال‌یافته، سهم برهم‌کنش‌های دوتایی افزایش یافته و اختلاف میان شدت قله‌های دوتایی و پس‌زنی کاهش می‌یابد

مرجع‌ها

[1] Fritzsche et al., *Rapid Access to Empirical Impact Ionization Cross Sections for Atoms and Ions across the Periodic Table*, Plasma **7**, (2024).106.
[2] Piron, *Atomic Models of Dense Plasmas, Applications, and Current Challenges*, Atoms **12**, (2024).26.
[3] Kirchner, *Time-Dependent Density Functional Theory for Atomic Collisions: A Progress Report*, Atoms **12**, (2024) 31.
[4] س. امیری بیدوری و ر. فتحی، **بررسی سطح مقطع جزئی کامل یونش یگانهٔ اتم هلیوم در برخورد با پروتونهای سریع بافرمولبندی‌های سه جسمی و چهارجسمی، مجله پژوهش فیزیک ایران ، جلد ۲۱ شماره ۴ (۱۴۰۰) ۶۴۳.**
[۵] I. B. Abdurakhmanov, A. S. Kadyrov and et al, *Fully differential cross sections for single ionization of helium by energetic protons*, Phys. Rev. A. **100** (2019) 062708.
[۶] O. Chuluunbaatar, K. A. Kouzakov, *Single ionization of helium by fast proton impact in different kinematical regimes*, Phys. Rev. A, **99** (2019) 062711.

اثرات کشش سطحی در گذار فاز باریون–کوارک براساس مدل توماس–فرمی

شفیعی، سیدسینا[1] ؛ غضنفری مجرد، مهدی[2] ؛ قائم مقامی،سیدعلیرضا[3]

[1,2,3]گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه کاشان، کاشان

چکیده

این پژوهش با رویکردی تحلیلی به بررسی اثرات اندازه محدود بر گذار فاز باریون–کوارک در ستاره‌های نوترونی می‌پردازد. در این مطالعه، برای فاز باریونی ازمدل توماس–فرمی و برای فاز کوارکی از مدل نامبو–جونا–لازینو (NJL) استفاده می‌کنیم. هدف اصلی این پژوهش، توصیف دقیق فرآیند گذار فاز در چارچوب یک مدل ترکیبی می‌باشد. یافته‌های ما نشان می‌دهد که در نظر گرفتن اثرات اندازه محدود، نقشی تعیین‌کننده در فرآیند گذار فاز ایفا می‌کند. واکاوی دقیق تأثیر پارامتر کشش سطحی و برهم‌کنش‌های کولنی حاکی از آن است که این عوامل منجر به کاهش قابل‌توجه ناحیه گذار فاز در ستاره‌های نوترونی می‌شوند. علاوه بر این، وجود جمله کشش سطحی باعث می‌شود که فشار فاز باریونی و کوارکی در ناحیه گذار بر خلاف گیبس با یکدیگر برابر نباشند که این امر تأثیر بسزایی بر معادله حالت ستاره‌های نوترونی خواهد داشت.

واژه های کلیدی: *اثرات اندازه محدود – مدل توماس–فرمی – مدل NJL – ستاره‌های نوترونی*

Surface tension effects in the baryon-quark phase transition based on the Thomas–Fermi model

Shafiee, Seyyed Sina [1]; Ghazanfari Mojarrad, Mehdi [2] ; Ghaemmaghami, Seyyed Alireza[3]

[1,2,3]Department of Physics, Faculty of Science, University of Kashan, Kashan

Abstract

This study employs an analytical approach to investigate the effects of finite size on the baryon–quark phase transition in neutron stars. In this work, we utilize the Thomas–Fermi model for the baryonic phase and the Nambu–Jona-Lasinio (NJL) model for the quark phase. The primary objective of this research is to provide a precise description of the phase transition process within the framework of a hybrid model. Our findings indicate that incorporating finite-size effects plays a decisive role in the phase transition process. A detailed analysis of the impact of the surface tension parameter and Coulomb interactions reveals that these factors lead to a significant reduction in the phase transition region within neutron stars. Furthermore, the presence of the surface tension term causes the pressures of the baryonic and quark phases in the transition region to be unequal, in contrast to the Gibbs construction, which has a considerable effect on the equation of state of neutron stars.

***Keywords**: Finite-size effects - Thomas–Fermi model - NJL model- Neutron stars*

PACS No. 26.60.+c, 12.39.−x, 21.65.+f, 25.75.Nq

مقدمه

ستاره‌های نوترونی از چگال‌ترین اجرام شناخته‌شده در کیهان‌اند و به‌عنوان بقایای فشرده‌ی ستارگان پرجرم پس از رمبش گرانشی و انفجار ابرنواختری شکل می‌گیرند. این اجرام، آزمایشگاهی طبیعی برای مطالعه‌ی ماده در چگالی‌های بسیار بالا فراهم می‌کنند؛ شرایطی که در آن امکان وقوع گذار فاز از ماده‌ی باریونی به ماده‌ی کوارکی در هسته‌ی ستاره‌های نوترونی پرجرم مطرح می‌شود. بررسی گذار فاز به خصوص تحت ساختارهای دقیق از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است، زیرا می‌تواند تأثیر قابل‌توجهی بر تعیین معادله حالت این

ستاره‌ها داشته باشد[۱]. ساختارهای ماکسول و گیبس به ترتیب بیانگر دو حد کشش سطحی بی‌نهایت و صفر هستند. در حالی که اغلب مطالعات قبلی[۲و۳] گذار فاز در دو حد ایده‌آل ماکسول و گیبس بررسی شده است، اما در نظر گرفتن اثرات اندازه محدود برای توصیف واقع‌بینانه‌تر ناحیه مخلوط ضروری است. نوآوری اصلی این پژوهش، با هدف پر کردن این شکاف، به بررسی تأثیر تغییر پارامتر کشش سطحی بر خواص ترمودینامیکی ستاره‌های نوترونی و تغییرات مربوط به نمودار گذار فاز می‌پردازد. ساختار این پژوهش به شرح زیر است: ابتدا مدل توماس–فرمی در قالب دو برهم‌کنش MS96 و MS90 معرفی می‌شود. در گام بعد، مدل نامبو–جونا–لازینو بررسی شده و سپس از طریق اثرات اندازه محدود، پیوند میان معادلات حالت باریونی و کوارکی برقرار می‌گردد. بخش‌های پایانی نیز به تحلیل نتایج عددی و بحث، و در نهایت نتیجه‌گیری اختصاص یافته است.

مدل توماس–فرمی

از برهم‌کنش‌های تعمیم‌یافته مایرز–شواتکی، یعنی MS96 و MS90، برای معادله حالت ماده باریونی استفاده می‌شود. در این مدل پتانسیل مورد استفاده در برهمکنش نوکلئون–نوکلئون به صورت زیر می‌باشد[۲و۳]:

$$V_{12} = -2T_b n_0^{-1} J\left(\frac{r_{12}}{a}\right)\left\{\frac{1}{2}(1 \mp \xi)\alpha - \frac{1}{2}(1 \mp \zeta) \times \left[\beta\left(\frac{p_{12}}{p_b}\right)^2 - \gamma\left(\frac{p_b}{|p_{12}|}\right) + \eta\left(\frac{2\bar{n}}{n_0}\right)^{\frac{2}{3}}\right]\right\}, \quad (1)$$

که در روابط فوق $J\left(\frac{r_{12}}{a}\right)$ نشان دهنده برهمکنش یوکاوایی است که در آن r_{12} فاصله نسبی بین دو ذره و p_{12} بزرگی تکانه نسبی ذرات است. T_b انرژی جنبشی بیانگر چگالی نسبی و $\bar{n}^{\frac{2}{3}} = \frac{1}{2}(n_1^{\frac{2}{3}} + n_2^{\frac{2}{3}})$ نیز به ترتیب چگالی اشباع و تکانه فرمی هستند. n_0 و p_b هفت پارامتر قابل تنظیم در پتانسیل توماس–فرمی MS96 (MS90) به صورت زیر می‌باشد[۲]:

$$a = 0/59294(0/59542)\ \text{fm},\ \alpha = 1/94684(3/60928),$$
$$\gamma = 1/13672(0/21329),\ \beta = 0/15311(0/37597),$$
$$\eta = 1/05(1/33677),\ \xi = 0/27976(0/44003),$$
$$\zeta = 0/55665(0/59778). \quad (2)$$

براساس قانون دوم ترمودینامیک، شرایط تعادل بتایی و خنثایی بار الکتریکی به صورت زیر تعیین می‌شود:

$$\mu_e = \mu_\mu, \quad \mu_e = \mu_n - \mu_p, \quad (3)$$

$$n_p = n_e + n_\mu. \quad (4)$$

چگالی انرژی و فشار در این مدل از رابطه زیر حاصل می‌شود:

$$\varepsilon_{TF} = \frac{g}{h^3}\sum_{b=n,p}\int_0^{p_{F,b}}\left(m_b c^2 + \frac{p_1^2}{2m_b} + \frac{1}{2}V_{12}(p_1)\right)\Theta(p_{F,b} - p_1)d^3p_1, \quad (5)$$

$$P_B = P_{TF} + P_L = \sum_{k=b,l} n_k\mu_k - \varepsilon_B. \quad (6)$$

مدل کوارکی NJL

مدل کوارکی NJL با بازتولید ویژگی‌هایی نظیر ساختار غیراختلال خلاء و شکست دینامیکی تقارن کایرال، دارای لاگرانژی زیر است[۲و۳]:

$$\mathcal{L}_{NJL} = \bar{q}(i\gamma_\mu\partial^\mu - m^0)q + G_S\sum_{a=0}^{8}\left[(\bar{q}\lambda_a q)^2 + (\bar{q}i\gamma_5\lambda_a q)^2\right] - K\{\det[\bar{q}(1+\gamma_5)q] + \det[\bar{q}(1-\gamma_5)q]\} - G_V\sum_{a=0}^{8}\left[(\bar{q}\gamma^\mu\lambda_a q)^2 + (\bar{q}\gamma^\mu\gamma_5\lambda_a q)^2\right], \quad (7)$$

در رابطه‌ی فوق q میدان کوارکی را نشان می دهد که دارای سه طعم و سه رنگ است و λ_a ماتریس گلمن نام دارد[۳]. m^0 ماتریس جرمی کوارک‌ها است. در محاسبات این مقاله، جرم‌های پایه کوارک‌ها برابر با $m_u^0 = 5/5$ MeV ، $m_d^0 = 5/5$ MeV و $m_s^0 = 140/7$ MeV در نظر گرفته شده است. همچنین، پارامترهای مدل شامل $\Lambda = 602/3$ MeV ، $G_S = \frac{1/835}{\Lambda^2}$ و $K = \frac{12/36}{\Lambda^5}$ تعیین شده‌اند[۳]. G_V که ثابت جفت شدگی برداری

نام دارد، به دلیل عدم قطعیت در پیش بینی‌های نظری نسبت $\frac{G_V}{G_S}$ به عنوان یک پارامتر آزاد در نظر گرفته می‌شود[۳]. برای مجموعه‌ای از کوارک‌ها و لپتون‌ها شرایط تعادل بتایی و خنثایی بار به صورت زیر است:

$$\mu_{s^-} = \mu_{d^-} = \mu_{u^+} + \mu_{e^-}\,, \qquad \mu_{\mu^-} = \mu_{e^-}\,, \tag{۸}$$

$$2n_u - (n_d + n_s) - (n_e + n_\mu) = 0\,. \tag{۹}$$

در نتیجه چگالی انرژی و فشار کوارکی به صورت زیر بدست می‌آید:

$$\varepsilon_{QP} = \varepsilon_{NJL} + \varepsilon_L\,, \tag{۱۰}$$

$$P_{QP} = P_{NJL} + P_L = \sum_{k=u,d,s} n_k\mu_k - \varepsilon_Q\,, \tag{۱۱}$$

ε_{NJL} در رابطه (۱۰) به صورت زیر می با شد:

$$\varepsilon_{NJL} = -\frac{3}{\pi^2}\sum_{i=u,d,s}\left[\int_{p_F^i}^{\Lambda}\sqrt{p^2 + M_i^2}\,p^2 dp\right] + 2G_S\left(c_u^2 + c_d^2 + c_s^2\right) - 4K\,c_u c_d c_s - \varepsilon_{NJL}^{\cdot} + 2G_V(n_u^2 + n_d^2 + n_s^2)\,. \tag{۱۲}$$

فاز مخلوط باریون–کوارک با اثرات اندازه محدود

در رویکرد توصیف فاز مخلوط باریون–کوارک، از تقریب ویگنر–سایتز استفاده می‌شود. بر این اساس، سیستم به سلول‌های هم‌ارز و خنثی از نظر بار الکتریکی تقسیم می‌گردد. درون هر سلول، دو فاز باریونی و کوارکی به‌طور همزمان حضور دارند که توسط یک مرز تیز و مشخص از یکدیگر جدا می‌شوند. همچنین، لپتون‌ها (شامل الکترون‌ها و میون‌ها) به صورت یکنواخت در تمام حجم سلول پخش شده‌اند[۱]. چگالی انرژی کل فاز مخلوط باریون–کوارک به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\varepsilon_{MP} = \chi\varepsilon_{QP} + (1-\chi)\varepsilon_{BP} + \varepsilon_{surf} + \varepsilon_{coul}\,, \tag{۱۳}$$

چگالی انرژی سطحی و کولنی برای یک سلول کروی با فرمول زیر داده می‌شود[۱و۴]:

$$\varepsilon_{surf} = \frac{3\sigma\chi_{in}}{r}\,, \tag{۱۴}$$

$$\varepsilon_{coul} = \frac{4\pi e^2}{5}(\delta n_c)^2 r^2 \chi_{in} D(\chi_{in})\,, \tag{۱۵}$$

$$D(\chi_{in}) = 1 - \frac{3}{2}\chi_{in}^{1/3} + \frac{1}{2}\chi_{in}\,. \tag{۱۶}$$

در رابطه فوق، χ_{in} کسر حجمی بخش داخلی با شعاع r است، در رابطه (۱۴) σ کشش سطحی مرز مشترک باریون–کوارک است که در محاسبه حاضر به عنوان یک پارامتر آزاد در نظر گرفته می‌شود. در اینجا، برای فاز قطره‌ای $\chi_{in} = \chi$ و برای فاز حبابی $\chi_{in} = 1 - \chi$ در نظر گرفته می‌شود. δn_c تفاوت چگالی بار بین فازهای باریونی و کوارکی می باشد[۱و۴و۵]. با معرفی ضرایب لاگرانژ، μ_c و μ_n ،کمینه‌سازی تابع را انجام می‌دهیم:

$$w = \varepsilon_{MP} - \mu_n\left[\frac{\chi}{3}(n_u + n_d + n_s) + (1-\chi)(n_p + n_n)\right] + \mu_c\left[\chi n_c^{QP} + (1-\chi)n_c^{BP}\right]. \tag{۱۷}$$

در این مقاله کسر حجمی $(0 \le \chi \le 1)$ قرار دارد و شرط خنثایی بار کل به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$0 = \frac{\chi}{3}(n_u + n_d + n_s) + (1-\chi)(n_p + n_n) - n_e - n_\mu\,. \tag{۱۸}$$

با مشتق گرفتن از w نسبت به چگالی الکترون در ناحیه گذار و مساوی صفر قرار دادن آن و با در نظر گرفتن شرط خنثی بودن بار کل در ناحیه گذار، شرایط تعادل بتایی به صورت زیر بدست می‌آید:

$$\mu_c = \mu_e^{BP} - \frac{2\varepsilon_{coul}}{(1-\chi)\delta n_c} = \mu_e^{QP} + \frac{2\varepsilon_{coul}}{\chi\delta n_c}\,, \tag{۱۹}$$

$$\mu_p = \mu_n - \mu_e^{BP}\,, \tag{۲۰}$$

$$\mu_u = \frac{1}{3}\mu_n - \frac{2}{3}\mu_e^{QP}\,, \tag{۲۱}$$

$$\mu_d = \mu_s = \frac{1}{3}\mu_n + \frac{1}{3}\mu_e^{QP}\,. \tag{۲۲}$$

در این ساختار فشار در فازهای باریونی و کوارکی باهم برابر نیست. با مشتق گرفتن از w نسبت به χ و مساوی صفر قرار دادن آن، شرط تعادل برای فشار به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$P_{BP} = P_{QP} - \frac{2\varepsilon_{coul}}{\delta n_c}\left[\frac{1}{3\chi}(2n_u - n_d - n_s) + \frac{1}{1-\chi}n_p\right], \pm\frac{\varepsilon_{coul}}{\chi_{in}}\left(3 + \chi_{in}\frac{D'}{D}\right). \tag{۲۳}$$

به‌طوری که علامت جمله‌ی آخر برای فاز قطره‌ای منفی و برای فاز حبابی مثبت است. شرط تعادل میان انرژی‌های سطحی و کولنی، از حاصل کمینه‌سازی نسبت به r حاصل می‌شود:

$$\varepsilon_{surf} = 2\varepsilon_{coul}\,. \tag{۲۴}$$

فشار و چگالی باریونی در ناحیه مخلوط به صورت زیر تعیین می‌شود:

$$P_{MP} = n_B^2\frac{\partial(\varepsilon_{MP}/n_B)}{\partial n_B}\,, \tag{۲۵}$$

$$n_B = \frac{\chi}{3}(n_u + n_d + n_s) + (1-\chi)(n_p + n_n)\,, \tag{۲۶}$$

نتایج و بحث

در شکل ۱ رفتار فشار بر حسب چگالی باریونی نشان می‌دهد که با کاهش σ ، ناحیه اثرات اندازه محدود به چگالی‌های بالاتر جابه‌جا می‌شود. این روند بیانگر آن است که افزایش σ باعث تقویت

انرژی‌های سطحی و کولنی می‌شود و در نهایت پایداری ساختار مقید باریون را تضعیف کرده و فرآیند گذار فاز باریون–کوارک را تسریع می‌کند. در یک σ خاص چگالی باریون در ناحیه گذار فاز در برهمکنش MS96 نسبت به MS90 افزایش می‌یابد. این تفاوت، ناشی از تغییر در توازن میان نیروهای دافعه و جاذبه هسته‌ای در این دو برهمکنش است. مشاهدات شکل ۲ بیانگر رابطه مستقیم میان چگالی باریونی و پتانسیل شیمیایی باریونی در هر دو برهمکنش MS90و MS96 است. در σ=۱۰، مشاهده می‌شود که برهمکنش MS96در مقایسه با MS90، بازه پتانسیل شیمیایی باریونی بالاتری را در ناحیه گذار تجربه می‌کند؛ این پدیده به‌طور مستقیم ناشی از افزایش چگالی باریونی در برهمکنش MS96 است که پتانسیل شیمیایی سیستم را به سطوح بالاتری سوق می‌دهد.

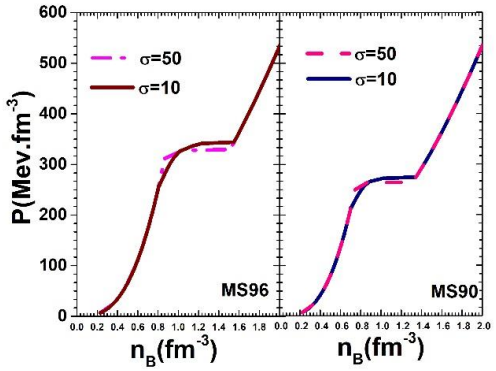
همان گونه که در شکل۳ نشان داده شده است با افزایش پتانسیل شیمیایی نوترون، چگالی باریونی نیز افزایش می‌یابد. در ناحیه گذار با تغییرات اندک در پتانسیل شیمیایی نوترون، چگالی باریونی به طور شدیدی افزایش پیدا می‌کند.

نتیجه گیری

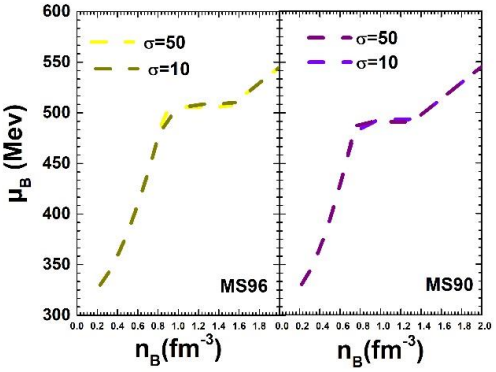
این مطالعه با رویکردی تحلیلی، روابط متقابل میان پارامترهای ترمودینامیکی شامل فشار، چگالی باریونی و پتانسیل‌های شیمیایی را در ستاره‌های نوترونی واکاوی کرد. نتایج نشان داد که پارامتر کشش سطحی با تأثیر بر انرژی‌های سطحی و کولنی، مستقیماً بر نرمی یا سختی معادله حالت تأثیر می‌گذارد. یافته‌های کلیدی ما نشان می‌دهد که در حضور اثرات اندازه محدود، برهمکنش‌های MS90 و MS96 رفتار متفاوتی از خود نشان می‌دهند: برهم‌کنش MS96 منجر به گسترش بازه چگالی باریونی در ناحیه گذار می‌شود؛ در حالی که برهم‌کنش MS90 سبب کاهش این بازه در همان ناحیه می‌گردد. همچنین مشاهده شد که افزایش σ باعث کاهش بازه گذار فاز و تسریع فرآیند گذار می‌شود. این نتایج تأکید می‌کنند که برای توصیف دقیق ساختار داخلی ستاره‌های نوترونی، در نظر گرفتن اثرات اندازه محدود و کشش سطحی در مدل‌های ترکیبی امری ضروری است.

مرجع ها

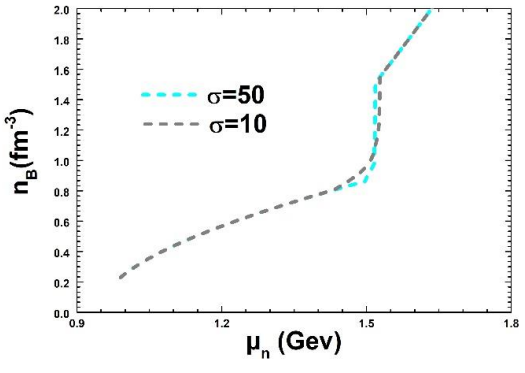
[1] X. H. Wu and H. Shen; "Finite-size effects on the hadron-quark phase transition in neutron stars"; *Physical Review C* **96**,2 (2017) 025802.
[2] M. Ghazanfari Mojarrad and J. Ranjbar; Thomas-Fermi approximation in the phase transition of neutron star matter from β-stable nuclear matter to quark matter; *Annals of Physics* **412**,(2020) 168048.
[3] M. Ghazanfari Mojarrad and J. Ranjbar ; Hybrid neutron stars in the Thomas-Fermi theory ; *Physical Review C* **100**,1 (2019) 015804.
[4] Min Ju and Jinniu Hu and Hong Shen; "Hadron-quark pasta phase in massive neutron stars"; *The Astrophysical Journal* **923**,2 (2021) 250.
[5] X. H. Wu and H. Shen; "Nuclear symmetry energy and hadron-quark mixed phase in neutron stars"; *Physical Review C* **99**,6 (2019) 065802.



شکل۱: نمودار فشار برحسب چگالی باریونی.



شکل۲: نمودار پتانسیل شیمیایی باریونی برحسب چگالی باریونی.



شکل۳: تغییرات چگالی باریونی برحسب پتانسیل شیمیایی نوترون(MS96).

محاسبه ریسک ابتلا به سرطان و دز جذبی ناشی از پرتوزایی رادیوایزوتوپ‌های طبیعی و مصنوعی در رسوبات رود گلوگاه

پورایمانی، رضا*؛ مرتضوی شاهرودی، سیدمحسن؛ قربانی، روشنک

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه اراک، اراک

*R-Pourimani@araku.ac.ir

چکیده

ارزیابی آلودگی رادیواکتیو در محیط‌زیست به دلیل خطرات پرتوها شامل اختلالات ژنتیکی و سرطان ضروری است. در این پژوهش، کمیت‌های پرتوشناختی ناشی از ویژه‌هسته‌های پرتوزا در رسوبات رود گلوگاه (شمال رشته کوه البرز) محاسبه شد. نتایج نشان داد دز جذبی (۷ نمونه) و دز معادل (۶ نمونه) و نیز شاخص خطر سرطان (۶ نمونه) بالاتر از حد جهانی است، هرچند میانگین‌ها کمتر از میانگین جهانی‌اند. نقشه پراکنش دز جذبی، افزایش از بالادست به پایین‌دست را نشان می‌دهد که ناشی از انباشت عناصر پرتوزا از طریق انتقال توسط جریان آب به پایین‌دست و مصرف کودهای پتاسیمی در اراضی کشاورزی در آن ناحیه است. با این حال، شاخص خطرپذیری خارجی در همه نمونه‌ها کمتر از حد مجاز بوده و تهدید جدی برای ساکنین ایجاد نمی‌کند.

واژه های کلیدی: *پرتوزایی، شاخص ابتلا به سرطان، دز جذبی، شاخص خطرپذیری، رسوب*

Calculation of Excess Life Cancer Risk and Absorbed Dose due to the Radioactivity of Natural and Artificial Radioisotopes in the Sediments of the Galougah River

Pourimani, Reza*; Mortazavi Shahroudi, Seyyed Mohsen; Ghorbani, Roshanak

Department of Physics, Faculty of Science, Arak University, Arak

Abstract

Assessing radioactive contamination in the environment is essential due to the risks of radiation, including genetic disorders and cancer. In this study, radiological quantities resulting from radioactive nuclides in the sediments of the Galougah River (northern Alborz mountain range) were calculated. The results showed that the absorbed dose (7 samples) and equivalent dose (6 samples), as well as the cancer risk index (6 samples) are higher than the global limit, although the average values are below the global average. The distribution map of absorbed dose indicates an increase from upstream to downstream, which is attributed to the accumulation of radioactive elements transported downstream by water flow and the use of potassium fertilizers in agricultural lands in that area. However, the external hazard index in all samples is below the permissible limit and does not pose a serious threat to the residents.

***Keywords**: Radioactivity, ELCR, Absorbed Dose, H_{ex}, Sediment*

PACS No. (61.80-x)

مقدمه

قرارگیری در معرض پرتوهای رادیواکتیو ناشی از عناصر پرتوزای طبیعی و مصنوعی، چه در شرایط پرتوزایی بالا در کوتاه‌مدت و چه در شرایط پرتوزایی پایین در بلندمدت، می‌تواند منجر به بروز طیف گسترده‌ای از بیماری‌ها از جمله سوختگی‌های پرتوی، اختلالات ژنتیکی، افزایش شاخص‌های خطرپذیری و افزایش ریسک ابتلا به سرطان گردد[۱]. سازوکار اصلی این آسیب‌ها، توانایی پرتوها در تجزیه رادیولیتیک مولکول‌های آب درون سلول‌های بدن انسان و تولید رادیکال‌های آزاد است. این رادیکال‌ها با تشکیل اکسیژن پراکسید، به رشته‌های DNA آسیب رسانده و سبب ایجاد جهش و اختلال در اطلاعات سلولی می‌شوند [۲، ۳]. منابع پرتوزایی طبیعی در محیط زیست عمدتاً

شامل ^{40}K و هسته‌های پرتوزای دختر در زنجیره‌های واپاشی ^{238}U، ^{232}Th و ^{235}U هستند. در مقابل، پرتوزایی مصنوعی ناشی از فعالیت‌های بشری نظیر آزمایش سلاح‌های هسته‌ای و حوادث نیروگاه‌های اتمی بوده که منجر به نشت آلودگی‌های رادیواکتیو مانند ^{137}Cs در سراسر کره زمین شده است[۴، ۵]. این ذرات به صورت ریزگردهای حاوی عناصر پرتوزا در اتمسفر منتشر شده، توسط جریان‌های هوا به نقاط دیگر انتقال می‌یابند و نهایتاً از طریق ریزش‌های جوی در محیط‌های آبی و خاکی ته‌نشین می‌شوند. پس از ته‌نشینی، این عناصر توسط ذرات رس و مواد معلق در آب جذب شده و در مدت کوتاهی بر بستر محیط‌های آبی رسوب می‌کنند. این مطالعه با هدف تعیین دز جذبی (D[1])، دز موثر سالانه معادل (AED[2])، شاخص خطرپذیری خارجی (H_{ex}[3])و خطر ابتلا به سرطان در طول عمر (ELCR[4])، بر پایه داده‌های اندازه‌گیری فعالیت ویژه عناصر پرتوزا در رسوبات رودخانه گلوگاه در شمال ایران با استفاده از آشکارساز فوق خالص ژرمانیومی (HPGe[5]) در آزمایشگاه هسته ای دانشگاه اراک که توسط نویسندگان این مقاله به‌دست آمده است، انجام شد [۶].

مواد و روش‌ها

منطقه مورد مطالعه

در این پژوهش، کمیت‌های پرتوشناختی در ۱۹ نمونه رسوبی از سرتاسر رود گلوگاه واقع در ضلع جنوبی تالاب میانکاله (شکل۱) که سرچشمه آن در دامنه شمالی رشته کوه زاگرس قرار دارد مورد مطالعه قرار گرفت. نمونه برداری از رسوبات به روش استاندارد تصادفی صورت گرفت. مختصات جغرافیایی نمونه‌ها در جدول ۱ درج شده است.



شکل۱: منطقه مورد مطالعه در این پژوهش در دامنه شمالی رشته کوه البرز

جدول۲: مختصات جغرافیایی نمونه‌های رسوبی در این پژوهش

کد نمونه	طول جغرافیایی	عرض جغرافیایی	کد نمونه	طول جغرافیایی	عرض جغرافیایی
S1	۵۳٫۸۲۳۷۲	۳۶٫۶۸۴۸۳	S11	۵۳٫۸۱۳۷۷	۳۶٫۶۹۹۷۶
S2	۵۳٫۸۲۱۶۶	۳۶٫۶۸۵۴۵	S12	۵۳٫۸۱۴۲۰	۳۶٫۷۰۶۰۸
S3	۵۳٫۸۱۹۶۰	۳۶٫۶۸۶۰۷	S13	۵۳٫۷۸۸۸۷	۳۶٫۷۷۹۸۳
S4	۵۳٫۸۱۸۱۵	۳۶٫۶۸۷۲۴	S14	۵۳٫۷۸۸۸۷	۳۶٫۷۸۱۴۱
S5	۵۳٫۸۱۶۸۶	۳۶٫۶۸۸۰۶	S15	۵۳٫۷۸۸۸۷	۳۶٫۷۸۲۷۲
S6	۵۳٫۸۱۷۷۲	۳۶٫۶۸۹۸۵	S16	۵۳٫۷۸۸۸۷	۳۶٫۷۸۴۳۰
S7	۵۳٫۸۱۹۲۶	۳۶٫۶۹۱۰۲	S17	۵۳٫۷۸۸۸۷	۳۶٫۷۸۵۴۷
S8	۵۳٫۸۲۰۸۰	۳۶٫۶۹۳۰۲	S18	۵۳٫۷۸۸۸۰	۳۶٫۷۸۶۸۶
S9	۵۳٫۸۱۸۲۳	۳۶٫۶۹۴۷۴	S19	۵۳٫۷۸۸۸۰	۳۶٫۷۸۷۷۸
S10	۵۳٫۸۱۵۴۹	۳۶٫۶۹۶۷۳			

منطقه سرچشمه این رود ساختار پلوتونیک دارد و در نتیجه نمک-های متشکل از هسته‌های پرتوزا به دلیل تحرک‌پذیری بالا در آب حل شده و با رسوب گذاری در بستر آن، باعث سطح تابش‌های رادیواکتیو در آن منطقه شود. همچنین فعالیت‌های بشری اطراف رود گلوگاه مانند استفاده از کودهای پتاسیمی برای مصارف کشاورزی می‌تواند آلودگی رادیواکتیو ناشی از هسته‌های پرتوزای پتاسیم را در آن ناحیه افزایش دهد. غلظت بالای ویژه‌هسته‌های پرتوزا در آن منطقه به شکل بالقوه می‌تواند باعث افزایش ریسک انتقال آلودگی رادیواکتیو به دام و آبزیان آن منطقه شود [۷، ۸].

محاسبه کمیت‌های پرتوشناختی

نمونه‌های آماده شده تحت استاندارد IAEA در ضروف نگینی با حجم ۳۰۰ CC قرار گرفتند [۹]. برای برقراری تعادل فعالیت بین ویژه‌هسته‌های ^{226}Ra و ^{222}Rn از زنجیره واپاشی ^{238}U، و همچنین تعادل ویژه‌هسته‌های پرتوزای ^{228}Ra، ^{228}Ac و ^{228}Th با

[1] Dose
[2] Annual Effective Dose Equivalent
[3] External Hazard Index
[4] Excess Life Cancer Risk
[5] High-Purity Germanium detector

ویژه‌هسته مادرشان یعنی ^{228}Ac، بین نمونه‌سازی تا طیف سنجی ۵۰ روز فاصله زمانی لحاظ شد [۱۰، ۱۱]. با استفاده از آشکارساز فوق خالص ژرمانیم (HPGe) هم‌محور نوع P مدل GCD-۳۰۱۹۵BSI انجام شد. تجزیه وتحلیل طیف‌های ثبت شده با استفاده از نرم‌افزار Maestro II Gamma ۳۲ صورت گرفت. از پرتوی گامای ^{214}Pb با انرژی ۳۵۱٫۹۳ keV و پرتوی گامای ^{214}Bi با انرژی ۶۰۹٫۳۱ keV برای تعیین ویژه‌فعالیت ^{226}Ra، و برای ^{232}Th از دو خط گامای ^{228}Ac، یکی با انرژی ۹۱۱٫۲۱ keV با احتمال واپاشی ۲۶٫۶٪ و دیگری با انرژی ۹۶۸٫۹۷ keV با احتمال واپاشی ۱۷٫۴٪ استفاده شده است. همچنین برای محاسبه فعالیت ویژه هسته‌های ^{40}K و ^{137}Cs خطوط گامای این هسته‌ها به ترتیب با انرژی‌های ۱۴۶۰٫۷۰ keV و ۶۶۱٫۶۶ keV استفاده شد. با استفاده از نرم‌افزار GammaVision ۳۲ EG&G Ortec طیف گامای تمامی نمونه‌ها مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت و فعالیت ویژه هر کدام از عناصر مورد مطالعه محاسبه شد. با توجه به اندازه‌گیری‌های انجام شده در مورد غلظت ویژه‌هسته‌های پرتوزا در هرنمونه، کمیت‌های پرتوشناختی مورد محاسبه قرار گرفت [۶]. در ارتفاع ۱ متری از سطح زمین، برای ویژه هسته‌های پرتوزایی که به طور یکنواخت در خاک و سنگ توزیع شده اند، دز جذبی گاما در هوا را می‌توان با استفاده از رابطه (۱) محاسبه کرد[۱۲].

$$D\left(\frac{nGy}{h}\right) = 0.461\,A_{Ra} + 0.623\,A_{Th} + 0.0417\,A_K + 0.1243\,A_{Cs} \quad (۱)$$

دز موثر سالانه معادل بر حسب میلی‌سیورت بر سال با استفاده از رابطه (۲) محاسبه شد [۱۲].

$$AED\left(\frac{mSv}{y}\right) = D\left(\frac{nGy}{h}\right) \times 8766\left(\frac{h}{y}\right) \times 0.8 \times 0.7\left(\frac{Sv}{Gy}\right) \times 10^{-6} \quad (۲)$$

نسبت خطر ابتلا به سرطان مستقیماً با دز مؤثر سالانه و امید به زندگی (DL) متناسب است و ضریب تناسب با RF نشان داده می‌شود. بر اساس گزارش سازمان بهداشت جهانی برای ایرانیان، امید به زندگی حدودا ۷۰ سال ثبت شده است و کمیته بین المللی حفاظت در برابر تشعشع ضریب تبدیل ریسک را $۰٫۰۵\ Sv^{-1}$ تعیین کرده است [۱۳]. مقدار این شاخص توسط رابطه (۳) محاسبه می‌شود [۱۲].

$$ELCR\ (\times 10^{-3}) = AED \times DL \times RF \quad (۳)$$

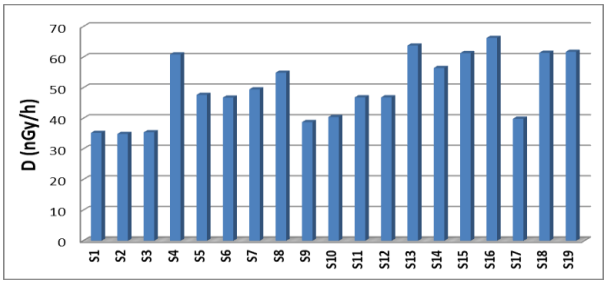
شاخص خطر خارجی سطح تشعشعات گاما موجود در محیط و وجود هسته‌های پرتوزا در محیط را نشان می‌دهد که تهدیدی بالقوه برای انسان است و مقدار آن برای ناچیز بودن مخاطرات ناشی از تابش رادیواکتیو کمتر از یک باشد. مقدار H_{ex} با استفاده از رابطه(۴) محاسبه شد [۱۲].

$$H_{ex} = \frac{A_{Ra}}{370} + \frac{A_{Th}}{259} + \frac{A_K}{4810} < 1 \quad (۴)$$

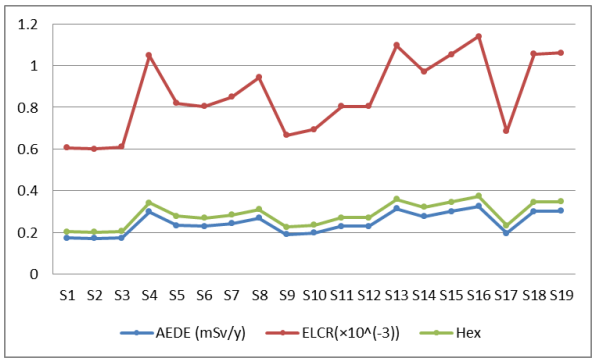
در روابط فوق A_{Ra}، A_{Th}، A_K و A_{Cs} به ترتیب فعالیت ویژه ^{226}Ra، ^{232}Th، ^{40}K و ^{137}Cs بر حسب Bq/kg می‌باشد.

نتایج و بحث

نتایج مربوط به محاسبه کمیت‌های پرتوشناختی در نمونه‌های مورد مطالعه در شکل‌های ۲ و ۳ و خلاصه نتایج در جدول ۲ درج شده است.



شکل۲: دز جذبی در نمونه های مورد مطالعه برحسب نانوگری بر ساعت.



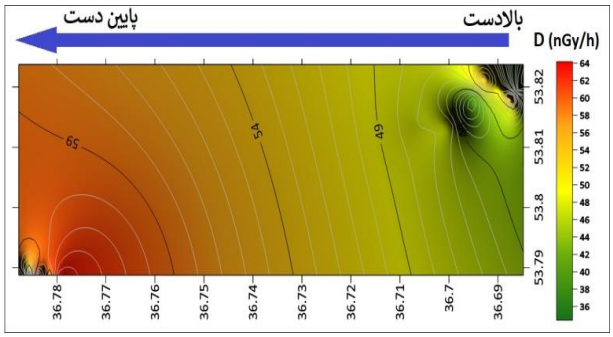
شکل۳: دزمعادل برحسب میلی‌سیورت برسال، خطر ابتلا به سرطان و شاخص خطرپذیری خارجی در نمونه‌های مورد مطالعه.

جدول۲: خلاصه نتایج کمیت‌های زیست‌شناختی

H_{ex}	$ELCR(\times10^{-3})$	AED(mSv/y)	D(nGy/h)

کمینه	۳۴٫۹۴	۰٫۱۷	۰٫۶۰	۰٫۲۰
بیشینه	۶۶٫۳۱	۰٫۳۳	۱٫۱۴	۰٫۳۷
میانگین	۴۹٫۹۸	۰٫۲۵	۰٫۸۶	۰٫۲۹

بر اساس یافته‌های حاصل از اندازه‌گیری و محاسبه کمیت‌های پرتوشناختی در رسوبات بستر رودخانه گلوگاه، تنوع مکانی معناداری در غلظت هسته‌های پرتوزا و به تبع آن در کمیت‌های پرتوشناختی مشاهده گردید. بیشینه مقادیر مربوط به کمیت‌های پرتوشناختی در نمونه شماره S16 ثبت شد، در حالی که کمترین میزان این کمیت‌ها به نمونه شماره S2 تعلق داشت. مقایسه مقادیر دز جذبی در نمونه‌های مورد مطالعه با میانگین جهانی این شاخص (۵۵ nGy/h) حاکی از آن است که نمونه‌های شماره S4، S13، S14، S15، S16، S18 و S19 ، مقادیری بالاتر از این حد مرجع جهانی از خود نشان می‌دهند [۱۴]. ارزیابی پارامتر دز معادل جذبی برای نمونه‌های مذکور بیانگر آن است که مقادیر این شاخص نه‌تنها از میانگین جهانی (۰٫۲۹ mSv/y) بیشتر است، بلکه از آستانه ایمنی جمعیت عمومی که معادل ۱ میلی‌سیورت در سال تعیین شده است، فاصله قابل توجهی داشته و در محدوده مجاز قرار میگیرد [۱۴]. با این وجود، محاسبه شاخص خطر ابتلا به سرطان در طول برای همین گروه از نمونه‌ها، رقمی بیش از حد مجاز آن یعنی 10^{-3} را نشان داد که بیانگر آن است که مواجهه طولانی‌مدت با این رسوبات، احتمالاً می‌تواند ریسک‌پذیری را در سطحی فراتر از آستانه مرجع قرار دهد [۱۴]. بررسی شاخص خطرپذیری خارجی برای کلیه نمونه‌ها، حاکی از آن است که مقدار این شاخص همواره از واحد کوچکتر بوده و بنابراین در چارچوب معیارهای ایمنی بین‌المللی، مخاطره پرتویی خارجی قابل توجهی از سوی این رسوبات متوجه کاربران و ساکنان آن منطقه نیست. در مجموع، محاسبه میانگین کلی برای تمامی کمیتهای پرتوشناختی مورد مطالعه نشان میدهد که مقادیر متوسط ثبت شده همگی کمتر از حدود مجاز تعیین شده توسط مراجع معتبری چون آژانس بین‌المللی انرژی اتمی (IAEA) و کمیسیون بین‌المللی حفاظت پرتویی (ICRP) هستند. این امر حاکی از آن است که سطح پرتوزایی طبیعی در رسوبات منطقه مورد مطالعه، علیرغم برخی نوسانات نقطه‌ای، در ترازی قرار دارد که خطری جدی و سیستماتیک برای سلامت ساکنین یا اکوسیستم پیرامونی ایجاد نکند و از این نظر، منطقه مورد مطالعه از وضعیت پرتوشناختی قابل قبولی برخوردار است. برای درک بهتر الگوی توزیع دز جذبی، نمودار هم‌ترازی توزیع دز در شکل ۴ رسم شده است.



شکل۴: نمودار هم‌ترازی توزیع دز جذبی در منطقه مورد مطالعه.

بررسی نقشه توزیع دز جذبی در امتداد رودخانه گلوگاه نشان‌دهنده وجود یک شیب افزایشی معنادار در مقادیر دز از نواحی بالادست به سوی پایین‌دست است. این الگوی مکانی را می‌توان به دو دسته عامل اصلی نسبت داد. نخست، سازوکار هیدرودینامیکی انتقال و انباشت رسوبات حامل رادیونوکلئیدهاست؛ به‌گونه‌ای که جریان آب، ذرات حاوی عناصر پرتوزا را از بستر و حاشیه نواحی بالادست شسته و با خود حمل می‌کند و متعاقباً در بخش‌های آرام‌تر و پست‌تر پایین‌دست (نزدیک به مصب) زمینه ته‌نشینی و تمرکز انباشتی آن‌ها فراهم می‌شود. در این میان، ^{137}Cs به دلیل ضریب تحرک‌پذیری نسبتاً بالا در محیط‌های آبی، نقشی کلیدی در این انتقال ایفا می‌کند و قابلیت جابه‌جایی مؤثر با جریان رودخانه را داشته و در نواحی انتهایی ته‌نشین می‌شود. دوم، مداخلات انسان‌ساخت در اراضی جلگه‌ای پایین‌دست، به‌ویژه مصرف گسترده کودهای شیمیایی پتاسیمی در زمین‌های کشاورزی مجاور تالاب میانکاله، به‌عنوان یک منبع خارجی و افزاینده پرتوزایی مطرح است. این کودها حاوی ایزوتوپ ^{40}K هستند که با افزایش فعالیت ویژه پرتوزای طبیعی در لایه‌های سطحی خاک و رسوبات مصبی، سهم قابل‌توجهی در افزایش دز جذبی اندازه‌گیری‌شده در منطقه پایین‌دست داشته‌اند. بنابراین، ترکیب فرایندهای طبیعی

انتقال و تمرکز رسوبی با عوامل انسانی ناشی از فعالیت‌های کشاورزی، الگوی مشاهده‌شده افزایش دز جذبی را توجیه می‌کند.

نتیجه گیری

طبق نتایج، میزان دز جذبی برای ۷ نمونه و دز معادل برای ۶ نمونه بیش از حد متوسط جهانی است، همچنین شاخص ابتلا به سرطان نیز برای ۶ نمونه بالاتر از حد مجاز آن و برای باقی نمونه‌ها در نزدیکی حد مجاز آن است. اما میانگین این کمیت‌ها از میانگین جهانی کمتر می‌باشد. نقشه توزیع دز جذبی افزایش آن را از بالادست به پایین‌دست رودخانه گلوگاه نشان می‌دهد. این الگو احتمالاً ناشی از انباشت عناصر پرتوزا در بخش‌های پایین‌دست بوده که توسط جریان آب از بالادست حمل و در پایین‌دست ته‌نشین شده‌اند. همچنین مصرف کودهای پتاسیمی در اراضی کشاورزی جلگه‌ای پایین‌دست (نزدیک تالاب میانکاله) با افزایش پرتوزایی ناشی از ^{40}K، در تشدید دز جذبی منطقه مؤثر بوده است. همچنین شاخص خطرپذیری خارجی برای همه نمونه‌ها کمتر از حد مجاز محاسبه شد که نشان می‌دهد پرتوزایی رسوبات این منطقه، تهدید جدی برای ساکنین منطقه محسوب نمی‌شود.

سپاسگزاری

این طرح با حمایت مالی معاونت پژوهشی دانشگاه اراک انجام شده است. بدین‌وسیله نویسندگان کمال سپاس‌گزاری و امتنان خود را از این معاونت اعلام می‌دارند

مرجع‌ها

[۱] Y.F. Ali, F.A. Cucinotta, L. Ning-Ang and G. Zhou; “Cancer Risk of Low Dose Ionizing Radiation”; *Front. Phys.* **8**, (2020) 234. https://doi.org/10.3389/fphy.2020.00234

[۲] M.E. Wrenn, P.W. Durbin, B. Howard, J. Lipsztein, J. Rundo, E.T. Still and D.I. Willis; “Metabolism of ingested U and Ra”; *Health Phys.* **48**, (1985) 601–633.

[۳] K. Sankaranarayanan; “Ionizing radiation and genetic risks: X. The potential “disease phenotypes” of radiation-induced genetic damage in humans: perspectives from human molecular biology and radiation genetics”; *Mutation Research* **429**, (1999) 45-83. https://doi.org/10.1016/s0027-5107(99)00100-1

[۴] K.M. Miller, J.L. Kuiper and I.K. Helfer; “137Cs fallout depth distributions in forest versus field sites: Implications for external gamma dose rate”; *J. Environ. Radioact.* **12**, No.1 (1990) 23–47. https://doi.org/10.1016/0265-931X(90)90034-S

[۵] R. Pourimani and S.M. Mortazavi Shahroodi; “Radiological assess ment of the artificial and natural radionuclide concentrations of wheat and barley samc in Karbala Iraq”; *Iranian J. Medi. Phys.* **15**, No. 2 (2018) 126–131. https://doi.org/10.22038/ijmp.2017.24190.1238

[۶] مرتضوی شاهرودی، سیدمحسن؛ پورایمانی، رضا؛ قربانی، روشنک؛ «**مطالعه الگوی رسوب‌گذاری عناصر پرتوزا در محدوده آبریز رود گلوگاه به تالاب میانکاله در شمال ایران**»؛ *پژوهش فیزیک ایران*، (در دست انتشار).

[۷] S.M. Mortazavi Shahroudi and R. Pourimani; “Emission Pattern of NORMs and 137Cs in the Sediments of the Gaz River and the Gorgan Bay, North Iran”; *Iran J. Sci.* **47**, (2023) 589-599. https://doi.org/10.1007/s40995-023-01417-7

[۸] پارسایی, لطف ا... و محمدمفیدی خواجه, اراز؛ «**مدیریت برآبخیز خلیج گرگان, چالش ها, اهداف و دورنما**»؛ پنجمین همایش ملی علوم و مهندسی آبخیزداری ایران, (۱۳۸۸) گرگان https://civilica.com/doc/86966

[۹] International Atomic Energy Agency (IAEA), 2003, Collection and Preparation of bottom sediment sample for analysis of radionuclides and trace element (IAEA-TECDOC-1360, Vienna).

[۱۰] J.D.S. Paiva, E.E. Farias and E.J.D. Franca; “Assessment of the equilibrium of Th-228 and Ra-228 by gamma-ray spectrometry in mangrove soils, international nuclear atlantic conference”; Brazilian nuclear program. State policy for a sustainable world; 12. ENAN: meeting on nuclear applications (INAC 2015), Sao Paulo, SP (Brazil), 4-9 Oct 2015.

1. [۱۱] A. Shahrokhi and T. Kovacs; “Radiological survey on radon entry path in an underground mine and implementation of an optimized mitigation system”; *Environ. Sci. Eur.* **33**, (2021) 66. https://doi.org/10.1186/s12302-021-00507-w

[۱۲] United Nations Scientific Committee on the Effect of Atomic Radiation, "Report on the effects of atomic radia tion submitted to the general congress by United Nations scientific committee", UNSCEAR, Vol. II, 12–15, (2000)

[۱۳] International Commission on Radiological Protection (ICRP), (1990), Recommendations of the ICRP Publication 60, (Oxford: Pergamum Publication).

[۱۴] United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation (UNSCEAR), (2008), Sources, effects and risks of ionizing radiation, New York: Report to the General Assembly with annexes.

محاسبه نرخ واکنش اندرکنش گیراندازی تابش گاما $d(\alpha,\gamma)^6Li$ در نظریه میدان موثر خوشه‌ای

نظری، فرزانه[۱]؛ رادین، مهدی[۱]؛ معینی آرانی، مهدی[۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه‌نصیرالدین طوسی، تهران، ایران

[۲] دانشگاه مالک اشتر، تهران، ایران

چکیده

هدف اصلی این مقاله ارائه مطالعه جامع اندرکنش $d(\alpha,\gamma)^6Li$ در چارچوب نظریه میدان مؤثر خوشه‌ای است؛ واکنشی که نقش بسیار مهمی در تولید ایزوتوپ Li^6 در جهان آغازین ایفا می‌کند. بخش نخست این تحلیل، به تعیین ضریب نرمال‌سازی مجانبی حالت مقید Li^6 با استفاده از داده‌های به دست آمده از پراکندگی کشسان سیستم دوجسمی دوترون-آلفا در نظریه میدان موثر خوشه‌ای اختصاص داده شده است. در ادامه نرخ واکنش اندرکنش مذکور در گستره وسیعی از دماها، (10^6 تا 10^{10}) کلوین محاسبه و با داده‌های تجربی موجود و همچنین پیش‌بینی‌های سایر مدل‌های نظری مقایسه شده‌اند. سازگاری کلی نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که نظریه میدان مؤثر خوشه‌ای چارچوبی قابل اعتماد برای توصیف واکنش‌های گیراندازی تابش گاما در انرژی‌های پایین فراهم می‌کند؛ واکنش‌هایی که از اهمیت ویژه‌ای در اخترفیزیک هسته‌ای برخوردار هستند.

واژه های کلیدی: *نظریه میدان موثر خوشه‌ای، واکنش گیراندازی تابش گاما، ضریب نرمال‌سازی مجانبی، نرخ واکنش*

Reaction Rate Calculation of Gamma Capture Reaction $d(\alpha,\gamma)^6Li$ in Cluster Effective Field Theory

Nazari, Farzaneh[1]; Radin, Mahdi[1]; Moeini Arani, Mahdi[2]

[1] Department of Physics, K. N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran
[2] Malek Ahtar University, Tehran, Iran

Abstract

This study investigates the $d(\alpha,\gamma)^6Li$ reaction using Cluster Effective Field Theory (CEFT) because of its importance in producing ^6Li during Big Bang nucleosynthesis. First, the Asymptotic Normalization Coefficient (ANC) of the ^6Li bound state is extracted from d–α elastic scattering data. Next, the reaction rate for the $d(\alpha,\gamma)^6Li$ process is calculated to test the theoretical framework. Finally, the reaction rates are evaluated across a broad temperature range and compared with experimental data and other theoretical models. The good agreement obtained indicates that CEFT is a reliable approach for describing low-energy nuclear gamma capture reactions relevant to astrophysics.

***Keywords**: Cluster Effective Field Theory, Gamma Capture Reaction, Asymptotic Normalization Coefficient, Reaction Rate*

PACS No. 20

مقدمه

اندازه‌گیری فراوانی ایزوتوپ‌های لیتیم در جهان تفاوت قابل‌توجهی با پیش‌بینی‌های مدل استاندارد سنتز هسته‌ای انفجار بزرگ (BBN) نشان می‌دهند[۲,۱]. حل این ناسازگاری مستلزم بررسی دقیق واکنش‌های هسته‌ای مؤثر در تولید و نابودی ایزوتوپ‌های لیتیم در جهان اولیه است. اگرچه تاکنون توضیح قطعی برای این مسئله ارائه نشده است، ادامه بررسی رویکردهای نظری برای تعمیق درک ما از فرآیندهای بنیادی حاکم بر تکامل جهان ضروری است.

واکنش گیراندازی تابش گاما $d(\alpha,\gamma)^6Li$ یکی از مهم‌ترین اندرکنش‌های مسئول تولید هسته ^6Li محسوب می‌شود که از برهم‌کنش دوترون و ذره آلفا حاصل می‌گردد. از سال ۱۹۸۱ تاکنون، بررسی این واکنش، به صورت تجربی و نظری، موضوع بسیاری از تحقیقات بوده است[۳-۱۰]. تعیین دقیق نرخ این واکنش از اهمیت ویژه‌ای در اخترفیزیک هسته‌ای برخوردار است، زیرا به طورمستقیم بر پیش‌بینی فراوانی عناصر سبک و روند تکامل شیمیایی کیهان اثر می‌گذارد. نظریه میدان مؤثر خوشه‌ای (CEFT) رویکردی نظام‌مند، مستقل از مدل و با دقت قابل‌کنترل برای توصیف اندرکنش‌های هسته‌ای فراهم می‌آورد. این چارچوب با تمرکز بر درجات آزادی مرتبط در انرژی‌های پایین و بهره‌گیری از فرآیند بازبهنجارش امکان انجام پیش‌بینی‌های دقیق را بدون نیاز به آگاهی جزئی از برهم‌کنش‌ها در تمامی مقیاس‌های انرژی فراهم می‌کند. از این رو، نظریه میدان موثر خوشه‌ای بستری قدرتمند برای تحلیل واکنش‌های هسته‌ای چندجسمی فراهم می‌سازد. ساختار مقاله پیش‌رو به‌صورت زیر است: بخش اول این مقاله به مرور مختصری بر فرمول‌بندی واکنش گیراندازی تابش گاما در نظریه میدان موثر خوشه‌ای می‌پردازد. در بخش دوم، روش استخراج روش استخراج ضریب نرمال‌سازی مجانبی (ANC) حالت مقید ^6Li از داده‌های پراکندگی کشسان سیستم دوجسمی دوترون-آلفا را تشریح شده است. **در** بخش بعدی، نرخ واکنش در گستره دمایی 10^6 تا 10^{10} کلوین محاسبه‌شده و با اندازه‌گیری‌های تجربی و دیگر پیش‌بینی‌های نظری مقایسه می‌شوند. بخش آخر به جمع‌بندی و نتیجه‌گیری پژوهش اختصاص داده شده است.

مروری بر اندرکنش گیراندازی تابش گاما $d(\alpha,\gamma)^6Li$ در نظریه میدان موثر خوشه‌ای

در چارچوب نظریه میدان مؤثر خوشه‌ای، ذره آلفا (با اسپین صفر) و دوترون (با اسپین یک) به‌عنوان درجات آزادی بدون ساختار در نظر گرفته می‌شوند. پس حالت‌های ورودی غالب در ناحیه انرژی‌های پایین، حالت‌هایی هستند که به‌ترتیب با تکانه‌های زاویه‌ای کل ۰، ۱، ۲ و ۳ متناظرند. حالت نهایی سیستم که مربوط به حالت پایه هسته مقید ^6Li می‌باشد در کانال $^3S_1$ است که ناشی از تقید دو ذره آلفا و دوترون با انرژی بستگی $B = 1/47$ MeV می‌باشد. ازاین‌رو، گذارهای مجاز و غالب میان حالت‌های ورودی و حالت پایه نهایی در ناحیه انرژی‌های پایین را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$^3P_0, {}^3P_1, {}^3P_2 \xrightarrow{E1} {}^3S_1$$
$$^3D_1, {}^3D_2, {}^3D_3 \xrightarrow{E2} {}^3S_1 \qquad (1)$$

لاگرانژی واکنش گیراندازی تابش گاما $d(\alpha,\gamma)^6Li$ را به صورت زیر می‌نویسیم:

$$\mathcal{L}^{[\xi]} = \mathcal{L}_{ES}^{[\xi]} + \mathcal{L}_{RC}^{[\xi]} = \varphi^\dagger (i\partial_0 + \frac{\nabla^2}{2m_\alpha})\varphi + d_i^\dagger (i\partial_0 + \frac{\nabla^2}{2m_d})d^i$$
$$+ \eta^{[\xi]} t^{[\xi]\dagger} (i\partial_0 + \frac{\nabla^2}{2m_t} - \Delta^{[\xi]}) t^{[\xi]} + g^{[\xi]} (t^{[\xi]\dagger} (\varphi \Pi^{[\xi]} d) + \text{h.c.}) + \mathcal{L}_{RC}^{[\xi]} \qquad (2)$$

$\mathcal{L}_{RC}^{[\xi]}$ لاگرانژی مربوط به اندرکنش گیراندازی تابش گاما است. در رابطه بالا، φ میدان اسکالر ذره بدون اسپین آلفا با جرم $m_\alpha =$ ۳۷۲۷/۳۸ MeV و $d_i = \varepsilon_i^d d$ میدان برداری دوترون با جرم $m_d =$ ۱۸۷۵/۶۱ MeV و $t^{[\xi]}$ میدان دایمرون با جرم $m_t = m_\varphi + m_d$ است[۱۱]. $g^{[\xi]}$، $\Delta^{[\xi]}$ و $h^{[\xi]}$ ثابت‌های جفت شدگی نظریه میدان مؤثر برای کانال‌های ξ هستند و $\eta^{[\xi]} = \pm 1$ است. سطح‌مقطع کل واکنش گیراندازی تابش گاما $d(\alpha,\gamma)^6Li$ را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\sigma(p) = \frac{\mu k}{18\pi p}(|M_{E1}(p)|^2 + \frac{1}{5}|M_{E2}(p)|^2) \qquad (3)$$

که در آن $M_{E1}(p)$ و $M_{E2}(p)$ به ترتیب دامنه گذار مربوط به گذار الکترومغناطیسی و است که جزییات مربوط به محاسبات را می‌توان در مرجع [۱۲] یافت.

ضریب نرمال‌سازی مجانبی (ANC)

ضریب نرمال‌سازی مجانبی به دلیل نقش تعیین‌کننده آن در اندرکنش‌های گیراندازی تابشی مرتبط با اخترفیزیک هسته‌ای، یکی از کمیت‌های مهم در مطالعه واکنش‌های هسته‌ای انرژی پایین محسوب می‌شود. در چارچوب نظریه میدان مؤثر، این رویکرد می‌تواند برای تعیین انرژی بستگی و همچنین، در صورت نیاز،

ضریب نرمال‌سازی مجانبی به کار گرفته شود [٤]. در انرژی بستگی حالت پایه هسته ^{6}Li، دامنه پراکندگی باید در تکانه بستگی $i\gamma$ دارای یک قطب باشد. بنابراین،

$$-\frac{1}{a^{[^3S_1]}}-\frac{1}{2}r^{[^3S_1]}\gamma^2+\frac{1}{4}s^{[^3S_1]}\gamma^4+\ldots-H_0(i\gamma)=0 \qquad (4)$$

در اینجا، $a^{[^3S_1]}$، $r^{[^3S_1]}$ و $s^{[^3S_1]}$ به‌ترتیب طول پراکندگی، برد مؤثر و پارامتر شکل متناظر با حالت مقید کانال $^3S_1$ هستند. اعمال این قید موجب برقراری رابطه‌ای میان $a^{[^3S_1]}$ و سایر پارامترهای برد مؤثر می‌شود که از تحلیل داده‌های انتقال فاز حاصل از پراکندگی کشسان دوترون–آلفا قابل استخراج‌اند.

$$\mathcal{Z}=\left[\frac{\partial D^{[^3S_1]}(E,0)^{-1}}{\partial E}|_{E=-B}\right]^{-1}$$
$$=\left[-\frac{g^{[^3S_1]^2}\mu^2}{2\pi p}\frac{\partial}{\partial p}\left(\begin{matrix}\frac{1}{2}r^{[^3S_1]}(p^2+\gamma^2)+\frac{1}{4}s^{[^3S_1]}(p^4-\gamma^4)\\+\ldots-H_0(\eta_p)+H_0(i\gamma)\end{matrix}\right)|_{p=i\gamma}\right]^{-1}$$

(5)

این رابطه بستری برای مرتبط ساختن پارامترهای برد مؤثر با داده‌های تجربی فراهم می‌آورد و از این طریق شناخت عمیق‌تری از ویژگی‌های فیزیکی سامانه حاصل می‌شود. ضریب نرمال‌سازی مجانبی که با نماد $|C_b|$ نشان داده می‌شود، برای حالت مقید هسته ^{6}Li از طریق رابطه زیر به دست می‌آید:

$$|C_b|=\Gamma(1+\frac{\kappa}{\gamma})(|\frac{dD^{[^3S_1]}(p)}{dp^2}|_{p^2=-\gamma^2})^{-1/2} \qquad (6)$$

همان‌طور که در جدول ۱ نشان داده شده است، مقدار ANC استخراج‌شده در چارچوب نظریه میدان موثرخوشه‌ای با نتایج سایر محاسبات نظری سازگاری مطلوبی دارد. این چارچوب با در نظر گرفتن عمومی‌ترین دینامیک حاکم برسیستم در انرژی‌های پایین و رعایت تقارن‌های اساسی نظریه، بدون نیاز به دانستن جزئیات دقیق برهم‌کنش‌ها و از طریق یک رویه منظم و قابل‌کنترل، امکان محاسبه ANC را فراهم می‌کند.

جدول۱. مقایسه مقدار ANC حالت مقید حاصل از CEFT با سایر روش‌های نظری

روش محاسبه	$\lvert C_b\rvert\,(fm)^{-1/2}$	مرجع
پتانسیل وودز–ساکسون	۲.۳۹	[۵]
اختلاف فاز سه‌جسمی (با صرف نظر از برهم کنش کولنی)	۲.۳٤	[۱۳]
حل مسئله معکوس SIP (با صرف نظر از برهم کنش کولنی)	۲.۳۲	[۱۳]
حل مستقیم معادله فدیف(با صرف نظر از برهم کنش کولنی)	۲.۳۰	[۱۳]
روش SIP (با درنظر گرفتن برهم‌کنش کولنی)	۲.۹٦	[۱۳]
Ab Initio	۲.۹٤	[۱٤]
نظریه میدان موثر خوشه‌ای	۲.۸۹	

توافق نتایج حاصل با مقادیر به‌دست‌آمده از روش‌های دیگر، از جمله مدل‌های وابسته به پتانسیل نظیر پتانسیل وودز–ساکسون، نشان‌دهنده اعتبار و کارایی رویکرد CEFT در توصیف سامانه مورد مطالعه است.

محاسبه نرخ واکنش گیراندازی تابش گاما $d(\alpha,\gamma)^6$Li

در یک واکنش دوجسمی، نرخ واکنش متوسط‌گیری‌شده بر روی توزیع ماکسول-بولتزمن سرعت‌های نسبی ذرات، که با نماد $N_A\langle\sigma\upsilon\rangle$ نمایش داده می‌شود، از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$N_A\langle\sigma\upsilon\rangle=N_A\frac{(8/\pi)^{1/2}}{\mu^{1/2}(\kappa_BT)^{3/2}}\int_0^\infty dEE\sigma(p)\exp(-E/\kappa_BT)$$
$$=N_A\frac{(8/\pi)^{1/2}(11.605)^{3/2}}{\mu^{1/2}(T_9)^{3/2}}\int_0^\infty dEE\sigma(p)\exp(-11.605E/T_9)$$

(7)

در این رابطه، κ_B بیانگر ثابت بولتزمن، T دما و $N_A=6.0221\times10^{23}mol^{-1}$ عدد آووگادرو است. با معرفی پارامتر دمایی بی‌بعد T_9، که به صورت $T_9=T/10^9K$ تعریف شده است و در بازه ۰.۰۰۱ تا ۱۰ تغییر می‌کند. رابطه $\kappa_BT=T_9/11.605$ امکان بیان انرژی گرمایی κ_BT را به‌صورت مناسبی بر حسب مگاالکترون‌ولت فراهم می‌کند.

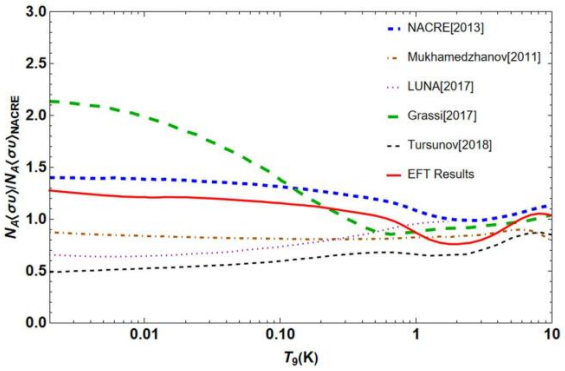
نتایج و جمع‌بندی

نرخ واکنش گیراندازی تابش گاما برای اندرکنش $d(\alpha,\gamma)^6Li$ در چارچوب نظریه CEFT و با استفاده از سطح مقطع کل گیراندازی محاسبه شده است. مقادیر به‌دست‌آمده برای بازه دمایی $0.001K \le T_9 \le 10K$ در جدول ۲ ارائه شده‌اند.

جدول۲ : مقادیر نرخ واکنش $d(\alpha,\gamma)^6Li$ برای محدوده دمایی $0.001K \le T_9 \le 10K$

$T_9(K)$	$N_A\langle\sigma\upsilon\rangle$ $(cm^3\,\mathrm{sec}^{-1}\,mol^{-1})$	$T_9(K)$	$N_A\langle\sigma\upsilon\rangle$ $(cm^3\,\mathrm{sec}^{-1}\,mol^{-1})$
0.001	8.704×10^{-30}	0.6	1.085×10^{-2}
0.003	3.407×10^{-20}	0.7	1.681×10^{-2}
0.005	7.892×10^{-17}	0.8	2.428×10^{-2}
0.007	6.450×10^{-15}	0.9	3.330×10^{-2}
0.009	1.256×10^{-13}	1	4.391×10^{-2}
0.01	4.045×10^{-12}	2	2.452×10^{-1}
0.02	3.321×10^{-10}	3	6.485×10^{-1}
0.03	8.447×10^{-9}	4	1.296
0.04	6.461×10^{-8}	5	2.183
0.05	2.738×10^{-7}	6	3.232
0.1	1.278×10^{-5}	7	4.341
0.2	2.701×10^{-4}	8	5.420
0.3	1.209×10^{-3}	9	6.409
0.4	3.160×10^{-3}	10	7.278

به‌منظور نمایش بهتر وابستگی نرخ واکنش به دما، در شکل ۲ نرخ واکنش بر حسب دما و در قالب پارامتر T_9 نمایش داده شده است. در این شکل، پیش‌بینی CEFT حاصل از پژوهش حاضر که با خط قرمز پیوسته نشان داده شده است، با نتایج مطالعات نظری پیشین [۳، ٤، ۸، ۱۵] و نیز داده‌های تجربی موجود [۱٦] که با خط آبی خط‌چین مشخص شده‌اند، مقایسه می‌شود. تمامی نرخ‌های واکنش نسبت به نرخ مرجع استاندارد گزارش‌شده در مرجع [۱٦] نرمال‌سازی شده‌اند. توافق بسیار خوب میان نتایج CEFT و معیارهای نظری و تجربی موجود، استحکام و قابلیت اعتماد چارچوب CEFT را در توصیف واکنش‌های هسته‌ای چندجسمی در انرژی‌های پایین نشان می‌دهد.



شکل۲ : مقایسه نرخ واکنش $d(\alpha,\gamma)^6Li$ به‌دست‌آمده در چارچوب CEFT (نمایش داده‌شده با خط قرمز پیوسته) با پیش‌بینی‌های نظری پیشین [۳،٤،۸،۱۵] و داده‌های تجربی [۱٦].

مرجع‌ها

[1] Spite, M., & Spite, F. "*Lithium abundance at the formation of the Galaxy*". Nature, (1982) 297(5866), 483-485.
[2] Serpico, P. D., Esposito "*Nuclear reaction network for primordial nucleosynthesis: a detailed analysis of rates, uncertainties and light nuclei yields*". Journal of Cosmology and Astroparticle Physics, .(2004).
[3] Trezzi, D., Anders, M., Aliotta, M. "*Big Bang ⁶Li nucleosynthesis studied deep underground (LUNA collaboration)*". Astroparticle Physics, (2017).
[4] Mukhamedzhanov, A. M., Blokhintsev, L. D., & Irgaziev, B. F. "*Reexamination of the astrophysical S factor for the d(α, γ)⁶Li reaction* ". Physical Review C,(2011).
[5] Mukhamedzhanov, A. M., Schmitt, R. P., Tribble, R. E., & Sattarov, A. "*Astrophysical factor for the radiative capture reaction d(α, γ)⁶Li*. " Physical Review C, (1995).
[6] Blokhintsev, L. D., Kukulin, V. I., Sakharuk, A. "*Determination of the ⁶Li → a+d vertex constant from the 4He+ d phase-shift analysis*". Physical Review C. .(1993)
[7] Hammache, F., Heil, M., Typel, S., Galaviz.. "*High-energy breakup of ⁶Li as a tool to study the Big Bang nucleosynthesis reaction H 2 (α, γ) ⁶Li*". Physical Review C, (2010).
[8] Tursunov, E. M., Turakulov, S. A., Kadyrov "*Theoretical study of the d(α, γ)⁶Li astrophysical capture process in a three-body model. II. Reaction rates and primordial abundance*". Physical Review C, (2018).
[9] Tursunov, E. M., Kadyrov, A. S., Turakulov, S. A., & Bray, I "*Theoretical study of the d(α, γ)⁶Li astrophysical capture process in a three-body model*". Physical Review C, . (2016).
[10] Kharbach, A., & Descouvemont, P. *"Microscopic study of the 2 H (α, γ) ⁶Li reaction in a multicluster model*". Physical Review C(1998).
[11] Nazari, F., Radin, M., & Arani, M. M. "*Low-energy deuteron–alpha elastic scattering in cluster effective field theory*". The European Physical Journal A, (2023).
[12] Nazari, F., Radin, M., & Arani, M. M. "*The d (α, γ) 6Li Radiative Capture Reaction in Cluster Effective Field Theory*". Progress of Theoretical and Experimental Physics, (2025).
[13] Blokhintsev, L. D., Kukulin, V. I., Sakharuk, A. A "*Determination of the ⁶Li → α + d vertex constant (asymptotic coefficient) from the 4He + d phaseshift analysis*". Physical Review C(1993).
[14] Navrátil, P., & Quaglioni, S. "*Ab initio many-body calculations of deuteron-He 4 scattering and ⁶Li states*". Physical Review C, (2011).
[15] Grassi, A., Mangano, G., Marcucci, L. E., & Pisanti, O.. "*α+ d→ ⁶Li + γ astrophysical S-factor and its implications for Big Bang nucleosynthesis*." Physical Review, (2017).
[16] Xu, Y. A., Takahashi, K., Goriely, S., Arnould, M., Ohta, M., & Utsunomiya, H. "*NACREII: an update of the NACRE compilation of charged-particle-induced thermonuclear reaction rates for nuclei with mass number A< 16*". Nuclear Physics A, (2013).

فعالیت‌ها و دستاوردهای تحقیق و توسعه شتاب دهنده خطی رادیو فرکانسی الکترون

زارعی، سارا[۱]؛ قاسمی، فرشاد [۱]؛ صنایع حجری، شاهین[۱]؛ آقایان، سید عبدالمهدی[۱]؛ لامعی رشتی، محمد[۱]؛ عباسی دوانی، فریدون[۲]

[۱] گروه شتابگرهای ذرات، پژوهشکده فیزیک و شتابگرها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی ایران، خیابان کارگر شمالی، تهران

[۲] گروه کاربرد پرتوها، دانشکده مهندسی هسته‌ای، دانشگاه شهید بهشتی، ولنجک، تهران

چکیده

شتابدهنده‌های خطی رادیوفرکانسی الکترون، پرکاربردترین شتابدهنده‌ها در دنیا هستند. از مهم‌ترین ویژگی‌های آن‌ها توسعه‌پذیری ساده‌تر نسبت به سایر شتابدهنده‌هاست. در جریان زیاد، پدیده‌های بار فضایی و برهم کنش متقابل باریکه و کاواک‌های رادیو فرکانسی شدت یافته و طراحی این شتاب دهنده را پیچیده می‌کند در حالی که در دستیابی به انرژی زیاد، بجای دانش و فنآوری، مهمترین چالش، هزینه است. بجز در کاربردهای رایج مانند رادیوتراپی و تصویربرداری اجسام، در سایر کاربردها مانند پرتودهی صنعتی، تولید رادیوایزوتوپ و کاربردهای تحقیقاتی، معمولاً به انرژی ۱۰ مگا الکترون ولت و بالاتر و نیز به جریان‌های زیاد نیاز است. باوجود برخورداری ایران در حدود ۱۴۰ عدد شتابدهنده خطی رادیوفرکانسی الکترون، به چندین برابر این تعداد بر اساس استاندارد کشورهای توسعه‌یافته نیاز است. فعالیت‌ها و دستاوردهای اخیر حاصل از تحقیق و توسعه مراکز مختلف، زمینه برای طراحی و ساخت شتابدهنده‌های با انرژی بیش‌تر را فراهم کرده است. این مقاله به تشریح اهمیت شتابدهنده‌های خطی الکترون، دستاوردهای حاصل و گزارش شده در ایران و پیشنهاد قدم بعدی در تحقیق و توسعه این شتابدهنده پرداخته است.

واژه‌های کلیدی: *شتابدهنده خطی رادیوفرکانسی الکترون، توان باریکه، گسیلندگی*

Research and Development Activities and Achievements in Electron Radio-Frequency Linear Accelerators

Zarei, Sara[1] ; Ghasemi, Farshad[1] : Sanaye-Hajari, Shahin[1] ; Aghasan, Seyed AbdolMahdi[1], Lamehi-Rashti, Mohammad[1], Abbasi-Davani, Fereydoun[2]

1 Physics and Particle accelerators Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran

2 Radiation Application Department, Nuclear Engineering Faculty, Shahid Beheshti University, Tehran

Abstract

RF e-Linacs are among the most widely used accelerators worldwide. One of their key advantages is their relatively straightforward scalability compared to other types of accelerators. At high beam currents, space-charge effects and beam–RF cavity interactions become significant, making accelerator design more complex. In contrast, for achieving high energies, cost rather than technology is often the main challenge. Beyond common applications such as radiotherapy and cargo scan, many other uses—including industrial irradiation, radioisotope production, and research applications—typically require electron energies of 10 MeV or higher, as well as high beam currents. Although Iran has 140 electron RF linacs, this number is still several times lower than the level required according to standards in developed countries. Recent research and development activities in various centers have paved the way for the design and construction of higher-energy accelerators. This paper briefly discusses the importance of electron linear accelerators, summarizes reported achievements in Iran, and proposes the next steps in the research and development of these accelerators.

***Keywords**: Electron radio-frequency linear accelerator (RF e-Linac), Beam power, Beam emittance*

PACS No. *40*

مقدمه

بر اساس مسیر حرکت می‌توان شتابدهنده‌ها را به شتابدهنده‌های دایروی و خطی تقسیم‌بندی کرد. گرادیان میدان در شتابدهنده‌های خطی فرکانس رادیویی، ذرات را به انرژی‌های بالا می‌رساند. آن‌ها تنها یکبار هر کاواک شتابدهی را در مسیر خود طی می‌کنند [۱]. از مهم‌ترین ویژگی‌های شتابدهنده خطی توسعه‌پذیری آن است. در انرژی‌های نسبیتی با تکرار ساختارهای شتابدهی می‌توان به انرژی‌های بالاتر رسید. شتابدهنده‌های خطی بر اساس نوع ذره

شتابدهی به شتابدهنده‌های خطی الکترون و شتابدهنده‌های خطی پروتون/ یون تقسیم‌بندی می‌شوند. از آنجا که الکترون‌ها در انرژی بسیار پایین‌تر نسبیتی می‌شوند، ساختار شتابدهنده‌های خطی الکترون با ساختار شتابدهنده‌های خطی پروتون/ یون در انرژی‌های معمول، متفاوت است. شتابدهنده‌های خطی رادیوفرکانسی الکترون، پر تعدادترین و پرکاربردترین شتابدهنده‌ها در دنیا هستند. مشخصه‌های اصلی شتابدهنده‌های خطی؛ جریان، انرژی خروجی و گسیلندگی باریکه‌ی آن است. به‌لحاظ کاربردی، جریان از مهم‌ترین پارامترهای باریکه است. جریان زیاد باریکه، در یک برخورددهنده‌ی ذرات، لازمه‌ی دستیابی به لومیناسیتی مورد نظر است و در یک چشمه نور منجر به افزایش شدت نور تابشی خواهد شد. در کاربردهای پرتودهی، جریان بالا با افزایش آهنگ‌دز، مدت زمان فرایند پرتودهی را کاهش خواهد داد. در نهایت، در تولید نوترون و رادیوایزوتوپ‌ها، تولید متناسب با جریان باریکه الکترونی خواهد بود. به‌علاوه جریان از پارامترهای تعیین‌کننده در طراحی شتابدهنده می‌باشد. با افزایش جریان پدیده‌هایی نظیر بارفضایی و نیز برهمکنش متقابل باریکه و کاواک‌های رادیو فرکانسی شدت یافته و طراحی شتابدهنده را پیچیده‌تر می‌کند. در شتابدهنده‌های خطی الکترون پس از انرژی حدود ۱۰ مگاالکترون ولت ، به‌دلیل نسبیتی شدن الکترون، سرعت آن‌ها ثابت می‌ماند وبجز انرژی، پارامترهای باریکه عملاً ثابت و یا کند تغییر خواهند بود. در بالاتر از این انرژی، برای شتابدهی باریکه می‌توان از ساختارهای تکراری استفاده نمود. به‌طور کلی در شتابدهنده‌های خطی الکترون (بر خلاف تصور معمول) افزایش انرژی بیشتر چالش تأمین هزینه دارد تا دانش و فنآوری [۲].

با افزایش جریان باریکه پدیده‌هایی نقش آفرینی می‌کنند که عدم شناخت صحیح و کنترل آن‌ها عملکرد شتابدهنده را تا مرز نابودی باریکه تحت‌تأثیر قرار خواهد داد. این پدیده‌ها عبارتند از اثر بار فضایی و برهمکنش‌های متقابل باریکه و کاواک. نکته مهم دیگر آن است که اجزاء همه شتابدهنده‌ها در همه کاربردهای اشاره شده یکسان است و تفاوت در فناوری دستیابی به زیرسیستم‌ها در توان‌ها (حاصلضرب انرژی و جریان) و دقت‌های (متناسب با گسیلندگی) متفاوت است. با توجه به دستاوردهای ملی در حوزه ساخت شتابدهنده‌های خطی الکترون در انرژی‌ها و جریان‌های کم، این مقاله پس از تشریح اهمیت شتابدهنده خطی الکترون، فعالیت‌های انجام و گزارش شده در ایران در زمینه طراحی و ساخت شتابدهنده خطی الکترون را تبیین می‌کند. در انتها نیز لزوم اقدام مدون و هدفمند در دستیابی به توانمندی تولید این نوع از شتابدهنده در جریان‌ها و انرژی‌های بیشتر را مطرح می‌نماید.

اهمیت و کاربرد شتابدهنده خطی الکترون

شتابدهنده خطی الکترون رادیوفرکانسی به‌صورت تجاری و انبوه تولید می‌شود و تنها درصدی بعنوان شتابدهنده‌های بزرگ و تحقیقاتی و غیر تجاری ساخته می‌شوند. تعداد شتابدهنده‌های خطی برای تحقیقات علمی بسیار کمتر از تعداد شتابدهنده‌های تجاری هستند که برای بهبود و کیفیت زندگی به کار برده می‌شوند. به نحوی که بیشتر از ۷۰ درصد این نوع از شتابدهنده‌ها در کاربردهای تجاری استفاده می‌شوند [۱]. شتابدهنده‌های خطی رادیوفرکانسی الکترون تجاری با دو کاربرد صنعتی و پزشکی قابل تقسیم بندی هستند. شتابدهنده‌های پزشکی برای رادیوتراپی مورد استفاده قرار می‌گیرند و حدود ۳۰ ٪ شتابدهنده‌های موجود در این حوزه گزارش شده است. شتابدهنده‌های خطی الکترون صنعتی، بیشتر برای پرتودهی مواد و قطعات بکار می‌روند. در جدول ۱، کاربردهای شتابدهنده‌های خطی الکترون در بازه انرژی‌های مختلف ارائه شده است. در هر بازه انرژی، طراحی و مشخصات شتابدهنده در هر یک از ردیف‌ها، با یکدیگر اندکی تفاوت دارد.

انرژی، جریان و گسیلندگی (امیتنس) باریکه، مهمترین کمیت‌های باریکه خروجی هر شتابدهنده خطی الکترون هستند که در هر کاربرد، به مقادیر مشخصی از این کمیت‌ها نیاز است. برای مثال در کاربرد پرتودهی صنعتی، به جریان زیاد برای افزایش آهنگ‌دز و کاهش مدت زمان فرایند پرتودهی نیاز است. در این کاربرد، بواسطه محدودیت جلوگیری از تولید نوترون و اکتیو شدن قطعات، بر اساس استانداردهای بین المللی، انرژی باریکه به ۱۰ مگا الکترون ولت محدود می‌شود. از طرفی برای پرتودهی، اساساً باریکه بسیار متمرکز و گسیلندگی کم باریکه مطلوب نیست. از طرف دیگر، در کاربرد شتابدهنده خطی الکترون به عنوان تزریقگر شتابگرهای بزرگ سینکروترونی، به باریکه‌ای با انرژی زیاد و

امیتنس کم نیاز است. در این کاربرد جریان زیاد، نیاز نیست. در جدول ۲ انرژی، جریان و گسیلندگی در کاربردهای مختلف آمده است. در این جدول، انرژی باریکه الکترون در گستره تا ۱۰ مگا الکترون ولت انرژی کم، بین ۱۰ تا ۵۰ مگا الکترون ولت، انرژی متوسط و بالای ۵۰ مگا الکترون ولت، انرژی زیاد در نظر گرفته شده است. همچنین جریان میانگین باریکه زیر ۱ میلی آمپر، جریان پایین و بالای آن، جریان زیاد درنظر گرفته شده است.

برای کمیت گسیلندگی نیز مقدار زیر ۱ میلی‌متر–میلی‌رادیان، مقدار کم و بالای این مقدار زیاد فرض شده است. حاصلضرب انرژی و جریان، توان باریکه است. تعیین مقدار هر یک از سه کمیت مهم اشاره‌شده، در پیچیدگی طراحی و ساخت شتابدهنده خطی الکترون اثر مستقیم دارد. برای مثال در کاربردی که به جریان بالا نیاز است (مانند پرتودهی صنعتی)، از تفنگ الکترونی استفاده می‌شود که طراحی و فناوری ساخت آن با تفنگ الکترونی که برای کاربرد جریان و گسیلندگی پایین (مانند تولید لیزر الکترون آزاد) مورد نیاز است، تفاوت بسیار دارد. در اولی از تفنگ‌های ترمویونی با چگالی بالا و در دومی معمولاً از تفنگ‌های فوتوکاتدی استفاده می‌شود.

جدول ۱: کاربرد شتابدهنده‌های خطی الکترون در بازه‌های انرژی مختلف

ردیف	انرژی (eV)	کاربرد	توان باریکه (وات)
۱	تا ۶ مگا	میکروسکوپ الکترونی	چند ده
۲		رادیوتراپی سطحی با الکترون	چند کیلو
۳		رادیوگرافی صنعتی	چند کیلو
۴		رادیوتراپی با ایکس	چند کیلو
۵		تصویربرداری اجسام بزرگ	چند کیلو
۶	۷ تا ۱۰ مگا	تصویربرداری اجسام بزرگ	چند ده کیلو
۷		پرتودهی صنعتی مواد غذایی و پلیمرها	چند ده کیلو
۸		رادیوتراپی با ایکس	چند ده کیلو
۹	۱۰ تا ۲۰ مگا	تولید فوتون و نوترون برای تحقیقات	چند کیلو
۱۰		تصویربرداری قطعات بسیار بزرگ	چند کیلو
۱۱		مولد امواج تراهرتز	چند کیلو
۱۲		تولید رادیوایزوتوپ‌های پزشکی	چند ده کیلو
۱۳	۲۰ تا ۵۰ مگا	تولید فوتون و نوترون برای تحقیقات	چند ده کیلو
۱۴		تزریقگر شتابگرهای بزرگ سینکروترونی	چند کیلو
۱۵		مولد لیزر الکترون آزاد مادون قرمز	چند ده کیلو
۱۶		تولید فوتون و نوترون برای تحقیقات	چند ده کیلو
۱۷	بالای ۵۰ مگا	تزریقگر شتابگرهای بزرگ سینکروترونی	چند ده کیلو
۱۸		لیزر الکترون آزاد ایکس نرم و سخت	چند صد کیلو
۱۹		تحقیقات فیزیک ذرات بنیادی	چند صد کیلو

دستاوردهای تحقیق و توسعه

حدود ۱۴۰ شتابدهنده خطی الکترون رادیوفرکانسی تاکنون در کشور نصب و در کاربردهای رادیوتراپی و تصویربرداری محموله‌ها درگمرک مورد استفاده قرار گرفته است. اغلب این شتابدهنده‌ها خرید از شرکت‌های خارجی بوده است. از طرفی فعالیت‌های مختلفی در دو دهه اخیر بر روی طراحی و ساخت شتابدهنده خطی الکترون رادیوفرکانسی در ایران انجام شده است.

پروژه‌ی شتابدهنده خطی پژوهشگاه دانش‌های بنیادی (IPM) از جمله فعالیت‌های انجام شده در این زمینه است که با هدف تحقیق و توسعه در زمینه‌ی شتابدهنده‌های خطی به طراحی و ساخت اولین شتابدهنده از این نوع پرداخته‌است. این ماشین برای تولید باریکه الکترونی با انرژی ۸ مگاالکترون‌ولت و جریان اوج ۱۰ میلی‌آمپر طراحی شد. برای این شتابدهنده سه فاز راه‌اندازی با استفاده از لامپ کلایسترون تولیدی در ایران، پیش‌بینی شد که در هر فاز با افزایش تعداد تیوب موج‌رونده انرژی باریکه افزایش می‌یابد. تاکنون فاز دوم راه‌اندازی به پایان رسیده و باریکه‌ی الکترونی با انرژی ۴ مگاالکترون‌ولت آشکارسازی و اندازه‌گیری شده‌است. با انجام این پروژه به سؤال در مورد امکان‌سنجی ساخت شتابدهنده‌های خطی در ایران پاسخ عملی داده‌شد. شکل ۱ شتابدهنده خطی پژوهشگاه دانش‌های بنیادی را نشان می‌دهد [۳].

جدول ۲: گستره انرژی، جریان و گسیلندگی در کاربردهای مختلف

کاربرد	انرژی	جریان	گسیلندگی
میکروسکوپ الکترونی	کم	کم	کم
رادیوگرافی اجسام	کم	کم	زیاد
رادیوتراپی با فوتون	کم	کم	زیاد
پرتودهی صنعتی مواد و قطعات	کم	زیاد	زیاد
تصویربرداری اجسام بسیار بزرگ	متوسط	کم	زیاد
مولد امواج تراهرتز	متوسط	کم	کم
تولید رادیوایزوتوپ	متوسط	زیاد	زیاد
تولید فوتون و نوترون تحقیقاتی	متوسط– زیاد	زیاد	زیاد
مولد لیزر الکترون	زیاد	کم	کم
تزریقگر شتابگرها	زیاد	کم	کم
تحقیقات فیزیک	زیاد	زیاد	کم




شکل ۱: شتابدهنده خطی پژوهشگاه دانش‌های بنیادی

شرکت بهیار صنعت سپاهان و زیرمجموعه‌های آن، تلاش مدون و پایدار توسط بخش خصوص در ساخت شتابدهنده‌های خطی الکترون را به ثمر رسانده‌اند. این شرکت با عرضه شتابدهنده در کاربردهای پزشکی و تصویربرداری گمرکی، گام مهمی در تحقیق و توسعه در این حوزه انجام داده است. شکل ۲، محصولات این شرکت با بیشینه انرژی ۶ مگاالکترون‌ولت را نشان می‌دهد[۴].

پژوهشکده فیزیک و شتابگرها پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای (NSTRI)، نسبت به طراحی و ساخت شتابدهنده با هدف‌گذاری راندمان زیاد، اقدام کرده است [۵]. شکل ۳ تفنگ و تیوب شتابدهی این پژوهشکده را که با همکاری صنعت لامپ‌های مایکروویو شیراز ساخته شده است، نشان می‌دهد. در جدول ۳ مقایسه‌ای بین پارامترهای خروجی شتابدهنده پژوهشگاه دانش‌های بنیادی و پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای نشان داده شده است.

نتیجه گیری و پیشنهاد

خوشبختانه در سال‌های اخیر، با فعالیت‌های تحقیق و توسعه در مراکز مختلف ایران، دانش، زیرساخت و محصولات ارزشمندی در حوزه طراحی و ساخت شتابدهنده خطی الکترون رادیوفرکانسی بدست آمده است. با ارتقاء کیفی و کمی زیرسیستم‌های مولد توان رادیوفرکانسی و تیوب‌های شتابدهی انرژی زیاد، می‌توان جهت دستیابی به شتابدهنده بومی برای پاسخ به انبوه کاربردهای ردیف‌های ۶ به بعد در جدول ۱ اقدام کرد. پیشنهاد این مقاله، هدف‌گذاری شتابدهنده الکترون در باند S با انرژی ۱۰ مگاالکترون‌ولت و توان ۱۰ کیلووات، برای قدم بعدی است.




شکل ۲: محصولات شرکت بهیار صنعت سپاهان



شکل ۳: تفنگ و تیوب شتابدهی پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای

جدول ۳: مقایسه شتابدهنده پژوهشگاه IPM و پژوهشگاه NSTRI

کاربرد	NSTRI	IPM
فرکانس (مگاهرتز)	۲۹۹۸.۵	۲۹۹۹
انرژی خروجی (مگاالکترون ولت)	۶	۸
جریان باریکه (میلی‌آمپر)	۱۲۰	۱۰
ضریب کیفیت	~۱۶۰۰۰	~۱۰۰۰۰
توان ورودی (مگاوات)	۲٫۶	۲

قدردانی

نویسندگان قدردانی خود را از سهم مؤثر دکتر فریدون عباسی دوانی در توسعه شتابگرهای ذرات در کشور ابراز می‌دارند. این مقاله با احترام به یاد و خاطره ایشان تقدیم می‌شود.

مراجع

[۱] محمد لامعی رشتی و همکاران؛ "بررسی اهمیت و کاربرد شتابدهنده‌ها در دنیای امروز"؛ مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران؛ جلد۱۵؛ شمارهٔ ۲؛ ۱۳۹۴

[۲] رضا کاووسی امید و همکاران؛ "بررسی اثرات بارگذاری باریکه در تیوب شتابدهی موج روند"؛ مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران؛ جلد۲۳؛ شمارهٔ۴؛ ۱۴۰۲

[۳] محمد لامعی رشتی و همکاران؛ " طراحی و ساخت شتابگر خطی موج روندهٔ الکترون در پژوهشگاه دانشهای بنیادی"؛ مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران؛ جلد۲۱؛ شمارهٔ۴؛ ۱۴۰۰

[4] https://behyaar.com/

[5] S. Zarei et al, “Construction and measurement of the prototype side-coupled standing-wave tube for electron Linac”, Journal of Instrumentation, 2023, JINST 18, T10006

اثر اتساع جرم بر مهار کوانتومی ناپایداری ریلی–تیلور در همجوشی لختی (ICF)

مرادی، زیبا؛ قاسمی‌زاد، عباس[۱]؛ مهرانگیز، مهسا

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه گیلان، رشت

چکیده

ناپایداری ریلی–تیلور (RT) همواره به عنوان یکی از موانع بنیادین در دستیابی به افروزش پایدار در فرآیند همجوشی محصورشدگی لختی (ICF) مطرح بوده است. مدل‌های هیدرودینامیک کلاسیک به دلیل نادیده گرفتن ماهیت موجی ذرات و اثرات کوانتومی در چگالی‌های فوق‌بالا، قادر به توصیف دقیق دینامیک مرز کندگی در لحظات بحرانی افروزش نیستند. در این مقاله، پایداری مرز کندگی با عبور از تقریب تراکم‌ناپذیری، در چارچوب مدل هیدرودینامیک کوانتومی تراکم‌پذیر (CQHD) و سپس در محدوده کوانتوم‌نسبیتی (RCQHD) بررسی شده است. تحلیل طیفی نشان می‌دهد که در رژیم تراکم‌پذیر کوانتومی، جفت‌شدگی فشار تبهگنی فرمی و پتانسیل غیرموضعی بوهم به عنوان یک مکانیسم پایدارکننده، منجر به سرکوب سراسری قله ناپایداری در تمامی طول موج‌ها می‌گردد. با این وجود، نوآوری فیزیکی این پژوهش در گذار به محدوده نسبیتی تجلی می‌یابد؛ جایی که اثر اتساع جرم مؤثر الکترون ($m_{eff} = \gamma_R m_e$) مستقیماً در عملگر بوهم اعمال شده است. یافته‌های تحلیلی اثبات می‌کند که در رژیم نسبیتی، افزایش جرم مؤثر باعث کاهش طول موج دوبروی شده و با تضعیف سپر محافظ کوانتومی، منجر به خیزش مجدد ناپایداری‌های مخرب کوتاه‌موج می‌گردد. نتایج نشان می‌دهد که نادیده گرفتن اصلاحات نسبیتی به بیش‌برآورد پایداری کپسول سوخت در نقطه افروزش خواهد انجامید.

واژه های کلیدی: *همجوشی محصورشدگی لختی (ICF)، ناپایداری ریلی–تیلور، هیدرودینامیک کوانتومی تراکم‌پذیر (CQHD)، اتساع جرم نسبیتی، پتانسیل بوهم.*

Effect of Mass Dilation on Quantum Suppression of Rayleigh-Taylor Instability in Inertial Confinement Fusion (ICF)

Moradi, Ziba; Ghasemizad, Abbas; Mehrangiz, Mahsa

Department of Physics, Faculty of Science, University of Guilan, Rasht

Abstract

Rayleigh-Taylor (RT) instability has always been considered one of the fundamental obstacles in achieving stable ignition in Inertial Confinement Fusion (ICF). Classical hydrodynamic models, by neglecting the wave nature of particles and quantum effects at ultra-high densities, fail to accurately describe the ablation front dynamics at critical ignition moments. In this paper, the stability of the ablation front is investigated by going beyond the incompressibility approximation, first within the framework of the Compressible Quantum Hydrodynamic (CQHD) model and subsequently in the relativistic quantum regime (RCQHD). Spectral analysis demonstrates that in the compressible quantum regime, the coupling of Fermi degeneracy pressure and the non-local Bohm potential acts as a stabilizing mechanism, leading to a global suppression of the instability peak across all wavelengths. However, the physical novelty of this research manifests in the transition to the relativistic regime, where the effective electron mass dilation effect ($m_{eff} = \gamma_R m_e$) is directly incorporated into the Bohm operator. The analytical findings prove that in the relativistic regime, the increase in effective mass reduces the de Broglie wavelength and, by weakening the quantum protective shield, leads to the resurgence of destructive short-wavelength instabilities. The results indicate that ignoring relativistic corrections will result in an overestimation of the fuel capsule's stability at the ignition point.

***Keywords**: Inertial Confinement Fusion (ICF), Rayleigh-Taylor Instability, Compressible Quantum Hydrodynamics (CQHD), Relativistic Mass Dilation, Bohm Potential.*

PACS No. 52.57.-z, 52.35.Py, 52.27.Gr

[۱] ایمیل نویسنده مسئول: *ghasemi@guilan.ac.ir*

مقدمه

تحقق همجوشی هسته‌ای کنترل‌شده به روش محصورشدگی لختی (ICF)، بر راهبرد ایجاد چگالی‌های فوق‌العاده بالا در بازه‌های زمانی بسیار کوتاه فشرده‌سازی استوار است. در این فرآیند، تابش شدید باریکه‌های لیزر به سطح بیرونی کپسول سوخت (لایه کندگی) منجر به تبخیر این لایه و ایجاد فشار موشکی عظیم رو به داخل می‌گردد. از مهم‌ترین چالش‌های هیدرودینامیکی در این مسیر، حفظ تقارن کروی کپسول در حین فشرده‌سازی است؛ چرا که هرگونه ناهمواری کوچک در سطح تماس لایه‌ها، تحت تأثیر شتاب‌های شدید و گرادیان‌های فشار بزرگ، بستر را برای رشد ناپایداری‌های ماکروسکوپیک فراهم می‌سازد. ناپایداری ریلی–تیلور (RT) بحرانی‌ترین ناپایداری هیدرودینامیکی در فیزیک همجوشی لختی است که در دو فاز شتاب‌گیری (در مرز سطح کندگی) و کندشوندگی (در مرز داخلی لکه داغ و پوسته یخی) رخ می‌دهد [۱]. فاز رکود یا ایستایی، نقطه اوج این فرآیند است؛ لحظه‌ای که انرژی جنبشی پوسته ورودی به دلیل مقاومت گاز مرکزی متوقف شده و لکه داغ مرکزی را شکل می‌دهد. در این فاز، پلاسمای سبک و داغ مرکز در حال متوقف کردن پوسته چگال و سنگین است که شرایط ایده‌آل را برای رشد ناپایداری ریلی–تیلور فراهم می‌آورد. رشد این ناپایداری منجر به ورود مواد سرد پوسته به مرکز لکه داغ، افزایش شدید تابش ترمزی و ورود این مواد با عدد اتمی بالا، منجر به افزایش شدید تابش ترمزی و افت ناگهانی دمای لکه داغ (خاموش شدن کپسول) پیش از تحقق افروزش می‌گردد. کنترل یا کاهش آهنگ رشد این ناپایداری‌ها یکی از چالش‌های اصلی طراحی کپسول‌های ICF است [۲]. در چارچوب هیدرودینامیک کلاسیک، پیش‌بینی می‌شود که این اختلاط لایه‌ها به صورت واگرا و با تابعیت رادیکالی از عدد موج اختلال ($\sqrt{k}$) رخ دهد که رفتاری غیرفیزیکی و ناشی از فقدان مکانیسم‌های اتلافی میکروسکوپیک است. با این حال، در چگالی‌های بالای فاز رکود، پلاسما از رژیم گاز ایده‌آل خارج شده و به یک گاز فرمی تبهگن تبدیل می‌شود. در این محدوده فوق‌چگال، اثرات مکانیک کوانتومی نظیر فشار تبهگنی فرمی (ناشی از اصل طرد پائولی) و پتانسیل غیرموضعی بوهم (ناشی از ماهیت موجی ذرات) ظاهر می‌گردند. فشار تبهگنی در برابر فشردگی موضعی مقاومت کرده و پتانسیل بوهم با اعمال یک کشش سطحی کوانتومی، مدهای کوتاه‌موج مخرب را مهار می‌کند؛ سازوکاری که در مدل هیدرودینامیک کوانتومی تراکم‌پذیر (CQHD) تبیین می‌شود [۳].

با این وجود، در آستانه افروزش و با افزایش بیشتر چگالی، تکانه الکترون‌های تبهگن در سطح فرمی به قدری بزرگ می‌شود که با تکانه نسبیتی قابل قیاس بوده و فرض ثابت بودن جرم الکترون دچار فروپاشی می‌گردد. در مدلسازی‌های پیشین پلاسمای کوانتومی، پژوهشگران عملگر بوهم را به اشتباه وابسته به جرم سکون الکترون (m_e) نگه داشته بودند [٤]. در حالی که مراجع [۳] و [۵] اثرات کوانتومی را صرفاً با فرض ثابت بودن جرم الکترون فرمول‌بندی کرده‌اند، نوآوری کلیدی این مقاله در گذار به رژیم نسبیتی است؛ جایی که جرم مؤثر نسبیتی $m_{eff}=\gamma_R m_e$ مستقیماً درون تانسور فشار کوانتومی جایگذاری شده و معادلات پاشندگی جدیدی استخراج شده است. از آنجا که پتانسیل بوهم مستقیماً با معکوس مربع جرم درگیر است، در این پژوهش با توسعه مدل هیدرودینامیک کوانتومی نسبیتی تراکم‌پذیر (RCQHD)، جرم مؤثر نسبیتی ($m_{eff}=\gamma_R m_e$) مستقیماً در تانسور فشار کوانتومی اعمال شده است. یافته‌های نظری این مدل یک رقابت دینامیکی جالب را اثبات می‌کند؛ در حالی که اثرات کوانتومی در رژیم غیرنسبیتی به عنوان سپر محافظ عمل می‌کنند، در رژیم نسبیتی لحظه افروزش، افزایش جرم مؤثر باعث کاهش طول موج دوبروی الکترون‌ها شده و با تضعیف سپر بوهم، منجر به خیزش مجدد و واگرای ناپایداری‌های مخرب کوتاه‌موج در مرز کندگی می‌گردد.

روش‌های محاسباتی و روابط حاکم

به منظور توصیف دینامیک پلاسما در مرز کندگی کپسول همجوشی لختی (ICF)، دستگاه معادلات هیدرودینامیک کوانتومی تراکم‌پذیر (CQHD) بر پایه بقای جرم و تکانه واحد حجم سیال اویلری به صورت روابط (۱) و (۲) تعریف می‌گردد [۵]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho v)=0, \qquad (۱)$$

$$\rho\left(\frac{\partial v}{\partial t}+v\cdot\nabla v\right)=-\nabla P+\rho g+F_Q, \qquad (۲)$$

که در آن ρ چگالی جرمی سیال، v سرعت ماکروسکوپیک، g شتاب مؤثر وارد بر لایه مرزی و F_Q نیروی کوانتومی است. فشار کل تحت سلطه فشار تبهگنی فرمی الکترون‌ها ($P \propto \rho^{5/3}$) قرار دارد. سنگ بنای این توصیف سیالی، تبدیل مادلونگ است که برحسب چگالی ذرات (n) و فاز تابع موج (S) به صورت $\psi(r,t)=\sqrt{n(r,t)}\exp(iS/\hbar)$ بیان می‌شود. با جایگذاری این رابطه در معادله شرودینگر و تفکیک بخش‌های حقیقی و موهومی، پتانسیل کوانتومی بوهم ($Q=-\left(\hbar^2\nabla^2\sqrt{n}\right)/2m\sqrt{n}$) ظاهر می‌گردد که ریشه در انحنای دامنه تابع موج دارد. چگالی نیروی کوانتومی از رابطه $F_Q=-n\nabla Q$ حاصل می‌شود. با توجه به رابطه چگالی جرمی و عددی ($\rho=mn$)، اعمال این تغییر متغیر در چگالی نیرو، وابستگی مربعی معکوس به جرم سیال مؤثر ($1/m^2$) را آشکار می‌سازد:

$$F_Q=\rho\frac{\hbar^2}{2m^2}\nabla\left(\frac{\nabla^2\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}\right). \qquad (3)$$

در آستانه افروزش اهداف ICF، به دلیل چگالی‌های بالای فاز ایستایی، تکانه الکترون‌ها در سطح فرمی با تکانه نسبیتی قابل قیاس شده و جرم الکترون دچار اتساع می‌گردد. با تعریف پارامتر بی‌بعد تکانه نسبیتی $\eta_0=p_F/m_ec$، جرم سکون الکترون (m_e) باید با جرم مؤثر نسبیتی ($m_{eff}=m_e\gamma_R=m_e\sqrt{1+\eta_0^2}$) جایگزین گردد. حال، با اعمال سیستماتیک این جرم مؤثر نسبیتی در مخرج کسر تانسور فشار کوانتومی، عملگر بوهم در رژیم نسبیتی به صورت رابطه زیر تعمیم می‌یابد که نشان‌دهنده تضعیف قدرت مهار کوانتومی با ضریب γ_R^2 است:

$$\nabla\cdot\Pi_Q=\rho\frac{\hbar^2}{2m_e^2(1+\eta_0^2)}\nabla\left(\frac{\nabla^2\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}\right). \qquad (4)$$

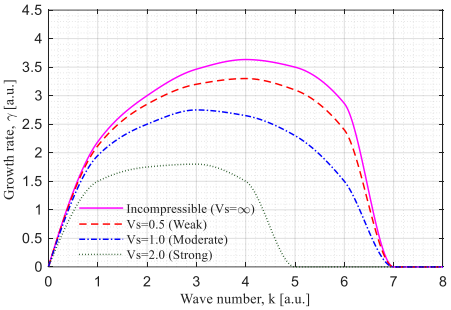
همچنین در این رژیم، سرعت صوت گاز تبهگن ($V_{s,rel}$) که نماینده ممانعت تراکمی سیستم است، به شکل $V_{s,rel}^2=c^2\eta_0^2/3\left(1+\eta_0^2\right)$ تصحیح می‌گردد. با اعمال آشفتگی‌های کوچک حول حالت تعادل مرز کندگی در صفحه $z=0$ به فرم مدهای نرمال $\exp[ikx+\gamma t]$ و تشکیل ماتریس ضرایب برای شرایط مرزی سینماتیکی و دینامیکی پیوستگی فشار، دترمینان دستگاه معادلات خطی شده برای دستیابی به پاسخ غیربدیهی برابر با صفر قرار داده می‌شود. در نهایت، معادله پاشندگی جامع برای آهنگ رشد ناپایداری ریلی–تیلور (γ) در پلاسمای کوانتوم–نسبیتی تراکم‌پذیر برحسب عدد موج اختلال (k) به صورت رابطه (۵) استخراج می‌گردد:

$$\gamma^2(k)=A_{rel}g_{eff}\,k-\frac{\hbar^2k^4}{4m_e^2(1+\eta_0^2)(\rho_1+\rho_2)}\left(\frac{\rho_1\rho_2}{\rho_1+\rho_2}\right), \qquad (5)$$

که در آن A_{rel} عدد آتوود مؤثر نسبیتی و g_{eff} دامنه شتاب مؤثر نرمال‌شده است.

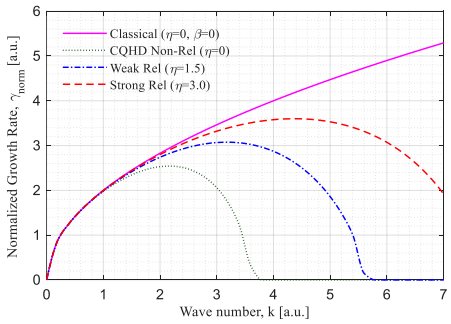
نتایج عددی و بحث

به منظور ارزیابی شهودی و تحلیل فیزیکی روابط پاشندگی استخراج‌شده، حل عددی عملگرهای دیفرانسیل در فضاهای فاز مشخصی کالیبره و ترسیم شده است. شکل (۱) رفتار طیفی آهنگ رشد ناپایداری ریلی–تیلور را در محدوده رژیم تراکم‌پذیر کوانتومی (CQHD) به ازای مقادیر مختلف سرعت صوت فرمی (V_s) نشان می‌دهد [۳و۴]. در این تحلیل، مقدار عدد آتوود استاندارد برابر با $A=0.5$ در نظر گرفته شده که نماینده شرایط واقعی فاز کندشوندگی در آزمایشگاه‌های همجوشی نظیر تاسیسات ملی افروزش (NIF) است. همان‌طور که در شکل (۱) پیداست، تمامی منحنی‌ها دارای یک ساختار شبه‌زنگوله‌ای نامتقارن هستند. در اعداد موج کوچک (طول‌موج‌های بلند ماکروسکوپیک)، آهنگ رشد به دلیل غلبه نیروی محرک شتاب روندی صعودی دارد، اما با نزدیک شدن به مقیاس‌های خرد (اعداد موج بزرگ)، اثرات کوانتومی غالب شده و منحنی را به سمت پایین می‌کشانند. در محدوده تراکم‌ناپذیر ($V_s\to\infty$)، تنها عامل مهارکننده پتانسیل بوهم است که بیشترین مقدار آهنگ رشد را ایجاد می‌کند. با لحاظ کردن سرعت صوت فرمی و ورود به رژیم تراکم‌پذیر، پلاسما قابلیت فشرده شدن پیدا کرده و بخشی از انرژی آزاد سیستم به جای تبدیل شدن به انرژی جنبشی گردابه‌ها، صرف کار تراکمی در گاز الکترونی تبهگن می‌شود. این مکانیزم اتلافی ذاتی باعث سرکوب سراسری آهنگ رشد در تمامی طول‌موج‌ها و انتقال نقطه قطع موج (k_c) به اعداد موج کوچک‌تر می‌گردد.



شکل ۱: تصویری از رفتار طیفی آهنگ رشد ناپایداری ریلی–تیلور (γ) بر حسب عدد موج اختلال (k) در محدوده‌های مختلف تراکم‌پذیری فرمی به ازای $A = ۰٫۵$ و $H = ۰٫۱$.

برای بررسی گام نهایی و اصلی رساله، یعنی اثر توأم مکانیک کوانتوم و نسبیت خاص بر دینامیک مرز کندگی و نقد مدل‌های سنتی که جرم را ثابت فرض می‌کردند [۵]، طیف پاشندگی آهنگ رشد نرمال‌شده در شکل (۲) به تصویر کشیده شده است.



شکل ۲: مقایسه دینامیک رشد ناپایداری مرز کندگی در رژیم‌های هیدرودینامیکی کلاسیک، کوانتومی غیرنسبیتی و کوانتوم‌نسبیتی (RCQHD).

طیف پاشندگی شکل (۲) پدیده رقابت میان مهار کوانتومی و اتساع جرم نسبیتی را آشکار می‌سازد. در مدل کلاسیک، آهنگ رشد به طور پیوسته و نامحدود افزایش می‌یابد. در محدوده کوانتومی غیرنسبیتی ($\eta = ۰$)، پتانسیل غیرموضعی بوهم به مثابه یک کشش سطحی ذاتی عمل کرده و اختلالات کوتاه‌موج را به شدت سرکوب می‌کند، به طوری که در عدد موج بحرانی $k_c \approx ۳٫۸$ آهنگ رشد کاملاً صفر می‌شود. با این حال، با افزایش فشرده‌سازی پلاسما و ورود الکترون‌ها به رژیم نسبیتی ($\eta = ۳٫۰$ و $\eta = ۱٫۵$)، پدیده اتساع جرم مؤثر رخ می‌دهد. از آنجا که نیروی مهارکننده بوهم با معکوس مربع جرم مؤثر ($۱/m_{eff}^{۲}$) تناسب دارد، افزایش جرم در رژیم نسبیتی باعث کاهش طول موج دوبروی الکترون‌ها شده و خصلت موجی آن‌ها را تقلیل می‌دهد. در نتیجه این پدیده، سپر محافظ کوانتومی به شدت تضعیف شده، نقطه قطع طیفی به تعویق می‌افتد و ناپایداری مخرب کوتاه‌موج در شرایط افروزش ICF مجدداً خیز برمی‌دارد. این یافته اثبات می‌کند که تقریب‌های رایج غیرنسبیتی، میزان پایداری مرز کندگی را در چگالی‌های افروزش به شدت بیش‌برآورد می‌کنند. باید توجه داشت که چارچوب تحلیلی ارائه‌شده بر پایه تقریب‌های ماکروسکوپیک هیدرودینامیکی استوار است. در فاز رکود واقعی، پدیده‌هایی نظیر اثرات جنبشی، ناهمسانگردی دمایی و تولید میدان‌های مغناطیسی موضعی می‌توانند دینامیک پلاسما را تحت تأثیر قرار دهند. بررسی دقیق این مکانیزم‌های میکروسکوپیک نیازمند استفاده از شبیه‌سازی‌های تمام‌جنبشی مانند کدهای ذرات در جعبه (PIC) است که بررسی آن‌ها به مطالعات آینده موکول می‌گردد.

نتیجه‌گیری

این پژوهش، ناپایداری ریلی–تیلور در مرز کندگی کپسول‌های ICF را فراتر از تقریب‌های کلاسیک بررسی می‌کند. نتایج نشان داد در رژیم کوانتومی تراکم‌پذیر (CQHD)، جفت‌شدگی فشار تبهگنی و پتانسیل بوهم با مهار مدهای کوتاه‌موج، قله ناپایداری را سرکوب می‌سازد. با این وجود، دستاورد کلیدی، کشف «تقابل اثرات کوانتومی و نسبیتی» (RCQHD) در آستانه افروزش است؛ اتساع جرم مؤثر الکترون‌ها با کاهش طول‌موج دوبروی، سپر کوانتومی را تضعیف کرده و منجر به خیزش مجدد ناپایداری‌های مخرب می‌شود. این پدیده نشان می‌دهد که فشردگی افراطی در فاز ایستایی لزوماً تضمین‌کننده پایداری مطلق نخواهد بود. بر این اساس، پیشنهاد می‌شود جهت جلوگیری از بیش‌برآورد پایداری کپسول‌ها، تصحیحات اتساع جرم نسبیتی به عنوان یک مؤلفه فیزیکی مهم در کدهای محاسباتی شبیه‌سازی ICF لحاظ گردد.

مرجع‌ها

[1] Emery, M. H., Gardner, J. H., & Boris, J. P.; "Rayleigh-Taylor and Kelvin-Helmholtz instabilities in targets accelerated by laser ablation"; Physical Review Letters, 48, No. 10 (1982) 677.
[2] Kilkenny, J. D., et al.; "A review of the ablative stabilization of the Rayleigh-Taylor instability in regimes relevant to inertial confinement fusion"; Physics of Plasmas, 1, No. 5 (1994) 1379-1389.
[3] Manfredi, G.; "How to model quantum plasmas"; Fields Institute Communications, 46 (2005) 263-287.
[4] Brodin, G., Marklund, M., & Manfredi, G.; "Quantum plasma effects in the classical regime"; Physical Review Letters, 100, No. 17 (2008) 175001.
[5] Haas, F.; Quantum Plasmas: A Hydrodynamic Approach; Vol. 65, Springer Science & Business Media (2011).

مطالعه فرایند واپاشی هسته ^{224}Th وابسته به انرژی برانگیختگی

امیدوار، زینب ؛ اسلامی‌زاده، هادی

گروه فیزیک، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر، خیابان خلیج فارس، بوشهر

چکیده

در این مقاله فرآیند شکافت هسته برانگیخته ^{224}Th که از واکنش همجوشی $^{16}O + ^{208}Pb$ تشکیل می‌شود، با هدف بررسی اثرات هم‌زمان انرژی‌برانگیختگی و تکانه زاویه‌ای در چارچوب مدل آماری اصلاح شده مورد مطالعه قرار گرفته. چگالی‌ترازهای این هسته برانگیخته با استفاده از مدل گازفرمی، و سدشکافت بر پایه مدل قطره‌مایع اصلاح شده محاسبه شده است. همچنین پهنای واپاشی کانال‌های مختلف شامل گسیل ذرات سبک (نوترون، پروتون، آلفا)، تابش گاما و شکافت محاسبه گردیده‌اند. نتایج بدست آمده نشان داد که در گستره انرژی مورد بررسی گسیل نوترون به‌دلیل عدم وجود مانع کولنی به فرآیند غالب تبدیل می‌شود. همچنین پهنای شکافت با افزایش انرژی برانگیختگی و کاهش ارتفاع سد ناشی از چرخش به‌طور چشمگیری بزرگ می‌شود و در ناحیه انرژی‌های بالا می‌تواند با پهنای گسیل نوترون رقابت کند. در مقابل، پهنای گسیل پروتون و آلفا به‌دلیل وجود سد کولنی، بسیار کوچک باقی می‌ماند .همچنین نشان داده شد که ارتفاع سد در مقابل شکافت با افزایش اسپین هسته کاهش و احتمال شکافت هسته افزایش می یابد. این نتایج که با داده‌های تجربی نیز اعتبارسنجی شده اهمیت بالایی در درک مکانیزم واپاشی هسته‌های سنگین داشته و ابزار محاسباتی معتبری را برای پیش‌بینی و شبیه‌سازی واکنش‌های همجوشی-شکافت ناشی از پرتابه های سنگین فراهم می‌کند.

واژه های کلیدی: *سدشکافت، مدل آماری اصلاح‌شده، پهنای واپاشی، شکافت هسته‌ای*

Study of the decay process of the ^{224}Th nucleus depending on excitation energy

Omidvar, Zeinab ; Eslamizadeh, Hadi

Department of Physics, Persian Gulf University, Bushehr, Persian Gulf Street, Bushehr

Abstract

In this article, the fission process of the excited nucleus ^{224}Th, formed through the fusion reaction $^{16}O + ^{208}Pb$, is investigated with the aim of studying the simultaneous effects of excitation energy and angular momentum within the framework of the modified statistical model. The level density of this excited nucleus is calculated using the Fermi-gas model, and the fission barrier is determined based on the modified liquid-drop model. The decay widths of different channels, including the emission of light particles (neutrons, protons, and alpha particles), gamma radiation, and fission, are also calculated. The obtained results show that within the investigated energy range, neutron emission becomes the dominant process due to the absence of a Coulomb barrier. Furthermore, the fission width increases significantly with increasing excitation energy and with the reduction of the barrier height caused by nuclear rotation, and at high energies it can compete with the neutron emission width. In contrast, the emission widths of protons and alpha particles remain very small because of the presence of the Coulomb barrier. It is also shown that the fission barrier height decreases with increasing nuclear spin, which leads to an increase in the probability of nuclear fission. These results, which have also been validated with experimental data, are highly important for understanding the decay mechanisms of heavy nuclei and provide a reliable computational tool for predicting and simulating fusion–fission reactions induced by heavy projectiles.

***Keywords**: Fission barrier, Modified statistical model, Decay width, Nuclear fission*

PACS No: 25.85.-w, 24.75. +i.

مقدمه

چرخه سوخت توریوم نوعی از چرخه سوخت هسته‌ای است که از ایزوتوپ‌های توریوم به عنوان ماده بارور در راکتورهای هسته‌ای استفاده می‌گردد. این چرخه نسبت به چرخه سوخت اورانیوم دارای مزایای فیزیکی و هسته‌ای بهتری است که از جمله آن‌ها می‌توان به تولید کمتر پلوتونیم و آکتینیدهای سنگین اشاره کرد. باتوجه به مفاهیم فوق‌الذکر بررسی دقیق عوامل مؤثر بر شکافت توریوم و ایزوتوپ‌های آن اهمیت بالایی دارد. در همین راستا، از مدل‌های‌آماری می‌توان جهت بررسی فرایند شکافت

هسته‌ها استفاده نمود (بطور نمونه از مدل‌های‌آماری ارائه شده در مراجع[۱,۲]. هدف اصلی این مقاله بررسی پدیده شکافت هسته ^{224}Th ناشی از همجوشی هسته‌های $^{16}O + ^{208}Pb$ است. هسته‌مرکب برانگیخته می‌تواند از طریق گسیل ذرات‌سبک، تابش‌گاما یا شکافت واپاشی کند و بررسی تغییرات پهنای این کانال‌ها با انرژی‌برانگیختگی در درک پایداری هسته‌های سنگین اهمیت دارد. برای تحلیل رفتار این هسته از مدل‌آماری اصلاح‌شده استفاده شده‌است، به‌طوری‌که سدشکافت با مدل قطره‌مایع اصلاح‌شده و چگالی ترازها با مدل گازفرمی محاسبه شده و رقابت میان کانال‌های واپاشی مورد بررسی قرارگرفته است.

مدل آماری اصلاح شده

در مدل قطره‌مایع اصلاح‌شده، سدشکافت هسته از مجموع انرژی‌های سطحی، کولنی و چرخشی به‌دست می‌آید[۳]. در این مدل برای هسته‌های با $A > 160$ انرژی‌پتانسیل به‌صورت تابعی از فاصله مراکز جرم پاره‌ها، عددجرمی، عددداتمی و اسپین محاسبه می‌شود و امکان تعیین انرژی حالت تعادلی و نقطه زینی را برای توصیف دقیق‌تر رفتار هسته در شرف شکافت را فراهم می‌کند. طبق مدل قطره‌مایع انرژی غیرحرارتی هسته را می‌توان به‌صورت زیر بر حسب پارامتر تغییر شکل α_i نوشت:

$$V(\alpha_i) = E_s(\alpha_i) + E_c(\alpha_i) + E_r(\alpha_i) \qquad (۱)$$

مایرز و سویاتکی[۴,۵] با استفاده از تصحیحات جفت‌شدگی و مدل پوسته‌ای از این رابطه برای تطابق جرم‌های محاسبه‌شده با مقادیر تجربی استفاده کردند. و برای انرژی‌های سطحی و کولنی هسته‌های کروی روابط زیر را به‌دست آوردند:

$$E_s^0 = 17.944\left[1 - 1.783\left(\frac{N-Z}{A}\right)^2\right]A^{2/3}\ MeV \qquad (۲)$$

$$E_c^0 = 0.7053\frac{Z^2}{A^{1/3}} - 1.1529\frac{Z^2}{A}\ MeV \qquad (۳)$$

انرژی چرخشی نیز از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$E_r(\alpha_i) = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mathfrak{z}(\alpha_i)} \qquad (۴)$$

که $\mathfrak{z}(\alpha_i)$ گشتاورلختی هسته وابسته به پارامتر تغییرشکل می‌باشد. مقادیر $E_s(\alpha_i)$ و $E_c(\alpha_i)$ را نیز می‌توان وابسته به پارامتر تغییرشکل براساس مدل‌آماری تصحیح شده[۳] و با درنظرگیری کمیت‌های E_s^0 و E_c^0 برآورد نمود. چگالی‌تراز هسته ^{224}Th براساس مدل گازفرمی محاسبه می‌شود[۶]. در این چارچوب، چگالی‌تراز برحسب انرژی‌برانگیختگی هسته، اسپین کل، پارامتر چگالی‌تراز و تصحیحات جفت‌شدگی بشکل زیر بیان می‌گردد:

$$\rho(E^*,J) = \frac{2J+1}{24\sqrt{2}\sigma^3 a^{1/4}(E^*-\delta)^{5/4}} \times exp\left\{2\sqrt{a(E^*-\delta)} - \frac{\left(J+\frac{1}{2}\right)^2}{2\sigma^2}\right\} \qquad (۵)$$

که σ^2 به شکل زیر تعریف میشود:

$$\sigma^2 = 6\overline{m^2}\frac{\sqrt{a(E^*-\delta)}}{\pi^2} \qquad (۶)$$

تصحیحات جفت‌شدگی برای هسته‌های زوج–زوج، زوج–فرد(یا فرد–زوج) و فرد–فرد به ترتیب برابر با $2.4, 1.2, 0\ MeV$ هستند. پارامتر چگالی‌تراز متناسب با چگالی حالت‌های تک‌ذره‌ای در سطح فرمی است. که دراینجا به‌صورت $a = A/10$ درنظر گرفته‌شد. میانگین تکانه‌زاویه‌ای‌کل نیز به‌صورت $\overline{m^2} \approx 0.24A^{2/3}$ تخمین زده می‌شود. هسته‌های برانگیخته برای رسیدن به حالت پایدار، انرژی خود را از طریق کانال‌های واپاشی مختلف از دست می‌دهند؛ از جمله گسیل ذرات‌سبک(نوترون، پروتون، آلفا)، تابش‌گاما و شکافت. برای بررسی رقابت بین این کانال‌ها باید کمیت‌هایی مانند چگالی‌ترازهای هسته، پهنای واپاشی‌ها و ارتفاع سدشکافت محاسبه شوند. بنا به مدل بوهر–ویلر پهنای سدشکافت از رابطه زیر ارائه می‌شود[۱] :

$$\Gamma_f^{BW} = \frac{1}{2\pi\rho_{gs}(E-V_{gs})} \times \int_0^{E-V_{gs}-B_f} \rho_{sp}(E-V_{gs}-B_f-\varepsilon)d\varepsilon \qquad (۷)$$

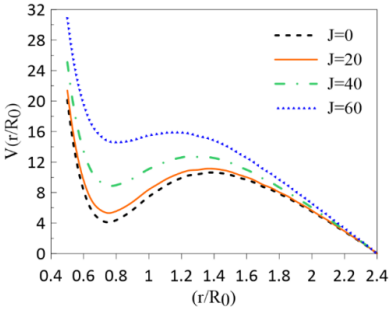
که B_f ارتفاع سدشکافت، ρ_{gs} و ρ_{sp} به ترتیب چگالی‌تراز هسته مرکب درحالت پایه و نقطه زینی و ε انرژی‌جنبشی هسته می‌باشد. همچنین پهنای واپاشی ذرات نوترون، پروتون و آلفا برحسب رابطه زیر محاسبه می‌شود[۷] :

$$\Gamma_v = (2S_v+1)\frac{m_v}{\pi^2\hbar^2\rho_c(E_{int})} \times \int_0^{E_{int}-B_v} d\varepsilon_v\rho_R(E_{int}-\varepsilon_v)\varepsilon_v\sigma_{inv}(\varepsilon_v) \qquad (۸)$$

در این رابطه S_ν اسپین ذره گسیل شده، m_ν جرم ذره خروجی و B_ν انرژی‌جدایی ذره می‌باشد. ρ_c و ρ_R به ترتیب چگالی‌تراز هسته مرکب و هسته باقی‌مانده هستند. در این محاسبات، سطح‌مقطع‌معکوس σ_{inv} و پارامترهای وابسته به آن براساس روابط ارائه‌شده در مرجع[۷] تعیین شده‌اند. همچنین، پهنای گسیل پرتوگاما، با بهره‌گیری از روابط موجود در مرجع[۸] محاسبه گردیده‌اند.

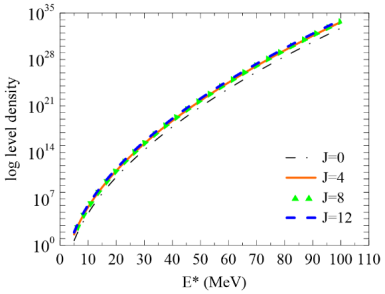
نتایج محاسبات

در این بخش با استفاده از مدل قطره‌مایع تصحیح‌شده، سد شکافت هسته ^{224}Th از مجموع انرژی‌های سطحی، کولنی و چرخشی محاسبه شده‌است. شکل ۱ تغییرات سدشکافت را برحسب پارامتر تغییرشکل r/R_0 و برای اسپین‌های مختلف نشان می‌دهد، که در آن r فاصله مراکز جرم دو پاره شکافت و R_0 شعاع هسته در حالت کروی است. شکل ۱ نشان می‌دهد که برای هسته ^{224}Th با افزایش اسپین کل منحنی پتانسیل به‌دلیل سهم مثبت انرژی چرخشی به‌سمت بالا جابه‌جا شده، اما ارتفاع سدشکافت کاهش می‌یابد. دلیل این موضوع ورود جمله پتانسیل گریز از مرکز در اسپین‌های بالاتر است که با افزایش ممان اینرسی شکل هسته را کشیده‌تر کرده و چاه‌پتانسیل را کم‌عمق می‌کند. بنابراین با غلبه این نیروی چرخشی و دافعه کولنی بر جاذبه هسته‌ای هسته در اسپین‌های بزرگ‌تر پایداری کمتری دربرابر شکافت داشته و آسان‌تر از سد عبور می‌کند.



شکل ۱ : سدشکافت هسته ^{224}Th برحسب پارامترتغییرشکل

در شکل۲، نتایج برآورد چگالی‌ترازهای هسته ^{224}Thبرحسب انرژی‌برانگیختگی ارائه شده است. لازم به ذکر است این کمیت در تعیین پهناهای واپاشی نقش مهمی دارد. این شکل تغییرات چگالی‌تراز را برای مقادیر مختلف اسپین نشان می‌دهد و امکان بررسی تأثیر انرژی‌برانگیختگی و اسپین بر تعداد ترازهای هسته را فراهم می‌کند.

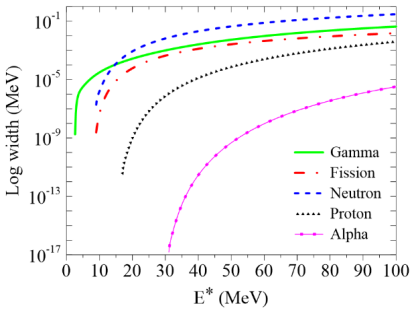


شکل۲ : تغییرات چگالی‌ترازها برای هسته ^{224}Th برحسب انرژی‌برانگیختگی

برای هسته ^{224}Th با افزایش انرژی برانگیختگی چگالی‌ترازها به‌صورت نمایی رشد می‌کند؛ یعنی پیش‌بینی مدل‌های آماری با افزایش دمای هسته‌ای تعداد حالت‌های کوانتومی قابل‌دسترس بیشتر شده و ترازهای برانگیخته بیشتری اشغال می‌شود. در نتیجه فاصله بین ترازهای انرژی کمتر و تراکم حالت‌ها بیشتر می‌شود. علاوه‌براین، شکل۲ نشان می‌دهد که با افزایش اسپین چگالی‌ترازها در یک انرژی برانگیختگی ثابت، روندی افزایشی دارد. از دیدگاه فیزیکی، حضور تکانه‌زاویه‌ای و انرژی چرخشی بالا، فرآیند شکستن جفت‌شدگی‌های نوکلئونی را تسهیل کرده و با اضافه شدن ترازهای چرخشی به ترازهای تک‌ذره‌ای، تراکم حالت‌های مجاز کوانتومی را افزایش می‌دهد. بنابراین در انرژی‌ها و اسپین‌های بالاتر، هسته تعداد بیشتری حالت برانگیخته دارد و چگالی‌ترازها روندی افزایشی نشان می‌دهند.

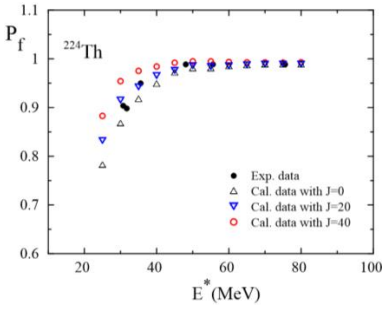
با استفاده از روابط قسمت قبل برای چگالی‌ترازها و سدشکافت و پهناهای واپاشی، می‌توان پهنای کانال‌های مختلف واپاشی که متناظر با احتمال واپاشی می‌باشد را برحسب انرژی‌برانگیختگی رسم کرد. شکل۳ نتایج مربوط به پهناهای واپاشی مربوط به شکافت، ذرات‌سبک و پرتوگاما برای هسته ^{224}Th برحسب انرژی‌برانگیختگی ارائه شده‌است. این نمودار امکان مقایسه سهم هر مکانیسم واپاشی را فراهم می‌نماید. در این هسته، در انرژی‌های پایین پهنای گسیل پرتو گاما بیشترین مقدار را دارد، اما با افزایش انرژی‌برانگیختگی، پهنای گسیل نوترون به‌دلیل عدم وجود مانع کولنی و رشد فزاینده چاه‌پتانسیل چگالی‌ترازهای هسته باقی‌مانده

سریعا افزایش یافته و از پرتوگاما پیشی می‌گیرد و به کانال غالب تبدیل می‌شود، پهنای شکافت نیز با افزایش انرژی و به‌دلیل کم‌عمق شدن سدشکافت رشد می‌کند، اما در کل اندکی کمتر از پهنای نوترون باقی می‌ماند، هرچند در انرژی‌های بالا می‌تواند رقابت‌پذیرتر شود



شکل۳: پهناهای مختلف واپاشی برای هسته ^{224}Th برحسب انرژی‌برانگیختگی

. درمقابل، پهناهای گسیل پروتون و آلفا به‌دلیل وجود سدکولنی بلند ناشی از عدد اتمی بالای توریم در بیشتر محدوده انرژی بسیار کوچک هستند و تنها در انرژی‌های بالاتر افزایش پیدا می‌کنند.در تحقیق حاضر جهت اعتبارسنجی مدل محاسباتی، احتمال‌شکافت هسته^{224}Th برحسب انرژی‌برانگیختگی به‌ازای اسپین‌های مختلف محاسبه گردید. شکل۴ مقایسه نتایج محاسباتی با داده‌های تجربی مرجع[۹] را نشان می‌دهد.



شکل۴ : احتمال شکافت هسته برانگیخته ^{224}Th وابسته به انرژی برانگیختگی

همان‌طور که مشاهده می‌شود، افزایش اسپین در تمامی انرژی‌ها منجر به صعودی شدن روند احتمال شکافت شده است، این رفتار با نتایج شکل‌های۱ و ۳ همخوانی کامل دارد، انطباق مطلوب میان محاسبات و آزمایش، به‌خوبی صحت مدل آماری و دقت پارامترهای ساختاری به‌کاررفته را تایید می‌کند.

نتیجه گیری

در این مقاله رفتار هسته برانگیخته ^{224}Th با بهره‌گیری از مدل آماری اصلاح‌شده بررسی شد. بررسی انرژی‌پتانسیل نشان داد که افزایش اسپین منجر به کاهش ارتفاع سدشکافت و تسهیل فرایند شکافت‌القایی می‌شود. اگرچه پیش‌بینی کیفی غالب بودن گسیل نوترون درمقایسه با ذرات باردار به‌دلیل وجود سد کولنی از گذشته شناخته شده است، اما هدف اصلی و نوآوری این مقاله، تعیین کمی و دقیق رفتار تابع احتمال واپاشی این کانال‌های رقابتی و بررسی تحول دینامیکی آن‌ها مستقیما برحسب تغییرات هم‌زمان انرژی برانگیختگی و تکانه زاویه‌ای است. محاسبات نشان داد که با افزایش انرژی‌برانگیختگی پهنای شکافت به‌طور قابل توجهی افزایش یافته و در انرژی‌های بالا با گسیل نوترون رقابت می‌کند. علاوه‌براین، در گام نهایی جهت اعتبارسنجی محاسبات انجام پذیرفته، احتمال کل شکافت محاسبه و با داده‌های تجربی موجود مقایسه گردید. انطباق خوب نتایج تئوری با داده‌های آزمایشگاهی، علاوه‌بر تایید صحت پارامترهای مدل‌آماری، نشان داد که اعمال تغییرات سدشکافت وابسته به اسپین چقدر در پیش‌بینی دقیق رفتار واپاشی هسته اهمیت دارد. یافته‌های این تحقیق درک عمیق‌تری از پایداری ساختاری هسته‌های سنگین را به‌دست می‌دهد و نتایج و روندهای استخراج‌شده از آن، می‌تواند به عنوان یک الگوی محاسباتی معتبر برای پیش‌بینی و تحلیل واکنش‌های همجوشی–شکافت ناشی از پرتابه‌های سنگین مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع‌ها

[1] J. P. Lestone and S. G. McCalla; “Statistical model of heavy-ion fusion-fission reactions”; *Phys. Rev. C* **79** (2009) 044611.
[2] P. Fanto, Y. Alhassid, and H. A. Weidenmüller; “The Statistical Model of Nuclear Reactions: Open Problems”; arXiv **1810** (2018) 1.
[3] J. P. Lestone; “Fast method for obtaining finite range corrected potential energy surfaces”; *Phys. Rev. C* **51**, No. 2 (1995) 580-585.
[4] W. D. Myers and W. J. Swiatecki; “Nuclear masses and deformations”; *Nucl. Phys.* **81**, No. 1 (1966) 1–60.
[5] W. D. Myers and W. J. Swiatecki; “Anomalies in nuclear masses”; *Ark. Fys.* **36** (1967) 343.
[6] A. S. Zubov, G. G. Adamian, N. V. Antonenko, S. P. Ivanova, and W. Scheid; “Competition between evaporation channels in neutron-deficient nuclei”; *Phys. Rev. C* **68** (2003) 014616.
[7] M. Blann; “Decay of deformed and superdeformed nuclei formed in heavy ion reaction”; *Phys. Rev.* C **21** (1980) 1770.
[8] J. E. Lynn; “*The theory of neutron resonance reactions*”; Clarendon Press, Oxford (1968) 325.
[9] E. G. Ryabov, *et al.*; “Application of a temperature-dependent liquid-drop model to dynamical Langevin calculations of fission-fragment distribution of excited nuclei”; *Phys. Rev. C* **78** (2008) 044614.

طراحی پروتوتایپ ساختار شتاب‌دهنده چندسلولی S-Band با گرادیان شتاب‌دهی ثابت

مستاجران ، مریم[۱]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد

چکیده

به منظور افزایش انرژی پرتو الکترونی در تاسیسات FERMI FEL و ارتقای پایداری ساختار در برابر شکست، ساختار گرادیان بالا پیشنهاد شده است. به دلیل هزینه‌های بالای محاسباتی برای شبیه‌سازی کامل، پروتوتایپ متقارن چندسلولی جهت بهینه‌سازی کوپلر ورودی در نرم‌افزار HFSS تحلیل شد. نتایج نشان می‌دهد این مدل پروتوتایپ با ایجاد تطبیق امپدانس مطلوب و توزیع میدان یکنواخت، بستر لازم را برای عملکرد پایدار در حالت موج رونده فراهم می‌سازد.

واژه های کلیدی: *شتاب‌دهنده خطی، گرادیان بالا، کوپلر ورودی، پروتوتایپ متقارن، موج رونده.*

Design of a Prototype Multi-Cell S-Band Accelerator Structure with a Constant Accelerating Gradient

Mostajeran, Maryam[۱]

[۱] *Department of Physics, University of Yazd, Yazd*

Abstract

To enhance electron beam energy at the FERMI FEL facility and improve structure stability against breakdown, a high-gradient structure is proposed. Due to high computational costs of full simulation, a multi-cell symmetric prototype was analyzed in HFSS to optimize the input coupler. Results indicate that this model achieves optimal impedance matching and uniform field distribution, providing the necessary foundation for stable traveling-wave operation.

Keywords: *Linear accelerator, High-gradient, Input coupler, Symmetric prototype, Traveling wave.*

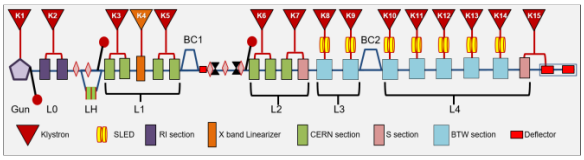
PACS No. *84*

مقدمه

تاسیسات FERMI FEL در آزمایشگاه Elettra تریسته، ایتالیا، منبع نور نسل چهارم است که در بازه‌ی طیفی فرابنفشِ خلأ تا پرتو ایکس نرم عمل می‌کند.در حال حاضر، این سیستم با انرژی ۱.۵ GeV کار می‌کند، با این حال، به‌منظور پوشش لبه‌های جذب Kنیتروژن و K اکسیژن، افزایش انرژی پرتو الکترونی به GeV ۱.۸ ضروری است. شکل ۱ چیدمان کامل لیناک FERMI را نشان می‌دهد که از چند بخش اصلی تشکیل شده است. الکترون‌ها ابتدا در تفنگ الکترونی تولید می‌شوند و سپس در بخش‌های L۰، L۱، L۲، L۳و L٤ توسط ساختارهای S-band شتاب می‌گیرند.

ساختارهای S-band معمولاً در فرکانس حدودGHz ۳ و در مد ۲π/۳ کار می‌کنند. در این مد، اختلاف فاز بین سلول‌های متوالی ۱۲۰ درجه است و میدان الکترومغناطیسی به‌صورت موج رونده در طول ساختار منتشر شده و موجب شتاب‌دهی پرتو الکترونی می‌شود. دو بخش BC۱ و BC۲ وظیفه ی فشرده‌سازی طول بانچ ذرات را بر عهده دارند. در بخش L۲ X-band Linearizer قرار دارد که برای خطی‌سازی فاز و بهبود فشرده‌سازی استفاده می‌شود. بخش‌های L۳ و L٤ شامل ساختارهای موج رونده‌ی پسرو (BTW) هستند که در زمان طراحی اولیه‌ی FERMI برای دستیابی به گرادیان مناسب در طول‌های بلند انتخاب شده‌اند. هر بخش توسط کلایسترون و

سامانه‌ی فشرده‌سازی توان مایکروویو (SLED) تغذیه می‌شود و در انتهای شتاب‌دهنده ی خطی یک منحرف‌کننده‌ی پرتو قرار دارد[۱].



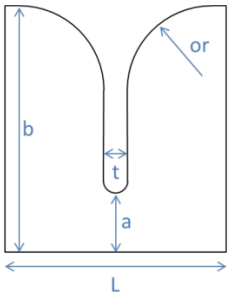
شکل۲ : چیدمان لیناک FERMI FEL [۱].

ساختار BTW در گرادیان‌های بالاتر از MV/m ۲۴دچار شکست زیاد و اثرات گرمایش پالسی می‌شوند که باعث محدود شدن انرژی نهایی پرتو می‌گردد. بنابراین، جایگزینی این بخش‌ها با ماژول‌های گرادیان بالا (HG) که قادر به تامین گرادیان پایدار MV/m ۳۰ باشند، هدف اصلی برنامه ارتقای این مرکز است. هر ماژول گرادیان بالا از دو ساختار شتاب‌دهنده‌ی S-band با گرادیان بالا تشکیل شده است که به‌صورت پشت‌سرهم نصب می‌شوند. این دو ساختار در گرادیان‌های بالاتر از بخش‌های موجود لیناک عمل می‌کنند و در کنار یکدیگر افزایش انرژی موردنیاز برای ارتقای FERMI را فراهم می‌سازند. برای دستیابی به گرادیان MV/m ۳۰ ، دو نوع ساختار شتاب‌دهنده مورد بررسی قرار گرفتند [۲] امپدانس ثابت و گرادیان ثابت، که در نوع اول با امپدانس ثابت، تمامی سلول‌ها یکسان هستند و برای رسیدن به میانگین مورد نظر، سلول اول باید به گرادیان MV/m ۳۶ برسد که این امر منجر به افزایش شدید میدان‌های سطحی و احتمال شکست رادیویی می‌گردد.در مقابل، در ساختارهای با گرادیان ثابت، ابعاد سلول‌ها به صورت تدریجی تغییر می‌کند تا میدان شتاب‌دهنده در طول ساختار تقریباً ثابت بماند. در این پروژه، گرادیان ثابت انتخاب شد، دلیل انتخاب این نوع ساختار کاهش میدان‌های سطحی و جلوگیری از تمرکز میدان در سلول ابتدایی بود که در نهایت نرخ شکست را کاهش می‌دهد. همچنین تغییر ابعاد سلول‌ها باعث می‌شود میدان های ویک از سلول به سلول تغییر فرکانس داده و اثرات منفی بر روی دسته‌های الکترونی بعدی کاهش یابد[۳].

طراحی سلول شتاب دهنده

طراحی سلول‌های شتاب‌دهنده با در نظر گرفتن محدودیت‌های فضای موجود و توان RF در دسترس انجام شد. با توجه به طول در دسترس ۳ متری برای بخش شتاب‌دهنده، تعداد ۸۴ سلول با طول هر یک ۳۳.۳۳۲ میلی‌متر در نظر گرفته شد هر سلول در حالت ۲π/۳ عمل کرده و برای دستیابی به امپدانس شانت و ضریب کیفیت بالا، ضخامت دیسک ۲.۵ میلی‌متر و هندسه‌ای گرد طراحی گردید. به منظور حفظ گرادیان شتاب‌دهنده ثابت در طول ساختار، ابعاد سلول‌ها به گونه‌ای تغییر یافت که شعاع آیریس از ۱۱.۱۳ میلی‌متر در سلول اول به ۸.۸۸ میلی‌متر در سلول آخر و شعاع بیرونی از ۴۱.۵۴ میلی‌متر به ۴۱.۰۷ میلی‌متر کاهش یابد[٤](این ابعاد با استفاده از نرم‌افزار SUPERFISH و برای دستیابی به فرکانس رزنانس GHz ۲.۹۹۸۰۱ محاسبه شده‌اند).

همچنین، برای کاهش میدان الکتریکی سطحی و بهینه‌سازی عملکرد در گرادیان‌های بالا، لبه‌های آیریس با یک پروفیل انحنای بیضوی طراحی شدند، شکل ۲.



شکل۲ : طرح شماتیک یک سلول.

شبیه‌سازی کامل ساختار ۳ متری شامل ۸۴ سلول و دو کوپلر ورودی و خروجی در HFSS نیازمند حافظه‌ی بسیار زیاد و زمان محاسباتی طولانی است. علاوه بر این، قبل از ساخت نسخه‌ی نهایی، لازم است رفتار الکترومغناطیسی واقعی، تطبیق امپدانس کوپلرها، یکنواختی میدان، پایداری فاز ۱۲۰ درجه، و نرخ شکست در توان بالا بررسی شود. به همین دلیل، ابتدا یک پروتوتایپ کوتاه طراحی شد.

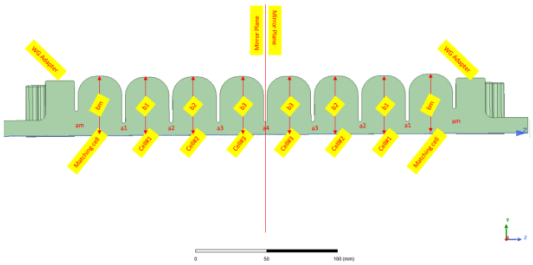
جدول۱ : مشخصات هندسی و RF سلول S-band برای ساختار گرادیان بالا

	Elettra model
f.[GHz]	۲.۹۹۸۰۱

Mode	۲π/۳
$L_{structure}$[mm]	۲۹۱۹.۸۹
L_{cell}[mm]	۳۳.۳۳۲
N_{cell}	۸۴
a(iris) [mm]	۱۱.۱۳
b(cell outer radius) [mm]	۵۴۶.۴۱
or (outer bending radius) [mm]	۱۳
t(disk thickness) [mm]	۲.۵

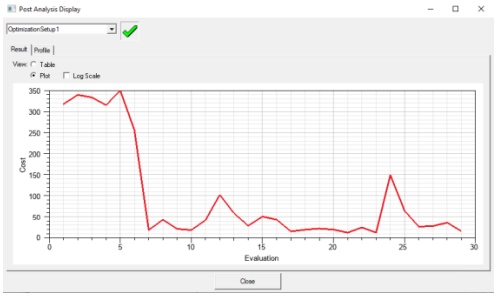
مدل پروتوتایپ متقارن و بهینه‌سازی کوپلر ورودی

در این روش، سه سلول ابتدایی ساختار به‌صورت آینه‌ای تکرار شدند تا یک مدل متقارن ایجاد شود، شکل ۳. سپس، به‌منظور اطمینان از عدم وجود مؤلفه‌های موج ایستاده، تعداد سلول‌های متقارن افزایش داده شد و نتایج حاصل از ساختارهای سه‌سلولی، چهارسلولی و پنج‌سلولی با یکدیگر مقایسه شدند. این فرایند با استفاده از یک مدل واحد انجام شد که قابلیت تغییر تعداد سلول‌ها را در حین بهینه‌سازی داشت. به این معنا که HFSS می‌تواند در هر تکرار، این مدل را با تعداد سلول‌های متفاوت تحلیل کند و نتایج را مقایسه کند. در فرایند بهینه‌سازی، شعاع آیریس کوپلر (a_m)و ارتفاع کوپلر (b_m) به‌عنوان دو پارامتر اصلی و قابل‌تنظیم انتخاب شده‌اند. این دو پارامتر هندسی تعیین‌کننده‌ی میزان جفت‌شدگی و تطبیق امپدانس هستند و تغییر آن‌ها مستقیماً بر مقدار S_{11} (پارامتر پراکندگی مربوط به بازتاب توان در ورودی) اثر می‌گذارد. بنابراین، در فرایند بهینه سازی، هر دو پارامتر a_m و b_mبه‌طور هم‌زمان بهینه می‌شوند تا بهترین شرایط تطبیق حاصل شود. شرط اصلی بهینه‌سازی این است که بیشینه‌ی مقدار S_{11} در تمام تکرارها کمتر از ۴۰- dB باشد. این شرط به‌عنوان تابع قیمت (Cost Function)تعریف شده است و HFSS در هر تکرار مقدار آن را محاسبه می‌کند.



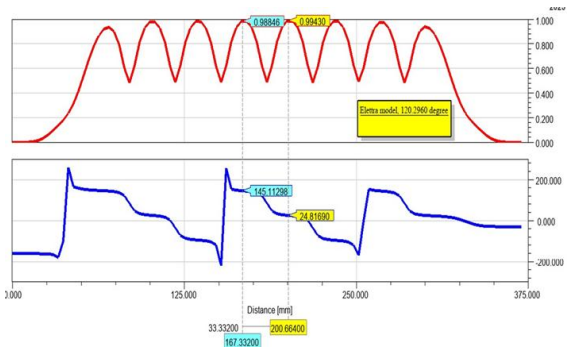
شکل۳ : مدل پروتوتایپِ متقارن‌شده برای پیکربندی سه‌سلولی.

بهینه‌سازی در اینجا به این معناست که شرط را تعریف می‌کنیم و HFSSبا تغییر پارامترهای هندسی، حالتی را پیدا می‌کند که مقدار Costکمترین مقدار ممکن باشد. نموداری که از تکرارهای مختلف به‌دست می‌آید، مقدار تابع قیمت را در هر مرحله نشان می‌دهد، شکل ۴. با استخراج جدول مربوط به همین نمودار، مقدار a_m و b_m متناظر با کمترین مقدار تابع قیمت انتخاب می‌شود، زیرا این مقدار بهترین تطبیق امپدانس و کمترین بازتاب را فراهم می‌کند.



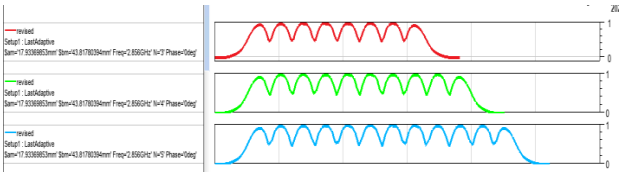
شکل۴ : تغییرات تابع قیمت در طول فرایند بهینه‌سازی.

پس از تعیین مقدار بهینه‌ی a_m و b_m، به ترتیب ۱۹.۸۱۵۳ mm و ۴۲.۶۸۳۵ mm رفتار میدان الکترومغناطیسی برای ساختارهای سه‌سلولی، چهارسلولی و پنج‌سلولی شبیه‌سازی انجام شد تا علاوه بر بررسی یکنواختی میدان و کیفیت تطبیق، مشخص شود که با مقادیر بهینه‌ی به‌دست‌آمده برای کوپلر ورودی ساختار به‌طور کامل در حالت موجِ رونده کار می‌کند و هیچ نشانه‌ای از بازتاب یا تشکیل مؤلفه‌ی موجِ ایستاده در آن باقی نمانده است.



شکل۵ : دامنه‌ی نرمال‌شده ی میدان الکتریکی طولی |Ez|و پیشروی فاز در امتداد محور باریکه برای پرونوتایپ سه سلولی متقارن.

در شکل ۵، نمودار اول پروفایل دامنه‌ی میدان طولی |Ez| را برای ساختار سه‌سلولیِ متقارن نشان می‌دهد؛ میدانی که به مقدار ۱ نرمال‌سازی شده و در امتداد محور ساختار ترسیم شده است. این نمودار بیانگر آن است که دامنه میدان در سلول‌های مختلف تقریباً یکسان باقی می‌ماند و بنابراین توزیع میدان در طول ساختار یکنواخت است. منظور از این یکنواختی آن نیست که میدان درون هر سلول بدون نوسان باشد؛ میدان در هر سلول به‌طور طبیعی نوسان می‌کند، اما بیشینه و کمینه‌ی میدان در سلول‌های مختلف تقریباً برابر است و تغییرات دامنه از یک سلول به سلول دیگر بسیار ناچیز است. به همین دلیل، این رفتار به‌عنوان یک توزیع میدان «فلت» و پایدار در طول ساختار تفسیر می‌شود. نمودار دوم نیز تغییرات پیشروی فاز را در امتداد محور باریکه نمایش می‌دهد. در امتداد محور باریکه، فاز در موقعیت‌های مختلف مقادیر مشخصی دارد. برای مثال :در موقعیت $X_1 = ۲۰۰,۶۶۴$ mm مقدار فاز برابر $\varphi_1 = ۱۴۵,۱۱۲۹۸۰^\circ$ است در موقعیت $X_2 =$ □□ ۱۶۷.۳۳۲۰مقدار فاز برابر $\varphi_2 = ۲۴,۸۱۶۹۰۰^\circ$. است. این دو موقعیت مربوط به دو نقطه درون یک سلول هستند. با مقایسه‌ی φ_1 و φ_2 می‌توان میزان تغییر فاز بین این دو نقطه را تعیین کرد. از آن‌جا که طول یک سلول برابر با ۳۳.۳۳۲ mm)اختلاف $X_1 - X_2$ است، پیشروی فاز در هر سلول برابر است با $\Delta\varphi = ۱۲۰.۲۹۰^\circ$.



شکل۶ : دامنه‌ی نرمال‌شده‌ی میدان الکتریکی طولی |Ez| به ترتیب برای پروتوتایپ سه سلولی، چهار سلولی و پنج سلولی متقارن.

در شکل ۶ رفتار میدان در هر سه ساختارِ سه‌سلولی، چهارسلولی و پنج‌سلولی کاملاً یکسان است و پروفایل‌ها نشان می‌دهند که میدان به‌صورت موجِ رونده پیشروی می‌کند، هیچ مؤلفه‌ی موجِ بازتابی یا ایستاده وجود ندارد، دامنه‌ی میدان با تغییر تعداد سلول‌ها تغییر نمی‌کند و یکنواختی میدان حفظ شده است که همگی بیانگر تطبیق صحیح کوپلر ورودی و عملکرد پایدار ساختار در مد $۲\pi/۳$ است. برای کوپلر خروجی نیز از همان روش بهینه‌سازی استفاده خواهد شد و مدل متقارن برای پیکربندی‌های سه، چهار و پنج‌سلولی به‌کار گرفته خواهد شد تا ابعاد مناسب کوپلر خروجی تعیین شود. بر اساس این ابعاد، مدل کامل ساختار، ۸۴ سلول طراحی خواهد شد و امکان محاسبه ی یکنواختی میدان، رفتار فاز ؛ ویک فیلد و سایر پارامترهای مورد نیاز فراهم خواهد شد.

نتیجه گیری

به دلیل حجم بالای محاسبات ساختار نهایی، در این پژوهش یک مدل پروتوتایپ متقارن چندسلولی برای بهینه‌سازی کوپلر ورودی در نرم‌افزار HFSS تحلیل شد. نتایج نشان داد که با اصلاح ابعاد هندسی کوپلر، ضریب بازتاب به کمتر از ۴۰ dB – کاهش یافته و توزیع میدان الکتریکی طولی |Ez| در طول ساختار کاملاً یکنواخت و پایدار باقی می‌ماند. همچنین، محاسبه پیشروی فاز درون سلول‌ها، عملکرد دقیق سیستم در حالت موج رونده $۲\pi/۳$ را تایید می‌کند که پیش‌زمینه لازم برای طراحی نهایی ساختار ۸۴ سلولی و تأمین گرادیان عملیاتی ۳۰MV/m را فراهم می‌سازد.

سپاسگزاری

از همکاری آقای نیومن شفقت صمیمانه تشکر می‌کنیم. اینکار با پشتیبانی مرکز ای سی تی پی در تریسته انجام شد.

مرجع‌ها

[۱] P. Craievich, S. Di Mitri, C. Serpico; “The short-range wakefields in the BTW accelerating structure of the ELETTRA linac”; *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* ۵۵۸ (۲۰۰۶) ۵۸–۶۱.

[۲] J. Raguin et al.; “RF design and thermal analysis of the SwissFEL C-band accelerating structure”; *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* ۷۴۰ (۲۰۱۴) ۱–۱۰.

[۳] L. Palumbo, V. G. Vaccaro, M. Zobov; “Wake fields and impedance”; *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* ۵۵۸ (۲۰۰۶) ۱–۲۷.

[۴] N. Shafqat, C. Serpico, A. Grudiev, R. Vescovo; “High gradient, high reliability, and low wakefield accelerating structures for the FERMI FEL”; *Rev. Sci. Instrum.* ۸۸ (۲۰۱۷) ۰۷۳۳۰۳.

بهینه‌سازی همزمان چشمه الکترونی و شنت‌های مغناطیسی در یک تفنگ الکترونی خمیده ۲۷۰ درجه با آهنربای دائم

مصلحی بهارانچی ، الناز[۱] ؛ حسنوند، مریم[۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان ، میدان استقلال، اصفهان

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

تفنگ‌های الکترونی خمیده ۲۷۰ درجه کاربرد گسترده‌ای در فرآیند لایه‌نشانی فیزیکی از بخار با باریکه الکترونی دارند. با این حال، بازده پایین استخراج باریکه و اعوجاج ناشی از میدان مغناطیسی غیریکنواخت، از چالش‌های اساسی این سامانه‌ها به شمار می‌روند. در این پژوهش، بهینه‌سازی سیستماتیک دو جزء کلیدی شامل چشمه الکترونی (متشکل از فیلمان، الکترود شکل‌دهنده باریکه و آند) و شنت‌های مغناطیسی در یک تفنگ خمیده ۲۷۰ درجه با آهنربای دائم انجام شده است. بهینه‌سازی چشمه الکترونی با تغییر فاصله فیلمان تا الکترود شکل‌دهنده، فاصله الکترود شکل‌دهنده تا آند، قطر فیلمان، قطر دهانه الکترود شکل‌دهنده و هندسه مارپیچ فیلمان (۶ حلقه، قطر ۳٫۵ میلی‌متر) صورت گرفت که نتیجه آن افزایش بازده استخراج باریکه از ۷۲٪ به ۸۹٪ و کاهش ۳۵ درصدی دمای آند بود. از آنجا که میدان حاصل از آهنربای دائم به تنهایی برای خمش و تمرکز مطلوب باریکه کافی نبود، از شنت‌های مغناطیسی برای شکل‌دهی پروفیل میدان استفاده شد. بهینه‌سازی شنت‌های مغناطیسی با تعیین ضخامت ٤ میلی‌متر، طول ۳۱٫۵ میلی‌متر، زاویه ۲۵ درجه نسبت به آهنربا و جنس فولاد ST-37 ، یکنواختی میدان مغناطیسی در طول مسیر باریکه را ٤۰٪ بهبود بخشید و اعوجاج نقطه کانونی را ۵۰٪ کاهش داد. شبیه‌سازی‌های سه‌بعدی الکترومغناطیسی و دینامیک ذرات با نرم‌افزار CST Studio Suite انجام شد و نتایج با اندازه‌گیری‌های تجربی گوس‌متر و آزمون مستقیم باریکه اعتبارسنجی گردید. در نتیجه بهینه‌سازی ترکیبی، جریان باریکه از ۱۲۰ به ۱٤۸ میلی‌آمپر افزایش یافت و قطر نقطه کانونی از ۲٫۱ به ۱٫۳ میلی‌متر کاهش پیدا کرد. تطابق عالی بین شبیه‌سازی و آزمایش با خطای کمتر از ۳٫۲ درصد، کارآمدی رویکرد بهینه‌سازی ارائه‌شده را تأیید می‌کند.

واژه های کلیدی: تفنگ الکترونی خمیده ۲۷۰ درجه، بهینه‌سازی همزمان، چشمه الکترونی، الکترود شکل‌دهنده باریکه، شنت مغناطیسی، آهنربای دائم.

Simultaneous Optimization of Electron Source and Magnetic Shunts in a 270 Degree Curved Electron Gun with Permanent Magnets

Moslehi Baharanchi, Elnaz[1]; Hasanvand, Maryam[2]

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

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

Abstract

۲۷۰-degree curved electron guns are widely used in electron beam physical vapor deposition processes. However, low beam extraction efficiency and beam distortion caused by non-uniform magnetic fields remain major challenges for these systems. In this study, systematic optimization of two key components—namely the electron source (consisting of the filament, beam forming electrode, and anode) and the magnetic shunts—has been carried out for a 270 degree curved electron gun with permanent magnets. Optimization of the electron source was performed by varying the filament-to-beam-forming-electrode distance, the beam-forming-electrode-to-anode distance, the filament diameter, the beam forming electrode aperture diameter, and the filament helix geometry (6 turns, 3.5 mm diameter). This resulted in an increase in beam extraction efficiency from 72 % to 89 % and a 35 % reduction in anode temperature. Since the magnetic field generated by the permanent magnets alone was insufficient for proper beam bending and focusing, magnetic shunts were employed to shape the field profile. Optimization of the shunts, including a thickness of

ε mm, length of 31.5 mm, tilt angle of 25° relative to the magnets, and ST-37 steel material, improved □□□ uniformity of the magnetic field along the beam path by 40 % and reduced focal spot distortion by 50 %. Three-dimensional electromagnetic and particle dynamics simulations were performed using CST Studio Suite, and the results were validated by experimental measurements using a Gauss meter and direct beam tests. As a result of the combined optimization, the beam current increased from 120 mA to 148 mA, and the focal spot diameter decreased from 2.1 mm to 1.3 mm. Excellent agreement between simulation and experiment (error < 3.2 %) confirms the effectiveness of the proposed optimization approach.

***Keywords**:270 degree curved electron gun, simultaneous optimization, electron source, beam forming electrode, magnetic shunt, permanent magnet.*

PACS No. 41.75.Fr; 41.85.Lc; 84.40.Fe; 41.85.Ne; 41.85.-p

۱.مقدمه

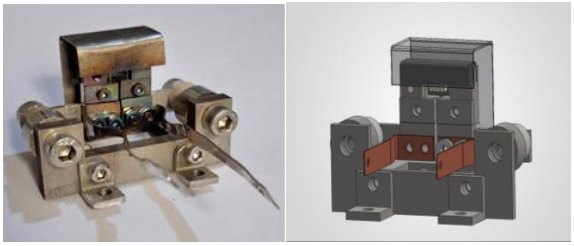
تفنگ‌های الکترونی خمیده ۲۷۰ درجه به دلیل امکان جداسازی الکتریکی ناحیه ولتاژ بالا از محفظه تبخیر، ابزاری کلیدی در فرآیندهای لایه‌نشانی با خلأ بالا محسوب می‌شوند [۱]. در این تفنگ‌ها، الکترون‌های گسیل شده از فیلمان تنگستنی، ابتدا توسط میدان الکترواستاتیک بین کاتد و آند شتاب می‌گیرند. سپس با عبور از میدان مغناطیسی خمشی (که معمولاً توسط آهنربای دائم ایجاد می‌شود)، مسیری ۲۷۰ درجه را طی کرده و باریکه بر روی بوته حاوی ماده هدف متمرکز می‌شود [۲،۳].

عملکرد سامانه به طراحی بهینه دو بخش وابسته است **۱) چشمه الکترونی** شامل فیلامنت، بیم فورمر و آند که بازده استخراج باریکه (نسبت جریان خروجی به جریان انتشار)، واگرایی و تلفات حرارتی آند را تعیین می‌کند [٤]. بیم فورمر، باریکه را پیش از شتاب متمرکز و شکل می‌دهد . **۲) سیستم هدایت مغناطیسی** شامل شنت‌های مغناطیسی فولادی که در تفنگ‌های با آهنربای دائم، پروفیل میدان خمشی را شکل داده و با هدایت شار، شرط خمش بهینه (برابری نیروی لورنتس و مرکزگرا) را در مسیر ۲۷۰ درجه برآورده می‌سازند.

علیرغم اهمیت این دو جزء، مطالعات کمی به بهینه‌سازی همزمان آنها اختصاص یافته است. در فرآیند بهینه‌سازی، هر پارامتر به‌صورت مستقل در یک بازه مشخص تغییر داده شد، در حالی که سایر پارامترها ثابت نگه داشته شدند. معیار انتخاب مقدار بهینه، بیشینه‌سازی جریان عبوری، کمینه‌سازی برخورد الکترون‌ها با آند، کاهش واگرایی باریکه و دستیابی به یکنواخت‌ترین توزیع میدان مغناطیسی بود.

۲. بهینه‌سازی چشمه الکترونی

چشمه الکترونی مهم‌ترین بخش تولید و شکل‌دهی اولیه باریکه است. این بخش از سه جزء اصلی تشکیل شده است : فیلامان (کاتد) به عنوان منبع گسیل الکترون، الکترود شکل دهنده که میدان الکتریکی موضعی را کنترل کرده و باریکه را متمرکز می‌کند، و آند که الکترون‌ها را شتاب داده و باریکه را استخراج می‌کند. هندسه و چیدمان این اجزا مستقیماً بر دینامیک باریکه، میزان واگرایی، چگالی جریان و تلفات حرارتی تأثیر می‌گذارد.



الف ب

شکل ۱ : الف) طراحی سه‌بعدی چشمه الکترونی در نرم‌افزار SolidWorks شامل فیلامان، الکترود شکل‌دهنده و آند، ب) تصویر چشمه الکترونی ساخته شده بر اساس پارامترهای بهینه.

۲،۱. بهینه‌سازی هندسه فیلامان و فاصله با الکترود شکل دهنده

تعداد حلقه‌های فیلامان در بازه ۵ تا ۷ دور و قطر مارپیچ در بازه ۳ تا ٤ میلی‌متر بررسی شد. تعداد حلقه کمتر از ٦ دور موجب افت جریان گسیلی و ۷ دور باعث ایجاد نواحی داغ و غیریکنواختی دما گردید. همچنین قطرهای کوچک‌تر از ۳،۵ میلی‌متر تمرکز بیش از حد و قطرهای بزرگ‌تر واگرایی اولیه باریکه را افزایش دادند؛

ازاین‌رو فیلامان ٦ حلقه با قطر مارپیچ ۳,۵ میلی‌متر انتخاب شد. فاصله فیلامان تا بیم‌فورمر نیز در بازه ۰,۸ تا ۱,۵ میلی‌متر بررسی شد؛ مقادیر کمتر از ۰,۹ میلی‌متر منجر به تخلیه الکتریکی و مقادیر بیشتر از ۱,۲ میلی‌متر موجب کاهش استخراج الکترون و افت جریان باریکه شدند، بنابراین مقدار بهینه ۱ میلی‌متر تعیین گردید.

۲,۲. نقش الکترود شکل دهنده در شکل‌دهی باریکه

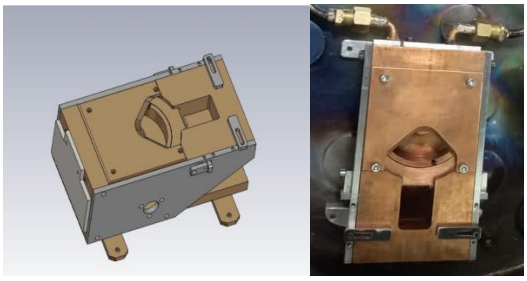
الکترود شکل‌دهنده با اعمال پتانسیل منفی نسبت به کاتد(معمولاً بین ۰ تا ۲۰۰ ولت منفی‌تر)، باریکه را پیش از شتاب‌دهی متمرکز می‌کند. قطر دهانه آن در بازه ۲,۵تا ٤ میلی‌متر بررسی شد؛ قطرهای کوچک‌تر عبور الکترون‌ها را محدود و قطرهای بزرگ‌تر واگرایی باریکه را افزایش دادند، بنابراین مقدار بهینه ۲.۸میلی‌متر انتخاب شد. با کاهش قطر دهانه از ٤به ۳ میلی‌متر، واگرایی باریکه از°٤,۲ به°۲,۸ و قطر باریکه در خروجی آند از ۱,۸به ۱,۲ میلی‌متر کاهش یافت.

۲.۳. طراحی آند

آند با ولتاژ شتاب ۱۰کیلوولت، الکترون‌ها را شتاب داده و استخراج می‌کند. فاصله الکترود شکل‌دهنده تا آند در بازه ۱تا ۳ میلی‌متر بررسی شد؛ فاصله‌های کمتر از ۲میلی‌متر احتمال تخلیه الکتریکی را افزایش دادند و فاصله‌های بیشتر از ۲میلی‌متر موجب کاهش میدان استخراج و افزایش برخورد الکترون‌ها با آند شدند، ازاین‌رو مقدار بهینه ۲میلی‌متر انتخاب شد. در نتیجه، بازده استخراج باریکه از ٪۷۲ به ٪۸۹ افزایش یافت و دمای بیشینه آند از ٤۸۰°C به ۳۱۲°C، (٪۳۵) کاهش یافت.

۳. بهینه‌سازی سامانه هدایت مغناطیسی (شنت‌های مغناطیسی)

سیستم هدایت مغناطیسی با دو آهنربای دائم[1] با فاصله هوایی ۱۵ میلی‌متر و شدت میدان ۰,٤۱تسلا در مرکز شکاف، باریکه را در مسیر ۲۷۰درجه هدایت می‌کند. از آنجا که میدان حاصل به‌تنهایی یکنواخت نبود و موجب اعوجاج باریکه می‌شد، از شنت‌های مغناطیسی برای هدایت شار و یکنواخت‌سازی توزیع میدان استفاده شد.



الف ب

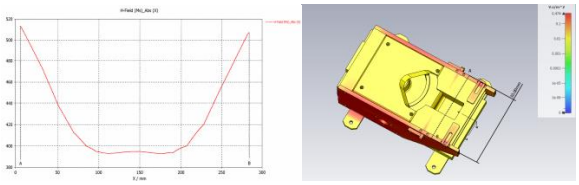
شکل ۲ : الف) طراحی سه‌بعدی تفنگ الکترونی در SolidWorks با نمایش موقعیت شنت‌های مغناطیسی، ب) تصویر تفنگ الکترونی ساخته شده.

۳,۱ .پارامترهای مؤثر شنت‌های مغناطیسی

چهار پارامتر شنت‌های مغناطیسی شامل ضخامت(t) ، طول(L) ، فاصله از محور باریکه و جنس ماده به‌صورت مستقل بررسی شدند. معیار انتخاب، بیشینه یکنواختی میدان، شدت میدان مناسب و هدایت صحیح باریکه بود. در نهایت، شنت فولادی ST-37 با مقادیر بهینه t=٤mm، L=۳۱,۵mm و x=۹ mm انتخاب شد.

۳,۲ . توزیع میدان مغناطیسی

برای بررسی کمّی توزیع میدان، یک مسیر خطی به نام AB در راستای عرضی سیستم (عمود بر جهت انتشار باریکه) تعریف شد.



الف ب

شکل ۳ : الف) نقشه رنگی دوبعدی توزیع شدت میدان مغناطیسی |B| (بر حسب تسلا) در نرم‌افزار CST به همراه مسیر اندازه‌گیری AB ، ب) نمودار تغییرات میدان مغناطیسی در امتداد مسیر AB .

نقشه رنگی میدان درشکل ۳ الف) نشان می‌دهد که بیشینه میدان در ناحیه دیواره‌های شکاف متمرکز است و در میانه شکاف از چگالی آن کاسته می‌شود. نمودار شکل ۳ ب) تأیید می‌کند که با بهینه‌سازی شنت‌های مغناطیسی، انحراف معیار نرمال‌شده میدان از ۰,۱۸ به ۰,۱۱ کاهش یافته و حداکثر شیب میدان از ۰,۵۲ به ۰,۲۸ گاوس بر میلی‌متر رسیده است (بهبود ٪٤۰ یکنواختی).

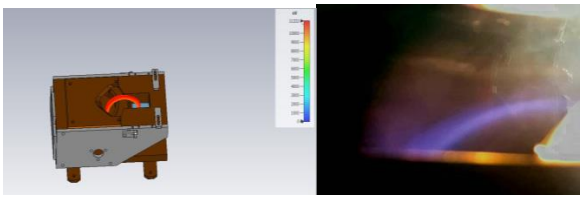
[1] NdFeB

٤. نتایج تجربی و دینامیک باریکه

پس از ساخت تفنگ با پارامترهای بهینه، عملکرد باریکه در شرایط واقعی (فشار 10^{-7} میلی‌بار) مورد ارزیابی قرار گرفت.

٤,١. شبیه‌سازی و اندازه‌گیری دینامیک باریکه

دینامیک باریکه الکترونی در مسیر ۲۷۰ درجه با استفاده از ماژول Particle Studio در CST شبیه‌سازی شد. تطابق بسیار خوبی بین شبیه‌سازی و آزمایش مشاهده گردید (خطای موقعیت نقطه کانونی کمتر از ٪۵) ، نتایج شبیه سازی و تجربی بیم الکترونی در شکل ٤ قابل مشاهده است. مسیر حرکت الکترون‌ها از محیط Particle Studio استخراج و مختصات برخورد ذرات به‌صورت فایل متنی ذخیره شد. سپس داده‌ها با استفاده از زبان Python پردازش و توزیع دوبعدی نقاط برخورد ترسیم گردید.

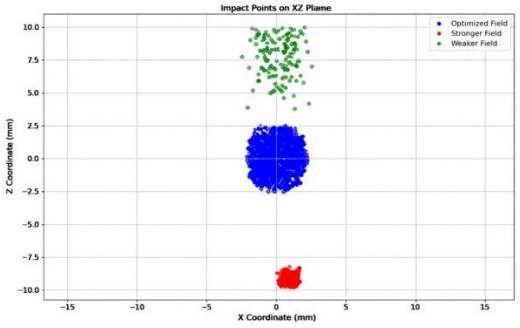


الف ب

شکل٤ الف) مسیر شبیه‌سازی‌شده باریکه الکترونی درCST ؛ ب) رد واقعی باریکه در محفظه خلأ هنگام آزمایش.

٤,٢. تأثیر شدت میدان مغناطیسی بر تمرکز باریکه

برای تحلیل کمی، داده‌های موقعیت برخورد الکترون‌ها تحت سه شرایط میدان مغناطیسی ضعیف(۰,۲٦تسلا)، بهینه(۰,٤۱تسلا) و قوی(۰,٦٤تسلا) ثبت و با پایتون پردازش شد.



شکل ۵: توزیع نقاط برخورد باریکه روی بوته در صفحه هدف روی بوته تحت تأثیر شدت‌های مختلف میدان مغناطیسی و محورهای افقی و عمودی نشان‌دهنده موقعیت برخورد الکترون‌ها بر حسب میلی‌متر هستند.

نتایج شکل ۵ نشان می‌دهد در میدان بهینه، بیش از ٪۹۰ نقاط برخورد در ناحیه‌ای به قطر ۷ میلی‌متر متمرکز می‌شوند (تمرکز مطلوب). در میدان ضعیف پراکندگی زیاد و در میدان قوی توزیع نامتقارن و متمایل به لبه‌ها ناشی از بیش‌تمرکزی و گرادیان شدید مشاهده می‌گردد.

۵. نتیجه‌گیری

در این پژوهش، بهینه‌سازی پارامتری چشمه الکترونی و شنت‌های مغناطیسی در تفنگ الکترونی خمیده ۲۷۰ درجه انجام شد. پارامترهای بهینه چشمه شامل فیلمان مارپیچی ٦حلقه با قطر ۳,۵ میلی‌متر، قطر روزنه بیم‌فورمر ۲,۸میلی‌متر و فاصله بهینه اجزا بود که موجب افزایش بازده استخراج از ٪۷۲ به ٪۸۹ و کاهش بار حرارتی آند به میزان ٪۳۵ شد. همچنین شنت مغناطیسی ST-37 با ضخامت ٤ میلی‌متر، طول ۳۱,۵ میلی‌متر و زاویه ۲۵درجه، یکنواختی میدان را ٪٤۰ بهبود داد. در شرایط بهینه، بیش از ٪۹۰ نقاط برخورد در ناحیه‌ای به قطر ۷ میلی‌متر متمرکز شده و جریان باریکه از ۱۲۰به ۱٤۸ میلی‌آمپر افزایش و قطر نقطه کانونی از ۲,۱ به ۱,۳ میلی‌متر کاهش یافت. نتایج تغییر پارامترها نشان داد که عملکرد تفنگ تنها در بازه محدودی از مقادیر هندسی بهینه بوده و انحراف از آن‌ها موجب کاهش استخراج، افزایش واگرایی یا افت کیفیت تمرکز باریکه می‌شود.

مرجع‌ها

[۱] F. Kong, J. Luan, F. Xie, Z. Zhang, M. Evaristo, and A. Cavaleiro, “The green lubricant coatings deposited by physical vapor deposition for demanding tribological applications: A review,” Coatings, vol. ١٤, no. ٧, p. ٨٢٨, ٢٠٢٤. DOI: 10.3390/coatings14070828.

[۲] R. Kumar and M. Patel, "Nanostructured coatings deposited by magnetron sputtering for tribological applications," Nanomaterials, vol. ١٣, no. ١٨, p. ٢٥٨٦, ٢٠٢٣. DOI: 10.3390/nano13182586.

[۳] R. Snyders, D. Hegemann, D. Thiry, O. Zabeida, J. Klemberg-Sapieha, and L. Martinu, “Foundations of plasma enhanced chemical vapor deposition of functional coatings,” Plasma Sources Science and Technology, vol. ٣٢, no. ٧, p. ٠٧٤٠٠١, ٢٠٢٣.

[٤] V. Goel, A. Roy, and N. Maiti, “A novel technique for optimizing ٢٧٠° bent electron gun for evaporation applications,” IEEE Transactions on Plasma Science, vol. ٤٨, no. ٩, pp. ٣٠٩٨–٣١٠٨, ٢٠٢٠.

بازسازی تصویر در تصویربرداری پروتونی با استفاده از موقعیت ورودی و خروجی آن از هدف

معینی، حسین[۱]؛ مکاری، مجتبی[۲]

[۱] بخش فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز، شیراز

[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی خاتم الانبیاء بهبهان، بهبهان

چکیده

عبور پروتون از مواد گوناگون امکان اندازه‌گیری تقریبی قدرت توقف میانگین را منوط به دانستن انرژی انباشت و زاویه انحراف پروتون در عبور از ماده مورد نظر فراهم می‌آورد. زاویه انحراف از طریق استفاده از صفحه‌های حساس به محل عبور پروتون (PSDs) برای ثبت مختصات گذر ذرات پیش و پس از محل قرارگیری هدف یا بافت قابل اندازه‌گیری تقریبی است. در این مطالعه، با شبیه‌سازی یک هندسه ساده برای تصویربرداری پروتونی که شامل یک فانتوم ساخته‌شده از مواد و ایمپلنت‌های گوناگون است و با صفحه‌های آشکارساز PSD محصور شده است، انرژی‌های انباشت پروتون در فانتوم را به طور تقریبی با استناد به انرژی انباشت در PSD و کالریمتر تعبیه شده در انتهای هندسه به دست آوردیم. بدین صورت و به طریق غیربرخط، اثر تقید زاویه انحراف پروتون (مقید شده به مقادیر بیشینه ۵، ۱۰، و ۱۵ میلی‌رادیان) بر تارشدگی تصویر مورد بررسی قرار گرفته و تاثیر آن بر کیفیت بازسازی تصویر مطالعه شد و نشان داده شد که محدود ساختن زوایای انحراف پروتون به مقادیر کوچکتر، بازسازی تصویر با وضوحی بالاتر یا به اصطلاح تارشدگی کمتر را به همراه خواهد داشت.

واژه های کلیدی: تصویربرداری پروتونی، تارشدگی تصویر، شبیه‌سازی مونت کارلو جیانت ٤

Image reconstruction in proton radiography knowing its position before and after the target

Moeini, Hossein[1]; Mokari, Mojtaba[2]

[1] Department of Physics, Faculty of Science, Shiraz University, Shiraz,
[2] Department of Physics, Faculty of Science, Behbahan Khatam Alanbia University of Technology, Behbahan

Abstract

Proton passage through various materials allows for an approximate measurement of the average stopping power, provided that the deposited energy and deflection angle of proton as it passes through the material are known. The deflection angle can be approximated by using position sensitive detectors (PSDs) to record the coordinates of the particle passage before and after the target or tissue. In this study, by simulating a simple geometry for proton radiography that includes a phantom made of various materials and implants that is placed between PSD plates, we obtained the approximate proton deposited energies in the phantom based on the deposited energies in PSDs and the calorimeter that is located at the end of the geometry. This way, and in an offline manner, the effect of constraining the proton deflection angles (to values smaller than 5, 10, and 15 mrad) on the image blurring was investigated and its impact on the quality of image reconstruction was studied. It was shown that limiting the proton deflection angles to smaller values would result in image reconstructions of better quality with lower blurring.

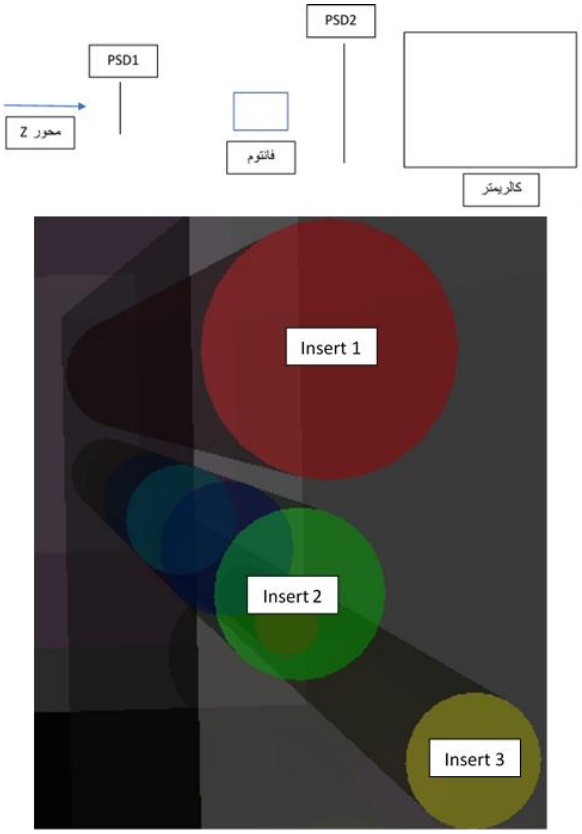
***Keywords**: Proton radiography, Image blurring, Geant4 Monte Carlo simulations.*

PACS No. 20, 87

مقدمه

تصویربرداری پروتون یک روش تصویربرداری است که قابل استفاده در کنار پروتون‌درمانی می‌باشد. تصویربرداری پروتون این امکان را فراهم می‌کند که بتوان به طور مستقیم قدرت توقف پروتون را به دست آورده و از آن در تسهیل برنامه‌ریزی درمان در پروتون درمانی بهره برد. قدرت توقف پروتون را معمولاً می‌توان از تصویرهای CT-scan با خطای ۳ تا ۱۰٪ استخراج نمود [۲-۱]. بدست آوردن مستقیم قدرت توقف پروتون از نتایج تصویربرداری آن می‌تواند خطاهای ناشی از پرتودهی نامتعارف بافت‌های سالم را به حداقل برساند [۳]. تصویربرداری پروتون و نمونه سه بعدی آن معروف به توموگرافی محاسباتی پروتون[1](PCT) مورد اقبال و تحت توسعه بوده است [٦-٤]. روش کار بدین صورت است که افت انرژی پروتون در هدف را می‌بایست با استفاده از انرژی اولیه آن به دست آورد، با این شرط که خطای محاسبه انرژی انباشت به خاطر نشت انرژی از طریق خروج ذرات ثانویه از هدف (بدون ثبت در آشکارسازها) ناچیز باشد. میزان تارشدگی تصویر بازسازی شده بستگی به مقدار انرژی منتقل شده به خارج از هدف، قدرت تفکیک مکانی آشکارسازهای PSD[2]حساس به موقعیت عبور پروتون، و نیز پراکندگی کولنی چندگانه MCS[3] دارد.

استفاده از یک فانتوم متشکل از مواد گوناگون واقع شده بین دو صفحه PSD، به‌علاوهٔ یک کالریمتر به‌منظور توقف و اندازه‌گیری باقیماندهٔ انرژی پروتون‌ها پس از عبور از PSDها و پیش از توقف آنها، امکان برساختن رادیوگراف‌های افت انرژی پروتون‌ها را میسر می‌سازد. این موضوع از لحاظ اصولی می‌تواند بررسی بهبود کیفیت تصویر را از حیث تمیز دادن مواد سازنده هدف امکان‌پذیر سازد. در این مطالعه، تقریبی از مسیر حرکت پروتون با برآورد زاویه انحراف آن از راستای اولیه باریکه پروتونی و استخراج مختصات عبور هر پروتون از دو صفحه PSD به‌دست آمده است. در بررسی غیر برخط داده‌های شبیه‌سازی، مقید کردن زاویه انحراف پروتون‌ها که قاعدتا به بهای کاهش بازده بازسازی تصویر تمام می‌شود، اساساً می‌تواند کنترل نسبی میزان تارشدگی تصویر به واسطه MCS را امکان‌پذیر سازد. بنابراین، نهایتاً پروتون‌هایی را مورد آنالیز قرار می‌دهیم که در عبور از هدف انحراف قابل توجهی نداشته باشند. با وجود اینکه دستگاه‌های آزمایشی PCT طراحی و اعتبارسنجی شده‌اند، تجاری‌سازی اسکنرهای کلینیکی هنوز کاملاً صورت نگرفته و غالب موارد موجود، به خاطر محدودیت‌های انرژی شتابدهنده‌های رایج برای پروتون درمانی، تنها قابلیت تصویربرداری از اهدافی در ابعاد سر انسان را دارا هستند [۷].



شکل ۱. پانل بالا: طرح شماتیک دوبعدی هندسهٔ شبیه‌سازی به‌طوری‌که باریکه پروتون، هندسه را در امتداد محور z پرتودهی می‌کند. فاصله PSD1، PSD2، و کالریمتر نسبت به مرکز فانتوم به ترتیب ۱۵/۵، ۱۱، و ۳۰/۵ سانتی‌متر است. پانل پایین (شکل رنگی): نمایی از هندسهٔ فانتوم شامل Insert های استوانه‌ای (محور استوانه‌ها در راستای محور z هستند).

جدول ۱. جزییات هندسه (شکل ۱، پانل بالا).

ابعاد x×y×z (mm³)	نام اجزا (ماده تشکیل دهنده)
۳۰×۳۰×۰/۴	PSD1 (سیلیکون)

[1] Proton Computed Tomography
[2] Position-Sensitive Detector
[3] Multiple Coulomb Scattering

PSD2 (سیلیکون)	۵۰×۵۰×۰/۴
کالریمتر (باریوم فلوراید)	۸۰×۸۰×۱۵۰
فانتوم (پُلی متیل مِت آکریلِت)	۱۰×۲۰×۳۰

مواد و روش‌ها

مطالعه حاضر با استفاده از کد مونت‌کارلو Geant4-11.0.1 صورت گرفته است [۸] و از مدل مرجع QGSP_BIC_EMY که برای شبیه‌سازی‌های هادرون درمانی مناسب می‌باشد [۹]، برای ترابرد ذرات استفاده شده است. هندسه شبیه‌سازی حاضر بر اساس طرح‌های نوعیِ تصویربرداری پروتونی [۴،۵،۱۰] در نظر گرفته شده است (شکل ۱) که بر پایه آن زاویه انحراف پروتون با استخراج اطلاعات موقعیت عبور آن از PSDها به‌دست می‌آید. در این پژوهش، با پروتون‌های ۲۰۰ MeV مقطع xy مستطیلی شکل فانتوم پرتودهی شد. پرتویی که ابتدا عمود بر سطح PSD1 فرود آمده بود، فانتوم را پرتودهی و از PSD2 گذر کرده و تنها پروتون‌هایی مورد آنالیز قرار گرفتند که پس از آن داخل کالریمتر متوقف شده بودند. جدول ۱ ابعاد و مواد سازنده هندسه را نشان می‌دهد. آنالیز پروتون‌هایی که حداکثر تا یک زاویهٔ مفروض (θ_{max}) انحراف یافته‌اند، امکان ارتقای کیفیت تصویر را در رقابت با کاهش بازده بازسازی آن فراهم می‌آورد.

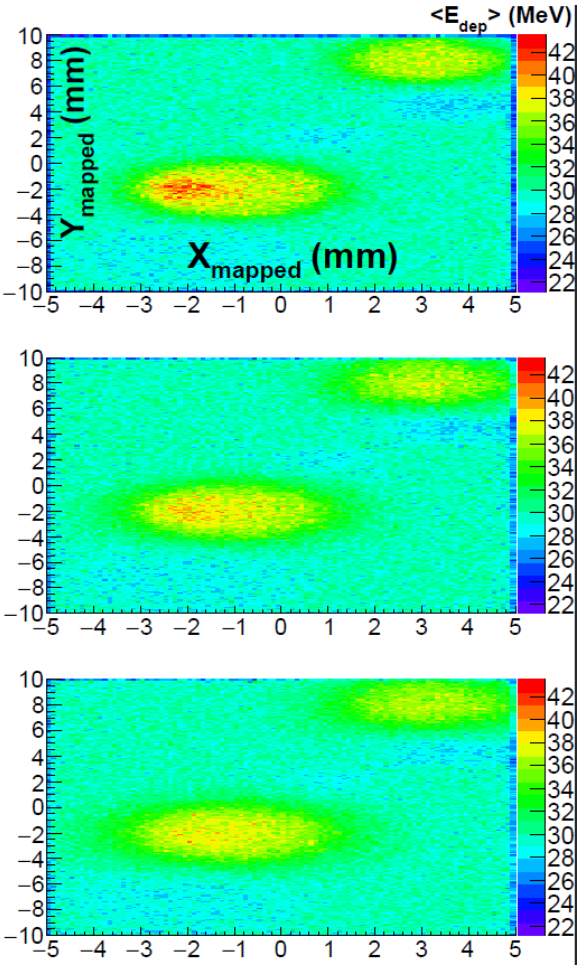
بحث و بررسی نتایج

شکل ۲ نتایج مقید به حداکثر زاویه انحراف ۵، ۱۰، و ۱۵ میلی‌رادیان را نشان می‌دهد. آنالیز داده‌های ۱۰۰ میلیون پروتون اولیه با میزان دوز پرتودهی برابر برای هر یک از زوایای ۵، ۱۰، و ۱۵ میلی‌رادیان صورت گرفت. هر پانل شکل ۲ یک هیستوگرام دو بعدی از میانگین انرژی انباشت در مختصات (X_{mapped},Y_{mapped}) را نشان می‌دهد که با وزن ΔE منطبق با رابطه (۱) پُر شده است. در نهایت، مقدار هر bin از هر هیستوگرام به تعداد پروتون عبوری واقع شده در آن bin نرمالیزه شده است.

$$\Delta E = 200\ MeV - Edep_{PSD1} - Edep_{PSD2} - Edep_{Calorimeter} \quad (1)$$

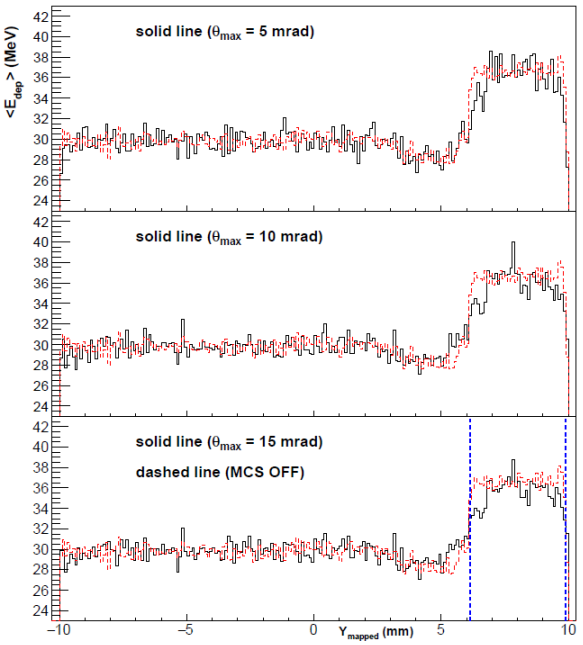
جملات آخر این رابطه انرژی انباشت در PSD1، PSD2، و کالریمتر هستند. موقعیت (X_{mapped},Y_{mapped}) محصول تصویر کردن مختصات خروج پروتون از صفحه PSD2 بر روی پنجره ورودی فانتوم است.

شکل ۳ تصویر شکل ۲ را در یک مقدار نمونه X_{mapped} = 3 mm روی محور y نشان می‌دهد. مقدار mm ۳، موقعیت x صفحه‌ای فرضی است که به موازات محور z دقیقا از وسط مقطع دایره‌ای Insert1 عبور کرده باشد. جنس Insert1 (به طول ۳۰ و قطر mm ۵) BONE_COMPACT_ICRU انتخاب شده است.



شکل۲. میانگین انرژی انباشت پروتون در موقعیت (X_{mapped},Y_{mapped}). پانل‌ها از بالا مربوط به θ_{max} های ۵، ۱۰، و ۱۵ میلی‌رادیان می‌باشند و قدرت تفکیک هیستوگرام‌ها bin/mm ۱۰ است.

شکل ۳، نتایج حالتی که MCS در شبیه‌سازی غیرفعال باشد را نیز نمایش داده است. فارغ از اثر binning ریزی که در هیستوگرام این شکل و شکل ۲ وجود دارد، ملاحظه می‌شود که حضور MCS تارشدگی تصویر قابل توجهی را سبب می‌شود و طبیعتاً در غیاب آن بازسازی تصویر بهتری از لبه‌های Insert1 می‌توانند انجام پذیرد.



شکل۳. نمودار خط پیوسته: تصویر شکل ۲ بر روی محور y در موقعیت مفروض X_{mapped} = 3mm. نمودار خط‌چین قرمز: نتایج در غیاب MCS. در پانل پایین، فاصله دو خط‌چین عمودی آبی‌رنگ مساوی با قطر Insert1 یعنی ۳/۷۵ mm انتخاب شده است.

نتیجه‌گیری

در این مطالعه با استفاده از جعبه ابزار Geant4، امکان بازسازی تصویر با استناد به موقعیت ورودی و خروجی پروتون از فانتوم بررسی گردید که در آن ایدهٔ بهبود کیفیت بازسازی جزییات فانتوم مبتنی بر مقید کردن غیر برخط میزان انحراف پروتون‌ها است. بدین ترتیب، ملاحظه شد که به طور کلی هر چقدر زوایای انحراف پروتون را بتوان به مقادیر کمتری محدود کرد (به شرط حفظ بازده بازسازی نسبتا مناسب یا به عبارتی آمار کافی)، تصویر بازسازی شده از وضوح بهتر و تارشدگی کمتری برخوردار خواهد بود. این موضوع را می‌توان با مقایسه میزان نزدیکی دو هیستوگرام پانل اول شکل ۳ در محل لبه‌های Insert1 (مثلا، مقادیر Y_{mapped} در محدوده ۵ تا ۷ میلی‌متر) در قیاس با میزان نزدیکی هیستوگرام‌های پانل وسط یا سوم بررسی نمود. در عمل، پارامترهای گوناگونی می‌توانند در تار شدن تصویر موثر باشند که از جمله شامل قدرت تفکیک انرژی کالریمتر، ضخامت، و جنس PSD می‌باشد.

مرجع‌ها

[1] Schuemann, J., & et al. (2014). Site-specific range uncertainties caused by dose calculation algorithms for proton therapy. *Physics in Medicine & Biology*, 59(15), 4007.
[2] Yang, M., & et al. (2012). Comprehensive analysis of proton range uncertainties related to patient stopping-power-ratio estimation using the stoichiometric calibration. *Physics in Medicine & Biology*, 57(13), 4095.
[3] Bucciantonio, M., & Sauli, F. (2015). Proton computed tomography. *Modern Physics Letters A*, 30(17), 1540024.
[4]. Poludniowski, G., & et al. (2015). Proton radiography and tomography with application to proton therapy. *The British journal of radiology*, 88(1053), 20150134.
[5]. Sipala, V., & et al. (2013). A proton computed tomography system for medical applications. *Journal of Instrumentation*, 8(02), C02021.
[6]. Quinones, C. T. (2016). *Proton computed tomography*. (Doctoral dissertation, Université de Lyon).
[7]. Wohlfahrt, P., & Richter, C. (2020). Status and innovations in pre-treatment CT imaging for proton therapy. *Br J Radiol* 93(1107):20190590
[8]. Agostinelli, S., & et al. (2003). GEANT4–a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 506(3), 250-303.
[9]. Cirrone, Giuseppe Antonio Pablo, et al. "Hadrontherapy: a Geant4-based tool for proton/ion-therapy studies." *Progress in nuclear science and technology* 2 (2011): 207-212.
[10]. Schnell, E., & et al. (2016). Commissioning of a relative stopping power to Hounsfield unit calibration curve for a Mevion proton radiation treatment unit. *AIP Conference Proceedings*. (Vol. 1747. No. 1). AIP Publishing.

بررسی انرژی آستانه بازدارندگی همجوشی در سیستمهای $^{48}Ca+^{48}Ca$ و $^{36}S+^{64}Ni$

قاسمی، طاهره ؛ ناصر قدسی، امید

گروه فیزیک، دانشگاه مازندران، بابلسر

چکیده

این مطالعه با استفاده از چارچوب تابعی–چگالی–انرژی اسکریم، سطح مقطعهای همجوشی سیستمهای نیمه‌سبک $^{48}Ca+^{48}Ca$ و $^{36}S+^{64}Ni$ و همچنین سیستمهای نیمه سنگین $^{58}Ni+^{58}Ni$ و $^{58}Ni+^{54}Fe$ را بررسی کرده و نتایج را با نتایج از مطالعه سیستم نیمه سنگین $^{64}Ni+^{64}Ni$ مقایسه میکند. در حالیکه مقادیر Q منفی و شواهدی از بازدارندگی همجوشی برای سیستمهای مذکور گزارش شده‌اند، اما افزایش تند شیب لگاریتمی سطح مقطعها و ظهور بیشینه فاکتور S در پایین‌ترین انرژیهای بمبارانی اندازه‌گیری شده برای سیستمهای سبکتر مشاهده نشده است. نتایج بدست آمده نشان میدهند که برهمکنشهای اسکریم متناظر با ماده هسته‌ای نرم در حدود $K\approx216$ MeV میتوانند رفتار سیستمهای نیمه سنگین را در انرژیهای پایین توصیف کنند. اعمال رویکرد مشابه برای مطالعه سیستمهای سبکتر پیشنهاد میدهد که افت ناگهانی مشابه در سطح مقطعها در انرژیهای بمبارانی پایین‌تر حدود $E\approx44$ MeV برای $^{48}Ca+^{48}Ca$ و حدود $E\approx50$ MeV برای $^{36}S+^{64}Ni$ قابل مشاهده میباشد.

واژه های کلیدی: *برهمکنشهای اسکریم، سطح مقطعهای همجوشی، بازدارندگی همجوشی.*

Investigation of the fusion hindrance threshold energy in the $^{48}Ca+^{48}Ca$ and $^{36}S+^{64}Ni$ systems

Ghasemi, Tahereh; Naser Ghodsi, Omid

Department of Physics, University of Mazandaran, Babolsar

Abstract

This study investigates fusion cross sections for the the medium-light systems $^{48}Ca+^{48}Ca$ and $^{36}S+^{64}Ni$, as well as the medium-heavy systems $^{58}Ni+^{58}Ni$ and $^{58}Ni+^{54}Fe$, within the framework of the Skyrme energy density functional, and compares the results with those for the medium-heavy system $^{64}Ni+^{64}Ni$. While negative Q-values and evidence of fusion hindrance have been reported for the mentioned systems, a steep increase in the logarithmic slope of the fusion cross sections and the appearance of an S-factor maximum have not been observed at the lowest measured energies for the lighter systems. The obtained results indicate that Skyrme interactions corresponding to a soft nuclear matter around $K\approx216$ MeV can describe the behavior of the medium-heavy systems at low energies. Applying the same approach to the medium-light systems suggests that observing a similar steep falloff in the fusion cross sections may require measurements at lower energies, estimated at about $E\approx44$ MeV for $^{48}Ca+^{48}Ca$ and $E\approx50$ MeV for $^{36}S+^{64}Ni$.

***Keywords**: Skyrme interactions, fusion cross sections, Fusion hindrance.*

PACS No. 25

مقدمه

تاکنون پژوهشهای گسترده ای بر روی واکنشهای همجوشی یونهای سنگین انجام شده است [۱]. اندازه‌گیریهای تجربی در انرژیهای بسیار پایین تر از سد کولنی، پدیده بازدارندگی همجوشی را آشکار ساخته اند که در آن، سطح مقطعها سریعتر از پیش بینی مدل کانالهای جفت شده استاندارد کاهش میابند. یکی از کمیتهای مهم برای بررسی پدیده بازدارندگی همجوشی فاکتور اخترفیزیکی–S، $S(E)=E\sigma_{fus}(E)exp(2\pi\eta)$ است که در آن E، σ_{fus} و η بترتیب انرژی مرکز جرم، سطح مقطع همجوشی و پارامتر سامرفیلد هستند. این پدیده نخستین بار در سیستمهای نیمه‌سنگین با $Q<0$ مانند $^{64}Ni+^{64}Ni$، $^{58}Ni+^{58}Ni$ و $^{58}Ni+^{54}Fe$ مشاهده شد [۲–۴]. در این واکنشها پیش بینی میشود که فاکتور–

S با کاهش انرژی بمبارانی به یک بیشینه برسد و شروع بازدارندگی همجوشی معمولا به انرژی متناظر با این بیشینه نسبت داده میشود. در مقابل، سیستمهای سبک با $Q>0$ مانند C+C و O+O شواهد روشنی از بیشینه فاکتور–S را نشان نمیدهند و شناسایی بازدارندگی همجوشی در آنها دشوارتر است [۵]. سیستمهای نیمه‌سبک بعنوان حد واسط میان سیستمهای سبک و سنگین میتوانند اطلاعاتی را در مورد بازدارندگی همجوشی فراهم آورند. شواهدی از این پدیده در سیستمهای نیمه‌سبک با $Q<0$، مانند $^{48}Ca+^{48}Ca$ [۶] و $^{36}S+^{64}Ni$ [۷] گزارش شده است؛ با این حال، فاکتور–S تجربی آنها در پایین‌ترین انرژیهای اندازه‌گیری شده علیرغم رفتار صعودی، مقدار بیشینه ای آن را نشان نمیدهد. ازاین‌رو، پیشنهاد شده است که اثر بازدارندگی در این سیستمها ممکن است در انرژیهای بمبارانی موجود برای ایجاد بیشینه فاکتور–S کافی نباشد [۷، ۸]. بنابراین، برآورد نظری انرژیهای پایین‌ترِ لازم برای ظهور احتمالی این بیشینه در سیستمهای مذکور میتواند حائز اهمیت باشد.

یکی از روشهای موفق در توصیف بازدارندگی همجوشی، مدل واپیچش دوگانه مبتنی بر برهمکنش M3Y است که در آن، اثرات اصل طرد پائولی و تراکم‌ناپذیری هسته‌ای با گنجاندن یک مغزی دافعه در برهمکنش نوکلئون–نوکلئون لحاظ میشود [۹]. کاربرد این مدل برای $^{48}Ca+^{48}Ca$، افزون بر توصیف خوب سطح مقطعهای همجوشی، بیشینه ای برای فاکتور–S در انرژیهای فاقد داده تجربی پیش بینی کرده است [۸]. علاوه بر این روش، فرمالیسم تابعی–چگالی–انرژی اسکریم نیز بطور گسترده برای مطالعه واکنشهای همجوشی یونهای سنگین بکار گرفته شده است [۱۱–۱۰]. این فرمالیسم با استفاده از چگالیهای هسته‌ای خودسازگار و لحاظ کردن اثرات همپوشانی چگالیهای هسته ای و اصل طرد پائولی از طریق سهم انرژی جنبشی، امکان تحلیل دقیق‌تر داده‌های همجوشی را میتواند فراهم کند. مطالعات پیشین نشان داده اند که داده های همجوشی به برهمکنشهای نوکلئون–نوکلئون مانند نیروهای اسکریم متناظر با مقادیر مختلف تراکم ناپذیری ماده هسته‌ای K، حساس میباشند [۱۳–۱۱]. علاوه بر این، یک مطالعه اخیر بر روی $^{64}Ni+^{64}Ni$ در چارچوب تابعی–چگالی–انرژی اسکریم نشان داده است که با کاهش انرژی بمبارانی و نزدیک شدن به انرژیهایی که بیشینه فاکتور–S مشاهده شده است، داده های همجوشی با میدان میانگینی توصیف میشوند که رفتاری نرم برای ماده هسته‌ای با تراکم ناپذیری در حدود $K\approx216$ MeV پیش بینی میکند [۱۴]. در مطالعه حاضر، قصد داریم سیستمهای نیمه‌سبک $^{48}Ca+^{48}Ca$ و $^{36}S+^{64}Ni$ را مورد بررسی قرار داده و نتایج حاصل برای روندهای تجربی فاکتور–S را همراه با سیستمهای سنگین‌تر مانند $^{58}Ni+^{58}Ni$، $^{58}Ni+^{54}Fe$ و $^{64}Ni+^{64}Ni$ مقایسه کنیم. در این تحقیق برای محاسبه پتانسیلهای برهمکنشی از فرمالیسم تابعی–چگالی–انرژی اسکریم استفاده شده است.

فرمالیسم تابعی–چگالی–انرژی اسکریم

از آنجا که بخش هسته‌ای پتانسیل برهمکنشی بخوبی بخشهای کولنی و دورانی شناخته شده نیست، روشهای مختلفی برای ارزیابی آن وجود دارد که یکی از آنها فرمالیسم تابعی–چگالی–انرژی اسکریم میباشد. در این فرمالیسم، بخش هسته‌ای پتانسیل برهمکنشی به فرم $V_N(R)=E_T(R)-E_1-E_2$ است که در آن، R به مراکز جرم هسته های برهمکنشی و $E_T(R)$ به انرژی سیستم مرکب اشاره دارد. همچنین، $E_{i=1,2}$ انرژیهای هسته های پرتابه و هدف را در فاصله دور از یکدیگر نشان میدهد. انرژیهای مذکور عبارتند از

$$E_T(R)=\int \varepsilon[\rho_{1p}(\vec{r})+\rho_{2p}(\vec{r}-\vec{R}),\rho_{1n}(\vec{r})+\rho_{2n}(\vec{r}-\vec{R})]d^3r. \quad (۱)$$

$$E_i=\int \varepsilon[\rho_{ip}(\vec{r}),\rho_{in}(\vec{r})]d^3r.(i=1,2). \quad (۲)$$

نماد گذاری $\varepsilon(\vec{r})$، معرف تابعی–چگالی–انرژی مبتنی بر برهمکنش اسکریم است [۱۵، ۱۶]. در مطالعه حاضر، چگالیهای پروتونی و نوترونی در هسته های پرتابه و هدف از طریق روش هارتری–فوک محاسبه و به توزیع دو پارامتری فرمی برازش شده اند. همچنین برای محاسبه پتانسیل برهمکنشی، از چگالی هسته ای متناظر با همان برهمکنش مؤثر استفاده شده است.

تجزیه و تحلیل نتایج

در پژوهش حاضر، برای درک بهتر رفتار تراکم‌ناپذیری ماده هسته‌ای در انرژیهای بمبارانی و ارتباط محتمل آن با بیشینه فاکتور–S، ابتدا سیستمهای $^{58}Ni+^{58}Ni$ و $^{58}Ni+^{54}Fe$ و سپس، سیستمهای سبکتر $^{48}Ca+^{48}Ca$ و $^{36}S+^{64}Ni$ را که فاقد بیشینه فاکتور–S هستند، در چارچوب تابعی–چگالی–انرژی اسکریم بررسی میشوند. بدین منظور، نیروهای اسکریمی انتخاب میشوند که بتوانند همزمان خواص حالت پایه هسته های پرتابه و هدف (انرژی بستگی و ریشه–میانگین–مربعی شعاع بار) و سطح مقطعهای همجوشی آنها را توصیف کنند. سطح مقطعهای همجوشی در چارچوب مدل کانالهای جفت شده و با بکارگیری کد CCFULL [۱۷] محاسبه میشوند. جزئیات مدهای برانگیختگی ۳+ و ۳- هسته های برهمکنشی در مراجع [۷،۱۸،۱۹] قابل مشاهده است. توافق بین سطح مقطعهای نظری و تجربی از طریق $\chi=\sqrt{\sum_{i=1}^{N}\left(\left((\sigma_{fus}^{Theo})_i-(\sigma_{fus}^{Exp})_i\right)/2\delta_i\right)^2}$ ارزیابی میشود که N تعداد نقاط داده تجربی و δ_i عدم قطعیت هر نقطه است. برای بررسی رفتار تراکم‌ناپذیری در انرژیهای مختلف، به ویژه در ناحیه ای که بازدارندگی همجوشی رخ میدهد، مقادیر χ در بازه های مختلف انرژی محاسبه

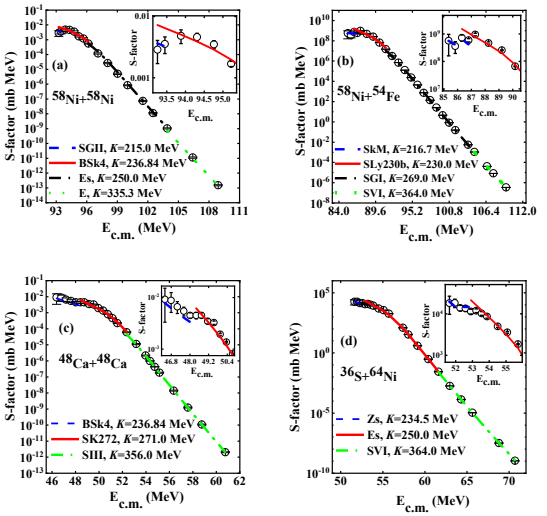
میشوند. برای نمونه، نتایج مربوط به ^{58}Ni+^{58}Ni در جدول ۱ لیست شده است. نتایج حاصل نشان میدهند که نیروهای SGII، BSk4، Es و E با مقادیر K در محدوده ۲۱۵ تا ۳۳۵ MeV، نه تنها قادر به توصیف شعاع بار و انرژی بستگی هسته ^{58}Ni با انحرافات نسبی بترتیب کمتر از ۰/۷۸ ٪ و ۲/۱۹ ٪ هستند، بلکه میتوانند سطح مقطعهای همجوشی ^{58}Ni+^{58}Ni را بترتیب در انرژیهای پایین، زیر سد، اطراف و بالای سد، و انرژیهای بالاتر بخوبی پیش بینی کنند.

جدول۱: انحراف (χ) سطح مقطعهای ناشی از نیروهای اسکریم از داده های تجربی ^{58}Ni+^{58}Ni. بر اساس ارتفاع سد V_B≈98 MeV [۳]، محاسبات در نواحی مختلف انرژی انجام شدند.

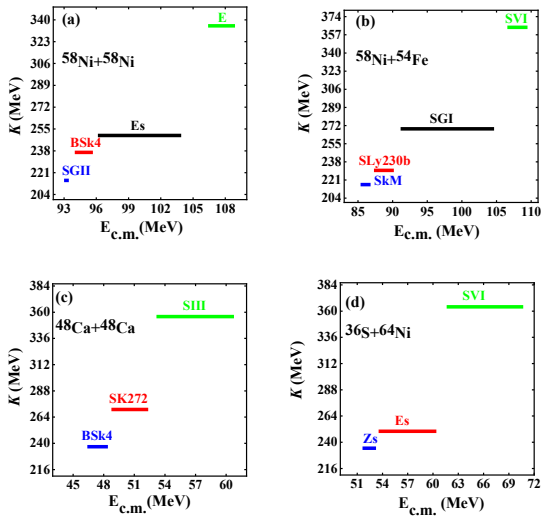
E_{cm} (MeV)	SGII K=215 MeV	BSk4 K=236.84 MeV	Es K=250 MeV	E K=335.3 MeV
۹۳۲-۹۳۵	۰/۳۵	۲/۲۹	۱/۰۹	۱/۷۱
۹۳۹-۹۵۷	۳/۰۹	۱/۱۸	۲/۸۱	۲/۳٤
۹۶۱-۱۰۳۹	۳/۵٦	۵/۸۸	۳/۳۹	۸/۳۱
۱۰۶۴-۱۰۸۹	۱/۱۸	۱/۷۰	۱/۲۹	۰/۹۰

سطح مقطعهای نظری که بیشترین توافق را با داده های تجربی متناظر دارند، برای استخراج فاکتور–S مورد استفاده قرار میگیرند. همانطور که در شکلهای ۱–(a) و (b) نشان داده شده است، فاکتورهای S محاسبه شده برای ^{58}Ni+^{58}Ni و ^{58}Ni+^{54}Fe توصیف خوبی از داده های تجربی، به ویژه بیشینه فاکتور–S ارائه میدهند. با توجه به نتایج بدست آمده انتظار می‌رود که هر ناحیه انرژی در این واکنشها توسط مقدار تراکم‌ناپذیری که نیروی اسکریم متناظرش بهترین توافق را بین محاسبات نظری و داده های تجربی نشان میدهد توصیف شود. شکلهای ۲–(a) و (b) نشان میدهند که با افزایش انرژی، تراکم‌ناپذیری ماده هسته ای از رفتاری نرم به سخت متمایل است. همچنین به نظر میرسد که با نزدیک شدن به رفتار نرم ماده هسته‌ای با تراکم‌ناپذیری حدود K≈216 MeV در پایین ترین انرژیها، مشابه با سیستم نیمه سنگین ^{64}Ni+^{64}Ni [۱۴]، توصیف بیشینه فاکتور–S برای سیستمهای نیمه سنگین ^{58}Ni+^{58}Ni و ^{58}Ni+^{54}Fe امکانپذیر میگردد.

به شیوه‌ای مشابه، سیستمهای نیمه‌سبک ^{48}Ca+^{48}Ca و ^{36}S+^{64}Ni نیز بررسی شده‌اند. همانطور که در شکلهای ۱–(c) و (d) نشان داده شده است، فاکتورهای S محاسبه شده برای این سیستمها توافق خوبی با داده های تجربی متناظر دارند. نتایج حاصل نشان میدهند در انرژیهای اندازه‌گیری شده خیلی پایین تر از ارتفاع سد همجوشی، سیستمهای نیمه سبک ^{48}Ca+^{48}Ca و ^{36}S+^{64}Ni در مقایسه با سیستمهای سنگین تر ^{58}Ni+^{58}Ni، ^{58}Ni+^{54}Fe و ^{64}Ni+^{64}Ni رفتار سخت تری از ماده هسته‌ای با تراکم‌ناپذیری حدود K≈235 MeV را نشان میدهند (شکلهای ۲–(c) و (d)). بر اساس نتایج بدست آمده پیش بینی میشود که با گسترش اندازه‌گیریهای سطح مقطعهای همجوشی برای ^{48}Ca+^{48}Ca و ^{36}S+^{64}Ni به انرژیهای بمبارانی پایین تر، مشاهده بیشینه در فاکتورهای S آنها محتمل میباشد. نتایج ارائه شده در شکل ۲ نشان میدهند برای مشاهده بیشینه در فاکتور–S، احتمالا لازم است انرژیهای بمبارانی در سیستمهای نیمه سبک ^{48}Ca+^{48}Ca و ^{36}S+^{64}Ni تا مقادیری متناظر با رفتار ماده هسته‌ای نرم که برای سیستمهای سنگین‌تر پیش بینی شد، کاهش یابند. در شکل ۳، تغییرات مقادیر تراکم ناپذیری K متناظر با نقاط آغازین نواحی انرژی، به صورت نمونه برای

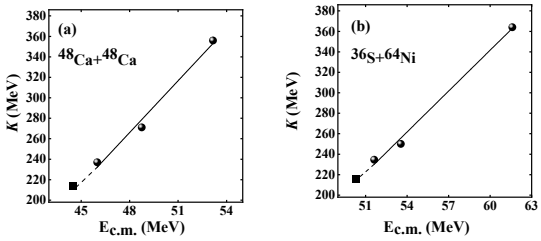


شکل۱: فاکتورهای S برای واکنشهای ^{58}Ni+^{58}Ni، ^{58}Ni+^{54}Fe، ^{48}Ca+^{48}Ca و ^{36}S+^{64}Ni. همچنین، ارتفاعهای سد بترتیب در حدود ۹۸، ۹۳ [۴]، ۵۱ [۶] و ۵۸ [۷] MeV گزارش شد. پل کوچک در هر شکل، روند داده ها را در انرژیهای زیر سد نشان میدهد.



شکل۲: مقادیر تراکم ناپذیری متناظر با نیروهای اسکریم توصیف کننده نواحی انرژی در واکنشهای ^{36}S+^{64}Ni و ^{48}Ca+^{48}Ca، ^{58}Ni+^{54}Fe، ^{58}Ni+^{58}Ni

سیستمهای نیمه سبک ^{48}Ca+^{48}Ca و ^{36}S+^{64}Ni نشان داده شده است. برونیابی به سوی مقدار تراکم‌ناپذیری نرمِ پیش‌بینی شده برای سیستمهای سنگین تر میتواند برآوردی از کم ترین انرژی لازم برای مشاهده بیشینه فاکتورهای S در سیستمهای نیمه سبک را فراهم کند. نتایج بدست آمده، که با نماد مربع در شکلهای ۳-(a) و (b) نشان داده شده اند، برای سیستمهای نیمه سبک ^{48}Ca+^{48}Ca و ^{36}S+^{64}Ni برترتیب مقادیری حدود E≈44 MeV و E≈50 MeV را برای مشاهده انرژی آستانه بازدارندگی پیش بینی میکنند. پژوهشهای دیگر، بیشینه فاکتورهای S را در حدود E≈43 MeV و E≈51 MeV برترتیب برای ^{48}Ca+^{48}Ca و ^{36}S+^{64}Ni پیشنهاد کرده‌اند [۱،۲۰].



شکل۳: دایره ها، مقادیر تراکم ناپذیری متناظر با نقاط آغازین نواحی انرژی که در شکل ۲ ارائه شده اند، را نشان میدهند. مربع ها، انرژیهای برون‌یابی شده هستند.

نتیجه گیری

در این پژوهش، تفاوت رفتار فاکتور–S در پایین‌ترین انرژیهای بمبارانی اندازه گیری شده برای سیستمهای نیمه سبک ^{48}Ca+^{48}Ca و ^{36}S+^{64}Ni نسبت به سیستمهای نیمه سنگین مانند ^{58}Ni+^{58}Ni، ^{58}Ni+^{54}Fe و ^{64}Ni+^{64}Ni بررسی میشود. برای دستیابی به این هدف، داده های همجوشی با استفاده از پتانسیلهای بین هسته‌ای حاصل از چارچوب تابعی–چگالی–انرژی اسکریم تحلیل میشوند. نتایج بدست آمده نشان میدهند که با کاهش انرژی بمبارانی، نیروهای اسکریم متناظر با مقادیر کمتر تراکم ناپذیری K داده های همجوشی را بهتر بازتولید میکنند. همچنین، نتایج نشان میدهند که با نزدیک شدن به رفتار نرم ماده هسته‌ای در حدود K≈216 MeV در پایین‌ترین انرژیهای اندازه گیری شده، توصیف بیشینه فاکتور–S برای سیستمهای نیمه‌سنگین ^{58}Ni+^{58}Ni، ^{58}Ni+^{54}Fe و ^{64}Ni+^{64}Ni امکانپذیر میگردد. از این رو، پیش بینی میشود که با گسترش اندازه‌گیریهای سطح مقطعهای همجوشی برای سیستمهای نیمه سبک ^{48}Ca+^{48}Ca و ^{36}S+^{64}Ni به انرژیهای بمبارانی متناظر با رفتار نرم ماده هسته‌ای، مشابه سیستمهای سنگین تر، افت سریع تر در سطح مقطعهای همجوشی و ظهور بیشینه در فاکتور S قابل مشاهده خواهد بود. نتایج بدست آمده برای سیستمهای نیمه‌سبک ^{48}Ca+^{48}Ca و ^{36}S+^{64}Ni برترتیب مقادیری حدود E≈44 MeV و E≈50 MeV را برای مشاهده بیشینه در فاکتور S پیش بینی میکنند.

مرجع‌ها

[۱] B. B. Back *et al.*, "Recent developments in heavy-ion fusion reactions"; *Rev. Mod. Phys.* **86** (2014) 317.
[۲] C. L. Jiang *et al.*, "Influence of Nuclear Structure on Sub-Barrier Hindrance in Ni+Ni Fusion"; *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004) 012701.
[۳] M. Beckerman *et al.*, "Near-and sub-barrier fusion of ^{58}Ni with ^{58}Ni"; *Phys. Rev. C* **23** (1981) 1581.
[۴] A. M. Stefanini *et al.*, "Fusion hindrance for ^{58}Ni+^{54}Fe"; *Phys. Rev. C* **82** (2010) 014614.
[۵] C. L. Jiang *et al.*, "Expectations for ^{12}C and ^{16}O induced fusion cross sections at energies of astrophysical interest"; *Phys. Rev. C* **75** (2007) 015803.
[۶] A. M. Stefanini *et al.*, "How does fusion hindrance show up in medium-light systems? The case of ^{48}Ca+^{48}Ca"; *Phys. Lett. B.* **679** (2009) 95.
[۷] G. Montagnoli *et al.*, "Sub-barrier fusion of ^{36}S+^{64}Ni and other medium-light systems"; *Phys. Rev. C* **82** (2010) 064609.
[۸] H. Esbensen, C. L. Jiang, and A. M. Stefanini; "Hindrance in the fusion of ^{48}Ca+^{48}Ca"; *Phys. Rev. C* **82** (2010) 054621.
[۹] Ş. Mişicu and H. Esbensen; "Signature of shallow potentials in deep sub-barrier fusion reactions"; *Phys. Rev. C* **75** (2007) 034606.
[۱۰] W. M. Seif *et al.,* "Role of internal kinetic energy in the surface density-overlap region of fusing nuclei"; *Phys. Rev. C* **111** (2025) 044307.
[۱۱] W. M. Seif; "Probing the equation of state for cold nuclear matter in fusion reactions"; *Eur. Phys. J. A* **38** (2008) 85.
[۱۲] O. N. Ghodsi and F. Torabi; "Effect of nuclear matter incompressibility on the ^{16}O+^{208}Pb system"; *Phys. Rev. C* **93** (2016) 064611.
[۱۳] S. Rana *et al.*, "Nuclear incompressibility and its enduring impact on fusion cross sections"; *Phys. Rev. C* **109** (2024) 044613.
[۱۴] T. Ghasemi and O. N. Ghodsi; "Variation of nuclear matter properties in fusion reaction of the ^{64}Ni+^{64}Ni"; *Nucl. Phys. A* **996** (2020) 121691.
[۱۵] D. Vautherin and D. M. Brink; "Hartree-Fock calculations with skyrme's interaction. I. Spherical nuclei"; *Phys. Rev. C* **5** (1972) 626.
[۱۶] M. Dutra *et al.*, "Skyrme interaction and nuclear matter constraints"; *Phys. Rev. C* **85** (2012) 035201.
[۱۷] K. Hagino *et al.*, "A program for coupled-channels with all order couplings for heavy ion fusion reactions"; *Comput. Phys. Commun.* **123** (1999) 143.
[۱۸] K. Cheng and C. Xu; "Systematic investigation of "hindrance" in heavy-ion fusion reactions at deep sub-barrier energies"; *Nucl. Phys. A* **992** (2019) 121642.
[۱۹] A. M. Stefanini *et al.*, "Near-barrier fusion and barrier distribution of ^{58}Ni+^{54}Fe"; *Phys. Rev. C* **81** (2010) 037601.
[۲۰] C. L. Jiang *et al.*, "Fusion hindrance for Ca+Ca systems: Influence of neutron excess"; *Phys. Rev. C* **82** (2010) 041601.

پتانسیل تک‌ذره‌ای ماده هسته‌ای نامتقارن در چارچوب روش LOCV

زیارتی، زهرا؛ مشفق، حمیدرضا
دانشکده فیزیك دانشگاه تهران، انتهاي خیابان کارگرشمالي، تهران

چکیده

پتانسیل تک‌ذره‌ای و جرم مؤثر پروتون و نوترون در ماده هسته‌ای نامتقارن با استفاده از روش وردشی با پایین‌ترین مرتبه قید (LOCV) مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین وابستگی این کمیت‌ها به تکانه، چگالی و پارامتر عدم تقارن β مورد مطالعه قرار می‌گیرد. برهم‌کنش Reid-68 به‌عنوان پتانسیل ورودی نوکلئون-نوکلئون در نظر گرفته شده است. نتایج نشان می‌دهد که در چگالی کل ثابت، با کاهش نسبت چگالی پروتون به نوترون، پتانسیل تک‌ذره‌ای پروتون منفی‌تر خواهد بود. علاوه بر این، مشاهده می‌شود که جرم مؤثر پروتون و نوترون به‌عنوان تابعی از پارامتر عدم تقارن، رفتار متقابلی از خود نشان می‌دهند؛ به‌گونه‌ای که با افزایش این پارامتر، روند تغییرات آن‌ها در جهت‌های مخالف یکدیگر قرار می‌گیرد. نتایج به‌دست آمده با آنچه از سایر روش‌های دیگر به‌دست آمده‌اند، مقایسه شده و همخوانی دارند.

واژه های کلیدی: *پتانسیل تک‌ذره‌ای؛ جرم مؤثر؛ روش LOCV ؛ ماده هسته‌ای نامتقارن؛ پارامتر عدم تقارن*

Single-particle potential of asymmetric nuclear matter within the LOCV framework

Ziarati, Zahra; Moshfegh, Hamidreza
Department of Physics, University of Tehran, Tehran

Abstract

The single-particle potential (SPP) and effective masses of protons and neutrons in asymmetric nuclear matter are investigated within the lowest order constrained variational (LOCV) method. The dependence of these quantities on momentum, density, and the asymmetry parameter is also studied. The Reid-68 interaction is considered as the input nucleon-nucleon potentials. Our results show that, at a fixed total density, the SPP of the proton becomes more negative as the proton-to-neutron density ratio decreases. Furthermore, it is found that the effective masses of protons and neutrons exhibit opposite behavior as function of the asymmetry parameter, such that their variations proceed in opposite directions with increasing asymmetry. The obtained results were compared with those derived from other methods and showed good agreement.

***Keywords**: Single-particle potential; effective mass; LOCV method; asymmetric nuclear matter; asymmetry parameter*

PACS No. 21

مقدمه

ماده هسته‌ای، سامانه‌ای بسیار جالب و در عین حال پیچیده است که از نوکلئون‌ها، یعنی پروتون‌ها و نوترون‌ها، تشکیل شده و تحت تاثیر برهم‌کنش قوی هسته‌ای رفتار می‌کند. مطالعه ساختار و ویژگی‌های ماده هسته‌ای یکی از مهم‌ترین موضوعات در فیزیک هسته‌ای نوین است. در میان ویژگی‌های مختلف ماده هسته‌ای، پتانسیل تک‌ذره‌ای از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است؛ زیرا این کمیت نقش اساسی در توصیف رفتار نوکلئون‌ها و پیش‌بینی خواص سامانه‌های هسته‌ای ایفا می‌کند و یکی از عناصر بنیادی در محاسبات بس‌ذره‌ای ماده هسته‌ای است. این پتانسیل بیانگر پتانسیلی است که یک نوکلئون در ماده هسته‌ای، به‌طور میانگین از سوی تمام ذرات دیگر در آن قرار دارد. با کمک پتانسیل تک‌ذره‌ای برای توصیف حرکت ذره در محیط، به‌جای حل چندین معادله جفت‌شده، یک معادله نیمه‌کلاسیکی خواهیم داشت که اثرات محیط در جرم مؤثر لحاظ می‌گردد. خواص تک‌ذره‌ای ماده هسته‌ای با استفاده از روش‌های مختلفی مطالعه شده است؛ از جمله بروکنر-هارتری-فوک [۱] و دیراک-بروکنر-هارتری-فوک [۲] و همچنین محاسبات وردشی زنجیره ابرشبکه فرمیونی [۳].

در مرجع [۴] پتانسیل تک‌ذره‌ای تنها برای ماده هسته‌ای متقارن محاسبه شده و محاسبات مربوط به ماده هسته‌ای نامتقارن در چارچوب این مرجع ارائه نشده است. با توجه به اهمیت ماده هسته‌ای نامتقارن در بسیاری از مسائل فیزیک هسته‌ای، از جمله در بررسی ساختار هسته‌های غنی از نوترون و مطالعه خواص ماده در ستارگان نوترونی، تعمیم این محاسبات به حالت نامتقارن از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. لذا در این پژوهش قصد داریم پتانسیل تک‌ذره‌ای را برای ماده هسته‌ای نامتقارن در این چارچوب محاسبه کنیم.

فرمولبندی روش LOCV

روش وردشی با پایین‌ترین مرتبه قید که با نام LOCV شناخته می‌شود، یک رویکرد وردشی کارآمد برای بررسی سیستم‌های بس‌ذره‌ای هم‌بسته، نظیر مایع هسته‌ای و ستاره‌های نوترونی محسوب می‌شود. این روش، روشی بس‌ذره‌ای مبتنی بر بسط خوشه‌ای است. ایده مرکزی این روش بر پایه ساده‌سازی توابع موج پیچیده سیستم‌های فرمیونی یا بوزونی از طریق تابع موج جسترو استوار است که در آن اثر هم‌بستگی‌های جفتی به‌صورت حاصل‌ضرب توابع هم‌بستگی دوتایی در تابع موج حالت‌پایه بدون برهمکنش است.

کمینه‌سازی تابعی انرژی تحت قید طبیعی بهنجارش بر توابع هم‌بستگی، به مجموعه معادلات اویلر-لاگرانژ برای توابع هم‌بستگی منجر می‌شود.

هامیلتونی ماده هسته‌ای و یک سیستم بس‌ذره‌ای معمولا به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = \sum_i T_i + \sum_{i\neq j} V_{ij} \qquad (۱)$$

که $T_i = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_i^2$ و V_{ij} به‌ترتیب عملگرهای انرژی جنبشی تک‌ذره‌ای و پتانسیل برهمکنش دوجسمی نوکلئون-نوکلئون هستند. ماهیت V_{ij} به‌طور معمول پیچیده است. این پتانسیل‌ها را می‌توان به شکل زیر نوشت [۵]:

$$V_{ij} = \sum_{i,\alpha} v_\alpha^i(ij) O_\alpha^i |\alpha\rangle\langle\alpha| \qquad (۲)$$

در اینجا شاخص $\alpha = \{J, L, S, T, M_T\}$ اعداد کوانتومی جفت‌ذره برای هر کانال برهم کنشی است. J تکانه زاویه‌ای کل، L تکانه زاویه‌ای مداری، S اسپین کل، T ایزواسپین کل و M_T مؤلفه سوم ایزواسپین کل است. برای پتانسیل‌های نوع Reid-68 تعداد مولفه های پتانسیل $i = 3$ است. در این رابطه، O_α^i عملگرهای تصویر هستند که شامل عملگر واحد، عملگر تانسوری S_{12} و عملگر جفت‌شدگی اسپین-مدار $L.S$ هستند [۵].

برای محاسبه کران بالا برای انرژی حالت‌پایه، تابع موج چندجسمی آزمایشی به‌صورت زیر درنظر می‌گیریم:

$$\psi_v = F\phi \qquad (۳)$$

که در آن ϕ، دترمینان اسلاتری از موج‌های تخت A نوکلئون مستقل است و F عملگر هم‌بستگی A-جسمی است که با نوع جسترو تقریب زده می‌شود، یعنی:

$$F(1 \dots A) = S\prod_{i>j} F(ij) \qquad (۴)$$

S عملگر متقارن‌ساز است. عملگرهای هم‌بستگی دوجسمی $F(ij)$، که به چگالی وابسته‌اند، به‌صورت زیر تعریف می‌شوند [۶]:

$$F(ij) = \sum_{\alpha,p=1}^{3} f_\alpha^{(p)} O_\alpha^{(p)}(ij) \qquad (۵)$$

با انجام بسط خوشه‌ای بر مقدار چشم‌داشتی انرژی، می‌توان انرژی را به‌صورت زیر نوشت:

$$\frac{E[f]}{A} = \frac{1}{A}\frac{\langle\psi_v|H|\psi_v\rangle}{\langle\psi_v|\psi_v\rangle} = E_1 + E_2 + E_3 + \cdots \geq E_0 \qquad (۶)$$

که در آن E_0 انرژی حالت‌پایه است. در پایین‌ترین مرتبه، رشته بالا را پس از E_2 قطع می‌کنیم. جمله تک‌جسمی E_1 مستقل از توابع f بوده و همان انرژی جنبشی مدل گاز فرمی برای ماده هسته‌ای نامتقارن است:

$$E_1 = \sum_{i=n,p} \frac{3}{5}\frac{\hbar^2 k_f^{i\,2}}{2m}\frac{\rho_i}{\rho} \qquad (۷)$$

که در آن k_f^i و ρ_i به‌ترتیب تکانه فرمی و چگالی ذره i هستند (نوترون و پروتون) و $\rho = \rho_n + \rho_p$ چگالی باریونی را نشان می‌دهد. همچنین، انرژی دوجسمی به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$E_2 = \frac{1}{2A}\sum_{ij}\langle ij|v(12)|ij - ji\rangle \qquad (۸)$$

که $|ij\rangle$ حالت‌های کوانتومی دوذره‌ای و $v(12)$:

$$v(12) = -\frac{\hbar^2}{2m}[F(12), [\nabla_{12}^2, F(12)]] + F(12)V(12)F(12) \qquad (۹)$$

عملگر برهمکنش مؤثر است. حال می‌توان انرژی دوجسمی رابطه (۸) را نسبت به تغییرات توابع موج $f_\alpha^{(p)}$ کمینه کرد، مشروط بر آن‌که قید بهنجارش در پایین‌ترین مرتبه بسط خوشه‌ای به شکل زیر برقرار باشد:

$$\frac{1}{A}\sum_{ij}\langle ij|f_P^{MT\,2}(12) - f^2(12)|ij - ji\rangle = 1 \qquad (۱۰)$$

که درآن $f_P^{MT\,2}(r)$ توابع پائولی اصلاح شده هستند که برای ماده هسته‌ای نامتقارن به‌صورت زیر در می‌آیند:

$$f_P^{MT}(r) = \begin{cases} [1 - \frac{9}{2}(\frac{J_1(k_f r)}{k_f r})^2]^{-\frac{1}{2}}, M_T = \pm 1 \\ 1 \quad , M_T = 0 \end{cases} \qquad (۱۱)$$

محاسبه پتانسیل تک‌ذره ای

انرژی تک‌ذره‌ای به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$e(k_i) = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} + U(k_i) \qquad (۱۲)$$

که پتانسیل تک‌ذره‌ای در چارچوب روش LOCV به این صورت خواهد بود [۴]:

$$U(k_i) = \sum_j \langle ij|v(12)|ij - ji\rangle \qquad (۱۳)$$

با دوبار وارد کردن یک مجموعه کامل ازحالات دوذره‌ای در رابطه (۱۳) و انجام محاسبات، پتانسیل تک‌ذره‌ای برای ماده هسته‌ای نامتقارن به صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$U(k_i) = \frac{4\pi}{\Omega}\sum_{k_j}\sum_{\alpha}\sum_{m_{t1}m_{t2}} (2J+1) \times \left(\frac{1-(-1)^{L+S+T}}{2}\right)|\langle m_{t1}m_{t2}|TM_T\rangle|^2 \times \int r^2 dr j_l^2(k_{ij}r)\, v^\alpha(r) \qquad (۱۴)$$

در این رابطه، $\vec{k}_i$ اعداد موج ذرات در دریای فرمی، $k_{ij} = \frac{1}{2}|(\vec{k}_i - \vec{k}_j)|$ ،$r = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ فاصله نسبی دو ذره

و $v^{\alpha}(r) = \langle \alpha | v(r) | \alpha \rangle$ است. همچنین m_{t1} و m_{t2} مؤلفه سوم ایزواسپین دو نوکلئون هستند. در این مرحله با تبدیل مجموع گسسته روی تکانه‌ها به یک انتگرال پیوسته، چگالی حالات نوکلئون‌ها را در ماده هسته‌ای لحاظ می‌کنیم. توزیع تکانه‌ای $n(k)$ برای یک سیستم فرمیونی در دمای صفر به‌صورت تابع پله خواهد شد. سرانجام پتانسیل تک‌ذره‌ای را به‌صورت زیر به‌دست می‌آوریم:

$$U(k_i) = \frac{1}{\pi} \sum_{\alpha} \sum_{m_{t1} m_{t2}} (2J+1) \times \left(\frac{1-(-1)^{L+S+T}}{2} \right) |\langle m_{t1} m_{t2} | T M_T \rangle|^2 \times \int r^2 dr I_l\left(k_i, k_j^f, r\right) v^{\alpha}(r) \quad (۱۵)$$

که $I_l\left(k_i, k_j^f, r\right)$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$I_l\left(k_i, k_j^f, r\right) = 2\pi \int_0^{k_j^f} \int_0^{\pi} k_j^2 j_l^2(k_{ij} r) \sin\theta \, d\theta \, dk_j \quad (۱۶)$$

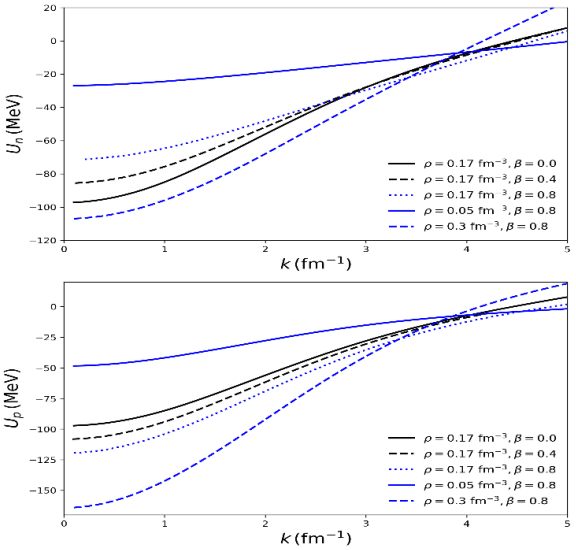
نتایج

نخست دسته معادلات جفت‌شده حاصل از کمینه کردن انرژی حاکم بر توابع همبستگی به روش عددی حل شده و توابع همبستگی و انرژی سیستم به‌دست می‌آید. به دنبال آن پتانسیل مؤثر در هر کانال به ازای هر چگالی و هر پارامتر عدم تقارن β که به صورت:

$$\beta = \frac{(\rho_n - \rho_p)}{(\rho_n + \rho_p)} \quad (۱۷)$$

تعریف می‌شود، به‌دست می‌آید. با قراردادن آن در معادله (۱۵) پتانسیل تک‌ذره‌ای را در هر چگالی ماده هسته‌ای برحسب تکانه و پارامتر عدم تقارن محاسبه می‌کنیم. در این مقاله برای درک پتانسیل تک‌ذره‌ای ماده هسته‌ای نامتقارن که برای نخستین بار در چارچوب روش LOCV انجام می‌شود؛ پتانسیل ساده‌ای که واجد اصلی‌ترین عملگرهای نیروی هسته‌ای باشد یعنی Reid-68 را به خدمت گرفته‌ایم. شکل (۱) پتانسیل تک‌ذره‌ای رادرسه چگالی مختلف برای سه پارامتر عدم تقارن را نشان می‌دهد.

با توجه به شکل (۱)، با افزایش پارامتر عدم تقارن β، پتانسیل تک‌ذره‌ای پروتون به‌طور فزاینده‌ای جاذب‌تر می‌شود، درحالی که برای پتانسیل تک‌ذره‌ای نوترون روندی معکوس مشاهده می‌شود. دلیل این رفتار آن است که با کاهش چگالی پروتون‌ها در ماده نامتقارن، برهمکنش غالبی که یک پروتون منفرد تجربه می‌کند، برهمکنش پروتون-نوترون است. از آن‌جا که برهمکنش میان پروتون و نوترون معمولا جاذب‌تر از برهمکنش میان نوکلئون‌های همنوع (پروتون-پروتون یا نوترون-نوترون) است، پتانسیل مؤثر پروتون در چنین محیطی جاذب‌تر می‌شود. با توجه به شکل (۱)، پتانسیل تک‌ذره‌ای برای $\beta = 0$ (یعنی تعداد پروتون‌ها و نوترون‌ها یکی است) که معادل پتانسیل تک‌ذره‌ای در ماده متقارن است با نتایج پتانسیل Reid-68 مرجع [۴]، کاملا مطابقت دارد. از سوی دیگر، همان‌گونه که انتظار می‌رود، وابستگی این پتانسیل‌ها به پارامتر عدم تقارن در تکانه‌های بزرگ‌تر، ضعیف‌تر می‌شود. همچنین در شکل (۱) رفتار

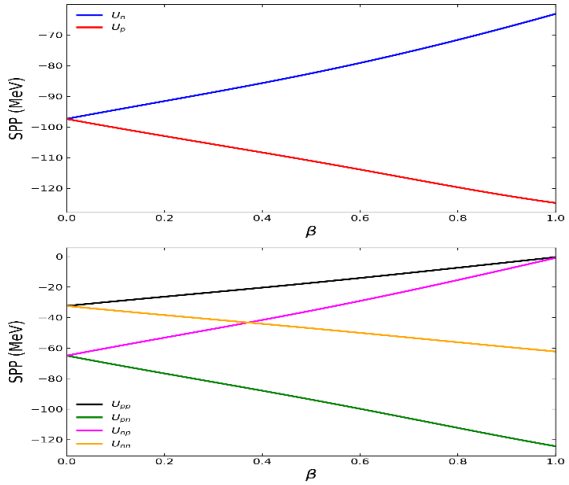


شکل ۱: پتانسیل تک‌ذره‌ای نوترون (شکل بالا) و پروتون (شکل پایین) بر حسب تابعی از تکانه نوکلئون برای سه مقدار پارامتر β رسم شده است. تکانه فرمی میانگین $k = 1.36\, fm^{-1}$ است. همچنین پتانسیل‌های تک‌ذره‌ای نوترون و پروتون در یک پارامتر عدم تقارن ثابت $\beta = 0.8$ در سه چگالی مختلف رسم شده است (نمودار آبی).

پتانسیل تک‌ذره‌ای پروتون و نوترون در یک پارامتر عدم تقارن ثابت و به ازای سه چگالی مختلف رسم شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، با افزایش چگالی، کاهش فاصله میان‌ذره‌ای منجر به افزایش تعداد همسایگان در شعاع برد هسته‌ای و در نتیجه تقویت جاذبه میان آن‌ها می‌شود که پتانسیل تک‌ذره‌ای را به سمت مقادیر منفی‌تر سوق می‌دهد. در محیطی با عدم تقارن $\beta = 0.8$ (غنی از نوترون)، این اثر در کنار برهمکنش‌های ایزواسپینی، منجر به شکافت چشمگیر پتانسیل میان نوترون و پروتون شده و نشان‌دهنده وابستگی شدید ساختار میدان میانگین به تراکم محیط است.

شکل (۲) این رفتارها را به وضوح نشان می‌دهد. در شکل (۲)، پتانسیل‌های تک‌ذره‌ای در تکانه $k = 0$ رسم شده‌اند. این مقدارها برحسب پارامتر عدم تقارن رسم شده است. U_{pp} و U_{np} میدان‌هایی هستند که در زمینه پروتونی ایجاد می‌شوند. در این حالت U_{pp} پتانسیلی است که پروتون از طرف پروتون‌ها احساس می‌کند و U_{np} پتانسیلی است که نوترون در محیط پروتون‌ها احساس می‌کند. وقتی پارامتر عدم تقارن به مقدار $\beta = 1$ برسد (یعنی محیط فقط از نوترون‌ها تشکیل شده باشد و پروتونی وجود نداشته باشد)، این میدان‌های مربوط به پس‌زمینه پروتونی باید صفر شوند، چون دیگر پروتونی در محیط نیست که چنین برهمکنشی را ایجاد کند و مطابق شکل (۲) طبق انتظارمان این دو به سمت صفر می‌روند. به‌طور مشابه، U_{nn} و U_{pn} میدان‌هایی هستند که در پس‌زمینه نوترونی تولید می‌شوند. U_{nn} پتانسیلی است که نوترون از طرف نوترون‌ها احساس می‌کند و U_{pn} پتانسیلی است که پروتون از حضور

نوترون‌ها تجربه می‌کند. تغییرات U_{pn} بزرگ‌تر از U_{nn} است و دلیل این موضوع به کانال‌های ایزواسپینی $T=0$ در برهمکنش هسته‌ای مربوط می‌شود. این کانال‌ها فقط در برهمکنش پروتون-نوترون وجود دارد و باعث می‌شوند برهمکنش بین پروتون و نوترون قوی‌تر و حساس‌تر به تغییرات محیط باشد. اما در برهمکنش نوترون-نوترون چنین کانالی وجود ندارد؛ بنابراین تغییرات U_{nn} کمتر است [۷].



شکل ۲: پتانسیل‌های تک‌ذره‌ای در $k=0$ و $\rho=0.17fm^{-3}$ برحسب تابعی از پارامترعدم تقارن رسم شده است. شکل بالا نمودار پتانسیل تک ذره‌ای U_p و U_n را نشان می‌دهد. U_p از جمع نمودارهای U_{pn} و U_{pp} پایین و U_n از جمع نمودارهای U_{np} و U_{nn} پایین است [۷].

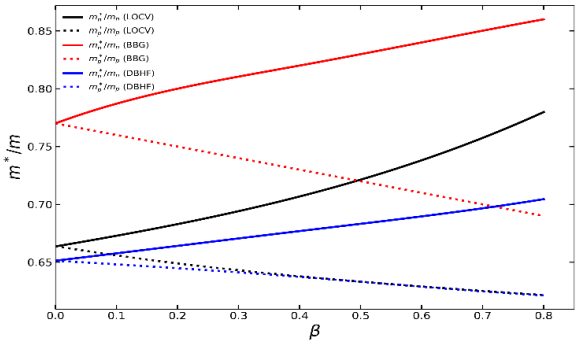
یکی از کمیت‌های مهمی که می‌توان از پتانسیل تک‌ذره‌ای به‌دست آورد، جرم مؤثر است که به‌صورت زیر بدست می‌آید:

$$\frac{m^*}{m}=\frac{k}{m}\left[\frac{de(k)}{dk}\right]^{-1} \qquad (۱۸)$$

درشکل (۳)، مقادیر جرم مؤثر پروتون ونوترون به‌عنوان تابعی از پارامتر عدم تقارن β نمایش داده شده است. نتایج محاسبات ما نشان می‌دهد که جرم مؤثر نوترون از جرم مؤثر پروتون بزرگ‌تر است؛ این رفتار با یافته‌های محاسبات میکروسکوپی غیرنسبیتی نیز سازگار است [۷]. درچارچوب غیرنسبیتی، می‌توان با استدلالی ساده بر مبنای انحنای پتانسیل تک‌ذره‌ای نشان داد که هرچه پتانسیل جاذب‌تر باشد (یعنی عمق بیشتری داشته باشد)، مقدار جرم مؤثر کاهش می‌یابد. به عبارت دیگر، از آن جا که پتانسیل تک‌ذره‌ای پروتون معمولا جاذب‌تر از پتانسیل تک‌ذره‌ای نوترون است، انحنای بیشتری در منحنی انرژی تک‌ذره‌ای آن ایجاد می‌گردد و در نتیجه جرم مؤثر پروتون کوچک‌تر از جرم مؤثر نوترون به‌دست می‌آید. این تفاوت در جرم مؤثر نوکلئون‌ها، بازتابی از ویژگی‌های ایزواسپینی برهمکنش هسته‌ای است؛ بدین معنا که ساختار پتانسیل مؤثر نوترون و پروتون در ماده هسته‌ای نامتقارن، تحت تاثیر ترکیب هسته قرار گرفته و باعث ایجاد این نابرابری در جرم مؤثر می‌گردد.

نتیجه گیری

در این پژوهش، برای نخستین بار وابستگی پتانسیل تک‌ذره‌ای و جرم مؤثر به تکانه، چگالی و پارامتر عدم تقارن در ماده هسته‌ای نامتقارن درچارچوب روش LOCV با پتانسیل ورودی نوکلئون-نوکلئون Reid-68 مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد با افزایش پارامتر عدم تقارن، پتانسیل‌های تک‌ذره‌ای پروتون و نوترون رفتاری متمایز از خود بروز می‌دهند.



شکل ۳: جرم مؤثر نوترون و پروتون به عنوان تابعی از پارامتر عدم تقارن β، در تکانه فرمی $k=1.36\ fm^{-1}$ ثابت نشان داده شده است. (نمودار قرمز مربوط به مرجع[۷] که با روش BBG است و نمودار آبی رنگ مربوط به روش DBHF است [۸].)

همچنین، تحلیل برهمکنش‌ها نشان داد که نقش کانال ایزواسپینی $T=0$ در برهمکنش‌های پروتون-نوترون، منجر به تغییرات بزرگ‌تر و حساسیت بیشتر این پتانسیل‌ها نسبت به تغییرات پارامتر عدم تقارن، در مقایسه با پتانسیل‌های همنوع (پروتون-پروتون و نوترون-نوترون) می‌شود. توافق مطلوب نتایج حاصل از این پژوهش با محاسبات پیشرفته روش‌های بس ذره‌ای نظیر دیراک-بروکنر-هارتری-فوک (DBHF) و بروکنر-بته-گلدستون (BBG)، اعتبار و دقت روش LOCV را در پیش‌بینی خواص ماده هسته‌ای تایید می‌کند. این یافته‌ها علاوه بر توسعه دانش بنیادی در فیزیک هسته‌ای، داده‌های پایه و حیاتی را برای مدل‌سازی معادله حالت در برخورد یون‌های سنگین و بررسی ساختار ستاره‌های نوترونی فراهم می‌آورد و بستری مناسب برای مطالعات آتی در شرایط چگالی و دمایی متفاوت و همچنین به‌کار گرفتن پتانسیل‌های مدرن و پیچیده‌تر ایجاد می‌کنند.

مرجع‌ها

[۱] Zuo, W., Giansiracusa, G., Lombardo, U., Sandulescu, N., and Schulze, H.-J. Single-particle properties in neutron matter from extended brueckner theory. Phys. Lett. B, 421:1–7, 1998.
[۲] C.-H. Lee, T. T. S. Kuo, G. Q. Li, and G. E. Brown, *Phys. Lett. B* **412**, 235–239 (1997)
[۳] Friedman, B. and Pandharipande, V.R. The single particle potential in nu clear matter. Physics Letters B, 100(3):205–208, 1981.
[۴] Modarres, M. and Rajabi, A. The single-particle potential of nuclear matter in the locv framework. Nucl. Phys. A, 867(1):1–11, 2011.
[۵] H.R. Moshfegh and M. Modarres, Nuclear Physics A 759 (2005) 79–91. doi:10.1016/j.nuclphysa.2005.04.021
[۶] J. C. Owen, R. F. Bishop, and J. M. Irvine, *Nucl. Phys. A* **277**, 45–61 (1977)
[۷] I. Bombaci and U. Lombardo, Phys. Rev. C 44, 1892 (1991).
[۸] F. Sammarruca, W. Barredo, and P. Krastev, *arXiv:nucl-th/0411053*.

گسیلِ نوترینو از ستاره ی نوترونیِ خارج از تعادل بتا:

اثر اندرکنش واقعی نوکلئون ها و حضور هایپرون های آزاد

دهقان نیری، اکرم[۱]؛ مشفق، حمیدرضا[۲]

[۱] دانشکده ی فیزیک دانشگاه بوعلی سینا، چهار باغ شهید احمدی روشن، همدان

[۲] دانشکده ی فیزیک دانشگاه تهران، انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران

چکیده

در پژوهش حاضر، طیف عددی نوترینوهای غیر تعادلی که از ستاره ی نوترونی سرد ($k_BT \leq 0.1MeV$) خارج از تعادل بتا گسیل می شوند تا ماده ی ستاره ای را به وضعیت تعادل بازگردانند، محاسبه می شود. این کمیت عمدتا به وسیله ی فضای فاز غیرگرمایی که حاصلِ خروج از تعادل بتاست تعیین می شود. گاف پتانسیل شیمیایی ($\delta\mu$) مشخصه ی این فضای فاز بوده و به چگونگی توصیف ماده ی هسته ای تشکیل دهنده ی ستاره و حضور درجات آزادی دیگر همچون هایپرون ها بستگی قوی دارد. محاسبه ی پیش رو با کاربست یک توصیف واقعی از ماده ی هسته ای از مجرای روش بس ذره ایِ LOCV و فرض وجود هایپرون های آزاد انجام می گیرد.

واژه های کلیدی: *ستاره ی نوترونی، معادله ی حالت هسته ای، هایپرون های آزاد، انرژی تقارنی هسته ای، گسیل نوترینو ، روش بس ذره ای LOCV*

Neutrino Emission from Neutron Star out of Beta Equilibrium:

Impacts of Realistic Nuclear Interaction and Free Hyperons Presence

Dehghan Niri, Akram[1]; Moshfegh, Hamidreza[2]

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

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

Abstract

In this study, the number spectra of non-equilibrium neutrinos emitted from the beta reactions within cold neutron star ($k_BT \leq 0.1MeV$) out of beta equilibrium to construct the new equilibrium state, is calculated. This quantity is mainly determined by the non-thermal phase space opened by non-equilibrium situation. Chemical potential gap ($\delta\mu$) is the characteristic of this phase space and depends strongly on the description of the neutron star nuclear matter and the presence of other degrees of freedom like hyperons. Our calculation is done under the application of a realistic description of nuclear matter within LOCV many-body method and the assumption of the presence of free hyperons in the neutron star core.

***Keywords**: neutron star, nuclear equation of state, free hyperons, neutrino emission, LOCV many-body method*
PACS No. 26

مقدمه

فیزیک ستاره های نوترونی و خواص مشاهده پذیرشان بستری ست مناسب برای بررسی معادله ی حالت ماده ی هسته ای بسیار چگال.

یکی از این مشاهده پذیرها، آهنگ سرد شدن ستاره است و مهمترین مجرای آن پیش از افت دما به $10^8 K$ گسیل نوترینو از فرآیندهای نوترینوزای گوناگونیست که در لایه های درونی ستاره ی نوترونی رخ می دهند[۱]. گسیلندگی نوترینوها با فرض تعادل نسبت به اندرکنش های ضعیف محاسبه می شود. این یعنی زمانی که واپاشی بتا و وارون آن $n \to p + e + \bar{\nu}_e$ و $p + e \to n + \nu_e$، که در ادبیات مربوط به ستاره های نوترونی با نام *آرکا* شناخته می شوند، با آهنگ یکسانی رخ دهند. با توجه به تبهگنی شدید حاکم بر ماده ی ستاره ای سرد، این یعنی $\mu_n = \mu_p + \mu_e$ (μ_i پتانسیل شیمیایی ذره ی نوع i است) و این هم یعنی برابریِ گسیلندگیِ نوترینوها و پاد نوترینوهای تولیدی.

بسته به کسر پروتونی تعادلی در هر چگالی باریونی دو نوع فرآیند آرکا، یکی مستقیم و دیگری اصلاح شده، می تواند رخ دهد و منجر به تولید نوترینو شود. در فرآیند آرکای مستقیم بقای انرژی و تکانه به طور همزمان برقرارند، درغیر این صورت فرآیند دیگری به نام آرکای اصلاح شده واقع می شود که در آن بقای انرژی و تکانه با دخالت یک باریون اضافه که وظیفه ی حمل تکانه ی اضافی را بر عهده می گیرد، برقرار می شود [۲]. چون فرآیند آرکای مستقیم در مدل مورد استفاده ی ما برای توصیف ماده ی هسته ای رخ نمی دهد تنها به فرآیند آرکای اصلاح شده می پردازیم.

به راحتی می توان پدیده های میکروسکوپیک و خارجی متعددی را متصور شد که منجر به تغییر چگالی ماده ی ستاره ی نوترونی شوند. با توجه به تبهگنی شدید ماده ی ستاره ای بسیاری از این پدیده ها آنقدر سریعند (سریع تر نسبت به آهنگ واکنش های بتایی) که می توانند ماده ی ستاره ای را از حالت تعادل بتا خارج سازند (زنش های شعاعی و ارتعاشات ستاره های نوترونی، جذب جرم از ستاره ی مجاور و ...). در این پدیده ها، خروج از تعادل شیمیایی، که توسط مقدار و علامت گاف پتانسیل شیمیایی $\delta\mu = \mu_n - \mu_p - \mu_e$ اندازه گیری و مشخص می شود، عامل اصلی و تعیین کننده ی طیف عددی نوترینوهای غیرتعادلی گسیلی و طعمشان (نوترینو یا پادنوترینو بودن) به شمار می رود. این کمیت که مستقیما به ویژگی های وابسته به چگالی ماده ی هسته ای (انرژی تقارنی) در چگالی های بالاتر از چگالی اشباع مرتبط است می تواند مجرایی برای بررسی خواص ماده ی هسته ای بسیار چگال باشد. ما مرکز ستاره ی نوترونی را با کاربست یک روش بس ذره ای میکروسکوپیک (نسخه ی گسترده ی اصلاح شده از روش وردشی مقید با کمترین مرتبه –LOCV– [۳]) با پتانسیل های دو جسمی واقعی (AV18 و Reid68) و همچنین اثر نیروی سه جسمی (از نوع پدیده شناسانه ی آربانا ۶ (UIX)) توصیف کرده ایم.

طیف عددی نوترینوها و گاف انرژی پتانسیل

ساده ترین مدل برای هسته ی ستاره های نوترونی سرد، ترکیبی متشکل از نوترون ها، پروتون ها، الکترون ها و احتمالا میوئون ها – و نیز در چگالی های بالاتر هایپرون های اولیه (Σ^- و Λ^0) – است. فرض می کنیم که نوترون ها و پروتون ها مایعِ فرمیِ *عادی* تشکیل داده اند و الکترون ها و میوئون ها – و هایپرون ها به شرط حضور – گاز فرمی غیر اندرکنشی. هریک از این ذرات سیستمی را تشکیل می دهد که بسیار تبهگن بوده (یعنی $\mu_i >> k_B T$ که k_B ثابت بولتزمن است) و در تعادل ترمودینامیکی مربوط به خود است.

واپاشی بتای نوترون اصلاح شده ($n \to p$):

$$n + N \to N + p + e^- + \bar{\nu}_e \qquad (۱)$$

و دام اندازی الکترون اصلاح شده ($p \to n$):

$$p + N + e^- \to N + n + \nu_e \qquad (۲)$$

که $N = n$ یا p. اگر این دو فرایند با آهنگ یکسانی رخ دهند تعادل بتا برقرار است. (این یعنی $\Gamma_{n\to p} = \Gamma_{p\to n}$، که Γ

عبارتست از گسیلندگی عددی نوترینو- در اینجا نوترینوی الکترون- و منظور از گسیلندگی، تعداد نوترینوها (پادنوترینوها) یی است که از واحد حجم در واحد زمان گسیل می شوند.)

فرض کنیم ستاره ی نوترونی مورد نظر در اثر یک پدیده ی اخترفیزیکی دچار یک تغییر چگالی سریع شود. طیف عددی نوترینوهای غیرتعادلی، که غالب شان غیرگرمایی هستند، با رابطه ی $\frac{d\Gamma}{dy}$ ، که $y=\frac{E_\nu}{k_BT}$ و E_ν انرژی نوترینوست، داده می شود:

$$\frac{d\Gamma^{(m)}_{n\to p}}{dy}=5\times10^{21}\frac{Y_p^{1/3}Y_e^{2/3}}{Y_n^{2}}\frac{n_0}{n_b}\left(\frac{m_n^*}{m_n}\right)^3\left(\frac{m_p^*}{m_p}\right) \quad (۳)$$
$$\times\mathcal{R}(k_{F_n})\,T_9^7y^2\mathcal{F}_m(y-\xi)\,[cm^{-3}.s^{-1}]$$

در این رابطه m_i^* و m_i به ترتیب جرم موثر و جرم خالص و فراوانی ذره ی نوع i هستند و $Y_i=n_i/n_b$ و $T_9=T/10^9$ همچنین $\mathcal{F}_m(y)\equiv\frac{9\pi^4+10\pi^2y^2+y^4}{1+e^y}$ و $\xi=\frac{\delta\mu}{k_BT}$.

ضریب بدون بُعد $\mathcal{R}(k_{F_n})$ (ضریب همبستگی)، با $k_{F_n}=p_{F_n}/\hbar$، بطور کامل درپژوهش پیشین ما [۴] معرفی و محاسبه شده است. این ضریب، خواص همبستگی نوکلئون-نوکلئون را در محیط بس ذره ای مرکز ستاره دربردارد.

طیف عددی نوترینوهای تولید شده در (۲) نیز از رابطه ای مشابه با (۳) پیروی می کند، با این تفاوت که در آن آرگومان $\mathcal{F}_m$ به $y+\xi$ تغییر می یابد.

در مورد گاف انرژی پتانسیل برای مدل $npe\mu$ داریم:

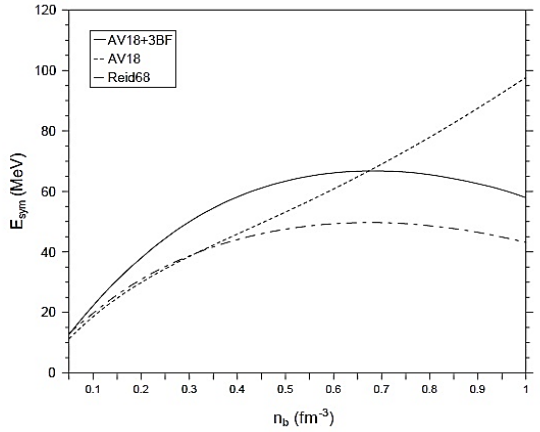
$$\delta\mu(n_N,Y_p)=4(1-2Y_p)E_{sym}(n_N)-c(m_e^2c^2+p_{F_e}^2)^{1/2} \quad (۴)$$

که $n_N=n_p+n_n$ چگالی نوکلئون هاست و عبارت دوم در رابطه ی بالا، پتانسیل شیمیایی الکترون ها در مدل گاز فرمی ست. در حضور هایپرون ها این رابطه تغییر می کند.

تحلیل نتایج و بحث

مهمترین ورودی ها در رابطه ی (۳) یکی فضای فاز غیرگرمایی ($\delta\mu$) است که از مجرای E_{sym} با توصیف ماده ی هسته ای مرتبط می شود. دیگری، ضریب همبستگی ($\mathcal{R}$) ست. بررسی تفصیلی نشان می دهد که اثر فضای فاز غیرتعادلی در یک توصیف خاص از ماده ی هسته ایِ ستاره ی نوترونی روی نتیجه ی نهایی آنقدر بزرگ است که اثر تفاوت بین ضریب همبستگی واقعی و تعادلی از نظر عملی قابل چشم پوشی ست.

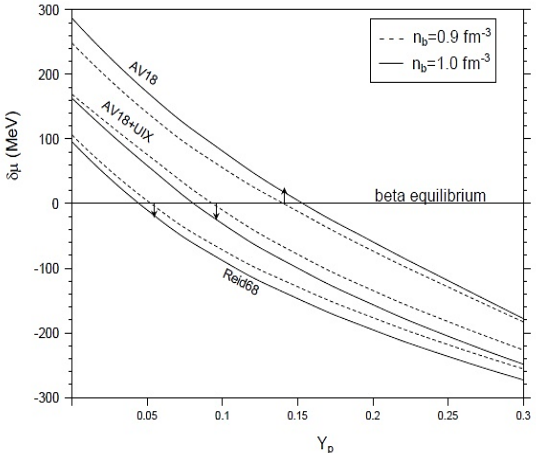
در شکلِ ۱ انرژی تقارنی وابسته به چگالی برآمده از توصیف واقعی از ماده ی ستاره ی نوترونی، در چارچوب روش بس ذره ای



شکل ۱: مقایسه ی انرژی تقارنی برآمده از روش بس ذره ای LOCV با استفاده از برهمکنش های هسته ای متفاوت

LOCV در گستره ی چگالی ۰/۰۵ تا fm^{-3} ۱/۰ نشان داده شده است. در شکلِ ۲ ، $\delta\mu$ را درمدل $npe\mu$ به عنوان تابعی از کسرپروتونی نشان داده ایم. این مقادیر منتج از یک انقباض کوچک و یک تغییرچگالی ست که در $n_b=0.9fm^{-3}$ (منحنی های خط چین) رخ داده و آن را به $n_b=1.0fm^{-3}$ (خطوط ممتد) می افزاید. دیده می شود که در تغییر چگالی نامبرده، توصیف های

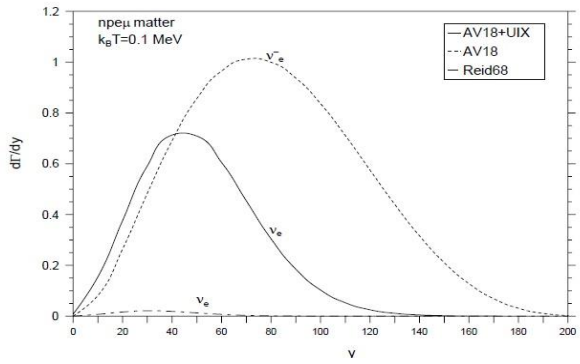
AV18+UIX و Reid68 برخلاف توصیف AV18 مقادیر منفی را برای $\delta\mu$ پیش بینی می کنند. نتیجه ی مهمِ دیگرِ شکلِ ۲ پیش بینی مقادیرعددی متفاوت برای $\delta\mu$ است. این تفاوت عددی با در نظر گرفتن حضور هایپرون ها ی آزاد Σ^- و Λ^0 بسیار بزرگ می شود. همچنین طعم نوترینویی غالب در هر توصیف متحول می گردد.



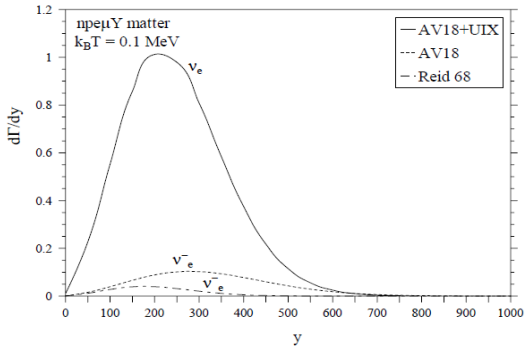
شکل ۲: مقایسه ی مقدار $\delta\mu$ در تغییر چگالی ای از 0.9 به $1.0fm^{-3}$ برای مدل $npe\mu$

در شکل۳ و۴ به ترتیب، طیف عددی نوترینو (پادنوترینو)ی الکترون (طیفِ غالب) را در مدل $npe\mu$ و $npe\mu\Sigma^-\Lambda^0$ از مرکز ستاره ی نوترونی نشان داده ایم. منحنی ها با فرض $T_9=1$ بدست آمده اند.

نتیجه گیری



شکل۳: مقایسه ی طیف عددی نوترینوها یا پادنوترینوهای غیر تعادلی بر اساس کمیت بدون بعد y در تغییر چگالی ای از 0.9 به $1.0fm^{-3}$ برای مدل $npe\mu$



شکل ۴: همانند شکل ۳ ولی برای مدل $npe\mu Y$ که منظور از Yهایپرون های Λ^0و Σ^- هستند.

دیده شد که چگونه توصیف های هسته ایِ متفاوت، بر اساس پیش بینی شان از چگونگی وابستگی انرژی تقارنی به چگالی، مقادیر و علامت متفاوتی را برای کمیت $\delta\mu$ پیشنهاد می کنند و این مسئله همراه با حضور هایپرون ها منجر به پیش بینی های متفاوت برای طیف عددی نوترینوهای غیر تعادلی گسیلی و طعم آنها به عنوان یک مشاهده پذیرمی شود.

مراجع

[۱] D. G. Yakovlev and C. J. Pethick; "*Neutron Star Cooling*"; *Annu. Rev. Astron. Astrophy.* **42**(2004), p.169

[۲] D. G. Yakovlev, A. D. Kaminker, O.Y. Gnedin, P. Haensel; "*Neutrino Emission from Neutron Stars*"; *Phys. Rep.* **354** (2001)1

[۳] S. Goudarzi and H. R. Moshfegh; "*Effects of three-body forces on the maximum mass of neutron stars in the lowest-order constrained variational formalism*"; *Phys. Rev. C* **91**(2015), p.054320; **96** (2017), p.049902 (E)

[۴] A. Dehghan Niri, H. R. Moshfegh, P. Haensel; "*Nuclear correlations and neutrino emissivity from the neutron branch of the modified Urca process*"; *Phys. Rev. C* **93** (2016), p.045806

مطالعه افروزش ضربه‌ای سوخت پیشرفته پروتون-بور۱۱ راه‌اندازی شده با باریکه یون سنگین

مومنی، قاسم؛ قاسمی زاد، عباس*؛ مهرانگیز، مهسا

گروه فیزیک، دانشگاه گیلان، رشت

چکیده

در این پژوهش، به بررسی فرآیند افروزش ضربه‌ای در همجوشی محصورشدگی لختی (ICF) راه‌اندازی شده با باریکه‌های یون سنگین، برای هدف‌های سوخت DT-$p^{11}B$ می‌پردازیم. با بهره‌گیری از شبیه‌سازی‌های هیدرودینامیکی DEIRA-4، فرآیندهای شکل‌دهی تپ و زمان‌بندی برخورد بین امواج ضربه‌ای فشرده‌سازی و افروزشی را بهینه‌سازی نموده و به مقادیر فشار مرکزی از مرتبه 10^7 Mbar (۱۰۰–۲۰۰ Gbar) دست می‌یابیم که منجر به حدود ۲۰ درصد افزایش در بهره انرژی و ۱۱ درصد کاهش در انرژی راه‌انداز مورد نیاز می‌گردد. بهینه‌سازی پیکربندی واکنش منجر به پایداری فرآیند ایستایی در اثر کاهش مقادیر سرعت انفجار درونی ($U_{imp} \approx 10–150$ km s^{-1} for DT; 5–116 km s^{-1} for $p^{11}B$) می‌گردد و بدین ترتیب، سبب فرونشانی ناپایداری‌های هیدرودینامیکی رایلی-تیلور در مقایسه با رهیافت‌های افروزش مرکزی متعارف و افروزش سریع برخوردی (IFI) خواهد شد. افزون بر برتری‌های عملکردی آن، سوخت بی‌نوترونی $p^{11}B$ از طریق محدودسازی نوترون‌های حاصل از سوختن DT و DD نسبت به سوخت DT خالص (به سبب استفاده از یک بذر افروزنده بسیار کوچک DT)، از قابلیت کاهش تابش نوترونی بلند-برد برخوردار خواهد بود. این نتایج بیانگر آن است که رهیافت افروزش ضربه‌ای یک سوخت پیشرفته با راه‌انداز یونی می‌تواند شیوه‌ای مقاوم، پر بهره و ایمن در برابر نوترون را برای دستیابی موثر و پاک به انرژی همجوشی لختی فراهم آورد.

واژه‌های کلیدی: *افروزش ضربه‌ای، همجوشی محصورسازی لختی (ICF)، راه‌انداز یون سنگین، همجوشی پروتون-بور۱۱ ($p^{11}B$)، ناپایداری رایلی-تیلور.*

The Study of Shock Ignited proton-Boron11 Advanced Fusion Fuel Driven by Heavy Ion Beams

Momeni, Ghasem; Ghasemizad, Abbas; Mehrangiz, Mahsa

Department of Physics, University of Guilan, Rasht

Abstract

In this study, we investigate shock ignition process in inertial confinement fusion (ICF) driven by heavy ion beams for DT-$p^{11}B$ fuel targets. Using the DEIRA-4 hydrodynamic simulations, we optimize pulse shaping and timing of collision between compression and ignition shocks, achieving central pressures of 10^7 Mbar (100-200 Gbar) with ≈20% energy-gain enhancement and ≈11% reduction in driver energy. The optimized configuration yields stable stagnation with reduced implosion velocities ($U_{imp} \approx$ 10-150 km s^{-1} for DT; 5-116 km s^{-1} for $p^{11}B$), suppressing Rayleigh-Taylor hydrodynamic instabilities compared with conventional central ignition and impact fast ignition (IFI). Beyond its performance advantages, the aneutronic $p^{11}B$ fuel reduces long-range neutron radiation, while produced neutrons from DT and DD burning are limited respect to a DT pure fuel (by using a small DT ignitor seed). These results demonstrate that ion-driven shock ignition for an advanced fusion fuel can provide a robust, high-gain, and neutron-safe pathway toward clean and efficient inertial fusion energy.

***Keywords**: Shock ignition, Inertial confinement fusion (ICF), Heavy ion driver, proton-Boron11 ($p^{11}B$) fusion, Rayleigh-Taylor instability.*

PACS No. *007*

* ghasemi@guilan.ac.ir

مقدمه

فرآیند همجوشی محصورشدگی لختی یا اینرسی (ICF[1])، یکی از روش‌های دستیابی به انرژی گداخت هسته‌ای است که در آن، ساچمه سوخت توسط یک تپ لیزری یا باریکه یونی که از طریق سامانه راه‌انداز پرتاب می‌گردد، فشرده و گرم شده (تا دمایی از مرتبه keV ۱۰–۵) و پس از افروزش و سوختن، انرژی همجوشی هسته‌ای را در کسری از نانو ثانیه آزاد می‌کند. تا به امروز، سوخت دوتریوم–تریتیوم به سبب ارائه پارامترهای فیزیکی مناسب، برترین گزینه برای دستیابی به گداخت هسته‌ای به‌شمار می‌رود؛ با این وجود، مشکل اساسی واکنش‌های هسته‌ای، یعنی پرتوزایی هنوز هم پابرجاست [۱]. به همین سبب، پای خانواده جدیدی از سوخت‌ها تحت عنوان سوخت‌های پیشرفته یا پاک به دنیای تحقیقات گداخت کنترل شده باز شده است. از جمله روش‌هایی که با هدف ایجاد لکه داغ در یک سوخت از پیش فشرده شده به وسیله سامانه راه‌انداز مستقیم، با سرعت درونی اندک پیشنهاد شده، رهیافت نوین «افروزش ضربه‌ای[2]» است. این ایده جدید طی سازوکاری، شرایط لکه داغ را به سوی فرآیند خود–افروزش پیش می‌برد و درواقع، پارامترهای افروزشی را بهبود می‌بخشد. از سوی دیگر، بسیاری از عوامل زیان‌بار برای افروزش، همچون ناپایداری‌های هیدرودینامیکی و گسیل الکترون‌های داغ را کنترل می‌کند [۷، ۱۰]. از این‌رو، بر آن شدیم تا در این مطالعه، افروزش و سوختن سوخت پیشرفته پروتون–بور۱۱ را تحت رهیافت افروزش ضربه‌ای مورد بررسی قرار دهیم.

پیشینه پژوهش

افروزش ضربه‌ای یا شوکی، رهیافت نوینی در همجوشی محصورسازی لختی است که در آن، مراحل فشرده‌سازی و تشکیل لکه داغ تا حدی جدا از هم هستند. فردی راد، قاسمی زاد و خوشبین فر، به بررسی شرایط تشکیل لکه داغ و وقوع افروزش ضربه‌ای سوخت دوتریوم–تریتیوم، با راه‌انداز مستقیم باریکه یون سنگین پرداختند. آنان به این نتیجه پی بردند که با یافتن شدت باریکه افروزشی مناسب با چگالی توان کافی که توانایی ایجاد بهره بالا با کمینه انرژی ممکن را دارد، از طریق برخورد دو باریکه فشردگی و افروزشی در زمان و مکان مناسب به منظور ایجاد موج ضربه‌ای، می‌توان آستانه دمای یونی مورد نیاز برای افروزش را کاهش داد تا شرایط هدف به سمت خود–افروزش نزدیک‌تر شود و چگالی لکه داغ افزایش یابد [۷–۵]. افزون بر این، مشخص گردید که سرعت انفجار درونی سوخت، در همان گستره افروزش ضربه‌ای لیزری قرار داشته و در مواردی نیز حتی کمتر از آن بازه است که نشان می‌دهد رهیافت افروزش ضربه‌ای با راه‌انداز یونی، می‌تواند به پایداری بیشتر این فرآیند و مقاومت آن در برابر ناپایداری‌های ریلی–تیلور منجر گردد و بدین ترتیب، شرایط مساعد برای گداخت کنترل شده فراهم خواهد شد [۳، ۲].

بر اساس این یافته‌ها، پژوهش حاضر به بررسی امکان‌سنجی فرآیند افروزش ضربه‌ای با راه‌انداز یون سنگین برای سوخت همجوشی پیشرفته DT-$p^{11}B$ در اهدافی با مقیاس راکتور می‌پردازد. بدین منظور، با استفاده از کد هیدرودینامیکی DEIRA-4، تشکیل لکه داغ، دینامیک فشار و پایداری هدف سوخت را بررسی می‌کنیم و پارامترهای باریکه راه‌انداز را برای دستیابی به بهره انرژی بالاتر از طریق کاهش انرژی باریکه نسبت به رهیافت استاندارد ICF بهینه‌سازی می‌کنیم. بخش دوم مقاله، پیکربندی هدف و روش‌های عددی را شرح می‌دهد؛ بخش سوم، نتایج شبیه‌سازی را مورد بحث قرار داده و بخش چهارم، به تشریح نتایج پژوهش خواهد پرداخت.

شرح پژوهش

از جمله سوخت‌های مناسب برای فرآیند گداخت، می‌توان به سوخت‌های اصلی یا استاندارد نظیر دوتریوم–تریتیوم (DT)، سوخت‌های پیشرفته یا پاک مانند پروتون–بور۱۱ ($p^{11}B$)، چرخه pp، چرخه CNO و چرخه CC اشاره نمود. واکنش سوخت پروتون–بور۱۱ به صورت زیر رخ می‌دهد:

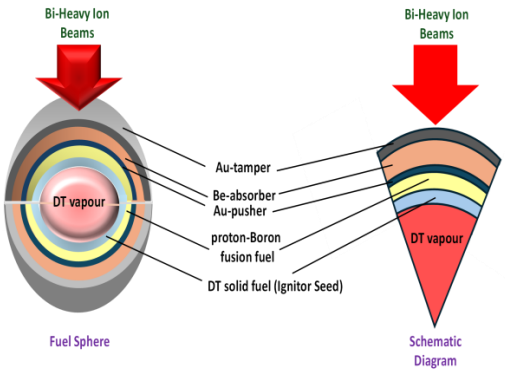
$$p + {}^{11}B \rightarrow 3\alpha + 8.7\ MeV \qquad (۱)$$

همانگونه که از رابطه فوق مشخص است، در سوخت‌های پیشرفته، واکنش‌های همجوشی هسته‌ای بین ایزوتوپ‌های هیدروژن و برخی هسته‌های سبک (نظیر هلیوم، لیتیوم و بور) مطرح می‌گردند؛

1. Inertial Confinement Fusion
2. Shock Ignition

از این‌رو، در زمینه تحقیقات همجوشی کنترل شده، مخلوط هیدروژن با چنین عناصری سوخت‌های همجوشی پیشرفته نامیده می‌شود. این واکنش‌ها بسیار جذاب‌اند؛ چون شامل هیچ سوخت پرتوزایی نبوده و فقط ذرات باردار بی‌خطر آزاد می‌کنند. بر خلاف این برتری ارزشمند، پارامترهای افروزشی آنها در برابر سوخت‌های استاندارد قابل رقابت نیست؛ به بیان دیگر، بهره هدف در آنها بسیار ناچیز و یا منفی است [۴، ۲، ۱]. در این مطالعه، خواهیم دید که چگونه افروزش ضربه‌ای این سوخت‌ها، ضمن ارتقای پارامترهای مذکور، موجب افزایش بهره انرژی و پایداری هیدرودینامیکی سوخت‌های پیشرفته خواهد شد.

در این پژوهش، پیکربندی افروزش ضربه‌ای را برای یک هدف کروی با ابعادی از مرتبه میلی متر که حاوی سوخت پیشرفته همجوشی پروتون–بور۱۱ و لایه‌های کوبش و درآشامنده بیرونی است (شکل ۱)، به کمک راه‌انداز باریکه یون سنگین بیسموت–۲۰۹ بررسی می‌نماییم. سپس، پارامترهای بهره هدف و فشار لکه داغ را در سه حالت: «افروزش استاندارد»، پیکربندی «نا هم‌فشار» بدون اعمال میخه یونی و سرانجام، «افروزش ضربه‌ای» ارزیابی می‌کنیم. افزون بر این، با بهینه‌سازی ویژگی‌های هندسی هدف و مقادیر پارامترهای راه‌انداز خارجی، شرایط تحقق افروزش ضربه‌ای برای هدف افروزشی دارای سوخت پیشرفته استخراج می‌گردد. در جدول ۱، مشخصات فیزیکی واکنش و سامانه راه‌انداز ارائه شده است.



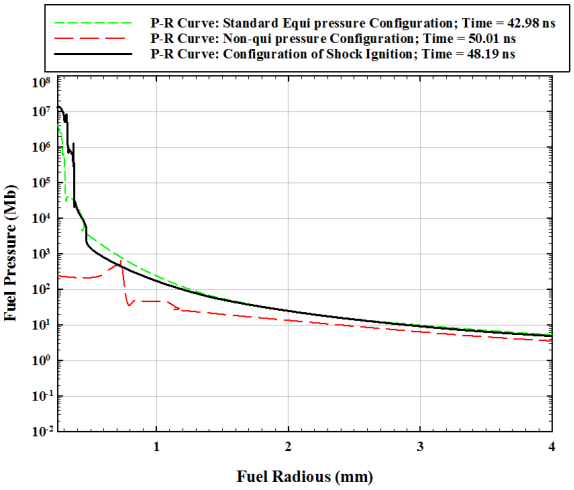
شکل ۱: طرح ساده‌ای از ساچمه همجوشی پیشرفته $DT\text{-}p^{11}B$.

پیکربندی بهینه (W_s = 1769 TW, Δt_s = 1.5 ns) با کاهش حدود ۱۱ درصدی در انرژی ورودی و افزایش حدود ۲۰ درصدی در بهره کل، به بالاترین بهره انرژی هدف دست می‌یابد. ما تحول پارامتر فشار شعاعی را در لایه سوخت $DT\text{-}p^{11}B$ و در مرکز هدف، تحت شرایط افروزش ضربه‌ای یونی بهینه‌سازی شده، ارزیابی کردیم. تقویت فشار مرکزی و همزمانی دقیق بین باریکه‌های فشرده‌سازی و افروزشی که برای دستیابی به افروزش موثر حیاتی هستند، در بخش‌های بعدی مورد بحث قرار گرفته‌اند.

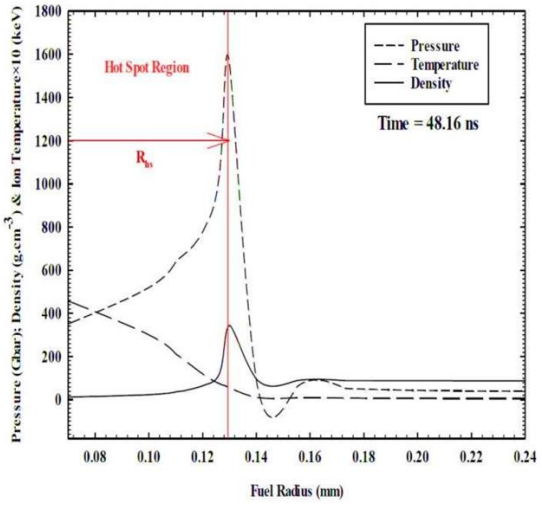
جدول ۱: مشخصات فیزیکی سامانه راه‌انداز باریکه یونی برای ساچمه سوخت $DT\text{-}p^{11}B$.

$DT\text{-}p^{11}B$ fuel pellet	W (TW) t (ns) W_{ph}=۳۰ Δt_{ph}=۵ W_c=۵۹۰ Δt_c=٤/٥ W_s=۱۷٦۹ Δt_c=۱/٥
E_{in}	٥/٤٦ (MJ)
$\langle \rho R \rangle_{DT}$	۱/۸٦ ($g.cm^{-2}$)
$\langle \rho R \rangle_{pB}$	۱/۷۷ ($g.cm^{-2}$)
$T_{ion,Max,\ DT}$	٤۲٦ (keV)
$T_{ion,Max,\ pB}$	۲٥۳ (keV)
f_h	۰/٦۱
η_h	۰/۳۲
η_f	۰/۱۹
G	۲۸۸

شکل ۲، تغییرات فشار مرکزی سوخت در سه رهیافت افروزش تک فشار، افروزش ناهم فشار–ناهم چگال بدون میخه افروزش و افروزش ضربه‌ای را به نمایش می‌گذارد. لحظه برخورد موج ضربه بازگشتی با باریکه افروزش و برهم‌نهی فشار آنها در ۴۱ نانو ثانیه روی داده و سبب ایجاد موج ضربه‌ای پرشدت می‌گردد که انباشتگی فشار را در مرکز ایجاد می‌کند. همچنین، مختصات فیزیکی لکه داغ در این واکنش نیز در شکل ۳ به نمایش درآمده است. می‌توان دریافت که افروزش ضربه‌ای از منظر بهبود فرآیند افروزش، به سبب افزایش فشار در لایه افروزشی (ناحیه لکه داغ)، میزان دمای یونی بالاتر، کاهش مقدار چگالی توان باریکه فشرده‌سازی و در عین حال، افزایش میزان بهره هدف نسبت به روش‌های استاندارد تک فشارمتعارف و نا هم‌فشار بدون میخه افروزشی، برترین رهیافت محسوب می‌شود. این رهیافت، بیشینه فشار مرکزی را به میزان ۱۶۲۰۰ گیگابار به همراه بهره انرژی هدف ۲۸۸ حاصل می‌کند.



شکل ۲: مقایسه فشار مرکزی بیشینه در سه رهیافت افروزش ضربه‌ای، افروزش استاندارد تک فشار و افروزش ناهم فشار–ناهم چگال.



شکل ۳: تحولات شعاعی دما، چگالی و فشار در تشکیل لکه داغ برای افروزش ضربه‌ای DT-$p^{11}B$.

نتیجه‌گیری

در این مطالعه، با استفاده از کد DEIRA-4، افروزش ضربه‌ای (SI) راه‌اندازی شده با یون سنگین را برای اهداف DT-$p^{11}B$ در مقیاس راکتور بررسی کردیم. اگرچه این کد یک بعدی، در ارزیابی ناپایداری‌های هیدرودینامیکی محدودیت دارد، با این وجود، پس از بهینه‌سازی شکل‌دهی باریکه فرودی و هماهنگ‌سازی باریکه‌های فشرده‌سازی و افروزش، فشارهای مرکزی حدود ۲۰۰ گیگابار حاصل شد و یک لکه داغ با شعاع نزدیک به ۱۳۰ میکرومتر ایجاد گردید. این افزایش فشار، در اثر برهم‌نهی موج ضربه بازگشتی از مرکز با موج ضربه پرقدرت ناشی از اعمال میخه افروزش رخ می‌دهد. این پیکربندی، انرژی باریکه لازم برای افروزش را حدود ۱۵ درصد کاهش می‌دهد. مشخص شد که باریکه افروزشی، نقش مهمی در حفظ پایداری هدف در فاز ایستایی، تضمین ایجاد شرایط مناسب لکه داغ و نیز امکان بروز همجوشی خواهد داشت. بیشینه فشار حاصل و سرعت انفجار درونی، در محدوده مجاز تعیین شده برای رهیافت SI با راه‌انداز لیزری قرار دارند که این امر، امکان وقوع SI با راه‌انداز یون سنگین را تایید می‌کند. نکته قابل توجه این است که این رهیافت، امکان کاهش انرژی راه‌انداز و سرعت انفجار درونی را فراهم کرده و افزون بر این، عملکرد فرآیند همجوشی را بهبود می‌بخشد. بدین ترتیب، افروزش ضربه‌ای با راه‌اندازی یون‌های سنگین، می‌تواند رهیافتی کارآمد را به سوی همجوشی محصورسازی لختی پربهره با سوخت‌های بی‌نوترونی پیشرفته ارائه دهد.

مرجع‌ها

[۱] اتزنی، استفانو؛ میر تر وهن، یورگن؛ *«فیزیک گداخت لختی، اندرکنش باریکه پلاسما، هیدرودینامیک و ماده چگال داغ»*؛ ترجمه دکتر عباس قاسمی زاد؛ انتشارات دانشگاه گیلان (۱۳۹۷)؛ صفحات ۵ و ۳۶.

[۲] مومنی، قاسم (۱۴۰۰)؛ مطالعه پارامترهای تشکیل لکه داغ سوخت‌های پیشرفته همجوشی در رهیافت افروزش ضربه‌ای"؛ پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه گیلان؛ صفحات ۱۱۰–۹۴.

[۳] فردی راد، صدیقه (۱۳۹۶)؛ "مطالعه پارامترهای تشکیل لکه داغ در سوخت دوتریوم–تریتیوم افروخته شده ضربه ای"؛ پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه گیلان؛ صفحات ۸۰–۷۸.

[۴] درویش پور، ساناز (۱۳۹۸)؛ "مطالعه دینامیک افروزش و اشتعال سوخت پیشرفته پروتون–بور۱۱"؛ پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه گیلان؛ صفحات ۷۲ و ۷۵.

[۵] X. Ribeyre et al.; "Shock Ignition: Modelling & Target Design Robustness"; *Plasma Physics and Controlled Fusion* **56**, No. 124030 (2009), 7-9.

[۶] S. Atzeni; "Shock ignition of thermonuclear fuel: principles and modelling"; *Nuclear* Fusion **54**, No. 0540088 (2014), 6.

[۷] M. Temporal et al.; "How Shock ignition can help to overcome the negative effects of hot electrons in direct-drive high-gain inertial confinement fusion"; *J. Plasma Phys.* **90**, No. 905900507 (2024), 3.

کنفرانس فیزیک ایران

دانشگاه قم – ۲ الی ۵ شهریور ۱۴۰۵

مجموعه مقالات شاخه

انرژی‌های بالا، ذرات بنیادی و ریاضی فیزیک

www.psi.ir/f/physics1405

بازنگری محتوای کوارک‌های سنگین پروتون در چارچوب فاکتورگیری-k_t

اولنج، نعیمه

دانشکده فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه بوعلی سینا، همدان

چکیده

در این پژوهش، توابع ساختار و سطح مقطع کاهش یافته کوارک‌های سنگین پروتون شامل افسون و زیبایی در چارچوب فاکتورگیری- k_t مورد بازنگری قرار گرفته‌اند. محاسبات با استفاده از توابع توزیع پارتونی انتگرال‌گیری نشده‌ی (UPDF) حاصل از رهیافت‌های کیمبر-مارتین-ریسکین (KMR) و مارتین-ریسکین-وات (MRW) بر پایه مجموعه توابع توزیع پارتونی انتگرال‌گیری شده‌ی (PDF) MMHT2014 انجام شده است. هدف اصلی این مطالعه، بررسی نقش سازگاری میان مرتبه اختلالی توابع توزیع پارتونی و ثابت جفت‌شدگی قوی (α_s) در توصیف کمیت‌های مشاهده‌پذیر مرتبط با کوارک‌های سنگین است. نتایج نشان می‌دهد که استفاده از مقادیر α_s متناظر با مرتبه اختلالی به‌کاررفته در برازش PDF ها به عبارتی به کارگیری $\alpha_{s,LO}(M_Z^2)=0.135$ برای KMR و $\alpha_{s,NLO}(M_Z^2)=0.118$ برای MRW، موجب رفع بیش‌برآوردهای مشاهده‌شده در محاسبات پیشین و بهبود توافق نتایج بدست آمده از هر دو رهیافت با پیش‌بینی‌های نظری و داده‌های آزمایشگاهی HERA می‌شود. علاوه بر این، نتایج نشان می‌دهد که رهیافت KMR در مقایسه با رهیافت MRW توصیف دقیق‌تری از داده‌های تجربی ارائه می‌کند.

واژه های کلیدی: *کوارک سنگین، فاکتورگیری K_t، ثابت جفت‌شدگی قوی، توابع توزیع پارتونی انتگرال‌گیری نشده‌ی KMR و MRW.*

Revisiting the Heavy-Quark Content of the Proton within the k_t-Factorization Framework

Olanj, Naeimeh

Physics Department, Faculty of Science, Bu-Ali Sina University, Hamedan, Iran

Abstract

In this work, the heavy-quark structure functions and reduced cross sections of the proton, including charm and beauty contributions, are revisited within the framework of k_t-factorization. The calculations are performed using unintegrated parton distribution functions (UPDF) generated through the Kimber–Martin–Ryskin (KMR) and Martin–Ryskin–Watt (MRW) approaches, based on the MMHT2014 integrated parton distribution functions (PDF). The primary objective of this study is to investigate the role of consistency between the perturbative order of the parton distributions and the strong coupling constant (α_s) in the description of heavy-quark observables. The results demonstrate that employing α_s values consistent with the perturbative order used in the PDF fits, namely ($\alpha_{s,LO}(M_Z^2)=0.135$) for the KMR approach and ($\alpha_{s,NLO}(M_Z^2)=0.118$) for the MRW approach, eliminates the overestimation observed in previous calculations and significantly improves the agreement of both approaches with theoretical predictions and HERA experimental data. Furthermore, the KMR approach is found to provide a more accurate description of the data compared with the MRW formalism.

***Keywords**: heavy-quark, K_t factorization, strong coupling constant, KMR-UPDF and MRW-UPDF.*

PACS No. 13

مقدمه

تولید کوارک‌های سنگین در پراکندگی عمیق ناکشسان الکترون–پروتون یکی از مهم‌ترین ابزارهای مطالعه ساختار پروتون و آزمون کرومودینامیک کوانتومی اختلالی (pQCD) در ناحیه x کوچک است. از آنجا که سهم فرآیندهای شامل کوارک‌های افسون و زیبایی در این ناحیه قابل توجه است، بررسی توابع ساختار و سطح مقطع‌های مرتبط با آن‌ها اطلاعات ارزشمندی درباره توزیع گلئون‌ها و دینامیک پارتونی پروتون فراهم می‌کند.

در ناحیه x کوچک و انرژی‌های بالا، تکانه عرضی پارتون‌ها دیگر قابل صرف‌نظر کردن نیست، ازاین‌رو چارچوب فاکتورگیری وابسته به تکانه عرضی (kt-factorization) توصیف مناسب‌تری نسبت به فاکتورگیری خطی ارائه می‌دهد. در این چارچوب، اطلاعات ساختار پروتون در توابع توزیع پارتونی انتگرال‌گیری‌نشده (UPDF) نهفته است که علاوه بر کسر تکانه طولی x ، به تکانه عرضی پارتون‌ها نیز وابسته‌اند. اگرچه این توابع به‌طور اصولی از معادلات CCFM به دست می‌آیند، حل این معادلات با پیچیدگی‌های محاسباتی قابل توجهی همراه است. به همین دلیل، رهیافت‌های Kimber–Martin–Ryskin (KMR) و Martin–Ryskin–Watt (MRW) [۱] به‌عنوان روش‌هایی کارآمد برای تولید UPDF ها بر پایه معادلات DGLAP و با لحاظ شرط ترتیب زاویه‌ای توسعه یافته‌اند.

در مطالعات پیشین، توابع ساختار **افسون** و زیبایی با استفاده از UPDFهای حاصل از رهیافت‌های KMR و MRW با موفقیت محاسبه شده‌اند [۳–۲]. با این حال، در برخی موارد اختلاف‌هایی میان پیش‌بینی‌های نظری و داده‌های تجربی مشاهده شده است. در پژوهش حاضر، با بازنگری محتوای کوارک‌های سنگین پروتون و بررسی نقش سازگاری میان مرتبه اختلالی PDF ها و ثابت جفت‌شدگی قوی α_s ، نشان می‌دهیم که بخش عمده این اختلاف‌ها ناشی از انتخاب ناسازگار α_s است. نتایج حاصل، ضمن رفع بیش‌برآوردهای مشاهده‌شده، توافق بهتری با داده‌های آزمایش HERA فراهم می‌کنند.

بنا به اهمیت موضوع ما در کار حاضر، ابتدا مروری بر چارچوب نظری و روش محاسباتی مبتنی بر رهیافت‌های KMR و MRWخواهیم داشت، سپس نتایج محاسبات توابع ساختار و سطح مقطع کاهش یافته کوارک‌های سنگین پروتون شامل **افسون** و زیبایی در چارچوب فاکتورگیری–k_t و مقایسه آن‌ها با داده‌های تجربی HERA و نتیجه‌گیری را ارائه خواهیم کرد.

چارچوب نظری

در این پژوهش، UPDFها با استفاده از رهیافت‌های KMR و MRW به عنوان ورودی به محاسبات توابع ساختار و سطح مقطع کاهش یافته کوارک‌های سنگین پروتون شامل **افسون** و زیبایی در چارچوب فاکتورگیری–k_t تولید شده‌اند. در رهیافتKMR، توزیع پارتونی انتگرال‌گیری‌نشده با اعمال شرط ترتیب زاویه‌ای و فاکتور ساداکوف به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$f_a(x,k_t^2,\mu^2) = T_a(k_t,\mu)\frac{\alpha_s(k_t^2)}{2\pi}\int_x^{1-\Delta} dz P_{aa'}(z)a'(\frac{x}{z},k_t^2). \quad (۱)$$

که در آن T_a فاکتور ساداکوف ، $P_{aa'}(z)$ تابع شکافت DGLAP و $\Delta = \frac{k_t}{k_t+\mu}$ حاصل شرط ترتیب زاویه‌ای است. در این رهیافت شرط $k_t > \mu \Rightarrow T_a(k_t,\mu)=1$ لحاظ شده و بنابراین این روش امکان وارد کردن بخشی از آثار مرتبه‌های بالاتر را در محاسبات فراهم می‌کند. در مقابل، رهیافت MRW تعمیمی نظامندتر در مرتبه NLO ارائه می‌دهد. در رهیافت MRW، توابع انتگرال‌گیری‌نشده در مرتبه NLO به صورت

$$f_a(x,k_t^2,\mu^2) = \int_x^1 dz T_a(k^2,\mu^2)\frac{\alpha_s(k^2)}{2\pi}\sum_{b=q,g} P_{ab}^{(0+1)}(z)b(\frac{x}{z},k^2)\Theta(\mu^2-k^2), \quad (۲)$$

تعریف می‌شوند. وات و همکاران در مقاله [۳] نشان داده‌اند که با استفاده از تابع شکافت های مرتبه اول و PDF مرتبه دوم با دقت خوبی می‌توان UPDF مرتبه دوم را تولید کرد. از آنجاکه ناحیه

$k^2 = \frac{k_t^2}{1-z} > \mu^2$ مربوط به دقت‌های بالاتر از NLO می‌باشد، $\Theta(\mu^2 - k^2)$ در UPDF وارد شده است.

روش محاسبه‌ی تابع ساختار، تابع ساختار طولی و سطح مقطع کاهش‌یافته‌ی پروتون به روش فاکتورگیری-k_t در مرجع [۳] کامل توضیح داده شده است. سطح مقطع کاهش‌یافته از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید

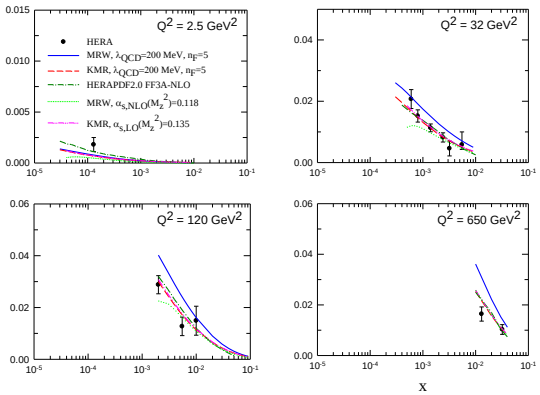
$$\sigma_{red}^{q\bar{q}}(x,Q^2) = F_2^{q\bar{q}}(x,Q^2) - \frac{y^2}{(1+(1-y)^2)} F_L^{q\bar{q}}(x,Q^2) \qquad (۳)$$

که در آن $y=Q^2/xs$ (s انرژی مرکز جرم است) متغیر بی‌بعد پراکندگی عمیق ناکشسان است.

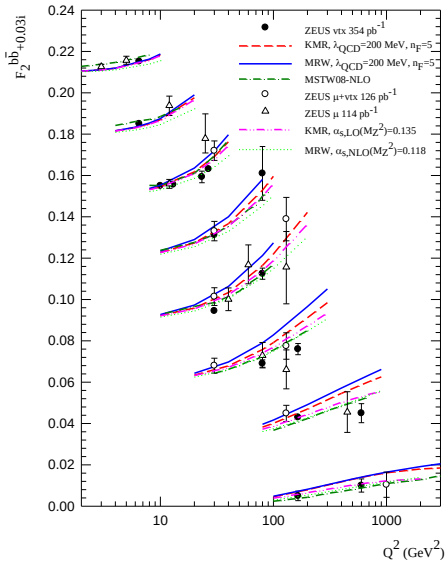
نتایج و بحث

به منظور بررسی تأثیر نحوه انتخاب ثابت جفت‌شدگی قوی بر پیش‌بینی‌های چارچوب فاکتورگیری-k_t ابتدا سطح مقطع کاهیده و تابع ساختار زیبایی، با استفاده از توزیع‌های پارتونی انتگرال‌گیری-نشده KMR و MRW محاسبه شدند [٤]. نتایج حاصل در شکل‌های ۱ و ۲ ارائه شده‌اند. در شکل ۱، سطح مقطع کاهیده زیبایی بر حسب متغیر بیورکن x برای مقادیر مختلف Q^2 نمایش داده شده و با داده‌های ترکیبی آزمایش‌های H1 و ZEUS مقایسه شده است. همچنین در شکل ۲، تابع ساختاری زیبایی بر حسب Q^2 برای چندین مقدار x رسم شده و در کنار داده‌های تجربی ZEUS قرار گرفته است.

مطابق شکل‌های ۱ و ۲، استفاده از $\alpha_s(Q^2)$ مبتنی بر Λ_{QCD}=200MeV و n_f=5 در رهیافت MRW منجر به پیش‌برآورد قابل توجه مقادیر سطح مقطع کاهیده و تابع ساختار زیبایی نسبت به داده‌های تجربی می‌شود. برای بررسی منشأ این اختلاف، رفتار ثابت جفت‌شدگی قوی در شکل ۳ مطالعه شده است. این شکل مقایسه‌ای میان $\alpha_s(Q^2)$ محاسبه‌شده از روابط (۳-۱) مرجع [٤] و مقادیر متناظر با برازش‌های LO و NLO مجموعه PDF های MMHT2014 ارائه می‌دهد. نتایج نشان می‌دهد که استفاده از $\alpha_{s,LO}(M_Z^2)$ مبتنی بر Λ_{QCD}=200MeV و n_f=5 عملاً معادل به‌کارگیری مقداری نزدیک به $\alpha_s(M_Z^2)$=0.1337 است، در حالی که در رهیافت MRW که بر پایه PDF های مرتبه NLO ساخته شده است، مقدار مناسب $\alpha_s(M_Z^2)$ برابر با ۰/۱۱۸ می‌باشد. این اختلاف موجب افزایش سهم کوارک‌ها و به‌ویژه گلئون‌ها در محاسبات شده و در نتیجه به بیش‌برآورد مشاهده‌شده در شکل‌های ۱ و ۲ منجر می‌شود.

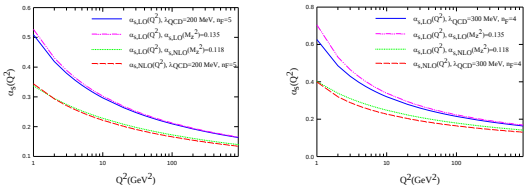


شکل ۱ : سطح مقطع کاهش‌یافته کوارک زیبایی $\sigma_{red}^{b\bar{b}}$



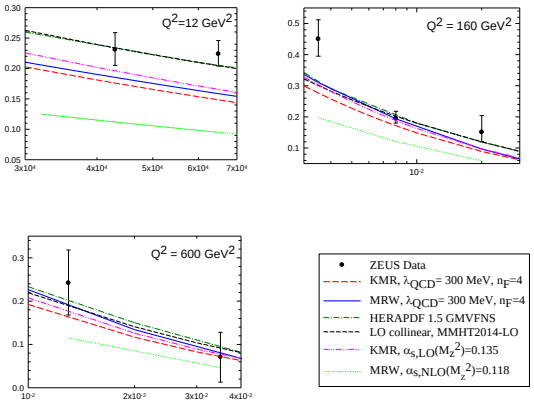
شکل۲: تابع ساختار کوارک زیبایی (برای اطلاعات بیشتر به متن مراجعه شود)

بر این اساس، محاسبات توابع ساختار افسون با استفاده از مقادیر $\alpha_{s,LO}(M_Z^2)$=0.135 و $(\alpha_{s,NLO}(M_Z^2)$=0.118) مجدداً انجام شد. نتایج جدید در شکل ٤ در کنار نتایج پیشین ارائه شده‌اند.



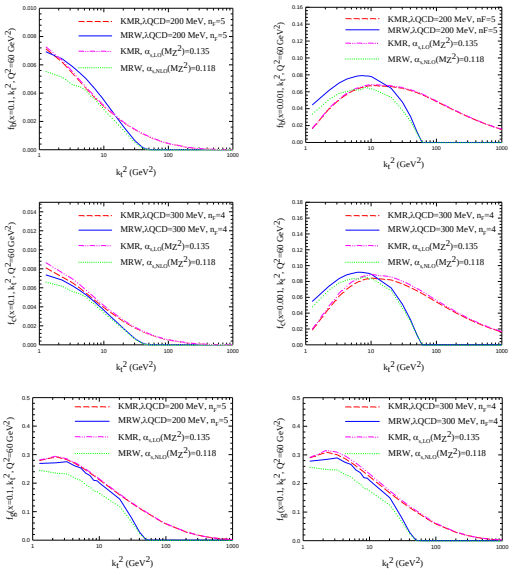
شکل۳: ثابت جفت‌شدگی قوی در تقریب مرتبه‌ی اول و دوم

همان‌گونه که از این شکل مشاهده می‌شود، پیش‌بینی‌های حاصل از رهیافت KMR تطابق بهتری با داده‌های تجربی و پیش‌بینی‌های QCDاختلالی دارند، در حالی که نتایج MRW در برخی نواحی انرژی مقادیر کوچک‌تری را پیش‌بینی می‌کنند.

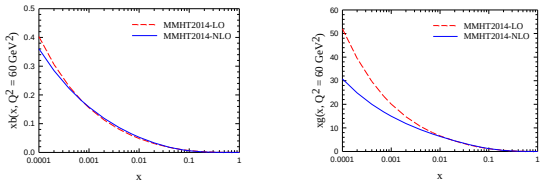


شکل٤: تابع ساختار کوارک افسون $F_2^{C\bar{C}}(x,Q^2)$

برای درک بهتر منشأ این تفاوت‌ها، توزیع‌های پارتونی انتگرال‌گیری‌نشده و انتگرال‌گیری‌شده کوارک‌های زیبایی، افسون و گلئون بر حسب k_t^2 به ترتیب در شکل‌های ۵ و ٦رسم شده‌اند. مقایسه نمودارها نشان می‌دهد که تفاوت اصلی میان دو رهیافت از رفتار توزیع گلئون در ناحیه x کوچک و تکانه عرضی پایین ناشی می‌شود. علاوه بر این، با افزایش مقیاس فاکتورگیری Q^2 ، نتایج حاصل از نسخه‌های مختلفKMR و MRW به یکدیگر نزدیک می‌شوند. همچنین مقایسه توزیع‌های شکل ٦ با نتایج شکل ۵ بیانگر نقش مهم توزیع گلئون در تعیین رفتار توابع ساختاری کوارک‌های سنگین و سطح مقطع‌های متناظر در چارچوب فاکتورگیری k_t است.



شکل ۵: توابع توزیع انتگرال‌گیری نشده‌ی گلئونی و زیبایی و افسون



شکل ٦: توابع توزیع انتگرال‌گیری شده‌ی گلئونی و زیبایی

نتیجه گیری

این پژوهش نشان داد سازگاری میان مرتبه اختلالی UPDF و مقدار ثابت جفتشدگی قوی شرطی اساسی برای دستیابی به پیش-بینی‌های قابل اعتماد است . نتایج جدید نه تنها بیش‌برآوردهای گزارش‌شده در محاسبات قبلی را حذف می‌کنند، بلکه نشان می-دهند رهیافت KMR در توصیف داده‌های HERA عملکرد بهتری نسبت به MRW دارد. این یافته‌ها اعتبار چارچوب فاکتورگیری-k_t را برای مطالعه دینامیک کوارک‌های سنگین تأیید می‌کند.

مرجع‌ها

[۱] A. D. Martin, M. G. Ryskin, and G.Watt, "NLO prescription for unintegrated parton distributions" *Eur. Phys. J. C* ***66*** (2010) 163.

[۲] N. Olanj and M. Modarres , "A detailed study of charm content of a proton in the frameworks of the Kimber-Martin-Ryskin and Martin-Ryskin-Watt approaches" *Nucl Phy A* **998** (2020) 121735.

[۳] N. Olanj "Phenomenological investigation of the beauty content of a proton in the framework of k_t-factorization using KMR and MRW unintegrated parton distributions" *Phy. Rev. D***110** (2024) 036009.

[٤] N. Olanj," Updating the proton heavy quark content analysis in the k_t-factorization formalism using the KMR and MRW approaches " *Phy Let B* **873** (2026) 140143.

اثرات تصحیحات QED در محاسبه توابع توزیع پارتونی قطبیده

حضرتی ، فهیمه[۱] ؛ تقوی شهری، سیده فاطمه[۲] ؛ علیزاده، زهرا[۱]؛ متقی زاده، مرضیه[۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه فردوسی مشهد

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد،صندوق پستی۱۴۳۶،مشهد

چکیده

ما در این پژوهش به محاسبه توابع توزیع پارتونی قطبیده پروتون با درنظر گرفتن همزمان تصحیحات QCD و QED پرداخته ایم. برای این منظور معادلات DGLAP در فضای ملین(Mellin space) حل شده و از مدل ولون(Valon model) برای توصیف ساختار درونی پروتون استفاده گردید. شایان ذکر است تأثیر تصحیحات QED با کمیت δf نمایش داده می شود. نتایج در مقیاس Q^2= 800 GeV با کار فلوریان و همکاران مقایسه گردید. با محاسبه گشتاور اول (First moment) سهم گلوئون ها و کوارک های ظرفیتی و برای نخستین بار سهم فوتون از اسپین پروتون را به طور مستقیم مورد محاسبه قرار دادیم. علاوه براین تابع ساختار قطبیده پروتون($g_1^p(x.Q^2)$ به عنوان کمیت قابل دسترس تجربی از توابع توزیع بازسازی شد و نقش تصحیحات QED مورد بررسی قرار گرفت.

Effects of QED corrections on the calculation of polarized parton distribution functions

Hazrati,Fahime[1]; Taghavi shahri, Fatemeh[1];Alizade, Zahra[1];Motaghizadeh,Marzieh[1]

[1] Department of Physics,Ferdowsi University of Mashhad,P.O Box1436, Mashhad

Abstract

In this study, we have calculated the proton polarized parton distribution functions by simultaneously considering QCD and QED corrections. For this purpose, the DGLAP equations were solved in Mellin space and the Valon model was used to describe the internal structure of the proton. It is worth noting that the effect of QED corrections is represented by the quantity δf. The results were compared with the work of Florian et al. at the scale of Q^2 = 800 GeV ^{2} . By calculating the first moment, we directly calculated the contribution of gluons and valence quarks and, for the first time, the contribution of photons to the proton spin. In addition, the proton polarized structure function $g_1^p(x.Q^2)$ was reconstructed from the distribution functions as an experimentally accessible quantity and the role of QED corrections was investigated.

مقدمه

پروتون به عنوان یک ذره مرکب دارای اسپین ۱/۲است. براساس تصویر مدل کوارکی انتظار می رفت که اسپین پروتون عمدتا از مجموع اسپین های کوارک های ظرفیتی تأمین شود بااین حال آزمایشات انجام شده در پراکندگی ناکشسان عمیق (Deep inelasting scattering) در دهه ۱۹۸۰ نشان داد [۱,۲] سهم کوارک ها در اسپین پروتون تنها حدود۳۰ درصد است. این یافته شگفت انگیز به معمای اسپین شهرت یافت و منجر به بازنگری در سهم اسپین هرکدام از پارتون ها از اسپین پروتون شد. برای محاسبه سهم اسپین هرکدام از پارتون های درون پروتون به توابع توزیع پارتونی قطبیده نیازمندیم. ما در این پژوهش توابع توزیع پارتونی قطبیده(PPDF) را با درنظرگرفتن تصحیحات QCD در مرتبه اختلالی NLO و تصحیحات QED در مرتبه اختلالی LO به دست آوردیم و سپس با استفاده از فرمول $\delta f = \frac{f_{with\ QED} - f_{no\ QED}}{f_{no\ QED}}$ تأثیر تصحیحات QED براین توابع توزیع را موردبررسی قرار دادیم.

محاسبه توابع توزیع پارتونی قطبیده در حضور تصحیحات QCD و QED

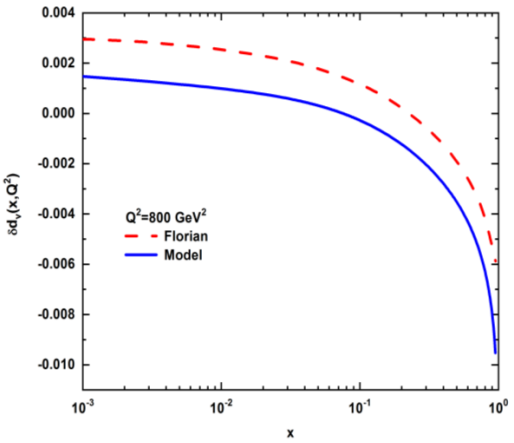
ما باحل معادلات DGLAP می توانیم توابع توزیع پارتونی قطبیده را به دست آوریم. فرم کلی این معادلات برای توابع توزیع پارتونی قطبیده براساس رابطه (۱) است [۳]:

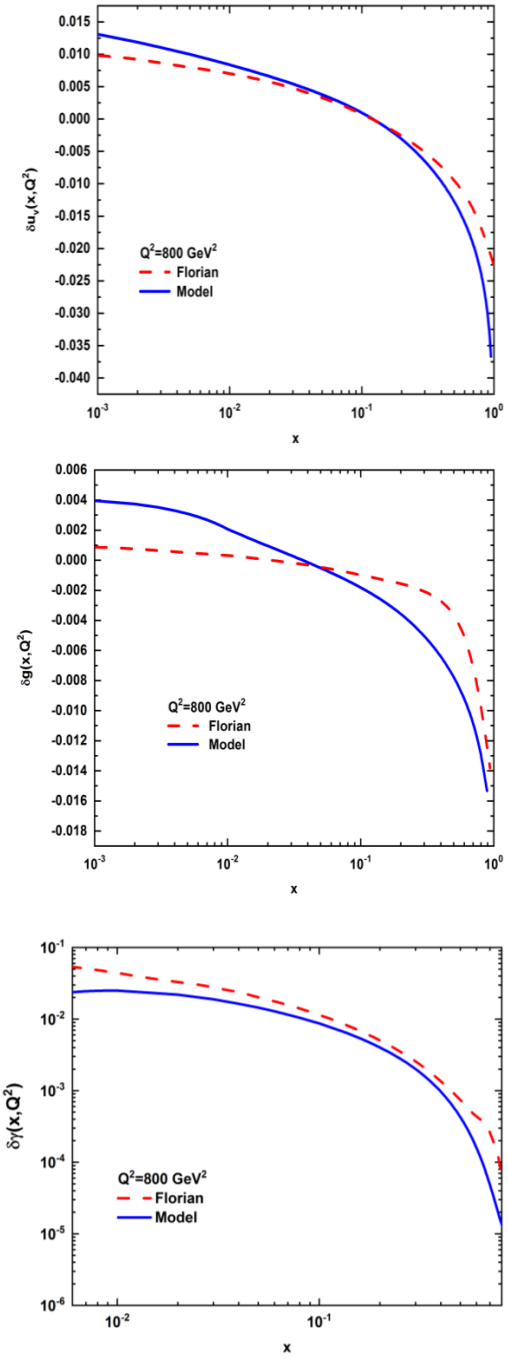
$$\frac{d\Delta q_i(x.Q^2)}{dlnQ^2} = \frac{\alpha_s(Q^2)}{2\pi}\left[p_{qq} \otimes \Delta q_i(x.Q^2) + p_{qg} \otimes \Delta g(x.Q^2)\right]$$
$$\frac{d\Delta \overline{q}_i(x.Q^2)}{dlnQ^2} = \frac{\alpha_s(Q^2)}{2\pi}\left[p_{qq} \otimes \Delta \overline{q}_i(x.Q^2) + p_{qg} \otimes \Delta g(x.Q^2)\right]$$
$$\frac{d\Delta g(x.Q^2)}{dlnQ^2} = \frac{\alpha_s(Q^2)}{2\pi}\left[\sum_i p_{gq} \otimes \Delta q_i(x.Q^2) + p_{gg} \otimes \Delta g(x.Q^2)\right] \quad (1)$$

در رابطه (۱)، $\otimes$ بیانگر انتگرال پیچش است و این معادلات به صورت دیفرانسیل – انتگرالی می باشند. در معادلات DGLAP درکنار تصحیحات کرومودینامیک کوانتومی (QCD) باید تصحیحات الکترومغناطیسی (QED) را به منظور افزایش دقت در محاسبات نیز لحاظ کرد. حضور تصحیحات الکترومغناطیسی این امکان را به ما می دهد علاوه بر افزایش دقت محاسبات سهم فوتون ها از اسپین پروتون را نیز به دست آوریم [٤,٥]. برای این منظور ابتدا معادلات DGLAP برای توابع توزیع پارتونی قطبیده در حضور تصحیحات QED را فرمول بندی کرده، سپس با استفاده از تبدیل ملین (Mellin Tramsform) [٦] معادلات انتگرالی–دیفرانسیلی را به معادلات دیفرانسیلی ساده تر در فضای ممان تبدیل می کنیم.[٥] پس از تبدیل معادلات DGLAP در فضای ملین برای شرایط اولیه معادله دیفرانسیلی حاصل، از مدل پدیده شناسی ولون (Valon Model) بهره می بریم. در این مدل پروتون را به جای آنکه مجموعه ای از ذرات نقطه ای در نظر بگیریم، آن را به صورت بسته هایی شامل کوارک ظرفیتی، کوارک های دریا و گلوئون های وابسته به این کوارک ظرفیتی درنظر می گیریم. این بسته ها را ولون می نامند [۷] . به طور مثال پروتون شامل دو ولون U و یک ولون D خواهد بود. هر ولون اعداد کوانتومی ظرفیتی درون خود را دارد. ولون ها حامل تمام انرژی – تکانه هادرون هستند. در Q^2 های بالا هرکدام از ولون ها به تفکیک قابل شناسایی و مطالعه می باشند، اما در Q^2 های پایین ساختار درونی یک ولون قابل شناسایی نیست. در این ناحیه ولون شبیه به یک کوارک ظرفیتی بدون ساختار رفتار می کند. براساس این مدل ساختار پروتون از دو بخش تشکیل شده است. بخش اول تابع توزیع پارتون های داخل ولون می باشد و بخش دوم تابع توزیع ولون های داخل هادرون است. بر اساس مدل ولون و با استفاده از قضیه پیچش می توان تابع توزیع پارتون قطبیده را به صورت زیر نوشت[۸]:

$$\Delta q^p(x.Q^2) = \sum_{valon}\int_0^1 dy\, \Delta G^p_{valon}(y)\, \Delta q^{valon}\left(\frac{x}{y}, Q^2\right) \quad (2)$$

در رابطه (2) $\Delta G^p_{valon}(y)$ تابع توزیع تکانه ولون است؛ یعنی احتمال پیدا کردن یک ولون خاص با کسر تکانه y از پروتون. این تابع مستقل از ماهیت ذره کاوشگر یا انرژی Q^2 می باشد و تمام پیچیدگی های مفهوم حبس شدگی را در خود دارد. $\Delta q^{valon}(x, Q^2)$ تابع توزیع پارتون قطبیده داخل ولون است. در نهایت با استفاده از انتگرال پیچش رابطه (2) تابع توزیع پارتون قطبیده داخل پروتون $\Delta q^p(x, Q^2)$ را می توان به دست آورد.[٥] شایان ذکر است ما در این پژوهش همچنین با استفاده از فرمول $\delta f = \frac{f_{with\ QED} - f_{no\ QED}}{f_{no\ QED}}$ تأثیر تصحیحات QED بر روی توابع توزیع پارتونی قطبیده را مورد بررسی قرار دادیم؛ سپس نتایج خود را با مقاله فلوریان وهمکارانش در $Q^2 = 800\ Gev^2$ مقایسه کردیم.





شـــکل۱: مقایســـه نمودارهای توابع توزیع پارتونی قطبیده برای مدل ولون وگروه فلوریان [۹] به ازای انرژی $Q^2 = 800\ Gev^2$

نتایج این بررسی در شکل(۱) به تفصیل آمده است.

محاسبه سهم پارتون ها از اسپین پروتون

برای پاسخ به این پرسش بنیادی که سهم هرکدام از پارتون ها از اسپین پروتون چه مقدار است قانون جمع اسپین مطرح شد. این قانون بیان می کند که اسپین پروتون از سه جزء اساسی تشکیل شده است[۱۰]:

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{2}\Delta\Sigma + \Delta G + L_Z \qquad (3)$$

$\Delta\Sigma$ سهم کوارک ها، ΔG سهم گلوئون ها و L_z سهم تکانه زاویه ای مداری از اسپین پروتون است.

توابع توزیع پارتونی قطبیده از آن جهت اهمیت دارند که انتگرال ۰تا۱ آن ها، یا همان گشتاور مرتبه اول (first moment) به ما سهم هرکدام ازپارتون ها ازاسپین پروتون را می دهد. در نتیجه ما می توانیم سهم اسپین هرکدام ازپارتون ها از اسپین پروتون در حضور تصحیحات QCD(NLO) و QED(LO) که سبب می شود دقت پژوهش افزایش یابد را بیابیم. علاوه بر این با استفاده از تصحیحات QED می توانیم سهم فوتون ها از اسپین پروتون را هم به دست آوریم .

در این پژوهش سهم تکانه زاویه ای مداری (L_z) با استفاده از فرمول بندیQCD در مرتبه NLO ولحاظ تصحیحات QEDدر مرتبهLO در انرژی های مختلف محاسبه شده است نتایج محاسبات در جدول (۱) ارائه شده است.پیش از این گروه های مختلفی [۱۱]و [۱۲] درچارچوب شبکه QCD مقادیر تکانه زاویه ای مداری کوارک ها(L_q) وتکانه زاویه ای کل کوارک ها(J_q)و گلوئون ها(J_q) محاسبه کرده اند[۱۳]و[۱٤].

جدول۱ : گشتاور مرتبه اول پارتون ها به ازای انرژی های مختلف

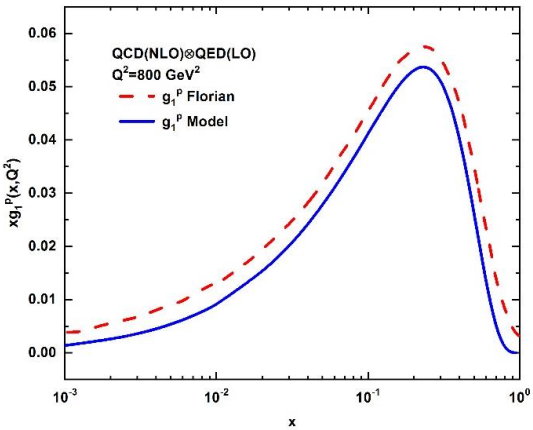
انرژی GeV^2	10	10^2	10^4	10^6	10^8
ΔG	0.3004	0.45413	0.725757	0.969676	1.19606
$\Delta\Sigma$	0.387947	0.388756	0.389814	0.390503	0.390985
$\Delta\gamma$	0.0011181	0.00185725	0.00336763	0.00492248	0.00652556
L_z	0.0045084	-0.15096525	-0.42403163	-0.66984998	-0.89807806

تابع ساختار قطبیده پروتون $g_1^p(x.Q^2)$ با لحاظ تصحیحات QCDو QED

در آزمایش های پراکندگی ناکشسان عمیق قطبیده مهم ترین کمیت قابل اندازه گیری که حاوی اطلاعات مستقیم از اسپین پارتون ها است تابع ساختار قطبیده پروتون می باشد. ارتباط این تابع ساختار با توابع توزیع پارتونی قطبیده در تقریب NLO به صورت زیر می باشد:

$$g_1 = \frac{1}{2}\sum_q e_q^2 \Big\{(\Delta q + \Delta\overline{q}) + 2a_s\Big[\Delta C_q^{(1.0)} \otimes (\Delta q + \Delta\overline{q}) + \Delta C_g^{(1.0)} \otimes (\Delta g)\Big] + 2a\Big[\Delta C_q^{(0.1)} \otimes (\Delta q + \Delta\overline{q}) + \Delta C_\gamma^{(0.1)} \otimes (\Delta\gamma)\Big]\Big\}$$

براساس محاسبات انجام شده در این پژوهش تصحیحات QED هم به صورت غیر مستقیم از طریق اصلاح Δq و هم به صورت مستقیم ازطریق جمله $\Delta\gamma$ در تابع ساختار تأثیرگذارند. با توجه به دقت مورد انتظار در شتابدهنده های نسل آینده نادیده گرفتن این تصحیحات منجر به خطایی فراتر از دقت آماری داده ها خواهد شد. به دلیل نبود داده های تجربی در انرژی های بالا برای تابع ساختار پروتون قطبیده ما پژوهش خود را با مدل فلوریان و همکاران [۹] مقایسه نموده ایم. نتایج این مقایسه در شکل (۲) آمده است.



شکل۲:مقایسه نمودارهای تابع ساختار پروتون قطبیده $g_1^p(x.Q^2)$ وگروه فلوریان [۹] به ازای انرژی $Q^2 = 800\ Gev^2$

نتیجه گیری

در این پژوهش توابع توزیع پارتونی قطبیده پروتون با لحاظ تصحیحات QCDو QED محاسبه شده اند. کمیت δf نشان می دهد که اثرات QED چند درصد است و برای داده های دقیق آینده قابل اغماض نیست. ممان اول محاسبه شده که نشان دهنده سهم کوارک ها از اسپین پروتون است توافق خوبی با داده های تجربی دارد. همینطور سهم گلوئون ها را به عنوان بخش قابل توجهی از اسپین پروتون نشان می دهد. ما در این پژوهش سهم فوتون را نیز برای نخستین بار مورد محاسبه قرار دادیم. بازسازی تابع ساختار پروتون قطبیده g_1^pاز روی توابع توزیع پارتونی قطبیده محاسبه شد و مقایسه با نمودار فلوریان و همکاران در انرژی $Q^2 = 800\ GeV^2$ سازگاری خوبی را نشان داد. این نتایج تأکیدی مجدد بر لزوم لحاظ تصحیحات QED در تفسیر داده های دقیق آینده است. همچنین بیان می کند که معمای اسپین بدون در نظر گرفتن سهم گلوئون ها و تصحیحات الکترومغناطیسی قابل حل نیست.

مرجع‌ها

[1] Thomson, M. (2013). Modern Particle Physics. Cambridge University Press.
[2] Halzen, F., & Martin, A. D. (2008). Quarks and Leptons: An Introductory Course in Modern Particle Physics. John Wiley & Sons.
[3]G. Altarelli and G. Parisi, Nucl. Phys. B126, 298 (1977)
[4] Marzieh Mottaghizadeh, Fatemeh Taghavi Shahri, Parvin Eslami, https://doi.org/10.48550/arXiv.1707.00845
[5] M. Mottaghizadeh, F. Taghavi Shahri, and P Eslami, "Analytical solutions of the QCD QED DGLAP evolution equations based on the Mellin transform technique in NLO approximation", Phys. Lett. B 773,375 (2017)
[6] J. Blümlein and S. Kurth, "Harmonic Sums and Mellin Transforms up to two-loop Order", arXiv:hep-ph/9810241 (1998).
[7]R. C. Hwa, Phys. Rev. D 22, 759 (1980).
[8] F. Arash and F. Taghavi-Shahri, JHEP 07, 071 (2007) [erratum: JHEP 08, 106 (2010)].
[9] Daniel de Florian, Lucas Palma Conte, Eur. Phys. J. C 83 (2023) 695
[10] M. Constantinou, "Status on Lattice Calculations of the Proton Spin Decomposition", arXiv:2112.08416 (2021).
[11] J. Liang, Y.-B. Yang, T. Draper, M. Gong, and K.-F. Liu (xQCD Collaboration), "Quark spins and anomalous Ward identity", Phys. Rev. D 98, 074505 (2018), arXiv:1806.08366
[12] C. Alexandrou, M. Constantinou, K. Hadjiyiannakou, K. Jansen, C. Kallidonis, G. Koutsou, A. Vaquero Aviles-Casco, and C. Wiese (ETMC), "Nucleon Spin and Momentum Decomposition Using Lattice QCD Simulations" Phys. Rev. Lett. 119, 142002 (2017), arXiv:1706.02973.
[13] R. Gupta, "Lattice QCD calculations of the quark and gluon contributions to the proton spin", arXiv:1904.00312 (2019).
[14] C. Alexandrou, S. Bacchio, M. Constantinou, J. Finkenrath, K. Hadjiyiannakou, K. Jansen, G. Koutsou, H. Panagopoulos, and G. Spanoudes (ETMC), "Complete flavor decomposition of the spin and momentum fraction of the proton using lattice QCD simulations at physical pion mass", Phys. Rev. D 101, 094513 (2020), arXiv:2003.08486.

بررسی تابع ساختار پروتون توسط یادگیری ماشین

شاهین آتشبار تهرانی[۱و۲] ؛ الهام آستارکی[۳] ؛فاطمه اربابی فر[۴]
[۱]پژوهشگاه دانش های بنیادی پژوهشکده ذرات و شتابگرها ، تهران ، ایران.
[۲]گروه فیزیک دانشکده‌ی علوم و فناوری نانو و زیستی ، دانشگاه خلیج فارس ،بوشهر، ایران
[۳]گروه فیزیک دانشگاه رازی کرمانشاه، کرمانشاه
[۴]گروه فیزیک ، دانشگاه فرهنگیان تهران، ایران صندوق پستی ۸۸۹-۱۴۶۶۵

چکیده

در این پژوهش، چهار الگوریتم یادگیری ماشینSVR ، GBoost، GPRو MLP برای پیش‌بینی تابع ساختار پروتون F_2^p بر اساس داده‌های BCDMS مقایسه شدند. این رویکرد داده‌محور، برخلاف روش‌های سنتیDGLAP ، دینامیک‌های غیرخطی پارتونی را به‌خوبی استخراج می‌کند. نتایج حاصل از ارزیابی متقابلk- نشان داد مدل‌های MLP و GPR با امتیاز R^2 بیش از ۰.۷۲، دقیق‌ترین عملکرد را دارند. در این میان، MLPبیشترین حساسیت به گرادیان‌های غیرخطی و SVR بالاترین پایداری را در برابر عدم‌قطعیت‌ها نشان دادند. یادگیری موفق فیزیک QCD بدون بیش‌برازش در این مدل‌ها، کارآمدی یادگیری ماشین را در تحلیل‌های کینماتیکی فیزیک انرژی‌های بالا تایید می‌کند.
واژه های کلیدی: یادگیری ماشین، تابع ساختار پروتون، QCD، رگرسیون، داده‌های.BCDMS

Investigation of the Proton Structure Function Using Machine Learning

Shahin Atashbar Tehrani[1,2], Elham Astaraki[3], Fatemeh Arbabifar[4]

[1]School of Particles and Accelerators, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), P.O.Box 19395-5531, Tehran, Iran
[2]Department of Physics, Faculty of Nano and Bio Science and Technology, Persian Gulf University, P.O. Box: 75169, Bushehr, Iran.
[3]Department of Physics, Razi University, Kermanshah 67149, Iran
[4]Department of Physics Education, Farhangian University, P.O.Box 14665-889, Tehran, Iran.

Abstract

In this study, four machine learning algorithms SVR, GBoost, GPR, and MLP were compared for predicting the proton structure function F_2^p based on BCDMS data. Unlike traditional DGLAP-based methods, this data-driven approach effectively extracts complex partonic non-linear dynamics. Results from k-fold cross-validation indicate that the MLP and GPR models achieve superior performance, with R^2scores exceeding 0.72. Specifically, MLP exhibits the highest sensitivity to non-linear gradients, while SVR demonstrates the greatest stability against experimental uncertainties. The successful learning of underlying QCD physics without overfitting confirms the efficiency of machine learning for kinematic analysis in high-energy physics.
***Keywords**: Machine Learning, Proton Structure Function, QCD, Regression, BCDMS data.*
PACS No. 13

مقدمه

یادگیری ماشین امروزه به ابزاری نیرومند در تحلیل‌های علمی بدل گشته است و انعطاف‌پذیری بالایی در مدل‌سازی روابط پیچیده و غیرخطی فراهم می‌کند. مدل‌سازی پیش‌بینانه، نقشی اساسی در عرصه‌های گوناگونی از علم مواد گرفته تا دانش مالی ایفا می‌کند. در

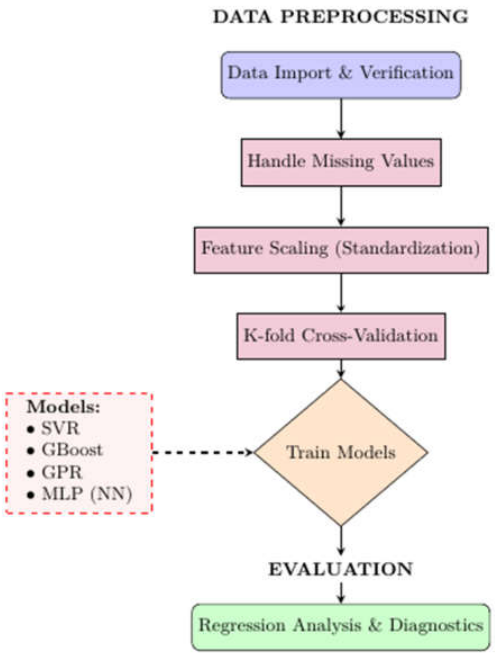
سال‌های اخیر، فیزیک انرژی‌های بالا نیز -چه در شاخه نظری و چه در شاخه تجربی- شاهد استقبال چشمگیری از روش‌های یادگیری ماشین بوده است. این موضوع به‌درستی در گزارش Community White Paper [۱] و مرور جامعی که در مرجع [۲] آمده مستند گردیده است. در این پژوهش، رویکردی جایگزین و داده‌محور مبتنی بر یادگیری ماشین[۱] (ML) ارائه می‌دهیم که امکان مدل‌سازی مستقیم $F_2^p(x,Q^2)$ بر پایهٔ مشاهدات تجربی را فراهم می‌کند. برای پیش‌بینی تابع ساختار پروتون به طور مشخص، از چهار الگوریتم رگرسیون نظارت‌شده، شامل رگرسیون بردار پشتیبان[۲] SVR، رگرسیون گرادیان بوستینگ[۳] GBoost، رگرسیون فرآیند گاوسی[۴] GRP و شبکه عصبی پرسپترون چند لایه[۵] MLP ، استفاده شده است. داده‌های به‌کاررفته در این مطالعه از مجموعه‌دقیق BCDMS [۳] برگرفته شده‌اند، همچنین در این رویکرد، برخلاف روش‌های متعارف، نیازی به حل معادلات تکامل DGLAP نیست [٤]. در این پژوهش، چهار الگوریتم یادگیری ماشین

[۱] Machine Learning
[۲] Support Vector Regression
[۳] Gradient Boosting Regression
[٤] Gaussian Process Regression
[٥] Multilayer Perceptron Neural Network

نظارت شده که قبلاً ذکر شد برای پیش‌بینی تابع ساختار پروتون F_2^p مورد بررسی قرار می‌گیرند[۵].

مواد و روش‌ها

در این پژوهش، از داده‌های تابع ساختار پروتون F_2^p مربوط به آزمایش BCDMS استفاده شده است. این مجموعه‌داده شامل ۷۰۳ نقطه تجربی بوده و بازه گسترده‌ای از متغیر مقیاس‌بندی بیورکن x و مربع تکانه-چهاربرداری انتقالی Q^2 را پوشش می‌دهد. در هر نقطه داده، دو متغیر x و Q^2 به‌عنوان ورودی‌های مدل و مقدار اندازه‌گیری‌شده تابع ساختار $F_2^p(x,Q^2)$ به‌عنوان خروجی هدف در نظر گرفته شد. دقت بالای داده‌ها و پوشش مناسب ناحیه کینماتیکی، این مجموعه‌داده را به گزینه‌ای مناسب برای به‌کارگیری روش‌های داده‌محور یادگیری ماشین در فیزیک انرژی‌های بالا تبدیل می‌کند. به‌منظور افزایش پایداری مدل‌ها و بهبود فرآیند یادگیری، داده‌ها پیش از آموزش مورد پیش‌پردازش قرار گرفتند. با توجه به آن‌که متغیرهای x و Q^2 در چند مرتبه بزرگی تغییر می‌کنند، از استانداردسازی ویژگی‌ها برای هم‌مقیاس‌سازی ورودی‌ها استفاده شد. این مرحله باعث می‌شود هیچ‌یک از متغیرها به دلیل دامنه عددی بزرگ‌تر، تأثیر نامتناسبی بر تابع خطا نداشته باشند. همچنین، این کار به پایداری فرآیند یادگیری، به‌ویژه در مدل‌های مبتنی بر گرادیان، کمک می‌کند. در این مطالعه، چهار الگوریتم رگرسیون یادگیری ماشین شامل رگرسیون بردار پشتیبان (SVR)، تقویت گرادیان (GBoost)، رگرسیون فرآیند گاوسی (GPR) و پرسپترون چندلایه (MLP) برای پیش‌بینی تابع ساختار پروتون مورد بررسی و مقایسه قرار گرفتند. این مدل‌ها به دلیل توانایی مناسب در مدل‌سازی روابط غیرخطی و تعمیم‌پذیری بالا انتخاب شدند. هدف از این مقایسه، ارزیابی عملکرد هر مدل در بازتولید رفتار تابع ساختار پروتون در ناحیه‌های مختلف کینماتیکی است. برای اطمینان از استحکام آماری نتایج و جلوگیری از بیش‌برازش، از روش اعتبارسنجی متقابل k-لایه استفاده شد. در این روش، مجموعه‌داده به k زیرمجموعه تقسیم شد و در هر مرحله، مدل روی $k-1$ بخش آموزش داده شده و روی بخش باقی‌مانده ارزیابی شد. این فرآیند به‌صورت تکراری انجام گرفت تا هر نقطه داده یک‌بار در مجموعه آزمون قرار گیرد. چنین رویکردی موجب می‌شود ارزیابی عملکرد مدل‌ها از حالت وابسته به یک تقسیم‌بندی خاص خارج شده و برآوردی دقیق‌تر و قابل‌اعتمادتر از توان تعمیم مدل‌ها به دست آید. برای سنجش عملکرد مدل‌ها، از چندین معیار آماری و رگرسیونی استفاده شد. در این میان، ضریب تعیین R^2 به‌عنوان شاخص اصلی دقت پیش‌بینی در نظر گرفته شد. همچنین، میانگین و انحراف معیار معیارهای خطا در تمام تکرارهای اعتبارسنجی متقابل محاسبه شد تا میزان پایداری مدل‌ها در شرایط مختلف داده‌ای بررسی شود. افزون بر این، تحلیل توزیع باقیمانده‌ها و بررسی همبستگی بین مقادیر واقعی و پیش‌بینی‌شده انجام شد تا اطمینان حاصل شود که مدل‌ها علاوه بر کاهش خطای عددی، روندهای فیزیکی نهفته در داده‌های تابع ساختار پروتون را نیز به‌درستی بازنمایی می‌کنند. تمامی مدل‌های رگرسیون یادگیری ماشین به‌کاررفته در این مطالعه با استفاده از scikit-learn کتابخانه پرکاربرد[۵]پیاده‌سازی شده‌اند. این چارچوب مبتنی بر زبان برنامه‌نویسی پایتون، محیطی یکپارچه و سازگار برای ساخت، آموزش و ارزیابی مدل‌های یادگیری ماشین فراهم می‌کند و به دلیل سادگی، انعطاف‌پذیری و کارایی بالا، به عنوان ابزاری قابل اعتماد برای مسائل رگرسیون مورد بررسی در این پژوهش مورد استفاده قرار گرفته است. شکل ۱ روند کلی فرآیند رگرسیون برای پیش‌بینی تابع ساختار پروتون را نشان می‌دهد. در این فرآیند، داده‌های ورودی ابتدا پیش‌پردازش و نرمال‌سازی شده و سپس به مدل‌های یادگیری ماشین وارد می‌شوند. پس از مرحله آموزش، مدل‌ها با استفاده از داده‌های آزمون مورد ارزیابی قرار گرفته و در نهایت بهترین مدل بر اساس شاخص‌های عملکرد انتخاب می‌شود.



شکل ۱ -فرایند رگرسیون برای پیش‌بینی تابع ساختار پروتون F_2^p

تمرکز بر داده‌های BCDMS در این مرحله از تحقیق به دلیل کیفیت بالا و پوشش مناسب در نواحی خاصی از x و Q^2 بوده است تا کارایی اولیه مدل‌های پیشنهادی سنجیده شود. با این حال، نویسندگان تایید می‌کنند که برای تعمیم‌دهی بیشتر، در فازهای بعدی تحقیق، داده‌های سایر آزمایش‌ها مانند (HERA) نیز اضافه خواهد شد.

نتایج و بحث

دقت پیش‌بینی مدل‌های مورد مطالعه با استفاده از سه معیار آماری شامل ضریب تعیین(R^2)، میانگین قدر مطلق خطا (MAE)و ریشه میانگین مربع خطا (RMSE) مورد ارزیابی قرار گرفت. پیش از ارائه نتایج، فراپارامترها و تنظیمات آموزشی

مدل‌های یادگیری ماشین مورد استفاده در این پژوهش در جدول ۲ ارائه شده است. این تنظیمات شامل پارامترهای اختصاصی هر مدل، راهبرد آموزش، روش برآورد عدم‌قطعیت و تنظیمات مشترک مربوط به پیش‌پردازش داده‌ها، تقسیم‌بندی مجموعه داده و اعتبارسنجی متقاطع است. گزارش این اطلاعات با هدف افزایش شفافیت روش تحقیق و فراهم کردن امکان بازتولید نتایج انجام شده است. همچنین خلاصه نتایج معیارهای آماری برای مجموعه‌داده‌های آموزش و آزمون در جدول ۳ ارائه شده است. نتایج جدول ۳ نشان می‌دهد که تمامی مدل‌های مورد استفاده توانسته‌اند با دقت قابل قبولی داده‌ها را مدل‌سازی کنند، اما در میان آن‌ها تفاوت‌هایی از نظر میزان خطا، پایداری و قدرت تعمیم مشاهده می‌شود. مدل رگرسیون بردار پشتیبان با وجود عملکرد مناسب، دارای مقادیر خطای بالاتری نسبت به برخی مدل‌های دیگر بوده و ضریب تعیین آن نیز کمتر است که بیانگر محدودیت نسبی این روش در استخراج کامل روابط غیرخطی موجود در داده‌های پراکندگی غیرکشسان عمیق می‌باشد. با این حال، تحلیل پایداری نشان داد که این مدل بالاترین میانگین ضریب تعیین در اعتبارسنجی متقاطع (0.6204) را همراه با کمترین انحراف معیار ارائه می‌دهد. این ویژگی نشان‌دهنده استحکام و پایداری بالای SVR در کل مجموعه داده و حساسیت کمتر آن نسبت به نحوه تقسیم‌بندی داده‌ها است. مدل فرآیند گاوسی (GPR) عملکرد پایدارتری از خود نشان داده و توانسته است خطاهای پیش‌بینی را کاهش دهد، هرچند اختلاف اندکی میان داده‌های آموزش و آزمون مشاهده می‌شود. همچنین مقدار منفی بیش‌برازش برای این مدل حاکی از آن است که GPR به‌خوبی تنظیم شده و به جای انطباق بیش از حد با نویزهای تجربی، روندهای فیزیکی اصلی موجود در داده‌ها را یاد گرفته است. این ویژگی سبب می‌شود که مدل از قابلیت تعمیم بالایی برخوردار باشد و بتواند مقادیر تابع ساختار پروتون را حتی در نواحی سینماتیکی با داده‌های محدود یا دارای عدم‌قطعیت زیاد پیش‌بینی کند. در مقابل، مدل گرادیان بوستینگ با دستیابی به بیشترین مقدار ضریب تعیین در داده‌های آزمون (R^2= 0.7627)و مقادیر نسبتاً پایین خطا، عملکرد بسیار مناسبی در تعمیم‌پذیری نشان داده است. این موضوع بیانگر توانایی روش‌های مبتنی بر تقویت تدریجی در استخراج الگوهای پیچیده و کاهش خطاهای پیش‌بینی می‌باشد. علاوه بر این، مقدار نسبتاً پایین بیش‌برازش و انحراف معیار مناسب در اعتبارسنجی متقاطع نشان می‌دهد که این مدل از تعادل مطلوبی میان دقت و پایداری برخوردار است. از سوی دیگر، مدل شبکه عصبی پرسپترون چندلایه نیز با کمترین مقادیر خطا عملکرد قابل قبولی ارائه کرده است. ساختار چندلایه و قابلیت یادگیری روابط غیرخطی پیچیده در این مدل سبب شده است که بتواند رفتار داده‌های پراکندگی غیرکشسان عمیق را با دقت مناسبی بازسازی کند. با این حال، انحراف معیار نسبتاً بالای این مدل در اعتبارسنجی متقاطع نشان می‌دهد که عملکرد شبکه عصبی به نحوه تقسیم داده‌ها حساس بوده و از پایداری کمتری نسبت به مدل‌هایی مانند SVR برخوردار است. با وجود این، مقدار منفی بیش‌برازش بیانگر آن است که مدل شبکه عصبی نیز توانسته است روندهای فیزیکی داده‌ها را بدون انطباق بیش از حد با نویزهای تجربی یاد بگیرد. به طور کلی، نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که روش‌های مبتنی بر یادگیری ماشین، به‌ویژه مدل‌های GBoostوMLP ، از توانایی بالایی در پیش‌بینی تابع ساختار پروتون برخوردار هستند، در حالی که مدل SVR از نظر پایداری و قابلیت اطمینان عملکرد برجسته‌تری ارائه می‌دهد. همچنین، مدل‌های GPR و شبکه عصبی به دلیل تعمیم‌پذیری مطلوب، گزینه‌های مناسبی برای تحلیل داده‌های پیچیده در فیزیک ذرات محسوب می‌شوند.

مدل	فراپارامترهای اصلی
SVR Ensemble	$C = 10, \varepsilon = 0.1, \gamma = scale, Bagging, Kernel = RBF$
GPR	$\upsilon = 1.5$, $l = 10$ تعداد دفعات شروع مجدد بهینه‌ساز: ۱۰
MLP Ensemble	معماری(50،100،100) ، ReLU، Adam، (max_iter=1000) ،(learning_rate_init=0.001)
Gradient Boosting Ensemble	(learning_rate=0.1) ،(n_estimators=100)، (subsample=0.8) ،(max_depth=3)

جدول ۲. فراپارامترهای اصلی مدل‌های یادگیری ماشین مورد استفاده در این پژوهش

هم چنین پیش‌پردازش داده‌ها با StandardScalerانجام شد، داده‌ها با نسبت ٪80آموزش و ٪۲۰ آزمون تقسیم شدند و اعتبارسنجی با روش K-Foldپنج‌بخشی انجام گرفت.

مدل	RMSE (آموزش)	MAE (آموزش)	R^2 (آموزش)	RMSE (آزمون)	MAE (آزمون)	R^2 (آزمون)
SVR	0.0996	0.0799	0.6375	0.0972	0.0800	0.7080
GBoost	0.0924	0.0719	0.6742	0.0975	0.0744	0.7627
GPR	0.0986	0.0765	0.6448	0.0947	0.0721	0.7331
MLP	0.0933	0.0706	0.6574	0.0933	0.0706	0.7310

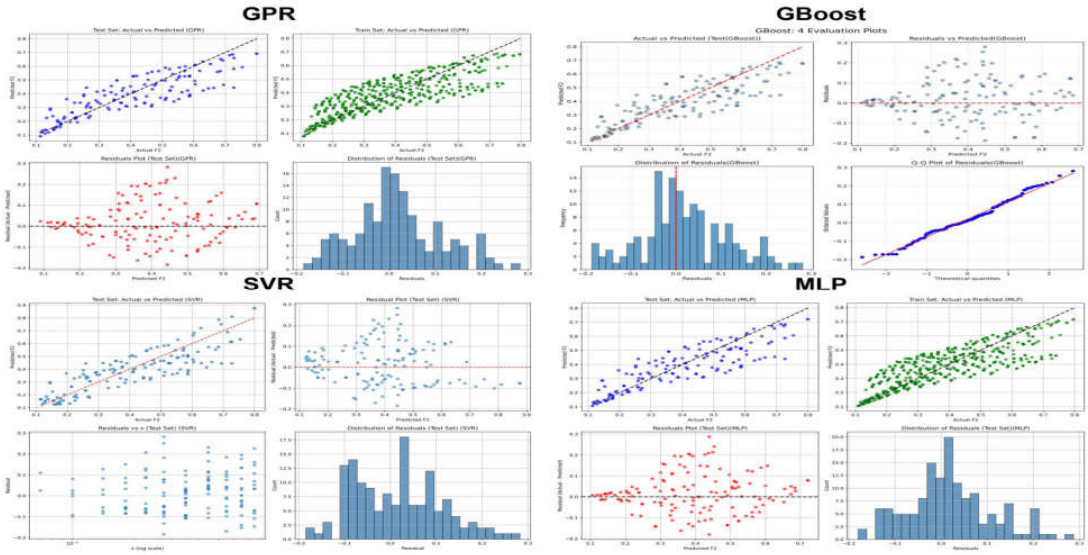
جدول ۳. مقایسه معیارهای عملکرد مدل‌های رگرسیون

مدل	Mean CV (R^2) (± Std)	Overfitting (ΔR^2)	Test (R^2) (Global)	وضعیت پایداری
SVR	0.6204 ± 0.0412	Low	0.7080	High
GBoost	0.5797 ± 0.0698	−0.0319	0.7062	Stable
GPR	0.4603 ± 0.0510	−0.0783	0.7231	Very Stable
MLP	0.4496 ± 0.2238	−0.0736	0.7310	High Variance

جدول ۴. تحلیل پایداری و تعمیم‌پذیری مدل‌های یادگیری ماشین

شکل ۲ نتایج تحلیل عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین شامل MLP، GPR، SVRو GBoost را نشان می‌دهد. نمودارهای «مقادیر واقعی در برابر مقادیر پیش‌بینی‌شده» بیانگر دقت مناسب مدل‌ها در بازسازی تابع ساختار پروتون هستند. همچنین توزیع باقی‌مانده‌ها حول صفر و پراکندگی تصادفی خطاها نشان می‌دهد که مدل‌ها توانسته‌اند الگوهای فیزیکی داده‌ها را بدون ایجاد خطای سیستماتیک یاد بگیرند. در میان مدل‌ها، MLPو GPRعملکرد دقیق‌تر و پایدارتری

ارائه داده‌اند، در حالی که SVR و GBoost نیز قابلیت تعمیم مناسبی در کل بازه سینماتیکی نشان می‌دهند.



شکل ۲. ارزیابی عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین در پیش‌بینی تابع ساختار پروتون

مزیت اصلی روش‌های یادگیری ماشین در این تحقیق، استقلال از فرضیات مدل‌محور و کاهش پیچیدگی‌های محاسباتی حل معادلات DGLAPاست.

نتیجه گیری

نتایج این پژوهش نشان داد که مدل‌های یادگیری ماشین توانایی بالایی در پیش‌بینی تابع ساختار پروتون دارند. در میان مدل‌های مورد بررسی، GBoostو MLP بهترین عملکرد را از نظر دقت پیش‌بینی ارائه دادند، در حالی که SVR از پایداری بیشتری برخوردار بود. همچنین تحلیل خطا و اعتبارسنجی متقاطع نشان داد که مدل‌ها از قابلیت تعمیم مناسبی برخوردار بوده و می‌توانند برای تحلیل داده‌های پیچیده فیزیک ذرات مورد استفاده قرار گیرند. باید توجه داشت که خطاهای آماری و سیستماتیک داده‌های BCDMS که در تابع هزینه (Loss Function)از طریق تکنیک‌های Bootstrapping در آموزش مدل‌ها لحاظ شده‌اند. هدف اصلی این مقاله ارائه یک "اثبات مفهوم" (Proof of Concept)برای جایگزینی توابع ساختار مشاهده‌پذیر با مدل‌های یادگیری ماشین است. پیش‌بینی مستقیم F_2 می‌تواند به عنوان یک ابزار سریع و جایگزین (Surrogate Model) در تحلیل‌های سریع داده‌های آزمایشگاهی، بدون نیاز به فرآیند زمان‌بر فاکتورگیری و برازشPDF ، مورد استفاده قرار گیرد.

دسترسی به داده ها و کد

تمامی داده‌ها و کدهای منبع استفاده شده در این پژوهش، به صورت عمومی در نشانی زیر در دسترس هستند:
https://github.com/atashbart/MachinlearningF2p

مرجع‌ها

[۱] K. Albertsson, P. Altoe, D. Anderson, J. Anderson, M. Andrews, J. P. Araque Espinosa, A. Aurisano, L. Basara, A. Bevan and W. Bhimji, et al. J. Phys. Conf. Ser. 1085, no.2, 022008 (2018).
[۲] A. Radovic, M. Williams, D. Rousseau, M. Kagan, D. Bonacorsi, A. Himmel, A. Aurisano, K. Terao and T. Wongjirad, Nature 560, no.7716, 41-48 (2018).
[۳] A. C. Benvenuti et al. [BCDMS], Phys. Lett. B 223, 485-489 (1989).
[۴] N. Olanj, M. L. Parsa and L. Asgari, Phys. Lett. B 834, 137472 (2022).
[۵]Shahin Atashbar Tehrani, Elham Astaraki , Fatemeh Arbabifar Hep-ph 2606.06414
[۶] https://www.scikit-learn.org.

استفاده از عناصر ماتریسی دامنه‌ی احتمال برای جستجوی نظریه‌ی میدان موثر

قاسمی ، عظیمه ؛ بخشیان‌سهی، حامد

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان ، اصفهان

چکیده

نظریه میدان‌های مؤثر به عنوان یکی از مهم‌ترین توسعه‌های مدل استاندارد فیزیک ذرات، در سال‌های اخیر توجه زیادی را به خود جلب کرده است. کشف بوزون هیگز در سال ۲۰۱۲ آخرین قطعه گمشده مدل استاندارد را تکمیل کرد، اما با وجود تلاش‌های گسترده آزمایش‌های انرژی بالا، تاکنون هیچ نشانه مستقیمی از ذرات جدید فراتر از مدل استاندارد مشاهده نشده است. این موضوع باعث شده است که رویکردهای مدل‌ناوابسته، به‌ویژه نظریه میدان‌های مؤثر، اهمیت بیشتری پیدا کنند. در این مطالعه ما از یک رویکرد وزن‌دهی مجدد میدان موثر درجه دوم مبتنی بر عناصر ماتریسی استفاده می‌کنیم. در روش پیشنهادی، با استفاده از جمله تداخل میدان موثر با مدل استاندارد و دامنه احتمال حاصل از میدان موثر، تلاش می‌کنیم مقدار ضریب ویلسون در فرایند تولید بوزون هیگز به همراه دو جت و واپاشی هیگز به دو فوتون را تعیین کنیم.

واژه های کلیدی: نظریه میدان‌های موثر، مدل استاندارد، هیگز، ضرایب ویلسون ،عناصر ماتریسی

Using Matrix Elements for Effective Field Theory Searches

Ghasemi, Azime; Bakhshiansohi, Hamed

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

Abstract

Effective Field Theory (EFT) has recently gained significant attention as one of the most vital extensions of the Standard Model (SM) of particle physics. Although the discovery of the Higgs boson in 2012 completed the Standard Model, the lack of direct evidence for new particles beyond the SM, despite extensive efforts in high-energy experiments, has underscored the importance of Ultraviolet completion approaches, particularly EFT. In this study, By utilizing the interference term between the effective field and the Standard Model, as well as the amplitude derived from the effective field, we aim to determine the Wilson coefficient in the process of Higgs boson production in association with two jets, followed by the decay of the Higgs boson into two photons., we employ a second-order matrix-element-based EFT reweighting approach.

***Keywords**: Effective Field Theory, Standard Model, Higgs, Wilson Coefficients, Matrix Elements.*
PACS No. 12.60.−i

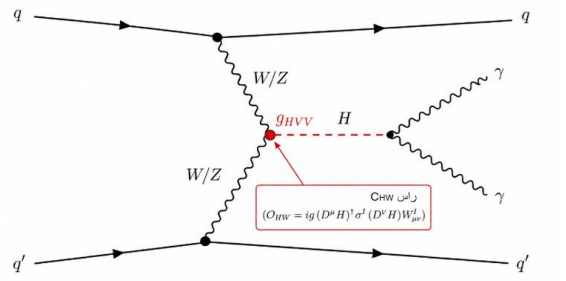
مقدمه

به طور کلی، برای مطالعه فیزیک جدید دو رهیافت اصلی وجود دارد. در دسته نخست، یعنی رویکرد مدل‌وابسته نظریه‌هایی مانند ابرتقارن قرار می‌گیرند که ساختار نظری مشخصی دارند و ذرات، برهم‌کنش‌ها و پارامترهای آن‌ها از چارچوب ریاضی نظریه قابل استخراج است. در این رویکرد، جزئیات فیزیک جدید به طور مستقیم مدل‌سازی می‌شوند. در مقابل، نظریه میدان‌های مؤثر[1] رویکردی مدل‌ناوابسته ارائه می‌دهد. در این چارچوب فرض می‌شود که مقیاس انرژی فیزیک جدید فراتر از دسترس

آزمایش‌های کنونی است و بنابراین به جای توصیف کامل نظریه بنیادی، تنها آثار مؤثر آن در انرژی‌های قابل دسترس بررسی می‌شود. در این پژوهش، رویداد

$$P\,P \rightarrow q\,q\,H\,,\,H \rightarrow a\,a$$

را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. همانطور که در شکل 1 می‌بینید این فرایند شامل تولید بوزون هیگز به همراه دو جت و واپاشی هیگز به دو فوتون است[2]. هدف ما، بررسی تأثیر ضریب ویلسون C_{HW}در چارچوب نظریه میدان‌های مؤثر در این رویداد است.



شکل 1: نمودار تولید دو فوتون و دو کوارک از برخورد دو پروتون به روش و تاثیر پارامتر C_{HW}

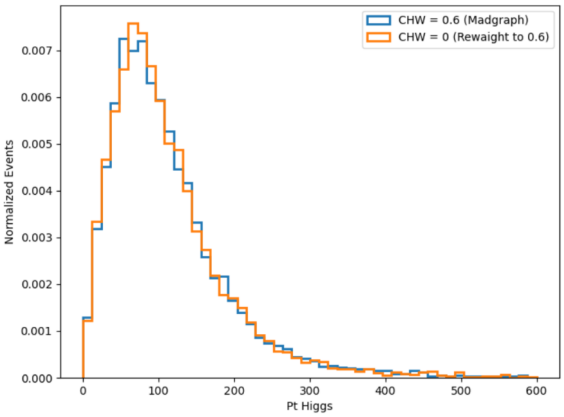
شبیه‌سازی و آنالیز رویداد

برای شبیه‌سازی رویدادهای مورد مطالعه، ابتدا فرایند مورد نظر را در نرم‌افزار MadGraph [3]با مدل SMEFT [4]تولید کرده‌ایم. سپس به منظور شبیه‌سازی دوش پارتونی،از نرم‌افزارPythiaاستفاده کردیم. در مرحله بعد، اثرات آشکارساز با استفاده از بسته[5] Delphesشبیه‌سازی شده‌است.

در MadGraph دو روش برای شبیه‌سازی نقاط مختلف در فضای پارامترهای نظریه میدان‌های مؤثر وجود دارد. در روش نخست، رویدادها مستقیماً برای یک مقدار مشخص از ضریب ویلسون تولید می‌شوند. در این روش، مقدار پارامتر مورد نظر در فایل پارامترهای MadGraph تنظیم شده و نمونه رویدادها برای همان نقطه از فضای پارامتر تولید می‌شود.

در روش دوم، ابتدا رویدادها در نقطه مرجع مدل استاندارد C_{HW}=0 تولید شده و سپس با استفاده از بستهReweight [6]، وزن رویدادها برای مقادیر مختلف ضریب ویلسون محاسبه می‌شود. این روش امکان مطالعه نقاط متعدد در فضای پارامتر را بدون نیاز به تولید مجدد رویدادها فراهم می‌کند و در نتیجه هزینه محاسباتی تحلیل را به طور قابل توجهی کاهش می‌دهد.

با هردو روش برای مقادیر C_{HW} = [0, 0.1 , 0.6, 1, 2] نمونه‌ها را تولید می‌کنیم. نمونه‌های تولیدشده به صورت مستقیم یعنی روش اول به عنوان مرجع در نظر گرفته شده و نتایج حاصل از روش بازوزن‌دهی را با آن‌ها مقایسه می‌کنیم.(شکل 2)



شکل 2: تکانه عرضی هیگز تولید شده با دو روش (با مدگراف و با بازوزن‌دهی)

در MadGraph وزن رویدادها در چارچوب نظریه میدان‌های مؤثر بر اساس رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$\frac{W_{EFT}}{W_{SM}} = \frac{\sigma_{SM}}{\sigma_{EFT}} = 1 + l(C_{HW}) + q(C_{HW})^2 \qquad (1.1)$$

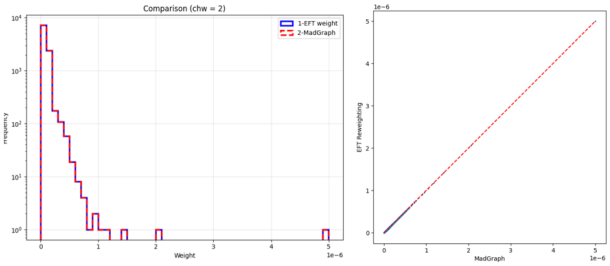
این رابطه از بسط سطح مقطع فرآیند در حضور اپراتورهای نظریه میدان‌های مؤثر به دست می‌آید. در این فرمول، W_{SM}وزن رویداد در مدل استاندارد وW_{EFT} وزن متناظر با مقدار مشخصی از ضریب ویلسون C_{HW}است. جمله خطی l ناشی از تداخل دامنه احتمال مدل استاندارد با دامنه احتمال حاصل از اپراتور مؤثر بوده و بیانگر سهم تداخلی در سطح مقطع است. همچنین جمله درجه دوم q از مربع دامنه احتمال ناشی از اپراتور مؤثر به دست می‌آید و سهم خالص نظریه میدان‌های مؤثر را توصیف می‌کند.

بنابراین، توزیع l و q امکان بازسازی وزن رویدادها را برای هر مقدار دلخواه از ضریب ویلسون فراهم می‌کنند.

مقدار l و q به طور مستقیم خروجی MadGraph نیستند ولی می‌توان مقادیر آنها را با استفاده از رابطه‌ی (1.1) بدست آورد.

برای هر رویداد، با استفاده از دو وزن متناظر با دو مقدار متفاوت از C_{HW}، دستگاهی شامل دو معادله و دو مجهول تشکیل می‌شود با حل این دستگاه، مقادیر ضرایب l و q برای هر رویداد استخراج می‌شوند

برای ارزیابی صحت روش استخراج ضرایب l و q ، توزیع‌های حاصل از بازسازی وزن‌ها با توزیع‌های اصلی تولیدشده توسط مدگراف مقایسه شدند.



ب الف

شکل 3:الف) مقایسه توزیع بازسازی شده وزن از l و q ورابطه (1.1) با توزیع خروجی مستقیم از مدگراف ب) تطابق کامل روی خط x=y

مقدار میانگین اختلاف بین مقادیر وزن $1.37e^{-16}$ بدست آمد که در حد خطای کامپوتری است و میتوان نتیجه گرف تطابق کامل است و صحت محاسبه و عملکرد صحیح روش بازوزن‌دهی را تأیید می‌کند.

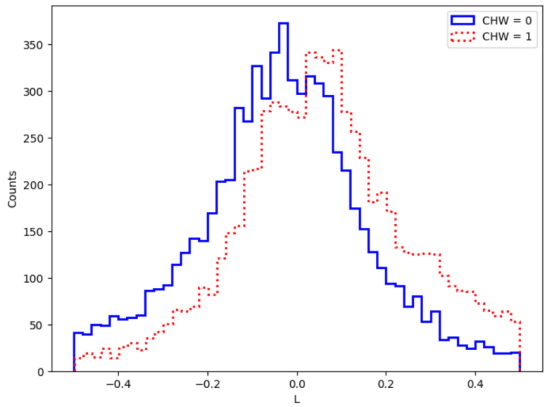
جداسازی نظریه میدان موثر از مدل استاندارد

ایده اصلی این پژوهش این است که ضرایب l و q به مقدار ضریب ویلسون C_{HW} وابسته هستند و با تغییر این ضریب، توزیع آن‌ها نیز تغییر می‌کند. به عبارت دیگر، هر مقدار از C_{HW} اثر مشخصی بر شکل توزیع متغیرهای l و q می‌گذارد. بنابراین انتظار می‌رود که با بررسی و مقایسه این توزیع‌ها بتوان اطلاعاتی درباره مقدار ضریب ویلسون به دست آورد و در نهایت آن را تعیین کرد.

در این مطالعه، توزیع عناصر ماتریس‌عنصر به عنوان ابزاری برای جستجوی آثار نظریه میدان مؤثر و استخراج مقدار ضریب ویلسون مورد استفاده قرار گرفته است. این چارچوب به طور قابلیت توسعه برای تعیین حدود بر ضرایب ویلسون را نیز داراست؛ با این حال در این مقاله تمرکز اصلی بر روی استخراج مقدار بهینه پارامتر بوده است..

مزیت این روش این است که به‌طور کاملا یکسان برای تمام جملات میدان‌های موثر و برای تمام ضرایب ویلسون قابل تعمیم است برای مثال کاربرد این روش تنها به ضریب ویلسون C_{HW}و رویداد *VBFHiigs*محدود نیست و می‌تواند در مطالعات مشابه برای استخراج سایر پارامترهای فیزیکی در رویدادهای دیگر نیز مورد استفاده قرار گیرد. این چارچوب قابلیت توسعه برای تعیین حد بر ضرایب ویلسون را نیز داراست؛ با این حال در این مقاله تمرکز اصلی بر روی استخراج مقدار بهینه پارامتر بوده است.

.در شکل زیر، توزیع l برای دو مقدار مختلف C_{HW} نمایش داده شده است. همان‌طور که پیش‌تر نیز اشاره شد، توزیع‌های l و q به مقدار ضریب ویلسون وابسته هستند و همانطور که در می‌بینید تغییر در این ضریب می‌تواند شکل توزیع‌ها را به‌طور محسوسی تحت تأثیر قرار دهد.

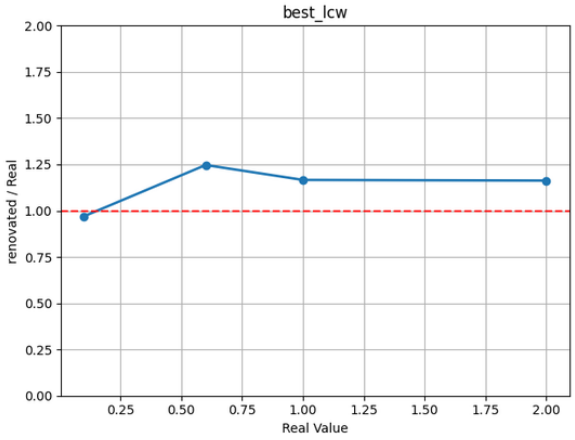


شکل 4: وابستگی توزیع l به مقدار CHW

با داشتن مقادیر l و q و بهره‌گیری از رابطه (1.1)، می‌توانیم از نمودار مرجع ($C_{HW}=0$) به توزیع متناظر با حالت مورد نظر ($C_{HW}=1$) برسیم و آن را بازسازی کنیم.

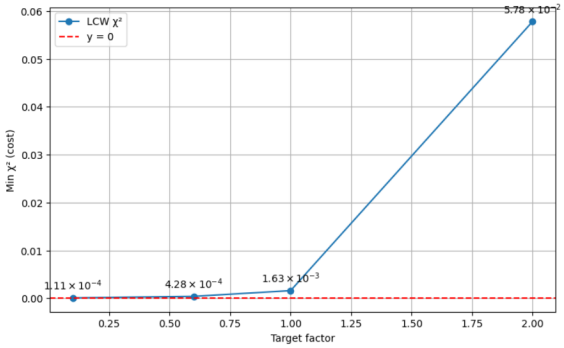
با این حال، هدف این پژوهش صرفاً بازسازی توزیع‌ها نیست، بلکه تعیین مقدار ضریب ویلسون از روی داده‌های موجود است. برای این منظور، توزیع‌های بازسازی‌شده با استفاده از ضرایب l و q با توزیع‌های حاصل از نمونه‌های تولیدشده در نقاط مرجع مختلف مقایسه و برازش شدند. در فرآیند برازش، مقدار C_{HW} به عنوان پارامتر آزاد در نظر گرفته شد و مقدار بهینه آن از طریق بیشترین تطابق میان هیستوگرام‌ها استخراج گردید.

نتایج نهایی برازش برای نمونه‌های دارای مقادیر مختلفC_{HW} در شکل 5 ارائه شده است. مقایسه مقادیر استخراج‌شده با مقادیر واقعی مورد استفاده در تولید نمونه‌ها، معیاری برای ارزیابی دقت و کارایی روش پیشنهادی محسوب می‌شود.



شکل 5: نسبت مقدار بازسازی شده به مقدار واقعی پارامتر CHW

نتایج این شکل نشان می‌دهند که ضرایب l و q حاوی اطلاعات معناداری درباره وابستگی رویدادها به ضریب ویلسون هستند و می‌توان از آن‌ها برای تخمین مقدار C_{HW} استفاده کرد، هرچند برای دستیابی به دقت بیشتر ممکن است نیاز به بهبود روش برازش باشد.



شکل 6: Min χ2 برای مقدار CHW

در **شکل 6** مقادیر کمینه تابع χ^2 ازرابطه (1.2) بدست می‌آید . همان‌طور که مشاهده می‌شود، با افزایش مقدار C_{HW} ، حساسیت یافتن پارامتر کم می‌شود.

$$\chi^2 = \frac{(l_{Real} - l_{Pred})^2}{\sqrt{l_{Real}}^2} \qquad (2.1)$$

نتیجه

در تحلیل‌های مبتنی بر نظریه میدان مؤثر، روش‌های مختلفی برای بازوزن‌دهی استفاده می‌شود.یکی ازین روش‌ها بازوزن‌دهی بر اساس روش مورفینگ [7]می‌باشد که امکان درون‌یابی بین نقاط مختلف فضای پارامترهای میدان موثر را فراهم می‌کندو توسط ابزار Madminer[8] که از مجموعه MadGraphاست انجام می‌شود

ما از یک رویکرد بازوزن‌دهی مستقیم مبتنی بر عناصر ماتریسی استفاده کردیم که وزن‌دهی رویدادها به‌صورت صریح و بر اساس عناصر ماتریسی انجام می‌شود.

در این پژوهش، به جای استفاده مستقیم از مشاهده‌پذیرهای سینماتیکی مرسوم مثل تکانه که در آن تنها بخشی از اطلاعات موجود در فضای فاز رویدادها در فرایند برازش مورد استفاده قرار می‌گیرد، توزیع ضرایب l و qاستخراج شده را برازش کردیم که سبب استفاده بیشتر از دانش فیزیکی می‌شود.این ترتیب و شیوه تحلیل، امکان استفاده مستقیم از ساختار ماتریس‌عنصر در سطح رویداد را فراهم کرد؛ به نظر می‌رسد این مطالعات در سطح شبیه‌سازی می‌تواند مارا در جستجوی میدان موثر به دقت خوبی برساند و امیدواریم در مطالعات CMSو ATLAS باعث بهبود نتایج شود .

نتایج ما نشان داد روش فوق امکان استخراج مقدار C_{HW} را فراهم میکند چون این روش بر پایه ضرایب حاصل از عناصر ماتریس ی بنا شده است و به یک مشاهده‌پذیر یا فرایند خاص محدود نمی‌شود وبنابراین، این رویکر می‌تواند ضرایب ویلسون در چارچوب نظریه میدان مؤثر را تعیین کند .

مرجع‌ها

[1] Ilaria Brivio and Michael Trott; “The Standard Model as an Effective Field Theory”; arXiv:1706.08945v3 [hep-ph] 12 Nov 2018.

[2] Yaquan Fang; “Study of VBF Higgs via Di-photon Decay at ATLAS”; School of Physics and Astronomy, Shanghai Jiao Tong University.

[3] ohan Alwall(1), Michel Herquet(2), Fabio Maltoni(3), Olivier Mattelaer(3), Tim Stelzer(4); “MadGraph 5 : Going Beyond”; https://arxiv.org/abs/1106.0522v1

[4] Ilaria Brivio; “SMEFTsim 3.0 – a practical guide”; arXiv:2012.11343v3 [hep-ph] 18 Aug 2021.

[5] s. . Ovyn∗, X. Rouby, V. Lemaˆıtre; “Delphes, a framework for fast simulation of a generic collider experiment’ https://arxiv.org/abs/0903.2225v3.

[6] Pierre Artoisenet a, Vincent Lemaˆıtre b, Fabio Maltoni b, Olivier Mattelaer; “Automation of the matrix element reweighting method”; https://arxiv.org/abs/1007.3300v2

[7] M. Baaka, S. Gadatschb, R. Harringtonc, W. Verkerke, Interpolationbetween multi-dimensional histograms using a new non-linear moment morphing method https://arxiv.org/abs/1410.7388v1

[8] Johann Brehmer,1, Felix Kling,2, 3, Irina Espejo,1, and Kyle Cranmer, MadMiner: Machine learning–based inference for particle physics https://arxiv.org/abs/1907.10621

بررسی کسرانشعاب دیفرانسیلی واپاشی $B \to K_0^* \mu^+ \mu^-$ در هولوگرافی جبهه‌ی نوری با دینامیک طولی

همتی، عسری[1]؛ خسروی، رضا[2]

[1]دانشکده فیزیک، گروه ذرات بنیادی دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

[2] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز، شیراز

چکیده

در چارچوب QCD هولوگرافیک جبهه‌ی نور، که در آن محصورشدگی عرضی ذاتاً از طریق هولوگرافی تحقق می‌یابد، ساختار و طیف جرمی مزون نرده‌ای سبک $K_0^*(1430)$ با استفاده از فرض جرم ناوردا و بهبود مدل با افزودن پتانسیل محصورشدگی طولی به‌طور خاص، معادله‌ی توفت و پتانسیل قابل حل تحلیلی LMZV بررسی می‌شود. دینامیک ترکیبی محصورشدگی عرضی و طولی منجر به محاسبات قابل اعتمادتری برای کمیت‌های کلیدی مانند ثابت‌های واپاشی و دامنه‌های توزیع پیچش-۲ و پیچش-۳ می‌گردد. عامل‌های شکل انتقالی برای واپاشی نیمه‌لپتونی $B \to K_0^* \mu^+ \mu^-$ با استفاده از دامنه‌های توزیع محاسبه شده‌اند. پیش‌بینی‌هایی برای کسر انشعاب دیفرانسیلی بر حسب تابعی از q^2 به دست آمده است که نتایج آن با سایر مدل‌های نظری مقایسه شده است.

کلیدواژه‌ها : *هولوگرافی جبهه‌ی نوری، محصورشدگی طولی، شکست تقارن دستیده، مزون نرده‌ای، دامنه‌های توزیع، واپاشی نیمه‌لپتونی*

Investigation of the differential branching ratio of $B \to K_0^* \mu^+ \mu^-$ decay in light front holography with longitudinal dynamics

Hemmati, Osra [1]; Khosravi, Reza [2]

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

Abstract

Within the framework of light-front holographic QCD, where transverse confinement is inherently realized through holography, the structure and mass spectrum of the light scalar meson $K_0^*(1430)$ are investigated using the invariant mass ansatz and improving the model by adding a longitudinal confinement potential, specifically the 't Hooft equation and the analytically solvable LMZV potential. The combined transverse and longitudinal confinement dynamics lead to more reliable calculations of key observables such as decay constants and twist-2 and twist-3 distribution amplitudes. Transition form factors for the semileptonic decay $B \to K_0^* \mu^+ \mu^-$ are computed using these distribution amplitudes. Predictions for the differential branching ratio as a function of q^2 are obtained, and the results are compared with other theoretical models.

***Keywords**: Light-front holography, longitudinal confinement, Chiral symmetry breaking, Scalar meson, Distribution amplitudes, Semileptonic decay.*

مقدمه

در فیزیک ذرات، درک ساختار درونی مزون‌های نرده‌ای سبک برای شناخت عمیق‌تر پدیده‌هایی همچون محصورشدگی هادرونی و سازوکار شکست تقارن دستیده در کرومودینامیک کوانتومی QCD[1] ضروری است. با این حال، ساختار این مزون‌ها که دارای اعداد کوانتومی اسپین–پاریته‌ی خلأ $J^{PC} = 0^{++}$ هستند، از هر دو جنبه‌ی نظری و تجربی همچنان بحث‌برانگیز می‌باشد. در مقیاس‌های انرژی پایین، QCD نظریه‌ای به‌شدت جفت‌شده و غیراختلالی است و محاسبه‌ی تابع موج حالت‌های مقید کوارک‌ها و گلوئون‌ها (هادرون‌ها) یکی از مهم‌ترین چالش‌های آن به شمار می‌رود. رویکرد هولوگرافی جبهه نوری HLFQCD[2] با بهره‌گیری از اصل هولوگرافی و تناظر میان فضای پاد دوسیته پنج بعدی AdS_5[3] و نظریه میدان همدیس، چارچوبی نوین برای مطالعه‌ی هادرون‌ها ارائه می‌دهد [1].

[1] Quantum Chromodynamics
[2] Holographic light-front QCD
[3] Anti de-sitter

در این روش، یک نگاشت هندسی میان فاصله‌ی عرضی کوارک–پادکوارک در مزون‌ها و بُعد پنجم فضای AdS برقرار می‌شود که به یک معادله‌ی شرودینگر–گونه با پتانسیل مؤثر عرضی می‌انجامد. در حد دستیده (کوارک‌های بدون جرم)، این معادله توصیفی تحلیلی از حالت‌های مقید ارائه می‌کند. برای لحاظ کردن جرم کوارک‌ها، افزودن یک پتانسیل طولی به این مدل ضروری است. به این ترتیب $HLFQCD$ ابزاری قدرتمند برای پیش‌بینی ویژگی‌های پدیدارشناختی هادرون‌ها مانند طیف‌های جرمی (برانگیختگی‌های مداری و شعاعی) و ساختار توابع موج هادرونی در ناحیه غیراختلالی فراهم می‌آورد. برای خارج شدن از حد دستیده، ابتدا فرض جرم ناوردا[4] IMA پیشنهاد شد که با رابطه‌ی گل–مان–اکس–رنر[5] ناسازگار است. از این رو، معادله‌ی توفت برای دینامیک طولی در (۱+۱) بعد و حد N_c بزرگ به کار گرفته شد. ترکیب $HLFQCD$ با معادله‌ی توفت، تقریب اولیه‌ی موفقی برای طیف‌شناسی هادرونی فراهم می‌کند، اما مدل توفت غیرتحلیلی بود [2]. برای رفع این مشکل، یک مدل قابل حل با پتانسیل تحلیلی $LMZV$ ارائه شد که نتایج آن در تطابق بسیار خوبی با پتانسیل طولی مدل توفت است [3].

در این مقاله تابع موج مزون بر اساس سه رهیافت متمایز در چارچوب‌های IMA، توفت و $LMZV$ محاسبه می‌شود که هر یک محصورشدگی طولی و شکست تقارن دستیده را از طریق مکانیسم‌های متفاوتی تحقق می‌بخشند. آنگاه کمیت‌های پدیده‌شناسی مرتبط با این تابع موج از قبیل ثابت‌های واپاشی و دامنه‌های توزیع هولوگرافیک پیچش-۲ و پیچش-۳ تعیین می‌گردند. در نهایت، با استفاده از دامنه‌های توزیع محاسبه‌شده، عامل‌های شکل گذار و کسر انشعاب دیفرانسیلی برای واپاشی $B \to K_0^* \mu^+ \mu^-$ به صورت تابعی از q^2 ارائه می‌گردند.

تابع موج هولوگرافی جبهه نور برای مزون نرده‌ای

تابع موج در مختصات جبهه نوری[6] برای یک مزون در فضای تکانه به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\Psi_{h,\bar{h}}(\alpha,\mathbf{k}_\perp) = NS_{h,\bar{h}}(\alpha,\mathbf{k}_\perp)\psi(\alpha,\mathbf{k}_\perp) \qquad (1)$$

در این رابطه N ضریب بهنجارش، α کسر تکانه طولی کوارک، $\mathbf{k}_\perp$ تکانه عرضی، h و $\bar{h}$ به‌ترتیب هلیسیتی کوارک و پادکوارک، $S_{h,\bar{h}}(\alpha,\mathbf{k}_\perp)$ تابع موج اسپین و $\psi(\alpha,\mathbf{k}_\perp)$ تابع موج کوارک–پادکوارک است. بخش اسپینوری بر اساس پاریته و محتوای کوارکی مزون نرده‌ای با جرم m و تکانه طولی p^+ به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$S_{h,\bar{h}}(\alpha,\mathbf{k}_\perp) = \frac{\bar{u}_h(\alpha p^+,\mathbf{k}_\perp)}{\sqrt{\alpha}}\left[(\not{p}+m)\right]\frac{v_{\bar{h}}(\bar{\alpha} p^+,-\mathbf{k}_\perp)}{\sqrt{\bar{\alpha}}} \qquad (2)$$

پس از محاسبه‌ی صریح برای مزون K_0^* ، به شکل زیر می‌رسیم:

$$S_{h,\bar{h}}(\alpha,\mathbf{k}_\perp) = \frac{1}{\alpha\bar{\alpha}}\left\{\mathcal{M}_\pm\, k_\perp e^{\mp i\theta}\delta_{h,\pm}\delta_{\bar{h},\pm} + \left(\mathcal{M}^2 - k_\perp^2 + m_{\kappa_0^*}\overline{\mathcal{M}}_-\right)\delta_{h,\pm}\delta_{\bar{h},\mp}\right\} \qquad (3)$$

که‌درآن $\mathcal{M}^2 = \alpha\bar{\alpha}\, m^2_{\kappa_0^*} - m_s m_{\bar{q}}$ ، $\mathcal{M}_\pm = \pm m_s \mp m_{\bar{q}} \pm m_{\kappa_0^*}$ و $\overline{\mathcal{M}}_\pm = \bar{\alpha} m_s \pm \alpha m_{\bar{q}}$ شکل قطبی تکانه عرضی $\mathbf{k}_\perp$ را $k_\perp e^{\pm i\theta}$ نشان می‌دهد. هم‌چنین m_s و m_u به ترتیب جرم کوارک s و پادکوارک u می‌باشند.

براساس اولین تقریب نیمه‌کلاسیک نسبیتی QCD، معادله حاکم بر تابع موج کوارک–پادکوارک مزون، ψ یک معادله شرودینگر–گونه موثر می‌باشد [4]:

$$\left[\frac{m_s^2}{\alpha} + \frac{m_{\bar{u}}^2}{\bar{\alpha}} - \frac{1}{\alpha\bar{\alpha}}\nabla_\perp^2 + U\right]\psi(r,\varphi,\alpha) = m^2\psi(r,\varphi,\alpha) \qquad (4)$$

در اینجا $\nabla_\perp^2$ لاپلاسین عرضی در مختصات قطبی است. با معرفی متغیر مقیاس شده $\zeta = \sqrt{\alpha\bar{\alpha}}\, r$، می‌توان تابع موج را به صورت حاصلضرب یک حالت عرضی و یک حالت طولی $X(\alpha)$ جدا کرد.

$$\psi(\zeta,\varphi,\alpha) = \frac{\phi(\zeta)}{\sqrt{2\pi\zeta}}\, e^{iL\varphi}\, X(\alpha), \quad X(\alpha) = \sqrt{\alpha\bar{\alpha}}\,\chi(\alpha) \qquad (5)$$

که در آن L عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای مداری است. حال با جایگذاری معادله‌ی (5) در (4) و اعمال حد دستیده (جرم کوارک‌ها صفر و پتانسیل به دو بخش عرضی و طولی تفکیک‌پذیر $U(\zeta,\alpha) = U_\perp(\zeta) + U_\parallel(\alpha)$ در نظر گرفته می‌شود) دو معادله‌ی مجزا به‌صورت زیر تعیین می‌شوند:

$$\left[-\frac{d^2}{d\zeta^2} - \frac{1-4L^2}{4\zeta^2} + U_\perp(\zeta)\right]\phi(\zeta) = m_\perp^2\phi(\zeta)$$
$$\left[\frac{m_s^2}{\alpha} + \frac{m_{\bar{u}}^2}{(1-\alpha)} + U_\parallel(\alpha)\right]\chi(\alpha) = m_\parallel^2\chi(\alpha) \qquad (6)$$

جرم کل مزون از جمع $m^2 = m_\perp^2 + m_\parallel^2$ حاصل می‌شود. با نادیده گرفتن جرم کوارک‌ها (حد دستیده)، پتانسیل مؤثر عرضی به صورت زیر محاسبه می‌شود [4]:

$$U_\perp^{LFH}(\zeta) = \kappa^4\zeta^2 + 2\kappa^2(J-1) \qquad (7)$$

[4] Invariant mass ansatz
[5] Gell-Mann-Oakes-Renner
[6] Light-front wave function

که در آن $J=L+S$ تکانه زاویه‌ای کل و κ مقیاس محصورشدگی عرضی است. حل معادله (6) با این پتانسیل، طیف جرمی عرضی و توابع ویژه به صورت زیررا بیان می‌کنند:

$$m_{\perp}^2(n_{\perp},L,S)=2\kappa^2\left(2n_{\perp}+2L+S\right) \qquad (8)$$

$$\phi_{n_{\perp}}^{(L)}(\zeta)=\sqrt{\frac{2n_{\perp}!}{(n_{\perp}+L)!}}\kappa^{1+L}\zeta^{1/2+L}exp(-\frac{\kappa^2\zeta^2}{2})L_{n_{\perp}}^{(L)}(\kappa^2\zeta^2) \qquad (9)$$

که در آن $n_{\perp}$ عدد کوانتومی شعاعی و $L_{n_{\perp}}^{(L)}$ چندجمله‌های لاگر را نشان می‌دهد. بنابراین، تابع موج کوارک–پادکوارک با قراردادن معادلات (6) در معادله (5) ویژه‌تابع ψبرای یک مزون با $L=1$ و $\chi^{hLF}(\alpha)=1$ به‌صورت زیر به دست می‌آید:

$$\psi_{n_{\perp}}^{hLF}(\zeta,\varphi,\alpha)=\sqrt{\frac{n_{\perp}!}{(n_{\perp}+1)!}}\frac{\kappa^2\zeta e^{i\varphi}}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\alpha\bar{\alpha}}exp(-\frac{\kappa^2\zeta^2}{2})\,L_{n_{\perp}}^{(1)}(\kappa^2\zeta^2) \qquad (10)$$

برای تابع پتانسیل طولی با شکست تقارن دستیده سه رویکرد طولی IMA، توفت و $LMZV$ به کار می‌رود. درهر سه روش، تابع موج کلی از حاصلضرب بخش عرضی $\psi_{n_{\perp}}^{hLF}$ و یک تابع موج طولی $\chi^{hLF}(\alpha)$ ساخته می‌شود.

در روش IMA، با تبدیل به فضای تکانه و اعمال جانشینی به صورت $\frac{k_{\perp}^2}{\alpha\bar{\alpha}}\rightarrow\frac{k_{\perp}^2}{\alpha\bar{\alpha}}+\frac{m_q^2}{\alpha}+\frac{m_{\bar{q}}^2}{\bar{\alpha}}$ تابع موج طولی حاصل می‌شود. این جانشینی در تابع موج عرضی حل‌شده در حد دستیده، یک عامل نمایی ایجاد می‌کند که همان تابع موج طولی است [5]:

$$\chi^{IMA}(\alpha)=exp\left(-\frac{m_q^2}{2\,\kappa^2\alpha}-\frac{m_{\bar{q}}^2}{2\,\kappa^2\bar{\alpha}}\right) \qquad (11)$$

در مدل توفت، پتانسیل طولی غیرموضعی از QCD در(۱+۱) بعد و حد N_c بزرگ استخراج می‌شود [6]:

$$U_{\parallel}(\alpha)\chi(\alpha)=\frac{g^2}{\pi}\mathcal{P}\int d\alpha'\frac{|\chi(\alpha)-\chi(\alpha')|}{(\alpha-\alpha')^2} \qquad (12)$$

که در آن مقیاس g محبوس شدگی طولی و $\mathcal{P}$ نشان‌دهنده مقدار اصلی کوشی است. این معادله انتگرالی بر خلاف بخش عرضی، حل تحلیلی ندارد. با بسط تابع موج طولی $\chi(\alpha)$ بر حسب چندجمله‌های ژاکوبی و قطری‌سازی، مقادیر ویژه جرم طولی $m_{\parallel}(n_{\parallel})$ و ضرایب بسط به دست می‌آیند. این روش اگرچه از نظر محاسباتی سنگین‌تر است، اما شکست تقارن دستیده را به صورت طبیعی و خودبه‌خود تولید می کند. در رویکرد $LMZV$، پتانسیل طولی تحلیلی و قابل حل به صورت $U_{\parallel}(\alpha)=-\sigma^2\frac{d}{d\alpha}\left(\alpha\bar{\alpha}\frac{d}{d\alpha}\right)$ پیشنهاد می‌شود، که در آن σمقیاس محبوس شدگی طولی را نشان می‌دهد. مقادیر ویژه و توابع ویژه این پتانسیل به صورت زیر حاصل می‌گردد [7]:

$$m_{\parallel}^2=\sigma(2n_{\parallel}+1)(m_s+m_{\bar{u}})+\sigma^2\,n_{\parallel}(n_{\parallel}+1)+(m_s+m_{\bar{u}})^2 \qquad (13)$$

$$\chi_{n_{\parallel}}^{LMZV}(\alpha)=\mathcal{N}_{n_{\parallel}}\alpha^{\frac{\beta}{2}}\bar{\alpha}^{\frac{\gamma}{2}}P_{n_{\parallel}}^{(\gamma,\beta)}(2\alpha-1) \qquad (14)$$

که $n_{\parallel}=0,1,2,...$ عدد کوانتومی مداری، $P_{n_{\parallel}}^{(\gamma,\beta)}$ چندجمله‌های ژاکوبی، $\gamma=2m_{\bar{u}}/\sigma$ ، $\beta=2m_s/\sigma$ و $\mathcal{N}_{n\parallel}$ ضریب بهنجارش می باشد.

تحلیل عددی و نتایج

پس از تعیین LFWF مزون K_0^* در این سه رویکرد، گام نخست، محاسبه‌ی، توابع پیچش Φ(مرتبه دوم) و Φ_S و Φ_σ(مرتبه سوم) است که به صورت زیر تعیین شده‌اند :

$$\Phi(\alpha,\mu)=\frac{2N\sqrt{N_c}}{\alpha\bar{\alpha}\,\pi\,f_{K_0^*}}\int^{k_\perp<\mu}\frac{d^2k_\perp}{4\pi^2}\left(\mathcal{M}^2-k_\perp^2+m_{K_0^*}\overline{\mathcal{M}}_-\right)\psi(\alpha,k_\perp),$$

$$\Phi_s(\alpha,\mu)=\frac{N\sqrt{N_c}}{\alpha^2\bar{\alpha}^2\,\pi\,\bar{f}_{K_0^*}\,m_{K_0^*}}\int^{k_\perp<\mu}\frac{d^2k_\perp}{4\pi^2}\left(\mathcal{M}_+k_\perp^2+\left(\mathcal{M}^2-k_\perp^2\right)\overline{\mathcal{M}}_-+m_{K_0^*}\overline{\mathcal{M}}_-\right)\psi(\alpha,k_\perp) \qquad (15)$$

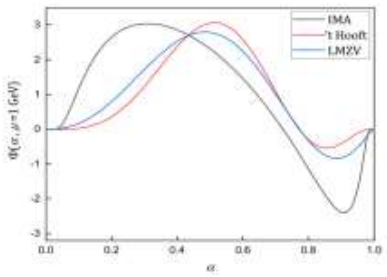
$$\frac{\partial\Phi_\sigma(\alpha,\mu)}{\partial\alpha}=\frac{12N\sqrt{N_c}}{\alpha^2\bar{\alpha}^2\,\pi\,\bar{f}_{K_0^*}\,m_{K_0^*}}\int^{k_\perp<\mu}\frac{d^2k_\perp}{4\pi^2}\left(\mathcal{M}_+k_\perp^2(1-2\alpha)+\left(\mathcal{M}^2-k_\perp^2\right)\overline{\mathcal{M}}_++m_{K_0^*}\overline{\mathcal{M}}_+\overline{\mathcal{M}}_-\right)\psi(\alpha,k_\perp)$$

در ادامه با محاسبه‌ی توابع پیچش، ثابت واپاشی برداری $f_{K_0^*}$ و ثابت واپاشی نرده‌ای $\bar{f}_{K_0^*}$ با استفاده از معادلات $HLFQCD$ به‌دست‌آمده‌اند. نتایج عددی برای این ثابت‌ها در سه رویکرد IMA، توفت و $LMZV$در جدول ۱ خلاصه شده است.

جدول ۱ – ثابت‌های واپاشی مزون K_0^* در مقیاس $\mu=1\,GeV$

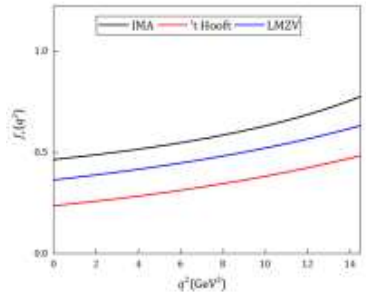
Approach	$f_{K_0^*}$ (MeV)	$\bar{f}_{K_0^*}$ (MeV)
IMA	28^{+15}_{-15}	285^{+43}_{-37}
't Hooft	37^{+11}_{-11}	428^{+63}_{-54}
LMZV	39^{+11}_{-11}	444^{+65}_{-56}

با در اختیار داشتن توابع موج و ثابت‌های واپاشی، به‌عنوان مهم‌ترین کمیت در تعیین عامل‌های شکل گذار، تابع توزیع پیچش Φبرای سه رویکرد IMA، توفت و $LMZV$در شکل ۱ نشان داده شده است.در چارچوب IMA، قله در حدود $\alpha\simeq 0.3$ قرار دارد و توزیع پهن‌تری دارد. در مقابل، در مدل‌های توفت و $LMZV$ قله به سمت $\alpha\simeq 0.5$ جابه‌جا می‌شود که نشان‌دهنده‌ی سهم بیشتر کوارک S در حمل تکانه‌ی طولی است. این تفاوت‌ها نشان می‌دهد که نحوه‌ی مدل‌سازی دینامیک طولی تأثیر مستقیمی بر توزیع تکانه‌ی طولی کوارک‌ها دارد.



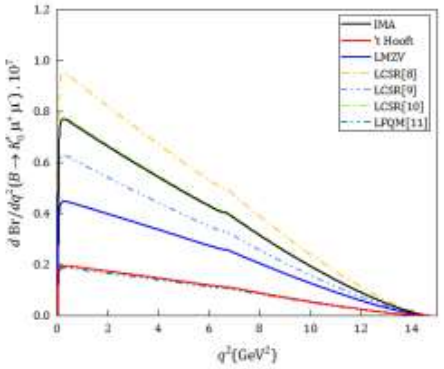
شکل ۱: توابع پیچش Φ بر حسب α در سه رویکرد IMA ، توفت و $LMZV$

واپاشی مورد نظر دارای سه عامل شکل f_+ ، f_- و f_T است. گام بعدی محاسبه‌ی این عوامل شکل با استفاده از قانون جمع مخروط نوری[۷] است. با جایگذاری توابع توزیع هولوگرافیک به دست آمده از هر سه رویکرد در فرمول‌های LCSR [11]، عامل شکل $f_+(q^2)$ محاسبه شده و نتیجه در شکل ۲ نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهد که این تفاوت‌ها به‌وضوح ناشی از نحوه‌ی مدل‌سازی دینامیک طولی است، زیرا سایر ورودی‌ها در هر سه محاسبه یکسان هستند.



شکل۲: عامل شکل f_+ برحسب تابعی از q^2

با داشتن عامل‌های شکل، کسر انشعاب دیفرانسیلی برای واپاشی $B \to K_0^* \mu^+ \mu^-$ محاسبه شده است هر سه رویکرد از نظر کیفی روند سینماتیکی یکسانی دارند، اما تفاوت‌های کمی آشکاری بین آن‌ها دیده می‌شود که ناشی از حساسیت به عامل‌های شکل و نحوه‌ی مدل‌سازی دینامیک غیراختلالی است. شکل۳ کسر انشعاب دیفرانسیلی واپاشی‌های $B \to K_0^* \mu^+ \mu^-$ را بر حسب q^2 در سه رویکرد هولوگرافی IMA ، توفت و $LMZV$ همراه با مقایسه با نتایج LCSR [8–10] و LFQM [11] نشان می‌دهد. با انتگرال‌گیری از منحنی‌های دیفرانسیلی در شکل ۳، کسر انشعاب کل به دست آمده و در جدول ۲ آورده شده است.



شکل ۳: کسر انشعاب دیفرانسیلی واپاشی‌نیمه‌لپتونی $B \to K_0^* \mu^+ \mu^-$ بر حسب q^2 در سه رویکرد و مقایسه با روشهای دیگر

رویکرد IMA بزرگترین کسر انشعاب که با نتایج LCSR [8] همخوانی دارد. رویکرد توفت کوچکترین مقدار را ارائه می‌دهد، که با نتایج LFQM [11] سازگار است. رویکرد $LMZV$ در محدوده‌ی میانی قرار می‌گیرد و با بخش پایینی پیش‌بینی‌های LCSR [8–10] همپوشانی دارد.

جدول ۲ – کسر انشعاب کل برای واپاشی‌نیمه‌لپتونی $B \to K_0^* \mu^+ \mu^-$ بر حسب q^2

BR	IMA	't Hooft	LMZV	LCSR[8]	LCSR[9]	LCSR[10]	LFQM[11]
$\mathrm{Br}\,(B \to K_0^* \mu^+ \mu^-) \times 10^7$	$5.39^{+2.05}_{-1.13}$	$1.60^{+0.47}_{-0.31}$	$3.26^{+0.78}_{-0.57}$	$5.66^{+2.77}_{-1.98}$	$4.12^{+1.35}_{-1.35}$	$5.60^{+3.10}_{-2.30}$	1.62

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، ما یک مطالعه جامع هولوگرافیک جبهه نوری از مزون نرده‌ای K_0^* و نقش آن در واپاشی نادر نیمه‌لپتونی $B \to K_0^* \mu^+ \mu^-$ ارائه کرده‌ایم. تحلیل ما در سه رویکرد هولوگرافیک IMA، توفت و $LMZV$ بررسی شد. نتایج نشان می‌دهد که دینامیک طولی نقشی اساسی در تعیین ساختار هادرون‌های نرده‌ای دارد. نتایج این کار مسیر را برای تأیید تجربی آینده در آزمایشگاهای مانند LHC و Belle II هموار می‌سازد.

مرجع‌ها

[1] G. F. de T´eramond and S. J. Brodsky, Phys. Rev. D 104, 116009 (2021).
[2] M. Ahmady, S. L. MacKay, S. Kaur, C. Mondal, and R. Sandapen, Phys. Rev. D 104, 074013 (2021).
[3] Y. Li, P. Maris, X. Zhao, and J. P. Vary, Phys. Lett. B 758, 118 (2016).
[4] G. F. de Teramond and S. J. Brodsky, Phys. Rev. Lett. 102, 081601 (2009).
[5] S. J. Brodsky and G. F. de T´eramond, Subnucl. Ser. 45, 139 (2009).
[6] G. 't Hooft, Nucl. Phys. B 75, 461 (1974).
[7] Y. Li and J. P. Vary, Phys. Rev. D 105, 114006 (2022).
[8] R. Khosravi, Phys. Rev. D 109, 036003 (2024).
[9] Z. G. Wang, JHEP 1310, 208 (2013).
[10] Y. M. Wang, M. J. Aslam, and C. D. L¨u, Phys. Rev. D 78, 014006 (2008).
[11] C. H. Chen, C. Q. Geng, C. C. Lih, and C. C. Liu, Phys. Rev. D 75, 074010 (2007).

[7] Light cone sum rules

ساخت نظریه‌های غیرخطی تعمیم یافته‌ی الکترومغناطیس با استفاده از میدان کمکی

کرم‌دوست، علی[1]؛ بابایی آقبلاغ، حسین[2]؛ محمدزاده، حسین[1]

[1] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل، ایران

[2] دانشگاه نینگبو، چین

چکیده

روش‌های گوناگونی برای ساخت نظریه‌های تعمیم‌یافته پیشنهاد شده است. برای مثال، استفاده از دگرگونی‌های تی‌تی‌بار و جذر تی‌تی‌بار می‌تواند نظریه‌ی شناخته‌شده‌ی الکترومغناطیس را به نظریه‌هایی مانند بورن–اینفلد و مادماکس تعمیم دهد. اخیراً روشی مطرح شده است که در آن می‌توان یک پتانسیل وابسته به یک میدان کمکی به نظریه افزود. با به‌دست‌آوردن معادله‌ی حرکت این میدان کمکی و جایگذاری آن در لاگرانژی تعمیم‌یافته، می‌توان یک نظریه‌ی غیرخطی بازتولید کرد که همچنان تقارن‌های الکترومغناطیسی را حفظ می‌کند؛ البته به شرط آن‌که پتانسیل افزوده‌شده به لاگرانژی دارای ویژگی‌های خاصی باشد. در این مقاله، با معرفی یک پتانسیل مناسب، به دنبال یافتن تعمیم‌های مناسبی برای نظریه‌ی الکترومغناطیس هستیم و این کار را به‌صورت اختلالی نیز بررسی خواهیم کرد.

واژه های کلیدی: *(10 ایتالیک). دگرگونی تی‌تی‌بار، میدان کمکی*

Construction of Nonlinear Generalized Electromagnetic Theories Using an Auxiliary Field

Karamdoost, Ali[1]; Babaei Aghbolagh, Hossein[2], Mohammadzadeh, Hosein[1]

[1] Physics Department, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil, Iran
[2] Institute of Fundamental Physics and Quantum Technology,
& School of Physical Science and Technology, Ningbo University, Ningbo, Zhejiang 315211, China

Abstract

Various methods have been proposed for constructing generalized theories. For instance, applying TTbar and root TTbar deformations can generalize the well-known theory of electromagnetism to theories such as Born–Infeld and ModMax. Recently, a method has been proposed in which a potential depending on an auxiliary field is added to the theory. By deriving the equation of motion for this auxiliary field and substituting it back into the generalized Lagrangian, one can reproduce a nonlinear theory that still preserves the symmetries of electromagnetism, provided that the added potential satisfies certain specific conditions. In this work, by introducing a suitable potential, we aim to find appropriate generalizations of the electromagnetic theory, which we will also study perturbatively.

Keywords: *TTbar deformation, Auxiliary Field*

PACS No. *11*

مقدمه

نظریه الکترومغناطیس ماکسول که در قرن نوزدهم تدوین شد، یکی از موفق‌ترین نظریه‌های فیزیک کلاسیک است و نقش بنیادینی در توصیف برهم‌کنش‌های الکترومغناطیسی دارد. با این حال، خطی بودن معادلات ماکسول باعث می‌شود که این نظریه در میدان‌های بسیار قوی توصیف کاملی ارائه ندهد. به‌ویژه در الکترودینامیک کلاسیک، انرژی میدان الکتریکی یک بار نقطه‌ای به صورت نامتناهی واگرا می‌شود که نشان‌دهنده محدودیت‌هایی در این چارچوب نظری است [1].

برای رفع این مشکلات، نظریه‌های الکترومغناطیس غیرخطی معرفی شدند که در میان آن‌ها نظریه بورن–اینفلد از مهم‌ترین نمونه‌ها به شمار می‌رود. در این نظریه با معرفی یک لاگرانژی غیرخطی، شدت میدان‌ها به طور طبیعی کراندار شده و تکینگی انرژی خودی بار نقطه‌ای برطرف می‌شود. افزون بر اهمیت کلاسیکی، این نظریه در فیزیک مدرن نیز کاربردهای قابل توجهی پیدا کرده و در حوزه‌هایی مانند نظریه ریسمان و دینامیک D–غشاها ظاهر می‌شود[2].

در سال‌های اخیر، روش‌های مختلفی برای ساخت و تعمیم نظریه‌های الکترومغناطیس غیرخطی پیشنهاد شده است. از جمله این روش‌ها می‌توان به دگرگونی‌های تی‌تی‌بار و جذر تی‌تی‌بار اشاره کرد که امکان تولید خانواده‌ای از نظریه‌های تغییرشکل‌یافته را فراهم می‌کنند. در کنار این رویکردها، چارچوب مبتنی بر میدان کمکی نیز مطرح شده است که در آن با افزودن یک میدان کمکی و یک پتانسیل مناسب به لاگرانژی، می‌توان ساختار کلی نظریه‌های خوددوگان الکترومغناطیسی را بازنویسی کرد [3-6].

مزیت اصلی این روش آن است که امکان تولید خانواده‌ای گسترده از نظریه‌های غیرخطی را فراهم می‌کند، در حالی که ویژگی‌های مهمی مانند خوددوگانگی و علیت حفظ می‌شوند. در این مقاله با استفاده از این چارچوب، یک تعمیم از الکترودینامیک ارائه می‌کنیم. ابتدا لاگرانژی شامل میدان کمکی معرفی شده و سپس با حذف آن در حد میدان‌های ضعیف، لاگرانژی مؤثر استخراج می‌شود. در نهایت، پایداری و علیت نظریه حاصل از طریق بررسی مشتقات لاگرانژی نسبت به ناورداهای لورنتسی تحلیل می‌گردد. نتایج نشان می‌دهد که نظریه به‌دست‌آمده در شرایط مناسب با نظریه بورن–اینفلد سازگار بوده و از نظر فیزیکی نیز پایدار و علی است.

نظریه مادماکس

یکی از تعمیم‌های مهم و نسبتاً جدید الکترودینامیک ماکسول، نظریه **مادماکس** است که به عنوان یک تغییرشکل غیرخطی از نظریه ماکسول معرفی شده است. این نظریه علاوه بر حفظ ناوردایی لورنتسی، دارای ویژگی‌های مهمی همچون خوددوگانگی الکترومغناطیسی **و** علیت است. از ویژگی‌های قابل توجه نظریه مادماکس آن است که با وجود غیرخطی بودن، همچنان تقارن دوگانگی الکترومغناطیسی را حفظ می‌کند و در عین حال در حد میدان‌های ضعیف به نظریه ماکسول فروکاسته می‌شود [7].

در بسیاری از نظریه‌های الکترودینامیک غیرخطی ممکن است در میدان‌های قوی شرط علیت یا تقارن دوگانگی نقض شود. با این حال نشان داده شده است که اگر یک نظریه الکترودینامیکی دارای تقارن خوددوگانگی باشد و در حد میدان‌های ضعیف شرط علیت را برقرار کند، آنگاه این شرط در میدان‌های قوی نیز برقرار خواهد بود.

در چارچوب فرمول‌بندی مبتنی بر میدان کمکی، لاگرانژی کلی نظریه‌های خوددوگانه را می‌توان به صورت [8]

$$L = l(\tau) - \frac{2U}{\dot{l}(\tau)}\ ,\ \tau = V + \frac{U}{(\dot{l}(\tau))^2} \qquad (1)$$

بیان می‌شود. کمیت‌های U و V توابعی از ناورداهای لورنتسی میدان الکترومغناطیسی هستند که به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$V = \frac{1}{2}\left(\sqrt{s^2+p^2}+s\right),$$
$$U = \frac{1}{2}\left(\sqrt{s^2+p^2}-s\right). \qquad (2)$$

در اینجا s و p ناورداهای استاندارد میدان الکترومغناطیسی هستند که از تانسور میدان به دست می‌آیند.علیت در میدان های قوی معادل با دو شرط زیر است.

$$\ddot{l}(\tau) \geq 0\ ,\ \dot{l}(\tau) \geq 1 \qquad (3)$$

حال اگر در معادله (1) تابع خطی $l(\tau) = a\tau$ را در نظر بگیریم، خواهیم داشت:

$$L = a\,\tau - \frac{2U}{a}\ ,\qquad \tau = V + \frac{U}{a^2} \qquad (4)$$

برای تضمین مثبت بودن پارامتر a، می‌توان آن را به صورت نمایی پارامتریزه کرد:

$$a = e^{\gamma},\quad \gamma \geq 0$$

به این ترتیب خواهیم داشت:

$$L = -e^{-\gamma}\frac{1}{2}\left(\sqrt{s^2+p^2}-s\right) + e^{\gamma}\frac{1}{2}\left(\sqrt{s^2+p^2}+s\right) = (\cosh\gamma)s + (\sinh\gamma)\sqrt{s^2+p^2}$$

این لاگرانژی دقیقاً به شکل نظریه **مادماکس** فروکاسته می‌شود که به عنوان یک تعمیم غیرخطی و خوددوگانه از الکترودینامیک ماکسول شناخته می‌شود. این رهیافت می‌تواند ایده‌ای باشد برای ساختن نظریات غیرخطی الکترومغناطیسی دیگر.

پتانسیل میدان کمکی و استخراج لاگرانژی موثر

در فرمول‌بندی مبتنی بر میدان کمکی، لاگرانژی خوددوگان به‌صورت تابعی از ناورداهای میدان و میدان کمکی γ نوشته می‌شود. در حالت خطی $l(\tau)=a\tau$ ، بخش الکترومغناطیسی لاگرانژی به شکل مادماکس در می‌آید. برای تولید یک نظریه غیرخطی با مقیاس بورنی T، باید **پتانسیل میدان کمکی** $W(\gamma)$ را اضافه کنیم. بنابراین لاگرانژی کلی به صورت

$$\mathrm{L(s,p,\gamma)} = (\cosh\gamma)\mathrm{s} + (\sinh\gamma)\sqrt{\mathrm{s^2+p^2}} - (6)\mathrm{W(\gamma)}$$

نوشته می‌شود. انتخاب غیرصفر برای $W(\gamma)$ یک مقیاس غیرهمدیس (Born scale) معرفی می‌کند. یک انتخاب مناسب که امکان بازیابی حد بورن–اینفلد را بدهد، به صورت

$$W(\gamma) = T(b\cosh\gamma + a\cosh^2\gamma - (\mathrm{a+b})) \quad (7)$$

است، که در آن T دارای بعد انرژی (یا مربع میدان) بوده و a و b پارامترهای بی‌بُعد هستند.

برای استخراج لاگرانژی مؤثر، میدان کمکی باید از طریق معادله حرکتش یعنی $\frac{\partial L}{\partial \gamma}=0$ حذف شود .به ازای حد میدان ضعیف داریم:

$$\begin{cases} \cosh\gamma \approx 1+\frac{\gamma^2}{2} \\ \sinh\gamma \approx \gamma \\ cosh^2\gamma \approx 1+\gamma^2 \end{cases} \quad (8)$$

با قرار دادن عبارات (7) در (6) پتانسیل میدان کمکی به صورت زیر بدست می آید.

$$\mathrm{W(\gamma)} = \mathrm{T}\left(\mathrm{b}\left(1+\frac{\gamma^2}{2}\right)+\mathrm{a}(1+\gamma^2)-(\mathrm{a+b})\right) = \mathrm{T}\left(\mathrm{b}\,\frac{\gamma^2}{2}+\mathrm{a}\,\gamma^2\right) = \mathrm{T}\left(\frac{\mathrm{b}}{2}+\mathrm{a}\right)\gamma^2 \quad (9)$$

با مشتق گیری از عبارت فوق خواهیم داشت:

$$\dot{W}(\gamma) = \frac{\partial}{\partial\gamma}\left(T\left(\frac{b}{2}+a\right)\gamma^2\right) = 2T\left(\frac{b}{2}+a\right)\gamma \quad (10)$$

اکنون رابطه (9) را در (6) جایگزاری کرده و از ان نسبت به γ مشتق گرفته و برابر صفر قرار میدهیم تا مقدار γ را بدست آوریم.

$$\mathrm{L} \approx s\cosh\gamma + \sqrt{\mathrm{s^2+p^2}}\sinh\gamma - T\left(\frac{b}{2}+a\right)\gamma^2 \quad (11)$$

معادله‌ی میدان کمکی نیز با استفاده از معادله حرکت آن به صورت زیر خواهد بود:

$$s\sinh\gamma + \sqrt{\mathrm{s^2+p^2}}\cosh\gamma - 2T\left(\frac{b}{2}+a\right) = 0 \quad (12)$$

مرتبه اول (8) را در عبارت فوق جایگزاری میکنیم.

$$\mathrm{s}\,\gamma + \sqrt{\mathrm{s^2+p^2}} - 2\mathrm{T}\left(\frac{\mathrm{b}}{2}+\mathrm{a}\right)\gamma = 0 \quad (13)$$

$$\gamma = \frac{\sqrt{\mathrm{s^2+p^2}}}{2\mathrm{T}(\frac{\mathrm{b}}{2}+\mathrm{a})} \qquad \mathrm{T}\,\gamma \gg \mathrm{s}\,\gamma \quad (14)$$

با استفاده از روابط (8) و (14) رابطه (11) به شکل زیر در می آید:

$$\mathrm{L} = s\left(1+\frac{\gamma^2}{2}\right)+\sqrt{\mathrm{s^2+p^2}}\,\gamma - T\left(\frac{b}{2}+a\right)\gamma^2 = s+\sqrt{\mathrm{s^2+p^2}}\,\gamma - T\left(\frac{b}{2}+a\right)\gamma^2 = s+\frac{\mathrm{s^2+p^2}}{2T\left(\frac{b}{2}+a\right)} - \frac{\mathrm{s^2+p^2}}{4T\left(\frac{b}{2}+a\right)} = s+\frac{\mathrm{s^2+p^2}}{4T\left(\frac{b}{2}+a\right)} \quad (15)$$

با استفاده از لاگرانژی بدست آمده به راحتی می توان با قرار دادن $a = 1 , b = 0$ لاگرانژی مربوط به نظریه‌ی بورن–اینفلد را بدست آورد.

$$L = s + \frac{\mathrm{s}^2 + \mathrm{p}^2}{4T} \qquad (16)$$

شرط تحدب و پایداری خلأ

برای اینکه نظریه از نظر فیزیکی پایدار و هامیلتونی آن از پایین کران‌دار باشد، لاگرانژی باید نسبت به ناورداهای میدان $(\boldsymbol{s}\ ,\ \boldsymbol{p})$ محدب باشد. این امر مستلزم مثبت‌معین بودن ماتریس هسین (مشتقات دوم لاگرانژی) است. برای نظریه پیشنهادی ما، این شرط زمانی برقرار است که مخرج کسر در جمله غیرخطی مثبت باشد:

$$T\left(a + \frac{b}{2}\right) > 0 \qquad (17)$$

با فرض مثبت بودن پارامتر تنش$(T > 0)$، قید اصلی به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$2a + b > 0 \qquad (18)$$

چنانچه رابطه فوق برقرار نباشد$(2a + b \leq 0)$ ، حالت خلأ ناپایدار می شود.

اصل علیت

اصل علیت ایجاب می‌کند که سرعت انتشار سیگنال‌ها (سرعت صوت در محیط فعال) از سرعت نور فراتر نرود $(v \leq c)$. درالکترودینامیک غیرخطی، شرط علیت به طور مستقیم با تحدب لاگرانژی در ارتباط است. از آنجا که شرط $2a + b >$ 0مثبت‌معین بودن هسین را تضمین می‌کند، اصل علیت نیز به طور خودبه‌خود در این ناحیه برقرار خواهد بود.

جمع‌بندی مقادیر مجاز

در نهایت ، ناحیه مجاز برای پارامترهای نظریه با نامساوی $2a + b > 0$ مشخص می‌شود. شایان ذکر است که نظریه استاندارد **بورن – اینفیلد که به ازای $\boldsymbol{a = 1}$ و $\boldsymbol{b = 0}$ به دست می‌آید، به وضوح در این شرط صدق می‌کند.**

$$(2(1) + 0 = 2 > 0) \qquad (19)$$

این امر تایید می‌کند که نظریه تعمیم‌یافته ما علاوه بر ارائه فضای پارامتری وسیع‌تر، با اصول فیزیکی شناخته‌شده کاملاً سازگار است.

مرجع‌ها

[1] J. D. Jackson**,** ***Classical Electrodynamics***, 3rd ed**.,** Wiley**, (1998).**
[2] M. Born and L. Infeld**,** *"Foundations of the New Field Theory,"* Proceedings of the Royal Society ***A*** 144**, 425–451 (1934).**
[3] J. G. Russo and P. K. Townsend, JHEP 10, 120 (2025), arXiv:2505.08869 [hep-th]
[4] H. Babaei-Aghbolagh, K. B. Velni, D. M. Yekta, and H. Mohammadzadeh, Phys. Lett. B 829, 137079 (2022).
[5] H. Babaei-Aghbolagh, K. Babaei Velni, S. He and Z. Pezhman, "Root-TT deformations on causal self-dual electrodynamic theories," JHEP 07, 227 (2025)
[6] H. Babaei-Aghbolagh, K. Babaei Velni, D. Mahdavian Yekta, and H. Mohammadzadeh, Phys. Rev. D 106, 086022 (2022).
[7] R. Conti, L. Iannella, S. Negro, and R. Tateo, JHEP 11, 007 (2018), arXiv:1806.11515 [hep-th].
[8] J. G. Russo and P. K. Townsend, JHEP 09, 107 (2024), arXiv:2407.02577 [hep-th].

دامنه هلیسیتی و کسر هلیسیتی در واپاشی‌های $t \to bV$

احمدی، مریم[۱]؛ منعم‌زاده، مجید[۱]؛ تعظیمی، نرگس[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان، کاشان – کیلومتر ٦ بلوار قطب راوندی

چکیده

در این مقاله، واپاشی‌های $t \to bV$ در مدل استاندارد مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. با استفاده از هامیلتونی مؤثر و تقریب جداسازی (Factorization)، دامنه واپاشی برای حالت‌های نهایی شامل مزون برداری محاسبه شده و دامنه‌ها و کسرهای هلیسیتی متناظر استخراج شده‌اند. همچنین ساختار هلیسیتی این واپاشی‌ها در چارچوب برهم‌کنش ضعیف (V-A) بررسی شده و اثرات جرم متناهی کوارک (b) در محاسبات وارد شده است.

واژه های کلیدی: *کوارک تاپ، مزون برداری، کسرهای هلیسیتی، جداسازی، هامیلتونی مؤثر، ساختار V-A ، قطبش، مدل استاندارد.*

Helicity Amplitudes and Helicity Fractions in $t \to bV$ Decays

Ahmadi, Maryam[1]; MonemZadeh, Majid[1]; Tazimi, Narges[1]

[1]Department of Physics, University of Kashan, Kashan

Abstract

In this paper, the decays $t \to bV$ are studied within the Standard Model. Using the effective Hamiltonian and the factorization approach, the decay amplitudes for vector-meson final states are calculated, and the corresponding helicity amplitudes and helicity fractions are derived. The helicity structure of these decays is investigated within the framework of the (V-A) weak interaction, and finite bottom-quark mass effects are taken into account throughout the analysis.

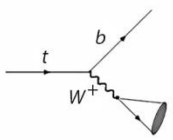
Keywords: *Top quark, Vector meson, Helicity fractions, Factorization, Effective Hamiltonian, V−A structure, Polarization, Standard model*

PACS N:

مقدمه

به عنوان یکی از واپاشی‌های کوارک top می‌توان به کانال واپاشی برداری $t \to bV$ اشاره کرد.

در این واپاشی، مزون برداری V از هادرون‌سازی جفت کوارک–پادکوارک ایجادشده از بوزون W ساخته می‌شود (شکل ۱) [۱].



شکل ۱: واپاشی کوارک top

دامنه مؤثر برای این کانال واپاشی‌ها با استفاده از تقریب جداسازی (Factorization)، به صورت رابطه (۱) نوشته می‌شود [۲، ۳]. در اینجا از هامیلتونی مؤثر ضعیف مدل استاندارد استفاده شده است که در آن اثر تبادل بوزون Wدر ثابت فرمی G_Fجذب شده و دامنه بر حسب حاصل‌ضرب دو جریان ضعیف نوشته می‌شود. بنابراین اثر انتشارگر W به صورت صریح در دامنه ظاهر نمی‌شود و به طور کامل در ثابت فرمی G_F جذب شده است ($\frac{g^2}{8m_W^2} = \frac{G_F}{\sqrt{2}}$). از این رو دامنه واپاشی مستقیماً با استفاده از اپراتور مؤثر چهار فرمیونی رابطه (۱) محاسبه می‌شود.

$$\mathcal{A}(t\to bM)=\frac{G_F}{\sqrt{2}}V_{tb}V_{qq'}^{*}\left[\bar{u}_b(p_b)\gamma^{\mu}(1-\gamma_5)u_t(p_t)\right]\times$$
$$\left[\bar{u}_q(p_q)\gamma^{\mu}(1-\gamma_5)u_{q'}(p_{q'})\right]= \qquad (۱)$$
$$\frac{G_F}{\sqrt{2}}V_{tb}V_{qq'}^{*}\langle M|\bar{q}\gamma_{\mu}(1-\gamma_5)q'|0\rangle\left[\bar{u}_b(p_b)\gamma^{\mu}(1-\gamma_5)u_t(p_t)\right]$$

بخش $\langle M|\bar{q}\gamma_{\mu}(1-\gamma_5)q'|0\rangle$ در دامنه رابطه (۱)، در تقریب جداسازی، ثابت واپاشی نام دارد و برای مزون‌های برداری به صورت زیر تعریف می‌شود [٤]:

$$\langle V(p,\varepsilon)|\bar{q}\gamma_{\mu}q'|0\rangle=f_V m_V \varepsilon_{\mu} \qquad (۲)$$

در رابطه (۲) مقدار f_V پارامتری هادرونی است که شدت کوپل‌شدگی جریان برداری ضعیف به مزون برداری را توصیف می‌کند. مقادیر عددی این کمیت از نتایج محاسبات نظری استخراج می‌شود و مطابق جدول ۱ می‌باشند.

جدول۱- مقادیر عددی f_V

مزون	مقدار عددی $f_V(MeV)$
ρ	216
K^*	220
D_S^*	~ 270
B_C^*	~ 420

در نتیجه با جایگذاری رابطه (۲) در رابطه (۱)، دامنه مطابق رابطه (۳) خواهد بود.

$$\mathcal{A}(t\to bV)=\frac{G_F}{\sqrt{2}}V_{tb}V_{qq'}f_V m_V \varepsilon_{\mu}\left[\bar{u}_b(p_b)\gamma^{\mu}(1-\gamma_5)u_t(p_t)\right] \qquad (۳)$$

برای هر واپاشی دوجسمی از نوع $X\to Y_1,Y_2$، پهنای جزئی واپاشی را می‌توان به صورت زیر نوشت [۵]:

$$\Gamma(X\to Y_1Y_2)=\frac{1}{16\pi m_X^3}\lambda(m_X^2,m_{Y_1}^2,m_{Y_2}^2)C_S C_C\sum_{h,p}|\mathcal{A}|^2 \qquad (٤)$$

که در آن X ذره اولیه و Y_1 و Y_2 ذرات نهایی هستند. عملیات جمع روی تمامی هلیسیتی‌ها (h) و قطبش‌ها (p) در حالت‌های اولیه و نهایی انجام می‌شود. همچنین دو ضریب با نام‌های ضریب تقارن C_S و ضریب رنگ C_C در فرمول ظاهر می‌شوند. ضریب تقارن به‌طور پیش‌فرض برابر ۱ است؛ اما اگر ذره اولیه (X) یک فرمیون باشد، خواهیم داشت $C_S=\frac{1}{2}$. ضریب رنگ نیز عوامل رنگی مرتبط با واپاشی را در نظر می‌گیرد و برابر است با $C_C=\frac{1}{2}$. بنابراین، پهنای جزئی واپاشی متناظر با $t\to bV$ به صورت رابطه (۵) به دست می‌آید.

$$\Gamma(t\to bM)=\frac{1}{64\pi m_t^3}\lambda^{1/2}(m_t^2,m_b^2,m_M^2)\overline{|\mathcal{A}(t\to bM)|}^2 \qquad (۵)$$

که در آن $\overline{|\mathcal{A}|^2}$ مربع دامنه واپاشی است که روی اسپین‌های حالت نهایی جمع زده شده و بر روی اسپین کوارک top در حالت اولیه میانگین‌گیری شده است. همچنین تابع کالن $\lambda(x,y,z)$ (Källén) از سینماتیک واپاشی دوجسمی ناشی می‌شود و به صورت رابطه (٦) است.

$$\lambda(x,y,z)=x^2+y^2+z^2-2xy-2xz-2yz \qquad (٦)$$

مسئله را در چارچوب سکون کوارک top حل می‌کنیم. در این چارچوب، چاربرداهای تکانه–انرژی به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$p_t^{\mu}=(m_t,0,0,0)$$
$$p_V^{\mu}=(E_V,0,0,+|\vec{p}|)\qquad p_b^{\mu}=(E_b,0,0,-|\vec{p}|) \qquad (۷)$$

در این تعریف، مزون برداری در جهت مثبت محور Z و کوارک b در جهت منفی محور X حرکت می‌کنند. در رابطه (۷)

$$E_V=\frac{m_t^2+m_V^2-m_b^2}{2m_t}\qquad E_b=\frac{m_t^2+m_b^2-m_V^2}{2m_t} \qquad (۸)$$

و اندازه تکانه ذرات حالت نهایی به صورت زیر است:

$$|\vec{p}|=\frac{1}{2m_t}\sqrt{\lambda(m_t^2,m_b^2,m_M^2)} \qquad (۹)$$

در ادامه مربع دامنه را به دست خواهیم آورد. توجه داشته باشید که برای حالت‌های نهایی با مزون برداری، مربع دامنه با جمع‌زدن روی اسپین‌های کوارک‌های اولیه و نهایی و همچنین روی سه قطبش فیزیکی مزون برداری به دست می‌آید. در این صورت، دامنه جداسازی‌شده به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\mathcal{A}(t\to bV_{\lambda})=\frac{G_F}{\sqrt{2}}V_{tb}V_{qq'}^{*}f_V m_V \varepsilon_{\mu}^{*}(p_V,\lambda)\times \qquad (۱۰)$$
$$\left[\bar{u}_b(p_b)\gamma^{\mu}(1-\gamma_5)u_t(p_t)\right]$$

جمع روی قطبش‌ها از رابطه زیر پیروی می‌کند:

$$\sum_{\lambda=0,\pm}\varepsilon_{\mu}^{*}(p_V,\lambda)\varepsilon_{\nu}(p_V,\lambda)=-g_{\mu\nu}+\frac{p_{V\mu}p_{V\nu}}{m_V^2} \qquad (۱۱)$$

در نتیجه داریم:

$$\overline{|\mathcal{A}(t\to bV)|^2}=\frac{G_F^2}{2}|V_{tb}V_{qq'}|^2 f_V^2 m_V^2 L_{\mu\nu}\left(-g^{\mu\nu}+\frac{p_V^{\mu}p_V^{\nu}}{m_V^2}\right) \qquad (۱۲)$$

که $L_{\mu\nu}$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$L_{\mu\nu}=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left[(\not{p}_b+m_b)\gamma_{\mu}(1-\gamma_5)(\not{p}_t+m_t)\gamma_{\nu}(1-\gamma_5)\right] \qquad (۱۳)$$

محاسبه مربع دامنه و کسر هلیسیتی

برای حالت‌های نهایی برداری $t\to bV$، قطبش مزون برداری V علاوه بر نرخ واپاشی کل، کمیت‌های قابل مشاهده

بیشتری را فراهم می‌کند. برای بررسی کمیت‌های مرتبط با قطبش، نرخ واپاشی را به مؤلفه‌های هلیسیتی تجزیه می‌کنیم (رابطه ۱۴) و کسر هلیسیتی F_λ را به صورت رابطه (۱۵) تعریف می‌کنیم.

$$\Gamma(t\to bV)=\Gamma_0+\Gamma_-+\Gamma_+ \qquad (۱۴)$$

$$F_\lambda\equiv\frac{\Gamma_\lambda}{\Gamma_0+\Gamma_-+\Gamma_+},\qquad \lambda=0,\pm \qquad (۱۵)$$

برای یک ذره جرم‌دار که در راستای $(+z)$ حرکت می‌کند، از پایه هلیسیتی استفاده می‌کنیم $g^{\mu\nu}=\mathrm{diag}(1,-1,-1,-1)$.

$$\varepsilon^\mu(0)=\left(\frac{|\vec{p}|}{m_V},0,0,\frac{E_V}{m_V}\right)\qquad \varepsilon^\mu(\pm)=\frac{1}{\sqrt{2}}(0,\mp1,-i,0) \qquad (۱۶)$$

بردار قطبش طولی در رابطه (۱۶) مستقیماً از فرض اولیه $\varepsilon^\mu(0)=(a,0,0,b)$ به دست می‌آید. با اعمال قیود $p_V.\varepsilon(0)=0$ و $\varepsilon(0)^2=-1$ مقادیر ضرایب به‌طور یکتا تعیین می‌شوند و نتیجه می‌دهد که $a=\frac{|\vec{p}|}{m_V}$ و $b=\frac{E_V}{m_V}$. در نتیجه می‌توان دامنه وابسته به هلیسیتی را نوشت:

$$\mathcal{A}_\lambda=C_V J^\mu\varepsilon^*_\mu(\lambda)$$
$$J^\mu=\bar{u}_b(p_b)\gamma^\mu(1-\gamma_5)u_t(p_t),C_V=\frac{G_F}{\sqrt{2}}V_{tb}V_{qq'}f_V m_V. \qquad (۱۷)$$

و مربع دامنه به صورت زیر خواهد بود:

$$\overline{|\mathcal{A}_\lambda|^2}=C_V^2 L_{\mu\nu}\varepsilon^{*\mu}(\lambda)\varepsilon^\nu(\lambda) \qquad (۱۸)$$

که در آن $L_{\mu\nu}$ تانسور هادرونی است و طبق رابطه (۱۳) تعریف می‌شود. با محاسبه تریس، نتیجه به صورت زیر به دست می‌آید:

$$L_{\mu\nu}=4\left[p_{b\mu}p_{t\nu}+p_{b\nu}p_{t\mu}-g_{\mu\nu}(p_b\cdot p_t)+i\epsilon_{\mu\nu\alpha\beta}p_b^\alpha p_t^\beta\right] \qquad (۱۹)$$

اکنون برای بردارهای قطبش عرضی (Transverse) داریم:

$$L_\pm\equiv L_{\mu\nu}\varepsilon^{*\mu}(\pm)\varepsilon^\nu(\pm)=4m_t(E_b\mp p) \qquad (۲۰)$$

در نتیجه دامنه برای قطبش عرضی برابر است با:

$$\overline{|\mathcal{A}_\pm|^2}=C_V^2 4m_t(E_b\mp p) \qquad (۲۱)$$

با استفاده از رابطه چاربرداری و بقای انرژی می‌توان نوشت:

$$E_b^2-p^2=m_b^2,\qquad E_b-p=\frac{m_b^2}{E_b+p} \qquad (۲۲)$$

مقدار نهایی دامنه برای قطبش‌های عرضی برابر است با:

$$\overline{|\mathcal{A}_+|^2}=C_V^2 4m_t\frac{m_b^2}{E_b+p}\qquad \overline{|\mathcal{A}_-|^2}=C_V^2 4m_t(E_b+p) \qquad (۲۳)$$

می‌بینیم که برای هلیسیتی مثبت مزون برداری، $\overline{|\mathcal{A}_+|^2}\propto m_b^2$ است. در نتیجه در صورتی که برای $m_b\to0$ داریم $\overline{|\mathcal{A}_+|^2}\to0$ برای بردار قطبش طولی نیز رابطه (۲۴) را داریم.

$$L_0=\frac{2}{m_V^2}\left[(m_t^2-m_b^2)^2-m_V^2(m_t^2+m_b^2)\right] \qquad (۲۴)$$

بنابراین مربع دامنه برای این قطبش برابر است با:

$$\overline{|\mathcal{A}_0|^2}=C_V^2L_0=C_V^2\frac{2}{m_V^2}\left[(m_t^2-m_b^2)^2-m_V^2(m_t^2+m_b^2)\right] \qquad (۲۵)$$

از آنجا که تمام کانال‌های هلیسیتی یک عامل فازفضای دوجسمی مشترک دارند، کسرهای هلیسیتی را می‌توان مستقیماً بر حسب مربع دامنه‌ها نوشت:

$$F_\lambda=\frac{|\mathcal{A}_\lambda|^2}{|\mathcal{A}_0|^2+|\mathcal{A}_-|^2+|\mathcal{A}_+|^2} \qquad (۲۶)$$

با تعریف $N\equiv(m_t^2-m_b^2)^2-m_V^2(m_t^2+m_b^2)$ خواهیم داشت:

$$F_0=\frac{N/m_V^2}{N/m_V^2+4m_tE_b}$$
$$F_-=\frac{4m_t(E_b+p)}{N/m_V^2+4m_tE_b} \qquad (۲۷)$$
$$F_+=\frac{4m_t(E_b-p)}{A/m_V^2+4m_tE_b}=\frac{4m_t}{N/m_V^2+4m_tE_b}\frac{m_b^2}{E_b+p}$$

بنابراین در حد $m_b\to0$

$$F_+\to0$$
$$F_-\to\frac{2m_V^2}{m_t^2+2m_V^2} \qquad (۲۸)$$
$$F_0\to\frac{m_t^2}{m_t^2+2m_V^2}$$

در حد $m_b\to0$ مطابق مدل استاندارد هلیسیتی و کایرالیتی هم‌ارز هستند. در نتیجه در راس tb کوارک b چپ‌دست است و با توجه به اینکه تکانه آن نیز در جهت منفی محور Z قرار دارد باید دارای اسپین $+\frac{1}{2}$ باشد. در نتیجه با توجه به بقای تکانه، تنها مزون‌های برداری‌ای مجازند که اسپین 0 یا -1 داشته باشند. با توجه به حرکت مزون برداری در جهت مثبت محور Z تنها هلیستی‌های مجاز برای این مزون‌ها هلیسیتی‌های 0 و $-$ خواهد بود. بنابراین صفر شدن $\overline{|\mathcal{A}_+|^2}=C_V^2 4m_t\frac{m_b^2}{E_b+p}$ در حد $m_b\to0$ دقیقاً این پیش‌بینی مدل استاندارد را تایید می‌کند [۶].

نتیجه گیری

جدول ۲ کسرهای هلیسیتی در مدل استاندارد را برای واپاشی‌های $t\to bV$ با در نظر گرفتن اثرات جرم متناهی کوارک b نشان می‌دهد. ارزیابی عددی با استفاده از $m_t=172.5\mathrm{GeV}$ و $m_b=4.8\mathrm{GeV}$ و جرم مزون‌های برداری انجام شده است [۷، ۸].

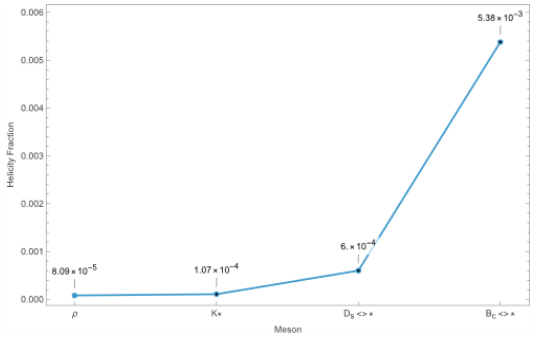
جدول ۲- کسرهای هلیسیتی برای واپاشی‌های $t \to bV$ با در نظر گرفتن اثرات جرم متناهی کوارک b

کانال	F_0	F_-	F_+
$t \to bW$	0.687	0.311	0.0017
$t \to b\rho^+$	0.99995954	8.09×10^{-5}	6.26×10^{-8}
$t \to bK^{*+}$	0.99994640	1.07×10^{-4}	8.29×10^{-8}
$t \to bD_s^{*+}$	0.99969959	6.00×10^{-4}	4.65×10^{-7}
$t \to bB_c^{*+}$	0.99730785	5.38×10^{-3}	4.18×10^{-6}

مقایسه نتایج حاضر با واپاشی استاندارد $t \to bW$ نشان می‌دهد که ساختار هلیسیتی در هر دو فرآیند از الگوی مشابهی پیروی می‌کند. در واپاشی $t \to bW$ نیز قطبش طولی سهم غالب را تشکیل می‌دهد، در حالی که مؤلفه راست‌دست در حد $m_b \to 0$ صفر است و تنها در اثر جرم متناهی کوارک (b) مقدار غیرصفر بسیار کوچکی پیدا می‌کند [۳، ۶]. نتایج حاضر نشان می‌دهند که این ویژگی‌ها پس از هادرون‌سازی زوج کوارکی و تشکیل مزون برداری نیز حفظ می‌شوند. تفاوت اصلی در وابستگی کسرهای هلیسیتی به جرم مزون برداری نهایی است که موجب تغییرات کوچکی در مقادیر F_0 و F_- می‌شود.

از روابط (۲۷) مشاهده می‌شود که کسرهای هلیسیتی نه تنها به جرم کوارک‌های اولیه و نهایی، بلکه به جرم مزون برداری نیز وابسته‌اند. با افزایش جرم مزون برداری، فضای فاز واپاشی کاهش و در نتیجه سهم قطبش طولی F_0 نیز اندکی کاهش می‌یابد. در تمامی کانال‌ها، سهم غالب مربوط به کسر طولی F_0 است که همچنان بسیار نزدیک به واحد باقی می‌ماند. از سوی دیگر مؤلفه عرضی چپ‌دست F_- تصحیح غالب را فراهم می‌کند و معمولاً از مرتبه 10^{-4} تا 10^{-3} قرار دارد و برای مزون‌های سنگین‌تر نیز افزایش می‌یابد؛ که ناشی از کاهش فضای فاز و سرکوب سینماتیکی بیشتر مؤلفه طولی است. این رفتار را می‌توان در نتایج عددی جدول ۲ نیز مشاهده کرد. به‌طور مشخص، هنگام گذار از مزون ρ به مزون B_c^{*+}، مقدار F_0 از 0.99995 به 0.997 کاهش می‌یابد، در حالی که سهم F_- روند افزایشی را نشان می‌دهد (شکل ۲).

کسر راست‌دست F_+ نیز تنها به‌واسطه اثرات جرم متناهی m_b غیرصفر می‌شود. این کمیت تقریباً با کسر m_b^2/m_t^2 مقیاس می‌شود و بسیار کوچک و از مرتبه 10^{-8} تا 10^{-6} باقی می‌ماند. در نتیجه، گنجاندن جرم متناهی کوارک b ساختار کیفی هلیسیتی را در واپاشی‌های $t \to bV$ تغییر نمی‌دهد. مقدار غیرصفر F_+ یک سهم غیرقابل حذف در مدل استاندارد است که به‌عنوان مرجع در مطالعات دقیق و نیز در جست‌وجوی برهم‌کنش‌های غیراستاندارد tWb اهمیت دارد؛ زیرا چنین برهم‌کنش‌هایی می‌توانند تولید هلیسیتی راست‌دست را فراتر از مقیاس سرکوب m_b^2/m_t^2 افزایش دهند.



شکل ۲: نمودار تغییر F_- بر اساس جرم مزون نهایی

شایان ذکر است که نتایج حاضر مبنایی برای بررسی آثار فیزیک فراتر از مدل استاندارد نیز فراهم می‌کنند. در بسیاری از مدل‌های توسعه‌یافته، از جمله مدل‌های دارای برهم‌کنش‌های غیرمتعارف در رأس tWb، مؤلفه راست‌دست F_+ می‌تواند مقادیر بسیار بزرگ‌تری نسبت به پیش‌بینی مدل استاندارد اختیار کند. از این رو اندازه‌گیری دقیق کسرهای هلیسیتی در واپاشی‌های کوارک top ابزاری حساس برای جست‌وجوی آثار فیزیک جدید محسوب می‌شود.

مرجع‌ها

[۱] Eilam, G., J. L. Hewett, and A. Soni. "Rare decays of the top quark in the standard and two-Higgs-doublet models." *Physical Review D* 44.5 (1991): 1473.
[۲] Czarnecki, Andrzej, and Kirill Melnikov. "Two-loop QCD corrections to top quark width." *Nuclear Physics B* 544.3 (1999): 520-531.
[۳] Ježabek, M., and Johann H. Kühn. "QCD corrections to semileptonic decays of heavy quarks." *Nuclear Physics B* 314.1 (1989): 1-6.
[٤] Beneke, Martin, and Matthias Neubert. "QCD factorization for B→ pp and B→ pv decays." *Nuclear Physics B* 675.1-2 (2003): 333-415.
[٥] Goodsell, Mark D., Stefan Liebler, and Florian Staub. "Generic calculation of two-body partial decay widths at the full one-loop level." *The European Physical Journal C* 77.11 (2017): 758.
[٦] Aguilar-Saavedra, Juan Antonio. "A Minimal set of top anomalous couplings." *Nuclear Physics B* 812.1-2 (2009): 181-204.
[٧] Zyla, P. A. "Particle Data Group Prog. Theor." *Exp. Phys* 2020 (2020).
[٨] Chang, Qin, et al. "Decay constants of pseudoscalar and vector mesons with improved holographic wavefunction." *Chinese Physics C* 42.7 (2018): 073102.

جداسازی پتانسیل نسبیتی برهمکنش مقید در فضازمان مینکوفسکی

آرزو جهانشیر

گروه فیزیک و علوم مهندسی، مرکز آموزش عالی فنی و مهندسی بوبین زهرا

چکیده

در این پژوهش نظری بر خلاف محاسبات معمول در فیزیک انرژی بالا که ویژگی ذرات و کمیت‌های فیزیکی برهمکنش مقید در شرایط غیر اختلالی و با در نظر داشتن اثرات نسبیتی فضازمان با استناد بر مرتبه اول نسبت v/c بدست می‌آید، ما سعی داشته‌ایم پتانسیل نسبیتی برهمکنش مقید دو ذره‌ای را با استفاده از مراتب توانی بالاتر نسبت v/c از معادلات برهمکنش استخراج نماییم. در این رویکرد بر خلاف گذشته بخش پتانسیل نسبیتی برهمکنش پیوند مقید پنهان نگه داشته نمی‌شود و سهم آن در هامیلتونی کل آشکار می‌شود. افزونه پتانسیل نسبیتی برهمکنش پیوند مقید در مباحث پیوند هادرونی، لپتونی و هایپر هسته‌ها بسیار با اهمیت بوده بصورت پتانسیل نسبیتی غیراختلالی در فضازمان مینکوفسکی از هامیلتونی اثرات نسبیتی اسپینی سیستم تفکیک می‌شود. به همین دلیل هامیلتونی کل به دو بخش غیرنسبیتی و اختلالی نسبیتی تفکیک شده و عبارت پتانسیل نسبیتی برهمکنش با وابستگی به ضریب برهمکنش پیوند مقید و عدد کوانتومی اربیتالی مداری بدست می‌آید.

کلید واژه‌ها: *هامیلتونی نسبیتی، پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی، عملگرتکانه اربیتالی.*

Extraction of Relativistic Hamiltonian of Bound State in Minkowski Spacetime

Jahanshir Arezu

Department of Physics and engineering sciences, Buein Zahra Technical University

Abstract

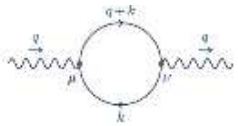
In this theoretical study, contrary to conventional high-energy physics calculations—where the properties of particles and physical quantities of bound-state interactions are typically obtained under non-perturbative conditions by considering relativistic spacetime effects only at the first order of (v/c)—we have sought to extract the relativistic potential of two-body bound-state interactions by incorporating higher-order power terms of (v/c). In this approach, unlike previous studies, the relativistic potential component of the bound-state interaction is not concealed; rather, its contribution to the total Hamiltonian is rendered explicit. The relativistic potential correction for bound-state interactions is of critical importance in hadronic, leptonic, and hypernuclear systems. We separate this correction from the Hamiltonian of the system's spin-relativistic effects as a non-perturbative relativistic potential in Minkowski spacetime. Consequently, the total Hamiltonian is decomposed into non-relativistic and relativistic perturbative parts, allowing us to derive the relativistic interaction potential as a function of the bound-state coupling constant and the orbital quantum number.

keywords: *Relativistic Hamiltonian, Nonperturbative Hamiltonian, Orbit momentum operator*

مقدمه

در مباحث فیزیک ذرات و بررسی برهمکنش قوی، یکی از مسائل اصلی و مهم، رسیدن به جواب معادلات کوانتومی–نسبیتی در محاسبه طیف جرم، مقادیر ویژه و توابع ویژه انرژی است تمامی اثرات برهمکنش را در بر داشته باشد. اگر برهمکنش کوانتومی و نسبیتی را مد نظر داشتته باشیم معادله دیراک و یا سالپیتر کاربردی هستند. اما این دو رابطه تنها بخش اسپینی ناشی از اثرات نسبیتی رهمکنش را نمایان می‌کنند. و یک بخش بسیار مهم از قلم می‌افتد. این بخش به اعمال توان‌های مرتبه بالاتر v/c در معادلات مرتبط است. با در نظر گرفتن این عبارات سهم پتانسیل نسبیتی برهمکنش قوی جداسازی می‌شود. در این پژوهش نظری تلاش شده است با استفاده از معادله‌ی شرودینگر راهکاری ساده و کاربردی برای یافتن پتانسیل برهمکنش نسبیتی در پیوند مقیدرا بدست دهیم. اگر چه در ظاهر معادله شرودینگر کاربردی در مباحث نسبیتی نمی‌تواند داشته باشد. اما با یک رویکرد ریاضی و کاربردی از مفاهیم مهم نظریه میدان و تلفیق با مبانی نظری مکانیک کوانتومی غیر نسبیتی می‌توان

با بازنویسی انرژی کلاسیک به نسبیتی در هامیلتونی شرودینگر و تعبیه متغیرهای نسبیتی، شکل جدیدی از معادله شرودینگر را برای توصیف ساختارهای کوانتومی–نسبیتی ارایه داد که در حل پیوندهای مقید ذرات بسیار کارآمد بوده و جواب‌های بدست آمده از این روش با نتایج تجربی و نظری روش‌های دیگر را می‌توان برای طیف جرم هادرونی محاسبه کرد. از این رو معادله شرودینگر تغییر شکل یافته را با یک پتانسیل دلخواه به همراه اصلاحات نسبیتی در هامیلتونی پیوند مقید دو ذره‌ای در نظر می‌گیریم. در این رویکرد لازم است بخش اثرات کوانتومی–نسبیتی را به عنوان هامیلتونی غیر اختلالی مشخص نماییم اما جداسازی عبارت پتانسیل نسبیتی از روابط معمولی معادله شرودینگر ممکن نیست[۱]. بنابراین بدنبال روشی راهبردی و ترکیبی از نظریه میدانهای کوانتومی و مفاهیم کوانتومی–نسبیتی خواهیم بود که با انجام تغییراتی جزئی در معادله برهمکنش دو ذره‌ای، به همراه مفهوم کاربردی انتگرال مسیر فاینمن، بتوانیم پتانسیل نسبیتی برهمکنش مقید را در فضازمان مینکوفسکی به شکل تفکیک شده بدست آوریم. به عبارت دیگر جداسازی پتانسیل نسبیتی با استفاده از معادله مرتبط با انتشارگر برهمکنش دو ذره‌ای معنا پیدا کرده و به عنوان افزونه پتانسیل نسبیتی در معادله شرودینگر بخش اصلاح پتانسیل را نمایان می‌کند. در روش پیشنهادی، دامنه احتمال رویدادهای کوانتومی با جمع‌زنی روی تمام مسیرهای ممکن که ذره می‌تواند از یک نقطه در فضازمان به نقطه دیگر طی کند محاسبه می‌شود (انتگرال مسیر فاینمن در نظریهٔ میدان‌های کوانتومی). از این رو برهمکنش دو ذره‌ای را در قالب مفاهیم توزیع دو نقطه‌ای گوسی ادامه می‌دهیم. می‌دانیم تابع توزیع گوسی دو نقطه‌ای (قطبش تک حلقه‌ای خلاء) (شکل ۱) و تابع گرین بهم وابسته بوده و مستقیما جریان بار حقیقی برهمکنش دو ذره‌ای در فضازمان مینکوفسکی را تحت انتگرال‌های تابعی بدست می‌دهند.



شکل ۱: قطبش تک حلقه‌ای خلاء

به همین دلیل در این مقاله برای رسیدن به افزونه پتانسیل نسبیتی در هامیلتونی پیوند مقید، از روش ریاضی انتگرال تابعی و انتگرال مسیر فاینمن برای بازنویسی برهمکنش دو ذره‌ای در میدان خارجی دلخواه تحت معادلات مکانیک کوانتومی و نظریه میدان استفاده شده است[۲,۳].

بازنویسی تابع توزیع گوسی دو نقطه‌ای

تابع توزیع گوسی دو نقطه‌ای بهترین حالت فرایند جریان حقیقی بار الکتریکی دو ذره را از یک نقطه به نقطه دیگر در فضازمان نشان می‌دهد و طبق اصول نظریه میدان، به شکل زیر بازنویسی می‌شود $(r = |r_1(\tau) - r_2(\tau)|)$

$$\Pi(r) = \int J_\mu(r) J_\nu(r) dr = \\ = \int \Phi^*(r)\Phi(r)\,\Psi^*(r)\Psi(r) dr \\ = \int G_{m_1}(r|A_\mu)\, G^*{}_{m_2}(r|A_\mu) dr \qquad (۱)$$

و تابع انتشارگر گرین در میدان پیمانه‌ای دلخواه $A_\mu(r_0,\bar{r})$ با ضریب برهمکنش g برابر است با [۲-۵]

$$G_m(r|A_\mu) = \left[\left(i\frac{\partial}{\partial r} + \frac{g}{c\hbar}A_\mu\right)^2 + \frac{c^2m^2}{\hbar^2}\right]^{-1}\delta(r) = \\ = \frac{1}{i}\int_0^\infty dt\delta(r) exp\left\{it\left[\left(i\frac{\partial}{\partial r} + \frac{g}{c\hbar}A_\mu\right)^2 + \frac{c^2m^2}{\hbar^2} + i\varepsilon\right]\right\} \qquad (۲)$$

عبارت $+i\varepsilon$ از روش انتگرال‌گیری «بازنمایی آلفا» یا «بازنمایی طیفی» در مکانیک کوانتوم بدست می‌آید [۱] و در حالت خاص ما روی مخروط نوری بالایی محاسبات را انجام می‌دهیم. در این بخش از مخروط نوری فضازمان، رویدادهایی قرار دارند که سیگنال نوری آنها با سرعت نور یا کمتر از آن است. با توجه به موضوع پژوهش پیش‌رو برای جداسازی پتانسیل نسبیتی در فضازمان مینکوفسکی در ابتدا تابع دلتا $\delta(r)$ از معادله (۲) را تحت عملگر ترتیب زمانی $T_\tau(\hat{A}(t))$ قرار می‌دهیم. برای این منظور معادله

$$\frac{\partial Y(t)}{\partial t} = g\hat{H}(t)Y(t) \qquad (۳)$$

را در نظر می‌گیریم و $\hat{H}(t)$ عملگر دلخواه با شرط $\left[\hat{H}(t),\hat{H}(t')\right] \neq 0$ است. حل این معادله را به صورت مجموعی از عبارات جبری از مرتبه توانی g بدست می‌آوریم

$$Y(t) = 1 + \sum_n g^n Y_n(t), \quad n=1,2,3,\cdots \qquad (۴)$$

و مشتق رابطه (۳) نسبت به زمان ($\frac{\partial Y_n(t)}{\partial t} = Y_n'(t)$) را نیز بدست می‌آوریم

$$Y_1(t) = \sum_{n=1}^{\infty} g^n Y_n'(t) \quad (۵)$$

با قراردادن روابط بالا در(۵) خواهیم داشت

$$\sum_{n=1}^{\infty} g Y_n'(t) = g\hat{H}(t) + \sum_{n=1}^{\infty} g^{n+1}\hat{H}(t)Y_n(t) \quad (۶)$$

و برای مقادیر متفاوت مرتبه توانی g بدست می‌دهد

$$\begin{aligned} Y_0(t) &= 1 \\ Y_1'(t) &= \hat{H}(t)Y_0(t) \\ Y_2'(t) &= \hat{H}(t)Y_1(t) \\ &\vdots \\ Y_n'(t) &= \hat{H}(t)Y_{n-1}(t) \end{aligned} \quad (۷)$$

و در ادامه انتگرال‌گیری از (۷) عبارات زیر را بدست می‌دهد

$$\begin{aligned} Y_1(t) &= \int Y_0(t)\hat{H}(t_1)dt_1 \\ Y_2(t) &= \int Y_1(t)\,\hat{H}(t_2)dt_2 \\ &\vdots \\ Y_n(t) &= \\ \int dt_n \int dt_{n-1} \cdots \int \hat{H}(t_n)\hat{H}(t_{n-1}) \cdots \hat{H}(t_1)dt_1 \end{aligned} \quad (۸)$$

در این حالت شرط ترتیب عملگر زمانی برابر است با

$$t \geq t_n \geq t_{n-1} \geq \cdots \geq t_1$$
$$t_{j(n)} \geq t_{j(n-1)} \geq \cdots \geq t_{t_{j(1)}}$$

با توجه به حضور عمگر $\hat{H}(t)$ در روابط، حفظ شرط ترتیب زمانی نیز لازم است روی آن اعمال شود

$$T_\tau\left(\hat{H}(t_n),\hat{H}(t_{n-1}),\cdots,\hat{H}(t_1)\right) = \hat{H}\left(t_{j(n)}\right),\hat{H}\left(t_{j(n-1)}\right),\cdots,\hat{H}\left(t_{j(1)}\right) \quad (۹)$$

با قرار دادن (۸) در(۹) شکل جدیدی از رابطه را خواهیم داشت

$$Y_n(t) = \frac{1}{n!}\int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \cdots \times \times \int_0^{t_2} T_\tau\left(\hat{H}(t_n)\hat{H}(t_{n-1}) \cdots \hat{H}(t_1)\right) dt_1 \quad (۱۰)$$

و سپس با استفاده از رابطه (۱۰) در (٤) حل مادله اولیه را بدست می‌آوریم

$$Y(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} T_\tau \left\{\int_0^t \hat{H}(t_n)dt_n \int_0^{t_n} \hat{H}(t_{n-1})dt_{n-1} \cdots \times \times \int_0^{t_2} \hat{H}(t_1)dt_1\right\} = T_\tau \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}\left\{g\int_0^t \hat{H}(\tau)d\tau\right\}^n \rightarrow Y(t) = exp\left\{g\int_0^t \hat{H}(\tau)d\tau\right\} \quad (۱۱)$$

اکنون با توجه به رابطه بالا و معادله (۲) شکل انتشارگر گرین را با اثر عملگر ترتیب زمانی بازنویسی می‌نماییم [۳,۲]

$$G_m(r|A_\mu) = \delta(r)\int_0^\infty dt exp\{-\alpha m^2\}\hat{H}(\tau) \times \times T_\tau exp\left\{-t\int_0^1 d\tau\left(i\frac{\partial}{\partial r(\tau)} + \frac{g}{c\hbar}A_\mu(r(\tau))\right)^2\right\} = \delta(r)\int_0^\infty dt exp\{-\alpha m^2\}\hat{H}(\tau) \times \prod_j^{N,N\to\infty} exp\left\{-t\Delta\left(i\frac{\partial}{\partial r(\tau_j)} + \frac{g}{c\hbar}A_\mu\left(r(\tau_j)\right)\right)^2\right\} \quad (۱۲)$$

با استفاده از رابطه

$$e^{\alpha\frac{\partial}{\partial r}}F(r) = F(r+\alpha)$$

تابع گرین با ضریب بهنجارش C در بازنمایی جدید برابر است با

$$G_m(r|A_\mu) = C\int_0^\infty dt exp\{-tm^2\}\int dv_\mu(\tau) \times \times exp\left\{-\int_0^1 d\tau v^2(\tau) - 2i\sqrt{t}\int_0^1 d\tau v(\tau)\right\} \times A_\mu\left(r + 2\sqrt{t}\int_\tau^1 d\tau' v^2(\tau')\right)\delta\left(r + 2\sqrt{t}\int_\tau^1 d\tau\ v(\tau)\right) \quad (۱۳)$$

اکنون برهمکنش دو ذره به جرم سکون m_i را در نظر می‌گیریم و تابع توزیع گوسی دو نقطه‌ای را از رابطه (۱۱) به شکل انتگرال تابعی بدست می‌آوریم

$$\Pi(r) = \mathcal{L}(\mu_i)\int_0^\infty\int_0^\infty \frac{d\mu_1 d\mu_2}{(8r\mu_1\mu_2\pi^2)^2} e^{\left\{\sum_{i=1}^2 -\frac{r}{2}\left(\frac{m_i^2}{\mu_i}\right)\right\}} \quad (۱٤)$$

$$\mathcal{L}(\mu_i) = C\int\ \delta r_1 \delta r_2\, e^{\{\varkappa\}} e^{W_{ij}} \quad (۱۵)$$

$$\varkappa = -\frac{1}{2}\int_0^r d\tau(\mu_1(\dot{r}_1(\tau))^2 + \mu_2(\dot{r}_2(\tau))^2) \quad (۱۶)$$

تابع $\mathcal{L}(\mu_i)$ مشابه انتگرال مسیر فاینمن در مکانیک کوانتومی غیر نسبیتی است که حرکت دو ذره به جرم μ_1 و μ_2 را توصیف می‌کند [٤-۲]. در فرمول (۱۵) برهمکنش بین دو ذره با رابطه

$$W_{ij} = -W_{11} + 2W_{12} - W_{22} = = (i)^{i+j}\frac{g^2}{2}\int_0^{\tau_1}\int_0^{\tau_2} d\tau_1 d\tau_2\, D_{\alpha\beta}\left(Z_i(\tau_1) - Z_j(\tau_2)\right) \times \times \dot{Z}_{i\alpha}(\tau_1)\dot{Z}_{j\beta}(\tau_2) \quad (۱۷)$$

بیان می‌شود که برهمکنش پتانسیلی (W_{11},W_{22}) و غیرپتانسیلی W_{12} را در بر دارد. اگر انتشارگر برهمکنش دو ذره بدین شکل فرض شود[۷-۵]

$$D_{\alpha\beta}(r) = \delta_{\alpha\beta}\int\frac{dq}{(2\pi)^4}\frac{e^{iqr}}{q^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_\alpha r_\beta}\int\frac{dq}{(2\pi)^4}\frac{e^{iqr}}{q^2}\frac{dq^2}{q^2} \quad (۱۸)$$

معادله(۱۶) بعد از انتگرال‌گیری روی پارامتر r برابر است با

$$W_{ij} = (i)^{i+j}\frac{g^2}{2}\int_0^t\int_0^t d\tau_1 d\tau_2 \int_0^\infty \frac{ds}{2\pi}\int_0^\infty d\eta (2\sqrt{\pi\eta})^3 \times$$
$$e^{\left\{-\frac{\bar{r}^2}{4\eta}\right\}}\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{n=0}^{k}\frac{(-1)^{n+k}}{n!\,(k-n)!}\eta^n r^{4(k-n)} \times$$
$$\left(\frac{is}{c}\right)^{n+k} e^{\{is\tau\}}\Theta_{ij} =$$
$$= (-1)^{i+j}\frac{g^2}{4\pi}\int_0^t\int_0^t d\tau_1 d\tau_2 \frac{\delta(\tau_1-\tau_2)}{|r_j(\tau_1)r_j(\tau_2)|} +$$
$$+(-1)^{i+j}\frac{g^2}{8\pi}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^k}{c^{2k}(2k)!}\int_0^t d\tau \frac{\partial^{2k}}{\partial\tau^{2k}}(r|r_1(\tau) -$$
$$r_2(\tau)|)^{2k-1} = W_{ij}^1 + W_{ij}^2 \qquad (۱۹)$$

سپس با استفاده از محاسبات استاندارد عبارت پتانسیل برهمکنش قطری با $i=j$ ، بخش برهمکنش تبادل تک فوتونی را بدست می‌دهد

$$W_{ij}^1 = W_{11}^1 + W_{12}^1 - W_{22}^1 =$$
$$\int_0^t d\tau\left\{-g^2 r^{-1} + g^2\int\frac{dq}{(2\pi)^2}q^{-1}\right\} \qquad (۲۰)$$

این انتگرال $g^2\int\frac{dq}{(2\pi)^2}q^{-1}$ برابرمقداری ثابت و معادل بهنجارش عملگر جرم در شرایط غیر نسبیتی است. بخش W_{ij}^2 عبارت غیر قطری را می‌دهد که در این حالت ضرایب قطری صفر هستند. هامیلتونی نسبیتی مورد انتظار ما در این بخش قرار دارد و به عنوان پتانسیل غیراختلالی است. با استفاده از مفهوم جابجایی نسبی $r(\tau)$ و زمان نسبی τ نسبت به حرکت دو ذره، رابطه W_{ij}^2 را بسط می‌دهیم. جهت ساده‌سازی موضوع تغییرات سرعت نسبی دو ذره $\frac{\partial v(\tau)}{\partial\tau}=0$ را نسبت به زمان نسبی صفر $r_0 = c(\tau_1-\tau_2)u = c\tau u$ در نظر می‌گیریم. در این حالت W_{ij}^2 به شکل زیر بازنویسی می‌شود

$$I(\tau) = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^k}{c^{2k}(2k)!}\frac{\partial^{2k}}{\partial\tau^{2k}}\left(r^{2k-1}(\tau)\right) \qquad (۲۱)$$

با قراردادن بردار واحد $\vec{n}=\frac{\vec{r}}{r}$ ، $\vec{v}=\vec{r}(\tau)=(\vec{n}\cdot\vec{v})$ ، $\vec{a}=\dot{\vec{v}}(\tau)$ و عملگر تکانه خطی $\hat{\ell}=(\vec{r}\times\mu\vec{v})$ رابطه (۲۱) برابر می‌شود با

$$W_{12}^2 = \frac{-g^2}{4\pi|x(\tau)|}\left(\left(1+\left(\frac{\hat{L}}{2\mu c|x(\tau)|}\right)^2\right)^{-1/2}-1\right) \qquad (۲۲)$$

رابطه (۲۲) پتانسیل نسبیتی غیراختلالی است و در هامیلتونی کل برهمکنش مقید ظاهر می‌شود. با توجه به معادلات ذکر شده هامیلتونی برهمکنش مقید دو ذره‌ای در فیزیک انرژی بالا با جرم کاهیده μ تحت پتانسیل کولنی و پتانسیل نسبیتی برابر است با

$$H \cong \frac{P^2}{2\mu} - \frac{\alpha_c}{r} - \frac{\alpha_c}{r}\left[\left(1+\left(\frac{\hat{L}}{2\mu cr}\right)^2\right)^{-1/2}-1\right] + H_{spins} \qquad (۲۳)$$

که در آن ℓ عدد کوانتومی مداری و α_c ضریب برهمکنش کولنی است.

نتیجه‌گیری

اثرات نسبیتی برهمکنش قوی در انرژی‌های بالا مستقیما بر روی طیف جرم و مقادیر ویژه هامیلتونی برهمکنش تاثیر گذار هستند. به همین دلیل در پتانسیل برهمکنش لازم است بخشی مختص به این رویداد وجود داشته باشد. در این پژوهش نظری با تلفیق نظریه میدان‌های کوانتومی و مکانیک کوانتومی غیر نسبیتی راهکاری برای جداسازی تصحیح پتانسیل نسبیتی برهمکنش مقید دو ذره‌ای در فضازمان مینکوفسکی ارایه شد. نتایج محاسبات طبق رابطه (۲۲) وابستگی اصلاحات نسبیتی غیراختلالی را با عدد کوانتومی اربیتالی و **ضریب برهمکنش** نشان می‌دهد. نتایج بدست آمده منجر به دقت بالاتر در طیف جرم پیوندهای مقید ذرات بنیادی می‌شود و در محاسبه طیف جرم چارمونیوم، باتومیوم و حتی هایپر هسته‌ها و ساختارهای مقید هادرونی چند کوارکی اهمیت بسیار قابل توجهی دارد .

مرجع‌ها

[1] M. E. Peskin, D. V. Schroeder, "*An Introduction To Quantum Field Theory*" CRC Press; 1st edition (2019).
[2] I. Helland, S. Inge., H. Parthasarathy, *"Theoretical variables, quantum theory, relativistic quantum field theory, and quantum gravity,* CRC Press, (2026).
[3] Feldbrugge, Job, and Ue-Li Pen. "The real-time Feynman path integral for step potentials." arXiv preprint arXiv:2508.17578 (2025).
[4] Feynman, A.R. Hibbs, "*Quantum Mechanics and Path Integrals*", Dover Publications Inc, (2010).
[5] R Rosenfelder, "Path Integrals in Quantum Physics", arXiv:1209.1315v2 [nucl-th], (2012).
[6] Jacobson, Ted. "Feynman 1947 letter on path integral for the Dirac equation." The European Physical Journal H 50.1 **4** (2025).
[7] Dineykhan M., Efimov G.V. and Narmsrai Kh. "Inwestigation of Green Functions and the Parisi-Wu Quantization Method in Background Stochastic Fields", Fortsh. Phys., **39** (1991), 259-318.

محاسبه پهنای واپاشی تابشی باریون های سنگین چارم در مدل کوارکی شبه نسبیتی

قلعه نوی، زهرا؛ مؤذن سرخی، معصومه

دانشگاه کوثر بجنورد

چکیده

در این مقاله به مطالعه باریون های سنگین به عنوان سیستم های سه ذره می پردازیم. در مدل پیشنهادی، پتانسیل برهمکنشی بین کوارکی در ابتدا مستقل از اسپین ذرات و به صورت برهمنهشی از پتانسیل محدود کننده خطی و پتانسیل کولنی رنگ در نظر گرفته می شود. با چشم پوشی از اسپین کوارک ها، معادله کلاین گوردن را می توان برای مطالعه باریون ها بکار برد. سپس با استفاده از مدل فوق کروی، قادر خواهیم بود معادله سه ذره ای سیستم را ای در حد شبه نسبیتی حل نموده و با در نظر گرفتن برهمکنشهای بین کوارکی اسپین و ایزو اسپین (به صورت انرژی اختلالی) جرم باریون ها را محاسبه نماییم. در پایان با استفاده از مقادیر جرمی بدست آمده؛ گشتاور مغناطیسی گذار و همچنین پهنای واپاشی باریون های شامل یک کوارک چارم سنگین بدست می آید. نتایج حاصله از این مطالعه با نتایج دیگر مدل ها مقایسه می گردد.

Calculation of Radiative decay widths of Heavy Charm Baryons in a Semi-Relativistic Quark Model

Ghalenovi, Zahra; Moazzen Sorkhi, Masoumeh

Kosar University of Bojnord

Abstract

In this work by solving the semi-relativistic three-body equation, we study the heavy baryons as three-quark systems. At first we introduce a spin-independent interaction as a combination of linear confining and Coulombic terms for the baryonic system. Then we solve the three-body Klein-Gordon equation under the semi-relativistic conditions using the hypercentral model. By considering the spin and isospin interactions as a perturbation, we are able to calculate the masses of the heavy baryons containing one heavy charm quark. Finally we compute the transition magnetic moments and also radiative decay widths of the baryons. Our results are compared to other theoretical calculations.

PACS No. 12.39.Pn, 11.30.Hv

مقدمه

در این مدل باریون به صورت یک سیستم نسبیتی سه ذره ای در نظر گرفته می شود. در این روش که که با هارمونیک های کروی سروکار دارد، فرض شده ا ست که پتانسیل فوق مرکزی فقط به شعاع فوق کره بستگی دارد. پتانسیل مورد بررسی برهمنهشی از پتانسیل محدود کننده خطی و کولنی رنگ (پتانسیل لاگر) می باشد. مدل غیرنسبیتی کوارکی در مراجع [1-6] بررسی شده است. در هیچ یک از مطالعاتی که قبلا انجام گردیده است واپاشی تابشی باریون های سنگین در حد شبه نسبیتی بررسی نشده ا ست. در این مطالعه با ارائه یک روش ساده توانسته ایم برای نخستین بار پهنای واپاشی باریون های دارای یک کوارک سنگین چارم را در حد شبه نسبیتی مطالعه نماییم. حل معادلات سیستم های سه ذره ای در حد نسبیتی و شبه نسبیتی بسیار پیچیده می باشد. در این مقاله با استفاده از مدل فوق کروی، معادله سه ذره ای (کوارکی) باریونی به یک معادله ساده با تک متغیر فوق شعاع x تبدیل و معادله حاصل با روش عددی در محیط نرم افزاری maple و با استفاده از معادلات ODE حل گردیده است. در پایان با استفاده از ویژه مقادیر انرژی بدست آمده و روابط ساده شده مربوط به واپاشی تابشی توانسته ایم پهنای واپاشی باریون های سنگین را به آسانی محاسبه نماییم. از آنجا که پتانسیل برهمکنشی معرفی شده در این مدل

مستقل از اسپین ذرات می باشد می توان معادله کلاین گوردن را برای توصیف سیستم بکار برد. سپس با فرض شرایط خاص می توان معادله سیستم را شبیه به معادله شرودینگر درآورد. در ابتدا معادله اصلی توصیف کننده سیستم باریونی (معادله کلاین گوردن) در حد نسبیتی تعریف شده است ولی سپس اعمال شرایط غیر نسبیتی به سیستم (یعنی $V << m$)، حد غیرنسبیتی را به دنبال دارد ازین رو مدل معرفی شده می تواند در حد شبه نسبیتی رفتار باریون ها را بررسی کند. پس از حل معادله سیستم به روش عددی می توان سهم پتانسیل اختلالی مربوط به وابستگی اسپینی و ایزواسپین را در طیف جرمی باریون محاسبه نمود. در پایان مجموع انرژیها، جرم باریون را بدست می دهد.

مدل پتانسیلی

فرض می کنیم که سیستم سه کوارکی باریون فاقد اسپین و ایزواسپین باشد. پتانسیل برهمکنشی بین دو کوارک با فاصله x را به شکل زیر در نظر می گیریم:

$$V(x) = ax - \frac{c}{x} \qquad (۱)$$

معادله کلاین گوردن یک سیستم کوانتومی تک ذره ای به جرم m و انرژی ε بصورت زیر تعریف می شود:

$$(P^2 + (m+V_S)^2)|\psi(x)\rangle = (\varepsilon - V_V)^2|\psi(x)\rangle \qquad (۲)$$

P عملگر اندازه حرکت و $\psi(x)$ تابع موج ذره می باشد. پتانسیل های برداری V_V و اسکالر V_S را برابر در نظر می گیریم یعنی

$$V_V = V_S = V/2 \qquad (۳)$$

و معادله (2) را بر حسب توان های P/m بسط می دهیم. با فرض $V << m$ (حد غیرنسبیتی) معادله زیر بدست می آید [7-8]:

$$\varepsilon \cong m(1+\frac{1}{2}(\frac{P}{m})^2) + V \qquad (۴)$$

معادله حاصله در حد شبه نسبیتی بررسی می شود [7]. در مورد مسئله سه جسمی باریونی معادله کلاین گوردن (2) را می توان به شکل زیر بازنویسی کرد:

$$(\sum_{i=1}^{3}[P_i^2 + (m_i + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{3}\frac{V_{ij}}{2})^2 - (\varepsilon - \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{3}\frac{V_{ij}}{2})^2])|\Psi\rangle = 0 \qquad (۵)$$

$|\Psi\rangle$ تابع موج کلی سیستم سه ذره ای، P_i اندازه حرکت ذره iام می باشد. انرژی کل سیستم نیز برابر $E = 3\varepsilon$ می باشد. معادله (5) را به شکل ساده زیر نیز می توان نوشت:

$$(P_1^2 + P_2^2 + P_3^2 + (m+\varepsilon)(V_{12}+V_{23}+V_{13}) + 3(m^2 - \varepsilon^2))|\Psi\rangle = 0 \qquad (۷)$$

معادله (6) را در مدل فوق کروی و به روش عددی حل می کنیم. در مدل ارائه شده، معادله کلاین گوردن سه جسمی به معادله شرودینگر شش بعدی زیر تبدیل می شود [6-9]:

$$[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{5}{x}\frac{d}{dx} - \frac{\gamma(\gamma+4)}{x^2} + 3(\varepsilon^2 - m^2) - (m+\varepsilon)(ax - \frac{c}{x})]\Psi(x) = 0 \qquad (۸)$$

که در آن γ عدد کوانتومی زاویه ای بزرگ و m جرم کاهش یافته می باشد. توضیحات بیشتر در مورد مدل فوق کروی در مرجع [6-9] آمده است.

در این مقاله فقط حالت پایه ($\gamma = 0$) باریون بررسی می شود. ویژه تابع و ویژه مقدار انرژی سیستم باریونی با حل عددی معادله (8) بدست می آید.

محاسبه جرم باریون

جرم باریون از مجموع جرم سه کوراک، ویژه مقادیر انرژی E بعلاوه انرژی اختلالی سیستم بدست می آید. از آنجا که مقدار انرژی برهمکنشی اسپینی و ایزواسپینی در مقایسه با ویژه مقادیر انرژی کوچک می باشند لذا می توان این برهمکنش ها را به صورت اختلال در نظر گرفت. در این مقاله انرژی اختلالی توسط تابع گاوسی از فاصله نسبی دو کوارک داده شده است[3]:

$$H_S = A_S(\frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_s})^3 \exp(-x^2/\sigma_S^2)(s_1.s_2) \qquad (۸)$$

$$H_I = A_I(\frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_I})^3 \exp(-x^2/\sigma_I^2)(t_1.t_2) \qquad (۹)$$

$$H_{SI} = A_{SI}(\frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_{SI}})^3 \exp(-x^2/\sigma_{SI}^2)(s_1.s_2)(t_1.t_2) \qquad (۱۰)$$

s_i، اسپین و t_i ایزواسپین کوارک iام می باشد. پتانسیلهای H_S، H_I و H_{SI} به ترتیب مربوط به وابستگی اسپینی، ایزواسپینی و اسپین–ایزواسپین می باشد. با بدست آوردن تابع موج سیستم به روش عددی می توانیم مقدار انرژی اختلالی مربوط به روابط (10-8) را محاسبه کنیم.

جرم باریون از روش زیر بدست می آید:

(۱۱)

$$M_B = E_0 + m_{q1} + m_{q2} + m_{q3} + < H_S > + < H_I > + < H_{SI} >$$

که در آن m_i جرم iامین کوارک و $< H >$ انرژیهای اختلالی مربوط به وابستگی اسپینی، ایزواسپینی و اسپین–ایزواسپین می باشد.

پارامترهای مربوط به پتانسیل برهمکنشی (1) و (11) از مرجع [8] گرفته شده و در جدول۱ لیست شده اند. است. با استفاده از رابطه (11) جرم باریونها را می توان بدست آورد.

جدول۱: پارامترهای مورد نیاز در این مدل

$m_u = m_d$	210 MeV
m_c	1300 MeV
a	$1.61(fm)^{-3}$
c	4.59
A_s	$67.4(fm)^2$
σ_S	2.87 fm
A_I	$51.7(fm)^2$
σ_I	3.45 fm
A_{SI}	$-106.2(fm)^2$
σ_{SI}	2.31 fm

محاسبه پهنای واپاشی تابشی باریونی

کوارک ها در اثر برهمکنش با دیگر کوارک ها انرژی دریافت می کنند و به این دلیل جرم موثر آنها درون باریون با جرم واقعی آنها متفاوت است. جرم موثر کوارکی به شکل زیر تعریف می شود:

$$m_i^{eff} = m_i(1 + \frac{E_0 + < H >}{\sum_i m_i}), \qquad (۱۲)$$

بنحوی که مجموع جرم های مؤثر کوارکی، جرم باریون را بدست می دهد. باریون های با $J^p = 3/2^+$ از آنجا که عمر کوتاهی دارند به باریون های $J^p = 1/2^+$ واپاشی می کنند. گشتاور مغناطیسی گذار را در واپاشی باریون ها $B(3/2^+) \to B(1/2^+)$ بصورت زیر تعریف می شود:

$$\mu_{\frac{3}{2}^+ \to \frac{1}{2}^+} = \sum_i < \phi^{3/2}{}_{sf} \; |\mu_i \vec{\sigma}_i| \; \phi^{1/2}{}_{sf} >, \qquad (۱۳)$$

که $\mu_i = \frac{e_i}{2m_i^{eff}}$ ، e_i بار و σ_i اسپین ذره می باشد. $|\phi_{sf}>$ تابع موج اسپین–طعم باریون مربوطه می باشد. در واقع گشتاور مغناطیسی گذار از ساندویچ کردن رابطه (۱۲) بین تابع موج باریون اولیه (با $J^p = 3/2^+$) و تابع موج باریون ثانویه (با $J^p = 1/2^+$) بدست می آید. از آنجا که جرم مؤثر کوارکی در باریون اولیه و باریون ثانویه متفاوت است لذا برای محاسبه μ_i در رابطه (۱۳) می بایست بین جرم های مؤثر کوارکی اولیه و ثانویه میانگین گرفته شود. در این مقاله از میانگین هندسی جرم ها استفاده شده است. پهنای واپاشی تابشی نیز از رابطه زیر بدست می آید[9]:

$$\Gamma_R = \frac{q^3}{4\pi} \frac{2}{2J+1} \frac{e^2}{m_p^2} |\mu_{\frac{3}{2}^+ \to \frac{1}{2}^+}|^2$$

که جرم پروتون، و J اسپین باریون و q انرژی فوتون تابشی می باشد. نتایج بدست آمده در جدول ۲ و ۳ لیست و با نتایج دیگر مدل ها [9-15] مقایسه شده اند.

جدول ۲. گشتاور مغناطیسی گذار بین باریونی (بر حسب مگنتون هسته)

واپاشی	$\mu_{\frac{3}{2}^+ \to \frac{1}{2}^+}$	[۹]	[۱۰]	[۱۱]	[۱۲]
$\Sigma_c^{*++} \to \Sigma_c^{++}\gamma$	1.631	1.080	0.988	1.19	1.06
$\Sigma_c^{*+} \to \Sigma_c^{+}\gamma$	0.172	0.008	0.008	0.04	0.45
$\Sigma_c^{*0} \to \Sigma_c^{0}\gamma$	1.287	1.064	1.012	1.11	0.19
$\Sigma_c^{*+} \to \Lambda_c^{+}\gamma$	2.610	1.857	1.758	–	–
$\Sigma_c^{+} \to \Lambda_c^{+}\gamma$	1.845	1.347	1.268	2.28	1.48

جدول ۳. پهنای واپاشی باریون های سنگین چارم بر حسب KeV

واپاشی	Γ_R	[۱۰]	[۱۳]	[۱۴]	[۱۵]
$\Sigma_c^{*++} \to \Sigma_c^{++}\gamma$	4.49	2.05	11.60	3.94	3.56
$\Sigma_c^{*+} \to \Sigma_c^{+}\gamma$	0.050	0.0004	0.85	0.004	0.187
$\Sigma_c^{*0} \to \Sigma_c^{0}\gamma$	2.79	2.16	2.92	3.43	1.04
$\Sigma_c^{*+} \to \Lambda_c^{+}\gamma$	664.14	135.30	893	373	409.3
$\Sigma_c^{+} \to \Lambda_c^{+}\gamma$	166	66	164	80	–

نتایج

در این مقاله باریون بصورت یک سیستم متشکل از سه ذره (سه کوارک) در نظر گرفته شده است. فرض شده است کوارک ها تحت پتانسیل $ax - c/x$ برهمکنش می کنند. با چشم پوشی از اسپین ذرات و با فرضیات خاص مسئله، معادله کلاین گوردن به معادله ای شبیه به معادله شرودینگر تبدیل و رفتار باریون های سنگین دارای یک کوارک چارم در حد شبه نسبیتی بررسی شده است. پتانسیل برهمکنشی اسپین، ایزو اسپین و اسپین–ایزواسپین بصورت انرژی اختلالی سیستم معرفی شده است. با حل معادله توصیف کننده سیستم به روش عددی، تابع موج سیستم و ویژه مقادیر انرژی سیستم بدست می آیند. در پایان مقدار انرژی اختلالی مربوط به اسپین و ایزواسپین و نیز جرم باریون را محاسبه کرده ایم. با معرفی جرم مؤثر کوارکی درون باریون می توانیم گشتاور مغناطیسی گذار و نیز پهنای واپاشی تابشی را در واپاشی باریون های چارم با اسپین۳/۲ به باریون های متناظر با اسپین ۱/۲ را محاسبه کنیم. نتایج بدست آمده به نتایج دیگر مدل ها نزدیک می باشد. تا کنون هیچ مقدار تجربی برای پهنای واپاشی باریون سنگین گزارش نشده است. بنابراین برآورد عدم قطعیت و تحلیل خطای محاسباتی در پهنای واپاشی بدست آمده امکان پذیر نیست.

مرجع ها

[1]. Z. Ghalenovi, Ch.P. Shen and M. Moazzen Sorkhi , Phys. Lett.B 834, 137405 (2022).
[2] .Z. Ghalenovi and M. Moazzen Sorkhi, Chin. Phys. C 47, 3 (2023).
[3]. Z. Ghalenovi, M. Moazzen Sorkhi and A. H. Sovizi, Mod. Phys. Lett. A 40, 19 (2025).
[4]. M.M Giannini, E.Santopinto A. Vassalo, Prog. Part. Nucl. Phys. 50, 263(2003).
[5]. Z. Ghalenovi and M. Moazen, Eur. Phys. J. Plus 132 354 (2017).
[6]. M. Aslanzadeh, A. A. Rajabi, Eur. Phys. J. A 50 151 (2014).
[7]. M. Aslanzadeh, A. A. Rajabi, Int. J. Mod. Phys.E 24,1550032 (2015).
[8]. Z. Ghalenovi, S. Qin and H.D. Rischke, Mod. Phys. Lett. A 29, 1450106 (2014).
[9] A. Majethiya, B. Patel, P. Vinodkumar, Eur. Phys. J A 42, 213 (2009).
[10] . Keval Gandhi, Zalak Shah, Ajay Kumar Rai, Eur. Phys. J. Plus 133, 512 (2018).
[11]. A. Majethiya, B. Patel, P. Vinodkumar, Eur. Phys. J A 42, 213 (2009)
[12]. T. Aliev, K. Azizi, A. Ozpineci, Phys. Rev. D 79, 056005 (2009).
[13]. N. Jiang, X.L. Chen, S.L. Zhu, Phys. Rev. D 92, 054017 (2015).
[14]. K. L. Wang *et al*., Phys. Rev. D 96, 116016 (2017).
[15]. T. Aliev, M. Savci, V. Zamiralov, Mod. Phys. Lett. A 27, 1250054 (2012).

محاسبه‌ی نیروی کششی کوارک سنگین با کمک یادگیری عمیق ماشین

منصوری، مهدی[۱] ؛ بی‌تقصیر فدافن[۱]، کاظم

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود ، خیابان تهران میدان هفت تیر ، شاهرود

چکیده

یادگیری عمیق ماشین زیر مجموعه‌ای از هوش مصنوعی است که با پردازش داده‌ها، سعی در استخراج ویژگی‌های خاص دارد. این رویکرد، برای حل مسائل فیزیک نظری و تجربی روش نوینی در سال‌های اخیر بوده است. در این مقاله با استفاده از یادگیری عمیق ماشین، نیروی کششی وارد بر کوارک سنگین محاسبه می شود. ابتدا متریک به این روش به دست می آید و سپس از هولوگرافی بررسی می کنیم که رفتار نیروی کششی مطابق انتظار است یا خیر.

.

واژه های کلیدی: *یادگیری عمیق ماشین، پلاسمای کوارک-گلئون، دوگانی پیمانه گرانش، نیروی کششی کوارکونیوم.*

Calculation of Heavy Qurak Drag Force using Deep Machine Learning

Mahdi, Mansouri ; Bitaghsir Fadafan, Kazem

Department of Physics, Shahrood University of Tecnology, Shahrood

Abstract

Deep machine learning is a subset of artificial intelligence that, through data processing, attempts to extract specific features. This approach has been a novel method in recent years for solving problems in theoretical and experimental physics. In this paper, using deep machine learning, the drag force acting on a heavy quark is calculated. First, the metric is obtained using this method, and then, through holography, we examine whether the behavior of the drag force is as expected or not.

***Keywords**: Deep Learning, Drag force, Quark-Gluon Plasma (QGP), Quark-anti Quark*

مقدمه

استفاده از روش یادگیری عمیق ماشین در زمینه تناظر نظریه میدان همدیس[۱]/ پاد دوسیته[۲] یا به اختصار AdS/CFT برای استخراج متریک گرانش به یک زمینه تحقیقاتی جذاب تبدیل شده است [۱]. یکی از چالش‌های اساسی در این دوگانی ساخت متریک گرانش

[1] Conformal Field Theory

[2] Anti de-Sitter

مناسب برای یک نظریه میدان کوانتومی معین در سمت مرز است. در مدل‌های هولوگرافی QCD، متریک فضازمان برای توصیف رفتار ذرات بنیادی و برهم‌کنش‌های آن‌ها در شرایط گوناگون به‌کار می‌رود. برای بدست آوردن متریک گرانش تعیین یک مدل ضروری است. از سوی دیگر درورویکرد یادگیری عمیق یافتن متریک مسئله‌ای معکوس است. یعنی با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی در نظریه مرز می‌توان متریک گرانش را یافت. هاشیموتو رویکردی مبتنی بر یادگیری عمیق برای استخراج متریک به این روش پیشنهاد کرد [۲]. در این روش با جمع‌آوری داده‌های تجربی مرزی ، یک شبکه عصبی عمیق با استفاده از این داده‌ها آموزش داده می‌شود. شبکه عصبی به گونه‌ای طراحی شده است که بتواند الگوهای پیچیده را شناسایی کرده و متریک فضازمان را بازسازی کند.

در این مقاله، ما از متریک استخراج شده از یادگیری عمیق ماشین به کمک روش به‌کار برده شده در [۲] برای مطالعه نیروی کششی در دماهای مختلف استفاده می‌کنیم. هم‌چنین نسبت ضرایب $\frac{\kappa_L}{\kappa_T}$ را برای یک کوارک سنگین در حال حرکت در پلاسمای کوارک–گئون هولوگرافی مطالعه می‌کنیم. این کمیت‌ها نقش اساسی در توصیف اتلاف انرژی و پدیده‌های انتقال در محیط‌هایی با دما و چگالی بالا ایفا می‌کند. هدف اصلی این مقاله، پاسخ به این پرسش است که چگونه یک متریک گرانش که با یادگیری عمیق از داده‌های مرزی استخراج شده است، می‌تواند پیش‌بینی‌های متفاوتی نسبت به متریک‌های تحلیلی متعارف مانند AdS-Schwarzschild برای نیروی کششی و نسبت $\frac{\kappa_L}{\kappa_T}$ ارائه دهد. بدین منظور، متریک گرانش استخراج شده به روش هاشیموتو به‌کار برده و سپس نیروی کششی را نسبت به سرعت را مطالعه کرده و هم‌چنین نیروی کششی را نسبت به دماهای مختلف بررسی می کنیم. نسبت $\frac{\kappa_L}{\kappa_T}$ با استفاده از فرمول‌بندی هولوگرافی محاسبه و با نتایج حاصل از مدل‌های تحلیلی مقایسه خواهد شد. در مرجع [۲] یک شبکه‌ی عصبی عمیق از معادله میدان اسکالر در فضازمان خمیده (d+1) بعدی طراحی می‌شود. قابل توجه است که خود فضازمان گرانشی به عنوان شبکه عصبی در نظر گرفته می‌شود. جهت گسترش فضازمان هولوگرافی را معادل جهت عمق لایه‌های شبکه عصبی در نظر می‌گیریم. فضازمان هولوگرافی $(1+4)$ بُعدی با متریک زیر تعریف می‌شود:

$$ds^2 = -f(\eta)dt^2 + d\eta^2 + g(\eta)(dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2) \quad (۱)$$

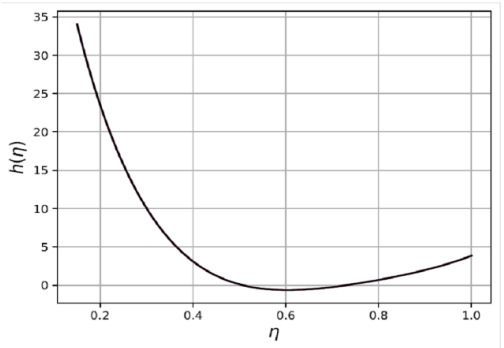
با مختصه‌های $(t.\eta.x_1.x_2.x_3)$، t بُعد زمانی، x_i بُعد فضایی و η بُعد شعاعی هولوگرافی است. افق سیاه‌چاله در $\eta = 0$ و مرز هولوگرافی در $\eta = \infty$ قرار دارد. برای سادگی یک نظریه میدان اسکالر درفضازمان خمیده در نظر گرفته شده است که ثابت برهمکنشی آن λ است. در این متریک پارامترهای $f(\eta)$ و $g(\eta)$ را بایستی استخراج کنیم. شبکه عصبی به‌گونه‌ای طراحی شده است که فرآیند شارش هولوگرافی از فضای درونی(توده) به سمت نظریه میدان در مرز را از طریق یک معادله دیفرانسیل معمولی پیوسته (***Neural ODE***) مدل‌سازی کند. در قلب این معماری، یک شبکه عصبی کمکی به نام تابع دینامیک قرار دارد که با بهره‌گیری از توابع فعال‌سازی غیر خطی(همچون ***tanh*** یا ***ReLU***) در بایه‌های درونی خود، قادر است روابط پیچیده و غیرخطی حاکم بر تحول میدان‌ها در راستای بعد شعاعی توده را تقریب بزند و عملا نقش نرخ تغییرات را در معادله دیفرانسیل ایفا کند. خروجی این بلوک ***ODE*** که با حل عددی معادله از عمق توده تا مرز به دست می‌آید، مقادیر پیش‌بینی شده برای مشاهده‌پذیرهای فیزیکی نظیر جرم مزون‌ها و ثابت واپاشی است. در انتهای معماری شبکه عصبی یک تابع هزینه (***Loss Funvtion***) تعریف می‌شود که اختلاف میان این مقادیر پیش‌بینی شده و داده‌های تجربی واقعی را به‌صورت یک عدد اسکالر خطا محاسبه می‌کند. فرایند آموزش بدین صورت است که گرادیان این تابه هزینه به‌وسیله الگوریتم پس‌انتشار خطا(***Backpropagation***) از مرز به درون شبکه و از میان حل‌گر ***ODE*** عبور داده می‌شود تا پارامترهای تابع دینامیک و در نتیجه شکل میدان دیلاتون و پتانسیل توده چنان تنظیم شوند که خروجی نهایی شبکه دقیقا منطبق بر واقعیت تجربی گردد. جزییات محاسبه در مرجع [٤] آمده است. شبکه عصبی متناسب با معادله حرکت و وزن‌ها در شبکه عصبی متریک است. ورودی شبکه عصبی داده‌های شبکه QCD هستند که در آن چگالش دستیده را به عنوان تابعی از جرم کوارک در دمای ثابت به ما می‌دهند. چگالش

دستیده $\langle\bar{\psi}\psi\rangle$ بر حسب واحد $[GeV^3]$ و جرم کوارک m_q برحسب $[GeV]$ است.

جدول ۱: نتایج یادگیری عمیق از ثابت جفت شدگی λ در دماهای مختلف

T	0.188	0.192	0.196	0.200	0.204	0.204
λ	0.0014	0.0011	0.009	0.0007	0.005	0.0003

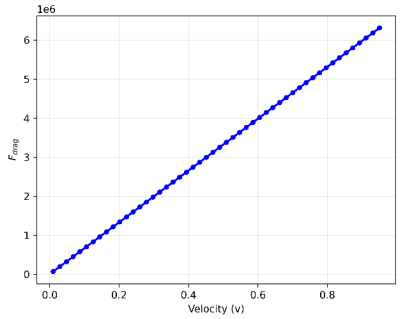
شکل (۱) تابع متریک استخراج شده توسط داده‌های شبکه QCD از چگالش دستیده با استفاده شبکه عصبی ODE در [۲] پیدا شد. پس از آموزش، مشخص شده که L=5.164 اما جفت شدگی میدان اسکالر λ مطابق جدول (۱) به دما وابسته است. کمیت hعبارتست از متریک استخراج شده از شبکه عصبی که به صورت چند جمله‌ای در آمده است.



شکل ۱: متریک استخراج شده توسط یادگیری عمیق ماشین

نیروی کششی به عنوان سنجه‌ای برای یادگیری ماشین

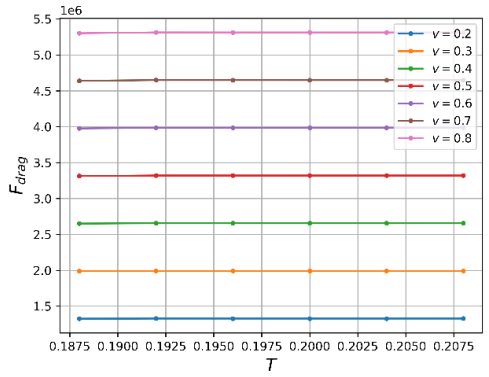
پلاسمای کوارک–گلئون حالتی از ماده QCD است که در دماها و چگالی‌های انرژی بسیار بالا (فراتر از دمای بحرانی $T_c \approx$ 155 MeV) شکل می‌گیرد. در این فاز، کوارک‌ها و گلئون‌ها از بند حبس درون هادرون‌ها آزاد شده و در حجمی بزرگ‌تر از ابعاد هادرونی حرکت می‌کنند. گذار از ماده هادرونی عادی به پلاسمای کوارک–گلئون یک گذار فاز از نوع گذار عرضی سریع است که در برخوردهای یون‌های سنگین نسبیتی در شتاب‌دهنده‌هایی مانند RHICو LHC رخ می‌دهد. این محیط به دلیل جفت‌شدگی قوی میان اجزایش، رفتاری نزدیک به یک سیال کامل با گرانرَوی برشی بسیار کوچک از خود نشان می‌دهد و آزمایش کاوشگرهایی مانند کوارک‌های سنگین، جت‌ها و کوارکونیوم‌ها نقش اساسی در شناخت ویژگی‌های ترابردی و دینامیکی آن دارد .وقتی یک کوارک سنگین از درون یک محیط داغ عبور می‌کند، دچار اتلاف انرژی شدید می‌شود . در انرژی‌های بالا (سرعت‌های نزدیک به نور، $v \to 1$ یا عامل لورنتس بزرگ $\gamma \gg 1$)، نیروی کششی وارد بر کوارک سنگین در پلاسمای کوارک–گلئون افزایش چشمگیری پیدا



شکل2 : نیروی کششی بر حسب سرعت برای متریک در یک دمای ثابت T=0.188 GeV

می‌کند. در حد تکانه‌های بالا، سطح مقطع برهم‌کنش کوارک با ذرات پلاسما (کوارک‌ها و گلئون‌ها) افزایش می‌یابد. نیروی کششی در این رژیم متناسب با تکانه یا همان عامل لورنتس رشد می‌کند و به صورت $F_{\text{drag}} \propto p \propto \gamma v$ ظاهر می‌شود. این رفتار به اتلاف سریع‌تر انرژی کوارک‌های پرانرژی می‌انجامد و زیربنای پدیده فرونشانی جت‌ها در برخوردهای یون‌های سنگین است. در تصویر پاد دوسیته، با افزایش سرعت کوارک، ریسمان بیش‌تر به سمت افق سیاه‌چاله خم می‌شود. این خمیدگی بیش‌تر به معنای شارش تکانه بیش‌تر به درون افق است که مستقیماً به نیروی کششی بزرگ‌تر ترجمه می‌شود(شکل (۲)). در حد فرانسبیتی، نیروی کششی به‌صورت $F_{\text{drag}} \propto \frac{v}{\sqrt{1-v^2}} = v\gamma$ رشد می‌کند که نشان‌دهنده اتلاف شدید انرژی کوارک در محیط با جفت‌شدگی

قوی است.مطابق شکل (۳) در انرژی‌های بالا، افزایش دمای پلاسما

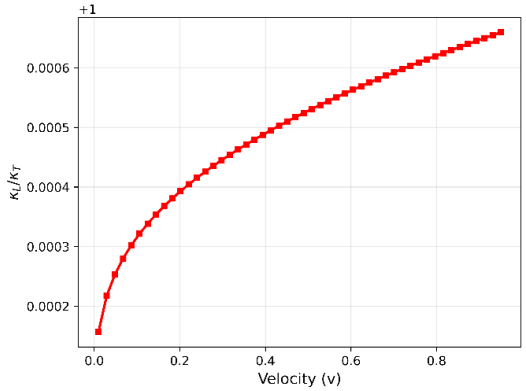


شکل ۳: نیروی کششی بر حسب دما و سرعت های مختلف

نیز نیروی کششی را تقویت می‌کند. با این حال، شیب افزایش نیرو با دما در تکانه‌های بسیار بالا کاهش می‌یابد. بنابراین به‌جای بررسی مستقیم سیستم با جفت‌شدگی قوی، دینامیک ریسمان در سوی گرانشی تحلیل می‌شود.

نتیجه گیری

با توجه به اینکه نظریه $\mathcal{N} = 4$ SYM می‌تواند ویژگی‌های دینامیکی پلاسمای کوارک–گلئون را بالای دمای بحرانی بازتولید کند، پدیده‌شناسی QCD با این نظریه تقریب زده می‌شود. در این چارچوب، آهنگ شارش تکانه به درون ریسمان، نیروی کششی تلقی می‌گردد. در رهیافت پایین‌به‌بالا، یک نظریه میدان مؤثر پنج‌بعدیِ الهام‌گرفته از ریسمان با داده‌های QCD سازگار می‌شود. در ادامه می توان ویژگی‌های ترابردی پلاسمای کوارک–گلئون را با کمک روش‌های یادگیری ماشین و با استفاده از داده‌های QCD مطالعه کرد. نتیجه در شکل ۵ آمده است. محور عمودی مقادیر بیشتر از یک را نشان می دهد و براساس مرجع [۷] نتیجه همواره از یک بیشتر است. پس محاسبه ها نتیجه قابل انتظار را تولید می کنند و تاییدی است بر متریکی که از روش یادگیری ماشین به دست آمده است.



شکل ۵: . نسب ضرایب $\frac{\kappa_L}{\kappa_T}$ به سرعت در یک دمای ثابت $T=0.188$ GeV

مراجع

[1]. K. Hashimoto, S. Sugishita, A. Tanaka and A. Tomiya,``*Deep learning and the AdS/CFT correspondence*,"Phys. Rev. D **98**, no.4, (2018) [arXiv:1802.08313 [hep-th]

[2].K. Hashimoto, H. Y. Hu and Y. Z. You, ``*Neural ordinary differential equation and holographic quantum chromodynamics*,' 'Mach. Learn. Sci. Tech. **2** (2021) [arXiv:2006.00712 [hep-th]

[3]. O.-Y. Luo, X. Chen, F.-P. Li, X.-H. Li, K. Zhou, *Neural Network Modeling of Heavy-Quark Potential from Holography*, arXiv preprint arXiv:2408.03784, DOI (2024).

[4]م. منصوری, پایان نامه کارشناسی ارشد، *یافتن متریک به کمک یادگیری عمیق ماشین در دوگانی پیمانه گرانش*، دانشکده فیزیک, دانشگاه صنعتی شاهرود, ۱۴۰۳.

[5]. Mahdi Mansouri, Kazem Bitaghsir Fadafan, Xun Chen *Holographic complex potential of a quarkonium from deep learning*, [arXiv:2406.06285 [hep-th]]

[6]. K.B. Fadafan and S.K. Tabatabaei,``*Thermal Width of Quarkonium from Holography*,"Eur. Phys.J. C **74** (2014), 2842doi:10.1140/epjc/s10052-014 28422[arXiv:1308.3971[hep-th]].

[7]D.~Giataganas and H.~Soltanpanahi,``Universal Properties of the Langevin Diffusion Coefficients,"Phys. Rev. D \textbf{89} (2014) no.2, 026011doi:10.1103/PhysRevD.89.026011[arXiv:1310.6725 [hep-th]].

بررسی تطبیقی محتوای کتابهای درسی فیزیک ایران در زمینه مفاهیم مکانیک کوانتومی با چند کشور منتخب

ربیعی کاشانکی، محیا[۱] ؛ احمدی، فاطمه[۱]

[۱]گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران، ایران.

چکیده

در این پژوهش، محتوای آموزشی کتاب‌های درسی فیزیک دوره دوم متوسطه ایران در زمینه مفاهیم مرتبط با مکانیک کوانتومی با محتوای کتاب‌های درسی کشورهایی همچون ایتالیا، آلمان، بریتانیا و هلند به روش تطبیقی مقایسه و تحلیل شد. نتایج نشان داد که آموزش مفاهیم مکانیک کوانتومی در کتاب های درسی ایران، تنوع مفهومی کمتر و سطح تحلیلی پایین تر نسبت به کشورهای مذکور دارد و بازنگری کتاب های درسی ایران بر اساس نیازهای به روز جامعه پیشنهاد می شود.

واژه های کلیدی: *آموزش فیزیک؛ کتاب درسی؛ مکانیک کوانتومی؛ مطالعه تطبیقی.*

A Comparative Study of the Content of Iranian Physics Textbooks on Quantum Mechanics Concepts with Selected Countries

Rabiee Kashanaki, Mahya[۱]; Ahmadi, Fateme[۱]

[۱] *Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Shahid Rajaee Teacher Training University, Tehran, Iran.*

Abstract

In this study, the educational content related to quantum mechanics concepts in Iranian high school physics textbooks was comparatively analyzed with the content of textbooks used in Italy, Germany, the United Kingdom, and the Netherlands. The results indicated that the teaching of quantum mechanics concepts in Iranian textbooks demonstrates less conceptual diversity and a lower analytical level compared to those countries. Therefore, revising Iranian textbooks based on the evolving needs of contemporary society is recommended.

***Keywords**: Quantum mechanics; high school physics textbooks; comparative study; Iran and selected countries*

PACS No. ۳ و ۱

مقدمه

گسترش فناوری‌های کوانتومی و کاربردهای آن در حوزه‌هایی مانند امنیت سایبری، صنعت و هوش مصنوعی، موجب تدوین برنامه‌های ملی در بسیاری از کشورها شد. برای مثال، بریتانیا از سال ۲۰۱٤ «برنامه ملی فناوری‌های کوانتومی» را با هدف توسعه کاربردهای فناوری‌های کوانتومی آغاز کرد [٦] و آمریکا نیز در سال ۲۰۱۸ قانون «National Quantum Initiative Act» را با هدف توسعه پژوهش‌ها و تربیت نیروی متخصص تصویب کرد (نایت، ۲۰۱۹؛ مونرو، ۲۰۱۹). همچنین اتحادیه اروپا با اجرای پروژه «Quantum Flagship» توسعه این فناوری را در اولویت قرار داده است (فالتیک و همکاران، ۲۰۲۳)[۷] .

در حوزه آموزش نیز مفاهیم مکانیک کوانتومی در برنامه‌های درسی دوره متوسطه بسیاری از کشورهای پیشرفته از جمله آلمان، بریتانیا، هلند، ایتالیا، فرانسه و آمریکا گنجانده شده است. در آلمان، این آموزش در برخی ایالت‌ها از ۱۵ سالگی آغاز می‌شود و بخشی اجباری از برنامه درسی است [۸]. همچنین ایتالیا در سال ۲۰۲۲ رویداد «هفته‌های کوانتومی ایتالیا» را برای ترویج و آشنایی عمومی با مفاهیم کوانتومی برگزار کرد[۹] . آموزش این مفاهیم می تواند

نقش مهمی در ارتقای سطح علمی کشور و آماده‌سازی نسل آینده برای مواجهه با فناوری‌های نوین داشته باشد. در این مقاله، محتوای آموزشی کتابهای درسی ایران در زمینه مفاهیم مکانیک کوانتومی، شامل مباحث فیزیک کوانتومی، فیزیک هسته‌ای، فیزیک ذرات و فناوری‌های کوانتومی، با محتوای کتاب های درسی چند کشور دیگر مورد مقایسه و بررسی قرار می گیرد.

روش تحقیق

این پژوهش از نوع مطالعه تطبیقی با رویکرد کیفی و مبتنی بر تحلیل اسنادی است و داده‌های آن از بررسی اسناد رسمی برنامه-های درسی و کتاب‌های فیزیک دوره متوسطه به‌دست آمده است. بخش‌ها و فصل‌های مرتبط با مفاهیم مکانیک کونتومی در کتاب-های منتخب بررسی و محتوای آن‌ها در قالب جدول محقق‌ساخته استخراج و طبقه‌بندی شد.

جامعه و نمونه آماری

جامعه آماری شامل اسناد رسمی برنامه‌های درسی و کتاب‌های فیزیک دوره متوسطه در نظام‌های آموزشی مختلف است. نمونه پژوهش هدفمند بوده و شامل اسناد و کتاب‌های فیزیک دوره متوسطه ایران [۵] و چهار کشور آلمان، ایتالیا، بریتانیا و هلند است.

روش گردآوری و تحلیل داده‌ها

ابتدا اسناد رسمی برنامه‌های درسی فیزیک در کشورهای مختلف بررسی شد و سپس براساس شاخص‌های بین‌المللی TIMSS، PISA و Nature Index ، کشورهای آلمان، ایتالیا، بریتانیا و هلند به عنوان نمونه پژوهش انتخاب شدند.

در مرحله‌ی بعد، انتخاب نظام‌های آموزشی و کتاب‌های درسی بر اساس دو معیار انجام شد: نخست انتخاب مسیرهای آموزشی که بیشترین عمق و آمادگی دانشگاهی را در آموزش فیزیک ارائه می-کنند و مباحث فیزیک مدرن و مکانیک کوانتومی را به طور نسبتاً کامل پوشش می‌دهند؛ و دوم، انتخاب کتاب‌هایی که در این مسیرهای آموزشی از جایگاه رسمی یا کاربرد گسترده‌ای برخوردار بوده، با برنامه‌های درسی ملی یا آزمون‌های استاندارد هر کشور انطباق داشته و از معتبرترین و پرکاربردترین منابع آموزشی به شمار می‌روند. بر این اساس، در بریتانیا مسیر A-Level و کتاب AQA Physics، در آلمان دوره Gymnasium و کتاب Dorn-Bader Physik، در ایتالیا شاخه Liceo Scientifico و کتاب Amaldi، و در هلند مسیر پیش‌دانشگاهی VWO و کتاب Newton به عنوان منابع نماینده نظام آموزشی این کشورها انتخاب شدند. تحلیل حاضر بر پایه نسخه اصلی و آخرین ویرایش در دسترس این کتاب‌ها انجام شد.

در ادامه، محتوای مکانیک کوانتومی از این کتاب‌ها استخراج، طبقه‌بندی و تحلیل شد. تحلیل داده‌ها به صورت کیفی و با رویکرد تطبیقی انجام شد. در فرایند کدگذاری، تنها مفاهیمی ثبت شدند که در کتاب درسی به صورت معنادار به آن‌ها پرداخته شده بود؛ به این معنا که برای آن مفهوم علاوه بر توضیح مفهومی، دست کم یکی از مواردی مانند مثال، کاربرد، فعالیت آموزشی یا رابطه ریاضی ارائه شده باشد.

سپس مفاهیم استخراج شده از نظر نوع و میزان پوشش در کتاب-های درسی کشورهای مورد مطالعه با یکدیگر و با کتاب‌های درسی ایران مقایسه شدند.

روایی و پایایی پژوهش

به منظور بررسی روایی محتوایی، جدول محقق ساخته و طبقه‌بندی مفاهیم استخراج‌شده در اختیار دو متخصص، شامل یک متخصص فیزیک و یک متخصص آموزش فیزیک، قرار گرفت و پس از دریافت نظرات اصلاحی، نسخه نهایی ابزار تدوین شد. همچنین، به منظور افزایش پایایی پژوهش، فرایند استخراج، طبقه-بندی و تحلیل مفاهیم به صورت مجدد بازبینی شد و ثبات در ثبت و طبقه‌بندی داده‌ها مورد کنترل قرار گرفت.

جدول۱ : مقایسه مفاهیم مکانیک کوانتومی در کتاب‌های درسی کشورهای منتخب

۱) تابش جسم سیاه	
کشور	توضیحات
ایران	–
ایتالیا	قانون جابجایی وین + توزیع طیف تابشی جسم سیاه
آلمان	قانون جابجایی وین + قانون ریلی_جینز + توزیع طیف

	تابشی جسم سیاه + مهبانگ و انبساط کیهان
۲) اثر فوتوالکتریک	
ایران	اثر فوتوالکتریک+ نارسایی فیزیک کلاسیک+ انرژی فوتون+ تابع کار+ معادله فوتوالکتریک+ بسامد آستانه
ایتالیا	مفاهیم ایران + پتانسیل توقف + جریان اشباع + آزمایش میلیکان
آلمان	مفاهیم ایران + اثر فوتوالکتریک درونی در نیمه‌رساناها و سلول‌های خورشیدی
بریتانیا	مفاهیم ایران + پتانسیل توقف+ برانگیختگی الکترون در اثر برخورد (بدون جذب فوتون)
۳) مدل‌های اتمی	
ایران	تامسون+ رادرفورد + بور
ایتالیا	تامسون+ رادرفورد + بور
هلند	تامسون+ رادرفورد به همراه کشف نوترون (چادویک)
٤) ترازهای انرژی اتم	
ایران	شعاع و ترازهای انرژی هیدروژن + مدارهای مانا + حالت پایه و برانگیخته + گسیل فوتون + انرژی یونش + معادله ریدبرگ + طیف‌های جذبی و گسیلی
ایتالیا	مفاهیم ایران + نیروی کولنی+ انرژی سامانهٔ الکترون–هسته + شرط کوانتش تکانه زاویه‌ای + رابطهٔ ترازهای انرژی اتم‌های هیدروژن مانند + آزمایش فرانک – هرتز
آلمان	ترازهای انرژی هیدروژن+ مدار مانا+ حالت پایه و برانگیخته+ گسیل فوتون+ انرژی یونش
بریتانیا	مفاهیم ایران + برانگیختگی اتمی در برخورد+ فلورسانس
۵) دوگانگی موج ـ ذره	
ایتالیا	دوگانگی موج ـ ذره+ آزمایش دوشکاف یانگ+ طول موج دوبروی + آزمایش داویسون_گرمر + پراش الکترون در شبکه بلوری+ معادله براگ
آلمان	دوگانگی موج – ذره + آزمایش دو شکاف یانگ+ الگوی تداخل+ طول موج دوبروی + آزمایش ولفگانگ کترله + پراش الکترون در شبکه بلوری
بریتانیا	دوگانگی موج – ذره + پراش فوتون و الکترون + طول موج دوبروی
٦) اثر کامپتون	
ایتالیا	پراکندگی فوتون از الکترون + پایستگی انرژی و تکانه + شیفت کامپتون (تغییر طول موج) با اثبات روابط
آلمان	پراکندگی فوتون از الکترون + پایستگی انرژی و تکانه + شیفت کامپتون (تغییر طول موج)
۷) پرتوهای X	
ایتالیا	تولید پرتو X+ تابش ترمزی + طیف مشخصه
آلمان	تولید پرتو X+ وارونگی اثر فوتوالکتریک + معادله براگ برای طول موج مرزی
بریتانیا	تولید پرتو X+ تصویربرداری با X+ کنتراست تصویر
۸) ساختار کوانتومی اتم و اعداد کوانتومی	
ایتالیا	اعداد کوانتومی (اصلی، فرعی، مغناطیسی) و ترازهای انرژی+ عدد کوانتومی اسپین، اوربیتال‌ها، تکانه زاویه‌ای اوربیتالی، اصل طرد پائولی، اثر زیمن
۹) اصول و مبانی مکانیک کوانتومی	
ایتالیا	اصل مکملیت+ اصل تطابق+ تابع موج و تعبیر احتمالاتی آن+ معادلهٔ شرودینگر+ اثر تونل‌زنی+ اصل عدم قطعیت هایزنبرگ + اصل برهم‌نهی
آلمان	تداخل + تابع موج و تعبیر احتمالاتی آن + اصل برهم نهی + آزمایش بمب + اصل مکملیت+ پاک‌کن کوانتومی + فروکاهش (*collapse*) در نتیجه اندازه‌گیری + گربه شرودینگر + دکوهرنس + اصل عدم قطعیت هایزنبرگ
۱۰) فیزیک هسته‌ای	
ایران	Z و A و N + پروتون، نوترون، الکترون+ ایزوتوپ+ نیروی هسته‌ای + کاستی جرم هسته و انرژی بستگی+ واپاشی الفا، بتا و گاما+ مقایسه جرم و بار و بُرد پرتوها+ هسته مادر و دختر+ نیمه عمر+ شکافت و جوش هسته‌ای+ راکتور هسته‌ای+ غنی سازی اورانیوم
بریتانیا	اشاره به واپاشی هسته‌ای + اندازه‌گیری انرژی یونش
هلند	نیروی لورنتس در محفظه مه + پوزیترون + میون + Z و A و N + ایزوتوپ + پایستگی بار + پایستگی جرم ـ

	انرژی + واپاشی هسته‌ای + شکافت و همجوشی هسته‌ای + کشف نوترینو و انواع آن + پایستگی عدد لپتونی + قانون پایستگی تکانه + آزمایش نوترینو کوان و رینز + آشکارساز نوترینو + لپتون + مزون + باریون + کوارک + نیروهای بنیادی + مکانیزم هیگز و بوزون هیگز + شتاب‌دهنده‌ها و تولید ذرات+ اتاقک سیمی+ سیکلوترون
۱۱) کاربردهای فناوری‌های کوانتومی	
ایران	لیزر
ایتالیا	میکروسکوپ تونلی روبشی *STM* + لیزر
آلمان	میکروسکوپ الکترونی
بریتانیا	اسکنر *PET* + میکروسکوپ تونلی روبشی *STM* + اسکنر بدنی *MRI* + *SQUID*
۱۲) ماهیت نور و تحول نظریه‌ها	
آلمان	نظریه گسیل بطلمیوس + نظریه ذره‌ای نیوتن+ نظریه موجی هویگنس+ نظریه کوانتومی پلانک–اینشتین

تحلیل و مقایسه یافته‌ها

در ایتالیا، آموزش مکانیک کوانتومی با تأکید بر ریاضیات، استدلال فیزیکی، تاریخ علم، آزمایش‌های فیزیک مدرن و کاربردهای فناوری‌های کوانتومی ارائه می‌شود و مفاهیم این حوزه به صورت نسبتاً کامل و منسجم پوشش داده می‌شوند. در آلمان، علاوه بر مفاهیم پایه، به جنبه‌های مفهومی، تفسیری و تاریخی مکانیک کوانتومی و نیز آزمایش‌های فکری توجه شده و ارتباط این نظریه با فناوری‌های نوین نیز مطرح است. در بریتانیا، رویکرد آموزشی بیشتر کاربردی و فناوری‌محور بوده و بر پیوند مفاهیم مکانیک کوانتومی با فناوری‌ها، پدیده‌های تجربی و زندگی روزمره تأکید می‌شود. در هلند، تمرکز آموزش بیشتر بر فیزیک ذرات بنیادی، ساختار ماده و دستاوردهای فیزیک نوین است.

در مقابل، آموزش مکانیک کوانتومی در ایران عمدتاً در سطحی مقدماتی و با ریاضیاتی بسیار ساده ارائه شده و بسیاری از مفاهیم بنیادی مکانیک کوانتومی، آزمایش‌های فکری، جنبه‌های تاریخی و فلسفی و کاربردهای فناوری‌های کوانتومی، در کتاب‌های درسی جایگاه قابل توجهی ندارند. در مجموع، آموزش مکانیک کوانتومی در ایران، در مقایسه با کشورهای مورد بررسی، از نظر تنوع مفهومی، سطح تحلیل و پیوند با فناوری‌های نوین محدودتر است.

نتیجه‌گیری

بررسی کتاب‌های درسی فیزیک ایتالیا، آلمان، بریتانیا و هلند نشان می‌دهد که مفاهیم مکانیک کوانتومی در این کشورها با رویکردهای آموزشی متنوع و با پوشش گسترده‌تری از مفاهیم فیزیک مدرن ارائه می‌شوند. در مقابل، محتوای کتاب‌های درسی ایران عمدتاً مقدماتی بوده و از نظر تنوع مفهومی و گستره مباحث محدودتر است. این یافته‌ها ضرورت بازنگری در محتوای آموزش فیزیک دوره متوسطه و توجه بیشتر به مفاهیم فیزیک مدرن و کاربردهای فناوری‌های کوانتومی را نشان می‌دهد.نتایج این پژوهش صرفاً ناظر بر محتوای کتاب‌های درسی دبیرستان است و لزوماً بیانگر کیفیت کلی آموزش فیزیک در این کشورها نیست.

مرجع‌ها

[۱] Amaldi, Ugo; *Il nuovo Amaldi per i Licei Scientifici blu (Vol. 3)*; Zanichelli; (۲۰۲۰).

[۲] Dorn, Friedrich; Bader, Franz; *Physik Kursstufe Sekundarstufe II Gymnasium Baden-Württemberg*; Westermann Schulbuchverlag; (۲۰۲۱).

[۳] Breithaupt, Jim; *AQA Physics: A Level Student Book (2nd Edition)*; Oxford University Press; (۲۰۱۵).

[٤] Newton; *Natuurkunde voor de bovenbouw*; Noordhoff Uitgevers; (۲۰۱۹).

[٥] «*فیزیک (۳)*»؛ دوره دوم آموزش متوسطه، رشته ریاضی فیزیک، پایه دوازدهم؛ سازمان پژوهش و برنامه‌ریزی آموزشی؛ (۱۳۹۷).

[٦] دوستی مطلق، سید نصیب‌الله؛ «علوم و فناوری‌های کوانتومی زمینه‌ساز شکوفایی علمی‌و حوزه‌های کلیدی برای ایفای نقش در نظم جدید جهانی»؛ فصلنامه علوم حیاتی و عرصه‌های نوپدید، سال ۱، شماره ۱ (۱٤۰۲).

[۷] آقایی، سهراب؛ «انقلاب‌های کوانتومی: از کشف تا کاربرد و اهمیت آموزش آن به نسل آینده»؛ *فصلنامه پویش در آموزش علوم پایه (Quarterly Journal of Education in Basic Sciences)*، ۱۰، شماره ۳٦ (۲۰۲٤).

[۸] صدیقی‌نژاد، طاها؛ کاظمی، مسعود؛ عسگری، احمد؛ آقایی، سهراب؛ «بررسی آموزش فیزیک کوانتوم در مدارس کشورهای مختلف»؛ چهارمین همایش ملی آموزش فیزیک، دانشگاه فرهنگیان، مشهد، ایران (۱٤۰۲).

[۹] تیله‌کوهی، علیرضا؛ دنیادیده، علیرضا؛ آرمند، مهدی؛ آقایی، سهراب؛ «اهمیت معرفی فناوری‌های کوانتومی جهت ترغیب دانش‌آموزان به یادگیری فیزیک کوانتوم»؛ چهارمین همایش ملی آموزش فیزیک، دانشگاه فرهنگیان، مشهد، ایران (۱٤۰۲).

کوانتش دوگانه‌ی مکانیک ۳بعدی همراه با پنجره‌ی اضافه‌ی ۲بعدی

قهرمان، زهرا[۱]؛ دهقانی، مهدی[۲]؛ منعم‌زاده، مجید[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

چکیده

در این مقاله با فرض وجود ابعاد اضافه و با کمک دستگاه‌های مقید نوع دوم و کوانتش آنها اقدام به ساخت مکانیک کوانتمی برای یک ذره‌ی آزاد می‌کنیم. به این منظور یک تابع احتمال $\eta(r)$ معرفی می‌کنیم که گذار ذره به پنجره‌ی اضافه را ممکن می‌کند. علاوه بر کوانتشی که با مقیاس کوانتش ثابت پلانک رخ می‌دهد، این تابع نیز به همراه یک مقیاس طولی کوچک، منجر به یک کوانتش دیگر می‌شود و از این رو برای آن نام کوانتش دوگانه را انتخاب می‌کنیم. با کمک دستورالعمل دیراک، جابه‌جاگرهای کوانتمی و سپس نمایش عملگرها و در نهایت معادله‌ی موج را استخراج کرده و طیف انرژی ذره را بدست می‌آوریم. نتایج نشان‌دهنده‌ی ظهور مدهایی شبیه مدهای کالوزا-کلاین و همچنین انرژی‌های مختلط احتمالی که مرتبط با گذار ذره به پنجره‌ی اضافه‌اند، هستند.

واژه های کلیدی: *ابعاد اضافه، دستگاه‌های مقید نوع دوم، کوانتش دوگانه*

A Double Quantization for 3D Quantum Mechanics with 2D Tiny Extra Window

Ghahreman, Zahra[1]; Dehghani, Mehdi[2]; Monemzadeh, Majid[1]

[1] *Department of Physics, University of Kashan, Kashan,*
[2] *Department of Physics, Shahrekord University, Shahrekord*

Abstract

We construct quantum mechanical framework assuming the existence of compact extra dimensions for a test particle. We introduce a probability function $\eta(r)$ that governs the transition of the particle into a tiny 2D extra window. This function, together with a new characteristic length scale, leads to a "double quantization" procedure in addition to the standard Plank constant will be mentioned. We derive the modified commutation relations and the corresponding wave equation.

For the free particle case, we solve the radial wave equation using the Frobenius method and obtain corrections to the energy spectrum. The results indicate the emergence of Kaluza-Klein- like modes and possible complex energies associated with transitions into the extra window.

Keywords: *Extra Dimension, Second Class Constraint, Double Quantization*

مقدمه

تاثیر تعداد ابعاد فضا–زمان روی قوانین فیزیکی همیشه به عنوان یک سوال در بین فیزیک‌دانان مطرح بوده و با توجه به تلاش‌ها برای اتحاد نیروها، این سوال اهمیت بیشتری پیدا کرده است[۱و۲]. پژوهش‌هایی که تاکنون در زمینه‌ی ابعاد اضافه انجام شده‌اند همگی برمبنای نظریه میدان‌ها شکل گرفته‌اند. قصد داریم اثر اضافه شدن بعد اضافه را با کمک ابزارهای مکانیک کلاسیک دستگاه‌های مقید مورد بحث قرار دهیم[۳]. ابعاد اضافه را به کمک معادلات قیدی به هامیلتونی اولیه‌ی ذره، اضافه می‌کنیم. این به همراه هامیلتونی ذره در دستگاه‌های مقید منجر به تولید قیود ثانویه می‌شود و در نهایت باعث تغییر ساختار همتافته‌ی فضای فاز می‌گردد. چنین دیدگاهی شبیه دستگاه‌های نوع دوم است. به این معنا که ذره به واسطه‌ی یک عبارت قیدی، تنها می‌تواند در فضای d بعدی حاضر باشد. ابعاد اضافه را فشرده در نظر می‌گیریم و شعاع فشردگی آن را با ρ_c نشان می‌دهیم. از آنجا که این مقدار بسیار کوچک است پس ذره‌ی آزمون آن باید یک ذره‌ی کوانتمی باشد[۲]. مکانیک مورد نیاز نیز از نوع کوانتمی شامل دو نوع کوانتش است در نظر میگیریم. کوانتش صفرم در حین ساخت فضای فاز کاهش یافته از طریق قیود و با مقیاس کوانتش شعاع فشردگی ρ_c صورت می‌گیرد. پتانسیل عامی که منجر به این کوانتش می‌شود از طریق قیود اولیه به هامیلتونی کلاسیک اضافه می‌شوند. نشان داده شده که یک بعد اضافه، منجر به شعاع فشردگی از مرتبه‌ی طول منظومه‌ی شمسی می‌شود[٤]. با در نظر گرفتن شعاع فشردگی در محدوده‌ی میلی‌متر تا میکرومتر، حداقل انتخاب برای تعداد ابعاد اضافه ۲ است. در اولین قدم، فضای فاز کاهش یافته برای ذره در ۳بعد همراه با پنجره‌ی ۲بعدی اضافه را با کمک دستورالعمل دیراک می‌سازیم.

قیود ارسال ذره به پنجره‌ی ۲بعدی

ذره آزمون به‌واسطه‌ی دریافت انرژی از مرتبه‌ی TeV که معادل با طول موج‌هایی از مرتبه‌ی میلی‌متر است، به پنجره‌ای ۲بعدی گذار می‌کند[۵]. مساله در حوزه مکانیک کوانتمی بررسی خواهد شد؛ بنابراین زمان در اینجا بخشی از برچسب فضازمان نیست، بلکه پارامتری برای تحول است

و مساله یک مکانیک کوانتمی ۳بعدی همراه با یک پنجره ۲ بعدی فضایی است که اثر این دو بعد اضافه همانند یک پتانسیل نابدیهی (شامل جملات وابسته به مکان و وابسته به تکانه) عمل می کند. این پتانسیل علی الاصول با شکل غیر استانداردش می تواند خاصیت خودالحاقی معادله شرودینگر را نیز برهم بزند. این گذار به پنجره‌ی و محدودیت حرکت ذره بر روی یک خمینه توسط معادلات قیدی بیان می‌شود. براساس مختصات کروی و با کمک توابع $\eta(r,\theta,\varphi)$ و $\xi(r,\theta,\varphi)$ مختصات ρ' و σ' را در پنجره‌ی اضافه ۲بعدی کسب می‌کند. معادلات قیدی زیرفضایی از فضای پیکربندی را برای حرکت ذره انتخاب می‌کنند و تعدادشان برابر با تعداد ابعاد اضافه شده است. حال اگر مختصات این پنجره‌ی اضافه ۲بعدی یعنی ρ' و σ' را قطبی درنظر بگیریم و همچنین فضا برای رخداد پنجره، همگن و همسانگرد باشد، در این صورت شکل استاندارد قیود اولیه‌ی کلاسیکی در فضای ۲+۳ بعدی به شکل زیر در می‌آید،

$$\bar{\phi}_1(r;\rho,\sigma)=\rho\cos\sigma-\eta(r)\ ,\ \bar{\phi}_2(r;\rho,\sigma)=\rho\sin\sigma-\eta(r). \quad (۱)$$

این قیود را می‌توان با کمک حل معادلات قیدی و کنترل شرایط هم‌ارزی به صورت قیود خطی و ساده شده‌ی زیر نوشت،

$$\phi_1(r;\rho,\sigma)=\rho-\sqrt{2}\eta(r)\ ,\ \phi_2(r;\rho,\sigma)=\sigma-\frac{\pi}{4}-2N\pi. \quad (۲)$$

قیود فضای پیکربندی، منجر به محدودیت‌هایی در فضای فاز ذره نیز می‌شوند. به واسطه‌ی قیود ثانویه نیز محدودیت‌هایی برای فضای فاز ذره به‌وجود می‌آید. قیود ثانویه با بررسی دینامیک ذره‌ی آزاد با هامیلتونی کل به‌دست میآید. هامیلتونی کل را می‌توان به صورت زیر در نظر گرفت،

$$H_T=H^{(3)}+H^{(2)}+\lambda_i\phi_i\ ,$$
$$H^{(2)}=\frac{1}{2m}(p_\rho^2+\frac{p_\sigma^2}{\rho^2})\ ,\ H^{(3)}=\frac{1}{2m}(p_r^2+\frac{p_\theta^2}{r^2}+\frac{p_\varphi^2}{r^2\sin^2\theta}). \quad (۳)$$

که در آن H_T به ترتیب از هامیلتونی ذره در فضای ۳بعدی اولیه، هامیلتونی پنجره‌ی ۲بعدی و جمله‌ای که قیود اولیه را با کمک ضرایب نامعین لاگرانژ λ_i به هامیلتونی کانونی اضافه می‌کند، تشکیل شده است. قیود ثانویه را از محتوای قیود اولیه خالی می‌کنیم. با توجه به برقراری $\overline{\psi_i}=0$، می‌توان این قیود را به شکل زیر بازنویسی کرد.

$$\psi_1=p_\sigma\quad ,\quad \psi_2=p_\rho-\sqrt{2}\eta'(r)\rho(r). \quad (۴)$$

از آنجا که کروشه پواسون مجموعه قیود اولیه و ثانویه غیرصفر است، پس با یک دستگاه نوع دوم سروکار داریم. مجموعه‌ی این اتحادها زیرفضای $\mathbb{C}_6\subset\mathbb{R}^{10}$ را به‌عنوان فضای در دسترس مدل کلاسیکی مطرح می‌کند؛ منظور از $\mathbb{C}_6$ فضای فاز کاهش یافته است.

مکانیک کوانتمی ۲+۳ بعدی

با دستورالعمل دیراک جابه‌جاگرهای کوانتمی به‌دست می‌آیند. به‌واسطه‌ی قیود اولیه و فرض‌هایی که برای ساده‌سازی آنها کردیم، می‌بینیم که جابه‌جاگرهای زاویه‌ای بدون تغییر باقی می‌مانند و تنها جابه‌جاگرهای قسمت شعاعی تغییر می‌کنند،

$$[r,p_r]=i\frac{\hbar}{1+\eta'^2(r)}\ ,\ [\theta,p_\theta]=i\hbar\ ,\ [\varphi,p_\varphi]=i\hbar. \quad (۵)$$

در اثر فرض حضور ابعاد اضافه کنترل شونده با تابع $\eta(r)$، ثابت پلانک به تابعی ناهمگن و همسانگرد تبدیل شده است،

$$\hbar(r)=\frac{\hbar}{1+\eta^2(r)} \quad (۶)$$

ناهمگنی که برای ثابت پلانک مشاهده کردیم از نوع شعاعی است. دیراک در مورد ناهمگنی زمانی ثوابت فیزیکی صحبت کرده و این ایده، کاندیدایی برای حل مسئله‌ی انرژی تاریک در نظر گرفته می‌شود[۶]. سایر جابه‌جاگرهای بنیادی به صورت زیر به‌دست می‌آیند،

$$[p_r,\rho]=i\eta'(r)\hbar(r)\ ,\ [p_r,p_\rho]=-i\hbar(r)\eta''(r)p_r+\mathrm{O}(\hbar^2)$$
$$[p_r,p_\sigma]=-\frac{2i\hbar(r)\eta'(r)}{\rho}p_\sigma\ ,\ [p_\rho,\rho]=-i\hbar(r)\eta'^2(r) \quad (۷)$$
$$[p_r,p_\rho]=-\frac{2i\hbar(r)\eta'(r)}{\rho}p_\sigma\ ,\ [p_\rho,r]=-i\hbar(r)\eta'(r)$$

از سمت راست این جابه‌جاگرها گفت که یک کوانتش معمول با مقیاس کوانتش ثابت پلانک و یک کوانتش نیز با جمله‌ی $\eta(r)$ اتفاق می‌افتد.

گام بعدی بدست آوردن فضای هیلبرت ذره در این مکانیک کوانتومی است. از جابه‌جاگرها می‌توان فهمید که هنوز انتخاب پایه‌ی مکان بهترین انتخاب است. در این صورت عامل تغییر در جابه‌جاگر $[r,p_r]$، تغییر در عملگر p_r است. به‌دلیل فرض همسانگردی که به آن اشاره کردیم، دو عملگر دیگرفضای ۳بعدی یعنی $\hat{p}_\theta=-i\hbar\partial_\theta$ و $\hat{p}_\varphi=-i\hbar\partial_\varphi$ بدون تغییر باقی مانده‌اند. بر اساس روابط قیدی بدست آمده در مورد p_σ، نمایش آن به صورت $\hat{p}_\sigma=0$ است. همیوغش $\hat{\sigma}$، نیز تنها به عنوان یک پارامتر ثابت در مدل عمل می‌کند و یک عدد کلاسیکی است.

$$\hat{\sigma}=\frac{\pi}{4}+2\pi N\quad ,\quad N\in\mathbb{Z} \quad (۸)$$

در حال بررسی آثار ناشی از فرض وجود ابعاد اضافه در بیرون از پنجره هستیم و $\hat{\sigma}$ مربوط به درون پنجره است. عدد صحیح z در این فرمول یک عدد کوانتومی توپولوژیک است که می‌توان از آن به عنوان عدد چرخش برای ذره‌ی آزمون در اطراف و بیرون پنجره‌ی اضافه یاد کرد[۷]. می‌توان به نمایش‌های زیر برای عملگرها دست یافت،

$$\hat{p}_r=-i\hbar(r)\partial_r\quad ,\quad \hat{\rho}=\eta(r)\quad ,\quad \hat{p}_\rho=-i\hbar(r)\partial_\rho \quad (۹)$$

با توجه به نمایش‌هایی که یافتیم، محاسبات در مختصات ۳بعدی اولیه است و تابع $\eta(r)$ نقش پتانسیل برای ارسال ذره به ابعاد اضافه را دارد.

تابع ورودی

با توجه به توضیحات قبلی، این تابع می‌تواند نقش متریک فضا–زمان و یا پتانسیل ارسال ذره به ابعاد اضافه را ایفا کند و یا از دیدگاهی دیگر می‌توان از آن یک تابع توزیع احتمال ساخت که نشان دهد ذره‌ی آزمون چگونه مختصات بعد اضافه را انتخاب می‌کند. اولین ویژگی مورد، نوسانی بودن آن است و با توجه به همگنی فضا برای ورود به بعد اضافه، دامنه‌ی این نوسانات باید بسیار کوچک و از مرتبه‌ی ρ_c باشد. ویژگی دیگر آن میرایی تابع ورودی در نقطه‌ی مشخص r و در حد $\varepsilon \to 0$ است. در صورتی که تابع ورودی شامل این بخش میرا نباشد ممکن است ذره حتی در انرژی‌های پایین به بعد اضافه گذار کند که این خلاف دانسته‌های ما در مورد آشکار شدن بعد اضافه است. شرط مهم دیگر تقارن تابع روی مرز است که به موجب این شرط اگر ذره به بعد اضافه گذار کند، امکان برگشت آن به فضای پایه وجود دارد. علاوه بر این ویژگی‌ها، باید شرایط مرزی را در ∞ و ρ_c نیز مشخص کنیم. پیش از این، شرایط مرزی در بی‌نهایت با معرفی متغیر بدون بعد $\varepsilon = \frac{\rho_c}{r}$ و تقاضا برای میرایی بیان شده است. اما در مرز ρ_c و در ایده‌آل‌ترین حالت تابع ورودی باید یک پله بخورد. در این صورت در نمایش عملگرها توابع دلتای دیراک ظاهر می‌شود، چرا که دیدیم در نمایش عملگرها مشتق تابع ورودی وجود داشت. جمله‌ی پتانسیل اضافه شده در مدل‌هایی که در آنها گذار به ابعاد اضافه با افزودن پتانسیل به مسئله رخ می‌دهد نیز شامل تابع دلتای دیراک هستند. بنابراین در اینجا با رهیافتی دیگر این تابع را به محاسبات خود وارد کرده‌ایم. از آنجا که پیش بردن مسئله با وجود تابع پله هویساید و تابع دلتای دیراک بسیار دشوار بود، ما در اینجا از بیان شکل خاص برای تابع ورودی اجتناب کرده و با شکل عمومی تابع ورودی پیش خواهیم رفت. برخی از شکل‌های پیشنهادی برای این تابع و بحث مفصل در مورد آن در [۸] انجام گرفته است.

معادله‌ی موج

با نمایش‌هایی که در بخش قبل برای عملگرهای اساسی بدست آوردیم، معادله‌ی شرودینگر می شود،

$$-\frac{1}{2m}\left[\hbar\hbar(r)\partial_r^2+(-\eta'(r)\eta''(r)\hbar^2(r)+\frac{2}{r}\hbar\hbar(r))\partial_r - \frac{1}{r^2}L^2\right]\psi(r,\theta,\varphi)=E\psi(r,\theta,\varphi) \qquad (۱۰)$$

که $\vec{L}$ عملگر تکانه زاویه‌ای مرسوم است. این معادله نشان می‌دهد که عامل متریک فضای ۲+۳بعدی به‌صورت $1+\eta'^2(r)$ در تقریب‌های مناسب ظاهر شده است. همچنین پتانسیل ارسال ذره به پنجره‌ی اضافه با مشتقات تابع $\eta(r)$ در معادله‌ی شرودینگر آمده است. همانطور که قبلا گفتیم ظهور جملات اضافه به خصوص مشتقات تابع مشخصه مدل عملگر معادله شرودینگر (هامیلتونی) را غیرهرمیتی می کند. این نتیجه دور از انتظار هم نیست چون به نوعی با ذره ای مواجه ایم که می تواند به بیرون فضای مورد بررسی اش (فضای سه بعدی) گذار کند و این غیر هرمیتی بودن مشخصه دستگاههای با نشت انرژی به بیرون است. به دلیل همسانگردی، عملگر $\vec{L}^2$ عامل جداسازی بخش‌های شعاعی و زاویه‌ای است. پس از قرار دادن عدد کوانتومی اصلی تکانه زاویه‌ای، معادله‌ی موج به‌شکل زیر بازنویسی می‌شود،

$$R''(r)+P(r)R'(r)+Q(r)R(r)=0$$
$$P(r)=\frac{\hbar'(r)}{2\hbar(r)}+\frac{2}{r}\ ,\ Q(r)=-(\frac{l(l+1)\hbar^2}{r^2}-2mE)\frac{1}{\hbar\hbar(r)}. \qquad (۱۱)$$

این معادله از نوع معادلات دیفرانسیل خطی مرتبه ۲ با ضرایب متغیر است و می‌توان به کمک روش فروبنیوس اقدام به حل آن کرد[۹]. قبل از آن باید معادله را بر حسب کمیت بدون بعد $\varepsilon = \frac{\rho_c}{r}$، بی‌بعد کنیم. با توجه به اینکه $\rho_c \le r \prec \infty$، بنابراین کمیت ε در بازه‌ی $0 \prec \varepsilon \le 1$ تغییر خواهد کرد. در نهایت معادله‌ی موج بی‌بعد به صورت زیر بدست می‌آید،

$$\bar{R}''(\varepsilon)+\bar{P}(\varepsilon)\bar{R}'(\varepsilon)+\bar{Q}(\varepsilon)\bar{R}(\varepsilon)=0$$
$$\bar{P}(\varepsilon)=-\frac{\varepsilon^3\bar{\eta}'(\varepsilon)(2\bar{\eta}'(\varepsilon)+\varepsilon\bar{\eta}''(\varepsilon))}{1+\varepsilon^4\bar{\eta}'^2(\varepsilon)} \qquad (۱۲)$$
$$\bar{Q}(\varepsilon)=-\frac{1}{\varepsilon^4}(\varepsilon^2 l(l+1)-\bar{E})(1+\varepsilon^4\bar{\eta}'^2(\varepsilon))$$

که در آن،

$$\bar{\eta}(\varepsilon)=\frac{\eta(\varepsilon)}{\rho_c}\ ,\ \bar{E}=\frac{2mE\rho_c^2}{\hbar^2}\ ,\ \bar{R}(\varepsilon)=\frac{R(\varepsilon)}{\rho_c^2} \qquad (۱۳)$$

طیف انرژی

در پایین‌ترین تقریب‌ها، جمله‌ای $\bar{\eta}(\varepsilon)$ می‌تواند برای محاسبات تک مقیاسی با مقیاس طول بنیادی ρ_c کافی باشد. با بررسی توابع $\bar{P}(\varepsilon)$ و $\bar{Q}(\varepsilon)$ و با کمک معیارهای روش فروبنیوس مشخص می‌شود که $\varepsilon = 0$ یک تکینگی نامنظم برای معادله‌ی شرودینگر است. این تکینگی ناشی از اثرات سراسری فرض وجود ابعاد اضافه است. به این معنا که ممکن است در حد $\varepsilon \to 0$ از اثرات واگرایی ناشی از حضور در پنجره‌ی اضافه حول نقطه‌ی r پرهیز کرده باشیم اما به ناچار وارد

پنجره‌های حول نقاط مجاور شده‌ایم و این موضوع منجر به ظهور واگرایی غیرقابل کنترل در $\varepsilon=0$ می‌شود. اما به ازای $\varepsilon=1$ هر دو معیار روش فروبنیوس مقدار متناهی می‌دهند. معادله‌ی مشخصه در اینجا به صورت $k(k-1)=0$ بدست می‌آید. هر مقدار k، جواب‌های مجاز برای تابع موج $\bar{R}(\varepsilon)$ را نتیجه می‌دهد. با تعیین انرژی برای هرتابع موج و مرتب کردن این مقادیر، طیف انرژی بدست می‌آید. بخشی از مقادیر انرژی ذره، مربوط به ریشه‌ی $k=0$ از معادله‌ی مشخصه است. در واقع $k=0$ کمترین توان بسط تابع موج حول نقطه‌ی بحرانی $\varepsilon=1$ است. در این قسمت با درخواست تعداد جملات متناهی برای تابع موج، مقادیر انرژی را برای مراتب مختلف تقریب حساب کرده و در نهایت روابط بدست آمده را برای مراتب بالاتر، تعمیم می‌دهیم. در تقریب مرتبه صفر، معادله‌ی موج به صورت $\bar{q}_0\bar{a}_0=0$ در می‌آید؛ که $\bar{q}_i$، $\bar{p}_i$ و $\bar{a}_i$ به ترتیب ضرایب بسط توابع $\bar{Q}(\varepsilon)$، $\bar{P}(\varepsilon)$ و $\bar{R}(\varepsilon)$ حول $\varepsilon=1$ هستند. با حل این معادله‌ی موج به دو جواب زیر می‌رسیم.

$$\bar{\eta}(1)=\exp(i\pi(z+\frac{1}{2}))\ ,\ \bar{E}^{0,0}_{(l,\eta)}=\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m\rho_c^2},z\in\mathbb{Z} \qquad (۱۴)$$

با این دو جواب می‌توان نتیجه گرفت که در پیوستار انرژی ذره‌ی آزاد، طیف گسسته‌ای ایجاد شده است. البته بخش پیوستار که ناشی از قسمت اول جواب بالا است از دید ناظر ۳بعدی غیرقابل قبول است و کنار گذاشته می‌شود. زیرا با این انتخاب، مخرج کسرها صفر شده و باعث نامنظم شدن واگرایی در $\varepsilon=1$ و ابهام در نمایش عملگرها می‌شود. توجه داریم که این قسمت کنار گذاشته شده از جواب، اطلاعاتی در مورد داخل پنجره یا همان تابع ورودی در اختیار قرار می‌دهد. با حل تقریب مرتبه اول و تعمیم آن به مراتب بالاتر، برای تقریب مرتبه‌ی $n-1$ معادله‌ی موج به صورت دترمینان زیر در می‌آید.

$$\begin{vmatrix} \bar{q}_0 & \bar{p}_0 & 2 & 0 & 0 & \dots \\ \bar{q}_1 & \bar{p}_1+\bar{q}_0 & 2\bar{p}_0 & 6 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\ \bar{q}_n & \bar{p}_n+\bar{q}_{n-1} & 2\bar{p}_n+\bar{q}_{n-2} & 3\bar{p}_{n-2} & \bar{q}_{n-3} & \dots \end{vmatrix}=0 \qquad (۱۵)$$

از آنجا که معادله‌ی موج را با در نظر گرفتن حالت عمومی تابع ورودی حل کردیم، ضرایب بسط این معادله پیچیده بوده و حل این دترمینان را در مراتب بالاتر تقریب بسیار دشوار می‌کند. بخش دیگر طیف به ازای $k=1$ بدست می‌آید. بسط تیلور توابع ضریب و همچنین تابع موج را حداکثر تا مرتبه‌ی ۱ در نظر می‌گیریم. در این صورت با حل معادله‌ی موج به جواب زیر می‌رسیم،

$$\bar{E}^{(1,1)}_{(l,\eta)}=\frac{\hbar^2}{2m\rho_c^2}[l(l+1)-\frac{1}{1+\eta'^2}\bar{p}_1(\varepsilon)|_{\varepsilon=1}] \qquad (۱۶)$$

حل معادله‌ی موج به یافتن مقادیر طیف انرژی منجر می‌شود و هم معادلاتی برای $\bar{\eta}(\varepsilon)$ در اختیار قرار می‌دهد. در ازای حل معادله‌ی موج برای تقریب مراتب بالاتر تعداد این معادلات بیشتر شده و شرایط مرزی بیشتری برای $\bar{\eta}(\varepsilon)$ پیدا می‌شود. بنابراین بسط تیلور دقیق‌تری برای آن در $\varepsilon=1$ بدست می‌آید که $\bar{\eta}(\varepsilon)$ را به‌طور دقیق تعیین کند. تاکنون دریافتیم که انرژی ذره گسسته است اما با توجه به رابطه‌ی (۱۵)، می‌بینیم متناسب با شکلی که برای تابع ورودی انتخاب می‌کنیم، این انرژی می‌تواند حتی موهومی باشد. مرز را می‌توان سطحی همانند سطح دریای دیراک برای تولید یا نابودی و پراکندگی ذره درنظر گرفت. می‌توانیم طیف انرژی ذره را در حالت کلی به صورت زیر بنویسیم،

$$E^{(k,n)}_{(l,\eta)}=\frac{\hbar^2}{2m\rho_c^2}\left[l^2+l+f_l[\eta(\varepsilon),\eta^{(1)}(\varepsilon),\dots,\eta^{(n+3)}(\varepsilon)\right] \qquad (۱۷)$$

توجه کنیم این طیف ذره ای است که به داخل پنجره ای با ابعاد با طول مشخصه ρ_c می تواند گذار پیدا کند و با صفر شدن این شعاع فشردگی این انرژی بینهایت می شود که به معنای نیاز به انرژی بینهایت برای غایب شدن و محو شدن در یک نقطه است. این طول مشخصه همراه با عدد کوانتمی تکانه زاویه ای به نوعی طیف انرژی و یا جرمی ذره را می سازد و به درستی یادآور طیف جرمی مدهای کالوزا–کلاین است. به نوعی کوانتش شعاعی ای در راستای شعاعی پنجره فشرده رخ داده است. جمله‌ی اول مستقل از شکل تابع ورودی است و می‌تواند اشاره به مدهای کالوزا–کلاین در این مدل ابعاد اضافه داشته باشد. جمله‌ی دوم نیز همچنان مستقل از شکل تابع ورودی است و می‌تواند مربوط به نوسان‌های ذاتاً کوانتمی ذره در مرز باشد که برای آن $\omega=\frac{\hbar}{2m\rho_c^2}$. در نهایت جمله‌ی آخر که مرتبط با انتخاب ما برای تابع ورودی است و با جزئیات مدل ارتباط دارد. مقدار انرژی که این جمله می‌تواند نتیجه دهد الزاما حقیقی مثبت نیست. انرژی مختلط به معنی گذار ذره به پنجره‌ی اضافه و بازگشت از آن و قسمت موهومی این انرژی به معنای پهنای این گذار است. به این ترتیب مرز سطح دریای دیراکی است که بالای آن فضای ۳بعدی و پایین آن فضای ۲+۳ بعدی است. ظهور انرژی مختلط با بخش حقیقی منفی به معنای ایجاد حفره در زیر دریای دیراک است.

نتیجه‌گیری

از نتایج مهم مکانیک کوانتمی همراه با ابعاد اضافه معرفی $\hbar(r)$ به جای ثابت پلانک است. هدف نهایی این مدل‌سازی یافتن طیف انرژی ذره بود که پس از محاسبات بسیار مشخص شد بخشی از این انرژی مستقل از

انتخاب تابع ورودی است و می‌تواند اشاره به مدهای کالوزا–کلاین مدل داشته باشد. جمله‌ی دیگر طیف که آن هم مستقل از شکل تابع ورودی است، مربوط به نوسانات ذاتا کوانتمی ذره روی مرز است در نهایت جملاتی از طیف که مستقل از انتخاب تابع ورودی نیستند و می‌توانند مقادیر منفی و یا حتی مختلط انرژی را نیز نتیجه دهند. با این توضیحات مرز را می‌توان سطح دریای دیراکی در نظر گرفت که ظهور انرژی‌های منفی به معنی ایجاد حفره در زیر آن است.

مرجع‌ها

[1] M. Brue, "Quantum physics with extra dimension ," Doctoral dissertation (2015).

[2] I. Antoniadis, "A possible new dimension at a few TeV," *Physics Letters B* **246**, No. 3–4 (1990) 377–384.

[3] P. A. M. Dirac, *Lectures on Quantum Mechanics*. (1964).

[4] Particle Data Group, P. A. Zyla *et al.*, "Review of Particle Physics," *Progress of Theoretical and Experimental Physics* **2020**, No. 8 (2020).

[5] N. Arkani-Hamed, S. Dimopoulos, and G. Dvali, "Phenomenology, astrophysics, and cosmology of theories with submillimeter dimensions and TeV scale quantum gravity," *Physical Review D* **59**, No. 8 (1999).

[6] P. A. M. Dirac, "Cosmological models and the Large Numbers hypothesis," *Proceedings of the Royal Society of London* **338**, No. 1615(1974) 439–446.

[7] M. Nakahara, *Geometry, Topology and Physics*. Boca Raton, Florida CRC Press (2017).

[8] قهرمان، زهرا. "ساخت مکانیک کوانتوم بر پایه‌ی ابعاد اضافه و به روش کوانتش دستگاه‌های مقید" رساله‌ی دکتری (۱۴۰۲).

[9] R. Courant, D. Hilbert, and T. Teichmann, "*Methods of Mathematical Physics*," *Physics Today* **15**, No. 11 (1962) 62–63

ریشه میانگین مربع شعاع مولکول‌های مزون- باریون $D^{*}\Sigma_{s,c,b}$ و $B^{*}\Sigma_{s,c,b}$

آرمات، آیدا

[1]گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه هرمزگان، صندوق پستی ۳۹۹۵، ایران

چکیده

مطالعه‌ی ویژگی‌های هادرون‌هایی مانند پنتاکوارک‌ها با پیکربندی‌هایی فراتر از مدل ساده‌ی کوارک-پارتون، موضوع جالبی در فیزیک ذرات و هسته‌ای است. در این کار، ریشه میانگین مربع شعاع پنتاکوارکها در مدل مولکولی مزون-باریون به صورت تحلیلی بدست آورده شده است. برای این منظور، پتانسیل تبادل مزون شبه‌اسکالر برای مطالعه ساختار مولکول‌های هادرونی در نظر گرفته شده است. نتایج با مراجع دیگر مقایسه شده است.

The root mean square radii of meson-baryon molecules $D^{*}\Sigma_{s,c,b}$ and $B^{*}\Sigma_{s,c,b}$

Armat, Aida

[1]*Department of Physics, Faculty of Science, University of Hormozgan, P.O. Box 3995, Bandar Abbas, Iran*

Abstract

The study of the properties of hadrons such as pentaquarks with configurations beyond the simple quark-parton model is an interesting topic in particle and nuclear physics. In this work, the root mean square radius of pentaquarks in the meson-baryon molecular model is obtained analytically. For this purpose, the quasi-scalar meson exchange potential is considered to study the structure of hadronic molecules. The results are compared with other references.

PACS No.10

مقدمه

پنتاکوارک‌ها هادرون‌های ساخته شده از چهار کوارک و یک پادکوارک در یک ساختار تک رنگ هستند. پنتاکوارک‌های زیادی در نظریه QCD پیش‌بینی شده‌اند، اما وجود آن‌ها باید توسط آزمایش‌ها تأیید شود. در دو دهه گذشته، تعدادی از پنتاکوارک‌ها به صورت تجربی مشاهده شده‌اند و جستجوهای بیشتری در حال انجام است. امروزه به طور تجربی، کاندیدهایی برای پنتاکوارک‌ها یافت می‌شوند، اگرچه هیچ نظر قطعی در مورد ترکیبات پیچیده آن‌ها وجود ندارد، بنابراین تلاش‌های نظری بیشتری مورد استقبال قرار می‌گیرد. به عنوان مروری بر مشاهدات تجربی پنتاکوارک‌ها می‌توان به موارد زیر اشاره کرد: در سال ۲۰۰۳ اولین ادعای مشاهده پنتاکوارک توسط LEPS گزارش شد [۱]. با این حال، مدت کوتاهی بعد، این کاندیدا توسط بسیاری از آزمایش‌ها و تحلیل‌های دیگر رد شد و اکنون هیچ کس آن را یک کشف واقعی نمی‌داند. در سال ۲۰۰٤، همکاری H1 در HERA اولین شواهد از یک پنتاکوارک متشکل از یک (پاد) کوارک سنگین، یعنی پنتاکوارک افسون [۲] را گزارش کرد. در ادامه، در سال ۲۰۱۵، LHCb اولین مشاهده دو حالت پنتاکوارک افسون $P_c(4380)^+$ و $P_c(4450)^+$ را در واپاشی $\Lambda_b^0 \to J/\Psi K^- p$ اعلام کرد [۳]. محتوای کوارک آن‌ها به صورت $c\bar{c}uud$ پیشنهاد شد. در سال ۲۰۱۹، در یک آزمایش جدید در LHCb [٤]، جرم حالت‌های مختلف P_c اندازه گیری شد. جرم $P_c^+(4312)$، $P_c^+(4440)$ و $P_c^+(4457)$. به ترتیب برابر با $M=4311.9\pm0.7^{+6.8}_{-0.6}\,\mathrm{MeV}$، $M=4440.3\pm1.3^{+4.1}_{-4.7}\,\mathrm{MeV}$ و $M=4457.3^{+6.4}_{-1.7}\pm0.5\,\mathrm{MeV}$ گزارش شد. پنتاکوارک‌های کاملاً سنگین، ذراتی هستند که توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند، زیرا این حالت‌های پرانرژی در آزمایشگاه قابل مشاهده بوده و به سادگی از سایر حالت‌ها قابل تشخیص هستند. از آن‌جا که هیچ کوارک سبکی در آن‌ها وجود ندارد، این ذرات اگزوتیک سنگین، مدل‌های ایده‌آلی برای درک بهتر دینامیک ذرات سنگین هستند. از نظر تجربی نیز برای تعیین

دقیق ماهیت، ساختار و اعداد کوانتومی این هادرون‌های جدید، به پژوهش بیشتری نیاز است. در این کار با استفاده از یک روش تحلیلی ریشه میانگین مربع شعاع مولکول‌های مقید $D^*\Sigma_{s,c,b}$ و $B^*\Sigma_{s,c,b}$ محاسبه شده است نتایج با مرجع دیگر مقایسه شده است.

محاسبات

در این بخش، با بهره‌گیری از یک رویکرد تحلیلی نوین و بر خلاف روش‌های عددی مرجع [۹]، پتانسیل تبادل مزون شبه‌اسکالر را برای حل دقیق معادله‌ی شرودینگر و محاسبه‌ی ریشه‌ی میانگین مربع شعاع مولکول‌های مزون-باریون به کار می‌گیریم که امکان مقایسه‌ی جامع‌تری میان حالت‌های مختلف با کوارک‌های سنگین را فراهم می‌سازد. برای مطالعه‌ی حالت‌های پنتاکوارک در مدل مولکولی هادرونی، آن‌ها را به عنوان حالت‌های مقید جفت‌های مزون-باریون فرض می‌کنیم. برای تعیین تابع موج از معادله‌ی موج شرودینگر استفاده می‌کنیم. بخش شعاعی معادله‌ی شرودینگر در واحدهای طبیعی به صورت زیر است[۵]

$$\frac{d^2R_{nl}(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR_{nl}(r)}{dr}+2\mu[E-V(r)]R_{nl}(r)-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R_{nl}(r)=0 \quad (1)$$

که در آن $\mu=m_1m_2/(m_1+m_2)$ جرم کاهش‌یافته سیستم، E انرژی حالت مقید و عدد کوانتومی ℓ تکانه زاویه‌ای مداری نسبی است. برای سادگی، $R_{nl}(r)=\Psi_{nl}(r)/r$ را تعریف می‌کنیم، بنابراین معادله فوق به رابطه زیر تبدیل می‌شود:

$$\frac{d^2\Psi_{nl}(r)}{dr^2}+[2\mu(E-V(r))-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}]\Psi_{nl}(r)=0 \quad (2)$$

$V(r)$ پتانسیل برهمکنش بین مزون و باریون است. پتانسیل را به صورت زیر در نظر می‌گیریم[۶]:

$$V(r)=\frac{1}{12}[\frac{g^2_{\pi NN}}{4\pi}\{(\frac{m_\pi}{m})^2\frac{e^{-m_\pi r}}{r}-F_{\pi2}(\frac{\Lambda_{\pi1}}{m})^2\frac{e^{-\Lambda_{\pi1}r}}{r}$$
$$+F_{\pi1}(\frac{\Lambda_{\pi2}}{m})^2\frac{e^{-\Lambda_{\pi2}r}}{r}\}(I_1.I_2)\quad+\frac{g^2_{\eta NN}}{4\pi}\{(\frac{m_\eta}{m})^2\frac{e^{-m_\eta r}}{r}$$
$$-F_{\eta2}(\frac{\Lambda_{\eta1}}{m})^2\frac{e^{-\Lambda_{\eta1}r}}{r}+F_{\eta1}(\frac{\Lambda_{\eta2}}{m})^2\frac{e^{-\Lambda_{\eta2}r}}{r}\}](\sigma_1.\sigma_2) \quad (3)$$

در این‌جا m، m_π و m_η به نوکلئون و (π,η) جرم مزون‌های تبادل شده اشاره دارند. $I_1.I_2$ و $\sigma_1.\sigma_2$ به ترتیب نشان‌دهنده برهمکنش‌های ایزواسپینی و اسپینی است. $g^2_{\rho NN}/4\pi=0.85$ ثابت جفت‌شدگی می‌باشد. ما فرم فکتورهای را به صورت زیر در نظر می‌گیریم

$$F_{\pi1,\eta1}=(\Lambda^2_{\pi1,\eta1}-m^2_{\pi,\eta})/(\Lambda^2_{\pi2,\eta2}-\Lambda^2_{\pi1,\eta1})$$
$$F_{\pi2,\eta2}=(\Lambda^2_{\pi2,\eta2}-m^2_{\pi,\eta})/(\Lambda^2_{\pi2,\eta2}-\Lambda^2_{\pi1,\eta1}) \quad (4)$$

پارامترهای $\Lambda_{\pi1}$، $\Lambda_{\pi2}$، $\Lambda_{\eta1}$ و $\Lambda_{\eta2}$ عبارت اند از[۱۲]

$$\Lambda_{\pi1}=\Lambda_\pi+\varepsilon,\ \ \Lambda_{\pi2}=\Lambda_\pi-\varepsilon,\ \ \Lambda_{\pi2}=\Lambda_\pi-\varepsilon,$$
$$\Lambda_{\eta1}=\Lambda_\eta+\varepsilon,\Lambda_{\eta2}=\Lambda_\eta-\varepsilon \quad (5)$$

که Λ_π و Λ_η به ترتیب مقادیر $1.3GeV$ و $1.5GeV$ را دارند. برای این‌که به‌توانیم معادله دیفرانسیل (۲) را به صورت تحلیلی حل کنیم، تقریب مناسب را روی توابع نمایی تا مرتبه پنجم در "r" اعمال می‌کنیم. بسط تا مرتبه‌ی پنجم برای فواصل کوتاه تا متوسط (۰/۱ تا ۱ فرمی) که ناحیه‌ی اصلی برهمکنش است، دقت کافی دارد و توان‌های بالاتر سهم ناچیزی دارند. بنابراین معادله دیفرانسیل می‌شود:

$$\frac{d^2\Psi_{nl}(r)}{dr^2}=[\frac{2\mu}{r}\zeta_0+\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+2\mu\{\zeta_1r+\zeta_2r^2+\zeta_3r^3+\zeta_4r^4\}$$
$$+2\mu(\zeta'_0-E)]\Psi_{nl}(r) \quad (6)$$

که ضرایب عبارت‌اند از

$$\zeta'_0=\frac{1}{12}[\frac{g^2_{\pi qq}}{4\pi}(I_1.I_2)\{-\frac{m^3_\pi}{m^2}+F_{\pi2}\frac{\Lambda^3_{\pi1}}{m^2}-F_{\pi1}\frac{\Lambda^3_{\pi2}}{m^2}\}$$
$$+\frac{g^2_{\eta qq}}{4\pi}(\sigma_1.\sigma_2)\{-\frac{m^3_\eta}{m^2}+F_{\eta2}\frac{\Lambda^3_{\eta1}}{m^2}+F_{\eta1}\frac{\Lambda^3_{\eta2}}{m^2}\}] \quad (7a)$$

$$\zeta_0=\frac{1}{12}[\frac{g^2_{\pi qq}}{4\pi}(I_1.I_2)\{(\frac{m_\pi}{m})^2-F_{\pi2}(\frac{\Lambda_{\pi1}}{m})^2+F_{\pi1}(\frac{\Lambda_{\pi2}}{m})^2\}$$
$$+\frac{g^2_{\eta qq}}{4\pi}(\sigma_1.\sigma_2)\{(\frac{m_\eta}{m})^2-F_{\eta2}(\frac{\Lambda_{\eta1}}{m})^2+F_{\eta1}(\frac{\Lambda_{\eta2}}{m})^2] \quad (7b)$$

و

$$\zeta_1=[\frac{g^2_{\pi qq}}{96\pi}(I_1.I_2)\{\frac{m^4_\pi}{m^2}-F_{\pi2}\frac{\Lambda^4_{\pi1}}{m^2}+F_{\pi1}\frac{\Lambda^4_{\pi2}}{m^2}\}$$
$$+\frac{g^2_{\eta qq}}{96\pi}(\sigma_1.\sigma_2)\{\frac{m^4_\eta}{m^2}-F_{\eta2}\frac{\Lambda^4_{\eta1}}{m^2}+F_{\eta1}\frac{\Lambda^4_{\eta2}}{m^2}\}] \quad (8a)$$

$$\zeta_2 = \frac{1}{12}[\frac{g^2_{\pi qq}}{24\pi}(I_1.I_2)\{-\frac{m_\pi^5}{m^2}+F_{\pi 2}\frac{\Lambda_{\pi 1}^5}{m^2}-F_{\pi 1}\frac{\Lambda_{\pi 2}^5}{m^2}\}$$
$$+\frac{g^2_{\eta qq}}{24\pi}(\sigma_1.\sigma_2)\{-\frac{m_\eta^5}{m^2}+F_{\eta 2}\frac{\Lambda_{\eta 1}^5}{m^2}-F_{\eta 1}\frac{\Lambda_{\eta 2}^5}{m^2}\}] \quad (8b)$$

همچنین

$$\zeta_3 = \frac{1}{12}[\frac{g^2_{\pi qq}}{96\pi m^2}(I_1.I_2)\{m_\pi^6 - F_{\pi 2}\Lambda_{\pi 1}^6 + F_{\pi 1}\Lambda_{\pi 2}^6\}$$
$$+\frac{g^2_{\eta qq}}{96\pi m^2}(\sigma_1.\sigma_2)\{m_\eta^6 - F_{\eta 2}\Lambda_{\eta 1}^6 + F_{\eta 1}\Lambda_{\eta 2}^6\}] \quad (9a)$$

$$\zeta_4 = \frac{1}{12}\frac{g^2_{\pi qq}}{480\pi}(I_1.I_2)\{-\frac{m_\pi^7}{m^2}+F_{\pi 2}\frac{\Lambda_{\pi 1}^7}{m^2}-F_{\pi 1}\frac{\Lambda_{\pi 2}^7}{m^2}\} \quad (9b)$$

برای حل این معادله، از روش آنساتز شرح داده شده در مراجع [۷–۸] استفاده می‌کنیم که روشی مناسب برای حل معادلات دیفرانسیل مرتبه دوم است. بر این اساس، ابتدا تابع موج را تعریف می‌کنیم:

$$\Psi_{nl}(r) = \Omega_{nl}(r)\, e^{\phi(r)} \quad (10)$$

تابع $\phi(r)$ عبارت است از

$$\phi(r) = -t_0 - t_1 r - t_2 r^2 - t_3 r^3 - t_4 \ln(r),$$

$$\Omega_{nl}(r) = \begin{cases} 1 & \text{if } n = 0 \\ \prod_{i=1}^{n}(r-\omega_i^{(n)}) & \text{if } n \geq 1 \end{cases} \quad (11)$$

با دو بار مشتق گرفتن تابع $\Psi_{nl}(r)$ داریم:

$$\frac{d^2\Psi_{nl}(r)}{dr^2} = [\frac{(t_4^2+t_4)}{r^2} + \frac{2t_1t_4}{r} + (9t_3^2)r^4 + (12t_2t_3)r^3$$
$$+(4t_2^2+6t_1t_3)r^2 + 2(2t_1t_2+3t_3t_4-3t_3)r$$
$$+(4t_2t_4+t_1^2-2t_2)]\Psi_{nl}(r) \quad (12)$$

با برابر قرار دادن توان‌های متناظر «r» در معادلات (۶) و (۱۲)، ضرایب به‌دست می‌آید:

$$t_1 = \frac{\mu\zeta_2 - 2t_2^2}{3t_3}, \quad t_2 = \sqrt{\frac{\mu}{8}}\frac{\zeta_3}{\sqrt{\zeta_4}},$$
$$t_3 = \frac{\sqrt{2\mu\zeta_4}}{3}, \quad t_4 = \ell,\ -(\ell+1)$$
$$t_5 = \frac{B_2}{4\sqrt{B_1}}, \quad (13)$$

ریشه میانگین مربع شعاع مولکول مزون– باریون به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\langle r^2\rangle^{1/2} = \left[\int r^2 \Psi_{nl}(r)\right]^{1/2} \quad (14)$$

از این تعریف برای به‌دست آوردن ریشه میانگین مربع شعاع مولکولهای $D^*\Sigma_{s,c,b}$ و $B^*\Sigma_{s,c,b}$ استفاده می‌کنیم.

جدول ۱. ریشه میانگین مربع شعاع مولکول‌های $D^*\Sigma_{s,c,b}$ (اسپین باریون 1/2)

مولکول مزون– باریون	$I(J)^p$	RMS radii (fm)	Ref[۹]
$(\Sigma_s)_{s=1/2,I=1}(D^*)_{s=1,I=1/2}$	$1/2(1/2)^-$	7.03	10.11
	$3/2(1/2)^-$	4.15	4.38
	$1/2(3/2)^-$	2.94	3.22
	$3/2(3/2)^-$	3.17	3.30
$(\Sigma_c)_{s=1/2,I=1}(D^*)_{s=1,I=1/2}$	$1/2(1/2)^-$	9.30	10.01
	$3/2(1/2)^-$	4.11	4.18
	$1/2(3/2)^-$	2.78	2.97
	$3/2(3/2)^-$	3.48	3.60
$(\Sigma_b)_{s=1/2,I=1}(D^*)_{s=1,I=1/2}$	$1/2(1/2)^-$	2.05	2.23
	$3/2(1/2)^-$	2.07	3.27
	$1/2(3/2)^-$	2.36	2.68
	$3/2(3/2)^-$	3.48	3.68

جدول ۲. ریشه میانگین مربع شعاع مولکول‌های $D^*\Sigma s,c,b$ (اسپین باریون با ۳/۲)

مولکول مزون– باریون	$I(J)^p$	RMS radii (fm)	Ref[۹]
$(\Sigma_s)_{s=3/2,I=1}(D^*)_{s=1,I=1/2}$	$1/2(1/2)^-$	8.11	6.45
	$3/2(1/2)^-$	4.91	5.11
	$1/2(5/2)^-$	4.07	4.15
	$3/2(5/2)^-$	2.15	2.38
$(\Sigma_c)_{s=3/2,I=1}(D^*)_{s=1,I=1/2}$	$1/2(1/2)^-$	11.97	10.91
	$3/2(1/2)^-$	4.42	4.68
	$1/2(5/2)^-$	3.41	3.61
	$3/2(5/2)^-$	2.96	3.16
$(\Sigma_b)_{s=3/2,I=1}(D^*)_{s=1,I=1/2}$	$1/2(1/2)^-$	1.29	1.49
	$3/2(1/2)^-$	3.85	4.05
	$1/2(5/2)^-$	2.73	2.92
	$3/2(5/2)^-$	3.42	3.54

جدول ۳. ریشه میانگین مربع شعاع مولکول‌های $B^*\Sigma_{s,c,b}$ (اسپین باریون ۱/۲)

مولکولهای مزون- باریون	$I(J)^p$	RMS radii (fm)	Ref [۹]
$(\Sigma_s)_{s=1/2,I=1}(B^*)_{s=1,I=1/2}$	$1/2(1/2)^-$	1.76	1.99
	$3/2(1/2)^-$	3.42	3.68
	$1/2(3/2)^-$	2.45	2.61
	$3/2(3/2)^-$	3.27	3.43
$(\Sigma_c)_{s=1/2,I=1}(B^*)_{s=1,I=1/2}$	$1/2(1/2)^-$	2.12	2.26
	$3/2(1/2)^-$	3.76	3.96
	$1/2(3/2)^-$	2.53	2.72
	$3/2(3/2)^-$	3.42	3.76
$(\Sigma_b)_{s=1/2,I=1}(B^*)_{s=1,I=1/2}$	$1/2(1/2)^-$	2.45	2.67
	$3/2(1/2)^-$	4.22	4.34
	$1/2(3/2)^-$	2.83	2.90
	$3/2(3/2)^-$	4.05	4.24

جدول ٤. ریشه میانگین مربع شعاع مولکول‌های $B^*\Sigma_{s,c,b}$ (اسپین باریون ۳/۲)

مولکولهای مزون- باریون	$I(J)^p$	RMS radii (fm)	Ref [۹]
$(\Sigma_s)_{s=3/2,I=1}(B^*)_{s=1,I=1/2}$	$1/2(1/2)^-$	5.27	4.224
	$3/2(1/2)^-$	3.73	3.92
	$1/2(5/2)^-$	2.71	2.92
	$3/2(5/2)^-$	3.07	3.27
$(\Sigma_c)_{s=3/2,I=1}(B^*)_{s=1,I=1/2}$	$1/2(1/2)^-$	1.31	1.53
	$3/2(1/2)^-$	3.98	4.15
	$1/2(5/2)^-$	2.76	2.98
	$3/2(5/2)^-$	3.46	3.64
$(\Sigma_b)_{s=3/2,I=1}(B^*)_{s=1,I=1/2}$	$1/2(1/2)^-$	2.24	2.41
	$3/2(1/2)^-$	4.18	4.45
	$1/2(5/2)^-$	2.78	3.04
	$3/2(5/2)^-$	3.96	4.17

نتیجه‌گیری

هادرون‌های اگزوتیک می‌توانند برای فهم بهتر ساختار داخلی هادرون‌ها و نیز دینامیک نیروی قوی در نظریه کرومودینامیک کوانتومی به‌کار برده شوند. از زمانی که همکاری سرن-ال‌اچ‌سی‌بی در سال ۲۰۱۵ از مشاهده دو پنتاکوارک جدید $P_c(4380)$ و $P_c(4450)$ خبر داد، حالت‌های چندکوارکی بار دیگر در مرکز توجه قرار گرفته‌اند. در سال‌های اخیر، مشاهده سه پنتاکوارک $P_c(4312)$، $P_c(4440)$ و $P_c(4457)$ توسط LHCb گزارش شد. گمان می‌رود که این حالت‌ها ناشی از شکافتگی حالت پنتاکوارکی $P_c(4450)$ باشند[۱۰]. تاکنون مدل‌های متفاوتی برای تفسیر ساختار درونی این حالت‌ها پیشنهاد شده است. این تنوع مدل‌ها نشانگر آن است که مطالعه ی حالت‌های چندکوارکی هنوز به توجه بیشتری برای آشکارسازی اطلاعات زیرساختار و ماهیت آن‌ها نیاز دارد.

کار حاضر بر تصویر مولکولی پنتاکوارک‌ها یعنی حالت‌های مقید مزون-باریون متمرکز است. با در نظر گرفتن پتانسیل مناسب و بااستفاده از معادله دیفرانسیلی شرودینگر ابتدا تابع موج به‌دست آمده است. سپس با استفاده از تابع موج ریشه میانگین مربع شعاع مولکلول‌های $D^*\Sigma_{s,c,b}$ و $B^*\Sigma_{s,c,b}$ محاسبه شده است. از نتایج جداول، مشاهده می‌شود که با سنگین‌تر شدن کوارک‌ها (از s به c و سپس b)، شعاع RMS کاهش می‌یابد که ناشی از افزایش جرم کاهش‌یافته و فشرده‌تر شدن تابع موج است. همچنین افزایش اسپین یا تکانه‌ی مداری، به دلیل سهم گریز از مرکز، شعاع را افزایش می‌دهد. مقایسه با مرجع [۹] توافق کیفی خوبی را نشان می‌دهد و تفاوت‌های عددی جزئی ناشی از روش تحلیلی به‌کاررفته در این کار است.

مرجع ها

[۱] T. Nakano et al., *Phys. Rev. Lett.* **91**, 012002 (2003).
[۲] A. Aktas et al. [H1], *Phys. Lett. B* **588** (2004), 17.
[۳] S. Ho. Kim, H. Chul. Kim, A. Hosaka; *Physics Letters B*, **763**(2016) 358-364.
[۴] R. Aaij et al. [LHCb], *Phys. Rev. Lett.* **115** (2015), 072001.
[۵] S. Mohammad MoosaviNejad , A. Armat, *Eur.Phys.J.A* **56** (2020) 11, 287.
[۶] R. Machleidt, K. Holinde, C. Elster, *Physics Reports* **149**, 1 (1987).
[۷] S.M. MoosaviNejad, A. Armat, *Int. J. Mod. Phys. E* **28**, 1950033 (2019).
[۸] L.Y. Glozman, W. Plessas, K. Varga, R.F. Wagenbrunn, *Phys. Rev.D* **58** (1998) 094030.
[۹] D. P. Rathaud and Ajay kumar Rai *arXiv:1808.05815v1* [hep-ph] 17 Aug (2018).
[۱۰] R Aaij et al. *Phys. Rev. Lett.***122** (2019), 222001.

طیف درهم‌تنیدگی در نظریه‌ی میدان نرده‌ای با پتانسیل موضعی

فاطمه حسینی توچائی، محمدرضا محمدی‌مظفر
گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم‌پایه، دانشگاه گیلان، رشت

چکیده

طیف ماتریس چگالی کاهش‌یافته در نظریه‌ی میدان نرده‌ای با پتانسیل موضعی را ، با استفاده از ظرفیت درهم‌تنیدگی بررسی می‌کنیم. نشان داده می‌شود که مقادیر ویژه‌ی ماتریس چگالی کاهش‌یافته توسط چندجمله‌ای‌های کراوچوک توصیف می‌شوند که یک توصیف جبری دقیق از ساختار درهم‌تنیدگی فراهم می‌کند. تأثیر ناهمگنی فضایی پتانسیل را بر طیف مطالعه کرده و تغییرات غیربدیهی در توزیع مقادیر ویژه را نشان می‌دهیم. علاوه بر این، رفتار ظرفیت درهم‌تنیدگی را با آنتروپی درهم‌تنیدگی در رژیم‌های مختلف مقایسه می‌کنیم. به نظر می‌رسد ظرفیت درهم‌تنیدگی حساسیت بیشتری نسبت به ساختار طیفی، به‌ویژه در حضور ناهمگنی‌ها، از خود نشان می‌دهد و ممکن است به عنوان مکملی مفید برای آنتروپی درهم‌تنیدگی عمل کند.

واژگان کلیدی: طیف درهمتنیدگی، ماتریس چگالی کاهش‌یافته، نظریه میدان نرده‌ای، پتانسیل موضعی

Entanglement spectrum in a scalar field theory with local potential

Hosseini Tochaie, Fateme; Mohammadi Mozaffar, Mohammad Reza
Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, University of Guilan, Rasht

Abstract

We examine the spectrum of the reduced density matrix in a scalar field theory with a local inhomogeneous potential, using the capacity of entanglement as a diagnostic tool. The eigenvalues are governed by Krawtchouk polynomials, enabling an exact treatment. We study how inhomogeneity of the potential modifies the spectrum and compare the capacity of entanglement with the entanglement entropy. The capacity seems to be sensitive to spectral deformations induced by inhomogeneities in a way that complements the behavior of the entanglement entropy.

Key Words: Entanglement spectrum, reduced density matrix, scalar field theory, local potential

مقدمه

پژوهش‌ها در حوزه درهمتنیدگی کوانتومی در دهه‌های اخیر شتاب بسیار زیادی گرفته و این مفهوم در حوزه‌های متنوعی مانند فیزیک ماده چگال، نظریه میدان کوانتومی و گرانش کوانتومی به طور گسترده بررسی شده است [۱–۵]. برای کمّی کردن این مفهوم، سنجه‌های مختلفی همچون انتروپی درهمتنیدگی، اطلاعات متقابل و انتروپی خالص‌سازی به کار گرفته شده‌اند. در مورد سامانه‌هایی که با حالت خالص توصیف می‌شوند، انتروپی درهمتنیدگی یک معیار منحصربه‌فرد است که میزان همبستگی کوانتومی بین دو زیرسیستم مکمل را مشخص می‌کند. به منظور تعریف انتروپی در ساده‌ترین حالت ممکن، یک سامانه متشکل از دو قسمت را در حالت خالصی مانند $|\psi\rangle$ با فضای هیلبرت $H_{tot.} = H_A \otimes H_{\bar{A}}$ در نظر بگیرید. اکنون با جمع‌زدن روی (صرف‌نظر کردن از) درجات آزادی موجود در فضای هیلبرت مکمل ناحیه‌ی A، یک ماتریس چگالی کاهش‌یافته به صورت $\rho_A = Tr_{\bar{A}} |\psi\rangle\langle\psi|$ برای آن خواهیم یافت. دقت به این نکته ضروری است که ماتریس چگالی کاهش‌یافته متناظر با یک عملگر هرمیتی و نیمه–مثبت معین بوده و لذا می‌توان نمایشی به شکل $\rho_A = e^{-H_A}$ برای آن یافت. در این نمایش از H_A به عنوان هامیلتونی درهمتنیدگی (ماژولار) یاد می‌شود. اکنون تعریف انتروپی درهمتنیدگی با انتروپی فون نویمان ماتریس چگالی کاهش‌یافته متناظر است

$$S_E = -Tr(\rho_A \ln \rho_A). \quad (۱)$$

به سادگی نشان داده می‌شود که انتروپی بر حسب مقدار انتظاری هامیلتونی درهمتنیدگی به صورت $S_E = \langle H_A \rangle$ نیز قابل بازنویسی است. بدین معنا انتروپی را می‌توان به عنوان معیاری از مقدار میانگین ویژه‌مقادیر این عملگر در حالت داده شده دانست. از طرفی برای داشتن اطلاعات بیشتر از نحوه‌ی توزیع و میزان انحراف معیار ویژه‌مقادیر ماتریس چگالی کاهش‌یافته بهره‌مندی از سایر تعاریف نیز سودمند است. بدین منظور کمیتی تحت عنوان ظرفیت درهمتنیدگی با رابطه‌ی زیر را در نظر می‌گیریم [۶]

$$C_E = \langle H_A^2 \rangle - \langle H_A \rangle^2. \quad (۲)$$

ظرفیت درهمتنیدگی مشخص‌کننده‌ی میزان پهنای تابع توزیع متناظر با ویژه مقادیر ماتریس چگالی کاهش‌یافته است. برای سنجش درستی این ویژگی کافی است توجه کنیم که این کمیت در سامانه‌هایی که با یک حالت دارای درهمتنیدگی بیشینه‌ی توصیف می‌شوند، مقدار صفر خواهد داشت. مطالعات فراوانی به منظور جستجو و بررسی ویژگی‌های جالب توجه این کمیت در سال‌های اخیر انجام شده است [۶-۴]. شایان ذکر است که در تشابه با تعریف انتروپی رنی، ممان‌های بالاتر ظرفیت درهمتنیدگی نیز به صورت زیر قابل تعریف هستند

$$C_n = n^2 \frac{\partial^2}{\partial n^2}\big((1-n)S_n\big),$$

که در آن انتروپی رنی به صورت $S_n = \frac{1}{1-n}\log \mathrm{Tr}\,\rho_A^n$ تعریف شده و n نمایانگر اندیس رنی است.

در این پژوهش قصد داریم به مطالعه و بررسی رفتارهای مقیاسی طیف درهمتنیدگی ماتریس چگالی کاهش‌یافته با استفاده از ظرفیت درهمتنیدگی در یک مدل دارای پتانسیل موضعی بپردازیم. هامیلتونی متناظر با این مدل در چارچوب یک نظریه میدان نرده‌ای آزاد قرار گرفته بر روی ساختار شبکه به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود

$$H = \frac{1}{2}\sum_{i=0}^{L}\pi_i^2 + \frac{1}{2}\sum_{i=0}^{L} J_i(\varphi_{i+1}-\varphi_i)^2 + \frac{1}{2}\sum_{i=0}^{L} V_i{\varphi_i}^2,$$

که در آن J_i و V_i حاوی اطلاعات مربوط به میزان وابستگی پتانسیل به نقاط شبکه بوده و هر دو را نامنفی فرض می‌نماییم. وجود چنین ضرایبی در عبارت هامیلتونی سبب از بین رفتن تقارن انتقال و پیدایش اثرات ناشی از ناهمگنی در مدل مزبور می‌شود. ذکر این نکته نیز لازم است که بخش مستقل از مکان در عبارت مربوط به V_i متناظر با جرم میدان نرده‌ای است. هامیلتونی بالا را می‌توان با استفاده از یک تبدیل تشابهی به صورت زیر تبدیل نمود

$$H = \frac{1}{2}\sum_{i=0}^{L}\pi_i^2 + \frac{1}{2}\sum_{i,j=0}^{L}\varphi_i K_{ij}\varphi_j.$$

در مدل مدنظر ما ماتریس اختلاط K نمایش سه‌قطری به صورت زیر دارد

$$K = \begin{pmatrix} D_0 & -J_0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -J_0 & D_1 & -J_1 & & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -J_1 & D_2 & & -J_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \ddots & \cdots & & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & D_{L-1} & -J_{L-1} & \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & -J_{L-1} & D_L & \end{pmatrix},$$

که در آن $D_i = V_i + J_i + J_{i-1}$ را معرفی کرده‌ایم. مطالعه‌ی ویژگی‌های متنوع سنجه‌های درهمتنیدگی در چارچوب نظریات دارای ناهمگنی و شکست تقارن انتقال به طور گسترده‌ای صورت گرفته است..... با این وجود و به منظور سهولت در ادامه تمرکز خود را بر مدل ساده‌ای که در [۷] معرفی شده است معطوف می‌نماییم. پارامترهای هامیلتونی متناظر با مدل مزبور به صورت زیر تعیین می‌شوند

$$J_i = \sqrt{(L-i)(i+1)p(1-p)},$$

$$V_i = Lp + (1-2p)i - J_i - J_{i-1} + m^2,$$

که در آن p پارامتری مثبت با اندازه‌ی کوچک‌تر از واحد است. یکی از انگیزه‌های انتخاب مدل بالا در مرجع مذکور سادگی تحلیل و شناسایی رفتارهای انتروپی درهمتنیدگی در حضور ناهمگنی است که به دلیل بازنویسی ویژه‌توابع ماتریس همبستگی این مدل بر حسب جملاتی متناسب با چندجمله‌ای‌های کراوچوک بروز می‌یابد.

به منظور محاسبه سنجه‌های درهمتنیدگی از رهیافت همبستگی استفاده می‌کنیم [۱۱، ۱۲]. این روش محاسباتی برای حالت‌های گوسی کاربرد داشته و بنابراین رهیافتی کارامد برای محاسبه‌ی طیف ماتریس چگالی کاهش‌یافته در اختیار ما قرار می‌دهد. در ادامه پس از مرور کوتاهی به این روش، نتایج مربوط به طیف درهمتنیدگی را برای مدل ناهمگن ارائه می‌نماییم.

روش همبستگی

روش همبستگی برای محاسبه طیف درهم‌تنیدگی بر این اصل استوار است که ناظری با دسترسی محدود به یک زیربخش مشخص از

فضای هیلبرت، توانایی یافتن مقدار انتظاری عملگرهایی که تنها روی همان زیربخش اثر می‌کنید، دارد. از طرفی، مقداری که چنین ناظری برای محاسبه‌ی مزبور به دست می‌آورد باید کاملا با مقداری که به وسیله‌ی ناظر کل سامانه به دست می‌آید، برابر باشد. توجه به اهمیت این سازگاری، پایه‌گذار تعریف همبستگی‌های کوانتومی در زیرسامانه‌هاست. به بیان ریاضی مقدار انتظاری عملگری مانند $\mathcal{O}_A$ که در زیرناحیه‌ی A تعریف شده است، به صورت زیر داده می‌شود

$$\langle \mathcal{O}_A \rangle = tr[\rho_A \, \mathcal{O}_A] \,, \qquad (۳)$$

که در آن ماتریس چگالی کاهش‌یافته‌ی زیرناحیه ظاهر شده است. در رهیافت مبتنی بر روش همبستگی سعی می‌شود ماتریس چگالی کاهش‌یافته برای یک زیربخش به صورت مستقیم و بدون محاسبه‌ی ماتریس چگالی کل سامانه، تنها با استفاده از توابع همبستگی میدان‌ها و تکانه‌های مزدوج آن‌ها به دست آید. فرض بنیادین این رهیافت آن است که حالت سرتاسری سامانه، یک حالت گوسی (مانند خلاء) باشد. کاربرد اصلی این روش به صورت عمده در تسهیل محاسبات عددی بوده و به ویژه در سامانه‌هایی که روی شبکه شبیه‌سازی شده‌اند به کار گرفته می‌شود. نقطه‌ی ابتدایی غالبا یافتن یک نسخه‌ی گسسته‌شده از نظریه میدان کوانتومی یک ساختار شبکه فضایی است. از ساده‌ترین و شناخته‌شده‌ترین نمونه‌ها، می‌توان به نظریه‌های میدان آزاد بوزونی یا فرمیونی اشاره نمود. در این نظریه‌ها، به کمک قضیه‌ی ویک می‌توان همه‌ی توابع همبستگی چندنقطه‌ای را به صورت ترکیبی از جفت‌شدگی‌های ناشی از توابع دونقطه‌ای بازنویسی نمود. با توجه به این ویژگی در صورت داشتن توابع دونقطه‌ای محدود به ناحیه‌ی مورد نظر، اطلاعات کافی برای تعیین ماتریس چگالی کاهش‌یافته متناظر در اختیار خواهیم داشت. بدین ترتیب باید بتوان طیف این عملگر را به صورت یکتا و منحصربه‌فرد از روی همین توابع دونقطه‌ای بازسازی کنیم. می‌توان نشان داد که در رهیافت همبستگی برای زیرناحیه‌ای با تعداد نقاط شبکه ℓ، انتروپی و ظرفیت درهم‌تنیدگی به ترتیب از روابط زیر به دست می‌آیند

$$S_E = \sum_{i=1}^{\ell} (\nu_{+i} \log \nu_{+i} - \nu_{-i} \log \nu_{-i}), \qquad (٤)$$

$$C_E = \sum_{i=1}^{\ell} \nu_{+i}\nu_{-i} \left(\log \frac{\nu_{+i}}{\nu_{-i}} \right)^2, \qquad (٥)$$

که در آن $\nu_{\pm i} = \nu_i \pm \frac{1}{2}$ تعریف شده است. از طرفی ν_i نشان‌دهنده‌ی ویژه‌مقادیر ماتریس $\sqrt{X.P}$ بوده که تعریف ماتریس‌های X و P بر حسب ماتریس اختلاط در زیرناحیه‌ی داده شده به شکل زیر است

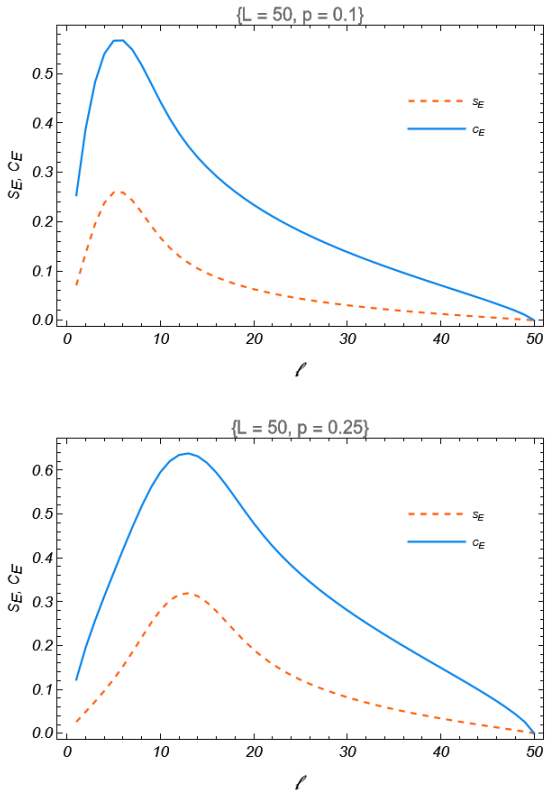
$$X_{mn} = \frac{1}{2}\left(K^{-1/2}\right)_{mn}, \qquad (۲۵)$$

$$P_{mn} = \frac{1}{2}\left(K^{1/2}\right)_{mn}. \qquad (۲۶)$$

نتایج عددی

با استفاده از رهیافت محاسباتی مطرح‌شده در بخش‌های پیشین می‌توان سنجه‌های گوناگونی از اطلاعات و درهمتنیدگی را در مدل مدنظر خود بیابیم. پاره‌ای از نتایج به دست‌آمده در شکل‌های ۱ و ۲ به صورت خلاصه گزارش شده‌اند. به ویژه با توجه به آن‌که تمرکز اصلی ما در این پژوهش بر طیف ماتریس چگالی کاهش‌یافته است در شکل ۱ ظرفیت درهمتنیدگی را به ازای مقادیر مختلفی از پارامترهای مدل رسم نموده‌ایم. ذکر این نکته ضروری است که در تمامی محاسبات عددی همواره پارامتر جرمی متناظر در پتانسیل موضعی را به صورت $m = 1/\sqrt{2}$ انتخاب کرده‌ایم. این مقدار مشخص هم‌ارز با انتخاب جرم موثر صفر برای پتانسیل موضعی حول نقطه‌ی کمینه (تعادل) آن است. در هر یک از این نمودارها به منظور مقایسه‌ی دقیق‌تر، انتروپی درهمتنیدگی نیز ترسیم شده است (خط‌چین). شایان ذکر است که نتایج عددی مربوط به انتروپی به ازای برخی از پارامترها پیش‌تر در [۷] گزارش شده‌اند. همان‌گونه که از نتایج عددی مشخص است، در حضور اثرات ناهمگنی، ظرفیت درهمتنیدگی نسبت به طول زیرناحیه رفتاری غیریکنوا و غیرمتقارن از خود نشان می‌دهد. این سنجه دارای یک مقدار بیشینه بوده که مکان آن با توجه به انتخاب پارامتر p متغیر است. نکته‌ی جالب توجه آن است که تغییر این پارامتر علاوه بر جابه‌جایی مکان قله، مقدار این کمیت را نیز تحت تاثیر قرار می‌دهد. طبق نتایج عددی حاصل درمی‌یابیم که مقدار ظرفیت درهمتنیدگی تابعی افزایشی از پارامتر مذکور است. بدین ترتیب با زیاد نمودن مقدار p همبستگی‌های کوانتومی میان زیرناحیه و ناحیه‌ی متمم آن افزایش یافته است. از طرفی پهنای طیف ویژه‌مقادیر ماتریس چگالی کاهش‌یافته نیز بیشتر خواهد شد. نتایج کیفی مشابهی برای انتروپی

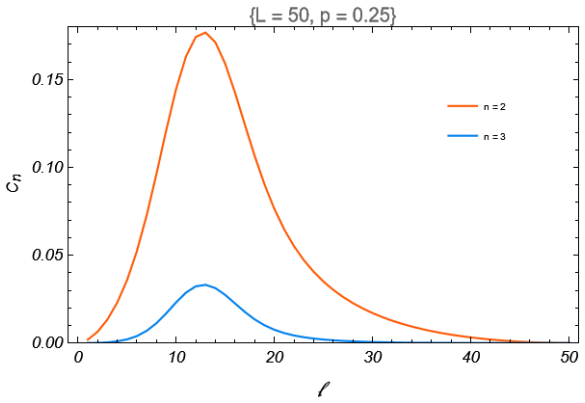
درهمتنیدگی در این مدل در مرجع [۷] مشـــاهده شـــده بود که با ویژگی‌های بیان‌شده سازگاری دارد.



شکل ۱. ظرفیت درهمتنیدگی برحسب طول زیرناحیه در حد جرم موثر صفر به ازای مقادیر مختلفی از پارامترهای مدل. در هر نمودار خط‌چین نشانگر انتروپی درهمتنیدگی متناظر است.

شـــکل ۲ دربردارنده‌ی نتایج عددی مربوط به ممان‌های ظرفیت درهمتنیدگی به عنوان تابعی از طول زیرناحیه است. دو نکته‌ی قابل توجه از این نتایج مشـهود اسـت. نخسـت آن‌که رفتار مقیاس‌پذیری این کمیت‌ها نیز مشابه با ظرفیت درهمتنیدگی غیریکنوا بوده و پس از رسـیدن به یک قله، روندی کاهشـی را از خود نشـان می‌دهند. همچنین با افزایش اندیس رنی مقدار ممان‌ها به طور محســوســی کاهش یافته است. این رفتار با تعمیم به مقادیر بزرگ‌تر پارامتر رنی نیز تکرار می‌شود. از طرفی نتایج حاصل نشان می‌دهد که مکان قله کاملا از مقدار این پارامتر مستقل است. با تغییر مقدار p، رفتارهای کیفی مشابهی برای ممان‌های ظرفیت به دست می‌آوریم که البته در این‌جا از بیان آن‌ها صرف‌نظر کرده‌ایم.

این پژوهش در مسـیرهای مطالعاتی مختلفی قابل گسـترش اسـت. رفتارهایی که تاکنون گزارش نموده‌ایم در قالب یک حالت ایسـتا و مسـتقل از زمان مطرح شـده‌اند. از این‌رو به عنوان یکی از مسـائل جالب توجه، به بررسـی رفتارهای وابسـته به زمان سـنجه‌های مورد مطالعه می‌توان اشـــاره نمود. به ویژه چنین مطالعه‌ای امکان می‌دهد تا تاثیرات ناشـــی از وجود ناهمگنی در هامیلتونی را، بر نحوه‌ی انتشار درهمتنیدگی و تصویر شبه‌ذره‌ی متناظر با آن بسنجیم.



شکل ۲. ممان‌های ظرفیت درهمتنیدگی بر حسب طول زیرناحیه در حد جرم موثر صفر.

مرجع‌ها

[1] H. Casini, M. Huerta, *J. Phys. A* **42**, 504007 (2009).
[2] P. Calabrese, J. Cardy, *J. Phys. A* **42**, 504005 (2009).
[3] N. Laflorencie, *Phys. Rept.* **646**, 1-59 (2016).
[4] M. Rangamani, T.Takayanagi, *Lect. Notes Phys.* **931**, 1-246 (2017).
[5] T. Nishioka, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 035007 (2018).
[6] H. Yao, X. L. Qi, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 080501 (2010).
[7] Y. Nakaguchi, T. Nishioka, *JHEP* **12,** 129 (2016).
[8] Y.O. Nakagawa and S. Furukawa, *Phys. Rev. B* **96**, 205108 (2017).
[9] J. De Boer, J. Jarvela and E. Keski-Vakkuri, *Phys. Rev. D* **99**, 066012 (2019).
[10] R. Arias, et. al., *JHEP* **03**, 175 (2023).
[11] M. R. M. Mozaffar, *Phys. Rev. D* **110,** 046021 (2024).
[12] P. Bernard, et. al., *J. Phys. A* **58**, 305001 (2025).

پدیدارشناسی ذره تک‌تایی η در مدل هیگز مرکب کمینه

رضا اصغرزاده جلودار ، کاظم بی‌تقصیر فدافن
دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود

چکیده

در این مقاله، مطالعه‌ای نظری و پدیدارشناختی از مدل کمینهٔ هیگز مرکب بر پایه الگوی شکست تقارن $SU(4) \to Sp(4)$ ارائه می‌شود. در این چارچوب، شکست تقارن الکتروضعیف توسط زاویه همترازی خلأ θ کنترل می‌شود که هم اصلاح جفت‌شدگی هیگز به بوزون‌های پیمانه‌ای $(\kappa_V = \cos\theta)$ و هم جرم بوزون تک‌تایی η را از طریق رابطه $m_\eta = m_h / \sin\theta$ تعیین می‌کند. با استفاده از آخرین اندازه‌گیری‌های Run-2 آزمایشگاه ATLAS، یک توزیع پسین بیزی برای θ ساخته شده و یک بررسی متقاطع فرکانسی بر پایه نمایه $\Delta\chi^2$ انجام شده است. نتایج نشان می‌دهد که سناریوهای با همترازی خلا و η سبک توسط داده‌های دقیق هیگز در LHCمنع می‌شوند و حدود پایینی $m_\eta \gtrsim 440\ GeV$ تا 820 GeV به‌دست می‌آید.

واژه‌های کلیدی: هیگز مرکب، مدل فرااستاندارد، نظریه الکتروضعیف، شکست تقارن

Phenomenology of the singlet η particle in the minimal composite Higgs model

Reza Asgharzadeh Jaloudar, Kazem Bitaghsir Fadafan
Department of Physics, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran

Abstract

In this paper, a theoretical and phenomenological study of the minimal composite Higgs model based on the symmetry breaking pattern $SU(4) \to Sp(4)$ is presented. In this framework, electroweak symmetry breaking is controlled by the vacuum misalignment angle θ, which determines both the modification of the Higgs coupling to gauge bosons ($\kappa_V = \cos\theta$) and the mass of the singlet boson η via the relation $m_\eta = m_h/\sin\theta$. Using the latest Run-2 measurements from the ATLAS experiment, a Bayesian posterior distribution for θ is constructed, and a frequentist cross-check based on the $\Delta\chi^2$ profile is performed. The results show that scenarios with large vacuum misalignment and a light η are excluded by the precise Higgs data at the LHC, and lower limits $m_\eta \gtrsim$ 440 GeV to 820 GeV are obtained.

Keywords: *Composite Higgs, Beyond the Standard Model, Electroweak Theory, Symmetry Breaking*

مقدمه

کشف بوزون هیگز با جرم حدود ۱۲۵ GeV در برخورددهندهٔ بزرگ هادرونی (LHC) موفقیت بزرگی برای مدل استاندارد بود[۱،۲]، با این حال، پایداری جرم هیگز در برابر تصحیحات کوانتومی از مقیاس‌های بالاتر یک معضل بنیادی باقی می‌ماند که به مسئله سلسله‌مراتب جرم معروف است [۳،٤]. یکی از راه‌حل‌های جذاب، ترک فرض بنیادی بودن هیگز و تفسیر آن به‌عنوان حالت مرکب یا دقیق‌تر به‌عنوان یک بوزون گلدستون شبه‌نامبو ناشی از دینامیک قوی جدید در مقیاس انرژی بالاتر است [۵،٦]. در این رویکردها، جرم هیگز به‌طور طبیعی توسط تقارن جهانی تقریبی بخش قوی محافظت می‌شود [۷].

در این مقاله بر مدل کمینه هیگز مرکب بر پایه شکست تقارن $SU(٤) \to Sp(٤)$ تمرکز داریم. این مدل از یک نظریه پیمانه‌ای تقارن $SU(۲)$ با دو طعم فرمیون دیراک قابل تحقق است [۸،۹]. فضای هم‌مجموعهٔ مدل شامل پنج بوزون شبه‌نامبوگلدستون که در زیرگروه الکتروضعیف به یک دوتایی هیگز و یک تک‌تایی خنثی η تجزیه می‌شوند. هدف اصلی این مقاله تبدیل اندازه‌گیری‌های دقیق جفت‌شدگی هیگز به قیود کمّی بر θ و از طریق آن بر جرم m_η است.

مدل هیگز مرکب: الگوی $SU(٤) \to Sp(٤)$

ساده‌ترین نظریه دینامیک قوی که می‌تواند یک بوزون گلدستون هیگز مرکب تولید کند، بر پایه نظریه پیمانه‌ای $SU(2)_{FC}$ با دو طعم دیراک در نمایش پایه استوار است [۸]. در حد دستیده، نظریه دارای تقارن طعمی $SU(٤)$ است که توسط چگالیده فرمیونی به $Sp(٤)$ می‌شکند. طبق قضیه نامبو–گلدستون، پنج مولد شکسته‌شده منجر به ظهور پنج بوزون گلدستون می‌شوند که تحت زیرگروه $SO(٤)$

به‌صورت (۲,۲) ⊕ (۱,۱) تجزیه می‌شوند؛ این تجزیه طبیعتاً امکان شناسایی یک دوتایی هیگز گلدستون را فراهم می‌کند. این بوزون‌های گلدستون، نوسانات میدان Σ حول خلأ نظریه‌اند؛ میدانی که جهت‌گیری خلأ چگالیده فرمیونی نظریه زیربنایی را در فضای هم‌مجموعه $SU(4)/Sp(4)$ مشخص می‌کند[۸]. پس از جانمایی بخش الکتروضعیف، خلأ نظریه به‌صورت ترکیبی از دو حالت پایه پارامتری می‌شود [۸]:

$$\Sigma_0 = \cos\theta \cdot \Sigma_B + \sin\theta \cdot \Sigma_H \quad (۱)$$

که در آن θ زاویه هم‌ترازی خلأ است و از $\theta = 0$ (فاز حفظ‌شده الکتروضعیف) تا $\theta = \pi/2$ (مدل تکنیکالر خالص) تغییر می‌کند. مدل هیگز مرکب در ناحیه $\theta \ll 1$ قرار می‌گیرد. بسط جمله جنبشی $f^2\,Tr[(D_\mu\Sigma)^\dagger D^\mu\Sigma]$، جرم بوزون‌های پیمانه‌ای را به‌دست می‌دهد و سه رابطه بنیادی را که کل پدیدارشناسی مدل بر آن‌ها استوار است آشکار می‌سازد:

$$v = 2\sqrt{2}\, f \sin\theta \quad (۲)$$

$$\kappa_V \equiv \frac{g_{hVV}}{g_{hVV}^{SM}} = \cos\theta \quad (۳)$$

$$m_\eta = m_h / \sin\theta \quad (٤)$$

رابطه (۲) ارتباط مقیاس شکست تقارن f با مقدار v یا همان خلا الکتروضعیف را نشان می‌دهد. رابطه (۳)، که از جمله جنبشی لاگرانژی و جفت‌شدگی کمینه ناشی می‌شود، پیش‌بینی می‌کند که هر انحراف از هم‌ترازی کامل $(\theta = 0)$ مستقیماً به کاهش جفت‌شدگی هیگز با بوزون‌های W و Z منجر می‌شود. رابطه سوم از ساختار پتانسیل مؤثر حاصل می‌شود: مشتق دوم پتانسیل نسبت به میدان‌های h و η در کمینه رابطه $\frac{m_h^2}{m_\eta^2} = sin^2\theta$ را به‌دست می‌دهد [۸]. با جایگذاری $m_h = 125\,GeV$، رابطه $m_\eta = m_h / \sin\theta$ حاصل می‌شود که نشان می‌دهد مقادیر کوچک θ به بوزون تک‌تایی سنگین منجر می‌شوند.

شایان ذکر است که تقارن گسسته $\eta \to -\eta$ در لاگرانژی مؤثر گلدستون وجود دارد که جفت‌شدگی‌های خطی سطح درخت مانند ηWW، ηZZ و $\eta t\bar{t}$ را ممنوع می‌کند. بنابراین کانال‌های واپاشی η از طریق مکانیزم‌های ثانوی نظیر واپاشی حلقه‌ای $\eta \to gg$ یا $\eta \to \gamma\gamma$ و برای جرم‌های بالا، $\eta \to hh$ پیش می‌روند.

تحلیل عددی و قیود تجربی

برای استخراج قیود تجربی بر زاویهٔ هم‌ترازی خلأ θ، از اندازه‌گیری ترکیبی $ATLAS$ بر جفت‌شدگی هیگز به بوزون‌های پیمانه‌ای در دادهٔ $Run-2$ استفاده می‌کنیم[۱۰]. مقدار ورودی اصلی تحلیل به‌صورت؛

$$\kappa_V = \mu \pm \sigma \quad ,\mu = 1.035,\ \sigma = 0.031 \quad (۵)$$

گرفته می‌شود و برای سنجش حساسیت نتایج، سناریوی محافظه‌کارانهٔ؛

$$\kappa_V = 1.00 \pm 0.05 \quad (٦)$$

نیز به‌عنوان مقایسهٔ کنترلی در نظر گرفته می‌شود. این ورودی‌ها مستقیماً به فضای θ نگاشت می‌شوند و به‌واسطهٔ رابطهٔ $\kappa_V = \cos\theta$، به قیود فیزیکی روی ساختار خلأ مدل تبدیل می‌شوند. پسین θ نشان می‌دهد با توجه به داده‌های تجربی هیگز، چه مقادیری از زاویه هم‌ترازی خلأ محتمل‌ترند و طبق قضیه بیز از ترکیب پیشین با درست‌نمایی داده به‌دست می‌آید. در رویکرد بیزی، پسین θ از تبدیل متغیر به‌دست می‌آید و به‌صورت:

$$p(\theta \mid \text{data}) \propto \sin\theta \exp\left[-\frac{(\cos\theta-\mu)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (۷)$$

نوشته می‌شود. عامل $\sin\theta$ همان ژاکوبین تبدیل $\kappa_V \to \theta$ است و نقش مهمی در شکل پسین در مجاورت مرز فیزیکی $\theta = 0$ دارد. با وارون‌سازی تابع توزیع تجمعی (CDF) [۱۱]، برای دادهٔ مرجع $ATLAS$ حدود یک‌طرفهٔ؛

$$\theta_{68\%} = 0.194 \quad ,\theta_{95\%} = 0.291 \quad (۸)$$

به‌دست می‌آیند. با استفاده از رابطهٔ

$$m_\eta = \frac{m_h}{\sin\theta}, \quad m_h = 125\ \text{GeV}, \quad (۹)$$

این حدود به کرانهای پایین

$$m_\eta^{68\%} \gtrsim 6.5 \times 10^2\ \text{GeV}, \quad (۱۰)$$
$$m_\eta^{95\%} \gtrsim 4.4 \times 10^2\ \text{GeV}$$

تبدیل می‌شوند. بنابراین حتی انحراف‌های کوچک از هم‌ترازی کامل، به محدودیت‌های جرمی قابل‌توجهی برای η منجر می‌شوند.

به‌عنوان بررسی متقابل، نمایهٔ فرکانسی $\Delta\chi^2$ نیز به‌صورت

$$\Delta\chi^2(\theta) = -2\ln\left(\frac{\mathcal{L}(\theta)}{\mathcal{L}_{\max}}\right) \quad (۱۱)$$

محاسبه می‌شود[۱۲] برای دادهٔ مرجع، تقاطع‌های متناظر با $\Delta\chi^2 = 1$ و $\Delta\chi^2 = 2.71$ در

$$\theta \simeq 0.153,\ \theta \simeq 0.232 \quad (۱۲)$$

قرار دارند که به‌ترتیب به

$$m_\eta \gtrsim 8.2 \times 10^2\ \text{GeV}, \quad m_\eta \gtrsim 5.4 \times 10^2\ \text{GeV} \quad (۱۳)$$

می‌انجامند. برای سناریوی محافظه‌کارانه نیز حدود بیزی

$$\theta_{68\%} = 0.316, \quad \theta_{95\%} = 0.446 \quad (۱٤)$$

و حدود فرکانسی

$$\theta \simeq 0.318, \quad \theta \simeq 0.409 \quad (۱۵)$$

به‌دست می‌آیند که همگی با تصویر کلی نتایج سازگارند و نشان می‌دهند که افزایش عدم‌قطعیت تجربی، قیدها را ضعیف‌تر می‌کند اما ساختار اصلی نتیجه را تغییر نمی‌دهد. نتایج عددی از تحلیل هر دو داده در جدول ۱ خلاصه شده است.

جدول .1 خلاصه قیود بر زاویه هم‌ترازی و جرم بوزون تک‌تایی η

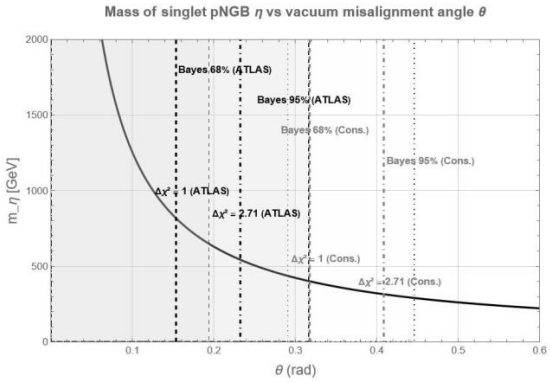
روش / داده	$\theta_{68\%}$	$\theta_{95\%}$	$m_\eta\ (68\%)\ [GeV]$	$m_\eta\ (95\%)\ [GeV]$
بیزی — ATLAS Run2	0.194	0.291	$\gtrsim 650$	$\gtrsim 440$
فرکانسی — ATLAS Run2	0.153	0.232	$\gtrsim 820$	$\gtrsim 540$
بیزی — محافظه‌کارانه	0.316	0.446	$\gtrsim 400$	$\gtrsim 290$
فرکانسی — محافظه‌کارانه	0.318	0.409	$\gtrsim 400$	$\gtrsim 310$

نکتهٔ مهم این است که مقدار مرکزی $\mu = 1.035$ بزرگ‌تر از ۱ است و بنابراین خارج از بازهٔ فیزیکی $\kappa_V \leq 1$ قرار می‌گیرد. در نتیجه، نرمال‌سازی پسین بر ناحیهٔ فیزیکی، حدودی محافظه‌کارانه بر θ ایجاد می‌کند که باید به‌عنوان کران‌های بالایی فیزیکی تفسیر شوند، نه به‌عنوان شاهدی برای ناهم‌ترازی غیرصفر. جمع‌بندی این بخش روشن است: مرز فیزیکی $\kappa_V \leq 1$ همراه با داده‌های کنونی LHC ناهم‌ترازی بزرگ خلأ را نامطلوب می‌کند و مدل را به ناحیهٔ $\theta \lesssim 0.3$ سوق می‌دهد. در نتیجه، اسکالر تک‌تایی η در این چارچوب نمی‌تواند سبک باشد و در بازهٔ چندصد GeV قرار می‌گیرد؛ بازه‌ای که در بخش بعد، از نظر پدیدارشناختی و با کمک سه نمودار کلیدی، به‌صورت تصویری و فشرده بررسی می‌شود.

پدیدهٔشناسی مدل

با استفاده از روابط بنیادی به‌دست‌آمده در بخش‌های پیشین، اکنون پیامدهای مستقیم و آزمون‌پذیر مدل کمینهٔ $SU(4)/Sp(4)$ را بررسی می‌کنیم. نتیجهٔ اصلی آن است که قیود تجربی بر θ، به‌طور غیرخطی به یک کران پایین بر جرم اسکالر تک‌تایی η تبدیل می‌شوند و بنابراین بازهٔ جرمیِ چندصد GeV را برای این حالت پیش‌بینی می‌کنند. این بازه نه‌تنها آزمون‌پذیری مدل را افزایش می‌دهد، بلکه نشان می‌دهد نسخه‌های طبیعی‌تر با θ بزرگ و در نتیجه η سبک، با داده‌های کنونی چندان سازگار نیستند.

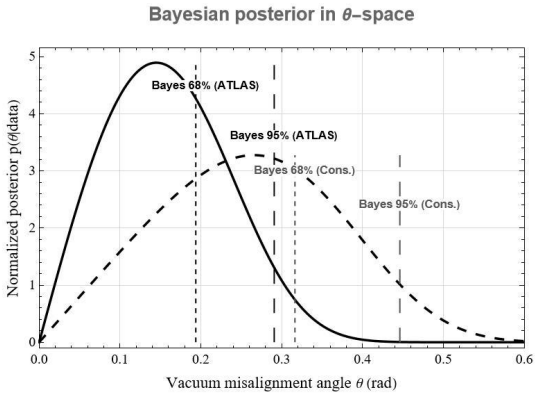
شکل(۱) مهم‌ترین پیام فیزیکی مدل را به‌صورت مستقیم نمایش می‌دهد: هرچه خلأ به سمت هم‌ترازی دقیق‌تر حرکت کند، جرم η افزایش می‌یابد. از این رو، داده‌های دقیق هیگز نه‌تنها بر جفت‌شدگی‌های مدل قید می‌گذارند، بلکه مستقیماً ناحیهٔ جرمیِ قابل‌انتظار برای η را نیز تعیین می‌کنند. در این تصویر، دادهٔ مرجع ATLAS کران‌های شدیدتری به‌دست می‌دهد و سناریوی محافظه‌کارانه فقط به‌عنوان یک مقایسهٔ کنترلی، ناحیهٔ کم‌اطمینان‌تر را نشان می‌دهد.



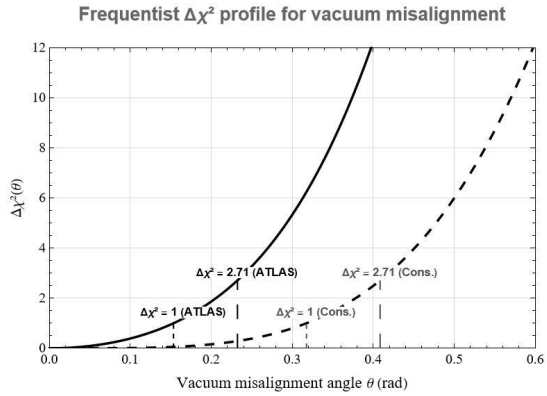
شکل ۱ .. جرم اسکالر تک‌تایی η بر حسب زاویهٔ هم‌ترازی خلأ θ. منحنی سیاه رابطهٔ نظری $m_\eta = m_h/\sin\theta$ را با $m_h = 125\ GeV$ نشان می‌دهد. نواحی سایه‌خورده حدود بیزی ۶۸٪ و ۹۵٪ برای دادهٔ مرجع ATLAS Run-2 و سناریوی محافظه‌کارانه را به ترتیب نمایش می‌دهند. خطوط عمودی نیز حدود یک‌طرفهٔ فرکانسی استخراج‌شده از نمایهٔ $\Delta\chi^2$ را مشخص می‌کنند.

شکل(۲) نشان می‌دهد که توزیع پسین θ به‌صورت طبیعی غیرگاوسی است؛ علت آن هم تبدیل غیرخطی $\kappa_V = \cos\theta$ و هم وجود مرز فیزیکی $\kappa_V \leq 1$ است. در نتیجه، گزارش یک عدم‌قطعیت متقارن برای θ تصویر دقیقی از داده‌ها ارائه نمی‌کند و استفاده از بازه‌های اعتبار بیزی ضروری است. این نمودار همچنین به‌خوبی نشان می‌دهد که داده‌های فعلی بیشتر با مقادیر کوچک θ سازگارند، هرچند سناریوی محافظه‌کارانه به دلیل عدم‌قطعیت بزرگ‌تر، توزیع پهن‌تری ایجاد می‌کند. از نظر عددی، برای دادهٔ مرجع ATLAS Run-2 حدود بیزی $\theta_{68\%} = 0.194$ و $\theta_{95\%} = 0.291$ به‌دست می‌آیند که به‌ترتیب به $m_\eta \gtrsim 6.5 \times 10^2$ GeV و $m_\eta \gtrsim 4.4 \times 10^2$ GeV منجر می‌شوند.

شکل ۳ نمایه $\Delta\chi^2(\theta)$ را برای هر دو مجموعه داده نمایش می‌دهد. خطوط مرجع در $\Delta\chi^2 = 1$ و $\Delta\chi^2 = 2.71$ حدود یک‌طرفه



شکل ۲. چگالی پسین بیزی برای زاویهٔ هم‌ترازی خلأ θ. توزیع‌های پسین نرمال‌شده برای دادهٔ مرجع ATLAS Run-2 با منحنی سیاه پیوسته و سناریوی محافظه‌کارانه با منحنی خاکستری خط‌چین نشان داده شده‌اند. شکل تأثیر تبدیل غیرخطی $\kappa_V = cos\theta$ و مرز فیزیکی $\kappa_V \leq 1$ را بر توزیع θ نشان می‌دهد.



شکل ۳. نمایهٔ $\Delta\chi^2$ برای زاویهٔ هم‌ترازی خلأ θ. منحنی‌ها برای دادهٔ مرجع ATLAS Run-2 با منحنی سیاه پیوسته و سناریوی محافظه‌کارانه با منحنی خاکستری خط‌چین رسم شده‌اند. خطوط عمودی متناظر با $\Delta\chi^2 = 1$ و $\Delta\chi^2 = 2.71$ به‌ترتیب حدود یک‌طرفهٔ ۶۸٪ و ۹۵٪ را در چارچوب فرکانسی تعیین می‌کنند.

۶۸٪ و ۹۵٪ را در چارچوب فرکانسی مشخص می‌کنند. سازگاری کلی نتایج دو روش آماری استحکام نتیجه‌گیری فیزیکی را تأیید می‌کند.: داده‌های کنونی LHC ناهم‌ترازی بزرگ خلأ را تضعیف می‌کنند و در نتیجه η سبک را نامطلوب می‌سازند. برای دادهٔ مرجع، تقاطع‌های $\Delta\chi^2 = 1$ و $\Delta\chi^2 = 2.71$ به‌ترتیب در $\theta \simeq 0.153$ و $\theta \simeq 0.232$ قرار می‌گیرند که متناظر با $m_\eta \gtrsim 8.2 \times 10^2$ GeV و $m_\eta \gtrsim 5.4 \times 10^2$ GeV هستند. برای سناریوی محافظه‌کارانه نیز حدود بیزی $\theta_{68\%} = 0.316$ و $\theta_{95\%} = 0.446$، و حدود فرکانسی $\theta \simeq 0.318$ و $\theta \simeq 0.409$ به‌دست می‌آیند که همگی با تصویر کلی نتایج سازگارند و نشان می‌دهند که افزایش عدم‌قطعیت تجربی، قیدها را ضعیف‌تر می‌کند اما ساختار اصلی نتیجه را تغییر نمی‌دهد.

از دیدگاه پدیدارشناختی، این نتیجه مستقیماً مدل را به ناحیهٔ آزمون‌پذیر چندصد GeV می‌برد. بنابراین، جست‌وجوهای آینده در LHC و به‌ویژه HL-LHC ، به‌خصوص در کانال‌های حساس به اسکالرهای سنگین، می‌توانند این چارچوب را به‌طور جدی بیازمایند. در این معنا، سه خلاصه‌ای فشرده از کل استدلال نظری و آماری مقاله هستند.

نتیجه‌گیری و جمع‌بندی

در این مقاله، تحلیل نظری و پدیدارشناختی از مدل کمینه هیگز مرکب مبتنی بر الگوی شکست تقارن $SU(4) \rightarrow Sp(4)$ ارائه شد. با استفاده از اندازه‌گیری‌های دقیق Run-2 آزمایش ATLAS برای ضریب جفت‌شدگی هیگز به بوزون‌های پیمانه‌ای، (κV) قیود کمّی بر زاویه هم‌ترازی خلأ θ در دو چارچوب آماری مستقل بیزی و فرکانسی استخراج گردید. نتیجه اصلی نشان می‌دهد که داده‌های کنونی هیگز کران‌های بالایی معناداری بر زاویه هم‌ترازی اعمال می‌کنند. برای مجموعه‌داده مرجع ATLAS ، تحلیل بیزی حدود $\theta_{68\%} = 0.194$ و $\theta_{95\%} = 0.291$ را به‌دست می‌دهد که به‌ترتیب به کران‌های پایینی $m\eta \gtrsim 650\ GeV$ و $m\eta \gtrsim 440\ GeV$ منجر می‌شوند. بررسی متقابل فرکانسی نیز حدود سازگاری در بازه $m\eta \gtrsim 540 - 820\ GeV$ ارائه می‌کند.

این نتایج دو پیامد مهم دارند. نخست، سناریوهای متناظر با ناهم‌ترازی بزرگ خلأ و در نتیجه اسکالر تکینهٔ سبک η، به‌واسطهٔ ترکیب مرز فیزیکی $\kappa_V \leq 1$ و داده‌های فعلی LHC به‌شدت محدود می‌شوند. دوم، بازهٔ جرمی پیش‌بینی‌شده برای η مستقیماً در محدودهٔ دسترسی جستجوهای آینده LHC، به‌ویژه در HL-LHC ، قرار می‌گیرد. ازاین‌رو، کانال‌هایی نظیر $\eta \rightarrow hh$ و واپاشی‌های حلقه‌ای $\eta \rightarrow gg$ و $\eta \rightarrow \gamma\gamma$ می‌توانند آزمون‌های تجربی تعیین‌کننده‌ای برای این چارچوب فراهم کنند.

مرجع‌ها

[۱]CMS Collaboration, Phys. Lett. B 716 (2012) 30, arXiv:1207.7235.
[۲]ATLAS Collaboration, Phys. Lett. B 716 (2012) 1, arXiv:1207.7214.
[۳]S. Weinberg, Phys. Rev. D 13 (1976) 974.
[۴]L. Susskind, Phys. Rev. D 20 (1979) 2619.
[۵]D. B. Kaplan and H. Georgi, Phys. Lett. B 136 (1984) 183.
[۶]D. B. Kaplan, H. Georgi and S. Dimopoulos, Phys. Lett. B 136 (1984) 187.
[۷]R. Contino, TASI 2009, arXiv:1005.4269.
[۸]G. Cacciapaglia and F. Sannino, JHEP 04 (2014) 111, arXiv:1402.0233.
[۹]A. Hietanen et al., JHEP 07 (2014) 116, arXiv:1404.2794.
[۱۰] ATLAS Collaboration, Nature 607 (2022) 52, arXiv:2207.00092.
[۱۱]W. H. Press et al., Numerical Recipes, Cambridge Univ. Press.(۲۰۰۷)
[۱۲] G. Cowan et al., Eur. Phys. J. C 71 (2011) 1554, arXiv:1007.1727.

ویژگی‌های جدید تابع تتای طیفی و کاربرد آن در مطالعه ناوردایی مشخصه‌های جبرهای نظریه ریسمان‌های کوانتومی

بهرامی نسب، محمدرضا[۱]؛ قمی نژاد، مهرداد[۲]

[۱و۲] دانشکده فیزیک دانشگاه سمنان ، کیلومتر ۳ جاده دامغان، سمنان

چکیده

در این مقاله ما به مطالعه ضرب‌های دوتایی از توابع تتای ژاکوبی که در ساختار مشخصه‌های جبر ابر همدیس $N=2$ وآفین ابر جبر لی $sl(2|1)$ وجود دارند، می پردازیم. در این مقاله، ابتدا یک تعریف طیفی از توابع تتای ژاکوبی ارائه کردیم سپس یک چارچوب ضربی طیفی را ایجاد نمودیم (قضیه۱). همچنین توانستیم ضرب-های دوتایی از تابع تتای طیف را بر حسب توابع تتای ژاکوبی ارائه کنیم. درنهایت به کمک قضیه۱، لیست کامل ضرب‌های دوتایی از توابع تتای ژاکوبی را مستقیما بررسی و تولید کردیم.

واژه های کلیدی: *تابع تتای طیف، توابع تتای ژاکوبی، چارچوب ضرب‌های دوتایی طیفی.*

New Properties of Spectral Theta Function with Applications to the Invariance of Algebras characters in Quantum String Theory

Bahraminasab, Mohammad Reza[1]; Ghominejad, Mehrdad[2]

[1,2] Department of physics, University of Semnan, Semnan,

Abstract

In this paper, we study the bi-production of the Jacobi theta functions appearing in the structure of characters of the superconformal $N=2$ algebra and the affine super Lie $sl(2|1)$ algebra. In this regard, we firstly present a spectral definition of Jacobi theta functions. Then, we establish a multiplication spectral framework (Theorem 1).We can present bi-production of the spectral theta function in terms of Jacobi theta functions. Finally, by using Theorem 1, the complete list of bi-production (bilinear identities) of Jacobi theta functions directly are explored and discussed.

***Keywords**: Spectral theta function, Jacobi theta functions, Multiplication spectral framework.*

PACS No. (02)

مقدمه

مشخصه‌های[۱] جبری نقشی بنیادین در نظریه ریسمان‌های کوانتومی ایفا می‌کنند. اهمیت این مشخصه‌ها زمانی آشکار می‌شود که تحت تبدیلات مدولار ناوردا باقی بمانند، چراکه این ناوردایی شرطی ضروری برای سازگاری این مشخصه‌ها بر روی سطوح ریمانی است. از این رو، اثبات ناوردایی مدولار جبرهای مختلف، هدف اصلی بسیاری از فیزیکدانان و ریاضی‌دانان در سال‌های اخیر بوده است. در بدنه و ساختار این مشخصه‌ها، توابع متعددی از جمله توابع تتای ژاکوبی، تابع اتای ددکیند و توابع اپل ظاهر می‌شوند. توابع تتای ژاکوبی از توابع پر کاربرد در ریاضیات و فیزیک هستند. این توابع توسط ژاکوبی به عنوان توابع دو دوره‌ای[۲] روی فضای مختلط معرفی شده است[۱]. توابع تتای ژاکوبی در ساختمان

[۱] characters

[۲] double-periodic

مشخصه‌های آفین ابر جبر لی $sl(2|1)$ و جبر ابر همدیس $N=2$ به کار می‌روند [۳,۲].

نمادگذاری ۱: توابع کلاسیکی مرومورفیک ژاکوبی $\theta_i:\mathbb{C}\to\mathbb{C}$ برای $(\tau,\nu)\in H\times\mathbb{C}$ و $(q,z):=(e^{2i\pi\tau},e^{2i\pi\nu})$ را به صورت زیر تعریف می‌کنیم [۴]:

$$\theta_1(q,z)=-iz^{\frac{1}{2}}\sum_{n\in\mathbb{Z}}q^{\frac{1}{2}(n+\frac{1}{2})^2}(-z)^n \qquad (۱)$$

$$\theta_2(q,z)=z^{\frac{1}{2}}\sum_{n\in\mathbb{Z}}q^{\frac{1}{2}(n+\frac{1}{2})^2}z^n \qquad (۲)$$

$$\theta_3(q,z)=\sum_{n\in\mathbb{Z}}q^{\frac{n^2}{2}}z^n \qquad (۳)$$

$$\theta_4(q,z)=\sum_{n\in\mathbb{Z}}q^{\frac{n^2}{2}}(-z)^n \qquad (۴)$$

در این مقاله قصد داریم برای نخستین بار یک چارچوب ضربی طیفی از توابع تتای ژاکوبی ایجاد نماییم.

برخی حاصل‌ضرب‌های جدید توابع تتای ژاکوبی

تعریف ۱: برای $(\tau,\nu)\in H\times\mathbb{C}$ ، $(q,z):=(e^{2i\pi\tau},e^{2i\pi\nu})$ و $\alpha\in\mathbb{R}$ تابع تتای طیف به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\alpha\Theta(q,z)=\sum_{n\in\mathbb{Z}}q^{\frac{1}{2}(n+\frac{\alpha}{2})^2}z^{(n+\frac{\alpha}{2})}e^{i\pi\frac{\alpha}{2}(n+\frac{\alpha}{2})(\alpha-1)} \qquad (۵)$$

درجه آزادی α در بالا طیفی بودن این تابع را نشان می‌دهد. جایی که $\theta_i(i=1,2,3,4)$ به ترتیب با $\alpha\Theta(\alpha=3,1,0,2)$ برابر است. دامنه نامتناهی از توابع مختلط بین دو تابع تتای ژاکوبی وجود دارد که همگی با استفاده از تعریف ۱ نمایش داده می‌شوند [۵].

لم ۱: برای هر $(\tau,\nu)\in H\times\mathbb{C}$ و $\alpha\in\mathbb{R}$ داریم:

$$\alpha\Theta(\tau,\nu)=e^{\frac{i\pi\alpha}{4}(4\nu+\alpha(\tau+\alpha-1))}\theta_3(\tau,\nu+\frac{\tau\alpha}{2}+(\alpha-1)\frac{\alpha}{4}) \qquad (۶)$$

لم ۲: برای هر $(\tau,\nu,\nu')\in H\times\mathbb{C}\times\mathbb{C}$ و $q=e^{2i\pi\tau}$ داریم:

$$\begin{aligned}\theta_3(q,\nu)\theta_3(q,\nu')&=\theta_3(q^2,\nu+\nu')\theta_3(q^2,\nu-\nu')\\&+\theta_2(q^2,\nu+\nu')\theta_4(q^2,\nu-\nu')\end{aligned} \qquad (۷)$$

لم ۳: خصوصیات شبه دوره‌ای تابع تتای طیف توسط روابط زیر نمایش داده می‌شوند:

برای $(\alpha,k)\in\mathbb{R}\times\mathbb{C}$ در دوره‌های کامل داریم:

$$\begin{aligned}&\alpha\Theta(\tau,\nu+k)=e^{\pi ik\alpha}\,\alpha\Theta(\tau,\nu),\\&\alpha\Theta(\tau,\nu+k\tau)=e^{\frac{-\pi ik}{2}(\alpha(\alpha-1)+4\nu+2k\tau)}\,\alpha\Theta(\tau,\nu),\\&\alpha\Theta(\tau,\nu+k\tau+k)=e^{\frac{-\pi ik}{2}(\alpha(\alpha-3)+4\nu+2k\tau)}\,\alpha\Theta(\tau,\nu).\end{aligned} \qquad (۸)$$

برای $(\alpha,\alpha')\in\mathbb{Z}\times2\mathbb{Z}$ در نیم دوره داریم:

$$\begin{aligned}&\alpha\Theta(\tau,\nu+\tfrac{1}{2})=e^{\pi i(\alpha-2)(\alpha-1)}\,\alpha-2\Theta(\tau,\nu),\\&\alpha'\Theta(\tau,\nu+\tfrac{\tau}{2})=e^{\frac{-\pi i}{4}(4\nu+\tau+\alpha'(3\alpha'+1))}\,\alpha'+1\Theta(\tau,\nu),\\&\alpha'+2\Theta(\tau,\nu+\tfrac{\tau+1}{2})=e^{\frac{\pi i}{4}(-4\nu-\tau+\alpha'(\alpha'+11)+8)}\,\alpha'+1\Theta(\tau,\nu).\end{aligned} \qquad (۹)$$

تمام لم ها در بالا توسط تعریف ۱ و روابط (۲) و (۳) اثبات می‌شوند [۶].

قضیه ۱: برای $(\tau,\nu,\nu')\in H\times\mathbb{C}\times\mathbb{C}$ و $(\alpha,\alpha')\in\mathbb{R}\times\mathbb{R}$ اتحاد ضرب دوتایی بین تابع تتای طیف به صورت زیر می‌باشد:

$$\begin{aligned}&\alpha\Theta(\tau,\nu)\,\alpha'\Theta(\tau,\nu')=\\&e^{\frac{-i\pi}{4}(4\nu'(\alpha-2\alpha')+\alpha'(\alpha-\alpha')(2\alpha'+\alpha-2)-\tau(5\alpha'^2-4\alpha\alpha'+\alpha^2)+4\nu\alpha')}\\&\times[\,\alpha\Theta(2\tau,\nu+\nu'-\tfrac{\tau}{2}(\alpha-\alpha')+\tfrac{\alpha'}{4}(\alpha'-1))\\&\times\alpha'\Theta(2\tau,\nu-\nu'+\tfrac{\tau}{2}(\alpha-3\alpha')+\tfrac{\alpha}{4}(\alpha-1)-\tfrac{\alpha'}{2}(\alpha'-1)+\tau)\\&+e^{i\pi(2\nu-\tau(\alpha'-1)+\frac{\alpha}{2}(\alpha-1))}\,\alpha\Theta(2\tau,\nu+\nu'-\tfrac{\tau}{2}(\alpha-\alpha')+\tfrac{\alpha'}{4}(\alpha'-1)+\tau)\\&\times\alpha'\Theta(2\tau,\nu-\nu'+\tfrac{\tau}{2}(\alpha-3\alpha')+\tfrac{\alpha}{4}(\alpha-1)-\tfrac{\alpha'}{2}(\alpha'-1)+\tau)].\end{aligned} \qquad (۱۰)$$

نتیجه ۱: برای $\alpha\leftrightarrow\alpha'$ و $\nu\leftrightarrow\nu'$ قضیه ۱ ناوردا باقی می‌ماند. بنابراین داریم:

$$\begin{aligned}&\alpha\Theta(2\tau,\nu+\nu'-\tfrac{\tau}{2}(\alpha-\alpha')+\tfrac{\alpha'}{4}(\alpha'-1))\\&\times\alpha'\Theta(2\tau,\nu'-\nu-\tfrac{\tau}{2}(\alpha+\alpha')-\tfrac{\alpha}{4}(\alpha-1))\\&=e^{\frac{i\pi}{2}[4(\alpha\nu'-\alpha'\nu)+\alpha\alpha'(\alpha'-\alpha)]}\\&\times\alpha'\Theta(2\tau,\nu+\nu'+\tfrac{\tau}{2}(\alpha-\alpha')+\tfrac{\alpha}{4}(\alpha-1))\\&\times\alpha\Theta(2\tau,\nu-\nu'-\tfrac{\tau}{2}(\alpha+\alpha')-\tfrac{\alpha'}{4}(\alpha'-1)).\end{aligned} \qquad (۱۱)$$

نتیجه ۲: برای $(\alpha,\alpha')\in\mathbb{R}\times\mathbb{R}$ اتحاد ضرب دوتایی تابع تتای طیف می‌تواند بر حسب توابع تتای ژاکوبی بازنویسی شوند.

لم ٤: برای هر $(\tau,\nu)\in H\times\mathbb{C}$ و $(\alpha,\beta)\in\mathbb{R}\times\mathbb{R}$ تساوی زیر را داریم:

$$\begin{aligned}&\alpha\Theta(\tau,\nu)=e^{\frac{i\pi}{4}(\alpha-\beta)(\alpha^2+4\nu+\alpha(\tau-1)-\beta\tau)}\\&\times\beta\Theta(\tau,\nu+\tfrac{\tau}{2}(\alpha-\beta)+\tfrac{1}{4}(\alpha(\alpha-1)-\beta(\beta-1))).\end{aligned} \qquad (۱۲)$$

با استفاده از قضیه ۱ و لم ٤ می توان به راحتی ضرب های دوتایی بین تابع تتای طیف و توابع تتای ژاکوبی را بدست آورد.

مثال ۱: اگر $(\alpha,\alpha')=(-\frac{1}{2},\frac{1}{4})$ داریم:

$$-\tfrac{1}{2}\Theta(\tau,\nu)\tfrac{1}{4}\Theta(\tau,\nu')=e^{-\frac{i\pi}{4}(\nu-4\nu'-\frac{17\tau}{16}+\frac{3}{8})}$$
$$\times\Big(-\tfrac{1}{2}\Theta(2\tau,\nu+\nu'+\tfrac{3\tau}{8}-\tfrac{3}{64})\tfrac{1}{4}\Theta(2\tau,\nu-\nu'-\tfrac{5\tau}{8}-\tfrac{9}{32})+e^{i\pi(2\nu+\frac{3}{8}(2\tau+1))}$$
$$\times-\tfrac{1}{2}\Theta(2\tau,\nu+\nu'+\tfrac{11\tau}{8}-\tfrac{3}{64})\tfrac{1}{4}\Theta(2\tau,\nu-\nu'+\tfrac{3\tau}{8}-\tfrac{9}{32})\Big).$$

با استفاده از لم ٤ و کمی محاسبات می‌توان نوشت:

$$-\tfrac{1}{2}\Theta(\tau,\nu)\tfrac{1}{4}\Theta(\tau,\nu')=e^{\frac{i\pi}{4}(2\nu+5\nu'+\frac{1}{16}(29\tau+\frac{5}{4}))}$$
$$\times\Big(\theta_1(2\tau,\nu+\nu'+\tfrac{7\tau}{8}-\tfrac{23}{64})\ \theta_4(2\tau,\nu-\nu'-\tfrac{3\tau}{8}+\tfrac{15}{64})+e^{\frac{i\pi}{4}(8\nu+6\tau+\frac{3}{2})}$$
$$\times\theta_1(2\tau,\nu+\nu'+\tfrac{15\tau}{8}-\tfrac{23}{64})\ \theta_4(2\tau,\nu-\nu'+\tfrac{5\tau}{8}+\tfrac{15}{64})\Big).$$

مثال ۲: اگر $(\alpha,\alpha')=(\frac{5}{2},-\frac{7}{2})$ داریم:

$$\tfrac{5}{2}\Theta(\tau,\nu)_{-\frac{7}{2}}\Theta(\tau,\nu')=e^{-\frac{i\pi}{4}(\frac{104}{3}\nu'-14\nu-\frac{31485\tau}{36}+\frac{23387}{18})}$$
$$\times\Big(\tfrac{5}{2}\Theta(2\tau,\nu+\nu'-\tfrac{31\tau}{12}+\tfrac{63}{16})\ {}_{-\frac{7}{2}}\Theta(2\tau,\nu-\nu'+\tfrac{73\tau}{12}-\tfrac{547}{72})+e^{i\pi(2\nu+\frac{9\tau}{2}+\frac{5}{9})}$$
$$\times\tfrac{5}{2}\Theta(2\tau,\nu+\nu'-\tfrac{19\tau}{12}+\tfrac{63}{16})\ {}_{-\frac{7}{2}}\Theta(2\tau,\nu-\nu'+\tfrac{85\tau}{12}-\tfrac{547}{72})\Big).$$

دوباره با استفاده از لم ٤ داریم:

$$\tfrac{5}{2}\Theta(\tau,\nu)_{-\frac{7}{2}}\Theta(\tau,\nu')=e^{-\frac{i\pi}{864}(11520\nu+2160\nu'-173475\tau+8825)}$$
$$\times\Big(\theta_4(2\tau,\nu+\nu'-\tfrac{23\tau}{12}+\tfrac{607}{144})\ \theta_4(2\tau,\nu-\nu'+\tfrac{7\tau}{12}-\tfrac{599}{144})+e^{\frac{i\pi}{72}(144(\nu+\nu')-132\tau+607)}$$
$$\times\theta_4(2\tau,\nu+\nu'+\tfrac{\tau}{12}+\tfrac{607}{144})\ \theta_1(2\tau,\nu-\nu'+\tfrac{7\tau}{12}-\tfrac{743}{144})\Big).$$

می‌توان طرف راست هر یک از روابط مثال های قبل را با استفاده از خصوصیات دوره‌ای بر حسب هر یک از توابع تتای ژاکوبی نوشت.

نتیجه۳: ما می‌توانیم به طور مستقیم روابط زیر را بدست آوریم:

اگر $\alpha=3$ و $\alpha'=0$:

$$\theta_1(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')=-ie^{\frac{i\pi}{4}(4\nu+\tau)}\times(\theta_1(2\tau,\nu+\nu'+\tfrac{\tau}{2})\quad(13)$$
$$\theta_1(2\tau,\nu-\nu'+\tfrac{\tau}{2})+\theta_4(2\tau,\nu+\nu'+\tfrac{\tau}{2})\theta_4(2\tau,\nu-\nu'+\tfrac{\tau}{2})).$$

اگر $\alpha=3$ و $\alpha'=2$:

$$\theta_1(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')=ie^{\frac{i\pi}{4}(-4\nu+\tau)}\times(\theta_4(2\tau,\nu+\nu'-\tfrac{\tau}{2})\quad(14)$$
$$\theta_4(2\tau,\nu-\nu'-\tfrac{\tau}{2})-\theta_4(2\tau,\nu+\nu'-\tfrac{\tau}{2})\theta_4(2\tau,\nu-\nu'-\tfrac{\tau}{2})).$$

اگر $\alpha=1$ و $\alpha'=0$:

$$\theta_4(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')=e^{\frac{i\pi}{4}(4\nu+\tau)}\times(\theta_4(2\tau,\nu+\nu'+\tfrac{\tau}{2})\quad(15)$$
$$\theta_4(2\tau,\nu-\nu'+\tfrac{\tau}{2})+\theta_4(2\tau,\nu+\nu'+\tfrac{\tau}{2})\theta_4(2\tau,\nu-\nu'+\tfrac{\tau}{2})).$$

اگر $\alpha=1$ و $\alpha'=2$:

$$\theta_4(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')=e^{\frac{i\pi}{4}(4\nu+\tau)}\times(\theta_4(2\tau,\nu+\nu'+\tfrac{\tau}{2})\quad(16)$$
$$\theta_4(2\tau,\nu-\nu'+\tfrac{\tau}{2})-\theta_1(2\tau,\nu+\nu'+\tfrac{\tau}{2})\theta_1(2\tau,\nu-\nu'+\tfrac{\tau}{2})).$$

اتحادهای ارائه شده در نتیجه۳ همگی به طور مستقیم از قضیه۱ استخراج می‌شوند. به طوریکه در پژوهش‌های گذشته هیچگاه به این دقت بیان و استفاده نشده‌اند [۴].

در جدول۱، برای نخستین بار در این مقاله، طبقه‌بندی کاملی از تمامی اتحادهای حاصل‌ضرب دوتایی توابع تتای ژاکوبی ارائه می‌شود. این مجموعه جامع از اتحادها، که پیش از این در دسترس نبود، همگی به طور مستقیم و با روشی ساده از قضیه ۱ قابل استخراج هستند.

جدول۱ : اتحادهای شامل ضرب توابع تتای ژاکوبی، بطوریکه $\varepsilon=\nu+\nu'$، $\varepsilon'=\nu-\nu'$، $\dot{\varepsilon}=\varepsilon+\frac{\tau}{2}$ و $\dot{\varepsilon}'=\varepsilon'+\frac{\tau}{2}$، $\xi=e^{\frac{i\pi}{4}(\tau+4\nu)}$.

#	ضرب‌های دوتایی از توابع تتای ژاکوبی
$\theta_1(\tau,\nu)\theta_1(\tau,\nu')$	$\theta_4(2\tau,\varepsilon)\theta_4(2\tau,\varepsilon')-\theta_4(2\tau,\varepsilon)\theta_4(2\tau,\varepsilon')$
$\theta_1(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')$	$\theta_1(2\tau,\varepsilon)\theta_4(2\tau,\varepsilon')+\theta_4(2\tau,\varepsilon)\theta_1(2\tau,\varepsilon')$
$\theta_1(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')$	$-i\xi(\theta_1(2\tau,\dot{\varepsilon})\theta_1(2\tau,\dot{\varepsilon}')+\theta_4(2\tau,\dot{\varepsilon})\theta_4(2\tau,\dot{\varepsilon}'))$
$\theta_1(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')$	$i\xi(\theta_4(2\tau,\dot{\varepsilon})\theta_4(2\tau,\dot{\varepsilon}')-\theta_4(2\tau,\dot{\varepsilon})\theta_4(2\tau,\dot{\varepsilon}'))$
$\theta_4(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')$	$\theta_4(2\tau,\varepsilon)\theta_4(2\tau,\varepsilon')+\theta_4(2\tau,\varepsilon)\theta_4(2\tau,\varepsilon')$
$\theta_4(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')$	$\xi(\theta_4(2\tau,\dot{\varepsilon})\theta_4(2\tau,\dot{\varepsilon}')+\theta_4(2\tau,\dot{\varepsilon})\theta_4(2\tau,\dot{\varepsilon}'))$
$\theta_4(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')$	$\xi(\theta_4(2\tau,\dot{\varepsilon})\theta_4(2\tau,\dot{\varepsilon}')-\theta_1(2\tau,\dot{\varepsilon})\theta_1(2\tau,\dot{\varepsilon}'))$
$\theta_4(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')$	$\theta_4(2\tau,\varepsilon)\theta_4(2\tau,\varepsilon')+\theta_4(2\tau,\varepsilon)\theta_4(2\tau,\varepsilon')$
$\theta_4(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')$	$\theta_4(2\tau,\varepsilon)\theta_4(2\tau,\varepsilon')-\theta_1(2\tau,\varepsilon)\theta_1(2\tau,\varepsilon')$
$\theta_4(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')$	$\theta_4(2\tau,\varepsilon)\theta_4(2\tau,\varepsilon')-\theta_4(2\tau,\varepsilon)\theta_4(2\tau,\varepsilon')$

نتیجه٤: می‌توان برخی از فرمول‌های جمع جدول ۱ را به صورت زیر بدست آورد:

$$\theta_1^2(\tau,\nu)\theta_4^2(\tau,\nu')-\theta_4^2(\tau,\nu)\theta_4^2(\tau,\nu')=\quad(17)$$
$$-2\xi^2(\theta_1^2(2\tau,\varepsilon)\theta_1^2(2\tau,\varepsilon')+\theta_4^2(2\tau,\varepsilon)\theta_4^2(2\tau,\varepsilon'))$$
$$\theta_1^2(\tau,\nu)\theta_4^2(\tau,\nu')-\theta_4^2(\tau,\nu)\theta_4^2(\tau,\nu')=\quad(18)$$
$$-2\xi^2(\theta_4^2(2\tau,\varepsilon)\theta_4^2(2\tau,\varepsilon')+\theta_4^2(2\tau,\varepsilon)\theta_4^2(2\tau,\varepsilon'))$$
$$\theta_4(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')+i\theta_1(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')=2\xi\theta_4(2\tau,\varepsilon)\theta_4(2\tau,\varepsilon')\quad(19)$$
$$\theta_4(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')+i\theta_4(\tau,\nu)\theta_4(\tau,\nu')=2\xi\theta_4(2\tau,\varepsilon)\theta_4(2\tau,\varepsilon')\quad(20)$$

با مربع کردن و تفریق روابط (۱۳) و (۱٦) و همچنین (۱٤) و (۱۵) در نتیجه۳ می‌توان روابط (۱۷) و (۱۸) را اثبات کرد. همچنین با

جمع روابط (۱۳) و (۱۶) با (۱۴) و (۱۵)، روابط (۱۹) و (۲۰) نیز اثبات می‌شود.

لیست کامل از فرمول های جمع از گذشته موجود است [۴]. اما روابط موجود در نتیجه ٤ برای اولین بار در مقاله حاضر به طور مستقیم بدست آمدند.

اثبات قضیه ۱:

با استفاده از لم ۱ می‌توان نوشت:

$$\alpha^{\Theta(\tau,\nu)}\alpha'^{\Theta(\tau,\nu')}=$$
$$e^{\frac{i\pi}{4}(4(\nu\alpha+\nu'\alpha')+(\tau-1)(\alpha^2+\alpha'^2)+(\alpha\alpha')^2)}$$
$$\times\theta_3(\tau,\nu+\frac{\tau\alpha}{2}+\frac{\alpha}{4}(\alpha-1))\theta_3(\tau,\nu'+\frac{\tau\alpha'}{2}+\frac{\alpha'}{4}(\alpha'-1)).$$

با استفاده از لم۲ می‌توان رابطه فوق را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\alpha^{\Theta(\tau,\nu)}\alpha'^{\Theta(\tau,\nu')}=$$
$$e^{\frac{i\pi}{4}(4(\nu\alpha+\nu'\alpha')+(\tau-1)(\alpha^2+\alpha'^2)+(\alpha\alpha')^2)}$$
$$\times(\theta_3(2\tau,\nu+\nu'+\frac{\tau}{2}(\alpha+\alpha')+\frac{\alpha}{4}(\alpha-1)+\frac{\alpha'}{4}(\alpha'-1))$$
$$\times\theta_3(2\tau,\nu-\nu'+\frac{\tau}{2}(\alpha-\alpha')+\frac{\alpha}{4}(\alpha-1)-\frac{\alpha'}{4}(\alpha'-1))$$
$$+\theta_2(2\tau,\nu+\nu'+\frac{\tau}{2}(\alpha+\alpha')+\frac{\alpha}{4}(\alpha-1)+\frac{\alpha'}{4}(\alpha'-1))$$
$$\times\theta_2(2\tau,\nu-\nu'+\frac{\tau}{2}(\alpha-\alpha')+\frac{\alpha}{4}(\alpha-1)-\frac{\alpha'}{4}(\alpha'-1)).$$

حال با اعمال $\tau\to 2\tau$ و $\nu\to\nu+\nu'-\frac{\tau}{2}(\alpha-\alpha')+\frac{\alpha'}{4}(\alpha'-1)$ در لم ۱، داریم:

$$\theta_3(2\tau,\nu+\nu'+\frac{\tau}{2}(\alpha+\alpha')+\frac{\alpha}{4}(\alpha-1)+\frac{\alpha'}{4}(\alpha'-1))=e^{-\frac{i\pi\alpha}{4}(4(\nu+\nu')+\alpha(\alpha-1))}$$
$$\times e^{-\frac{i\pi\alpha\alpha'}{4}(2\tau+\alpha'-1)}\alpha^{\Theta(2\tau,\nu+\nu'-\frac{\tau}{2}(\alpha-\alpha')+\frac{\alpha'}{4}(\alpha'-1))}$$

و به طور مشابه با اعمال $\tau\to 2\tau$، $\alpha\to\alpha'$ و $\nu\to\nu-\nu'+\frac{\tau}{2}(\alpha-3\alpha')+\frac{\alpha}{4}(\alpha-1)-\frac{\alpha'}{2}(\alpha'-1)$، داریم:

$$\theta_3(2\tau,\nu-\nu'+\frac{\tau}{2}(\alpha-\alpha')+\frac{\alpha}{4}(\alpha-1)-\frac{\alpha'}{4}(\alpha'-1))=e^{-\frac{i\pi\alpha'}{4}(4(\nu-\nu')+\alpha(\alpha-1+2\tau))}$$
$$\times e^{\frac{i\pi\alpha'^2}{4}(4\tau+\alpha'-1)}\alpha'^{\Theta(2\tau,\nu-\nu'+\frac{\tau}{2}(\alpha-3\alpha')+\frac{\alpha}{4}(\alpha-1)-\frac{\alpha'}{2}(\alpha'-1))}$$

حال با استفاده از لم۳ می‌توان نوشت:

$$\theta_3(2\tau,\nu+\nu'+\frac{\tau}{2}(\alpha+\alpha')+\frac{\alpha}{4}(\alpha-1)+\frac{\alpha'}{4}(\alpha'-1))=e^{-\frac{i\pi}{4}(\alpha-1)(4(\nu+\nu')+\alpha(\alpha-1))}$$
$$\times e^{-\frac{i\pi}{4}(\alpha-1)(\alpha'(\alpha'-1)+2\tau(\alpha'+1))}\alpha^{\Theta(2\tau,\nu+\nu'-\frac{\tau}{2}(\alpha-\alpha')+\frac{\alpha'}{4}(\alpha'-1)+\tau)}$$

و

$$\theta_3(2\tau,\nu-\nu'+\frac{\tau}{2}(\alpha-\alpha')+\frac{\alpha}{4}(\alpha-1)-\frac{\alpha'}{4}(\alpha'-1))=$$
$$\times e^{\frac{i\pi}{4}(\alpha'-1)(\alpha-\alpha'^2+4\nu'-2\alpha\tau-2(2\nu+\tau)+\alpha'(\alpha'-1+4\tau))}$$
$$\alpha'^{\Theta(2\tau,\nu-\nu'+\frac{\tau}{2}(\alpha-2\alpha')+\frac{\alpha}{4}(\alpha-1)-\frac{\alpha'}{2}(\alpha'-1)+\tau)}$$

در اینجا با قرار دادن تمام روابط اخیر در کنار هم و کمی ساده-سازی، عبارت قضیه ۱ بدست می‌آید. □

نتیجه گیری

ما یک چارچوب طیفی از ضرب‌های تابع تتای طیف را ایجاد کردیم(قضیه۱). سپس برای اولین بار به کمک آن، ضرب‌های دوتایی از تابع تتای طیف را بر حسب توابع تتای ژاکوبی بازنویسی کردیم. به کمک قضیه۱ ما توانستیم اتحادهای ضرب دوتایی بین توابع تتای ژاکوبی را مستقیما و ساده و بدون محاسبات پیچیده بدست آوریم (جدول۱) که می‌تواند اثبات ناوردایی مشخصه‌های ابر جبر آفین لی $sl(2|1)$ و جبر ابر همدیس $N=2$ را آسان کند [۵] و [۶].

مرجع‌ها

[۱] C.G.J. Jacobi; "*Fundamenta Nova Theoriae Functionum Ellipticarum*"; Konigsberg. (1829)

[۲] A. Schwimmer and N. Seiberg; "Comments on the N = 2, 3, 4 superconformal algebras in two dimensions"; *Phys. Lett. B* **184**, (1986) 191-196.

[۳] V. G. Kac and M. Wakimoto; "Integrable highest weight modules over affine superalgebras and Appell's function"; *Math. Phys* **215**, (2001) ٦٣١-٦٨٢.

[٤] D. F. Lawden; "*Elliptic Functions and Applications*"; Vol. 80 Springer, New York (1989).

[٥] M. R. Bahraminasab and M. Ghominejad; "N = 2 superconformal characters as the residue of sl(2|1) affine Lie superalgebra characters by defining a new vocabulary for Jacobi theta functions"; *J. Geom. Phys.* **156**, (2020) 11pp.

[٦] M. R. Bahraminasab and M. Ghominejad; "S-modular transformation of the N=2 superconformal algebra characters"; *Theor. Math. Phys.* ۲۱۷, (۲۰۲۳) ۲٦۰-۲۸٤.

کران هندسی رشد فضای پیکربندی قابل دسترس در انبساط آزاد زمان‌محدود گاز کامل

خاموشی، سیدآرش[۱]؛ عسگریان، فاطمه[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان ، اصفهان ۸۳۱۱۱-۸۴۱۵۶

چکیده

در انبساط آزاد گاز کامل، تغییر آنتروپی از مقایسه حالت‌های اولیه و نهایی به دست می‌آید و به زمان وابسته نیست. با این حال، در زمان‌های متناهی، محدودیت سرعت ذرات سبب می‌شود تنها بخشی از فضای پیکربندی نهایی برای سیستم قابل دسترس باشد. در این مقاله، کرانی برای رشد فضای پیکربندی قابل دسترس استخراج می‌شود. ابتدا مسئله برای یک ذره بررسی شده و سپس به گاز کامل N ذره‌ای تحت قید انرژی کل ثابت تعمیم داده می‌شود. نشان داده می‌شود که بیشینه رشد آنتروپی پیکربندی در حالت کلاسیک را می‌توان بر حسب زمان، انرژی کل، تعداد ذرات و اندازه اولیه سیستم بیان کرد. همچنین تعمیم نسبیتی این کران به دست می‌آید. نتایج حاصل کران‌های صریحی برای گسترش فضای پیکربندی قابل دسترس در زمان محدود ارائه می‌کنند.

واژه های کلیدی: *انبساط آزاد، فضای پیکربندی قابل دسترس، آنتروپی پیکربندی، ترمودینامیک زمان‌محدود*

A Geometric Bound on the Growth of Accessible Configuration Space During Finite-Time Free Expansion of an Ideal Gas

Khamooshi, Seyed Arash[1]; Asgarian, Fatemeh[1]

[1]*Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran*

Abstract

In the free expansion of an ideal gas, the entropy change is conventionally obtained by comparing the initial and final equilibrium states and is independent of the elapsed time. However, at finite times, the finite speed of particles restricts the system to only a subset of the final configuration space. In this work, an upper bound on the growth of the accessible configuration space is derived. The problem is first analyzed for a single particle and then generalized to an N-particle ideal gas under the constraint of constant total energy. It is shown that the maximum growth of configurational entropy in the classical regime can be expressed in terms of time, total energy, particle number, and the initial size of the system. A relativistic extension of the bound is also obtained. The resulting expressions provide explicit bounds on the expansion of the accessible configuration space during finite-time evolution.

***Keywords**: Free Expansion, Accessible Configuration Space, Configurational Entropy, Finite-Time Thermodynamics*
PACS No. 5

مقدمه

در توصیف متعارف انبساط آزاد گاز کامل، افزایش آنتروپی از مقایسه حالت‌های اولیه و نهایی سیستم به دست می‌آید و معمولاً به زمان لازم برای دستیابی به حالت نهایی وابسته نیست. با این حال، در هر زمان متناهی، محدودیت سرعت حرکت ذرات سبب می‌شود تنها بخشی از فضای پیکربندی نهایی برای سیستم قابل دسترس باشد. می‌توان پرسید که تحت قید انرژی کل ثابت، بیشترین میزان گسترش فضای پیکربندی قابل دسترس در یک زمان معین چقدر است.

در این مقاله، با استفاده از یک مدل هندسی ساده، کرانی برای رشد فضای پیکربندی قابل دسترس در انبساط آزاد استخراج می‌شود. نتیجه ابتدا برای یک مدل تک‌ذره‌ای به دست آمده و سپس به گاز کامل N ذره‌ای در رژیم‌های کلاسیک و نسبیتی تعمیم داده می‌شود.

روابط حاصل، کران‌هایی صریح بر رشد فضای پیکربندی قابل دسترس بر حسب زمان، انرژی کل و اندازه اولیه سیستم ارائه می‌کنند. تأکید می‌شود که نتایج این مقاله به صورت کران‌های هندسی بر فضای پیکربندی قابل دسترس تفسیر می‌شوند و لزوماً معادل آنتروپی تعادلی بولتزمن نیستند.

مدل هندسی تک‌ذره‌ای برای فضای پیکربندی قابل دسترس در انبساط آزاد

در این بخش، مسئله تک‌ذره‌ای صرفاً به عنوان یک مدل هندسی مقدماتی برای استخراج کران فضای مکانی قابل دسترس بررسی می‌شود. هدف از این بخش تعریف آنتروپی ترمودینامیکی برای یک ذره نیست، بلکه به دست آوردن رابطه‌ای برای رشد حجم پیکربندی‌های مکانی قابل دسترس در زمان محدود است. این نتیجه در ادامه به سامانه چندذره‌ای تعمیم داده خواهد شد که در آن کمیت مورد بحث تفسیر آنتروپی پیکربندی پیدا می‌کند. در این مقاله، کمیت Σ در ابتدا صرفاً به عنوان لگاریتم اندازه مجموعه پیکربندی‌های مکانی قابل دسترس تعریف می‌شود و لزوماً معادل آنتروپی ترمودینامیکی نیست. هدف از این بخش استخراج کران‌های هندسی برای رشد این مجموعه در زمان محدود است. تنها در بخش چندذره‌ای و تحت فرض استقلال آماری درجات آزادی مکانی ذرات، این کمیت می‌تواند تفسیری مشابه آنتروپی پیکربندی پیدا کند.

کره‌ای با شعاع r_1 فرض کنید که برای شروع، حاوی یک ذره باشد. این کره، هم‌مرکز با کره بزرگ‌تری به شعاع r_2 است و در فضای بین دو کره، خلأ برقرار است. تغییر معیار گسترش پیکربندی تحت برداشتن مرزهای کره کوچک‌تر در ترمودینامیک زمان‌نامحدود، مشابه دیگر مسئله‌های پیکربندی انبساط آزاد به صورتی از رابطه بولتزمن نوشته می‌شود[۱]. در چنین شرایطی تغییر معیار گسترش پیکربندی سیستم، به صورت رابطه بولتزمن برای حجم مکان‌های محتمل اولیه و ثانویه است؛ که در رابطه ۱ آمده است.

$$\Delta\sum = kln\left(\frac{V_2}{V_1}\right) = kln\left(\frac{r_2^3}{r_1^3}\right) \qquad (1)$$

در صورتی که مسئله را یک مسئله زمان‌محدود ببینیم تا رسیدن به شعاع r_2، ذره هر لحظه در کره‌ای به شعاع $r(t) < r_2$ قرار دارد.

در صورت فرض وجود حرکت کاتوره‌ای برای ذره –که تندی و جهت، ثابت نیست–، مکان احتمالی آن در حجم کره‌ای با شعاع‌های r(t) قرار می‌گیرد. چرا که حرکت تصادفی، در حالتی که ذره، هیچ تغییر جهت و تندی نداشته باشد؛ و با بیشینه تندی خود حرکت کند؛ در شعاع $r(t)_{max}$ قرار می‌گیرد؛ و در حالتی که ذره، با تغییر جهت، و حفظ تندی، تعداد گام‌های برابر در راستاهای مخالف یکدیگر، بردارد؛ در مکان ابتدایی خود، قرار می‌گیرد. هر حالت تغییر جهت و تندی میان این دو حالت، مکان احتمالی میان این دو حالت دارد. با در نظر گرفتن این شرایط، مقدار بیشینه‌ای که تغییر معیار گسترش پیکربندی می‌تواند داشته باشد؛ و توجه داریم که لزوما محتمل‌ترین حالت نیست؛ به صورت رابطه ۲ است. رابطه زیر به عنوان یک کران بالا بر اندازه فضای پیکربندی قابل دسترس در نظر گرفته می‌شود. این کران الزاماً متناظر با محتمل‌ترین مسیر دینامیکی ذره نیست، بلکه تمامی مسیرهایی را که با محدودیت بیشینه اندازه سرعت سازگار باشند، در بر می‌گیرد.

$$\Delta\sum \le kln\left(\left(\frac{(vt)^1 + r_1^1}{r_1^1}\right)^3\right) = 3kln\left(1 + \frac{(vt)^1}{r_1^1}\right) \qquad (2)$$

تغییر معیار گسترش پیکربندی در رابطه ۲ آن‌گاه بیشینه می‌شود که ذره با بیشینه تندی که برای آن متصوریم، حرکت کند. با این تعبیر، رابطه ۲ برای حالات بیشینه، به شکل زیر در می‌آید.

$$\Delta\sum_{max} = 3kln\left(1 + \frac{(v_{max}t)^1}{r_1^1}\right) \qquad (3)$$

تعمیم به مسئله انبساط آزاد سیستم چندذره‌ای

اگر مشابه یک مسئله انبساط آزاد واقعی، درمورد N ذره گاز آرمانی صحبت کنیم؛ تعمیم $\sum$ به یک سامانه چندذره‌ای، می‌تواند به عنوان آنتروپی پیکربندی سیستم، تعبیر شود. در ادامه فرض می‌کنیم که گاز به اندازه کافی رقیق است که همبستگی‌های مکانی میان ذرات در مرتبه اول قابل صرف‌نظر کردن باشند. تحت این فرض، فضای پیکربندی کل سیستم را می‌توان به صورت حاصل‌ضرب فضاهای پیکربندی تک‌ذره‌ای در نظر گرفت. نتایج این بخش به صورت یک کران بالا برای فضای پیکربندی قابل دسترس سیستم تفسیر می‌شوند.

در چنین سیستمی هر ذره –به صورت بالقوه– می‌تواند مکان‌های احتمالی مشابه مسئله تک‌ذره‌ای را اختیار کند. البته به شرطی که برای همه ذرات، تندی v_{smax} را متصور شویم؛ مقداری که آنتروپی پیکربندی را بیشینه می‌کند.

چنین تصوری که اگر v_{smax} در دسترس برای همه ذرات، مقدار یکسانی داشته باشد؛ از تلاش ما برای به دست آوردن کران بالای آنتروپی پیکربندی ناشی می‌شود. در حالتی که توزیع سرعت در ذرات، یکنواخت نباشد؛ آنتروپی پیکربندی کل سیستم به صورت

جمع مقادیر مختلف آنتروپی‌های پیکربندی ذرات، نوشته می‌شود؛ که آن را در رابطه ۴ نشان داده‌ایم.

$$\Delta S_{config,total} = \sum_i^N \Delta\sum_i = \sum_i^N 3kln\left(1+\frac{(v_i t)^1}{r_1^1}\right) \qquad (4)$$

همچنین رابطه ۵، انرژی کل سیستم؛ E_{total} –که در چنین مسئله‌ای برابر با مجموع انرژی جنبشی ذرات سیستم است– را بر حسب سرعت‌های متفاوت ذرات، نشان می‌دهد. و m جرم هر ذره از گاز آرمانی مفروض مسئله است.

$$E_{total} = \frac{1}{2}m\sum_i^N v_i^2 = const \qquad (5)$$

برای تعیین شرایطی که کران حاصل از رابطه ۴ را بیشینه می‌کند، از این واقعیت استفاده می‌کنیم که انرژی کل سیستم در انبساط آزاد گاز کامل ثابت باقی می‌ماند[۲]. بنابراین مسئله به یافتن توزیع سرعت‌هایی تبدیل می‌شود که تحت قید انرژی ثابت، بیشترین مقدار ممکن برای عبارت سمت راست رابطه ۴ را ایجاد کنند.

این، ما را به استفاده از تابع لاگرانژ برای بیشینه کردن رابطه ۴ سوق می‌دهد. مقدار ثابت $a = \frac{t}{r_1} > 0$ را تعریف می‌کنیم. با توجه به مثبت بودن مقادیر تندی، تابع لاگرانژ به صورت زیر است[۳].

$$L = \sum_i^N \ln(1+av_i) - \lambda(\sum_i^N v_i^2 - C) \qquad (6)$$

که در آن $C = \frac{2E_{total}}{m}$. تابع لاگرانژ را در رابطه شرط اکسترمم قرار می‌دهیم که در رابطه ۶.۱ آمده است.

$$\frac{\partial L}{\partial v_i} = \frac{a}{1+av_i} - 2\lambda v_i = 0 \qquad (6.1)$$

بنابراین رابطه ۶.۲ به ازای تمام مقادیر i برقرار است.

$$\frac{a}{1+av_i} = 2\lambda v_i \qquad (6.2)$$

رابطه ۶.۲ فقط به v_i بستگی دارد؛ به این معنی که تمام حالت $v_1 = v_2 = \cdots = v_N$ یک حالت بحرانی است.

از آنجا که تابع $\ln(1+av_i)$ مشتق دومی برابر با تابع $\frac{-a^2}{(1+av_i)\text{^}2} < 0$ دارد؛ یعنی مقعر است؛ و جمع روی توابع مقعر نیز، مقعر است. لذا اکسترمم مذکور، مقدار بیشینه را نشان می‌دهد و می‌گوید بیشینه زمانی رخ می‌دهد که توزیع متغیر، یکنواخت باشد. به این معنی که برابری اندازه سرعت‌ها کاندید بیشینه کردن عبارت ۴ تحت قید انرژی ثابت محسوب می‌شود. بنابراین در چارچوب کران‌گذاری حاضر، حالت اندازه سرعت‌های مساوی به عنوان حالت بیشینه‌کننده آنتروپی پیکربندی در نظر گرفته می‌شود. باید توجه داشت که برابری سرعت‌ها در اینجا به عنوان حالت تعادل ترمودینامیکی سیستم تفسیر نمی‌شود. این حالت صرفاً جواب مسئله بهینه‌سازی ریاضی برای به دست آوردن کران بالای رشد فضای پیکربندی قابل دسترس تحت قید انرژی کل ثابت است.

با چنین تصویری، کران آنتروپی پیکربندی بیشینه که در رابطه ۷ تعریف شده؛ به صورت زیر تعمیم داده می‌شود.

$$\Delta S_{config,max} = 3Nkln\left(1+\frac{v_{smax}t}{r_1}\right) \qquad (7)$$

به علاوه، مقدار v_{smax} را می‌توان از رابطه ۵ و نتیجه ۶.۲ به صورت زیر نوشت[۴].

$$E_{total} = \frac{1}{2}mNv_{smax}^2 \rightarrow v_{smax} = \sqrt{\frac{2E_{total}}{mN}} \qquad (8)$$

با توجه به رابطه ۷ و ۸ می‌توان یک رابطه کلاسیک نهایی را به دست آورد که در رابطه ۹ بیان شده است.

$$\Delta S_{config,max} = 3Nkln\left(1+\frac{\sqrt{\frac{2E_{total}}{mN}}t}{r_1}\right) \qquad (9)$$

با میل دادن شعاع کره بزرگ‌تر؛ یعنی r_2؛ به بینهایت؛ شرط $r(t) < r_2$ در همه زمان‌ها، برقرار می‌شود. همچنین مسئله به انبساط آزاد زمان‌محدود N ذره گاز کامل با حجم اولیه V_1 در خلأ تبدیل می‌شود. در چنین مسئله‌ای –که سرعت‌ها در محدوده کلاسیک قرار دارند– کران بالای آنتروپی پیکربندی با گذشت زمان t، در رابطه ۹ آمده است و هر آنتروپی پیکربندی در چنین شرایطی، از مقدار آن کمتر است. به عبارت دیگر، رابطه ۱۰ را به دست آورده‌ایم. باید توجه داشت که رابطه ۱۰ کرانی بر رشد آنتروپی پیکربندی در زمان محدود ارائه می‌کند و لزوماً با آنتروپی تعادلی بولتزمن در حد زمان‌های بسیار بزرگ یکسان نیست. این کمیت میزان گسترش فضای مکانی قابل دسترس سیستم را تا زمان t توصیف می‌کند. این کران از در نظر گرفتن بیشینه شعاع قابل دسترس برای هر ذره تحت قید انرژی کل ثابت به دست آمده و لزوماً متناظر با تحول واقعی توزیع مکانی گاز نیست.

$$\Delta S_{con} \leq 3Nkln\left(1+\frac{\sqrt{\frac{2E_{total}}{mN}}t}{r_1}\right) \qquad (10)$$

تعمیم به سرعت‌های نسبیتی

در صورتی که انرژی سیستم، شرایطی داشته باشد که مقدار سرعت ذرات گاز آرمانی، در حدود سرعت‌های نسبیتی باشند؛ مسئله را

می‌توان به همان صورت پیشین تعریف کرد؛ با این تفاوت که انرژی جنبشی در رابطه ۵، به رابطه ۱۱ تبدیل می‌شود[۵].

$$E_{total} = mc^2 \sum_{i}^{N} (\gamma_i - 1) \qquad (11)$$

همچنین برای حالت نسبیتی هم رابطه ۱۰ در کنار وجود شرط $E_{total} = constant$ در انبساط آزاد گاز کامل؛ رابطه ۶ برقرار است. مشابه قبل، می‌توان نتیجه گرفت که برای بیشینه شدن آنتروپی پیکربندی، $\gamma_1 = \gamma_2 = \cdots = \gamma_N$ برقرار است و همچنین با تعریف نسبیتی $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ می‌توان نتیجه گرفت که $v_1 = v_2 = \cdots = v_i$ کران بالای آنتروپی پیکربندی را نتیجه می‌دهد.

با این تفاسیر، رابطه ۷ در این حالت نیز برقرار است و مقدار v_{smax} را می‌توان از رابطه ۱۱ به صورت زیر نوشت.

$$E_{total} = mc^2 N\left(\frac{1}{\sqrt{1-\frac{{v_{smax}}^2}{c^2}}} - 1\right) \rightarrow v_{smax} = c\sqrt{1-\frac{1}{\left(1+\frac{E_{total}}{mc^2 N}\right)^2}} \qquad (12)$$

با توجه به رابطه ۱۲ و برقراری رابطه ۷ برای این حالت، می‌توان رابطه ۹ را در حالت نسبیتی به رابطه ۱۳ تعمیم داد.

$$\Delta S_{max} = 3Nkln\left(1 + \frac{c\sqrt{1-\frac{1}{\left(1+\frac{E_{total}}{mc^2 N}\right)^2}}\,t}{r_1}\right) \qquad (13)$$

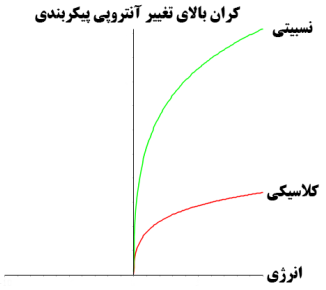
بحث

شکل ۱ نمایش‌دهنده کران بالای تغییر آنتروپی پیکربندی برحسب انرژی در دو نظام کلاسیکی و نسبیتی است. آنتروپی پیکربندی در هر یک از این دو نظام؛ همیشه در مساحت زیرین خط مربوط به نظام خود، قرار می‌گیرد.

همچنین در حد زمان‌های بسیار کوچک $1 \gg \frac{\sqrt{\frac{2E_{total}}{mN}}t}{r_1}$، برای رابطه ۱۰، نتیجه می‌شود که کران بالای تغییر آنتروپی، تقریبا خطی رشد می‌کند. چرا که داریم

$$\lim_{\frac{\sqrt{\frac{2E_{total}}{mN}}t}{r_1}\rightarrow 0} 3Nkln\left(1 + \frac{\sqrt{\frac{2E_{total}}{mN}}t}{r_1}\right) = 3Nk\frac{\sqrt{\frac{2E_{total}}{mN}}t}{r_1} \qquad (14)$$

همچنین در نظام نسبیتی به دلیل $v_{smax} \leq c$؛ مقدار کران بالای آنتروپی پیکربندی مطلقا از مقدار $3Nkln\left(1+\frac{ct}{r_1}\right)$ کوچک‌تر است.



:شکل ۱: کران بالای تغییر آنتروپی پیکربندی در دو نظام نسبیتی و کلاسیکی

نتیجه‌گیری

در این مقاله، کرانی تابع زمان برای رشد فضای پیکربندی قابل دسترس در مسئله انبساط آزاد گاز کامل استخراج شد. برخلاف توصیف متعارف ترمودینامیکی زمان‌نامحدود که تغییر آنتروپی پیکربندی را از مقایسه حالت‌های اولیه و نهایی به دست می‌آورد، در اینجا محدودیت زمانی ناشی از سرعت متناهی ذرات به طور صریح در نظر گرفته شد. این کران‌ها میزان گسترش ناحیه قابل دسترس در فضای پیکربندی را تا زمان t توصیف می‌کنند و مستقل از جزئیات دینامیکی فرایند به دست آمده‌اند.

نشان داده شد که بیشینه این کران در برابری تندی ذرات حاصل می‌شود. همچنین روابط متناظر برای رژیم نسبیتی نیز استخراج شد. بررسی تعمیم این ایده به سامانه‌های برهم‌کنشی، گازهای غیرآرمانی و ترمودینامیک زمان محدود غیرتعادلی می‌تواند موضوع پژوهش‌های آینده باشد.

سپاس‌گزاری

از همراهی بی‌دریغ دکتر فرهاد شهبازی مراتب تشکر را به جا می‌آوریم.

مرجع‌ها

[1] F. L. Lambert; “Configurational Entropy Revisited”; *Journal of Chemical Education*, Vol. 84, No. 9 (2007) 1548–1550.
[2] D. V. Schroeder; *An Introduction to Thermal Physics*; Addison Wesley Longman, (1999); pp. 74–84.
[3] T. Roubíček; “Calculus of Variations”; Chap. 17 in: *Mathematical Tools for Physicists* (Ed. M. Grinfeld); J. Wiley, Weinheim, (2014) pp. 551–588.
[4] D. V. Schroeder; *An Introduction to Thermal Physics*; Addison Wesley Longman, (1999); pp. 10–33.
[5] E. F. Taylor and J. A. Wheeler; *Spacetime Physics: Introduction to Special Relativity*; 2nd edition, W. H. Freeman, New York, (1992) pp. 38–40.

بررسی اثر ماده تاریک بوزونی بر تغییرشکل‌پذیری کشندی ستاره‌های کوارکی شگفت در فازCFL در مدل دو شاره ای

صداقت، جلیل، بردبار، غلامحسین، حقیقت، منصور، زبرجد، سید محمد

بخش فیزیک، دانشکده‌علوم، دانشگاه شیراز

چکیده

*در این پژوهش، رفتار **کمیت** بدون بعد تغییرشکل‌پذیری کشندی (Λ) برای ستاره‌های کوارکی شگفت در فاز قفل‌شدگی رنگ–طعم (CFL) در حضور ماده تاریک بوزونی نرده ای در چارچوب مدل دو شاره‌ای مورد بررسی قرار می گیرد. در این راستا معادله حالت ماده کوارکی با استفاده از کرومودینامیک کوانتومی اختلالی همراه با جرم وابسته به انرژی کوارک شگفت استخراج شده و ماده تاریک به صورت یک چگالش بوز–اینشتین با خودبرهم‌کنش دافعه‌ای مدل‌سازی می گردد. نتایج نشان می‌دهند که اگرچه برخی معادلات حالت تک‌شاره‌ای فاز CFL به دلیل بالا بودن مقدار Λ با داده‌های رصدی امواج گرانشی GW170817 ناسازگار هستند، افزودن مؤلفه ماده تاریک امکان تعدیل کمیت Λ و برآورده کردن هم‌زمان شروط رصدی و دست‌یابی به ناحیه شکاف جرمی پایین را فراهم می‌سازد.*

واژه های کلیدی: *ماده تاریک نرده ای، ستاره کوارکی شگفت، **تغییرشکل‌پذیری** کشندی ، QCD **اختلالی، مدل دو–شاره ای***

Investigation of the Effect of Bosonic Dark Matter on the Tidal Deformability of CFL Strange Quark Stars in a Two-Fluid Model

Sedaghat, Jalil; Bordbar, Gholam Hossein; Haghighat, Mansour; Zebarjad, Seyed Mohammad

Department of Physics, College of Science, Shiraz University

Abstract

In this work, the dimensionless tidal deformability parameter (Λ) for the strange quark stars in the color-flavor-locked (CFL) phase is investigated in the presence of scalar bosonic dark matter within the framework of a two-fluid model. In this regard, the equation of state of quark matter is derived using perturbative quantum chromodynamics (pQCD) with a running strange-quark mass, while dark matter is modeled as a Bose-Einstein condensate with repulsive self-interactions. The results indicate that although some single-fluid CFL equations of state are inconsistent with the gravitational-wave observations of GW170817 due to their relatively large values of Λ, the inclusion of a dark matter component can effectively modify the tidal deformability, allowing the model to satisfy observational constraints while simultaneously reaching the lower mass-gap region.

***Keywords**: Scalar dark matter, Strange quark star, Tidal deformability, Perturbative QCD, Two-fluid model*

مقدمه

کشف امواج گرانشی ناشی از ادغام ستاره‌های نوترونی دوتایی، به‌ویژه رویداد GW170817 [1]، ابزار رصدی بی‌نظیری را برای کاوش در ساختار درونی اجرام فشرده و تعیین معادله حالت آن‌ها در چگالی‌های فوق‌هسته‌ای فراهم کرده است. یکی از مهم‌ترین کمیت‌های قابل استخراج از این رصدها، کمیت بی‌بعد تغییرشکل‌پذیری کشندی (Λ) است که میزان سخت یا نرمی جرم فشرده را مشخص می‌کند. از سوی دیگر، بر اساس نظریه رفتار کوارک ها در چگالی‌های بسیار بالا، پدیده ابررسانایی رنگی رخ می‌دهد که پایدارترین فاز آن، فاز قفل‌شدگی رنگ–طعم (CFL) است [2]. ستاره‌های کوارکی خالص در فاز CFL معمولاً دارای معادله حالت بسیار سختی هستند که منجر به تولید جرم‌های بیشینه بالا (در محدوده شکاف جرمی ۲.۵ تا ۵ برابر جرم خورشید) می‌شود؛ اما سخت شدن معادله حالت، می تواند منجر به مقادیر Λ فراتر از حد رصدی یعنی $70 < \Lambda_{1.4\odot} < 580$ شود.[1] در این پژوهش به‌طور ویژه نشان داده می شود که هر دو چارچوب تک‌شاره‌ای و دوشاره‌ای، در صورت استفاده از معادلات حالت سخت، قادر به بازتولید اجرام واقع در ناحیه شکاف جرمی هستند.

با این حال، نتایج حاکی از آن است که این دو رویکرد پیش‌بینی‌های متفاوتی برای Λ ارائه می‌دهند. به‌طور مشخص، مدل دوشاره‌ای مقادیر به‌مراتب کوچک‌تری برای Λ نسبت به مدل تک‌شاره‌ای به‌دست می‌دهد که در بسیاری از موارد با حدود رصدی استخراج‌شده از داده‌های امواج گرانشی سازگارتر است. این اختلاف نشان می‌دهد که لحاظ کردن درجه آزادی ماده تاریک می‌تواند نقش مهمی در کاهش Λ و بهبود انطباق نظریه با قیود مشاهده‌ای ایفا کند.

معادلات حالت بخش های باریونی و ماده ی تاریک

برای محاسبه ویژگی‌های ساختاری ستاره‌های فشرده، در گام نخست باید معادله حالت اجزای تشکیل‌دهنده آن مشخص شود. در چارچوب مدل دوشاره‌ای، ماده باریونی و ماده تاریک به‌عنوان دو سیال مستقل توصیف می‌شوند که هر یک دارای معادله حالت ویژه خود هستند. در این مدل، هیچ برهم‌کنش مستقیمی میان دو مؤلفه فرض نمی‌شود و ارتباط آن‌ها تنها از طریق میدان گرانشی برقرار می‌گردد. ازاین‌رو، تعیین معادله حالت هر یک از این دو سیال نقش اساسی در بررسی ساختار داخلی و خواص ماکروسکوپی ستاره ایفا می‌کند [5]. در بخش‌های بعدی، معادلات حالت مربوط به ماده باریونی و ماده تاریک معرفی خواهند شد.

الف) معادله حالت بخش باریونی

در مدل مورد بررسی، مؤلفه باریونی ستاره، ماده کوارکی شگفت در نظر گرفته می شود. به منظور لحاظ کردن آثار برهم‌کنش‌های قوی، پتانسیل ترمودینامیکی این سامانه با احتساب تصحیحات مرتبه اول در ثابت جفت‌شدگی QCD استخراج می‌شود که رابطه آن به صورت زیر است[2]

$$-\frac{\Omega_{\rm SQM}}{V} = -\frac{\Omega_{\rm LO}}{V} - \frac{\Omega_{\rm CFL}}{V}. \quad (1)$$

پتانسیل ترمودینامیکی Ω_{LO} از مجموع سهم ذرات آزاد (کوارک‌ها و الکترون‌ها) و سهم ناشی از برهم‌کنش‌های قوی بین کوارک‌ها تشکیل شده است که هر یک به صورت زیر محاسبه می‌شوند

$$-\frac{\Omega_{\rm LO}}{V} = \sum_{N_f=1}^{3}\left(\mathcal{M}_1 + \frac{\mathcal{M}_2\alpha_s(Q)}{4\pi}\right), \quad (2)$$

که در آن $\mathcal{M}_1$ و $\mathcal{M}_2$ به‌ترتیب بیانگر سهم غیربرهم‌کنشی و تصحیحات اختلالی مرتبه نخست ناشی از برهم‌کنش‌های قوی هستند. این کمیت‌ها تابعی از پتانسیل‌های شیمیایی کوارک‌ها و جرم کوارک شگفت بوده و جزئیات آن‌ها در مرجع [2] ارائه شده است. از آنجا که جرم کوارک شگفت و ثابت جفت‌شدگی QCD دارای رفتار وابسته به انرژی بوده، ما از مقادیر به‌روز این کمیت‌ها بر اساس آخرین داده‌های منتشرشده توسط گروه داده‌های ذرات (Particle Data Group) استفاده می کنیم[3] ؛ رویکردی که با روش به‌کاررفته در مرجع [4] سازگار است.

عبارت Ω_{CFL} بیانگر سهم ناشی از فاز ابررسانای رنگی قفل‌شدگی طعم–رنگ (CFL) است. انتظار می‌رود در چگالی‌های بسیار بالا، ماده کوارکی به این فاز گذار کند، زیرا فازCFL از نظر ترمودینامیکی پایدارترین آرایش شناخته‌شده برای ماده کوارکی چگال به شمار می‌رود. سهم انرژی آزاد این فاز به پتانسیل شیمیایی کوارک‌ها و کمیت گاف (Δ) وابسته بوده و از رابطه زیر به دست می‌آید [2]

$$-\frac{\Omega_{\rm CFL}}{V} = \frac{\Delta^2(\mu_u+\mu_d+\mu_s)^2}{3\pi^2}, \quad (3)$$

ب) معادله حالت ماده تاریک بوزونی

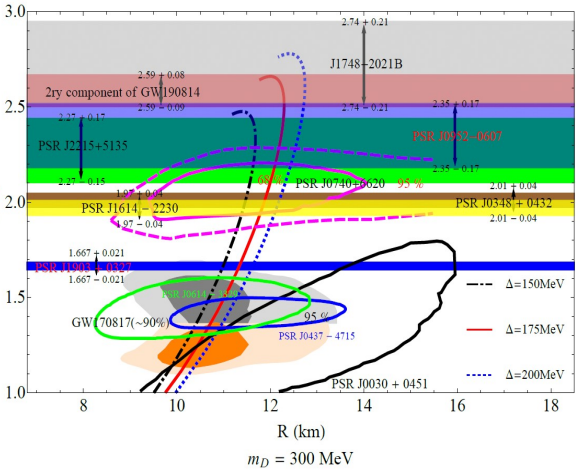
در یک گاز بوزونی رقیق، هنگامی که طول موج حرارتی ذرات از فاصله متوسط میان آن‌ها بزرگ‌تر شود، سامانه وارد ناحیه‌ای می‌شود که اثرات کوانتومی جمعی بر رفتار آن غالب هستند. در این شرایط، گذار به فاز چگالش بوز– اینشتین رخ می‌دهد و بخش بزرگی از ذرات در پایین‌ترین تراز انرژی تجمع می‌یابند. با فرض دمای صفر، می‌توان در نظر گرفت که تقریباً تمامی ذرات ماده تاریک در حالت چگال‌شده حضور دارند. در چنین حالتی، ویژگی‌های ماکروسکوپی سامانه عمدتاً توسط برهم‌کنش‌های کم‌انرژی تعیین می‌شوند که به‌خوبی از طریق پراکندگی موج (s) با طول پراکندگی (l_a) توصیف می‌شوند. بر پایه این فرضیات، معادله حالت ماده تاریک در فاز چگالش بوز–اینشتین در مرجع [5] استخراج شده و به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$-\frac{\Omega_{BEC}}{V} = P_{BEC} = \frac{2\pi l_a}{m_{\rm D}^3}\epsilon_{BEC}^2, \quad (4)$$

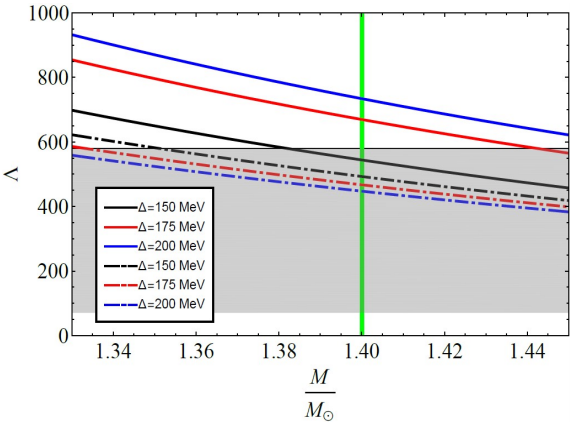
در رابطه فوق، کمیت‌های P_{BEC} و ϵ_{BEC} به‌ترتیب فشار و چگالی انرژی ماده تاریک بوزونی در فاز چگالش بوز–اینشتین را نشان می‌دهند. همچنین، m_D جرم ماده تاریک می باشد و کمیت l_a برابر با 1fm در نظر گرفته می شود. در محاسبه رابطه (4) فرض شده است که برهم کنش ذرات نرده ای تاریک با یک پتانسیل نقطه ای دافعه ای (پتانسیل دیراک) توصیف می شود. برای اطلاع بیشتر از جزییات نحوه استخراج این رابطه به مرجع [5] مراجعه شود.

بررسی ویژگی‌های ساختاری

حضور ماده تاریک می‌تواند به تشکیل یک هسته مرکزی یا هاله‌ای پیرامون ماده باریونی منجر شود که در هر دو حالت، توزیع جرم و فشار ستاره را تغییر داده و بر ویژگی‌های ماکروسکوپی آن مانند جرم، شعاع و کمیت Λ اثر می‌گذارد. در این چارچوب، از آنجا که هر یک از دو سیال به‌طور مستقل از قانون پایستگی انرژی–تکانه پیروی می‌کنند، برای هر مؤلفه یک معادله تعادل هیدرواستاتیکی جداگانه به دست می‌آید و در نتیجه، معادلات ساختار ستاره در مدل دوشاره‌ای به‌صورت جفت شده از طریق پتانسیل گرانشی مشترک حل می‌شوند [5]. برای حل این معادلات، انتخاب مقدار m_D، Δ و هم چنین تعیین شرایط مرزی مناسب در مرکز ستاره بسیار تعیین کننده می باشد؛ به‌ویژه فشار مرکزی ماده تاریک به‌عنوان یک ورودی کلیدی در تعیین ساختار شعاعی نقش دارد. در این چارچوب، انتخاب کمیت های آزاد مدل باید با دقت انجام شود تا تمامی قیود فیزیکی بنیادی برآورده شوند. به‌طور مشخص، مقادیر کمیت ها باید به‌گونه‌ای تنظیم شوند که شرط علیت در هر دو مؤلفه باریونی و ماده تاریک برقرار بماند، به‌طوری که سرعت صوت در هر سیال از سرعت نور فراتر نرود. علاوه بر این، پایداری ترمودینامیکی ماده کوارکی شگفت نیز باید تضمین شود. ما در این مطالعه، با انتخاب مقدار مناسب برای m_D و سهم ماده تاریک در فشار مرکزی(fr)، منحنی‌های جرم–شعاع و هم چنین تغییر شکل پذیری کشندی بر حسب جرم را برای مقادیر مختلف Δ به دست آورده و نتایج را با مدل تک شاره ای (بدون در نظر گرفتن مولفه تاریک) مقایسه می کنیم. لازم به ذکر است که مقدار در نظر گرفته شده برای m_D در مرتبه MeV می‌باشد. ما برای این انتخاب شروط علیت و سازگاری نتایج با مشاهدات تجربی را در نظر گرفتیم. افزون بر این، یکی از اهداف اصلی این پژوهش بررسی توانایی مدل دوشاره‌ای در بازتولید اجرام واقع در ناحیه شکاف جرمی است. افزایش مقدار m_D به مرتبه های GeV و TeV به شدت جرم ستاره را تحت تاثیر قرار داده و باعث کاهش شدید آن و عدم دست یابی مدل به اجرام پر جرم مخصوصا اجرام ناحیه شکاف جرمی می شود که مورد علاقه ما در این کار نیستند. شکل ۱ نمودار جرم بر حسب شعاع ستاره برای مدل دو شاره ای را نشان می دهد. همانطور که از شکل ۱ مشاهده می کنیم ترکیبات انتخاب شده به خوبی اجرام ناحیه شکاف جرمی را پوشش می دهند. لازم به ذکر است که حتی در غیاب ماده تاریک (مدل تک‌شاره‌ای)، مدل همچنان قادر به بازتولید اجرام واقع در ناحیه شکاف جرمی است و نمودار جرم و شعاع به دست آمده تفاوت آنچنانی با حالت دو شاره ای به ازای هر کمیت گاف ندارد. با این حال، تفاوت اساسی میان مدل تک‌شاره‌ای و دوشاره‌ای در رفتار کمیت Λ نمایان می‌شود. شکل ۲ رفتار Λ بر حسب جرم در مدل های تک شاره ای و دوشاره ای را نشان می دهد. همانطور که می بینیم در مدل تک شاره ای تنها ترکیب مربوط به کمیت گاف ($\Delta = 150\text{MeV}$) قید مربوط به Λ را برآورده می‌کند. اما مدل دو شاره ای مورد استفاده نه تنها قادر به بازتولید ستاره‌های بسیار پرجرم است بلکه مقادیر Λ به‌دست‌آمده با نتایج مشاهده‌ای رویداد GW170817 دارای ناحیه هم‌پوشانی و تبهگنی(degeneracy) کمیتی است. این ویژگی نشان می‌دهد که نقش ماده تاریک نه تنها در تغییر ساختار ستاره، بلکه در گسترش ناحیه مجاز کمیتی نیز قابل توجه است.



شکل ۱ نمودار جرم–شعاع ستاره کوارکی در مدل دو شاره ی (تحلیل شکل و مباحث مربوطه در متن اورده شده است.)



شکل ۲ نمودار تغییر شکل پذیری کشندی بر حسب جرم برای ستاره کوارکی شگفت در مدل های تک شاره ای و دو شاره ای. خطوط پر رنگ مربوط به مدل تک شاره ای و خطوط خط چین مربوط به مدل دو شاره ای هستند. خط سبز عمودی مقدار Λ مربوط به ستاره ای با جرم 1.4 برابر جرم خورشید را نشان می دهد و ناحیه خاکستری قید روی Λ را برای ستاره ای با جرم 1.4 برابر جرم خورشید نشان می دهد.

نتیجه گیری

نتایج به‌دست‌آمده در این پژوهش نشان می‌دهد که حضور ماده تاریک می‌تواند مقادیر تغییرشکل پذیری کشندی (Λ) را به‌طور قابل توجهی تغییر دهد. این موضوع اهمیت در نظر گرفتن ماده تاریک را در مدل‌سازی ستاره‌های فشرده، به‌ویژه در ناحیه شکاف جرمی، برجسته می‌سازد. به‌طور خاص، نشان داده شد که هر دو مدل تک‌شاره‌ای و دوشاره‌ای با استفاده از معادلات حالت سخت قادر به بازتولید اجرام واقع در ناحیه شکاف جرمی هستند. با این حال، این دو رویکرد پیش‌بینی‌های متفاوتی برای Λ ارائه می‌کنند. در حالی که مدل تک‌شاره‌ای عموماً به مقادیر بزرگ‌تری از Λ منجر می‌شود، حضور ماده تاریک در مدل دوشاره‌ای باعث کاهش این کمیت شده و در نتیجه مقادیر حاصل سازگاری بیشتری با محدودیت‌های استخراج‌شده از داده‌های امواج گرانشی، به‌ویژه رویداد GW170817 ، نشان می‌دهند. بنابراین ماده تاریک می‌تواند نقش مهمی در تفسیر داده‌های مربوط به ستاره‌های فشرده و منابع امواج گرانشی ایفا کند. از این رو، در تحلیل‌های آینده لحاظ کردن سهم احتمالی ماده تاریک امری ضروری به نظر می‌رسد. چنین رویکردی نه تنها می‌تواند به کاهش تبهگنی میان مدل‌های مختلف کمک کند، بلکه امکان ارائه تصویری دقیق‌تر از ترکیب و ساختار درونی اجرام فشرده را نیز فراهم خواهد ساخت.

مراجع

[1] B.P. Abbott et al., Phys. Rev. Lett. **121**, 161101 (2018).

[2] A. Kurkela et al., Phys. Rev. D **81**, 105021 (2010).

[3] S. Navas et al., Phys. Rev. D **110**, 030001 (2024).

[4] J. Sedaghat et al., Eur. Phys. J. C **85**, 283 (2025).

[5] G. Panotopoulos et al., Phys. Rev. D **96**, 023002 (2017).

نقض نامساوی لگت–گارگ در نوسان‌های نوترینو اتمسفری با استفاده از فرمالیسم ماتریس شبه–چگالی

اتفاقی ، محمد مهدی[1]؛ حاجی پور، حانیه

[1]گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم ، بلوار الغدیر، قم

چکیده

در این مقاله، با استفاده از فرمالیسم ماتریس شبه‌چگالی، نقض نامساوی لگت–گارگ در پدیده‌ی نوسان نوترینو در یک مدل دوطعمی بررسی شده است. در این چارچوب ابتدا نشان می‌دهیم که پارامتر هورودسکی همواره ۲ است و این به معنی آن است که شرط لازم و کافی برای نقض نامساوی لگت–گارگ در سامانه‌های نوسان دوطعمی نوترینو همیشه برآورده می‌شود. از این رو، ما چگونگی نقض این نامساوی برای نوترینوهای اتمسفری عبور کننده از زمین را به صورت عددی بررسی می‌کنیم. به ویژه نشان داده می‌شود که اثر ماده و رزونانس MSW می‌تواند باعث شود که کمیت K_4 که ترکیبی از زوج همبستگی‌های زمانی شامل ۴ زمان متفاوت است، از پیش بینی کلاسیکی بیشتر شود و علی الاصول برای آزمایش DUNE قابل بررسی باشد.

واژه های کلیدی: نوسان نوترینو، نامساوی لگت–گارگ، ماتریس شبه‌چگالی، اثرMSW .

Leggett-Garg inequality violation in atmospheric neutrino oscillations using pseudo-density matrix

Ettefaghi, Mohammad Mahdi[1]; Hajipour, Hanieh

[1] Department of Physics, University of Qom, Qom

Abstract

In this paper, the violation of the Leggett-Garg inequality in the phenomenon of neutrino oscillation within a two-flavor model is investigated using the pseudo-density matrix formalism. Within this framework, we first show that the Horodecki parameter is always equal to 2, implying that the essential and sufficient condition for violating the Leggett-Garg inequality inherently is satisfied in two-flavor neutrino systems. Consequently, we numerically study how this inequality is violated for atmospheric neutrinos propagating through the Earth. In particular, it is shown that the matter effect and the MSW resonance can cause the parameter K_4 to exceed the classical prediction, making it in principle testable in the DUNE experiment.

***Keywords**: Neutrino Oscillation, Leggett-Garg Inequality, Pseudo-Density Matrix.*

PACS No. 14.60.Pb و 03.65.Ud

مقدمه

نامساوی لگت–گارگ(LGI)، که گاه نسخه‌ی وابسته به زمان نامساوی بل خوانده می‌شود، بر پایه همبستگی‌های زمانی در یک سامانه‌ی منفرد، واقع‌گرایی ماکروسکوپیک[1] و اندازه‌گیری غیرتهاجمی[2] را می‌آزماید [۱]. به بیان مشخص‌تر، LGI بررسی

1 Macrorealism
2 Noninvasive measurability

می‌کند که آیا رفتار یک سامانه در طول زمان را می‌توان بر مبنای این فرض‌های معقول کلاسیکی که سامانه در هر لحظه در وضعیتی معین قرار دارد و اندازه‌گیری‌ها تحول آن را مختل نمی‌کنند، توصیف کرد؟ البته شرط اندازه‌گیری غیر تهاجمی عملا غیر ممکن است. از این رو در بسیاری از مطالعات، شرط پایایی (این که همبستگی زمانی از مبدا زمانی مستقل و به اختلاف زمانی وابسته باشد) در اندازه‌گیری‌های آنسامبلی را به جای اندازه‌گیری غیرتهاجمی در نظر می‌گیرند [۲].

پدیده نوسان نوترینو از برهم‌نهی کوانتومی حالت‌های جرمی که در تقابل با واقع‌گرایی ماکروسکوپی است، ناشی می‌شود. در نتیجه احتمال بقای هر طعم، تابعی از زمان خواهد بود. از این رو، نوسان نوترینو بستری مناسب برای مطالعه نقض نامساوی لگت–گارگ فراهم می‌کند [۳]. علاوه بر این، انتشار نوترینوها در محیط مادی به دلیل پراکندگی کشسان رو به جلو از طریق برهم‌کنش‌های الکتروضعیف، منجر به ایجاد یک پتانسیل مؤثر برای نوترینوهای الکترونی می‌شود که به چگالی ماده بستگی دارد. به ازای مقادیری از چگالی ماده برای نوترینوهایی با انرژی معین، انتقال طعم تقریباً کامل حتی برای زوایای اختلاط کوچک امکان‌پذیر می‌شود. این پدیده که با نام اثر MSW شناخته می‌شود، نخست در [۴] معرفی و سپس در [۵] توسعه یافت و نقش مهمی در تبیین نوسان‌های نوترینوی خورشیدی ایفا کرد. با این حال، در چگالی‌های بسیار زیاد ماده، احتمال گذار نوترینوهای الکترونی کاهش می‌یابد [۶].

از آنجایی که اندازه‌گیری نقض نامساوی بل یا LGI منوط به تنظیم چینش آزمایشگاهی بر مبنای ناحیه‌ای خاص از فضای پارامتری است، بسیار اهمیت دارد که با یک روشی مستقل از انتخاب فضای پارامتری خاص در مورد نقض یا عدم نقض LGI قضاوت داشته باشیم. این موضوع با استفاده از قضیه هورودسکی امکان‌پذیر است [۷]. طبق این قضیه برای نقض نامساوی CHSH در سیستم‌های اسپین ۱/۲ آمیخته یک شرط لازم و کافی به دست می‌آید. همین شرط برای برای کمیت K_4 که ترکیب خطی از زوج همبستگی‌های زمانی بین چهار زمان متفاوت است در مجموعه‌ی LGIها قابل تعمیم است [۸]. برای انجام این کار همبستگی‌های زمانی با استفاده از فرمالیزم ماتریس شبه‌چگالی محاسبه شده است.

در مورد نوسان نوترینو ما ابتدا با استفاده از قضیه هورودسکی نشان می‌دهیم که برای نوسان دو طعم کمیت K_4 همواره حد کلاسیکی را نقض می‌کند. سپس یک بحث عددی در مورد چگونگی نقض آن برای نوترینوهای اتمسفری انجام می‌دهیم. تاکنون نقض LGI برای نوترینوهای اتمسفری بررسی نشده است. ویژگی منحصر به فردی که باعث می‌شود این بحث اهمیت پیدا کند آن است که در چارچوب آزمایش‌هایی از قبیل DUNE و Hyper-Kamiokande می‌توان کمیت K_4 را برای انرژی یکسان ولی طول انتشارهای مختلف تشکیل داد. برای مثال در مقاله‌ای که نقض LGI را در داده‌های آزمایش MINOS دنبال می‌کند، طول انتشار ثابت است و همبستگی‌ها بین نوترینوها با انرژی‌های مختلف لحاظ می‌شود. این از لحاظ حذف Loophole برای استنباط چگونگی نقض اصول موضوعه‌ی نامساوی می‌تواند اهمیت داشته باشد.

ماتریس شبه‌چگالی

یکی از راه‌های مطالعه همبستگی‌های زمانی در سامانه‌های کوانتومی، استفاده از فرمالیسم ماتریس شبه‌چگالی است [۸]. برخلاف ماتریس چگالی معمولی که تنها همبستگی‌های فضایی را در یک لحظه زمانی توصیف می‌کند، با استفاده از ماتریس شبه‌چگالی می‌توان همبستگی‌های میان رویدادهای رخ داده برای یک سیستم در زمان‌های مختلف را محاسبه کرد. از این رو، ماتریس شبه‌چگالی ابزار مناسبی برای بررسی نقض نامساوی لگت–گارگ فراهم می‌کند.

ماتریس شبه‌چگالی دارای ویژگی‌های مشابه ماتریس چگالی است؛ به این معنا که هرمیتی بوده و تریس آن برابر با یک است. با این حال، به دلیل حضور همبستگی‌های زمانی، الزاماً مثبت معین نیست و می‌تواند دارای مقادیر ویژه منفی باشد. همین ویژگی امکان آشکارسازی جنبه‌های غیرکلاسیکی تحول زمانی سامانه را فراهم می‌سازد. افزون بر این، حاشیه‌های ماتریس شبه‌چگالی به ماتریس‌های چگالی استاندارد متناظر با زمان انتگرال‌گیری نشده کاهش می‌یابند و بنابراین توصیف معمول مکانیک کوانتومی را در حالت‌های حدی باز تولید می‌کنند.

برای یک سیستم تک کیوبیتی با ماتریس چگالی ρ و تحت تحول زمانی U، ماتریس شبه‌چگالی برای حالت دو زمانه‌ی t_1 و t_2 را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$R(t_1,t_2)=\frac{1}{4}\sum_{i,j}\left\langle\left\{\sigma_i(t_1)\sigma_j(t_2)\right\}\right\rangle(\sigma_i\otimes\sigma_j) \qquad (1)$$

که در اینجا

$$\left\langle\left\{\sigma_i(t_1)\sigma_j(t_2)\right\}\right\rangle=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left[(\sigma_i\rho+\rho\sigma_i)U^\dagger\rho U\right] \qquad (2)$$

است.

ماتریس شبه‌چگالی برای نوسان نوترینو

برای نوترینوهای دوطعمی که در محیط مادی منتشر می‌شوند، هامیلتونی مؤثر در پایه طعم به صورت

$$H=\frac{\vec{r}(\omega_a).\vec{\sigma}}{2}$$

نوشته می‌شود که

$$\vec{r}(\omega_a)=(\omega_a\sin2\theta,0,\omega_a\cos2\theta-A_C)$$

در آن $\omega_a=\frac{\Delta m^2}{2E_a}$. $A_C=\sqrt{2}G_F n_e$ پتانسیل ناشی از انتشار نوترینو در محیط مادی است و در آن n_e چگالی الکترونی محیط است. θ زاویه اختلاط در خلاء و G_F ثابت فرمی است.

در نتیجه این هامیلتونی، عملگر تحول زمانی بین زمان‌های t_i و t_j به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$U=\cos\psi_{a:ij}\mathrm{I}-i\,\mathrm{Sin}\,\psi_{a:ij}(\vec{r}(\omega_a).\vec{\sigma}) \qquad (3)$$

که فاز نوسان نیز تابع انرژی نوترینو و پارامترهای اختلاط بوده و از رابطه‌ی

$$\psi_{a:ij}=|\vec{r}(\omega_a)|\frac{t_j-t_i}{2}$$

به دست می‌آید. برای مثال با فرض حالت اولیه $\rho=|\upsilon_e\rangle\langle\upsilon_e|$ می‌توان از تعریف ماتریس شبه‌چگالی را تشکیل داد.

قضیه هوردوسکی برای نامساوی LGI

اصل این قضیه برای نامساوی CHSH مطرح شده است. اما در مرجع [۸] نشان داده شده است ویژگی‌های لازم برای به کار بردن این قضیه در مورد ماتریس شبه چگالی در حالت کلی برقرار است. فرض کنید ماتریس شبه چگالی در حالت کلی به شکل

$$R_{ij}=\frac{1}{4}(\mathrm{I}_i\otimes\mathrm{I}_j+\vec{r}.\vec{\sigma}_i\otimes\mathrm{I}_j+\mathrm{I}_i\otimes\vec{s}.\vec{\sigma}_j+\sum_{m,n=1}^{3}t_{mn}\sigma_{i_m}\otimes\sigma_{j_n})$$

نوشته شود که در اینجا

$$t_{mn}=\mathrm{Tr}\left[R_{ij}\sigma_{i_n}\otimes\sigma_{j_m}\right] \qquad (4)$$

است. ماتریس همبستگی T_R از درایه‌های t_{mn} تشکیل داده می‌شود. اگر u_k و u_l دو مقدار ویژه بزرگ‌تر ماتریس $T_R^\dagger T_R$ باشند، مجموع آنها را به عنوان پارامتر هوردوسکی تعریف می‌کنیم و با M_R نشان می‌دهیم. مطابق قضیه هوردوسکی، بیشینه مقدار کمیت K_4 با $2\sqrt{M_R}$ داده می‌شود. بنابراین شرط لازم و کافی برای نقض نامساوی LGI و به تبع آن وجود همبستگی‌های غیرکلاسیکی در سامانه با $M_R>1$ داده می‌شود [۸].

برای سامانه دو طعمی نوترینو، با محاسبه مستقیم و با استفاده از روابط (۱) تا (۴)، کمیت هوردوسکی M_R برابر ۲ به دست می‌آید. این نتیجه مستقل از مقدار پتانسیل ناشی از انتشار نوترینو در ماده است. این نتیجه بیانگر آن است که منشأ نقض نامساوی لگت–گارگ در نوسان‌های دوطعمی نوترینو، ماهیت کوانتومی برهم‌نهی حالت‌های جرمی است و حضور ماده، اگرچه ویژگی‌های دینامیکی نوسان را تغییر می‌دهد، اصل امکان نقض نامساوی را از بین نمی‌برد.

تحلیل عددی

یکی از چالش‌های مهم در مطالعه LGI آن است که ارزیابی این نامساوی مستلزم اندازه‌گیری در بیش از دو زمان مختلف است، در حالی که آزمایش‌های معمول نوسان نوترینو، غالباً تنها شامل آشکارسازهای نزدیک و دور هستند. در این مقاله، ما نقض نامساوی LGI را برای نوترینوهای اتمسفری محاسبه می‌کنیم که می‌توانند در هر زاویه سمت الراسی وارد زمین شوند و در نتیجه برای رسیدن به آشکارسازهایی مثل DUNE یا Hyper-kamiokande طول انتشارهای مختلف طی می‌کنند. بنابراین با بررسی امکان نقض LGI برای نوترینوهای اتمسفری، این زمینه فراهم می‌شود که نقض LGI در DUNE و Hyper-Kamiokande مورد بررسی قرار بگیرد.

همان‌گونه که گفته شد LGI برای محک زدن برقراری واقع‌گرایی ماکروسکوپیک مطرح شد ولی لازمه آن اطمینان از غیرتهاجمی بودن اندازه‌گیری‌ها است که این عملا برای بسیاری از آزمایش‌ها غیر ممکن است. ولی نشان داده شده است که به جای شرط اندازه گیری غیر تهاجمی می‌توان شرط پایایی را در نظر گرفت [۲]. شرط پایایی ایجاب می‌کند که قاعده جمع زیر برای فاز نوسان برقرار باشد:

$$\sum_{i=1}^{n-1}\psi_{a:i,i+1}=\psi_{a:1,n}$$

برای محاسبه K_4، طبق این قاعده جمع، اگر L_1 ، L_2 و L_3 طول انتشار نوترینوهای ۱، ۲ و ۳ باشند طول انشار نوترینوی چهارم به صورت $L_1+L_2+L_3=L_4$ می‌شود.

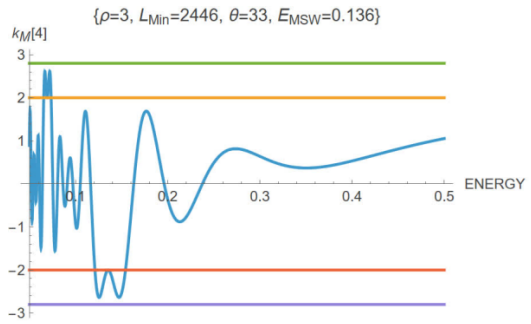
طیف نوترینوهای اتمسفری از چند صد MeV تا چند GeV گسترده است و ترکیب طعمی آنها با انرژی تغییر می‌کند. نسبت شار نوترینوی الکترونی به میونی همواره کمتر از یک است و بیشینه آن (حدود ۰/۵) در انرژی‌های زیر 1 GeV رخ می‌دهد.

آزمایش DUNE عمدتاً بر روی نوترینوهایی با انرژی کمتر از 1 GeV متمرکز است. در این بازه انرژی، سهم نوترینوی الکترونی در شار اولیه قابل توجه است؛ بنابراین، می‌توان از نوسان این نوترینوها در مسیر عبور از زمین، برای مطالعه نامساوی لگت–گارگ بهره گرفت. در شکل ۱، با چگالی مشابه پوسته زمین و پارامترهای خورشیدی، نمودار احتمال بقای نوترینوی الکترونی برحسب انرژی رسم شده و طول انتشار به‌گونه‌ای انتخاب شده که شرط بیشینه نوسان برقرار باشد.

$$L_1=L\ ;\ L_2=3L\ ;\ L_3=5L\ ;\ L_4=9L$$

همان‌گونه که در این شکل ملاحظه می‌شود، در انرژی رزونانس مقدار نقض LGI بیشینه می‌شود.

از طرف دیگر در انرژی بیش از 1 GeV تبدیل نوترینوی میونی به تائو نقش برجسته دارد که مستقل از محیط مادی است. بنابراین با فرمول دوطعمی در خلأ قابل مدل‌سازی است در نتیجه با انتخاب پارامترهای نوسان مطابق با نوترینوهای اتمسفری، باز هم نقض LGI را نشان می‌دهد.



۱- K_4 بر حسب انرژی برای بازه زیر یک GeV

نتیجه‌گیری

در این مقاله ما با استفاده از روش ماتریس شبه‌چگالی، قضیه هورودسکی را برای نوسان نوترینو در حالت دوطعمی مستقل از چگونگی آزمایش بکار بردیم و نشان دادیم شرط لازم و کافی برای نقض LGI در نوسان نوترینو وجود دارد. سپس یک تحلیل عددی کوتاه بر روی فضای پارامتری نوترینوهای اتمسفری انجام دادیم و دیدیم که امکان مشاهده نقض LGI برای نوترینوها اتمسفری گذرنده از زمین وجود دارد. به ویژه برای نوترینوهای با انرژی کمتر از 1 GeV که آزمایش DUNE امکان اندازه گیری آنها را دارد، امکان دیدن نقض LGI در ناحیه رزونانس وجود دارد.

مرجع‌ها

[۱] A. J. Leggett, Realism and the physical world. *Reports on Progress in Physics*, *71*(2), (2008) 022001.
[2] Clive Emary, Neill Lambert, and Franco Nori. "Leggett–garg inequalities." *Reports on Progress in Physics* 77, no. 1 (2014) 016001.
[3] J. A. Formaggio, D. I. Kaiser, M. M. Murskyj, and T. E. Weiss. "Violation of the Leggett-Garg inequality in neutrino oscillations." *Physical review letters* 117, no. 5 (2016) 050402.
[4] L. Wolfenstein, Neutrino oscillations in matter, Phys. Rev. D 17, (1978) 2369.
[5] S. P. Mikheev, and A. Yu Smirnov. "Resonance amplification of oscillations in matter and spectroscopy of solar neutrinos." *Yad. Fiz.;(USSR)* 42, no. 6 (1985).
[6] Z. Askaripour Ravari, M. M. Ettefaghi, and S. Miraboutalebi. "Quantum coherence in neutrino oscillation in matter." *The European Physical Journal Plus* 137, no. 4 (2022) 1-10.
[7] J. A. Formaggio, D. I. Kaiser, M. M. Murskyj, and T. E. Weiss. "Violation of the Leggett-Garg inequality in neutrino oscillations." *Physical review letters* 117, no. 5 (2016): 050402.
[8] A. Jalal, S.M. Fazeli, and M.M. Ettefaghi, Quantum coherence and Leggett-Garg inequality, Annals of physics (2026) 170583.

تأثیر ریسمان کیهانی بر خواص طیفی و ترمودینامیک سامانه‌های کوانتومی

روشن‌ضمیر، محمّد
گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

چکیده

در این پژوهش، طیف انرژی و توابع موج یک سامانه کوانتومی در حضور ریسمان کیهانی به‌عنوان یک نقص توپولوژیکی بررسی شد. معادله شرودینگر برای حالت‌های دارای تکانه زاویه‌ای غیرصفر با استفاده از روش نیکیفوروف–یواروف و تقریب گرین–آلدریش حل گردید و سپس ویژگی‌های ترمودینامیکی سامانه از طریق محاسبه تابع پارش مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان داد که حضور ریسمان کیهانی موجب افزایش ترازهای انرژی شده و این اثر با افزایش قدرت پتانسیل و پارامتر غربالگری تقویت می‌شود. همچنین، افزایش قدرت پتانسیل با رشد تابع پارش و کاهش انرژی آزاد هلمهولتز همراه است. به‌طور کلی، یافته‌ها بیانگر آن است که نقص توپولوژیکی ریسمان کیهانی تأثیر چشمگیری بر ساختار انرژی و خواص ترمودینامیکی سامانه داشته و در توصیف رفتار کوانتومی این‌گونه سیستم‌ها نقش مهمی ایفا می‌کند.

واژه های کلیدی: *نقص توپولوژیکی، تابع پارش، انرژی آزاد هلمهولتز، تقریب گرین – آلدریش.*

The effect of the cosmic string on the spectral and thermodynamic properties of quantum systems

Roshanzamir, Muhammad

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Shahrekord University, Shahrekord

Abstract

In this study, the energy spectrum and wave functions of a quantum system in the presence of a cosmic string as a topological defect were investigated. The Schrödinger equation for states with non-zero angular momentum was solved using the Nikiforov–Uvarov method and the Greene–Aldrich approximation, and then the thermodynamic properties of the system were studied by calculating the partition function. The results showed that the presence of the cosmic string increased the energy levels, and this effect was enhanced by increasing the potential strength and screening parameter. Also, increasing the potential strength is accompanied by the growth of the partition function and the decrease in Helmholtz free energy. In general, the findings indicate that the topological defect of the cosmic string has a significant effect on the energy structure and thermodynamic properties of the system and plays an important role in describing the quantum behavior of such systems.

***Keywords**: topological defect, partition function, Helmholtz free energy, Greene-Aldrich approximation scheme.*

PACS No. 05

مقدمه

مدل‌های پتانسیل نقش بنیادینی در توصیف حالت‌های مقید و بررسی برهم‌کنش‌های کوانتومی داشته و از طریق حل معادله شرودینگر، مطالعه دقیق سامانه‌های فیزیکی را امکان‌پذیر ساخته‌اند [۳–۱]. در این میان، پتانسیل‌های نمایی و تعمیم‌های آن‌ها به دلیل توانایی در توصیف برهم‌کنش های کوتاه‌برد و بلندبرد، کاربرد گسترده‌ای در فیزیک اتمی، مولکولی و هسته‌ای یافته‌اند [۲،۱]. به‌ویژه، پتانسیل‌های نمایی ترکیبی با برخورداری از ساختار ریاضی

مناسب و قابلیت بیان توابع موج بر حسب توابع فوق‌هندسی، ابزار مؤثری برای مدل‌سازی سامانه‌های مختلف، به‌ویژه مولکول‌های دواتمی، فراهم کرده‌اند [۳،۲]. یکی از مهم‌ترین اعضای این خانواده، پتانسیل تعمیم‌یافته‌ی هیلراس- فراست- موسولین[1] است که به صورت

$$V(r)=D_e\left(1-\frac{(r+\eta r_e r-\eta {r_e}^2)e^{-\eta(r-r_e)}}{r}\right)-\frac{e^{-\eta r}}{1-e^{-\eta r}}\left(-\frac{V_0}{b}(ae^{\eta r}-1)+V_1-\frac{V_2}{1-e^{-\eta r}}\right) \quad (۱)$$

تعریف می‌شود به‌طوری که D_e، σ و r_e به‌ترتیب مبین انرژی تفکیک، پارامتر غربالگری ($\eta<1$) و طول پیوند تعادلی است. لازم به ذکر است V_0، V_1 و V_2 معرف عمق چاه پتانسیل و a و b ویژگی‌های ساختاری پتانسیل را تعیین می‌نمایند. این پتانسیل با دربرگرفتن چندین حالت خاص، کاربردهای گسترده‌ای در فیزیک هسته‌ای، اتمی، مولکولی، پلاسما و ماده چگال دارد و به دلیل ساختار تحلیلی مناسب، بستری ارزشمند برای آزمون روش‌های دقیق و تقریبی در مکانیک کوانتومی محسوب می‌شود.

مطالعه حالت‌های دارای تکانه زاویه‌ای غیرصفر در پتانسیل‌های نمایی به دلیل وجود جمله گریز از مرکز، معمولاً به روش‌های تقریبی نظیر تقریب گرین–آلدریش نیاز دارد [۴]. افزون بر این، نقص‌های توپولوژیکی مانند ریسمان‌های کیهانی با ایجاد هندسه مخروطی در فضازمان، ساختار ترازهای انرژی را از طریق تغییر تکانه زاویه‌ای مؤثر تحت تأثیر قرار می‌دهند، در حالی که معادله شرودینگر همچنان قابلیت حل تحلیلی خود را حفظ می‌کند [۶،۵]. با وجود مطالعات گسترده در این زمینه، تأثیر ریسمان کیهانی بر سامانه‌های توصیف شده توسط پتانسیل تعمیم‌یافته هیلراس–فراست–موسولین هنوز به‌طور جامع بررسی نشده است؛ موضوعی که مطالعه آن می‌تواند به درک عمیق‌تر اثرات توپولوژیکی بر طیف انرژی این سامانه‌ها منجر شود.

رهیافت نیکیفروف- یووارف

یکی از روش‌های تحلیلی پرکاربرد برای حل معادلات دیفرانسیل در مکانیک کوانتومی، روش نیکیفوروف–یووارف است. این روش بر پایه حل معادلات دیفرانسیل مرتبه دوم از نوع فوق‌هندسی و با استفاده از خواص چندجمله‌ای‌های متعامد ویژه بنا شده است [۷]. معادله دیفرانسیل عمومی متناظر با این رهیافت به صورت

$$\psi_n''(r)+\frac{\tilde{\tau}(r)}{\sigma(r)}\psi_n'(r)+\frac{\tilde{\sigma}(r)}{\sigma(r)}\psi_n(r)=0, \quad (۲)$$

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 شکل

$$\psi_n(r)=y_n(r)\varphi(r)$$

در نظر گرفته و با بکارگیری رابطه $\left(\sigma(r)\rho(r)\right)'=\tau(r)\rho(r)$ به شکل فوق هندسی

$$\sigma(r)y_n''(r)+\tau(r)y_n'(r)+\lambda y_n(r)=0, \quad (۳)$$

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

$$\pi(r)=\frac{\sigma'(r)-\tilde{\tau}(r)}{2}\pm\left(\frac{\left(\sigma'(r)-\tilde{\tau}(r)\right)^2-\tilde{\sigma}(r)+k\,\sigma(r)}{4}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (۴)$$

نمایان می‌گردد. پاسخ‌های چندجمله‌ای $y_n(r)$ را می‌توان برحسب رابطه رودریگز[2] $y_n(r)=\frac{B_n}{\rho(r)}\frac{d^n}{dr^n}\left[\sigma^n(r)\rho(r)\right]$ بیان نمود که B_n ثابت بهنجارش بوده و $\rho(r)$ تابع وزنی است که عبارت

[1] Hylleraas-Frost-Musulin potential

[2] Rodriguez relation

$\rho(r)=\sigma^{-1}(r)\exp\left(\int\tau(r)\sigma^{-1}(r)dr\right)$ را برآورد می‌سازد. همچنین قسمت دوم تابع موج به‌صورت $\varphi(r)=\exp\left(\int\pi(r)\sigma^{-1}(r)dr\right)$ ارائه می‌گردد.

خواص طیفی و ترمودینامیکی سامانه‌های کوانتومی با نقص توپولوژیکی

معادله شعاعی شرودینگر به شکل

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E_{n,\ell}-V(r)-\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right)\right)\mathcal{R}_n(r)=0, \qquad (۵)$$

ارائه شده بطوری‌که $\hbar$، μ و $E_{n,\ell}$ به‌ترتیب مبین ثابت کاهش یافته پلانک، جرم کاهیده و انرژی چرخشی-ارتعاشی مولکول‌ها است. حضور ریسمان کیهانی به عنوان یک نقص توپولوژیکی، با ایجاد هندسه مخروطی در فضازمان موجب تغییر در ساختار دینامیکی سامانه‌های کوانتومی می‌شود. این تغییر هندسی که با پارامتر توپولوژیکی ξ مشخص می‌گردد، از طریق بازمقیاس‌دهی مختصات زاویه‌ای بر عملگرهای زاویه‌ای معادله شرودینگر اثر گذاشته و تکانه زاویه‌ای مؤثر سامانه را اصلاح می‌کند. در نتیجه، جمله متعارف تکانه زاویه‌ای دیگر معتبر نبوده و اثر ریسمان کیهانی به صورت ظهور عامل $\frac{1}{\xi^2}$ در بخش زاویه‌ای معادله نمایان می‌شود. بر این اساس، با جایگزینی جمله تکانه زاویه‌ای معمول با کمیت اصلاح‌شده $\frac{\delta^2}{\xi^2}$، می‌توان تأثیر هندسه مخروطی فضازمان را در شکل‌بندی سامانه لحاظ کرد. این رویکرد امکان بررسی نظام‌مند آثار توپولوژیکی ریسمان کیهانی بر طیف انرژی، هم‌ترازی ترازها و سایر ویژگی‌های فیزیکی سامانه را فراهم می‌سازد.

با جایگذاری رابطه (۱) در معادله (۵) و بهره‌گیری از تقریب گرین- آلدریش به شکل $1/r^2\approx\eta^2/\left(1-e^{-\eta r}\right)^2$ به ازای $1\gg\eta$ و اعمال تغییر متغیری به شکل $q=e^{-\eta r}$ جهت استفاده از رهیافت نیکیفوروف-یووارف [۷] و به‌منظور مطالعه ویژگی های ترمودینامیکی پتانسیل مورد مطالعه و تسهیل تحلیل و استخراج کمیت‌های ترمودینامیکی، طیف انرژی مربوطه به شکل

$$E_n=\frac{\hbar^2\eta^2}{2\mu}\left(T_1-\left(\frac{T_2}{2(n+\eta)}+\frac{n+\eta}{2}\right)^2\right), \qquad (۶)$$

بیان می‌گردد به‌طوری‌که

$$T_1=-2D_e\mu\frac{r_e+1}{\hbar^2\eta^2}e^{\eta r_e}+\frac{2a\mu V_0}{\hbar^2\eta^2 b}+\frac{2\mu D_e}{\hbar^2\eta^2}+\left(\frac{\delta}{\xi}\right)^2$$
$$T_2=\frac{-2D_e\mu {r_e}^2}{\hbar^2\eta}e^{\eta r_e}-\left(\frac{\delta}{\xi}\right)^2-\frac{2\mu V_0(a-1)}{\hbar^2\eta^2 b}+\frac{2\mu V_1}{\hbar^2\eta^2}, \qquad (۷)$$
$$\kappa=\frac{1}{2}+\sqrt{\left(\frac{\delta}{\xi}\right)^2+\frac{1}{4}+\frac{2\mu V_2}{\hbar^2\eta^2}}, n=0,1,2,\ldots$$
$$<\left[-\kappa+\sqrt{T_1}\pm\sqrt{T_1-T_2}\right].$$

همچنین تابع موج متناظر به صورت

$$\mathcal{R}_n(q)=\left(\frac{\zeta\eta(\rho+n+\zeta)\Gamma(n+1)\Gamma(\rho+n+2\zeta-1)}{(n+\rho)\Gamma(n+2\rho)}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad (۸)$$
$$\times q^{\zeta}(1-q)^{\rho}\mathcal{P}_n^{(2\zeta,2\rho-1)}(1-2q),$$

بیان گردیده به‌نحوی‌که

$$\zeta=\frac{1}{\hbar\eta}\sqrt{2\mu\left(D_e\left(1-e^{\eta r_e}(\eta r_e+1)\right)-E_n+\frac{aV_0}{b}\right)+\left(\frac{\delta}{\xi}\right)^2},$$
$$\rho=\frac{1}{2}\left(1+\sqrt{\frac{4\eta^2\left(\left(\frac{\delta}{\xi}\right)^2+\frac{1}{4}\right)\hbar^2+8\mu V_2}{\eta^2\hbar^2}}\right).$$

و $\mathcal{P}_n^{(\chi,\varsigma)}$ معرف چندجمله‌ای ژاکوبی است که به‌طور گسترده‌ای در تحلیل ریاضی و کاربردهای عملی استفاده می‌گردد [۸]. لازم به یادآوری است که در محاسبه رابطه (۸) از خاصیت تعامد این چندجمله‌ای‌ها ، به شکل

$$\int_{-1}^{1}\mathcal{P}_\alpha^{(\chi,\varsigma)}\mathcal{P}_\beta^{(\chi,\varsigma)}(1-t)^{\chi}(1+t)^{\varsigma}dt$$
$$=\frac{2^{\chi+\varsigma+1}}{2n+\chi+\varsigma+1}\frac{\Gamma(n+\chi+1)\Gamma(n+\varsigma+1)}{n!\,\Gamma(n+\chi+\varsigma+1)}\delta_{\alpha\beta},$$

استفاده شده است.

خواص حرارتی از مهم‌ترین ویژگی های یک سامانه ترمودینامیکی هستند و بررسی آن‌ها اطلاعات ارزشمندی درباره

رفتار فیزیکی و پاسخ سامانه به تغییرات محیطی فراهم می‌کند. در ترمودینامیک آماری، محاسبه این خواص بر پایه تابع پارش ارتعاشی انجام می‌شود؛ کمیتی بنیادی که توزیع آماری ترازهای انرژی را توصیف کرده و مبنای استخراج پارامترهایی نظیر آنتروپی، انرژی آزاد هلمهولتز و سایر کمیت‌های ترمودینامیکی است. ازاین‌رو، تابع پارش ارتعاشی نقش محوری در تحلیل رفتار ترمودینامیکی سامانه‌های کوانتومی ایفا می‌کند. تابع پارش متناظر با چنین سامانه‌ای با بهره‌گیری از طیف انرژی ارائه‌شده در معادله (۶)، به صورت

$$Q_{vib}(\beta)=\frac{1}{2\sqrt{-\varkappa\mu\beta}}\left(\left(1-\mathrm{erf}\left(\left(\frac{\sqrt{-\varkappa {T_2}^2}}{2(n+\hbar)}-\frac{(n+\hbar)\sqrt{-\varkappa}}{2}\right)\sqrt{\beta}\right)-e^{T_2\varkappa\beta}\left(1-\mathrm{erf}\left(\left(\frac{\sqrt{-\varkappa {T_2}^2}}{2(n+\hbar)}+\frac{(n+\hbar)\sqrt{-\varkappa}}{2}\right)\sqrt{\beta}\right)\right)\right)\sqrt{\pi}e^{-T_1\beta\varkappa}\right) \quad (۹)$$

محاسبه می‌گردد که $\beta=1/\kappa T$ و κ مبین ثابت بولتزمن است. $\mathrm{erf}(w)$ مبین تابع خطا بوده و یکی از توابع ویژه و پرکاربرد در ریاضیات، آمار و فیزیک است. این تابع در واقع نسخه‌ای نرمال‌شده از انتگرال تابع گاوسی به شمار می‌رود و نقش مهمی در تحلیل توزیع نرمال، نظریه احتمال و بسیاری از مسائل مهندسی ایفا می‌کند. می‌توان نتیجه گرفت که با کاهش دما، کاهش یکنواختی در تابع پارش مشاهده می‌شود.

انرژی آزاد هلمهولتز از مهم‌ترین پتانسیل‌های ترمودینامیکی است و نقش کلیدی در بررسی پایداری و تعادل سیستم‌ها دارد و در فرآیندهای خودبه‌خودی به سمت کمینه شدن میل می‌کند. همچنین، بسیاری از خواص ترمودینامیکی مواد از طریق این تابع قابل محاسبه هستند. براین اساس، انرژی آزاد میانگین ارتعاشی به شکل

$$F(\beta)=-\kappa T\ln Q_{vib}(\beta)=-\frac{1}{\beta}\left(\ln\left(\frac{1}{2\sqrt{-\varkappa\mu\beta}}\right.\right. \quad (۱۰)$$

$$\left.\left.\left(\left(e^{T_2\beta\varkappa}\mathrm{erf}\left(\frac{\left(\sqrt{-\varkappa {T_2}^2}+\sqrt{-\varkappa}(n+\hbar)^2\right)\sqrt{\beta}}{2(n+\hbar)}\right)-e^{T_2\beta\varkappa}+\mathrm{erf}\left(\frac{\left(-\sqrt{-\varkappa {T_2}^2}+\sqrt{-\varkappa}(n+\hbar)^2\right)\sqrt{\beta}}{2(n+\hbar)}\right)+1\right)\sqrt{\pi}e^{-T_1\varkappa\beta}\right)\right)\right).$$

قابل بیان است. می‌توان دریافت که با کاهش دما و تمایل آن به همگرایی، افزایش اولیه‌ای در انرژی آزاد هلمهولتز وجود دارد.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، رفتار طیف انرژی و توابع موج بهنجار مربوط به پتانسیل تعمیم‌یافته نوع نمایی در حضور ریسمان کیهانی به‌عنوان یک نقص توپولوژیکی مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور، معادله شرودینگر با بهره‌گیری از روش نیکیفوروف–یواروف و تقریب گرین–آلدریش برای حالت‌های کوانتومی حل شده و مقادیر ویژه انرژی و توابع ویژه متناظر به دست آمده‌اند. در ادامه، با استفاده از سطوح انرژی حاصل، تابع پارش سامانه در حضور نقص توپولوژیکی محاسبه شده و تأثیر این نقص بر ویژگی‌های ترمودینامیکی، از جمله انرژی آزاد هلمهولتز مورد مطالعه قرار گرفته است.

این یافته‌های حاصل از این پژوهش بیانگر آنند که ساختار هندسی فضا–زمان ناشی از نقص توپولوژیکی، نقش مهمی در تعیین ساختار انرژی و رفتار ترمودینامیکی سامانه ایفا کرده و می‌تواند به‌عنوان عاملی مؤثر در تغییر خواص کوانتومی و آماری سیستم‌های فیزیکی مورد توجه قرار گیرد.

مرجع‌ها

[1] H. I. Alrebdi, A. N. Ikot, I. B. Okon, U. S. Okorie & R. Horchani, *International Journal of Modern Physics A* **25** (2025) 25501106.
[2] F. M. Fernández, *Frontiers in Physics* **12** (2024) 1361070.
[3] H. Mansour & A. Gamal, *Results in Physics* **35** (2022) 105203.
[4] R. L. Greene and C. Aldrich, *Phys. Rev. A* **14** (1976) 2363.
[5] H. Alrebdi, A. N. Ikot, U. S. Okorie, G. J. Rampho & R. Horchani, *Front. Phys.* **13** (2025) 1620283.
[6] F. Ahmed & A. Bouzenada, *Scientific Reports* **15** (2025) 34177.
[7] G. Szego, *"Orthogonal Polynomials"*, American Mathematical Society, New York, (1959).
[8] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *"Table of Integrals, Series and Products"*, Academic Press, New York, (1965).

تأثیر روش پیش‌بینی–مشاهده–تبیین (POE) و شبیه‌ساز PhET بر درک مفهومی نمودارهای حرکت در دانش‌آموزان: مطالعه‌ای بر مبنای تحلیل داده‌های پیش‌آزمون–پس‌آزمون

زینب موسی پور خوئینی

دبیر فیزیک آموزش‌وپرورش، شهرستان‌های استان تهران، ورامین، ایران

چکیده

این پژوهش به بررسی اثربخشی ترکیب روش پیش‌بینی–مشاهده–تبیین (POE) و شبیه‌ساز تعاملی PhET در ارتقاء درک مفهومی دانش‌آموزان از نمودارهای حرکت پرداخت. مطالعه بر روی ۱۶ دانش‌آموز با استفاده از طرح پیش‌آزمون–پس‌آزمون انجام شد. درک مفهومی از طریق یک آزمون تشخیصی چهارسطحی (سطح A درک درست، B پاسخ درست با استدلال ناقص، C تصور غلط پایدار، D کمبود دانش) سنجیده شد. نتایج نشان داد که پس از مداخله آموزشی، میانگین نمرات در سطح A به‌طور کلی ۱۷ واحد افزایش یافته و تصورات غلط (سطح C) و کمبود دانش (سطح D) کاهش معناداری داشته است. بیشترین پیشرفت در تحلیل کمی نمودارها مشاهده شد، در حالی که مفاهیم انتزاعی‌تر مانند شتاب و تفسیر کیفی حرکت همچنان چالش‌برانگیز باقی ماندند. این یافته‌ها نشان‌دهنده پتانسیل بالای روش POE و ابزارهای شبیه‌سازی در تسهیل یادگیری فعال و اصلاح تصورات غلط در حوزه مکانیک کلاسیک است، اما بر ضرورت توجه به عمق مفاهیم و زمان‌بر بودن بازسازی ساختارهای مفهومی پیچیده تأکید دارد.

واژه های کلیدی: *روش POE ، شبیه‌ساز PhET ، نمودارهای حرکت، حرکت‌شناسی، یادگیری فعال، درک مفهومی، تصورات غلط*

The Effect of Predict-Observe-Explain (POE) Method and PhET Simulator on Students' Conceptual Understanding of Motion Diagrams: A Study Based on Pretest-Posttest Data Analysis

Zeinab Musapour Khoeini

Teacher of Physics Education, Tehran Province, Varamin, Iran

Abstract

This study examined the effectiveness of combining the Predict-Observe-Explain (POE) method and the PhET interactive simulator in improving students' conceptual understanding of motion diagrams. The study was conducted on 16 students using a pretest-posttest design. Conceptual understanding was measured through a four-level diagnostic test (Level A correct understanding, B correct answer with incomplete reasoning, C persistent misconception, D lack of knowledge). The results showed that after the educational intervention, the average scores at Level A increased by 17 points overall, and there was a significant decrease in misconceptions (Level C) and lack of knowledge (Level D). The greatest improvement was observed in the quantitative analysis of the diagrams, while more abstract concepts such as acceleration and qualitative interpretation of motion remained challenging. These findings indicate the high potential of the POE method and simulation tools in facilitating active learning and correcting misconceptions in the field of classical mechanics, but emphasize the necessity of paying attention to the depth of concepts and the time-consuming nature of reconstructing complex conceptual structures.

Keywords *POE method, PhET simulator, motion diagrams, kinematics, active learning, conceptual understanding, misconceptions.*

مقدمه

فیزیک، به‌ویژه مفاهیم حرکت‌شناسی، یکی از دروس بنیادین در نظام آموزشی است که فهم آن مستلزم درک عمیق روابط میان مفاهیم انتزاعی و نمایش‌های گرافیکی آن‌هاست [۱]. با این حال، مطالعات متعددی نشان داده‌اند که دانش‌آموزان اغلب در تفسیر نمودارهای حرکت (مانند نمودار مکان–زمان، سرعت–زمان و شتاب–زمان) با دشواری‌های جدی روبرو هستند. این دشواری‌ها معمولاً ناشی از تصورات غلط ریشه‌دار درباره ارتباط بین کمیت‌های فیزیکی و ویژگی‌های نمودارها (مانند شیب، مساحت زیر نمودار) است [۲]. استراتژی POE یکی از استراتژی‌های مؤثری است که به یادگیرندگان اجازه می‌دهد ایده‌های از پیش ساخته شده خود در مورد علم را توجیه کرده و پس از انجام تحقیقات، آنها را بازسازی کنند؛ بنابراین، می‌توانند تصورات غلط خود را در مورد موضوعات خاص اصلاح می‌کنند [۳]. در استراتژی POE، ابتدا از دانش‌آموزان خواسته می‌شود که فرضیه‌هایی در مورد نتیجه یک پدیده خاص بسازند یا فرضیه‌هایی را مطرح کنند و دلایلی برای فرض خود ارائه دهند. ثانیاً، یک آزمایش یا نمایش برای آزمایش فرضیات خود انجام دهند و پیش‌بینی خود را ارزیابی کنند تا بررسی کنند که آیا بین پیش‌بینی آنها و مشاهده واقعی اختلاف وجود دارد یا خیر. و در آخر، توضیحی در مورد یک مفهوم خاص بر اساس مشاهدات خود ارائه دهند و ایده‌های خود را در میان سایر دانش‌آموزان مورد بحث قرار دهند [۴،۵].

در سال‌های اخیر، شبیه‌سازهای تعاملی مبتنی بر وب، مانند مجموعه شبیه‌سازهای PhET دانشگاه کلرادو، به ابزارهای قدرتمندی در آموزش علوم تبدیل شده‌اند. این شبیه‌سازها امکان تجسم مفاهیم انتزاعی، دستکاری متغیرها و مشاهده آنی اثرات را فراهم می‌کنند و می‌توانند تجربه یادگیری عمیق‌تر و معنادارتری را برای دانش‌آموزان ایجاد کنند [۶]. با توجه به پتانسیل روش POE در فعال‌سازی شناختی و اثربخشی شبیه‌سازهای PhET در تسهیل یادگیری مفهومی، پژوهش حاضر با هدف بررسی تأثیر هم‌افزایی این دو رویکرد بر درک دانش‌آموزان از نمودارهای حرکت انجام شده است. این مطالعه بر داده‌های جمع‌آوری شده از یک مداخله آموزشی خاص متمرکز است تا تغییرات مفهومی مشاهده شده را در سطوح مختلف درک، مورد تجزیه و تحلیل قرار دهد.

نوع پژوهش و نمونه مورد مطالعه

پژوهش حاضر از نظر هدف، کاربردی و از نظر روش گردآوری داده‌ها، از نوع پژوهش‌های پیش‌تجربی با طرح تک‌گروهی پیش‌آزمون–پس‌آزمون است. جامعه آماری پژوهش شامل ۱۶ دانش‌آموز (دختر پایه دوازدهم تجربی در یک مدرسه دولتی واقع در شهرستان ورامین، استان تهران) بود که به صورت هدفمند انتخاب شدند. این گروه ابتدا تحت پیش‌آزمون قرار گرفته و پس از اجرای مداخله‌ی آموزشی، مجدداً در مرحله پس‌آزمون مورد سنجش قرار گرفتند.

ابزار اندازه‌گیری

جهت ارزیابی درک مفهومی دانش‌آموزان از نمودارهای حرکت، از آزمون تشخیصی استاندارد TUG-K (نسخه بازنگری شده توسط زاوالا و همکاران) [۷] شامل ۲۶ سؤال استفاده شد. این آزمون در قالب یک ساختار چهارسطحی طراحی شده است که سطوح مختلف درک را شامل می شود: سطح A (درک درست، پاسخ و استدلال صحیح)، سطح B (پاسخ درست با استدلال ناقص)، سطح C (تصور غلط پایدار)، سطح D (کمبود دانش). برای تحلیل دقیق‌تر داده‌ها، از دو شیوه نمره‌گذاری مکمل استفاده شد: نخست، نمره‌گذاری مجزا جهت تفکیک «دانش محتوایی» (صحت پاسخ) از «دانش تبیینی» (صحت استدلال) و دوم، نمره‌گذاری ترکیبی که در آن تنها در صورت صحت هم‌زمان پاسخ و دلیل، نمره ۱ اختصاص یافت تا اثر حدس تصادفی به حداقل برسد. در نهایت، میانگین و فراوانی نمرات حاصل از پیش‌آزمون و پس‌آزمون برای هر دو شیوه مورد مقایسه توصیفی قرار گرفت.

فرایند مداخله آموزشی

مداخله‌ی آموزشی در این پژوهش شامل کاربرگ‌های طراحی شده بر اساس رویکرد POE بر اساس استفاده از نرم افزار PHET

است، که در ۵ جلسه آموزشی هر جلسه به مدت ۲۰ دقیقه اجرا شد. شامل دو بخش اصلی بود: ۱- آموزش مبتنی بر روش POE : برای هر مفهوم کلیدی مرتبط با نمودارهای حرکت (مانند تعریف سرعت، شتاب، رابطه بین نمودار مکان-زمان و سرعت-زمان)، مراحل پیش‌بینی، مشاهده و تبیین به صورت فعال توسط دانش‌آموزان طی می‌شد.۲- استفاده از شبیه‌سازPhET : در بخش مشاهده و گاهی تبیین، از شبیه‌سازهای مرتبط PhET مانند شبیه‌ساز "Moving man" استفاده گردید. دانش‌آموزان قادر بودند پارامترهایی مانند سرعت اولیه، شتاب و زمان را تغییر داده و اثر آن را بر نمودارهای حرکت مشاهده کنند.

تحلیل داده‌ها

داده‌های حاصل از پیش‌آزمون و پس‌آزمون به‌صورت توصیفی و مقایسه‌ای تحلیل شدند. با توجه به حجم محدود نمونه (۱۶نفر)، تمام تحلیل‌های کمّی در سطح آمار توصیفی گزارش می‌شوند و از آزمون‌های استنباطی استفاده نشده است. درصد فراوانی دانش‌آموزان در هر یک از سطوح A، B، Cو D برای هر سؤال و در کل آزمون محاسبه گردید. تغییرات مشاهده شده در سطوح مختلف درک مفهومی (به‌ویژه انتقال از سطوح پایین‌تر به سطوح بالاتر) و همچنین میزان پایداری تصورات غلط مورد بررسی قرار گرفت.

جدول۱- مجموع تعداد دانش‌آموزان در هر سطح، برای تمام ۲۶ سؤال را در پیش‌آزمون و پس‌آزمون

تغییر	پس‌آزمون (مجموع)	پیش‌آزمون (مجموع)	سطح
+۲۲	۸۹	۶۷	— A**درک علمی**
+۲۵	۱۵۰	۱۲۵	— Bمثبت کاذب
-۴۵	۱۰۶	۱۵۱	— Cتصور غلط پایدار
-۲۸	۷۱	۹۹	— Dکمبود دانش

تفسیر: سطح C (تصور غلط پایدار) و D (کمبود دانش) هر دو کاهش معناداری داشتند. با این حال، بخشی از این کاهش به سطح B (مثبت کاذب) منتقل شده - یعنی دانش‌آموزان پاسخ درست را یاد گرفتند اما استدلال علمی دقیق هنوز شکل نگرفته است. سطح A رشد ۱۷ واحدی داشته که نشانه مثبتی است.

روند تغییرات بر اساس نوع سؤالات:

استخراج کمی از نمودارها: این حوزه بیشترین پیشرفت را نشان داد. به‌طور خاص، **سؤال ۱۶** که به محاسبه سرعت متوسط از نمودار مکان-زمان مربوط می‌شد، از وضعیت غالب سطح D در پیش‌آزمون به سطح A در پس‌آزمون ارتقاء یافت. سؤالات ۱۰ و ۱۹ نیز بهبود چشمگیری داشتند. این امر بیانگر توانایی دانش‌آموزان در استفاده صحیح از روابط ریاضی برای تحلیل داده‌های تصویری است. رابطه سرعت و نمودار مکان-زمان: در این زمینه، پیشرفت‌ها تا حدی متغیر بود. در حالی که سؤال ۱۳ (مرتبط با درک مفهوم شیب نمودار مکان-زمان به عنوان سرعت) بهبود قابل توجهی داشت، سؤال ۵ که به تمایز بین موقعیت و جابجایی می‌پردازد، عمدتاً در سطح C باقی ماند. این نشان‌دهنده پایداری تصور غلط رایج مبنی بر یکی دانستن موقعیت و جابجایی است. مفهوم شتاب و نمودار سرعت-زمان: در این بخش، دانش‌آموزان چالش جدی‌تری داشتند .سؤالات ۶ و ۷ (مرتبط با تفسیر شتاب از شیب نمودار سرعت-زمان) از سطح C به B ارتقا یافتند، اما سطح A (درک عمیق) همچنان در حد صفر باقی ماند. این یافته با مطالعات پیشین که شتاب را یکی از مفاهیم انتزاعی و دشوار در حرکت شناسی معرفی می‌کنند، هم‌خوانی دارد.

تبدیل نمودارها: این مهارت نیز نتایج ترکیبی داشت. سوال ۱۴ (تبدیل نمودار مکان-زمان به سرعت-زمان) بهبود یافت، اما **سؤال ۲۱** (تبدیل نمودار سرعت-زمان به مکان-زمان) با افت جزئی مواجه شد. این امر نشان می‌دهد که مهارت تبدیل بین نمایش‌های مختلف یک پدیده فیزیکی نیازمند تمرینات هدفمند و متنوع است.

تفسیر کیفی حرکت: این حوزه بیشترین مقاومت مفهومی را از خود نشان داد. سؤال ۲۰ (تفسیر مفهومی شتاب در یک وضعیت پیچیده) بدترین نتیجه را داشت و در پس آزمون نیز در سطح D باقی ماند. این موضوع تأکید می‌کند که درک کیفی و مفهومی عمیق، فراتر از محاسبات و تبدیل‌های سطحی، نیازمند فرایندهای یادگیری عمیق‌تر و طولانی‌مدت‌تر است.

روایی و پایایی ابزار

آزمون TUG-K یک ابزار استاندارد با سابقه‌ی پژوهشی گسترده است که روایی سازه‌ی آن در پژوهش‌های متعدد بین‌المللی تأیید شده است [۷, ۸]. روایی صوری و محتوایی این پژوهش با نظر متخصصان و اجرای آزمایشی تأیید شد. کاربرگ‌های آموزشی نیز طی دو مرحله بر اساس تحلیل پیش‌آزمون و نظر متخصصان جهت انطباق با رویکرد POE اعتبارسنجی شدند. با توجه به حجم محدود نمونه (۱۶ نفر)، محاسبه ضریب پایایی درونی (مانند آلفای کرونباخ یا KR-۲۰) از توان آماری کافی برخوردار نبوده و قابل اتکا نیست. از این رو، در این پژوهش به پایایی گزارش‌شده در پژوهش‌های اصلی [۷, ۸] استناد می‌شود و پایایی تحلیل کیفی پاسخ‌ها از طریق توافق میان‌ارزیابان (دو متخصص) و حصول اجماع در کدگذاری A/B/C/D تضمین گردیده و عدم محاسبه‌ی کمیِ پایایی بین‌کدگذاران نیز از محدودیت‌های روش‌شناختی این مطالعه است.

بحث و نتیجه‌گیری

روش POE با فعال‌سازی فرایندهای شناختی و مواجهه‌سازی دانش‌آموز با پیش‌بینی‌ها و مشاهدات خود، زمینه را برای یادگیری عمیق‌تر فراهم می‌آورد [۳]. شبیه‌سازهای PhET نیز با ارائه تجسم‌های پویا و تعاملی، به دانش‌آموزان کمک می‌کنند تا مفاهیم انتزاعی را بهتر درک کرده و روابط علت و معلولی را مشاهده کنند [۹]. افزایش چشمگیر در سطح A برای سؤالات مربوط به استخراج کمی نمودارها، نشان‌دهنده توانایی دانش‌آموزان در استفاده از ابزارهای ریاضی برای تحلیل پدیده‌های فیزیکی با کمک این رویکردهاست. این یافته با نتایج مطالعاتی که بر نقش تجسم و ابزارهای محاسباتی در یادگیری فیزیک تأکید دارند، همسو است [۱۰]. با این حال، پایداری تصورات غلط در مفاهیمی مانند شتاب و تفسیر کیفی حرکت، اهمیت چالش‌های ذاتی این مفاهیم را برجسته می‌سازد. شتاب، به عنوان یک مفهوم دو مرحله‌ای (تغییر سرعت)، اغلب با مفهوم سرعت اشتباه گرفته می‌شود و درک آن نیازمند بازسازی عمیق‌تر ساختارهای مفهومی است [۷]. همچنین، تفسیر کیفی حرکت که نیازمند تلفیق چندین مفهوم (سرعت، شتاب، جهت) و درک روابط پیچیده آن‌هاست، فراتر از توانایی‌های یک مداخله کوتاه مدت یا صرفاً محاسباتی است [۱۱]. افزایش سطح B نشان می‌دهد که یادگیری لزوماً یک جهش ناگهانی به سوی درک کامل نیست، بلکه اغلب یک فرایند تدریجی است که در آن دانش‌آموزان ابتدا به درک سطحی دست یافته و سپس با تمرین و بازنگری، استدلال خود را تعمیق می‌بخشند [۵]. این موضوع اهمیت ارزیابی‌های مستمر و ارائه بازخورد سازنده را روشن می‌سازد. این مطالعه نشان داد که ترکیب روش POE و شبیه‌ساز PhET یک استراتژی آموزشی مؤثر برای بهبود درک مفهومی دانش‌آموزان از نمودارهای حرکت است. این رویکرد توانست به میزان قابل توجهی دانش صحیح را افزایش داده و تصورات غلط رایج را کاهش دهد، به‌ویژه در حوزه‌هایی که تحلیل کمی نمودارها مد نظر بود. با این حال، مفاهیم انتزاعی‌تر مانند شتاب و تفسیر کیفی حرکت همچنان نیازمند توجه ویژه و مداخلات آموزشی تکمیلی هستند.

منابع

[۱] Redish, Edward F., and Juan R. Burciaga. "Teaching physics with the physics suite." *American Journal of Physics* ۷۲,۳ (۲۰۰٤): ٤١٤-٤١٤.
[۲] Planinic, Maja, et al. "Comparison of university students' understanding of graphs in different contexts." *Physical Review Special Topics—Physics Education Research* ۹,۲ (۲۰۱۳): ۰۲۰۱۰۳.
[۳] Yatmanto, Yatmanto, Peduk Rintayati, and Mintasih Indriayu . "The effectiveness of POE (Predict-Observe-Explain) Differentiated Learning in Science Learning." *Social, Humanities, and Educational Studies (SHES): Conference Series*. Vol. ۸. No. ۱. ۲۰۲۵
[٤] Udo, Mfon Effiong. "Effect of guided-discovery, student -centred demonstration and the expository instructional strategies on students' performance in chemistry." *African research review* ٤,٤ (۲۰۱۰)
[٥] Inyang, F. N. U., et al. "Effect of Guided-Discovery and Expository Instructional Methods on Secondary Schools Students Academic Achievement in Physics in Ikot Abasi Local Government Area, Akwa Ibom State, Nigeria." *Journal of research in education and society* ١٤,٢ (٢٠٢٣): ٨٠-٩٠.
[٦] فاخری، هدی. ۱۳۹۸. اثربخشی استفاده از شبیه ساز آموزشی فیزیک بر یادگیری و انگیزش دانش آموزان دختر دوره اول متوسطه
[۷] Beichner, Robert J. "Testing student interpretation of kinematics graphs." *American journal of Physics* ٦٢,٨ (١٩٩٤): ٧٥٠-٧٦٢.
[۸] Zavala, Genaro, et al. "Modifying the test of understanding graphs in kinematics." *Physical Review Physics Education Research* ١٣,٢ (٢٠١٧): ٠٢٠١١١
[۹] وکیلی، میلاد. ۱٤۰۲. تأثیر نرم افزارهای شبیه ساز آموزش فیزیک بر یادگیری و انگیزش دانش آموزان پایه دوازدهم تجربی شهرستان سراوان
[۱۰] Brookhart, Susan M. *How to create and use rubrics for formative assessment and grading*. Ascd, ۲۰۱۳.
[۱۱] Demirci, N. (۲۰۰۵). A Study about Students' Misconceptions in Force and Motion Concepts by Incorporating a Web-Assisted Physics Program. Turkish Online Journal of Educational Technology-TOJET, ٤(٣), ٤٠-٤٨

اصلاحات نسبیتی جرم و پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی در طیف جرم هایپر هسته‌ها

آرزو جهانشیر

گروه فیزیک و علوم مهندسی، مرکز آموزش عالی فنی و مهندسی بوبین زهرا

چکیده

در این پژوهش ویژگی بارز نیمهٔ عمر نسبتا بالای هایپر هسته‌ها در مقایسه با زمان تعاملات معمول برهمکنش‌های هسته‌ای بررسی شده است. بدین منظور برای مقایسه پایداری پیوند مقید تحت نفوذ هایپرون سنگین $(Y: \Omega^-)$ در هسته، معادله تغییر شکل یافته شرودینگر در نظر گرفته شده است. محاسبه طیف جرم هایپر هسته‌های تولید شده تحت پتانسیل برهمکنش تکمیلی متشکل از عبارات کولنی–موضعی–غیرموضعی در کنار اصلاحات نسبیتی جرم، پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی و اسپینی حائز اهمیت است. به همین دلیل پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی به عنوان بخش غیر آشفته در سرعت‌های بالادر نظر گرفته شده است. این پتانسیل از طریق سری توانی مرتبه‌های بالای نسبت سرعت نسبی ذرات به سرعت نور v/c بدست می‌آید. روابط بدست آمده از اصلاحات نسبیتی جرم و پتانسیل در محاسبه طیف جرم، جرم نسبیتی ذرات در پیوند مقید هسته–هایپرون‌های سنگین و سبک قابل اعمال است و در این مقاله به آ»پرداخته شده است.

کلید واژه‌ها: *هامیلتونی نسبیتی، پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی، معادله شرودینگر*

Relativistic Mass and Non-Perturbative Relativistic Potential Corrections to Hypernuclei Mass Spectrum

Jahanshir Arezu

Department of Physics and engineering sciences, Buein Zahra Technical University

Abstract

A typical feature of hypernuclei is their relatively long lifetime compared with the characteristic timescale of conventional nuclear interactions. In the present study, this property is investigated by examining the stability of bound state under the influence of a heavy hyperon $(Y: \Omega^-)$ through a modified Schrödinger equation. To accurately determine the mass spectra of the resulting hypernuclei, a total interaction potential is employed, consisting of Coulomb, local, and nonlocal components, together with relativistic mass corrections, a relativistic nonperturbative potential, and spin-dependent interactions. In particular, the relativistic nonperturbative potential is preserved as the dominant interaction at high velocities rather than as a perturbative correction. This potential is derived from a higher-order power-series expansion in the relative velocity-to-light-speed ratio, (v/c). The resulting relativistic corrections to both the particle masses and the interaction potential are incorporated into the calculation of the hypernuclear mass spectrum, enabling a consistent description of the relativistic bound-state masses for bound state containing both heavy and light hyperons. These aspects constitute the primary focus of the present work.

keywords: *Relativistic Hamiltonian, Relativistic non-Perturbative potential, Schrödinger equation*

مقدمه

گیراندازی یک یا دو هایپرون توسط هسته‌های سنگین در برهمکنش قوی منجر به تولید هایپر هسته‌هایی با یک یا چند کوارک شگفت می‌شود. در حال حاضر پژوهش‌های انجام شده برای در اختیار داشتن نتایج محاسبات نظری در این موضوع به منظور آماده‌سازی برای یکی از مهم‌ترین دوره‌های تاریخی تحول هایپرهسته‌ها که در ده سال آینده در شتابدهنده‌ی FAIR-GSI (آلمان)،NICA (روسیه)، بزرگ‌ترین پروژه هسته‌ای جدید چین HIAF و شتابدهنده‌های KEK و J-PARC (ژاپن) رقم خواهد خورد حائز اهمیت است [۲,۱]. نتایج نظری برای مقایسه با داده‌های تجربی آینده در توصیف مدل‌های هادرونی، پتانسیل‌های کوارکی و حتی روش‌های کاربردی محاسبه طیف جرم ذرات در فیزیک انرژی بالا ضروری است. زیرا تطابق داده‌ها مستقیماً وارد مدل‌سازی ماده درونی ستارگان نوترونی، هادرون‌های عجیب و هایپرهسته‌های سنگین با تعداد بیشتر کوارک شگفت خواهد شد. از این رو با توجه به ویژگی بارز نیمهٔ عمر نسبتا بالای هایپر هسته‌ها در مقایسه با زمان

تعاملات معمول برهمکنش‌های هسته‌ای، برای بررسی و مقایسه پایداری پیوند مقید در نفوذ هایپرون سنگین (Ω^- ،Y:) در هسته در نظر گرفته شده است. دینامیک برهمکنش با استفاده از معادله تغییر شکل یافته شرودینگر برای محاسبه طیف‌جرم هایپر هسته‌های تولید شده انتخاب شده است. پتانسیل برهمکنش تکمیلی متشکل از عبارت کولنی–موضعی با تصحیح مرتبه اول غیر موضعی و پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی را به شکل[۳]

$$V = \frac{-z\alpha}{r} + V_a e^{-(r/\sigma_a)^2} - V_r e^{-(r/\sigma_r)^2} + V_{rel} \qquad (۱)$$

در نظر می‌گیریم. عبارت پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی به عنوان بخش غیر آشفته نسبیتی در سرعت‌های بالا (ابر نسبیتی) از بسط سری توانی مرتبه‌های بالای نسبت سرعت نسبی ذرات سیستم به سرعت نور v/c در معادلات برهمکنش استخراج شده است[٤]. در این پژوهش نظری، بخش موثر پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی برهمکنش پیوند مقید بر خلاف مطالعات گذشته پنهان و بدون توجه نگه داشته نمی‌شود بلکه سهم آن در هامیلتونی کل پیوند مقید و برهمکنش قوی در نظر گرفته می‌شود. روابط بدست آمده از اصلاحات نسبیتی جرم و پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی در محاسبه طیف‌جرم، جرم نسبیتی ذرات در پیوند مقید هسته–هایپرون سنگین و سبک اعمال شده و نتایج عددی ارائه شده است.

اصلاحات نسبیتی پیوند مقید

برهمکنش دو ذره در پتانسیل مشخص شده پیوند مقید یا نیمه مقید را شکل می‌دهد. در فیزیک ذرات و برهمکنش قوی اثرات نسبیتی قابل تامل بوده و در نظر داشتن تمامی اثرات بر روی طیف جرم ضروری است. از این رو در این مقاله به دو بخش اصلاحات نسبیتی جرم و پتانسیل غیر اختلالی در پیوند مقید–نیمه مقید هسته و هایپرون منفی پرداخته‌ایم. در برهمکنش قوی و سرعت‌های ابر نسبیتی سهم برهمکنش غیر اختلالی نسبیتی در عبارات نهایی پتانسیل که به عنوان مثال برای پیوند مقید هسته و هایپرون می‌تواند به صورت پتانسیل کولنی، موضعی، غیر موضعی و اسپینی باشد لازم است گنجانده شود. در این پاراگراف به اختصار عبارت پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی را با استفاده از بسط سری توانی مرتبه‌های بالای v/c را بدست می‌آوریم. بدین منظور برای برهمکنش دو ذره در میدان خارجی دلخواه A در ابتدا رفتار تک ذره را با استفاده از معادله تابع گرین و اصول مکانیک کوانتومی مطابق رابطه (۲) جستجو می‌نماییم [٦–٤]

$$(i\partial_x + gA)^2 + m^2)G(x|A) = \delta(x) \qquad (۲)$$

ابتدا رابطه انتگرال‌گیری «بازنمایی آلفا» یا «بازنمایی طیفی»

$$\frac{1}{(m^2-p^2-i\varepsilon)^k} = i\int_0^\infty e^{\{i\alpha(p^2-m^2+i\varepsilon)\}}\, d\alpha$$

و رابطه $e^{\alpha\frac{\partial}{\partial r}F(r)} = F(r+\alpha)$ را برای ساده‌سازی روابط تابع گرین و تابع قطبش حلقه در نظر می‌گیریم. سپس در سیستم طبیعی آحاد ($\hbar = c = 1$) معادله (۱) را به شکل معادله (۳) بدست می‌دهد

$$G(x|A) = -i\int_0^\infty dt\, e^{\{it[i\partial_x+gA)^2+m^2+i\varepsilon]\}}\,\delta(x) \qquad (۳)$$

برای حل معادله (۳)، از رابطه دیفرانسیلی زیر بهره می‌جوییم

$$\frac{\partial Y(t)}{\partial t} = gH(t)Y(t) \qquad (٤)$$

$-H(t)$ عملگردلخواه با شرط $[H(t),H(t')] \neq 0$ تصور می‌شود. حل معادله (٤) را به شکلی از سری توانی ضرایب برهمکنش دنبال می‌نماییم

$$Y(t) = 1 + \sum_n g^n Y_n(t)\,,\quad n = 1,2,3,\cdots,\infty \qquad (٥)$$

و حل رابطه (۳) را با مشتق‌گیری از دو طرف رابطه نسبت به پارامتر t بدست می‌آوریم

$$\frac{\partial Y(t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^\infty g^n \frac{\partial Y_n(t)}{\partial t} \qquad (٦)$$

با ادغام روابط (٤–٦) خواهیم داشت

$$\sum_{n=1}^\infty g\frac{\partial Y_n(t)}{\partial t} = gH(t) + \sum_{n=1}^\infty g^{n+1}H(t)Y_n(t) \qquad (۷)$$

تحلیل معادله (۷) در مرجع [٤] بیان شده است و به شکل نهایی

$$Y(t) = T_\tau \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n!}\left(g\int_0^t d\tau H(\tau)\right)^n = e^{\left[g\int_0^t d\tau H(\tau)\right]} \qquad (۸)$$

بازنویسی می‌شود. سپس حل تابع گرین (۲) را از توابع انتگرال مسیر فاینمن بدست می‌آوریم

$$G(x|A) = \int_0^\infty \frac{ds}{(4\pi s)^2} e^{\left[-sm^2-\frac{x^2}{4s}\right]} \int d\sigma_\beta e^{\left[ig\int_0^s d\xi \frac{\partial Z_\alpha(\xi)}{\partial \xi}A(\xi)\right]} \qquad (۹)$$

اکنون برهمکنش دو ذره با جرم سکون m_1 و m_2 که در فاصله x در برهمکنش مقید یا شبه مقید هستند را در نظر می‌گیریم. تابع قطبش حلقه دو ذره‌ای

$$\Pi(x) = \langle G_{m_1}(x|A)G_{m_2}(x|A)\rangle_{x\to\infty} = ce^{\left[-M\sqrt{|x|}\right]} \qquad (۱۰)$$

بدین شکل تعریف می‌شود و بر اساس دستاوردهای نظریه مکانیک کوانتومی جرم پیوند مقید M را در شرایط حدی بدست می‌دهد

$$M = -lim_{x\to\infty}\frac{ln\,\Pi(x)}{\sqrt{|x|}} \qquad (۱۱)$$

استفاده از رابطه (۹) تابع قطبش حلقه نیز در شکل انتگرالی

$$\Pi(x)=\int_0^\infty\int_0^\infty \frac{d\mu_1 d\mu_2}{(8x\pi^2)^2} e^{\left[-\frac{|x|}{2}\left(\frac{m_1^2}{\mu_1}+\frac{m_2^2}{\mu_2}+\mu_1+\mu_2\right)\right]} R(\mu)$$

$$R(\mu)=\int\int N\,dx_{01}dx_{02}e^{-\left[\int d\tau\frac{\mu_i}{2}\sum_{i=1}^2(\dot{x}_i(\tau))^2\right]}\times e^{-[V_{11}+V_{22}-V_{12}-V_{21}]} \quad (۱۲)$$

را در نظر گرفته وبا استفاده از (۱۱–۱۲) طیف جرم پیوند مقید [۵،٤]

$$M=\mu_1+\mu_2+\mu\frac{dE(\mu)}{d\mu}+E(\mu) \quad (۱۳)$$

پارامتر $\mu=\frac{\mu_1\mu_2}{\mu_1+\mu_2}$ جرم کاهیده سیستم مقید، μ_i جرم موثر ذرات یا جرم نسبیتی ذرات در پیوند مقید $\mu_i=\sqrt{m_i^2-2\mu^2\frac{dE_\ell(\mu)}{d\mu}}$ و $E(\mu)$ مقدار ویژه هامیلتونی سیستم مقید می‌باشد. $R(\mu)$ تمامی برهمکنش‌های دو ذره‌ای و تک ذره‌ای را در برداشته و برابر

$$\lim_{|x|\to\infty} R(\mu)=c'e^{[-xE_\ell(\mu)]}=$$
$$\int\int N\,dx_{01}dx_{01}e^{-\left[\int d\tau\frac{\mu_i}{2}\sum_{i=1}^2(\dot{x}_i(\tau))^2\right]}e^{-[V_{ij}]} \quad (۱٤)$$

است. اکنون از روابط $[x,v]^2=\frac{\hat{L}^2}{|x|^3}$, $\hat{L}^2=\hbar^2\ell(\ell+1)$ و $\mu[x,v]=[x,p]$ استفاده کرده و خواهیم داشت [٤]

$$[x,v]^2=\frac{\hat{L}^2}{\mu^2|x|^3}$$

که برای بازنویسی و بازیابی سهم پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی از بخش $e^{-[V_{ij}]}=e^{-[V_{11}+V_{22}-V_{12}-V_{21}]}$ رابطه (۱٤) کارآمد خواهد بود [۳]

$$V_{ij}=(-1)^{i+j}\frac{g^2}{4\pi}\int_0^t\int_0^t d\tau_1 d\tau_2\frac{\delta(\tau_1-\tau_2)}{|r_j(\tau_1)r_j(\tau_2)|}+$$
$$(-1)^{i+j}\frac{g^2}{8\pi}\sum_{k=1}^\infty\frac{(-1)^k}{c^{2k}(2k)!}\int_0^t d\tau\frac{\partial^{2k}}{\partial\tau^{2k}}(r|r_1(\tau)-r_2(\tau)|)^{2k-1} \quad (۱۵)$$

بعد از یکسری ساده سازی ریاضیاتی که در مرجع [٤] به تشریح بیان شده است رابطه نهایی سهم پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی

$$V_{rel}=\frac{-z\alpha}{r}\left(\left(1+\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{(2c\mu r)^2}\right)^{-1/2}-1\right) \quad (۱۶)$$

را با توجه به رابطه (۱) در $\hbar=c=1$ بدست می‌دهد. با توجه به نتایج بدست آمده رابطه (۱۳) اصلاح نسبیتی جرم را بدست می‌دهد و رابطه (۱۶) سهم پتانسیل غیر اختلالی که ناشی از اثرات نسبیتی برهمکنش است را معین کرده است.

اصلاحات نسبیتی در محاسبه طیف جرم

با هدف بدست آوردن طیف جرم پیوند مقید–شبه مقید هایپرون سنگین $(\Omega^-:Y)$ و هایپرون سبک $(\Sigma^-:Y)$ با هسته تحت اصلاحات نسبیتی بیان شده در بند قبل، معادله شعاعی شرودینگر $H\mathcal{R}=E\mathcal{R}$ در فضای n بعدی را در پتانسیل (۱) با در نظر گرفتن شرایط نسبیتی برهمکنش و جایگزینی انرژی نسبیتی دو خوشه‌ای

$$\frac{\hat{p}^2}{2m_i}\to\sqrt{m_i^2+\hat{p}^2}$$

و استفاده از تقریب انرژی بالا

$$\sqrt{m_i^2+\hat{p}^2}\approx\min_{\mu_i}\frac{1}{2}\left(\mu_i+\frac{m_i^2+\hat{p}^2}{\mu_i}\right)$$

بازنویسی می‌نماییم

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+V(r)\right]\mathcal{R}(r)=\left[M-\frac{\mu_1+\mu_2}{2}-\frac{m_1^2\mu_2+m_2^2\mu_1}{2\mu_1\mu_2}\right]\mathcal{R}(r) \quad (۱۷)$$

مقدار ویژه انرژی پیوند مقید در رابطه بالا برابر است با

$$E_\ell(\mu)=\left[M-\frac{\mu_1+\mu_2}{2}-\frac{m_1^2\mu_2+m_2^2\mu_1}{2\mu_1\mu_2}\right] \quad (۱۸)$$

اکنون برای حل معادله بهینه شده نسبیتی شرودینگر از مفاهیم بنیادی نظریه کوانتومی نوسانگر هماهنگ و روش کوانتش دوم عملگرهای خلق و فنا $\hat{a},\hat{a}^\dagger$ بهره جسته و با بازنویسی توان‌های زوج عملگرهای کانونیک $\hat{p}=i\sqrt{\frac{\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger-\hat{a})$ $\hat{q}=\frac{1}{\sqrt{2\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)$ در معادله $\left[\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+V(r)\right]\mathcal{R}(r)=E_\ell(\mu)\mathcal{R}(r)$ و با هدف برای دستیابی به جواب‌های معادله نسبیتی شرودینگر را از روش فضای هم‌تافته $r=q^{2\rho}$ و $\mathcal{R}(r)\to q^{a(\rho,\ell)}\varphi(q)$ که در [۵] به تفصیل بیان شده است و در فضای جدید به ابعاد $\mathfrak{D}=4+4\ell$ استفاده کرده و از روش کوانتش دوم خواهیم داشت

$$\hat{q}^{2n}=\int_{x=0}(-1)^n\frac{de^{-x\hat{q}^2}}{dx^n}=\frac{1}{\omega^n}\frac{\Gamma\left(\frac{\mathfrak{D}}{2}+n\right)}{\Gamma\left(\frac{\mathfrak{D}}{2}\right)}+\Omega_q(\hat{a}^+,\hat{a}^-) \quad (۱۹)$$

$$\hat{p}_q^{\,2n}=\int_{x=0}(-1)^{-n}\frac{de^{-x\hat{p}^2}}{dx^n}=\omega^n\frac{\Gamma\left(\frac{\mathfrak{D}}{2}+n\right)}{\Gamma\left(\frac{\mathfrak{D}}{2}\right)}+\Omega_p(\hat{a}^+,\hat{a}^-)$$

بنابراین با در نظر داشتن لاپلاسی

$$\Delta_r=\frac{d^2}{dr^2}+\frac{n-1}{r}\frac{d}{dr}\to\Delta_q=\frac{d^2}{dq^2}+\frac{\mathfrak{D}-1}{q}\frac{d}{dq}$$

رابطه (۱۹) بدست می‌دهد $\hat{p}_q^2=\frac{\mathfrak{D}}{2}\omega$ و سپس معادله شرودینگر بهینه شده $H\varphi(q)=E_\ell(\mu)\varphi(q)$ در فضای هم‌تافته برای محاسبه طیف جرم پیوند مقید و شبه مقید با رابطه (۲۰) بدست می‌آید[۷،۵]

$$\left[\frac{\mathfrak{D}\omega}{4}+4\mu\rho^2q^{4\rho-2}(V(q)-E_\ell(\mu))\right]\varphi(q)=0 \quad (۲۰)$$

در این مقاله هامیلتونی اسپینی و پتانسیل غیر موضعی در نظر گرفته نشده است. بنابراین با قرار دادن رابطه (۱) در (۲۰) داریم

$$\varepsilon_0(\mu)\varphi(q)=\left[\frac{\mathfrak{D}\omega}{4}+4\mu V_a q^2e^{-(q^2/\sigma_a)^2}-\right.$$
$$4\mu V_r q^2e^{-(q^2/\sigma_r)^2}-4\mu z\alpha\left(1+\frac{\ell(\ell+1)}{4\mu^2q^4}\right)^{-1/2}-$$
$$\left.4\mu q^2E_\ell(\mu)\right]\varphi(q)=0 \quad (۲۱)$$

و با استفاده از سری نمایی $e^{-x}=\sum_0^\infty \frac{(-1)^n x^n}{n!}$ در پتانسیل (۱) حل معادله (۲۰) را با استفاده از شرط اول در روش بسط پایه‌های نوسانگر در فضای همتافته $\frac{d\varepsilon_0(\mu)}{d\rho}=0$ پارامتر $\rho=1$ تعیین شده و از شرط دوم $\frac{d\varepsilon_0(\mu)}{d\omega}=0$ مقدار ویژه انرژی $E(\mu)$ محاسبه می‌نماییم. از این رو برای محاسبه طیف جرم حالت پایه $\ell=0$ و حالات برانگیخته شعاعی با پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی لازم است $\ell>0$ باشد و در روش فضای همتافته و نوسانگر کوانتومی معادله انرژی

$$\varepsilon_\ell(\mu)=\frac{\mathfrak{D}\omega}{4}+4\mu V_a q^2\left(1-\frac{q^4}{{\sigma_a}^2}\right)-4\mu V_r q^2\left(1-\frac{q^4}{{\sigma_a}^2}\right)-$$
$$-4\mu z\alpha\left(1+\frac{\ell(\ell+1)}{4\mu^2 q^4}\right)^{-1/2}-4\mu q^2 E_\ell(\mu)+2n\omega=0 \qquad (۲۲)$$

و معادله انرژی حالات برانگیخته شعاعی با فرض عدد کوانتومی نوسانگر n برابر

$$\varepsilon_\ell(\mu)=\varepsilon_0(\mu)+2n\omega+\langle n|H_I|n\rangle, n=0,1,2,\cdots \qquad (۲۳)$$

است. در رابطه (۲۲) به پایین‌ترین مرتبه سری اکتفا کرده و از بخش اختلالی برهمکنش نیز صرف نظر می‌شود. قراردادن (۱۹) در (۲۲) و سپس در (۲۳) طیف انرژی حالات پایه و برانگیخته شعاعی را بدست می‌دهد [۵]

$$\varepsilon_\ell(\mu)=\frac{\mathfrak{D}\omega}{4}+\frac{2\mu\mathfrak{D}}{\omega}(V_a-V_r)+2n\omega-\frac{2\mu\mathfrak{D}}{\omega}E_\ell(\mu)-\left(\frac{V_a}{{\sigma_a}^2}-\right.$$
$$\left.\frac{V_r}{{\sigma_a}^2}\right)\frac{\mu\mathfrak{D}(\mathfrak{D}+2)(\mathfrak{D}+4)}{2\omega^3}-4\mu z\alpha\left(1+\frac{\ell(\ell+1)}{4\mu^2 q^4}\right)^{-1/2}=0 \qquad (۲۴)$$

بازنویسی سری توانی $(1+\epsilon)^{-1/2}\cong 1-\frac{\epsilon}{2}+\frac{3\epsilon^2}{8}-\cdots$ و ساده‌سازی رابطه خواهیم داشت

$$\varepsilon_\ell(\mu)=\left(\frac{\mathfrak{D}}{4}+2n\right)\omega+\frac{2\mu\mathfrak{D}}{\omega}(V_a-V_r)-\left(\frac{V_a}{{\sigma_a}^2}-\right.$$
$$\left.\frac{V_r}{{\sigma_a}^2}\right)\frac{\mu\mathfrak{D}(\mathfrak{D}+2)(\mathfrak{D}+4)}{2\omega^3}-4\mu z\alpha+2z\alpha\frac{\ell(\ell+1)}{\mu\mathfrak{D}(\mathfrak{D}+2)}\omega^2-$$
$$2\mu\frac{\mathfrak{D}}{\omega}E_\ell(\mu)=0 \qquad (۲۵)$$

حل رابطه بالا با استفاده از شرط روش نوسانگر در فضای همتافته $\frac{d\varepsilon_0(\mu)}{d\omega}=0$ معادله فرکانس نوسانگر از رابطه (۲۶) و با کمینه کردن آن نسبت به ω محاسبه می‌شود [۵]

$$\omega^4-\frac{8\mu z\alpha}{\mathfrak{D}}\omega^3+2(\mathfrak{D}+2)(\mathfrak{D}+4)\left(\frac{V_a}{{\sigma_a}^2}-\frac{V_r}{{\sigma_a}^2}\right)=0 \qquad (۲۶)$$

و همچنین معادله مقدار ویژه انرژی حالت پایه پیوند مقید به صورت

$$E_0(\mu)=\frac{\omega^2}{8\mu}-\frac{2z\alpha\omega}{\mathfrak{D}}+(V_a-V_r)-\left(\frac{V_a}{{\sigma_a}^2}-\frac{V_r}{{\sigma_a}^2}\right)\frac{(\mathfrak{D}+2)(\mathfrak{D}+4)}{4\omega^2} \qquad (۲۷)$$

و مقدار ویژه حالت برانگیخته شعاعی را

$$E_\ell(\mu)=\left(\frac{\mathfrak{D}}{4}+2n\right)\frac{\omega^2}{2\mu\mathfrak{D}}+(V_a-V_r)-\left(\frac{V_a}{{\sigma_a}^2}-\right.$$
$$\left.\frac{V_r}{{\sigma_a}^2}\right)\frac{\mathfrak{D}(\mathfrak{D}+2)(\mathfrak{D}+4)}{4\mathfrak{D}\omega^2}-\frac{2z\alpha\omega}{\mathfrak{D}}+z\alpha\frac{\ell(\ell+1)}{\mu^2\mathfrak{D}^2(\mathfrak{D}+2)}\omega^2 \qquad (۲۸)$$

بدست می‌دهد. معادلات نهایی بدست آمده

$$E_0(\mu)=\frac{\omega^2}{8\mu}+(V_a-V_r)-\left(\frac{V_a}{{\sigma_a}^2}-\frac{V_r}{{\sigma_a}^2}\right)\frac{12}{\omega^2}-\frac{z\alpha\omega}{2} \qquad (۲۹)$$

اولین حالت برانگیخته شعاعی برای $\ell=0{,}1$ و $\mathfrak{D}=4+4\ell$

$$E_1(\mu)=\frac{3\omega^2}{8\mu}+(V_a-V_r)-\left(\frac{V_a}{{\sigma_a}^2}-\frac{V_r}{{\sigma_a}^2}\right)\frac{3}{\omega^2}-\frac{z\alpha\omega}{2}+$$
$$z\alpha\frac{1}{48\mu^2}\omega^2 \qquad (۳۰)$$

اثرات و سهم پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی در جمله سوم (۳۰) در پیوند هایپرون سنگین $(Y:\Omega^-)$ و هایپرون سبک $(Y:\Sigma^-)$ توسط هسته را نشان می‌دهد. با استفاده از (۱۳) و (۳۰) طیف جرم هایپر هسته با اصلاحات نسبیتی جرم در حالت پایه بدست می‌آید

$$M=\sqrt{m_N^2+\frac{\omega^2}{4}}+\sqrt{m_Y^2+\frac{\omega^2}{4}}-\left(\frac{V_a}{{\sigma_a}^2}-\frac{V_r}{{\sigma_a}^2}\right)\frac{12}{\omega^2}-\frac{z\alpha\omega}{2}+$$
$$(V_a-V_r) \qquad (۳۱)$$

نتیجه‌گیری

برهمکنش قوی در انرژی‌های بالا مستقیما با اصلاحات نسبیتی روی جرم و عبارت تکمیلی پتانسیل غیر اختلالی نسبیتی مرتبط بوده و بر روی طیف جرم و مقادیر ویژه انرژی تاثیر گذار بوده و دقت طیف جرم پیوندهای مقید هادرونی را برای مقایسه با نتایج تجربی آتی در شتابدهنده‌های نسل بعد افزایش می‌دهد. چنین ساختارهایی می‌تواند جاذبه قابل توجهی داشته باشد و حتی حالت‌های مقید هادرونی عجیب ایجاد کند. به همین دلیل در برنامه‌های J-PARC،FAIR و NICA جستجوی سامانه‌های هایپرهسته‌های $\Omega^-\mathrm{N},\Omega^-\mathrm{NN},\Omega^-$ یکی از موضوعات جذاب آینده است.

مرجع‌ها

[1] Filikhin I. et al., "$\Omega 3\ cN\ N$ systems with HAL QCD potentials." Physical Review. D. **112**(9) (2025).
[2] Messchendorp, J. et al., "Hadron Physics Opportunities at FAIR." arXiv preprint arXiv:2512.15986 (2025).
[3] Rijken, A., et al., "Baryon-Baryon Interactions: Nijmegen Extended-Soft-Core Models", Progress of Theo.Phys. Supp., **185** (2010).
[4] Jahanshir A., "On nonperturbative and relativistic corrections to the highly resonant hadronic bound states", TTMP, **2**(3), (2025).
[5] Dienykhan M., et al. Oscillator Representation in Quantum Physics, Springer, (1995).
[6] Jacobson, Ted. "Feynman letter on path integral for the Dirac equation." The European Physical Journal H 50.1 **4** (2025).
[7] Jahanshir A., "Relativistic Mass-Potential Extension Effect in Helium Hypernuclei", JMRPh. **7**(1), (2024).

چارچوبی جدید برای توابع بیضوی: اصطلاحات و خواص در جبرهای نظریه ریسمان‌های کوانتومی

بهرامی نسب، محمدرضا[۱]؛ قمی نژاد، مهرداد[۲]

[۱و۲]دانشکده فیزیک دانشگاه سمنان ، کیلومتر ۳ جاده دامغان، سمنان

چکیده

با بررسی کاراکترهای آفین ابر جبر لی $sl(۲|۱)$ و جبر ابر همدیس $N=۲$ می توان آنها را بر حسب توابع تتای بیضوی نمایش داد. در این مقاله تعریف طیفی از توابع تتای بیضوی ژاکوبی ارائه کردیم و به روابط و اتحاد های جدید و همچنین ارتباط آن با توابع تتای ژاکوبی دست یافتیم. این چارچوب طیفی می تواند در استخراج تبدیلات مدولار کاراکترهای $sl(۲|۱)$ و $N=۲$ در نظریه ریسمان های کوانتومی مفید باشد.

واژه های کلیدی: *تابع بیضوی طیفی، توابع بیضوی ژاکوبی، توابع تتای ژاکوبی، کاراکترهای جبری.*

A New Framework for Elliptic Functions: Vocabulary and Properties in Algebras of Quantum String Theory

Bahraminasab, Mohammad Reza[1]; Ghominejad, Mehrdad[2]

[1,2] Department of Physics, University of Semnan, Semnan,

Abstract

By studying the characters of the affine super Lie $sl(2|1)$ algebra and the superconformal $N=2$ algebra, they can be expressed in terms of elliptic theta functions. In this paper, we present a spectral definition of the Jacobi elliptic theta functions and obtain new relations and identities, as well as their connections with the Jacobi theta functions. This spectral framework can be useful for the extraction of modular transformations of characters $sl(2|1)$ and $N=2$ in quantum string theory.

***Keywords**: Spectral elliptic function, Jacobi elliptic functions, Jacobi theta functions, algebraic characters.*

PACS No. (02)

مقدمه

ژاکوبی با تعمیم تابع پارش اویلر توانست توابع تتای ژاکوبی را پایه گذاری کند. این توابع به عنوان توابع دوبل شبه پریودیک مرومورفیک در زمینه های مختلف از جمله تئوری توابع بیضوی، فیزیک آماری، فرم های مدولار و تئوری اعداد کاربرد دارند [۱]. همچنین این توابع در کاراکترهای آفین ابر جبر لی $sl(۲|۱)$ و جبر ابر همدیس $N=۲$ کاربرد دارند. توابع تتای ژاکوبی دارای شکل های نمایش مختلفی هستند اما در این مقاله ما از نمایش طیفی آنها استفاده می کنیم [۲].

تعریف ۱: برای $(\tau,\nu)\in H\times\mathbb{C}$ ، $(q,z):=(e^{۲i\pi\tau},e^{۲i\pi\nu})$ و $\alpha\in\mathbb{R}$ تابع تتای طیف به صورت زیر تعریف می شود:

$$\alpha\Theta(q,z)=\sum_{n\in\mathbb{Z}} q^{\frac{۱}{۲}(n+\frac{\alpha}{۲})^{۲}} z^{(n+\frac{\alpha}{۲})} e^{i\pi\frac{\alpha}{۲}(n+\frac{\alpha}{۲})(\alpha-۱)} \qquad (۱)$$

به طوریکه $\alpha\Theta(\alpha=۳,۱,۰,۲)$ به ترتیب با $\theta_i(i=۱,۲,۳,۴)$ برابر است [۳].

سطوح ریمانی با جینس حداقل یک، همواره یک سری پارامتر مختلط به نام مدول دارند که توسط یک سری تبدیلات که الزاما همانی نیستند قادر به تغییر می باشند. به این تبدیلات که بدون تغییر در شکل سطح ریمانی مقادیر مدول را تغییر می دهند،

تبدیلات مدولار نامیده می شوند. این تبدیلات که به تبدیلات موبیوس معروف اند توسط روابط زیر تولید می شوند:

$$S=\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\qquad T=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

دو مدول مذکور به صورت زیر هستند:

$$T:\tau\to\tau+1,\qquad S:\tau\to-\frac{1}{\tau},\quad \nu\to\frac{\nu}{\tau}$$

لم۱: روابط شبه پریودیک تابع تتای طیف توسط روابط زیر نمایش داده می شوند:

برای $(\alpha,k)\in\mathbb{R}\times\mathbb{C}$ در پریودهای کامل داریم:

$$\begin{aligned}&{}_{\alpha}\Theta(\tau,\nu+k)=e^{\pi ik\alpha}\,{}_{\alpha}\Theta(\tau,\nu),\\ &{}_{\alpha}\Theta(\tau,\nu+k\tau)=e^{\frac{-\pi ik}{2}(\alpha(\alpha-1)+4\nu+2k\tau)}\,{}_{\alpha}\Theta(\tau,\nu),\\ &{}_{\alpha}\Theta(\tau,\nu+k\tau+k)=e^{\frac{-\pi ik}{2}(\alpha(\alpha-3)+4\nu+2k\tau)}\,{}_{\alpha}\Theta(\tau,\nu).\end{aligned}\qquad(۲)$$

برای $(\alpha,\alpha')\in\mathbb{Z}\times2\mathbb{Z}$ در نیم پریود داریم:

$$\begin{aligned}&{}_{\alpha}\Theta(\tau,\nu+\tfrac{1}{2})=e^{\pi i(\alpha-2)(\alpha-1)}\,{}_{\alpha-2}\Theta(\tau,\nu),\\ &{}_{\alpha'}\Theta(\tau,\nu+\tfrac{\tau}{2})=e^{\frac{-\pi i}{4}(4\nu+\tau+\alpha'(3\alpha'+1))}\,{}_{\alpha'+1}\Theta(\tau,\nu),\\ &{}_{\alpha'+2}\Theta(\tau,\nu+\tfrac{\tau+1}{2})=e^{\frac{\pi i}{4}(-4\nu-\tau+\alpha'(\alpha'+11)+8)}\,{}_{\alpha'+1}\Theta(\tau,\nu).\end{aligned}\qquad(۳)$$

لم۲: تبدیلات مدولار تابع تتای طیف توسط روابط زیر بدست می آید:

برای تبدیل T:

$${}_{\alpha}\Theta(\tau+1,\nu)=e^{-\frac{i\pi\alpha}{2}(\frac{\alpha}{2}+1)}\,{}_{\alpha}\Theta(\tau,\nu+\tfrac{\alpha+1}{2})\qquad(۴)$$

برای تبدیل S:

$$\begin{aligned}{}_{\alpha}\Theta(-\tfrac{1}{\tau},\tfrac{\nu}{\tau})&=\sqrt{-i\tau}\,e^{\frac{i\pi}{16\tau}(8\alpha^2\tau+(4\nu+\alpha\tau(\alpha-3))^2)}\\ &\times{}_{\alpha}\Theta(\tau,\nu+\tfrac{\tau\alpha(\alpha-3)}{4}-\tfrac{\alpha(\alpha+1)}{4}).\end{aligned}\qquad(۵)$$

در این مقاله می خواهیم توابع بیضوی ژاکوبی را که می توانند در بدنه کاراکترهای جبری مورد استفاده قرار گیرند را بررسی و مطالعه کنیم [۳] و [۴].

مطالعه و بسط توابع بیضوی ژاکوبی

ریاضیدان ایتالیایی فاگنانو نخستین بار به مطالعه انتگرال های بیضوی پرداخت. پس از او دانشمندان زیادی به گسترش یافته های او پرداختند. ژاکوبی نیز با تعمیم و توسعه دستاوردهای دیگران در این زمینه توانستند توابع بیضوی ژاکوبی را ارائه کند. ما در این مقاله می خواهیم برای اولین بار یک تعریف طیفی از تابع بیضوی ارائه کنیم تا به کمک آن اتحادهای جدید از این توابع ایجاد کنیم.

تعریف۲: برای $(\tau,\nu)\in H\times\mathbb{C}$ و $\alpha\in\mathbb{R}$ تابع بیضوی طیفی به صورت زیر تعریف می شود:

$$\begin{aligned}{}_{\alpha}\mathcal{E}(\tau,\nu)&=e^{\frac{i\pi}{2}((\alpha-1)(\tau\alpha+\frac{\alpha-2}{2})+(3\alpha-1)(2-\alpha)\nu)}\\ &\times\frac{{}_{\alpha}\Theta(\tau,\nu-\frac{\tau}{4}(3\alpha-2)(\alpha-1)-\frac{\alpha-1}{2})\,{}_{\alpha}\Theta(\tau,\frac{-\tau\alpha}{2}-\frac{\alpha(\alpha-2)}{2})}{{}_{\alpha}\Theta(\tau,\nu-\frac{\tau\alpha}{2}-\frac{\alpha(\alpha-1)-2}{4})\,{}_{\alpha}\Theta(\tau,\frac{\tau}{4}(\alpha-1)(\alpha-2)-\frac{\alpha(\alpha-1)}{4})}.\end{aligned}\qquad(۶)$$

در این تعریف α نقش طیفی را دارد و با انتخاب های زیر توابع بیضوی ژاکوبی بدست می آید:

$$\begin{aligned}{}_{0}\mathcal{E}(\tau,\nu)&=snu=\frac{\theta_4(\tau,0)}{\theta_4(\tau,0)}\frac{\theta_1(\tau,\nu)}{\theta_4(\tau,\nu)},\\ {}_{1}\mathcal{E}(\tau,\nu)&=cnu=\frac{\theta_4(\tau,0)}{\theta_3(\tau,0)}\frac{\theta_2(\tau,\nu)}{\theta_4(\tau,\nu)},\\ {}_{2}\mathcal{E}(\tau,\nu)&=dnu=\frac{\theta_4(\tau,0)}{\theta_2(\tau,0)}\frac{\theta_3(\tau,\nu)}{\theta_4(\tau,\nu)},\end{aligned}\qquad(۷)$$

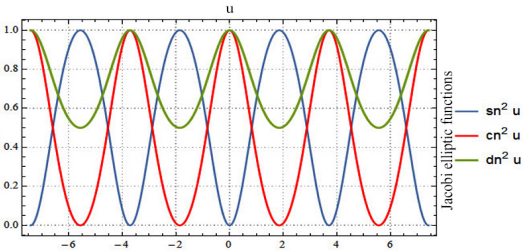
در جدول ۱ تمام توابع بیضوی ژاکوبی را می توان بدست آورد.

جدول۱ : ارتباط بین توابع بیضوی ژاکوبی و تابع بیضوی طیفی

#	توابع بیضوی ژاکوبی	توابع بیضوی طیفی
۱	snu	${}_{0}\mathcal{E}(\tau,\nu)$
۲	cnu	${}_{1}\mathcal{E}(\tau,\nu)$
۳	dnu	${}_{2}\mathcal{E}(\tau,\nu)$
۴	ncu	${}_{1}\mathcal{E}(-\frac{1}{\tau},\frac{\nu}{\tau})$
۵	csu	$i\,{}_{2}\mathcal{E}(\tau,\nu+\frac{\tau}{2})$
۶	ndu	${}_{2}\mathcal{E}(\tau+1,\nu)$
۷	scu	$i.\mathcal{E}(-\frac{1}{\tau},\frac{\nu}{\tau})$
۸	dcu	${}_{2}\mathcal{E}(-\frac{1}{\tau},\frac{\nu}{\tau})$
۹	cdu	$.\mathcal{E}(\tau,\nu+\frac{1}{2})$
۱۰	sdu	$-{}_{1}\mathcal{E}(\tau,\nu+\frac{1}{2})\big/{}_{2}\mathcal{E}(\tau,\frac{1}{2})$
۱۱	nsu	$.\mathcal{E}(\tau,\nu+\frac{\tau}{2})\big/.\mathcal{E}(\tau,\frac{\tau+1}{2})$
۱۲	dsu	$-{}_{2}\mathcal{E}(\tau,\frac{1}{2})\big/{}_{1}\mathcal{E}(\tau,\nu+\frac{1}{2})$
۱۳	k مدول توابع بیضوی	$1\big/.\mathcal{E}(\tau,\frac{\tau+1}{2})$
۱۴	k' مدول مکمل	${}_{2}\mathcal{E}(\tau,\frac{1}{2})$

برای $\alpha=1,2,3$ ما به هشت تابع بیضوی جدید به صورت زیر دست پیدا می کنیم:

$$.\mathcal{E}(\tau+1,\nu)=\frac{\theta_4(\tau,0)}{\theta_4(\tau,0)}\frac{\theta_1(\tau,\nu)}{\theta_4(\tau,\nu)},\qquad(۸)$$



شکل۱ : مقایسه توابع بیضوی sn^2u ، cn^2u و dn^2u برای متغیر حقیقی u و مدول بیضوی $k=0/5$.

$$\mathscr{E}(\tau,\nu+\tfrac{\tau}{2})=\frac{\theta_2(\tau,0)}{\theta_3(\tau,0)}\frac{\theta_4(\tau,\nu)}{\theta_1(\tau,\nu)}, \quad (9)$$

$$_1\mathscr{E}(\tau,\nu+\tfrac{1}{2})=-\frac{\theta_4(\tau,0)}{\theta_3(\tau,0)}\frac{\theta_1(\tau,\nu)}{\theta_2(\tau,\nu)}, \quad (10)$$

$$_1\mathscr{E}(\tau,\nu+\tfrac{\tau}{2})=-i\frac{\theta_4(\tau,0)}{\theta_3(\tau,0)}\frac{\theta_2(\tau,\nu)}{\theta_1(\tau,\nu)}, \quad (11)$$

$$_2\mathscr{E}(\tau,\nu+\tfrac{1}{2})=\frac{\theta_4(\tau,0)}{\theta_3(\tau,0)}\frac{\theta_4(\tau,\nu)}{\theta_3(\tau,\nu)}, \quad (12)$$

$$\mathscr{E}(\tau,\nu+\tfrac{\tau+1}{2})=\frac{\theta_2(\tau,0)}{\theta_3(\tau,0)}\frac{\theta_2(\tau,\nu)}{\theta_1(\tau,\nu)}, \quad (13)$$

$$_1\mathscr{E}(\tau,\nu+\tfrac{\tau+1}{2})=-i\frac{\theta_2(\tau,0)}{\theta_3(\tau,0)}\frac{\theta_3(\tau,\nu)}{\theta_1(\tau,\nu)}, \quad (14)$$

$$_2\mathscr{E}(\tau,\nu+\tfrac{\tau+1}{2})=i\frac{\theta_2(\tau,0)}{\theta_3(\tau,0)}\frac{\theta_1(\tau,\nu)}{\theta_2(\tau,\nu)}. \quad (15)$$

نتیجه۱: اتحادهای مربع توابع تتای ژاکوبی به صورت زیر بدست می آید:

$$\mathscr{E}^2(\tau,\nu)=sn^2u=\frac{(1+\bar{k})(1-cd\bar{u})\,cd^2u}{4cd^2u-(1+\bar{k})(1+dc\bar{u})\,cd\bar{u}},$$
$$_1\mathscr{E}^2(\tau,\nu)=cn^2u=\frac{(1-\bar{k})(1+dc\,\bar{u})\,cd^2u}{dc\bar{u}\,(4cd^2u-(1+\bar{k})(1+dc\bar{u})\,cd\bar{u})} \quad (16)$$
$$_2\mathscr{E}^2(\tau,\nu)=dn^2u=\frac{(1-\bar{k})(1+dc\,\bar{u})\,cd\,u}{4cd^2u-(1+\bar{k})(1+dc\bar{u})\,cd\bar{u}},$$

در رابطه فوق $\bar{k}=\frac{\theta_2^2(2\tau,0)}{\theta_3^2(2\tau,0)}$ همچنین $\bar{u}$ به این معنی است که هر دو آرگمان τ,ν دارای ضریب ۲ هستند، شکل ۱ دوره ای بودن آنها را مقایسه کرده است.

اثبات روابط فوق از طریق روابط جدول ۱ و برخی اتحادهای بین توابع تتای ژاکوبی بدست می آید [۵].

نتیجه۲: اتحادهای مربع هشت تابع بیضوی جدید را نیز می توان برای نخستین بار بر حسب توابع بیضوی ژاکوبی به صورت زیر نمایش داد:

$$\mathscr{E}^2(\tau+1,\nu)=_1\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\tfrac{1}{2})=\frac{(dn\bar{u}-cn\bar{u})^2cd^2u\;\;cs^2u}{(dn\bar{u}+cn\bar{u})^2}, \quad (17)$$

$$_2\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\tfrac{1}{2})=\frac{(dn\bar{u}-cn\bar{u})^2nd^2u\;\;cs^4u}{(dn\bar{u}+cn\bar{u})^2}, \quad (18)$$

$$\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\tfrac{\tau}{2})=-\frac{(dn\bar{u}+cn\bar{u})^2(1-\bar{k}^2)}{4\bar{k}\;(dn\bar{u}-cn\bar{u})cn^2u}, \quad (19)$$

$$_1\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\tfrac{\tau}{2})=\frac{(dn\bar{u}+cn\bar{u})^2(1-\bar{k}^2)dc^2u}{4\bar{k}\;(dn\bar{u}-cn\bar{u})}, \quad (20)$$

$$\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\tfrac{\tau+1}{2})=\frac{(1+\bar{k})^2dc^2u}{4\bar{k}}, \quad (21)$$

$$_1\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\tfrac{\tau+1}{2})=-\frac{(1-\bar{k})^2}{4\bar{k}\;cn^2u}, \quad (22)$$

$$_2\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\tfrac{\tau+1}{2})=-\frac{(dn\bar{u}-cn\bar{u})^2cs^2u}{(dn\bar{u}+cn\bar{u})^2}, \quad (23)$$

نتیجه۳: همچنین داریم:

$$\mathscr{E}^2(\tau,\nu)=\frac{1-\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\frac{1}{2})}{1-\sqrt{\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\frac{\tau+1}{2})}}, \quad (24)$$

$$_1\mathscr{E}^2(\tau,\nu)=\frac{1-\mathscr{E}^2(\tau+1,\nu)}{1-\sqrt{_1\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\frac{\tau}{2})}}, \quad (25)$$

$$_2\mathscr{E}^2(\tau,\nu)=\frac{1-{}_2\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\frac{\tau+1}{2})}{1-\sqrt{_2\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\frac{\tau}{2})}}, \quad (26)$$

با توجه به اتحادهای مربع توابع تتای ژاکوبی روابط فوق اثبات می گردد.

نتیجه۴: همچنین روابط زیر نیز برقرار است:

$$\mathscr{E}^2(\tau+1,\nu)=_1\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\tfrac{1}{2})=1-cd^2u, \quad (27)$$

$$\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\tfrac{\tau}{2})=-\sqrt{(1-nd^2u)}dn^2u, \quad (28)$$

$$_1\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\tfrac{\tau}{2})=\sqrt{(1-nd^2u)}, \quad (29)$$

$$_2\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\tfrac{1}{2})=1+cs^2u-nd^2u\,cs^2u, \quad (30)$$

$$_2\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\tfrac{\tau+1}{2})=1-dn^2u-sn^2u\,dc^2u. \quad (31)$$

اثبات: رابطه (۲۶) را می توان به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$_2\mathscr{E}^2(\tau,\nu)=1-{}_2\mathscr{E}^2(\tau,\nu)+\frac{{}_2\mathscr{E}^2(\tau,\nu)}{{}_2\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\frac{\tau}{2})}=1-dn^2u-dn^2u\;\;sc^2u,$$

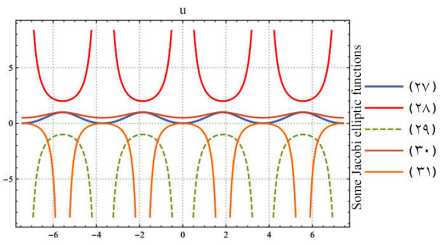
بنابراین رابطه (۳۱) اثبات می شود. طبق رابطه (۲۳) می توان نوشت:

$$\frac{(dn\bar{u}-cn\bar{u})^2}{(dn\bar{u}+cn\bar{u})^2}=dn^2u\;\;sc^2u\,(1+sc^2u-nd^2u).$$

با توجه به رابطه فوق و با استفاده از روابط (۱۷) و (۱۸)، رابطه (۳۰) اثبات می شود. با استفاده از رابطه (۲۷) و (۲۵) داریم:

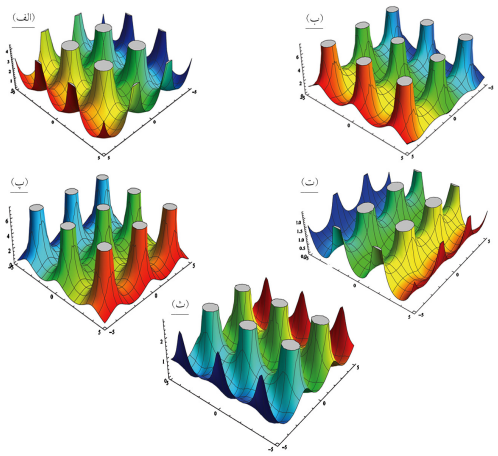
$$_1\mathscr{E}^2(\tau,\nu+\tfrac{\tau}{2})=\frac{1}{1-nd^2u}.$$

رابطه (۲۹) اثبات می شود. با استفاده از رابطه (۱۹) و (۲۰) نیز، (۲۸) اثبات می گردد.



شکل۲ : مقایسه اتحادهای مربعی برخی توابع بیضوی جدید.

شکل ۲ نشان می دهد که انتقال در آرگومان های روابط نتیجه ۴ معادل تغییر نوع تابع بیضوی است، در حالی که ساختار پریودیک همچنان حفظ می شود. به این ترتیب روابط این تصویر تعمیم جبری همان رفتار پریودیک است که در شکل ۱ مشاهده شد.



شکل۳ : بزرگی برخی از توابع بیضوی جدید الف) (۲۷)، ب) (۲۸)، پ) (۲۹)، ت) (۳۰) و ث) (۳۱).

شکل ۳ بزرگی (قدرمطلق) برخی از توابع بیضوی جدید معرفی شده در نتیجه۴ برای مقادیر حقیقی متغییر را نشان می دهد. این توابع دارای یک پریود دوگانه هستند به این معنا که الگوی آنها در دو جهت مستقل در صفحه مختلط تکرار می شود. همچنین قطب ها به صورت قله های منظم و تکراری در نمودار ظاهر شده‌اند که تایید کننده ماهیت بیضوی این توابع است. این رفتار پریودیک، مطابق با روابط تحلیلی ارائه شده در شکل ۲، به وضوح در شکل ۳ قابل مشاهده است.

نتیجه گیری

ما در این مقاله رابطه بین توابع تتای ژاکوبی و توابع بیضوی ژاکوبی را با استفاده از یک تعریف جدید، یعنی «تابع بیضوی طیفی» (تعریف۲)، بررسی کردیم. ما برای اولین بار بسط جدیدی از مربع توابع بیضوی ارائه دادیم (به نتیجه‌های ۱ تا ۴ مراجعه کنید). به باور ما، این دسته‌های جدید از توابع بیضوی (شبه)دوره‌ای، در محاسبات جبرهای نظریه ریسمان‌های کوانتومی نقشی مؤثر و قوی ایفا خواهند کرد **[۳]** و **[۴]**. تمام فرمول‌های این مقاله به صورت محاسباتی با نرم‌افزار Mathematica با دقت بالا بررسی و تأیید شده‌اند.

مرجع‌ها

[۱] C.G.J. Jacobi; "*Fundamenta Nova Theoriae Functionum Ellipticarum*"; Konigsberg. (1829)
[۲] A. G. Greenhill, "*The Applications of Elliptic Functions*"; Dover Publications, New York (1959).
[۳] M. R. Bahraminasab and M. Ghominejad; "N = 2 superconformal characters as the residue of sl(2|1) affine Lie superalgebra characters by defining a new vocabulary for Jacobi theta functions"; *J. Geom. Phys.* **156**, (2020) 11pp.
[۴] M. R. Bahraminasab and M. Ghominejad; "S-modular transformation of the N=2 superconformal algebra characters"; *Theor. Math. Phys.* **217**, (2023) 260-284.
[۵] D. F. Lawden; "*Elliptic Functions and Applications*"; Vol. 80 Springer, New York (1989).

ذرات با تکانه زاویه‌ای ذاتی در فضازمان FJNW شتابدار

انجم‌شعاع، همایون[۱]؛ میرزا، بهروز[۱]؛ بهار راستکار ثمرین[۱]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۳۱۱۱-۸۴۱۵۶

چکیده

در نسبیت عام، یکی از مسائل بنیادی بررسی و تحلیل تکینگی‌های ذاتی و مطالعه رفتار انواع ذرات در مجاورت آن‌هاست. حضور میدان‌های اسکالر با جفت‌شدگی ضعیف می‌تواند به ظهور فضازمان‌هایی با تکینگی‌های عریان بینجامد. متریک فیشر- یانیس-نیومن-وینیکور (FJNW) شتاب‌دار نمونه‌ای برجسته از چنین هندسه‌هایی است؛ این متریک علاوه بر جرم و شتاب، شامل یک پارامتر اسکالر نیز هست که خانواده‌ای از جواب‌های عریان را توصیف می‌کند و به‌طور هم‌زمان دارای دو تکینگی مستقل است. در این مقاله، پتانسیل مؤثر مربوط به ذرات دارای تکانهٔ زاویه‌ای ذاتی در پس‌زمینه این متریک را با استفاده از معادلات ماتیاس-پاپاپترو-دیکسون (MPD) محاسبه می‌کنیم و نشان می‌دهیم که رفتار پتانسیل در همسایگی هر دو تکینگی دستخوش تغییرات قابل توجهی می‌شود. سپس پتانسیل مؤثر را در نزدیکی هر تکینگی، یک‌بار بر اساس تغییر پارامترهای هندسی متریک شامل پارامتر اسکالر λ و بار دیگر بر اساس تغییر پارامتر اسپین ذره مورد بررسی قرار می‌دهیم. نتایج نشان می‌دهد که تغییرات هندسی ناشی از تغییر λ و همچنین تغییرات مربوط به اسپین، هر یک به‌طور مستقل ساختار پتانسیل را تحت تأثیر قرار داده و می‌توانند موجب جابه‌جایی یا دگرگونی در موقعیت کمینه‌ها شوند. این ویژگی‌ها تصویری دقیق از اثرات هم‌زمان میدان اسکالر، شتاب و اسپین فراهم کرده و می‌تواند در تحلیل نظری و مطالعات تجربی مرتبط با این پدیده‌ها سودمند باشد.

واژه های کلیدی: *معادله MPD، متریک FJNW شتابدار، تکینگی‌های عریان، پتانسیل ذرات دارای اندازه حرکت زاویه‌ای ذاتی*

Spinning Test Particles in the Accelerating FJNW Space-time

Anjomshoa, Homayon [1]; Mirza, Behrouz[1]; Bahar Rastkar somarin [1]

[1] *Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran*

Abstract

In general relativity, one of the fundamental issues is the investigation and analysis of intrinsic singularities and the study of the behavior of various types of particles in their vicinity. The presence of scalar fields can lead to the emergence of space-times with naked singularities. The accelerating FJNW metric is a prominent example of such geometries; in addition to mass and acceleration, it contains a scalar parameter that characterizes a family of naked singular solutions, and it possesses two independent intrinsic singularities. In this work, we compute the effective potential for spinning test particles in the background of this metric using the Mathisson-Papapetrou-Dixon (MPD) equations and demonstrate that the behavior of the potential undergoes significant changes in the neighborhood of both singularities. We then analyze the effective potential near each singularity, first by varying the geometric parameters of the metric including the scalar parameter λ and subsequently by varying the spin parameter of the particle. The results indicate that the geometric modifications induced by changes in λ, as well as the variations associated with the particle's spin, each independently influence the structure of the potential and may shift or alter the position of its minima. These features provide a precise and comprehensive picture of the combined effects of the scalar field, acceleration, and particle spin, and may prove useful in the theoretical analysis and experimental studies related to such phenomena.

***Keywords**: MPD equations, accelerating FJNW metric, naked singularities, effective potential*

مقدمه

یکی از موضوعات فعال پژوهش در نسبیت عام، جست‌وجوی راه‌حل‌هایی برای معادله‌های نسبیت عام است که ساختار آن‌ها شامل تکینگی‌های عریان باشد. چنین فضازمان‌هایی به این دلیل مورد توجه قرار گرفته‌اند که می‌توانند نشانه‌هایی از نواحی فراتر از چارچوب کلاسیک گرانش و شاید حتی پیوندی با جنبه‌های کوانتومی ارائه

کنند. از میان نخستین مثال‌های مطرح‌شده در این زمینه می‌توان به راه‌حل FJNW اشاره کرد که به‌عنوان یکی از اولین مدل‌های دارای تکینگی بدون افق شناخته می‌شود [۱]. نمونه مهم دیگری از این نوع ساختارها، γ متریک است که رفتار هندسی غیرمتعارفی را نشان می‌دهد [۲]. به‌واسطه اهمیت نظری این دو نمونه و پیامدهایی که برای اصل سانسور کیهانی به همراه دارند، طی سال‌های اخیر تلاش‌های گسترده‌ای برای یافتن راه‌حل‌های جدید و گسترش طبقه‌بندی فضازمان‌های دارای تکینگی عریان صورت گرفته است [۳-۵].

ما در این مقاله متریک جدید FJNW شتاب‌دار [۶] را که دارای دو تکینگی مستقل است، مورد بررسی قرار می‌دهیم. با استفاده از معادلات MPD که معادلات توصیف کنند دینامیک ذرات چرخان در یک میدان گرانش هستند، پتانسیل مؤثر ذرات دارای تکانه زاویه‌ای ذاتی را محاسبه می‌کنیم و رفتار آن‌ها را در نواحی نزدیک به تکینگی‌ها بررسی می‌کنیم.

معادله MPD

در سال ۱۹۳۷ ماتیاس نشان داد که اسپین، به‌عنوان کمیتی دینامیکی مستقل، می‌تواند بر حرکت ذرات در فضازمان خمیده اثر بگذارد [۷]. او معادلاتی برای تغییرات تکانه و چرخش در میدان گرانشی ارائه کرد، اما به‌دلیل ابهام در تعریف مرکز جرم و اسپین، این چارچوب کامل نبود. در سال ۱۹۵۱ پاپاپترو با استفاده از تقریب تک‌قطبی دوقطبی نسخه دقیق‌تری از این توصیف ارائه کرد و به‌طور روشن نشان داد که چرخش چگونه مسیر ذرات را تحت تاثیر قرار می‌دهد [۸،۹]. در دهه ۱۹۷۰ دیکسون با تکمیل جزئیات نظری، فرمول‌بندی جامع‌تری از حرکت ذرات اسپین‌دار در فضازمان خمیده ارائه داد. معادلات زیر تحول چهاربردار تکانه و تانسور چرخش را توصیف می‌کنند [۱۰-۱۲].

$$\frac{DP^{\alpha}}{d\lambda} = -\frac{1}{2}R^{\alpha}_{\beta\mu\nu}U^{\beta}S^{\mu\nu} \qquad (۱)$$

و

$$\frac{DS^{\mu\nu}}{d\lambda} = P^{\mu}U^{\nu} - U^{\mu}P^{\nu} \qquad (۲)$$

در رابطه (۱) و (۲) P^{α} چهار بردار تکانه و $S^{\mu\nu}$ تانسور چرخش ذره است که مولفه‌های آن دینامیک تکانه زاویه‌ای ذره را در فضازمان خمیده توصیف می‌کنند. در چهارچوب معادلات MPD نشان داد می‌شود که وجود یک بردار کیلینگ $\mathcal{K}_{\xi}$ در فضازمان همواره به پیدایش یک کمیت پایسته منجر می‌شود [۱۳] که به صورت زیر نوشته

$$C_{\mathcal{K}_{\alpha}} = P^{\alpha}\mathcal{K}_{\alpha} - \frac{1}{2}S^{\alpha\beta}\nabla_{\beta}\mathcal{K}_{\alpha}. \qquad (۳)$$

همان‌گونه که برای ذرات بدون چرخش از تقارن‌های زمانی و زاویه‌ای کمیت‌های پایسته‌ای مانند E و J به‌دست می‌آید، در مورد ذرات با تکانه زاویه‌ای ذاتی نیز کمیت‌های متناظر از رابطه $C_{\mathcal{K}_{\alpha}}$ به دست می‌آیند و در ادامه ما از رابطه (۳) برای این منظور استفاده خواهیم کرد.

متریک FJNW شتاب‌دار

متریک شتاب‌دار FJNW یکی از جدیدترین متریک‌هایی است که دارای تکینگی عریان است. این هندسه سه پارامتر دارد: جرم، شتاب و پارامتر λ که رفتار این دسته از راه‌حل‌ها را تعیین می‌کند. این متریک به صورت زیر نوشته می‌شود [۶]:

$$dS^2 = -\frac{f^{\lambda}h^{\lambda}}{\Omega^{2\lambda}}dt^2 + \frac{f^{-\lambda}h^{-\lambda}}{\Omega^{2(2-\lambda)}}dr^2 + \frac{f^{1-\lambda}h^{1-\lambda}r^2}{\Omega^{2(2-\lambda)}}\left(\frac{d\theta^2}{G} + Gsin(\theta)^2d\varphi^2\right) \qquad (۴)$$

در رابطه (۴) پارامتر λ پارامتر آزاد است و f، h، Ω و G و همچنین میدان اسکالر به صورت زیر تعریف می‌شوند [۶].

$$f(r) = 1 - \frac{2M}{r}, \qquad (۵)$$
$$h(r) = 1 - a^2r^2,$$
$$\Omega(r,\theta) = 1 + arcos(\theta),$$
$$G(\theta) = 1 + 2Macos(\theta),$$
$$\emptyset(r) = \sqrt{\frac{1-\lambda^2}{2}}ln\left(\frac{f\,h}{\Omega^2}\right).$$

پتانسیل مؤثر ذرات دارای تکانه زاویه‌ای ذاتی در فضازمان FJNW شتابدار

با توجه به این‌که متریک FJNW شتاب‌دار (4) وابستگی‌ای به مختصات φ و t ندارد، می‌توان به‌سادگی دو بردار کیلینگ متناظر را به صورت زیر نوشت:

$$\mathcal{K}_{\varphi} = \partial_{\varphi}, \qquad (۶)$$
$$\mathcal{K}_{t} = \partial_{t}.$$

بنابراین با استفاده از رابطه (۳) دو کمیت پایسته که یکی بیان‌کننده انرژی و دیگری نشان‌دهنده اندازه‌حرکت زاویه‌ای هستند را به صورت زیر به‌دست آورد:

$$E = -P_t + \frac{1}{2}\partial_\beta g_{t\alpha} S^{\alpha\beta}, \qquad (۷)$$

و

$$L = -P_\varphi + \frac{1}{2}\partial_\beta g_{\varphi\alpha} S^{\alpha\beta}. \qquad (۸)$$

نکته‌ای که باید به آن توجه کرد و رابطه های (۷) و (۸) را به صورت زیر بازنویسی کرد این است که در متریک (٤) فقط جمله‌های g_{tt} و $g_{\varphi\varphi}$ غیر صفر هستند و جمله‌های غیرقطری $g_{t\alpha}$ و $g_{\varphi\alpha}$ صفر هستند. بنابراین

$$E = -P_t + \frac{1}{2}\partial_\beta g_{tt} S^{t\beta}, \qquad (۹)$$

و

$$L = -P_\varphi + \frac{1}{2}\partial_\beta g_{\varphi\varphi} S^{\varphi\beta}. \qquad (۱۰)$$

نشان داده شده است که در چارچوب معادلات MPD و با بهره‌گیری از کمیت پایسته $C_{\mathcal{K}_\alpha}$ می‌توان پتانسیل موثر کلی حرکت ذرات دارای تکانه زاویه‌ای ذاتی در فضازمان‌های خمیده را به صورت زیر نوشت [۱۳]

$$V = -\frac{\delta L}{\beta} + \sqrt{\frac{\delta L^2}{\beta^2} + \frac{\rho - \sigma L^2}{\beta}}. \qquad (۱۱)$$

در رابطه (۱۱)، برای یک متریک قطری، کمیت‌های β، δ، σ و ρ در صفحه $\theta = \frac{\pi}{2}$ به صورت زیر تعریف می‌شوند [۱۳]

$$\beta = -g^{tt} + \frac{s^2 \partial_r(g_{tt})\partial_r(g_{\varphi\varphi})}{\sqrt{g_{tt} g_{rr} g_{\varphi\varphi}}} \qquad (۱۲)$$

و

$$\delta = \frac{s\left(g^{tt}\partial_r(g_{tt}) - g^{\varphi\varphi}\partial_r(g_{\varphi\varphi})\right)}{2\sqrt{g_{tt} g_{rr} g_{\varphi\varphi}}} \qquad (۱۳)$$

و

$$\sigma = -g^{\varphi\varphi} + \frac{s^2 g^{tt}\left(\partial_r(g_{tt})\right)^2}{4 g_{tt} g_{rr} g_{\varphi\varphi}} \qquad (۱٤)$$

و

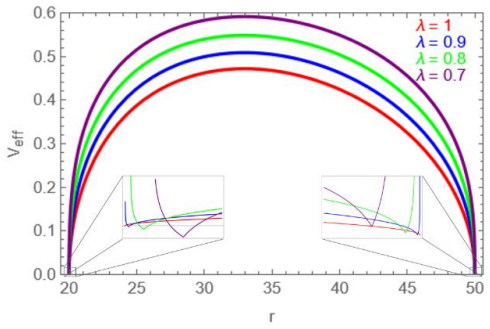
$$\rho = m^2\left[1 - \frac{s^2\partial_r(g_{tt})\partial_r(g_{\varphi\varphi})}{4 g_{tt} g_{rr} g_{\varphi\varphi}}\right]^2. \qquad (۱۵)$$

در رابطه (۱۳)، (۱٤)، (۱۵) و (۱٦) m جرم ذره و s اسپین ذره است.

حال با قرار دادن مولفه‌های متریک FJNW شتابدار (٤) در روابط (۱۲) تا (۱۵) مقادیر β، δ، σ و ρ را محاسبه کردیم، به دلیل طولانی بودن این عبارت‌ها از نوشتن آن‌ها در اینجا صرف نظر کردیم. در نهایت با قرار داردن مقادیر β، δ، σ و ρ در رابطه (۱۱) پتانسیل موثر ذرات دارای تکانه زاویه‌ای ذاتی را در متریک FJNW شتابدار محاسبه کردیم.

با توجه به طولانی‌بودن فرم صریح پتانسیل مؤثر، از ارائه فرم کامل آن صرف‌نظر می‌کنیم و تحلیل رفتار آن از طریق نمودارهای مرتبط انجام می‌دهیم. در این بررسی، با ثابت‌نگه‌داشتن جرم و شتاب متریک و جرم ذره، ابتدا مقدار تکانه زاویه‌ای ذاتی s را ثابت در نظر گرفته و پتانسیل مؤثر را بر حسب تغییرات پارامتر λ ترسیم می‌کنیم. سپس با ثابت‌نگه‌داشتن λ و تغییر تکانه زاویه‌ای ذاتی، رفتار پتانسیل مورد مطالعه قرار می‌گیرد. در هر دو حالت، اثر این پارامترها بر موقعیت کمینه‌های پتانسیل تحلیل می‌کنیم. همچنین $M = 10$ و $a = \frac{1}{50}$ در نظر گرفتیم که بر اساس متریک (٤) دو تکینگی در $r = 20$ و $r = 50$ داشته باشیم.

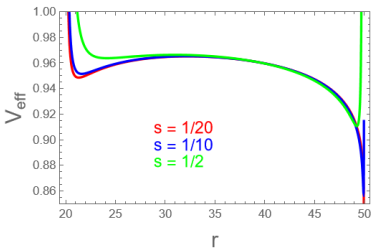
در ادامه، ابتدا تأثیر λ بررسی می‌شود.



شکل ۱: پتانسیل حاصل از رابطه (۱۲) در حالتی که $M = 10$ و $a = 1/50$ و $m = 1$ و $L = 1$ و $s = 1/10$ به ازای λ مختلف برای بررسی دقیق‌تر رفتار تابع در نواحی مینیمم، نمای بزرگ‌شده‌ی آن قسمت‌ها به‌صورت یک کادر درون‌شکل ترسیم شده است.

با توجه به شکل ۱ مشاهده می‌شود که با کاهش مقدار λ، کمینه‌های پتانسیل مؤثر مربوط به ذرات دارای تکانه زاویه‌ای ذاتی از نواحی نزدیک به تکینگی‌ها فاصله می‌گیرند، این جابه‌جایی بیانگر آن است که با کاهش λ، ساختار هندسی و میدان اسکالر نزدیک تکینگی به‌گونه‌ای تغییر می‌کند که امکان شکل‌گیری مدارهای پایدار در

مجاورت تکینگی کم شده و کمینه پتانسیل به نواحی دورتر منتقل می‌شود و مدارهای پایدار با فاصیه بیشتری از تکینگی‌ها برای این ذرات شکل می‌گیرد. همچنین برای حالت $\lambda = 1$ دیگر کمینه‌ای در پتانسیل دیده نمی‌شود. این رفتار با انتظار نظری نیز سازگار است؛ زیرا برای $\lambda = 1$ متریک FJNW شتاب‌دار به حالت شتاب‌دار بدون میدان اسکالر تبدیل می‌شود و در این حد، تکینگی ذاتی از بین می‌رود. حال در حالت دوم، پارامتر λ را ثابت نگه داشته و مقدار s را تغییر می‌دهیم و پتانسیل را رسم می‌کنیم.



شکل ۲: پتانسیل حاصل از رابطه (۱۲) در حالتی که $M = 10$ و $a = 1/50$ و $m = 1$ و $L = 1$ و $\lambda = 1/20$ به ازای s مختلف.

با توجه به شکل ۲ می‌توان نتیجه گرفت که با کاهش مقدار s، کمینه‌های پتانسیل مؤثر به تکینگی‌ها نزدیک‌تر می‌شوند. این رفتار با فرمولبندی MPD سازگار است، زیرا کاهش اسپین موجب کاهش برهمکنش اندازه حرکت زاویه‌ای ذاتی ذرات با انحنای فضازمان شده و سهم دافعه‌گونه ناشی از ترم‌های اسپینی در معادلات حرکت کاهش می‌یابد. در نتیجه، ترم‌های گرانشی و اسکالر غالب شده و موقعیت مدارهای پایدار به نواحی نزدیک‌تر به تکینگی منتقل می‌شود.

نتیجه گیری

در این مقاله، پتانسیل مؤثر ذرات دارای تکانه زاویه‌ای ذاتی را در پس‌زمینه متریک جدید FJNW شتاب‌دار محاسبه و رفتار آن را بر اساس تغییر پارامتر λ و پارامتر s بررسی کردیم. در شکل ۱ با کاهش مقدار λ، کمینه‌های پتانسیل مؤثر از تکینگی‌ها فاصله می‌گیرند. این رفتار ناشی از تغییرات هندسی و کاهش شدت میدان اسکالر نزدیک تکینگی است. علاوه بر این، در حالت $\lambda = 1$ هیچ کمینه‌ای دیده نمی‌شود که با حدی که در آن متریک FJNW شتاب‌دار به حالت شتاب‌دار بدون میدان اسکالر و بدون تکینگی ذاتی تبدیل می‌شود، سازگار است. شکل ۲ نشان می‌دهد که با کاهش مقدار s، کمینه‌های پتانسیل مؤثر به تکینگی‌ها نزدیک‌تر می‌شوند. این نتیجه کاملاً با فرمولبندی MPD سازگار است؛ زیرا کاهش اسپین موجب تضعیف برهمکنش اسپین با خمش شده، در این شرایط، مؤلفه‌های گرانشی و اسکالر غالب شده و مدارهای پایدار در فاصله‌ای نزدیک‌تر به تکینگی تشکیل می‌شوند. این نتایج به‌روشنی نشان می‌دهد که وجود میدان اسکالر و اثرات اسپینی، هر دو نقشی تعیین‌کننده در ساختار مداری ذرات در مجاورت تکینگی‌های عریان دارند. ترکیب این دو عامل تصویری جامع از دینامیک ذرات چرخان در هندسه‌های با تکینگی عریان ارائه می‌کند و می‌تواند در بررسی پایداری، رفتار مداری و ماهیت تکینگی‌های عریان در راه‌حل‌های جدید گرانشی نقش مهمی ایفا کند.

مرجع‌ها.

[۱] Janis, Allen I., Ezra T. Newman, and Jeffrey Winicour. "Reality of the Schwarzschild singularity." *Physical Review Letters* 20, no. 16 (1968): 878.
[۲] Stewart, B. W., D. Papadopoulos, L. Witten, R. Berezdivin, and L. Herrera. "An interior solution for the gamma metric." *General Relativity and Gravitation* 14, no. 1 (1982): 97-103.
[۳] Mirza, B., and F. Sadeghi. "Exact Solutions of Einstein's Equations in the Presence of a Scalar Field." *Physics of Particles and Nuclei* 55, no. 6 (2024): 1408-1412.
[٤] Derekeh, Ali, Behrouz Mirza, Pouya Heidari, Fatemeh Sadeghi, and Reza Bahani. "A class of Taub-NUT-scalar metrics via Ehlers transformations." *The European Physical Journal C* 84, no. 11 (2024): 1230.
[٥] Hajibarat, Arash, Behrouz Mirza, and Alireza Azizallahi. "γ-metrics in higher dimensions." *Nuclear Physics B* 978 (2022): 115739.
[٦] Anjomshoa, H., Mirza, B. and Azizallahi, A., 2025. Accelerating FJNW metric. *Annals of Physics*, p.170239.
[٧] Mathisson, Myron. "The variational equation of relativistic dynamics." In *Mathematical proceedings of the Cambridge philosophical society*, vol. 36, no. 3, pp. 331-350. Cambridge University Press, 1940.
[٨] Papapetrou, Achille. "Spinning test-particles in general relativity. I." *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 209, no. 1097 (1951): 248-258.
[٩] Corinaldesi, Ernesto, and Achille Papapetrou. "Spinning test-particles in general relativity. II." *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 209, no. 1097 (1951): 259-268.
[١٠] Dixon, William G. "Dynamics of extended bodies in general relativity. I. Momentum and angular momentum." *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* 314, no. 1519 (1970): 499-527.
[١١] Dixon, William G. "Dynamics of extended bodies in general relativity-II. Moments of the charge-current vector." *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* 319, no. 1539 (1970): 509-547.
[١٢] Dixon, William G. "Dynamics of extended bodies in general relativity III. Equations of motion." *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* 277, no. 1264 (1974): 59-119.
[١٣] Toshmatov, Bobir, and Daniele Malafarina. "Spinning test particles in the γ spacetime." *Physical Review D* 100, no. 10 (2019): 104052.

پهنای واپاشی تابشی باریون‌های Ξ^* با ساختار دو کوارک سنگین

آرمات، آیدا[۱]؛ موسوی نژاد، سید محمد[۲]

[۱]گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه هرمزگان، صندوق پستی ۳۹۹۵، ایران

[۲]*دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد*

چکیده

در این کار با استفاده از مدل دینامیکی دی‌کوارک، پهنای واپاشی تابشی باریون‌های کسی با اسپین ۳/۲ محاسبه می‌شود. در این راستا، ابتدا معادله جرم دی‌کوارک‌های سنگین بر پایه معادله بته–سالپتر استخراج می‌گردد که در آن پتانسیل برهم‌کنش شامل پتانسیل کرنل و تقریب برایت–فرمی است. سپس با حل این معادله، جرم‌ها و توابع موج باریون‌ها به‌دست آمده و از آن‌ها برای محاسبه پهنای واپاشی تابشی در حالت پایه استفاده می‌شود.

The radiative decay width of Ξ* baryons with a doubly heavy quark structure.

Armat, Aida[1]; Moosavi Nejad, S. Mohammad[2]

[1]*Department of Physics, Faculty of Science, University of Hormozgan, P.O. Box 3995, Bandar Abbas, Iran*

[2]*Department of Physics, Yazd University, Yazd*

Abstract

In this work, the radiative decay widths of baryons containing a charm quark with spin 3/2 are calculated using a diquark dynamical model. To this end, the mass equation for heavy diquarks is first derived based on the Bethe–Salpeter equation, where the interaction potential includes the Cornell potential and the Breit–Fermi approximation. By solving this equation, the masses and wave functions of the baryons are obtained, which are then used to compute the radiative decay widths in the ground state.

PACS No.13

مقدمه

مطالعه باریون‌های دارای طعم سنگین که شامل چندین کوارک سنگین هستند، به‌ویژه باریون‌های با طعم زیبایی و افسونِ دوتایی و سه‌تایی، به یکی از موضوعات مهم در طیف‌سنجی هادرونی مدرن تبدیل شده است. بررسی برهم‌کنش‌های طعم سنگین–سنگین و سنگین–سبک امکان مطالعه‌ای نظام‌مند از دینامیک QCD اختلالی و غیراختلالی را در چارچوب یک حالت مقید واحد فراهم می‌کند [۱–۳]. مطالعه باریون‌های دارای کوارک سنگین از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است، زیرا می‌تواند به درک بهتر ساختار باریون، تقارن کوارک سنگین و دینامیک برهم‌کنش قوی کمک کند [٤–٦]. یکی از ویژگی‌های مهم باریون‌های سنگین، پهنای واپاشی تابشی آن‌هاست که شامل گذارهایی از طریق گسیل فوتون می‌شود. در باریون‌های دو کوارک سنگین، از آنجا که آستانه‌های واپاشی قوی معمولاً بالاتر از جرم حالت‌های کم‌انرژی هستند، انتظار می‌رود گذارهای تابشی به‌عنوان حالت‌های واپاشی غالب یا حتی تنها کانال‌های واپاشی عمل کنند، و بنابراین برای شناسایی تجربی آن‌ها اهمیت اساسی دارند [۷]. چارچوب‌های نظری اخیر، از جمله روش بسط گاوسی و مدل‌های پتانسیل نسبیتی ، برای پیش‌بینی این پهناها به کار گرفته شده‌اند و نشان داده‌اند که اختلاط ساختارریز و تقارن‌های تابع موج اسپین–طعم تأثیر قابل توجهی بر نرخ‌های گذار دارند [۸]. افزون بر این، واپاشی‌های تابشی باریون‌های دارای دو کوارک سنگین، ابزاری حساس برای بررسی گشتاورهای مغناطیسی کوارک‌های سنگین در یک محیط چندکوارکی فراهم

می‌کند. اختلاف میان مدل‌های مختلف، نشان‌دهنده نیاز به محاسبات دقیق‌تر ضرایب شکل گذار است تا بتواند راهنمای جستجوهای آینده در مراکزی مانند بل و برخورددهنده پرشدت ال اچ سی باشد [۹]. هدف این کار حاضر، محاسبه و پهنای واپاشی تابشی باریون‌های دارای سه طعم سنگین است. در چارچوب این مطالعه، از یک مدل دینامیکی استفاده می‌شود که در آن هر باریون به‌صورت یک سامانه دوذره‌ای شامل یک دی‌کوارک سنگین و یک کوارک در نظر گرفته می‌شود. روش تحلیلی به‌کار رفته بر حل معادله بته–سالپتر استوار است که در آن پتانسیل کرنل و پتانسیل برایت–فرمی استفاده شده است. بنابراین با حل معادله‌ی بته-سالپتر برای دی‌کوارک‌های سنگین، جرم و تابع موج این شبه‌ذرات را به‌دست می‌آوریم. این کمیت‌ها نه تنها ورودی اصلی برای محاسبه-ی جرم باریون‌های سه‌کوارکی هستند، بلکه مستقیماً در تعیین اختلاف جرم (و در نتیجه انرژی فوتون) و نیز عناصر ماتریس گشتاور مغناطیسی در واپاشی تابشی نقش دارند. به‌این‌ترتیب، محاسبه‌ی دقیق جرم دی‌کوارک، گام اساسی برای دستیابی به پهنای واپاشی‌ای است که با داده‌های تجربی قابل مقایسه باشد و اعتبار مدل پتانسیل را می‌آزماید.

پهنا واپاشی

واپاشی‌های تابشی هادرون‌ها ابزارهای مهمی برای بررسی ساختار داخلی هادرون‌ها هستند و همچنین برای مدل‌های پارتونی در QCD به‌کار می‌روند. پهنای واپاشی تابشی باریون‌های سنگین در حالت پایه از طریق رابطه زیر تعیین می‌شود [۱۰].

$$\Gamma_R(B^* \to \gamma B) = \frac{\alpha\omega^3}{m_p^2}\frac{2}{2J+1}\left(\frac{M_B}{M_{B^*}}\right)\left|\sum_i \left\langle \psi_{sf}^{B}\left|\mu_i\vec{\sigma}_i\right|\psi_{sf}^{B^*}\right\rangle\right|^2 \quad (1)$$

که در آن α یک ثابت جفت‌شدگی بسیار کوچک $(\alpha \approx 1/137)$ است و ω در دستگاه مرکز جرمِ باریون واپاشی‌کننده به صورت $\omega = (M_{B^*}^2 - M_B^2)/(2M_B)$ تعریف می‌شود. همچنین، M_{B^*} و J به‌ترتیب جرم و اسپین باریون واپاشی‌کننده هستند، M_B جرم باریون در حالت نهایی آن است و m_p جرم پروتون است.

بدست آوردن معادله جرم

برای محاسبه جرم باریون از معادله دیفرانسیل نیمه نسبیتی بته-سالپیتر استفاده می‌کنیم که به صورت زیر تعریف می‌شود

$$-\frac{1}{2\mu}\left[\Psi''_{n\ell}(r)+\frac{2}{r}\Psi'_{n\ell}(r)-\frac{\ell(\ell-1)}{r^2}\right]$$
$$+[-\frac{\left(M_B-m_1-m_2-U(r)\right)^2}{2\alpha\mu}+U(r)$$
$$+m_1+m_2-M_B]\Psi_{n\ell}(r)=0 \quad (2)$$

پتانسیل برهمکنش بین کوارک‌ها در ساختار باریون را به صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$U(r)=V_{Cornell}(r)+V_{BF}(r) \quad (3)$$

$V_{Cornell}(r)$ پتانسیل کرنل است که به صورت تعریف می-شود[۱۱]

$$V_{Cornell}(r)=-\frac{2\alpha_s}{3r}+br \quad (4)$$

که "b" پارامتر شدت محبوس شدگی را نشان می‌دهد. α_s ثابت جفت شدگی قوی است. عبارت $V_{BF}(r)$ پتانسیل برایت–فرمی است که به صورت زیر بیان می‌شود[۱۲]

$$V_{BF}(r)=\frac{\kappa_2}{r^3},$$
$$\kappa_2=\frac{C_F\alpha_s}{m_1m_2}\left(3(\vec{S}_1.\hat{r})(\vec{S}_2.\hat{r})-\vec{S}_1.\vec{S}_2\right) \quad (5)$$

که C_F ضریب کازیمیر، $\hat{r}$ بردار یکه اتصال دو ذره بهم و $\vec{S}_{1,2}$ عملگرهای اسپین ذرات برهمکنش کننده هستند. برای ساده‌سازی معادله دیفرانسیل (۲)، $R_{n\ell}(r)=\Phi_{n\ell}(r)/r$ تعریف می‌کنیم. حال، با جایگذاری پتانسیل $U(r)$، به معادله دیفرانسیل زیر می‌رسیم:

$$\frac{d^2\Phi(r)}{dr^2}+\{B_0+B_1r+B_2r^2+\frac{B_3}{r}+\frac{B_4}{r^2}+\frac{B_5}{r^3}+\frac{B_6}{r^4}+\frac{B_7}{r^6}\}\Phi(r)=0 \quad (6)$$

که ضرایب عبارتند از

$$B_0 = (M_B - m_1 - m_2)(2\mu - \frac{M_B - m_1 - m_2}{\alpha}) - \frac{4b\alpha_s}{3\alpha^2},$$
$$B_1 = -2b(\frac{M_B - m_1 - m_2}{\alpha} + \mu),$$
$$B_2 = \frac{b^2}{\alpha^2}$$
$$B_3 = \frac{4}{3}\alpha_s(\frac{M_B - m_1 - m_2}{\alpha} + \mu) \qquad (7)$$

و

$$B_4 = -\frac{2b\kappa_2}{\alpha^2} + \frac{4\alpha_s^2}{9\alpha^2} - \ell(\ell - 1),$$
$$B_5 = 2\kappa_2(\frac{M_B - m_1 - m_2}{\alpha} + \mu), \qquad (8)$$

همچنین

$$B_6 = \frac{4\alpha_s\kappa_2}{3\alpha^2}, \qquad B_7 = \frac{\kappa_2^2}{\alpha^2}, \qquad (9)$$

معادله(٦) حل نمی‌شود بنابراین از روش آنساتز استفاده می‌کنیم. ابتدا تابع موج را به صورت $\Phi_{n\ell}(r) = \exp(g(r))$ در نظر می‌گیریم.

$$g(r) = -n_1 r - n_2 r^2 - n_3 \mathrm{Ln}(r) - \frac{n_4}{r} - \frac{n_5}{r^2} \qquad (10)$$

با دو بار مشتق گرفتن از این رابطه داریم:

$$\Phi''_{nl}(r) = [n_1^2 + 4n_2n_4 + 4n_1n_2r + 4n_2^2r^2 + \frac{2n_1n_3 - 4n_2n_4}{r}$$
$$+ \frac{n_3^2 - 2n_1n_4 - 8n_2n_5}{r^2} - \frac{2n_3n_4 + 4n_1n_5}{r^3} + \frac{n_4^2 - 4n_3n_5}{r^4}$$
$$+ \frac{4n_4n_5}{r^5} + \frac{4n_5^2}{r^6}]\Phi_{nl}(r) \qquad (11)$$

با مقایسه‌ی معادله ی (۱۰) و (٦) ضرایب "n" به دست می‌آیند

$$n_1 = \frac{1}{2\sqrt{B_1}}(B_2 - \frac{B_3^2}{4B_4}),$$
$$n_2 = \frac{B_5}{4\sqrt{B_4}},$$
$$n_3 = \frac{\sqrt{B_6}}{3} \qquad (12)$$

و

$$n_4 = \frac{1}{2\sqrt{B_7}}(B_5 - \frac{B_6^2}{4B_3}),$$
$$n_5 = \frac{B_2}{4\sqrt{B_1}}, \qquad (13)$$

علاوه بر این، با برابر قرار دادن ضرایب جمله‌های متناظر با توان صفر «r» در معادلات، معادله جرم تحلیلی دستگاه دو جسمی به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\frac{\alpha^2}{4b^2}\Big[-\frac{4b\alpha_s}{3\alpha^2} - \alpha^4(\mu + \frac{M_B - m_1 - m_2}{\alpha})^2 + M_B - m_1 - m_2(2\mu$$
$$- \frac{M_B - m_1 - m_2}{\alpha})\Big]^2 - \frac{4}{\alpha^2}\left(\frac{\alpha_s^2}{9} + b\kappa_2\right) + \ell(\ell - 1) = 0 \qquad (14)$$

با توجه به معادله (١٤)، ابتدا جرم دی‌کوارک را محاسبه کرده و در ادامه، جرم باریون با تکرار این معادله تعیین می‌شود. در ادامه، به کمک تابع موج به دست آمده، گشتاورهای مغناطیسی و پهنای واپاشی تابشی باریون‌های سنگین را محاسبه می‌کنیم.

جدول ۱. جرم دی کوارک‌های سنگین

دی کوارک	جرم	Ref [۱۳]	Ref [۱۴]	Ref [۱۵]
cc	3230±84	3226	3141	3414
bb	9861±121	9778	9342	10018
bc	6595±96	6519	6270	6735

جدول ۲.جرم باریون کسی با اسپین ۳/۲

باریون	M(MeV)	M(other)
$\Xi_{cc}^{*++}([cc]u)$	3708±95	3727 [۱۶] 3610 [۱۷] 3860 [۱۸] 3610 [۱۹]
$\Xi_{bb}^{*0}([bb]u)$	10238±145	10237 [۱۶] 10130 [۱۷] 10340 [۱۸] 10133 [۱۹]
$\Xi_{cb}^{*+}([cb]u)$	6983±108	6980 [۱۶] 6900 [۱۷] 7100 [۱۸] 6900 [۱۹]

جدول ۳. پهنای واپاشی تابشی باریون Ξ

پهنا واپاشی تابشی	نتایج	مراجع دیگر
$\Gamma(\Xi_{cc}^{*++} \to \Xi_{cc}^{++}\gamma)$	1.540 ± 0.181	14.6[۲۰] 3.90[۲۱] 1.64 [۲۲]
$\Gamma(\Xi_{bb}^{*0} \to \Xi_{bb}^{0}\gamma)$	0.432 ± 0.102	0.31 [۲۳] 0.022[۲۴] 0.001[۲۲]
$\Gamma(\Xi_{bc}^{*+} \to \Xi_{bc}^{+}\gamma)$	0.251 ± 0.082	0.209[۲۵] 0.612[۲۴]

لازم به ذکر است که خطاهای جدول‌های ۱ تا ۳، خطاهای آماری نبوده و از انتشار عدم قطعیت پارامترهای ورودی مدل (شامل جرم کوارک‌ها، پارامتر b و ثابت جفت‌شدگی) حاصل شده‌اند. در بسیاری از کارهای پیشین، چنین خطاهایی گزارش نشده است، زیرا یا از پارامترهای ثابت استفاده کرده‌اند یا فقط خطای عددی حل معادله را ذکر کرده‌اند که معمولاً بسیار کوچک‌تر از خطای سیستماتیک است. بدین‌ترتیب، گزارش خطا در این کار، تصویر واقع‌گرایانه‌تری از وابستگی نتایج به مدل ارائه می‌دهد و امکان مقایسه‌ی معنی‌دارتر با داده‌های آینده را فراهم می‌کند.

نتیجه‌گیری

باریون‌های سنگین، آزمایشگاه‌های منحصربه‌فردی برای مطالعه دینامیک برهمکنش قوی و همچنین محبوس‌شدگی رنگ در نظریه QCD به شمار می‌روند. آن‌ها همچنین محیطی عالی برای درک دینامیک کوارک‌های سبک در مجاورت کوارک‌های سنگین فراهم می‌کنند. باریون‌های دوگانه سنگین به طور خاص جالب توجه هستند، زیرا همزمان بستری جدید برای بررسی تقارن کوارک سنگین و دینامیک کایرال ارائه می‌دهند. با توجه به نتایج اخیر از آزمایش LHCb سرن در مورد باریون‌های افسون تکی و دوگانه، علاقه مجددی هم از نظر تجربی و هم از نظر نظری به ویژگی‌های باریون‌های سنگین، مانند جرم‌ها، گشتاورهای مغناطیسی و پهنای واپاشی تابشی، ایجاد شده است.در این کار جرم باریون سنگین در مدل دی کوارک به دست آمد. مدل دی‌کوارک در توصیف بسیاری از پدیده‌های جالب توجه بسیار موفق عمل می‌کند. این مدل به ما اجازه می‌دهد تا مسئله‌ی سه‌جسمی را به یک مسئله‌ی دو جسمی تبدیل کنیم به طوری که بتوان از معادله‌ی بته–سالپیتر که برای سیستم‌های دو جسمی مناسب است، استفاده کرد. ابتدا جرم دی کورام با استفاده از معادله سالپیتر محاسبه شده است. نتایج جرم دی‌کوارک در جدول ۱ آورده شده. سپس با استفاده از مدل کوارک–دی‌کوارک، طیف جرمی حالت موج S باریون دو کوارک سنگین کسی با اسپین ۳/۲ را محاسبه کردیم. نتایج آن با مراجع دیگر در جدول ۲ مقایسه شده است. پهنای واپاشی تابشی را برای گذارهای اسپین ۳/۲ به ½ محاسبه نمودیم. مقایسه نتایج پهنا واپاشی تابشی با سایر مراجع در جدول ۳ نشان داده شده است.

مرجع ها

[۱]N. Brambilla et al., *Eur. Phys. J. C* 74, 2981 (2014).
[۲]A. Vairo, *Mod. Phys. Lett. A* 29, 1430019 (2014).
[۳] M. Karliner, J. L. Rosner, *Phys. Rev. Lett*. 119, 202001 (2017).
[۴] G. Yang, J. Ping, P. G. Ortega, and J. Segovia, Chinese Physics C 44, 023102 (2020).
[۵] J. M. Flynn, E. Hernandez, and J. Nieves, *Phys. Rev. D* 85, 014012 (2012).
[۶] Z. S. Brown, W. Detmold, S. Meinel, and K. Orginos, Phys. Rev. D 90, 094507 (2014).
[۷] Hao Zhou, Si-Qiang Luo, Xiang Liu, *Physical Review D* 112 (7) (2025).
[۸] Tian-Wei Wu, Li-Sheng Geng, *Few Body Syst*. 62 4, 89 (2021).
[۹] K. Azizi and Sarac, *Eur. Phys. J. C* 82 (2022) 10, 920.
[۱۰] A. Bernotas, V. Simonis, *Phys. Rev. D* 87, 074016 (2013).
[۱۱] C. Patrignani et al., *Chin. Phys. C* 40 (10), 100001 (2016).
[۱۲] A. H. Hoang, *Phys. Rev. D* 59, 014039 (1999).
[۱۳]R. N. Faustov, V. O. Galkin, E. M. Savchenko, Universe 7 (4), 94 (2021).
[۱۴]A.S. de Castro, H. F. de Carvalho, A. C. B. Antunes, Z. Phys. C 57, 315-317 (1993).
[۱۵] M. V. Carlucci et al., arXiv:0711.2014v2 (2008).
[۱۶] D. Ebert, R. N. Faustov, V. O. Galkin and A. P. Martynenko, *Phys. Rev. D* 66, 014008 (2002).
[۱۷] V. V. Kiselev and A. K. Likhoded, Phys. Usp. 45, 455-506 (2002); *Usp. Fiz. Nauk* 172, 497 (2002).
[۱۸] S. P. Tong et al., *Phys. Rev. D* 62, 054024 (2000).
[۱۹] C. Albertus, et al., *Eur. Phys. J. A* 31, 691-694 (2007).
[۲۰] Q. F. Lü, K. L. Wang, L. Y. Xiao, X. H. Zhong, *Phys. Rev. D* 96, 114006 (2017).
[۲۱] L.Y. Xiao, K. L. Wang, Q. F. Lü, X. H. Zhong, S. L. Zhu, *Phys. Rev. D* 96, 094005 (2017).
[۲۲] M. Farhadi, S. Mohammad Moosavi Nejad, A. Armat, *Eur. Phys. J. A* 59, 171 (2023).
[۲۳] T. Branz et al., *Phys. Rev. D* 81, 114036 (2010).
[۲۴] A. Bernotas, V. Sımonis, *Phys. Rev. D* 87, 074016 (2013).
[64] C. Albertus, E. Hernández, J. Nieves, *Phys. Lett. B* 690, 265 (2010).

مطالعه طیف انرژی پتانسیل تعمیم‌یافته هولتن–هلمن در حضور نقص توپولوژیکی در چارچوب مکانیک کوانتومی

روشن‌ضمیر، محمّد

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

چکیده

در این تحقیق رفتار طیف انرژی و توابع موج بهنجار مربوط به پتانسیل تعمیم‌یافته هولتن–هلمن در حضور عیب توپولوژیکی و با استفاده از رهیافت نیکیفوروف – یواروف و تقریب گرین – آلدریش برای حالت $\ell \neq 0$ در چارچوب مکانیک کوانتومی مطالعه می‌گردد. مشاهده می‌شود که حضور عیب توپولوژیکی به طور مداوم باعث افزایش ویژه مقدار انرژی برحسب تابعی از قدرت پتانسیل و پارامتر پوششی می‌شود.

واژه های کلیدی: *پتانسیل تعمیم‌یافته هولتن–هلمن، عیب توپولوژیکی، تقریب گرین – آلدریش.*

Investigation of the generalized Hulthén-Hellmann potential energy spectrum in the presence of topological defect in the quantum mechanical framework

Roshanzamir, Muhammad

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Shahrekord University, Shahrekord

Abstract

In this research, the behavior of the energy spectrum and normalized wave functions related to the generalized Hulthén-Hellmann potential in the presence of topological defect is studied using the Nikiforov-Uvarov approach and the Greene-Aldrich approximation for the ℓ −state in the framework of quantum mechanics. It is observed that the presence of topological defects consistently increases the specific energy eigenvalue as a function of the potential strength and the screening parameter.

***Keywords**: modified Hulthén–Hellmann potential, topological defect, Greene-Aldrich approximation scheme.*

PACS No. 02

مقدمه

توسعه مکانیک کوانتومی و تبیین طیف‌های انرژی گسسته همواره با معرفی مدل‌های مختلف پتانسیل همراه بوده است. این مدل ها نقش مهمی در توصیف حالت های مقید و بررسی برهم‌کنش‌های کوانتومی ایفا می‌کنند و از طریق معادله شرودینگر امکان مطالعه دقیق سامانه‌های فیزیکی را فراهم می سازند. موفقیت این مدل‌ها در بازتولید طیف‌های اتمی، اعتبار و اهمیت آن‌ها را در فیزیک کوانتومی تثبیت کرده است [۳-۱]. در سال‌های اخیر، توجه ویژه‌ای به پتانسیل‌های نوع نمایی و ترکیب آن‌ها معطوف شده است، زیرا این پتانسیل‌ها قادرند طیف گسترده‌ای از برهم‌کنش‌های کوتاه‌برد و بلندبرد را توصیف کنند. در این میان، پتانسیل تعمیم‌یافته هولتن–هلمن از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. این پتانسیل با دربرگرفتن حالت‌های خاص، کاربردهای گسترده‌ای در فیزیک هسته‌ای، اتمی، مولکولی، حالت جامد و پلاسما دارد. همچنین، به دلیل ساختار ریاضی مناسب، بستری مطلوب برای آزمون روش‌های تحلیلی و تقریبی در مکانیک کوانتومی محسوب می‌شود [۴].

از سوی دیگر، نقص‌های توپولوژیکی به‌ویژه ریسمان‌های کیهانی، به دلیل تأثیر قابل توجه بر ساختار فضازمان و ویژگی‌های کوانتومی سامانه‌ها، مورد توجه فراوان قرار گرفته‌اند. حضور ریسمان کیهانی با ایجاد هندسه مخروطی در فضازمان، موجب تغییر در تکانه زاویه‌ای مؤثر، جابه‌جایی ترازهای انرژی و رفع هم‌ترازی آن‌ها می‌شود، در حالی که معادله شرودینگر همچنان قابلیت حل تحلیلی خود را حفظ می‌کند [۶،۵]. این ویژگی، ریسمان کیهانی را به چارچوبی مناسب برای مطالعه آثار توپولوژیکی در سامانه‌های کوانتومی تبدیل کرده است.

علاوه بر این، مطالعه پتانسیل‌های نمایی در حالت‌های دارای تکانه زاویه‌ای غیر صفر، به دلیل حضور جمله گریز از مرکز، معمولاً نیازمند استفاده از روش‌های تقریبی نظیر تقریب گرین–آلدریش به فرم $1/r^2 \approx \eta^2/\left(1-e^{-\eta r}\right)^2$ است [۷]. پتانسیل‌های نمایی ترکیبی به‌ویژه در مدل سازی مولکول‌های دواتمی و بررسی سامانه‌هایی با توابع موج فوق‌هندسی کاربرد فراوانی دارند و استخراج طیف انرژی آن‌ها از دیدگاه نظری و تجربی حائز اهمیت است [۳،۲]. با وجود مطالعات گسترده انجام‌شده، تاکنون تأثیر نقص توپولوژیکی ریسمان کیهانی بر طیف انرژی سامانه‌های توصیف‌شده توسط پتانسیل تعمیم‌یافته هولتن–هلمن به‌طور جامع بررسی نشده است. ازاین‌رو، هدف این پژوهش مطالعه اثر این نقص توپولوژیکی بر ترازهای انرژی حالت‌های مقید در چارچوب پتانسیل تعمیم‌یافته هولتن–هلمن است. پتانسیل تعمیم‌یافته‌ی هولتن–هلمن[1] به فرم

$$V(r) = -\frac{\mathrm{M}e^{-\eta r}}{1-e^{-\eta r}} + \frac{\mathrm{P}e^{-\eta r}}{r} - \frac{\mathrm{T}}{r} \qquad (۱)$$

بیان می‌گردد به‌طوری که M، P و T معرف پارامترهای پتانسیل و η مبین پارامتر غربالگری یا پوششی ($\eta < 1$) است. محاسبه دقیق مطالعه رابطه پاشندگی و حل تحلیلی چنین سیستم‌هایی می‌تواند بطور نظری و تجربی نتایج جالب توجه کاربردی ارائه دهد.

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 [۸]. معادله عمومی که بدین روش مربوط است به فرم

$$\psi_n''(r) + \frac{\tilde{\tau}(r)}{\sigma(r)}\psi_n'(r) + \frac{\tilde{\sigma}(r)}{\sigma^2(r)}\psi_n(r) = 0, \qquad (۲)$$

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 $\left(\sigma(r)\rho(r)\right)' = \tau(r)\rho(r)$ به فرم فوق هندسی

$$\sigma(r)y_n''(r) + \tau(r)y_n'(r) + \lambda y_n(r) = 0, \qquad (۳)$$

می‌رسیم که

$$\tau(r) = \tilde{\tau}(r) + 2\pi(r); \tau'(r) < 0,\ \lambda = \lambda_n = k + \tilde{\pi}(r)$$
$$= -n\tilde{\tau}(r) - 1/2\, n(n-1)\sigma''(r), \quad n = 0,1,2,\ldots.$$

$\pi(r)$ چندجمله‌ای از مرتبه حداکثر یک می‌باشد. در اینصورت جواب معادله مجذوری چندجمله‌ای $\pi(r)$ بصورت

$$\pi(r) = \frac{\sigma'(r) - \tilde{\tau}(r)}{2} \pm \left(\frac{\left(\sigma'(r) - \tilde{\tau}(r)\right)^2 - \tilde{\sigma}(r) + k\,\sigma(r)}{4}\right)^{\frac{1}{2}}, \qquad (۴)$$

نمایان می‌گردد. پاسخ‌های چندجمله‌ای $y_n(r)$ را می‌توان برحسب رابطه رودریگز[2] $y_n(r) = \frac{B_n}{\rho(r)}\frac{d^n}{dr^n}\left[\sigma^n(r)\rho(r)\right]$ 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 به‌صورت $\varphi(r) = \exp\left(\int \pi(r)\sigma^{-1}(r)dr\right)$ ارائه می‌گردد.

رفتار طیف انرژی در حضور پتانسیل تعمیم‌یافته هولتن–هلمن تحت نقص توپولوژیکی با بهره‌گیری از تقریب گرین – آلدریش و رهیافت نیکیفروف– یووارف

[1] Hulthén-Hellmann potential

[2] Rodriguez relation

معادله شعاعی شرودینگر به فرم

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E_{n,\ell}-V(r)-\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right)\right)S_{n,\ell}(r) = 0, \qquad (۵)$$

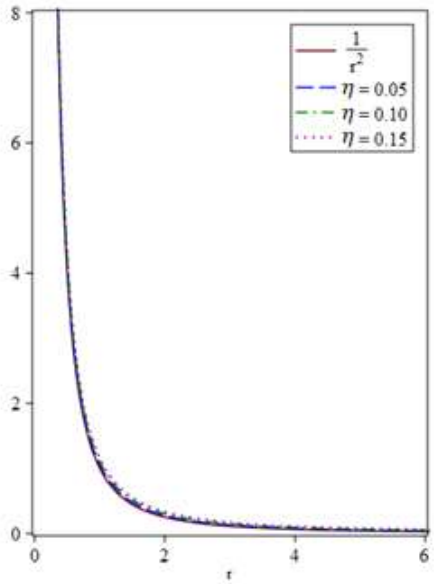
ارائه شده بطوری‌که $\hbar$، μ و $E_{n,\ell}$ به‌ترتیب مبین ثابت کاهش یافته پلانک، جرم کاهیده و انرژی چرخشی–ارتعاشی مولکول‌ها است. در حضور نقص توپولوژیکی ناشی از ریسمان کیهانی، تکانه زاویه‌ای سامانه دستخوش تغییر شده و پارامتر توپولوژیکی $\frac{1}{\xi^2}$ در فرمول‌بندی مسأله ظاهر می‌شود. ریسمان کیهانی با ایجاد یک هندسه مخروطی در فضازمان، کسری زاویه‌ای را به سامانه تحمیل می‌کند که توسط پارامتر توپولوژیکی ξ مشخص می‌شود. این ویژگی موجب بازمقیاس‌دهی مختصات زاویه‌ای و در نتیجه اصلاح مشتق‌های زاویه‌ای می‌گردد. بر این اساس، تکانه زاویه‌ای مؤثر در این حالت به صورت $\ell(\ell+1) \rightarrow \ell_{eff}(\ell_{eff}+1)$ تعریف می‌شود. بنابراین، با در نظر گرفتن تغییر ایجادشده در عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای، می‌توان $\ell(\ell+1)$ را با $\frac{\delta^2}{\xi^2}$ جایگزین نمود.

با جایگذاری رابطه (۱) در معادله (۵)، معادله شرودینگر مرتبه دوم به فرم

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2\mu E_{n,\ell}}{\hbar^2}-\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{Me^{-\eta r}}{1-e^{-\eta r}}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2 r}\left(T-Pe^{-\eta r}\right)\right)S_{n,\ell}(r), = 0, \qquad (۶)$$

ارائه گردیده که برای حالت‌های $\ell \neq 0$ به‌دلیل در برداشتن جمله گریز از مرکز تنها می‌توان با روش‌های تقریبی مورد بررسی قرار داد. جهت حل رابطه فوق می‌توان از تقریب گرین– آلدریش به فرم $1/r^2 \approx \eta^2/\left(1-e^{-\eta r}\right)^2$ برای $\eta \ll 1$ بهره گرفت. شکل ۱ روند تغییرات $1/r^2$ را با عبارت تقریبی ارائه شده به ازای η های مختلف نشان می‌دهد.

با بکارگیری تقریب مذکور در معادله (۶) و تغییر متغیری به فرم $g = e^{-\eta r}$ جهت استفاده از رهیافت نیکیفوروف–یووارف [۸]، فرم معادله فوق هندسی تعمیم یافته به صورت



شکل ۱: منحنی $\frac{1}{r^2}$ و تقریب $1/r^2 \approx \eta^2/\left(1-e^{-\eta r}\right)^2$ به ازای $\eta = 0.05, 0.10, 0.15$

$$\frac{d^2S_{n,\ell}(g)}{dg^2}+\frac{1}{g}\frac{dS_{n,\ell}(g)}{dg}+\frac{1}{g^2(1-g)^2}\left(\tau_1(1-g)^2+\tau_2 g(1-g)+\tau_3(1-g)-\frac{\delta^2}{\xi^2}\right)S_{n,\ell}(g) = 0, \qquad (۷)$$

بدست می‌آید به‌طوری‌که

$$\tau_1 = \frac{2\mu}{\hbar^2\eta^2}E_{n,m}\,,\tau_2 = \frac{2\mu}{\hbar^2\eta^2}(M-P\eta)\,, \qquad (۸)$$
$$\tau_3 = \frac{2\mu\eta T}{\hbar^2\eta^2}.$$

با جایگذاری رابطه (۸) در معادله (۳)، طیف انرژی مربوط به پتانسیل تعمیم‌یافته‌ی هولتن–هلمن از رابطه

$$\frac{1}{2\eta^2\hbar^2}\left(2\left(n+\frac{1}{2}\right)\eta^2\hbar^2\sqrt{\frac{\eta^2\left(\left(\frac{2\delta}{\xi}\right)^2+1\right)\hbar^2+8E_{n,m}\mu}{\eta^2\hbar^2}}\right. \qquad (۹)$$
$$+4\left(n+\frac{1}{2}\right)\eta^2\hbar^2\sqrt{\frac{\left(\frac{\delta}{\xi}\right)^2\eta\hbar^2-2T\mu}{\eta\hbar^2}}+2\left(2\left(\frac{\delta}{\xi}\right)^2+n^2\right.$$
$$\left.\left.+\left(-\frac{16}{\eta^3\hbar^4}\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\delta}{\xi}\right)^2\eta\hbar^2+T\mu\right)\left(\frac{\eta^2\left(\frac{1}{4}+\left(\frac{\delta}{\xi}\right)^2\right)\hbar^2}{2}+E_{n,m}\mu\right)\right)^{\frac{1}{2}}\right)$$

$$+n+\frac{1}{2}\eta^2\hbar^2-4\mu(\mathrm{T}-\mathrm{P})\eta+8\mu\left(E_{n,m}-\frac{\mathrm{M}}{2}\right)=0$$

قابل دستیابی است. در ادامه با جایگذاری رابطه (۸) در معادله (۴)، تابع موج متناظر به صورت

$$\mathcal{S}_{n,\ell}(\mathcal{g}) = \mathcal{N}_n \mathcal{g}^{\sqrt{\frac{\delta^2}{\xi^2}-\tau_3}}(1-\mathcal{g})^{\frac{1}{2}\left(1+\sqrt{4\tau_1+\left(\frac{2\delta}{\xi}\right)^2+1}\right)} \mathcal{P}_n\left(2\sqrt{\frac{\delta^2}{\xi^2}-\tau_3},2\sqrt{\tau_1+\left(\frac{\delta}{\xi}\right)^2+\frac{1}{4}}\right)(1-2\mathcal{g}), \quad (۱۰)$$

بیان گردیده به‌طوری‌که $\mathcal{P}_n^{(\chi,\varsigma)}$ معرف چندجمله‌ای ژاکوبی است که به‌طور گسترده‌ای در تحلیل ریاضی و کاربردهای عملی استفاده می‌گردد [۹]. با بهره‌گیری از خاصیت تعامد این چندجمله‌ای‌ها، به فرم

$$\int_{-1}^{1}\mathcal{P}_\alpha^{(\chi,\varsigma)}\mathcal{P}_\beta^{(\chi,\varsigma)}(1-t)^\chi(1+t)^\varsigma dt = \frac{2^{\chi+\varsigma+1}}{2n+\chi+\varsigma+1}\frac{\Gamma(n+\chi+1)\Gamma(n+\varsigma+1)}{n!\,\Gamma(n+\chi+\varsigma+1)}\delta_{\alpha\beta},$$

می‌توان ضریب بهنجارش $\mathcal{N}_n$ را به فرم

$$\mathcal{N}_n=\sqrt{\frac{\eta\Lambda_1(\Lambda_2+n+\Lambda_1)\Gamma(n+1)\Gamma(\Lambda_2+n+2\Lambda_1-1)}{(n+\Lambda_2)\Gamma(n+2\Lambda_2)}},$$

بدست آورد، به‌طوری‌که

$$\Lambda_1=\sqrt{\frac{\delta^2}{\xi^2}-\tau_3},$$

$$\Lambda_2=\frac{1}{2}+\sqrt{\tau_1+\left(\frac{\delta}{\xi}\right)^2+\frac{1}{4}}.$$

با انتخاب مقادیر مناسب برای پارامترهای کنترلی در رابطه (۱) می‌توان به راحتی الگوهای پتانسیلی متنوعی را بدست آورد. به‌عنوان مثال با جایگذاری $\mathrm{P}=0$ و $\mathrm{T}=0$، رابطه (۱) به پتانسیل هولتن می‌انجامد،

$$V_{Hu.P}(r)=-\frac{\mathrm{M}e^{-\eta r}}{1-e^{-\eta r}},$$

که به ویژه در حوزه اتمی و مولکولی بسیار مهم است. این پتانسیل از نوع کوتاه‌برد بوده که برای بررسی انرژی‌های حالت مقید مولکول‌های دو اتمی [۱۰] و ویژگی‌های نوری نقاط کوانتومی [۱۱] استفاده می‌گردد.

برای حالت $\mathrm{M}=0$، رابطه (۱) به پتانسیل هلمن به فرم

$$V_{He.P}(r)=\frac{\mathrm{P}e^{-\eta r}}{r}-\frac{\mathrm{T}}{r},$$

کاهش می‌یابد که زیرمجموعه‌ای از پتانسیل نوع نمایی چند پارامتری است و اولین بار جهت نشان دادن برهمکنش الکترون–هسته یا الکترون–یون در اتم‌های چند الکترونی مانند پتاسیم استفاده شد.

نتیجه‌گیری

در این تحقیق، تأثیر نقص توپولوژیکی از نوع ریسمان کیهانی بر ترازهای انرژی پتانسیل کوتاه‌برد هولتن–هلمن با بهره‌گیری از رهیافت نیکیفوروف–یووارووف و تقریب گرین–آلدریش مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهد که حضور ریسمان کیهانی موجب تغییر در سطوح انرژی و افزایش تبهگنی آن‌ها می‌شود. این یافته‌ها بیانگر آن هستند که نقص توپولوژیکی به‌عنوان یک قید هندسی در سامانه‌های کوانتومی عمل کرده و ویژگی‌های حالت‌های مقید در مقیاس میکرو سکوپی را دستخوش تغییر می‌کند. افزون بر این، مطالعه حاضر ارتباط مهم میان شدت پتانسیل، پارامتر غربالگری و هندسه توپولوژیکی را آشکار ساخته و نقش تعیین‌کننده توپولوژی را در کنترل و شکل‌دهی طیف‌های انرژی برجسته می‌سازد.

مرجع‌ها

[1] H. I. Alrebdi, A. N. Ikot, I. B. Okon, U. S. Okorie & R. Horchani, *International Journal of Modern Physics A* **25** (2025) 25501106.
[2] F. M. Fernández, *Frontiers in Physics* **12** (2024) 1361070.
[3] H. Mansour & A. Gamal, *Results in Physics* **35** (2022) 105203.
[4] R. V. Nikolaenko, *Journal of High Energy Physics* **11** (2025) 120.
[5] H. Alrebdi, A. N. Ikot, U. S. Okorie, G. J. Rampho & R. Horchani, *Front. Phys.* **13** (2025) 1620283.
[6] F. Ahmed & A. Bouzenada, *Scientific Reports* **15** (2025) 34177.
[7] R. L. Greene and C. Aldrich, *Phys. Rev. A* **14** (1976) 2363.
[8] G. Szego, *"Orthogonal Polynomials"*, American Mathematical Society, New York, (1959).
[9] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *"Table of Integrals, Series and Products"*, Academic Press, New York, (1965).
[10] O. Aydo˘gdu, A. Arda, R. Sever, *J. Math. Phys.* **53** (2012) 102111.
[11] M. C. Onyeaju, J. O. A. Idiodi, A. N. Ikot, M. Solaimani, H. Hassanabadi, *Few Body Syst.* **57** (2016) 793.

اثر ژول–تامسون در سیاهچاله‌های باردار آنتی دوسیته نظریه الکترودینامیک غیر خطی

مهدویان یکتا، داود

گروه فیزیک، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار

چکیده

یکی از جنبه‌های فیزیکی مهم و با سابقه در خصوص سیاهچاله‌ها، مطالعه ترمودینامیک آنها می باشد که نه تنها اطلاعات مفیدی در مورد نظریه‌های کلاسیکی در گرانش به ما می‌دهد بلکه بستر مناسبی برای مطالعه اثرات کوانتومی گرانش فراهم می کند. در این میان سیاهچاله‌هایی که باردار هستند و شامل هندسه آنتی–دوسیته نیز می شوند از اهمیت بالایی برخوردار می باشند. در این مقاله بنا داریم تا یکی از اثرات فیزیکی در سیستم‌های ترمودینامیکی که یک فرآیند کنترلی فشار است و به پدیده ژول–تامسون موسوم است را در خصوص دسته‌ای از سیاهچاله‌های باردار آنتی–دوسیته از مدل الکترودینامیک غیر خطی اینشتین–اویلر–هایزنبرگ مورد تحقیق قرار دهیم. بر این اساس کمیت‌های مهمی از قبیل ضریب ژول–تامسون، دمای وارونی و مقادیر بحرانی برای پارامترها در نقاط گذار فاز را محاسبه می‌کنیم و نمودارهای دمای وارونی و هم‌آنتالپی را در خلال این فرآیند ترسیم می‌کنیم تا اثرات پارامترهای مختلف نظریه الکترودینامیک غیر خطی و سیاهچاله را بررسی کنیم.

Joule-Thomson effect in charged AdS black holes of nonlinear electrodynamics

Mahdavian Yekta, Davood

Department of Physics, Hakim Sabzevari University, Sabzevar

Abstract

One of the most important features in the black hole physics is studying their Thermodynamics, that not only yields useful information about the classical theories of gravity but also provide an appropriate frame for studying quantum gravity. In this respect, the charged Anti-de Sitter (AdS) black holes are of great interest. In the context of black hole thermodynamics, we investigate a throttling process for a quantum-corrected charged AdS black holes governed by Einstein-Euler-Heisenberg (EEH) nonlinear electrodynamics. We will find exact expressions for the Joule-Thomson coefficient and the inversion temperature as functions of the Euler-Heisenberg parameter and other physical parameters of the black hole. The critical values of parameters, which may be regarded as some phase transition points, are specified by extremizing the equation of state. We also consider the isenthalpic and inversion curves for different values of the black hole parameters.

۱–مقدمه

مطالعه فیزیک سیاه‌چاله‌ها همواره یکی از زمینه‌های مورد علاقه دانشمندان در حوزه فیزیک نظری بوده است. از ساختارهای اولیه کیهان، نظریه‌های نسبیت عام و تصحیحات آن تا نظریه ریسمان و فیزیک انرژی‌های بالا همه به نوعی با جنبه‌های مختلف فیزیک سیاهچاله‌ها ارتباط دارند. یکی از بخش‌های مهم در این حوزه مشابهت سازی سیاه‌چاله با یک سیستم ترمودینامیکی معمول است که بر اساس کارهای برجسته بکنشتاین، هاوکینگ و همکارانش انجام شده است[۱–۳]. اهمیت موضوع فراتر از یک مشابهت سازی است و کمیت‌های مورد نظر از قبیل دما و آنتروپی قابل اندازه‌گیری نیز می‌باشند. اگرچه این اندازه‌گیری در خصوص سیاهچاله‌های مورد مطالعه در حال حاضر امکان‌پذیر نیست. در این خصوص مطالعه ترمودینامیک سیاه‌چاله‌های با هندسه‌ی آنتی–دوسیته که در آنها ثابت کیهانی نقش فشار را ایفا می‌کند از اهمیت بالایی برخوردار هستند[٤]. همچنین نشان داده شده است [٥] که سیاهچاله‌های AdS باردار گذار فازی مشابه گذار فاز سیستم گاز واندروالس دارند. بر این اساس مطالعه گذار فازها و نقاط بحرانی و سایر پدیده‌های ترمودینامیکی از اهمیت بالایی برخوردار می‌شوند [٦].

بنابر قضیه‌ی بدون مو، سیاه‌چاله‌ها شامل یکسری پارامترهای محدود به نام جرم M ، بار Q و اندازه حرکت زاویه‌ای J می‌باشند که در کنار کمیت‌های ترمودینامیکی دیگر قانون اول ترمودینامیک سیاهچاله‌ها را به شکل زیر برآورده می‌کنند:

$$dM = T_H\, dS + \Omega_H\, dJ + \Phi_H\, dQ + V_H\, dP, \qquad (۱)$$

که به ترمودینامیک گسترش یافته موسوم می‌باشد و $V_H=\frac{4}{3}\pi r_H^3$ حجم ناحیه افق رویداد سیاه‌چاله است [۶]. یکی از فرآیندهای ترمودینامیکی که در خصوص سیاه‌چاله‌های آنتی-دوسیته باردار نیز بررسی می‌شود اثر ژول-تامسون است که در آن گاز درون یک مخزن از یک دیواره متخلخل یا یک شیر تخلیه، از ناحیه فشار بالا به ناحیه با فشار پایین عبور می‌کند. در خلال چنین فرآیندی آنتالپی سیستم بدون تغییر است و یک انبساط آدیاباتیک رخ می‌دهد [۷]. علت مشابهت سازی چنین فرآیندی برای سیاهچاله‌ها پایین بودن آهنگ تابش هاوکینگ است به گونه‌ای که جرم سیاهچاله با آنتالپی تقریب زده می‌شود [۸].

علی‌رغم مدل‌های گرانشی جفت شده با الکترودینامک خطی ماکسول که منجر به معرفی سیاه‌چاله‌های باردار شده‌اند، علاقه‌مندی زیادی همچنین در بررسی اثرات الکترودینامیک غیر خطی بواسطه محدود بودن طیف انرژی آنها از قبیل نظریه بورن-اینفلد [۹]، در مطالعه فیزیک سیاه‌چاله‌ها می‌باشد. در این مقاله می‌خواهیم اثرات پارامتری یک نظریه‌ی گرانشی جفت‌شده غیرخطی به نام اویلر-هایزنبرگ [۱۰] را در ضریب ژول-تامسون، نمودارهای وارونی دمایی و منحنی‌های هم‌آنتالپی سیاه‌چاله‌های باردار AdS تحقیق کنیم.

۲- سیاه‌چاله باردار AdS در نظریه EEH

در مشابهت با نظریه‌ی نسبیت عام اینشتین که از وجود تکینگی‌ها در مرکز سیاهچاله‌ها به دلیل واگرایی انحنای فضا-زمان رنج می‌برد، نظریه‌ی کلاسیک الکترودینامیک ماکسول نیز از واگرایی خود-انرژی بارهای نقطه‌ای رنج می‌برد. با این وجود با معرفی یکسری مدل‌های غیر خطی از الکترودینامیک سعی بر رفع این مشکل نموده‌اند. یکی از این مدل‌ها که در مطالعات نظریه‌ی ریسمان و گرانش کوانتومی مهم است نظریه‌ی اویلر-هایزنبرگ است. هنگامیکه این نظریه با گرانش اینشتین همراه می‌شود کنش موثر آن در حضور ثابت کیهانی به عنوان نظریه‌ی EEH شناخته می‌شود[۱۱]:

$$S_{EEH}=\frac{1}{16\pi G}\int d^4x\sqrt{-g}\left[R-2\Lambda-L(X,Y)\right], \qquad (۲)$$

که $L(X,Y)$ لاگرانژی غیرخطی بر حسب اسکالرهای $X=1/4F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$ و $Y=1/4F_{\mu\nu}*F^{\mu\nu}$ است:

$$L(X,Y)=4X-2\alpha\left(X^2+\frac{7}{4}Y^2\right), \qquad (۳)$$

پارامتر اویلر-هایزنبرگ است که شدت برهمکنش غیر خطی را با ثابت ساختار ریز الکترودینامیکی $\alpha=8\alpha_{QED}^{\ 2}/45m^4$ مشخص می‌کند. جواب متقارن کروی برای معادلات حرکت این نظریه سیاه‌چاله AdS باردار الکتریکی است که با متریک زیر داده می‌شود [۱۲]:

$$ds^2=f(r)\,dt^2-f^{-1}(r)\,dr^2-r^2\,d\Omega^2, \qquad (٤)$$

که در آن تابع $f(r)$ به صورت زیر است

$$f(r)=1-\frac{2M}{r}+\frac{Q^2}{r^2}-\frac{\alpha Q^4}{r^6}+\frac{r^2}{\ell^2}, \qquad (۵)$$

و پتانسیل پیمانه‌ای ماکسول عبارت است از

$$A_t=-(\frac{Q}{r}-2\alpha\frac{Q^3}{r^5}). \qquad (۶)$$

تعیین مکان افق رویداد در هر سیاه‌چاله‌ای برای محاسبه کمیت‌های ترمودینامیکی بسیار حائز اهمیت است و از حل $f(r_H)=0$ تعیین می‌شود. با توجه به رابطه (۵) معادله به صورت تحلیلی حل نمی شود و بایستی محل افق رویداد را به صورت عددی مشخص کنیم. $r=r_H$ نمایش دهنده‌ی بزرگترین ریشه معادله و محل افق رویداد است. آنتروپی، حجم و فشار سیاه‌چاله عبارتند از [۱۳]

$$S=\frac{A_H}{4G}=\pi r_H^2,\quad V=\frac{4}{3}\pi r_H^3,\quad P=-\frac{\Lambda}{8\pi}=\frac{3}{8\pi\ell^2}, \qquad (۷)$$

با فرض اینکه $G=1$ باشد. جرم ADM و دمای هاوکینگ سیاه‌چاله بر حسب شعاع افق رویداد به صورت زیر داده می‌شوند:

$$M=\frac{r_H}{2}+\frac{Q^2}{2r_H}-\frac{\alpha Q^4}{40r_H^5}+\frac{r_H^3}{2\ell^2} \qquad (۸)$$

$$T_H=\frac{\kappa}{2\pi}=\frac{f'(r)}{4\pi}=\frac{1}{4\pi r_H}\left(1-\frac{Q^2}{r_H^2}+\frac{\alpha Q^4}{4r_H^6}+\frac{3r_H^2}{\ell^2}\right).$$

می‌توان نشان داد که این کمیت‌ها قانون اول ترمودینامیک را به صورت $T=\left(\frac{\partial M}{\partial S}\right)_{Q,P}$ نیز برآورده می‌کنند [۱۴]. معادله حالت سیستم با جایگزاری حجم و فشار از روابط (۷) بر حسب افق رویداد و شعاع فضای AdS در معادله دما (۸) بدست می‌آید

(۹)

$$P=\frac{36\pi^{2/3}q^2V^{4/3}-9\times6^{2/3}V^2+108\pi^{2/3}TV^{7/3}-4\times6^{2/3}\pi^2\alpha q^4}{108\times6^{1/3}\pi^{1/3}V^{8/3}}.$$

۳- ضریب ژول-تامسون و دماهای وارونی و بحرانی

در یک سیستم ترمودینامیکی ایزوله، هنگامی‌که گاز از یک ناحیه با فشار بالا از درون یک دیواره متخلخل وارد ناحیه کم فشار می‌شود

پدیده ژول–تامسون رخ می‌دهد و در طی فرآیند تغییر دمایی آنتالپی ثابت می‌ماند. میزان تغییرات دمایی با تغییر فشـــار گاز با ضـــریب ژول–تامسون توصیف می‌شود

$$\mu=\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_H . \qquad (۱۰)$$

با توجه به تعریف ترمودینامیکی آنتالپی $H=U+PV$ و تغییر انرژی داخلی $dU=TdS-PdV$ و قانون اول و ثابت بودن آنتالپی $dH=0$ داریم

$$0=T\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_H+V . \qquad (۱۱)$$

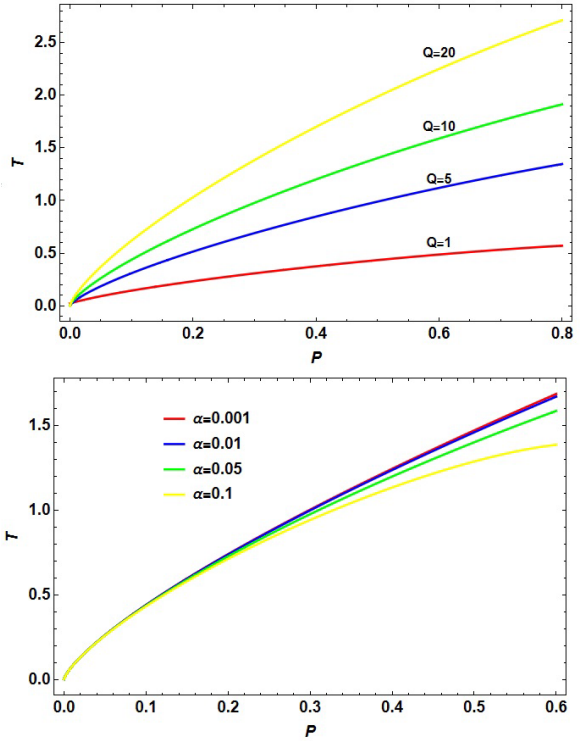
چون آنتالپی با جرم سیاه‌چاله داده می‌شود پس شرط هم‌آنتالپی با شرط ثابت بودن جرم سیاه‌چاله $dM=0$ متناظر است. با استفاده از روابط دیفرانسیلی و روابط ماکسول $\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T=-\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P$ و ظرفیت گرمایی در فشار ثابت $C_P=T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P$ و جایگزاری در رابطه (۱۱) داریم

$$0=-T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P+C_P\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_H+V . \qquad (۱۲)$$

با مقایسه روابط (۱۰) و (۱۲) به ضریب ژول–تامسون زیر می‌رسیم:

$$\mu=\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_M=\frac{1}{C_P}\left[T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P-V\right]. \qquad (۱۳)$$

در نمودارهای دما بر حســب فشــار محلی که گاز از ناحیه گرم به ناحیه سـرد تغییر فاز می‌دهد به دمای وارونی موسوم می‌باشـد. این نقطه متناظر با دمایی است که از حل معادله $\mu=0$ بدست می‌آید. دمایی که از رابطه (۱۳) بدست می‌آید بایستی با دمایی که از معادله حالت (۹) به ازای فشار وارونی P_i بدست می‌آید یکی باشد. این تسـاوی یک معادله برای افق بر حسـب P_i می‌دهد که بایسـتی حل شود و بزرگترین ریشه آن در رابطه‌ی دمای وارونی قرار داده شود. بر این اسـاس منحنی‌های دمای وارونی در صـفحه T-P قابل ترسـیم اســت. نمودارها بر حســب مقادیر مختلف بار و پارامتر غیرخطی اویلر–هایزنبرگ در شـکل (۱) آمده اسـت. در مشـابهت با رفتار گاز واندروالس برای این دسته از سیاه‌چاله‌ها می‌توان یک دمای وارونی کمینه برای هر منحنی در شـکل‌های (۱) پیدا کرد که به ازای فشـار وارونی $P_i=0$ بدست می‌آیند.



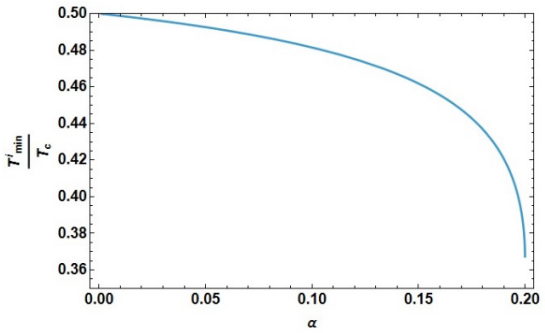
شـــکل ۱ : منحنی های دمای وارونی به ازای مقادیر مختلف بار الکتریکی و پارامتر غیرخطی

در منحنی‌های هم‌دما گاز ولندروالس یکســـری نقاط عطفی وجود دارند که سیستم در آنها گذار فاز انجام می‌دهد. برای سیاه‌چاله‌های AdS نیز چنین نقاط بحرانی وجود دارند که از شـــرایط $\frac{\partial P}{\partial r_H}=0$ و $\frac{\partial^2 P}{\partial {r_H}^2}=0$ بدست می‌آیند [۵]. طبق رابطه (۷) مشتقات نسبت به حجم را می‌توان با مشـــتق نســـبت به افق رویداد جایگزین کرد. این معادلات رفتار بحرانی P-V را توصـیف می‌کنند[۵]. با توجه به متریک (۵) عباراتی که برای کمیت‌های بحرانی دما، افق رویداد (حجم) و فشـار بدسـت می‌آیند خیلی طولانی و بزرگ هسـتند ولی در حد مقادیر کوچک پارامتر غیر خطی داریم

$$T_c=\frac{1}{3\sqrt{6}\,\pi Q}+\frac{\alpha}{432\sqrt{6}\,\pi Q^3}+\mathrm{O}\left(\alpha^{3/2}\right)$$
$$r_c=\sqrt{6}Q-\frac{7\alpha}{72\sqrt{6}Q}+\mathrm{O}\left(\alpha^{3/2}\right) \qquad (۱۵)$$
$$P_c=\frac{1}{96\pi Q^2}+\frac{7\alpha}{41472\,\pi Q^4}+\mathrm{O}\left(\alpha^{3/2}\right)$$

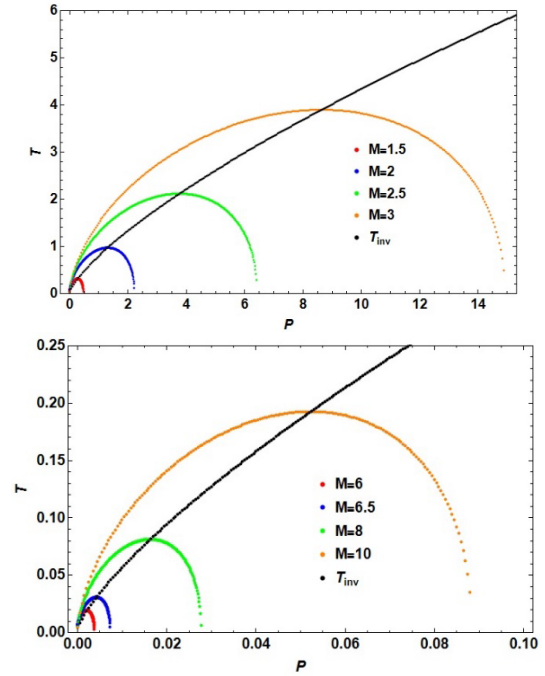
مشـخص اسـت که در حد $\alpha\to 0$ به نتایج سیاه‌چاله AdS باردار در مقاله [۷] منجر می‌شـوند. نسـبت کمینه دمای وارونی به دمای

بحرانی سیستم برای سیاه‌چاله‌های *AdS* باردار برابر ۰.۵ است [۷] ولی در مدل‌های گرانشی مختلف این مقدار تصحیح می‌شود. در این مقاله نیز این نسبت برای مدل *EEH* بررسی شده که نتایج آنها در شکل (۲) آمده است.



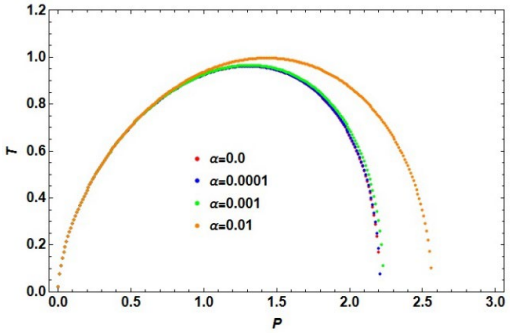
شکل ۲: نسبت دمای وارونی کمینه به دمای بحرانی برحسب پارامتر غیرخطی

نمودارهای هم‌آنتالپی و منحنی دمای وارونی مربوطه نیز به ازای مقدار $\alpha = 0.001$ و بارهای متفاوت در شکل‌های (۳) آمده است. محل تلاقی منحنی‌های مشکی رنگ با منحنی‌های هم‌آنتالپی نقاط تغییر فاز دمایی سیستم هستند.



شکل ۳: منحنی‌های هم‌آنتالپی و دمای وارونی در مدل EEH

برای مشاهده اثرات پارامتر غیرخطی مدل *EHH* روی نمودارهای هم‌آنتالپی شکل (٤) به ازای مقادیر مختلف α ترسیم شده است.



شکل ٤: اثرات پارامتر غیر خطی مدل EEH روی منحنی هم‌آنتالپی

٤- نتیجه‌گیری

در این مقاله اثرات لاگرانژین غیرخطی اویلر-هایزنبرگ بر روی ویژگی‌های ترمودینامیکی سیاه‌چاله‌های *AdS* باردار از مدل *EEH* مطالعه شده است. به طور خاص، اثرات این تصحیح روی ضریب ژول-تامسون، دمای وارونی و مقادیر بحرانی برخی از کمیت‌های سیستم بررسی شده است. نکته قابل ذکر در این محاسبات اینست که به دلیل پیچیدگی‌های ریاضیاتی در شکل تابع سیاهی متریک این سیاه‌چاله تقریبا اکثر کمیت‌ها و حتی ترسیم نمودارها به روشهای عددی انجام شده است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهند که تصحیحات ناشی از جمله غیرخطی قابل ملاحظه می‌باشند و در حدی که ثابت جفت‌شدگی این جمله به سمت صفر میل کند همان نتایج سیاهچاله *AdS* باردار معمول در مقاله [۷] بدست می‌آیند که این کمیت‌ها برای اولین بار در آن معرفی و محاسبه شده‌اند.

مراجع

[1] J.D. Bekenstein, *Lett. Nuovo Cimento* **4** (1972) 737.
[2] S.W. Hawking, *Nature* **248** (1974) 30.
[3] J.M. Bardeen, B. Carter, S.W. Hawking, *Commun. Math. Phys*. **31** (1973) 161.
[4] A. Chamblin, R. Emparan, C. V. Johnson, R. C. Myers, *Phys. Rev. D* **60**, 064018 (1999).
[5] D. Kubiznak, R.B. Mann, *J. High Energy Phys.* **1207** (2012) 033.
[6] D. Kubiznak, R.B. Mann, M. Teo, *Class. Quantum Gravity* **34** (2017) 063001.
[7] Ö. Ökcü, E. Aydıner, *Eur. Phys. J. C* **77**(1) (2017) 24.
[8] D. Kastor, S. Ray, J. Traschen, *Class. Quant. Grav*. **26**, 195011 (2009).
[9] M. Born and L. Infeld, *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **144**, 852 (1934).
[10] W. Heisenberg and H. Euler, *Zeitschrift Fr Physik*, **98**, 714-732 (1936).
[11] S. A. Gutierrez, A. L. Dudley, J. F. Plebaski, *J. Math. Phys.* **22**, 2835 (1981)
[12] H. Yajima and T. Tamaki, *Phys. Rev. D* **63**, 064007 (2001).
[13] D. Magos and N. Breton, *Phys. Rev. D* **102**, 084011 (2020)
[14] N. Breton and L. A. Lopez, *Phys. Rev. D* **104**, 024064 (2021).





کنفرانس فیزیک ایران

دانشگاه قم – ۲ الی ۵ شهریور ۱۴۰۵

مجموعه مقالات شاخه

اطلاعات کوانتومی، محاسبات کوانتومی و اپتیک کوانتومی

www.psi.ir/f/physics1405

دینامیک تحول واهمدوسی ساختارهای زیرپلانکی

دولتشاهی، ساره ؛ توسلی، محمدکاظم

گروه اتمی و مولکولی، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد

چکیده

ساختارهای زیرپلانکی با نوسانات سریع در فضای فاز و حساسیت فوق‌العاده به جابه‌جایی‌های کوچک، از ویژگی‌های غیرکلاسیکی مهم سامانه‌های کوانتومی هستند و پتانسیل بالایی برای کاربرد در مترولوژی کوانتومی دارند. در این مطالعه، دینامیک زمانی و واهمدوسی این ساختارها در یک برهم‌نهی خاص از حالت‌های چلانده در حضور نویز گرمایی بررسی شده است. با استفاده از تابع توزیع ویگنر، آهنگ واپاشی ویژگی‌های زیرپلانکی و حساسیت کوانتومی متناظر برای هر حالت محاسبه شده است. نتایج نشان می‌دهد که افزایش تعداد فوتون‌های افزوده و یا کاهیده به برهم‌نهی در نظر گرفته شده، آهنگ واهمدوسی را در ساختارهای زیرپلانکی افزایش می‌دهد. علاوه بر این، افزایش فوتون‌های افزوده یا کاهیده آهنگ واپاشی حساسیت را نیز افزایش داده و آن‌ها را در برابر نویز ضعیف‌تر می‌سازد. این بررسی کمی، تصویری دقیق از پایداری و حساسیت ساختارهای زیرپلانکی ارائه می‌کند و مسیر طراحی سامانه‌های مقاوم در برابر نویز در فناوری‌های کوانتومی را روشن‌تر می سازد.

واژه های کلیدی: *ساختار زیرپلانکی، حالت چلانده، واهمدوسی، مترولوژی کوانتومی.*

Dynamical evolution of decoherence across sub-Planck structures

Dolatshahi, Sareh; Tavassoly, Mohammad Kazem

Atomic and Molecular Group, Physics Department, Yazd University

Abstract

Sub-Planck structures, characterized by rapid oscillations in phase space and extraordinary sensitivity to small displacements, constitute one of the most significant nonclassical features of quantum systems and hold great potential for applications in quantum metrology. In this work, the temporal dynamics and decoherence of these structures are investigated for a particular superposition of squeezed states in the presence of thermal noise. By employing the Wigner distribution function, the decay rates of the sub-Planck features and their corresponding quantum sensitivities are quantitatively evaluated for each state. The results reveal that increasing the number of either photon-added or photon-subtracted enhances the decoherence rate of the sub-Planck structures. Furthermore, a larger number of added or subtracted photons also accelerates the decay of quantum sensitivity, thereby making the state susceptible to noise. This quantitative analysis provides a deeper understanding of the stability and sensitivity of sub-Planck structures and offers valuable insights for the design of noise-resilient quantum resources and advanced quantum technologies.

***Keywords**: Sub-Planck structure, Squeezed state, Decoherence, Quantum metrology.*

PACS No. 32

مقدمه

ویژگی‌های منحصر به‌فرد کوانتومی یک سامانه، نظیر برهم‌نهی و تداخل کوانتومی، در اثر برهم‌کنش با محیط پیرامون دستخوش تغییر و نابودی می‌شوند. این فرآیند که با عنوان واهمدوسی کوانتومی شناخته می‌شود، یکی از مهم‌ترین موانع بهره‌برداری عملی از فناوری‌های کوانتومی به شمار می‌آید [۱]. از آنجا که کارآیی پروتکل‌های کوانتومی به حفظ این ویژگی‌های غیرکلاسیکی وابسته است، مطالعه دینامیک آن‌ها در حضور نویزهای محیطی از اهمیت بنیادین برخوردار است. در این مقاله، تحول زمانی ساختارهای زیرپلانکی و حساسیت مرتبط با آن‌ها تحت نویز گرمایی مورد مطالعه قرار گرفته و رفتار واهمدوسی این ویژگی‌های غیرکلاسیکی به صورت کمی بررسی می‌شود. ساختارهای زیرپلانکی که در نواحی تداخلی تابع توزیع ویگنر ظاهر می‌شوند، به دلیل ماهیت نوسانی سریع در فضای فاز، از ابعادی کوچکتر از حد استاندارد کوانتومی ($\hbar$) برخوردارند. حساسیت فوق‌العاده این ساختارها به جابه‌جایی‌های بسیار کوچک در فضای فاز، آن‌ها را به بستری

مناسب برای دستیابی به اندازه‌گیری‌های فوق دقیق در مترولوژی کوانتومی تبدیل کرده است [۲و۳]. از این رو، بررسی پایداری و تحول زمانی ساختارهای زیرپلانکی و هم‌چنین حساسیت کوانتومی مرتبط با آن‌ها در حضور اتلاف گرمایی، اطلاعات ارزشمندی درباره قابلیت عملی این ساختارها در فناوری‌های کوانتومی فراهم می‌آورد.

ساختارهای فضای فاز

حالت مورد مطالعه یک برهم‌نهی خاص از حالت‌های چلانده است. اعمال متوالی عملگرهای فوتون افزودن و فوتون کاهیدن مکرر منجر به تولید حالت‌های کوانتومی غیرگاوسی زیر می‌شود:

$$|\psi\rangle_{SA} = N_{SA}\hat{a}^n\hat{a}^{\dagger m}(\hat{S}(\xi)+\hat{S}(-\xi))|0\rangle, \quad (۱)$$

$$|\psi\rangle_{AS} = N_{AS}\hat{a}^{\dagger m}\hat{a}^n(\hat{S}(\xi)+\hat{S}(-\xi))|0\rangle, \quad (۲)$$

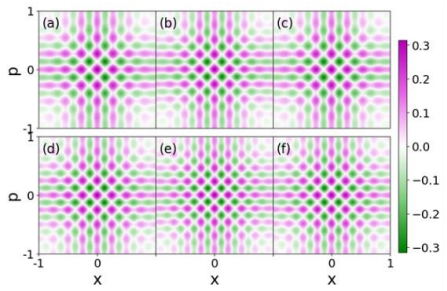
که در آن N_{AS} و N_{SA} ضرایب بهنجارش، $\hat{a}$ و $\hat{a}^\dagger$ عملگرهای خلق و نابودی و $\hat{S}(\xi)=e^{\frac{\xi^*}{2}\hat{a}^2-\frac{\xi}{2}\hat{a}^{\dagger 2}}$ عملگر چلاندگی با متغیر چلاندگی $\xi = re^{i\varphi}$ است. به منظور بررسی ساختار فضای فاز حالت‌های مورد مطالعه، از تابع شبه–توزیع ویگنر استفاده می‌کنیم که برای حالت کوانتومی $\hat{\rho}$ در نمایش همدوس به صورت زیر تعریف می‌شود [۴]:

$$W(\beta,\beta^*) = Tr(\hat{\rho}\hat{\Delta}(\beta,\beta^*)), \quad (۳)$$

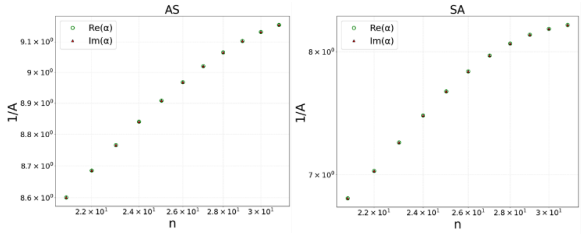
$$\hat{\Delta}(\beta,\beta^*) = \frac{e^{2|\beta|^2}}{\pi}\int\frac{d^2z}{\pi}|z\rangle\langle -z|e^{-2(z\beta^*-z^*\beta)}. \quad (۴)$$

تابع توزیع ویگنر حالت‌های SA و AS در شکل ۱ نشان داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، هر دو حالت دارای الگوهای تداخلی مشخصی با نوسانات سریع در فضای فاز هستند. ظهور این نواحی تداخلی با ابعاد بسیار کوچک، نشان‌دهنده شکل‌گیری ساختارهای زیرپلانکی در هر دو حالت کوانتومی است: ساختارهایی که مقیاس آن‌ها به مراتب کوچک‌تر از مقیاس پلانک در فضای فاز است و در فناوری سنجش کوانتومی از اهمیت برخوردارند.

علاوه بر این، مقایسه ساختارهای دو حالت نشان می‌دهد که حالت کوانتومی AS از ساختارهای زیرپلانکی ریزتری نسبت به حالت SA برخوردار است. این یافته به صورت کمی در شکل ۲ بررسی شده است، که در آن ابعاد ساختار مرکزی با تعیین موقعیت صفرهای W در امتداد محورهای فضای فاز تعیین می‌شود. از آن‌جا که یک حالت همدوس دارای ابعاد مشخصه $A_i \sim 1$ در تمامی جهت‌های فضاز فاز است، حالت‌هایی با ابعاد کوچک‌تر از این مقیاس به عنوان حالت‌های زیرپلانکی شناخته می‌شود [۵]. همان‌گونه که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، ابعاد ساختارهای مرکزی در هر دو حالت SA و AS در تمامی جهت‌های فضای فاز از حالت همدوس کوچک‌تر بوده و بیانگر حساسیتی فراتر از حد استاندارد کوانتومی است. علاوه بر این، با افزایش تعداد فوتون‌های کاهیده شده، ابعاد این ساختارها در هر دو حالت کاهش می‌یابد (نتایج متناظر با افزایش تعداد فوتون–های افزوده، که روندی مشابه دارند، ارائه نشده است). در شرایط بررسی شده، ابعاد ساختار مرکزی در حالت AS کوچک‌تر از حالت SA است. از آن‌جا که اندازه این ساختارها رابطه معکوسی با حساسیت کوانتومی حالت نسبت به جابه‌جایی‌های کوچک در فضای فاز دارد، این نتیجه حاکی از آن است که حالت AS می‌تواند حساسیت کوانتومی بیشتری را در مقایسه با حالت SA فراهم کند.



شکل ۱ : تابع ویگنر حالت‌های SA (ردیف بالا) و AS (ردیف پایین) در فضای فاز برای $r = 0.8$ (a) $n = 24$ ،$m = 8$ و (b) $n = 24$ ،$m = 12$ و (c) $n = 20$ ،$m = 12$ و (d) $n = 24$ ،$m = 8$ و (e) $n = 24$ ،$m = 12$ و (f) $n = 20$ ،$m = 12$.



شکل۲ : ابعاد فضای فاز ساختار مرکزی حالت‌های SA (سمت راست) و AS (سمت چپ) بر حسب تعداد فوتون‌های کاهیده شده برای $r = 0.8$ ،m = 12.

واپاشی ساختارهای فضای فاز

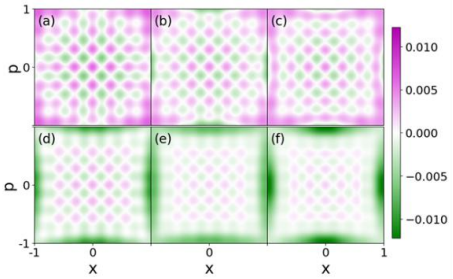
با توجه به نقش بنیادین ساختارهای زیرپلانکی در تعیین حساسیت حالت‌های کوانتومی نسبت به جابه‌جایی‌های بسیار کوچک در فضای فاز، بررسی پایداری و تحول دینامیکی این

ساختارها در حضور نویزهای محیطی از اهمیت ویژه‌ای برای تحقق عملی آن‌ها در سامانه‌های آزمایشگاهی برخوردار است. از آن‌جا که برهم‌کنش با محیط اجتناب‌ناپذیر بوده و منجر به تضعیف و نهایتا از بین رفتن ویژگی‌های غیرکلاسیکی می‌شود، مطالعه رفتار زمانی ساختارهای زیرپلانکی در کانال‌های اتلافی می‌تواند میزان مقاومت این ساختارها را در برابر واهمدوسی تعیین نماید. در این راستا، برای تحلیل تحول زمانی ساختارهای زیرپلانکی، تحول زمانی تابع توزیع ویگنر متناظر با حالت‌های کوانتومی موردنظر را در حضور نویز گرمایی بررسی می‌کنیم. دینامیک سامانه تحت تاثیر برهم‌کنش با محیط توسط معادله زیر توصیف می‌شود [۶]:

$$W(\gamma,\gamma^*,t)=\frac{2}{T(2\bar{n}+1)}\int\frac{d^2\alpha}{\pi}W(\alpha,\alpha^*,0)\times\exp\left[-\frac{2}{T(2\bar{n}+1)}|\gamma-\alpha e^{-\kappa t}|^2\right], \quad (۵)$$

که در آن $\bar{n}$ میانگین تعداد فوتون‌های گرمایی محیط، $T=1-e^{-2\kappa t}$ و $W(\alpha,\alpha^*,0)$ تابع ویگنر توزیع در زمان اولیه است.

تحول زمانی تابع ویگنر متناظر با حالت‌های کوانتومی SA و AS در شکل ۳ ارائه شده است. در تمامی پنل‌های این شکل، کاهش تدریجی دامنه نوسانات الگوهای تداخلی با گذشت زمان به وضوح مشاهده می‌شود که بیانگر اثر تخریبی نویز گرمایی بر همدوسی کوانتومی سامانه است. نتایج نشان می‌دهند که با افزایش تعداد فوتون‌های افزوده یا کاهیده، ساختارهای زیرپلانکی به تدریج تضعیف شده و در نهایت محو می‌شوند. افزون بر این، مقایسه مستقیم دو حالت نشان می‌دهد که در شرایط یکسان، حالت AS افت سریع‌تری در دامنه نوسانات ساختارهای زیرپلانکی نسبت به حالت SA تجربه می‌کنند. این رفتار حاکی از آن است که ساختارهای زیرپلانکی در حالت SA پایداری بیشتری در برابر اثرات واهمدوسی ناشی از محیط گرمایی داشته و برای مدت زمان طولانی‌تری ویژگی‌های غیرکلاسیکی خود را حفظ می‌کنند. از این رو، می‌توان نتیجه گرفت که فرآیند افزودن و سپس کاهیدن فوتون (SA) نسبت به فرآیند معکوس آن (AS)، در حفظ ساختارهای ظریف فضا–زمان و مقابله با تخریب ناشی از نویز گرمایی کارآمدتر است.



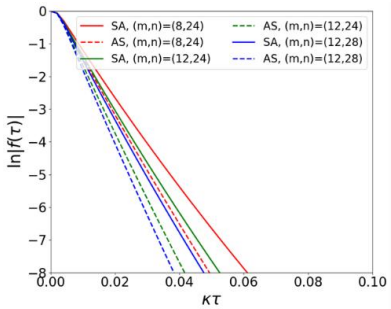
شکل۳ : واپاشی ساختار فضای فاز حالت‌های SA (ردیف بالا) و AS (ردیف پایین) در فضای فاز برای $\bar{n}=0.1, r=0.8$ و $\kappa t=0.03$ و $n=$ (a) 24، $m=8$ و (b) $n=24$، $m=12$ و (c) $n=28$، $m=12$ و (d) $n=24$، $m=8$ و (e) $n=24$، $m=12$ و (f) $n=28$، $m=12$.

از آنجایی که حفظ ساختارهای زیرپلانکی حالت‌های کوانتومی در برابر نویز مهم است، به بررسی اثرات فوتون افزودن و کاهیدن بر آهنگ واپاشی این ساختارها در حضور نویز گرمایی می‌پردازیم.

آهنگ واپاشی برای ساختار زیرپلانکی مرکزی در طول زمان، با کمیت زیر تعریف می‌شود [۳]:

$$\mathcal{F}(\tau)=\frac{W_C(0,\tau)}{W_C(0,0)}, \quad (۶)$$

که در آن $\tau=\kappa t$ زمان مقیاس‌بندی شده و $W_C(0,\tau)$ دامنه محلی ساختار مرکزی تابع ویگنر را به ترتیب در زمان $t=0$ و $t=\tau$ نشان می‌دهد.



شکل۴ : واپاشی ساختار فضای فاز حالت‌های SA و AS در فضای فاز برای $r=0.8$ (الف) $\bar{n}=0.1$.

تاثیر افزودن و کاهیدن فوتون بر آهنگ واپاشی ساختار زیرپلانکی مرکزی برای حالت‌های SA و AS در شکل ۴ نشان داده شده است. در حالت SA، با افزایش تعداد فوتون‌های افزوده شده و یا کاهیده شده به حالت کوانتومی، آهنگ واپاشی آن افزایش می‌یابد. این روند افزایشی در حالت AS نیز مشاهده می‌شود. افزون بر این، مقایسه نمودارهای مربوط به حالت‌های SA و AS حاکی از آن است که ساختار زیرپلانکی مرکزی حالت AS با آهنگی سریعتر از حالت

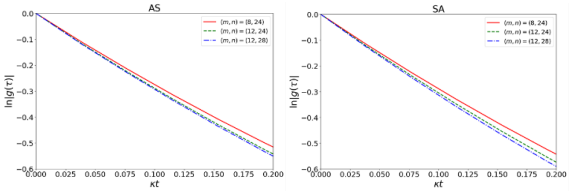
SA دچار واپاشی می‌شود. این نتیجه با یافته حاصل از مقایسه حالت‌های SA و AS در شکل ۳ کاملا سازگار است.

واپاشی حساسیت

حساسیت یک حالت کوانتومی در برابر جابه‌جایی در فضای فاز، اساس فناوری مترولوژی کوانتومی است. این ویژگی توصیف می‌کند که یک حالت کوانتومی تا چه اندازه می‌تواند در برابر جابه‌جایی‌های کوچک در فضای فاز پاسخگو باشد. حساسیت کوانتومی به عنوان معیاری برای تمایزپذیری بین حالت کوانتومی و حالت جابه‌جاشده آن، به صورت زیر تعریف می‌گردد [۲و۵]:

$$O(\delta\alpha;t)=\left|\langle\psi|\hat{D}(\delta\alpha)|\psi\rangle\right|^2, \qquad (۷)$$

که در آن $\delta\alpha$ نشان‌دهنده جابه‌جایی کوچک در فضای فاز است که توسط عملگر جابه‌جایی $\hat{D}(\alpha)=e^{(\alpha\hat{a}^\dagger-\alpha^*\hat{a})}$ اعمال می‌شود. کمینه مقدار $|\delta\alpha|$ که منجر به همپوشانی صفر حالت کوانتومی و حالت جابه‌جا شده‌اش می‌شود، حساسیت کوانتومی را تعریف می‌کند. این مقدار متناظر با کوچکترین اختلالی است که حالت جابه‌جا شده را متعامد بر حالت اولیه می‌سازد. هرچه این جابه‌جایی کوچک‌تر باشد، حساسیت کوانتومی آن بیشتر است که نشان‌دهنده پاسخ مترولوژیکی قوی‌تر نسبت به آن جابه‌جایی‌ها است.



شکل۵ : واپاشی حساسیت در فضای فاز برای $r=0.8$ ، $\bar{n}=0.5$ (الف) حالت SA (سمت راست) به ازای $|\delta\alpha|=0.1477$ و (ب) حالت AS (سمت چپ) $|\delta\alpha|=0.1342$.

حضور نویز محیطی می‌تواند موجب واهمدوسی حالت‌های کوانتومی شده و ویژگی‌های کوانتومی آن را تحت تاثیر قرار می‌دهد. به منظور ارزیابی پایداری حساسیت کوانتومی در حضور نویز گرمایی، آهنگ واپاشی آن را در یک کانال اتلاف گرمایی به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\Gamma(\tau)=\frac{O(|\delta\alpha|,\tau)}{O(|\delta\alpha|,0)}, \qquad (۸)$$

که در آن $O(|\delta\alpha|,0)$ و $O(|\delta\alpha|,\tau)$ به ترتیب حساسیت کوانتومی در زمان $t=0$ و $t=\tau$ است و $|\delta\alpha|$ جابه‌جایی متناظر با شرط تعامد حساسیت کوانتومی را نشان می‌دهد. تغییر آهنگ واپاشی حساسیت کوانتومی برای حالت‌های SA و AS در شکل ۵ نمایش داده شده است. همان‌گونه که از شکل آشکار است، حساسیت کوانتومی در حضور نویز گرمایی کاهش می‌یابد. در هر دو حالت SA و AS، افزایش تعداد فوتون‌های افزوده یا کاهیده موجب افزایش آهنگ واپاشی حساسیت کوانتومی می‌شود؛ به طوری‌که حساسیت کوانتومی برای بازه زمانی کوتاه‌تری حفظ می‌شود. این اثر در حالت SA آشکارتر بوده و افزایش آهنگ واپاشی با افزایش تعداد فوتون‌های افزوده یا کاهیده در آن محسوس‌تر است.

نتیجه‌گیری

در این مطالعه، دینامیک ساختارهای زیرپلانکی یک برهم‌نهی خاص از حالت‌های چلانده و حساسیت کوانتومی مرتبط با آن‌ها در حضور نویز گرمایی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که برهم‌کنش با محیط موجب واهمدوسی و تضعیف دامنه نوسانات سریع الگوهای تداخلی حالت‌های کوانتومی مورد مطالعه می‌شود. تحلیل رفتار ساختارهای زیرپلانکی آشکار ساخت که افزایش تعداد فوتون‌های افزوده یا کاهیده به برهم‌نهی مورد نظر منجر به افزایش آهنگ واپاشی ساختار مرکزی زیرپلانکی در هر دو حالت SA و AS می‌گردد. افزایش تعداد فوتون‌های افزوده یا کاهیده نیز می‌تواند آهنگ واپاشی حساسیت کوانتومی را افزایش دهد و در نتیجه پایداری آن در برابر اثرات نویز گرمایی تضعیف کند. این نتایج نشان می‌دهد که افزودن و کاهیدن فوتون می‌تواند به عنوان یک ابزار کارآمد برای مهندسی پایداری حساسیت کوانتومی مورد استفاده قرار گیرد. بنابراین، یافته‌های این مطالعه می‌توانند راهکارهایی برای طراحی سامانه‌های کوانتومی مقاوم در برابر نویز و استفاده از ساختارهای زیرپلانکی در کاربردهای مترولوژی فراهم آورند.

مرجع‌ها

[1] N. Akhtar, J. X. Peng, T. Hailin, X. Yang, and D. Wang, *Phys. Rev. A* **113**, (2026) 062421.
[2] W. H. Zurek, *Nature* **412** 712 (2001).
[3] N. Akhtar, X. Yang, M. Asjad, J. X. Peng, G. Xianlong, and Y. Chen, *Phys. Rev. A* **109**, (2024) 053718.
[4] M. O. Scully and M. S. Zubairy, *Quantum Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
[5] N. Akhtar, J. Wu, J. X. Peng, W.M. Liu, and G. Xianlong, , *Phys. Rev. A* **107**, 052614 (2023).
[6] L. Hu, X. Xu, Z. Wang, and X. Xu, *Phys. Rev. A* **82**, (2010) 043842.

چیدمان فضاییِ اتم‌های دوترازی و انفجارهای ابرتابشی در یک کاواک غیرخطی مرتبه‌دوم

لطفی، فرزانه[۱]؛ گلشن، محمدمهدی[۲]

[۱و۲] بخش فیزیک، دانشکده‌ی علوم، دانشگاه شیراز، شیراز

چکیده

در این پژوهش، تأثیر هندسه‌ی آرایه‌ی اتم‌های دوترازی بر رفتار انفجارهای ابرتابشی در یک کاواک تک‌مدی حاوی ماده‌ی غیرخطی مرتبه‌ی دوم بررسی می‌شود. آرایه‌هایی شامل شش اتم و در سه چیدمان متفاوت ــ زنجیره‌ای، حلقوی و شبکه‌ی مربعی ــ در نظر گرفته شده‌اند. اتم‌ها از طریق برهم‌کنش دوقطبی–دوقطبی با یکدیگر و نیز به‌صورت تشدیدی با میدان فوتونی کاواک برهم‌کنش دارند. میدان کاواک با یک پمپ کلاسیک جفت شده است. با حل عددی معادله‌ی اصلی برای عملگر چگالیِ این سامانه‌ها و محاسبه‌ی نرخ گسیل جمعی، نشان داده می‌شود که آرایش فضایی اتم‌ها نقش مهمی در رفتار پالس‌های ابرتابشی دارد. علاوه‌بر این، بررسی نمودارهای پربندیِ بیشینه‌ی این نرخ، برحسب فاصله‌ی بین‌اتمی و ضریب جفت‌شدگی غیرخطی، نشان می‌دهد که با تنظیم هم‌زمان این دو پارامتر می‌توان شرایط تقویت سازنده را فراهم کرده و شدت تابش جمعی را بیشینه ساخت.

واژه‌های کلیدی: *اپتیک کوانتومی، کاواک غیرخطی، آرایه‌ی اتمی، اتم‌های دوترازی، برهم‌کنش دوقطبی–دوقطبی، انفجار ابرتابشی*

Effect of Spatial Configurations of Two-Level Atoms on Superradiant Bursts in a Second-Order Nonlinear Cavity

Lotfi, Farzaneh[1]; Golshan, Mohammad Mehdi [2]

[1,2] Department of Physics, Faculty of Science, Shiraz University, Shiraz

Abstract

In this work, we investigate the role of the spatial configurations of two-level atomic arrays in the production of superradiant bursts in a single-mode cavity, containing a second-order nonlinear medium. We consider arrays of six atoms arranged in three geometries: a linear chain, a ring, and a square lattice. Moreover, the atoms interact via dipole–dipole coupling and are resonantly coupled to the cavity photons, while the cavity mode is driven by an external classical pump. By numerically solving the corresponding master equations and evaluating the collective emission rate, we show that the atomic spatial arrangement strongly influences the characteristics of the superradiant pulses. Furthermore, contour maps as functions of the interatomic distance and the nonlinear coupling strength reveal that appropriate simultaneous tuning of these parameters enables constructive enhancement of the collective emission.

***Keywords**: Quantum Optics, Nonlinear Cavity, Atomic Array, Two-Level Atoms, Dipole-Dipole Interaction, Superradiant Burst.*

PACS No. *32*

مقدمه

گسیل جمعی نور از مجموعه‌ای از تابشگرهای کوانتومی از موضوعات مهم اپتیک کوانتومی است [۱–۳]. یکی از نمودهای شاخص چنین گسیل جمعی پدیده‌ی ابرتابش است [۳و۴]. در این پدیده ایجاد همبستگی بین اتم‌های برانگیخته منجر به گسیل نوری با شدتی فراتر از مجموع گسیل مستقل آن‌ها می‌شود [۳]. ویژگی‌های ابرتابش به‌طور قابل توجهی به برهم‌کنش‌های بین‌اتمی و ساختار فضایی محیط فوتونی وابسته است[۵و۶]. از طرفی، کاواک‌های نوری، به‌ویژه در حضور محیط‌های غیرخطی مرتبه‌ی دوم و جفت‌شدگی با میدان پمپ خارجی، امکان کنترل و تقویت

تابش جمعی را فراهم می‌کنند [۷]. از سوی دیگر، پیشرفت در به‌دام‌اندازی اتم‌ها در شبکه‌های نوری امکان طراحی و کنترل دقیق ساختارهای اتمی را فراهم کرده است [۸]. در نتیجه، مطالعه‌ی هم‌زمان تأثیر چیدمان فضایی اتم‌ها و محیط فوتونی غیرخطی می‌تواند تصویر کامل‌تری از سازوکارهای کنترل ابرتابش ارائه دهد.

در این چارچوب، در مقاله‌ی حاضر رفتار انفجارهای ابرتابشی گسیل یافته از اتم‌های دوترازی در یک کاواک تک‌مدیِ حاوی محیط غیرخطی مرتبه‌ی دوم به‌صورت نظام‌مند بررسی می‌شود. معادله‌ی اصلی سامانه به‌صورت عددی (با استفاده از زبان جولیا) حل شده و نرخ گسیل جمعی برای سه آرایش اتمی متفاوت محاسبه می‌گردد. افزون بر این، تأثیر فاصله‌ی بین‌اتمی و ضریب جفت‌شدگی غیرخطی بر بیشینه‌ی نرخ گسیل با بهره‌گیری از نمودارهای پربندی (کانتور) تحلیل و مقایسه می‌شود.

نتایج این پژوهش می‌تواند در طراحی منابع نوری کوانتومی و مهندسی برهم‌کنش‌های جمعی در سامانه‌های فوتونیکی غیرخطی کاربرد داشته باشد.

مدل نظری و معادله‌ی اصلی سامانه

سامانه‌ی مورد بررسی شامل یک کاواک تک‌مدی است که با محیطی دارای خواص غیرخطی مرتبه‌ی دوم پر شده است. در این کاواک، شش اتم دوترازی یکسان با فواصل مساوی در یک آرایه‌ی معین در جایگاه خود قرار دارند. فرض بر این است که اتم‌ها فاقد هرگونه حرکتی هستند و از طریق برهم‌کنش دوقطبی–دوقطبی با یکدیگر جفت می‌شوند. شرط تشدید میان فرکانس مُد کاواک، ω_c، و فرکانس گذار اتمی، ω_0، برقرار است. همچنین، یک میدان کلاسیکی خارجی نیز کاواک را پمپ می‌کند. فرض می‌شود که این پمپ تنها به فعال‌سازی غیرخطّیت محیط منجر شده و به‌دلیل اختلاف فرکانس زیاد با گذارهای اتمی، با اتم‌ها برهم‌کنش مستقیم ندارد. در این مدل، هامیلتونی کل سامانه به صورت زیر توصیف می‌شود:

$$H = H_A + H_{ph} + H_{A-ph} + H_{A-A} + H_{Ph-F} \qquad (۱)$$

جملات این هامیلتونی، از چپ به راست به‌ترتیب توصیف کننده‌ی هامیلتونی اتم‌های آزاد، فوتون آزاد، برهم‌کنش اتم–فوتون، برهم‌کنش اتم–اتم و برهم‌کنش غیرخطی میدان کاواک با پمپ است. تحول زمانی ماتریس چگالیِ سامانه، در فضای هیلبرتِ ترکیب‌شده‌ی اتم‌ها و میدان کاواک، توسط معادله‌ی اصلی، $\dot{\hat{\rho}}(t) = -i[H, \hat{\rho}(t)]$ داده می‌شود. پس از وارد کردن هامیلتونی کل در معادله‌ی اصلی و اعمال دو تقریب کلیدی مارکوف و موج چرخان، به معادله‌ی زیر دست می‌یابیم [۹–۱۱]:

$$\dot{\hat{\rho}}(t) = -i[\mathcal{H}, \hat{\rho}(t)] + \mathcal{L}'[\hat{\rho}(t)] + \mathcal{L}[\hat{\rho}(t)] \qquad (۲)$$

در رابطه‌ی فوق، هامیلتونی $\mathcal{H}$، در یک چارچوب چرخان با نصف فرکانس میدان پمپ، به شکل زیر تعریف می‌شود [۱۰]:

$$\mathcal{H} = \Delta_c \hat{a}^\dagger \hat{a} + \sum_{i=1}^{6} \Delta_A \hat{\sigma}_i^+ \hat{\sigma}_i^- + \sum_{i=1}^{6} \lambda \left(\hat{a}^\dagger \hat{\sigma}_i^- + \hat{\sigma}_i^+ \hat{a} \right) + \sum_{i,j\neq i=1}^{6} \Omega_{ij} \hat{\sigma}_i^+ \hat{\sigma}_j^- + g(\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2}). \qquad (۳)$$

در هامیلتونی بالا، $(\hat{a}^\dagger)\hat{a}$ عملگر نابودی (خلق) فوتون و $\sigma_i^\pm$ عملگرهای نردبانی اتمی مربوط به اتم i-ام است. پارامترهای Δ_c و Δ_A به‌ترتیب بیانگر جابه‌جایی فرکانس‌های آزاد فوتونی و اتمی در چارچوب چرخان‌اند. ضریب برهم‌کنش اتم–فوتون در تقریب دوقطبیِ الکتریکی با λ، و قدرت برهم‌کنش غیرخطی میان میدان فوتونی کاواک و میدان پمپ با g نمایش داده شده است. عبارت چهارم در رابطه‌ی (۳) توصیف کننده سهم برهم‌کنش همدوس دوقطبی–دوقطبی میان دو اتم i و j است. ضریب این برهم‌کنش، Ω_{ij}، از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید [۹و۱۰]:

$$\Omega_{ij} = \frac{3\Gamma_0}{4}\left[-\left(1 - \left(\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}\right)^2\right) \frac{\cos(k_0 r_{ij})}{(k_0 r_{ij})} - \left(1 - 3\left(\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}\right)^2\right) \left(\frac{\sin(k_0 r_{ij})}{(k_0 r_{ij})^2} + \frac{\cos(k_0 r_{ij})}{(k_0 r_{ij})^3} \right) \right] \qquad (۴)$$

در رابطه‌ی اخیر، k_0 عدد موج گذار اتمی، r_{ij} فاصله‌ی بین دو اتم و $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ بردار واحد در راستای خط واصل اتم‌های i و j در آرایه است. همچنین، $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ نشان‌دهنده‌ی بردار واحد در جهت گشتاور دوقطبی گذار اتم‌هاست.

در رابطه‌ی(۲)، عملگرهای $\mathcal{L}'[\hat{\rho}(t)]$ و $\mathcal{L}[\hat{\rho}(t)]$ بیانگر عملگرهای لیندبلاد هستند که توصیف‌کننده‌ی اتلاف‌های ناشی از گذارهای اتمی بوده و از روابط زیر محاسبه می‌شوند [۹و۱۰]:

$$\mathcal{L}'[\hat{\rho}(t)]=\sum_{i=1}^{N}\frac{\Gamma_0}{2}\big(2\hat{\sigma}_i^-\,\hat{\rho}(t)\hat{\sigma}_i^+ -\hat{\rho}(t)\hat{\sigma}_i^+\hat{\sigma}_i^- -\hat{\sigma}_i^+\hat{\sigma}_i^-\,\hat{\rho}(t)\big), \qquad (۵)$$

$$\mathcal{L}[\hat{\rho}(t)]=\sum_{i,j\neq i=1}^{N}\frac{\Gamma_{ij}}{2}\big(2\hat{\sigma}_j^-\,\hat{\rho}(t)\hat{\sigma}_i^+ -\hat{\rho}(t)\hat{\sigma}_i^+\hat{\sigma}_j^- -\hat{\sigma}_i^+\hat{\sigma}_j^-\,\hat{\rho}(t)\big), \qquad (۶)$$

در رابطه‌ی(۵)، پارامتر $\Gamma_0=\omega_0^3|\boldsymbol{\mu}|^2/3\pi\varepsilon_0c^3\hbar$ نرخ گسیل خودبه‌خودی تک‌اتم دوترازی را نشان می‌دهد، در حالی که در رابطه‌ی (۶) کمیت Γ_{ij} معرف نرخ فروافت ناشی از برهم‌کنش‌های اتلافی میان اتم‌هاست و به صورت زیر محاسبه می‌شود [۹و۱۰]:

$$\Gamma_{ij}=\frac{3\Gamma_0}{2}\left[\left(1-\left(\hat{\boldsymbol{\mu}}\cdot\hat{\mathbf{r}}_{ij}\right)^2\right)\frac{\sin(k_0r_{ij})}{(k_0r_{ij})} +\left(1-3\left(\hat{\boldsymbol{\mu}}\cdot\hat{\mathbf{r}}_{ij}\right)^2\right)\left(\frac{\cos(k_0r_{ij})}{(k_0r_{ij})^2}-\frac{\sin(k_0r_{ij})}{(k_0r_{ij})^3}\right)\right] \qquad (۷)$$

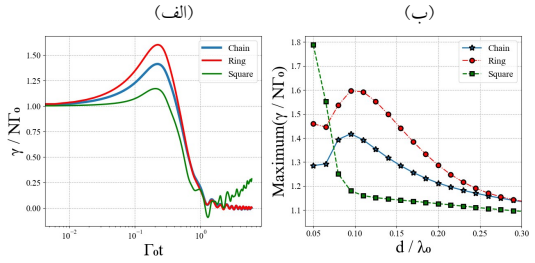
در ادامه، دینامیک سامانه برای سه آرایش اتمی، از طریق حل عددی معادله‌ی اصلی، با استفاده از زبان برنامه‌نویسی جولیا (نسخه ۱.۹.۲) و بسته‌های QuantumOptics.jl و CollectiveSpins.jl استخراج می‌شود. حالت اولیه‌ی سامانه به‌گونه‌ای تنظیم شده است که تمامی اتم‌ها در تراز برانگیخته و کاواک دارای یک فوتون باشد، $|\psi_0\rangle=|e_1,e_2,...,e_N\rangle\otimes|1\rangle$. این انتخاب با هدف جداسازی اثرات هندسیِ چیدمان فضایی از اثرات توزیع جمعیت اتم‌ها، و همچنین با توجه به معیار تعریف انفجار ابرتابشی (که در بخش بعد تشریح شده است)، صورت گرفته است. همچنین فرض می‌شود بردار قطبش اتم‌ها بر صفحه‌ی آرایه‌های دوبعدی (صفحه x-y)، و بر بردار اتصال جفت‌اتم‌ها ($\hat{\mathbf{r}}_{ij}$) عمود است. بنابراین، جملات وابسته به زاویه بیشینه می‌شوند و برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی در بیشترین مقدار خود قرار می‌گیرد.

نرخ گسیل جمعی و شرط وقوع انفجارهای ابرتابشی

یکی از شاخص‌های مهم برای تشخیص رخداد ابرتابش در آرایه‌های اتمی این است که نرخ گسیلِ جمعی سامانه از حالتی که اتم‌ها کاملاً مستقل از هم عمل می‌کنند، بیشتر شود. در چنین وضعیتی نرخ گسیل به سرعت رشد کرده و به صورت یک پالس قوی و کوتاه ظاهر می‌شود[۳]. نرخ گسیل جمعی اتم‌ها برای سامانه‌ی پیشنهادی ما از رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود[۱۰]:

$$\gamma\equiv-\frac{d}{dt}\sum_{i=1}^{6}\langle\hat{\sigma}_i^+\hat{\sigma}_i^-\rangle=\sum_{i=1}^{6}\Gamma_0\langle\hat{\sigma}_i^+\hat{\sigma}_i^-\rangle +\sum_{i,j\neq i=1}^{6}\Gamma_{ij}\langle\hat{\sigma}_i^+\hat{\sigma}_j^-\rangle-i\sum_{i=1}^{6}\lambda\big(\langle\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_i^-\rangle-\langle\hat{a}\,\hat{\sigma}_i^+\rangle\big). \qquad (۸)$$

براساس رابطه‌ی(۸)، معیار فیزیکی برای گذار به رژیم ابرتابشی را می‌توان برحسب بیشینه‌ی نرخ گسیل بهنجارشده، $\max(\gamma/N\Gamma_0)$، تعریف کرد. باور عمومی بر آن است که هرگاه این بیشینه بزرگتر از واحد شود شاهد وقوع انفجارهای ابرتابشی خواهیم بود [۹و۱۱]. شکل ۱ تحول زمانی نرخ گسیل جمعی بهنجارشده را در بخش (الف) و بیشینه‌ی آن را برحسب فاصله‌ی بین‌اتمیِ مقیاس‌شده در بخش (ب) برای سه آرایش هندسی شامل زنجیره، حلقه و شبکه‌ی مربعی با پیکربندی $(N_x=3,N_y=2)$ نشان می‌دهد. همان‌گونه که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، در مدل پیشنهادی، شرط وقوع انفجار ابرتابشی برای تمامی چیدمان‌ها، حتی در فواصل نسبتاً بزرگ بین‌اتمی، برقرار است.

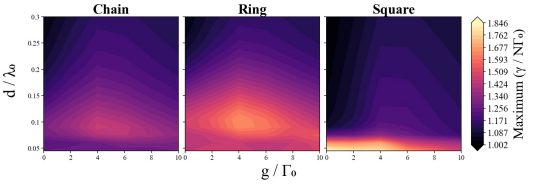


شکل ۱ : (الف) نمایش نرخ گسیل بهنجارشده به‌عنوان تابعی از زمان مقیاس‌شده برای فاصله‌ی بین‌اتمی $d=0.1\lambda_0$ و (ب) بیشینه نرخ گسیل جمعی به‌عنوان تابعی از فاصله‌ی بین‌اتمی مقیاس شده با طول موج گذار اتم دوترازی λ_0، برای سه آرایه‌ی مختلف. در ترسیم این شکل، پارامترهای ثابت به صورت $\lambda=0.5\Gamma_0$، $g=3\Gamma_0$ و $\Delta_A=\Delta_c=0.1\Gamma_0$ انتخاب شده‌اند.

تحلیل تحول زمانی نرخ گسیل در شکل ۱(الف) نشان می‌دهد که در لحظات اولیه ، به‌دلیل شکل نگرفتن کامل فاز جمعی، نرخ گسیل بهنجارشده نزدیک به واحد است. با گذشت زمان، برهم‌کنش‌های جمعی موجب شکل‌گیری قله‌ی ابرتابشی می‌شود که بیشینه‌ی آن در آرایش حلقوی، به‌دلیل تقارن بالاتر و حفظ

هم‌فازی، مشاهده می‌شود؛ در حالی که در زنجیره و آرایه‌ی مربعی، ناهمگنی برهم‌کنش‌ها در مرزها دامنه‌ی این قله را کاهش می‌دهد. در زمان‌های طولانی‌تر نیز به‌دلیل تسلط تداخل‌های مخرب و رقابت میان جفت‌شدگی همدوس و واپاشی، نرخ گسیل کاهش یافته و نوسانات ضعیفی ظاهر می‌شود. مطابق شکل ۱(ب)، در فواصل بین‌اتمی کوچک، $d/\lambda_0 < 0.1$، آرایه‌ی مربعی به‌دلیل مسیرهای بیشتر برهم‌کنش دوقطبی، بیشینه‌ی نرخ گسیل بزرگ‌تری نسبت به حلقه نشان می‌دهند. با این حال، برخلاف هندسه‌های حلقوی و زنجیره‌ای که دارای فاصله‌ی بهینه، در حدود $d \approx 0.1\lambda_0$، برای بیشینه شدن نرخ گسیل هستند، این نرخ در آرایه‌ی مربعی با افزایش فاصله به‌سرعت کاهش می‌یابد؛ امری که وابستگی تقویت جمعی به برهم‌کنش‌های نزدیک‌برد و کاهش سریع هم‌پوشانی مودهای جمعی با میدان کاواک را نشان می‌دهد.

برای تکمیل بحث، وابستگی بیشینه نرخ گسیل جمعی به قدرت برهم‌کنش غیرخطی میدان کاواک–پمپ و فاصله بهنجارشده برای سه آرایش اتمی مذکور در شکل۲ ارائه شده است. نتایج شکل۲ بیانگر آن است که برای فواصل بین اتمی بسیار کوچک، $d \ll 0.1\lambda_0$، شبکه‌ی مربعی در تقویت ابرتابش عملکرد بهتری دارد؛ درحالی‌که برای فواصل بین اتمی بزرگتر، آرایه حلقوی شدیدترین انفجارهای ابرتابشی را از خود نشان می‌دهد.



شکل۲ : نمودارهای پربندی بیشینه نرخ گسیل جمعی بهنجارشده $\gamma/N\Gamma_0$ بر حسب قدرت برهم‌کنش غیرخطی g/Γ_0 و فاصله مقیاس‌شده d/λ_0 برای سه چیدمان اتمی. جهت اجتناب از خطاهای محاسباتی در حد $d \to 0$، بررسی‌ها بر رژیم $d \geq 0.05\lambda_0$ متمرکز شده است.

علاوه‌برآن، شکل۲ به وضوح نشان می‌دهد که بیشینه‌ی ابرتابش تنها به هندسه و فاصله‌ی بین‌اتمی وابسته نیست، بلکه به قدرت برهم‌کنش غیرخطی کاواک–پمپ نیز حساس است. اگرچه ضریب برهم‌کنش غیرخطی g به‌طور صریح در معادله‌ی نرخ گسیل جمعی، γ، ظاهر نمی‌شود اما با حضور در هامیلتونی، تکامل ماتریس چگالی (ρ) را هدایت می‌کند. بنابراین، مقدار چشمداشتی‌ها در معادله‌ی (۸) و در نتیجه نرخ گسیل جمعی سامانه به‌طور ضمنی از ضریب g تأثیر می‌پذیرند. بدین ترتیب، پارامتر g و فاصله بین‌اتمی d، به عنوان دو عامل کلیدی، دینامیک ابرتابش را کنترل می‌کنند. در شکل۲ مشاهده می‌شود که برای آرایش‌های زنجیره‌ای و حلقوی، بیشینه‌ی نرخ گسیل در مقدار بهینه‌ی $g/\lambda_0 \approx 4$ رخ می‌دهد، در حالی که در آرایه‌ی مربعی این بیشینه در مقادیر کوچک‌تری ظاهر می‌شود؛ امری که نشان می‌دهد هندسه‌های دوبعدی به‌دلیل چگالی بیشتر برهم‌کنش‌ها به شدت پمپ ضعیف‌تری برای برانگیزش مودهای جمعی نیاز دارند. در مقادیر بسیار بزرگ g، نرخ گسیل به‌دلیل اشباع فضای فوتونی و نوسانات سریع کاهش می‌یابد.

نتیجه‌گیری

نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که نحوه‌ی چینش اتم‌ها در آرایه نقشی تعیین‌کننده در شکل‌گیری و شدت انفجارهای ابرتابشی در کاواک غیرخطی مرتبه‌دوم ایفا می‌کند. در تمامی چیدمان‌های اتمی بررسی‌شده، با تنظیم همزمان فاصله‌ی بین‌اتمی و ضریب جفت‌شدگی غیرخطی می‌توان شرایط بهینه‌ای برای تقویت گسیل جمعی فراهم ساخت؛ در این میان، آرایش حلقه‌ای در فواصل بین اتمی بزرگتر و شبکه‌ی مربعی در فواصل کوچکتر بیشترین شدت تابش جمعی را نشان می‌دهند.

مرجع‌ها

[1] M. Q. Wu, G. Sun, J. Lu, and L. Zhou; *Physical Review A* **113**, (2026).
[2] K. Y. Kim, J. H. Lee, W. B. Jeon, D. H. Park, S. I. Park, J. D. Song, C. Lee, and J. H. Kim; *Nature Communications* **16**, (2025).
[3] C. Liedl, F. Tebbenjohanns, C. Bach, S. Pucher, A. Rauschenbeutel, and P. Schneeweiss; *Physical Review X* **14**, (2024).
[4] X. Guo and Z. Wang; *Physical Review A* **113**, (2026).
[5] M. A. Norcia, R. J. Lewis-Swan, J. R. K. Cline, B. Zhu, A. M. Rey, and J. K. Thompson; *Science* **361**, (2018) 259.
[6] R. J. Bettles, S. A. Gardiner, and C. S. Adams; *Physical Review A* **94**, (2016) 043844.
[7] C. J. Zhu, L. L. Ping, Y. P. Yang, and G. S. Agarwal; *Physical Review Letters* **124**, (2020) 073602.
[8] R. Tao, M. Ammenwerth, F. Gyger, I. Bloch, and J. Zeiher; *Physical Review Letters* **133**, (2024) 013401.
[9] F. Robicheaux; *Physical Review A* **104**, (2021) 063706.
[10] F. Lotfi and M. M. Golshan; *Physical Review A* **112**, (2025) 063729.
[11] O. Rubies-Bigorda, S. Ostermann, and S. F. Yelin; *Physical Review Research* **5**, (2023) 013091.

خنک سازی نوسانگرپارامتری اپتیکی تک مد برای تولید حالتهای خالص ایستاوارچلانده گاوسی

فصیحی ، محمد علی ؛ راشدی، خدیجه

گروه فیزیک دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، ۳۵ کیلومتری جاده تبریز -مراغه

چکیده

یک نوسانگر پارامتری اپتیکی جفت شده با میدان خلاء را در نظر می گیریم. ابتدا با بررسی دینامیک ماتریس کوواریانس نوسانگر پارامتری تک مد جوابهای ایستاوار را بدست می آوریم و سپس با اعمال اندازه گیری پیوسته روی مکان نوسانگر دینامیک شرطی ماتریس کوواریانس را مطالعه می‌کنیم. نشان می دهیم که اندازه گیری پیوسته زمانی باعث خنک سازی سیستم و در نتیجه افزایش خلوص جوابهای ایستاوار تک مد می شود. همچنین ما چلاندگی کوانتومی حالت‌های ایستاوار را قبل و بعد از اندازه گیری مورد بررسی قرار می دهیم و نشان می دهیم که اندازه‌گیری باعث غیرکلاسیکی شدن حالتهای ایستاوار می شود.

واژه های کلیدی: *خنک سازی کوانتومی ، تولید حالتهای خالص، ماتریس کوواریانس، اندازه گیری*

Cooling of a single-mode optical parametric oscillator for the generation of Gaussian squeezed stationary pure states

Fasihi, Mohammad Ali; Rashedi, Khadidjeh

Department of Physics, Azarbaijan Shahid Madani University,

Abstract

We consider an optical parametric oscillator coupled to a vacuum field. First, we obtain the steady-state solutions by investigating the dynamics of the covariance matrix of the single-mode parametric oscillator, and then we study the conditional dynamics of the covariance matrix by applying continuous measurements on the oscillator's position. We show that continuous measurements cool the system and thus increase the purity of the single-mode steady-state solutions. We also investigate the quantum squeezing of the steady-state before and after the measurement and show that the measurement causes the steady-state to become non-classical.

***Keywords**: Quantum cooling, Generation of pure states, Covariance matrix, Measurement*

مقدمه

با توجه به کاربرد سیستمهای کوانتومی متغیر پیوسته گاوسی در نظریه اطلاعات و محاسبات کوانتومی تولید حالات کوانتومی ایستاوار گاوسی خالص دارای اهمیت زیادی است[1]. یاد آوری می کنیم دررژیم گاوسی جفت شدگی سیستم با محیط پیرامون خود خطی است وهامیلتونی برحسب عملگرهای کانونیک $\hat{x},\hat{p}$ که در روابط جابجایی کانونیک $[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$ صدق می‌کنند، حداکثردرجه دوم می باشند.

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\vec{\hat{r}}^{T}G\vec{\hat{r}} \qquad (۱)$$

که در آن بردار عملگری عبارت است از

$$\vec{\hat{r}}=\{\hat{x}_1,\hat{p}_1,...,\hat{x}_n,\hat{p}_n\}^T$$

نماد T بیانگر ترانهاد است و G یک ماتریس مربعی $2n$ بعدی حقیقی می باشد. در سیستمهای کوانتومی با متغیر پیوسته با تعریف عملگر برداری رابطه جابجایی کانونیک $[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$ را می توان به شکل کلی $[\hat{r},\hat{r}^T]=i\Sigma$ نوشت که در آن

$$\Sigma = \oplus_l \Sigma_1,\ l=1,...,n\ ,\quad \Sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

نوسانگرپارامتری اپتیکی تک مد

یک نوسانگر پارامتری اپتیکی تک مد با هامیلتونی $\hat{H} = \frac{i\varepsilon}{4}(\hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}^2)$ را در نظر می گیریم که بطور خطی با میدان خلاء جفت شده است. عملگرهای $\hat{a}$ و $\hat{a}^\dagger$در رابطه جابجایی $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$صدق می کنند و در ضمن کوادراچرهای مکان و اندازه حرکت نظیر نوسانگر به شکل زیر تعریف می شوند: $\hat{x} = (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)/\sqrt{2}$ و $\hat{p} = -i(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)/\sqrt{2}$ به شکل زیر تعریف می شوند. در ضمن با در نظر گرفتن اندرکنش نوسانگر پارامتری اپتیکی با میدان خلاء معادله اصلی مارکوفی به شکل زیر نوشته می شود.

$$\dot{\rho} = L\rho = -i[\hat{H}, \rho] + D[\hat{c}]\rho,\quad \hat{c} = \sqrt{k}\hat{a},\ k > 0$$
$$D[\hat{c}]\rho = k\hat{a}\rho\hat{a}^\dagger - k/2(\hat{a}^\dagger\hat{a}\rho + \rho\hat{a}^\dagger\hat{a}) \qquad (۲)$$

با فرض اینکه سیستم در زمان $t = 0$ در حالت گاوسی (مثلاً در حالت حرارتی) آماده شده است، در هر زمان بعدی، دینامیک حالت گاوسی را حفظ می‌کند [۲]. در نتیجه، کل دینامیک را می‌توان به طور کامل با استفاده از بردار گشتاور اول $\vec{R}$ و ماتریس کوواریانس σ توصیف کرد، که عناصر آن به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$R_j = Tr[\rho r_j] \qquad (۳)$$
$$\sigma_{ij} = Tr[\rho(r_i r_j + r_j r_i)] - 2R_i R_j \qquad (۴)$$

ما در این کار علاقمند به بررسی خواصی از سیستم نظیر چلاندگی کوانتومی، میانگین تعداد فوتونها و خلوص حالت گاوسی نظیر نوسانگر پارامتری اپتیکی هستیم. تمامی این کمیات را می توان با استفاده از ماتریس کوواریانس بدست آورد. خلوص یک حالت کوانتومی در نظریه ارتباطات و پردازش کوانتومی از اهمیت بسیار زیادی برخوردار است بنابراین تولید حالتهای خالص بسیار مهم است. خلوص یک حالت کوانتومی به صورت $\mu = Tr[\rho^2] = 1\text{-}S$ تعریف می شود (که در آن S آنتروپی می باشد) و حداکثر مقدار آن برابر با یک است وقتی که حالت خالص باشد. برای حالتهای گاوسی خلوص را می توان طبق رابطه زیر تعرف نمود.

$$\mu = \frac{1}{\sqrt{Det[\sigma]}} \qquad (۵)$$

بنابراین تولید حالتهای گاوسی ایستاور با بیشینه درجه خلوص یا کمینه مقدار آنتروپی معادل با فرآیندی است که درآن بواسطه کاهش آنتروپی یا تخلیه آنتروپی از سیستم، گرما از سیستم خارج می شود. در این کار فرایند خنک سازی بواسطه اندازه گیری مورد بررسی قرا رخواهد گرفت.

در ضمن میانگین تعداد فوتونها و و چلاندگی کوانتومی را می توان از روابط زیر برحسب ماتریس کوواریانس بدست آورد.

$$N_{ph} = \frac{1}{4}(Tr[\sigma] - 2),\qquad \zeta = MinEigenvalue[\sigma] \qquad (۶)$$

بر حسب بردار گشتاور اول و ماتریس کوواریانس، معادله اصلی مارکوفی برای حالت کوانتومی گاوسی ρ در (۲) مستلزم تحول زمانی زیر است [۳].

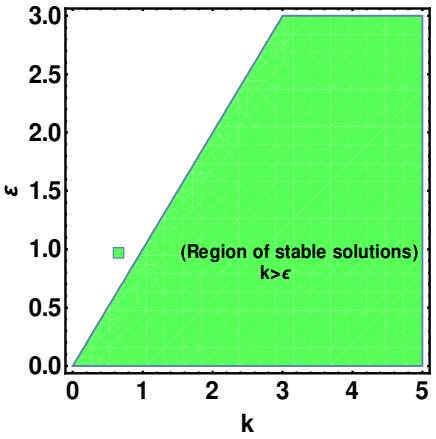
$$\frac{d\vec{R}}{dt} = A\vec{R}, \qquad (۷)$$
$$\dot{\sigma} = A\sigma + \sigma A^{\mathrm{T}} + D \qquad (۸)$$

که در آن ماتریس پخش D و ماتریس رانش A را می توان با استفاده از روابط زیر بدست آورد.

$$A = \Sigma(G + \mathrm{Im}[\tilde{C}^\dagger\tilde{C}]),\ \ G = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & \varepsilon \\ \varepsilon & 0 \end{pmatrix}$$
$$\rightarrow\ A = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \varepsilon - k & 0 \\ 0 & -(\varepsilon + k) \end{pmatrix} \qquad (۹)$$
$$D = \Sigma \mathrm{Re}[\tilde{C}^\dagger\tilde{C}]\Sigma^T \ \rightarrow\ D = \begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix}$$
$$\hat{c} = \sqrt{k}\hat{a} = \tilde{C}\hat{r}\ \Rightarrow\ \tilde{C} = \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{2}}(1, i)$$

لازم به توضیح است با توجه به اینکه برای نوسانگر پارامتریک اپتیکی $Tr[\rho\, x] = Tr[\rho\, p] = 0$بنابراین بردار گشتاور اول $\vec{R} = 0$ می باشد. اگر چنانچه قسمت حقیقی ویژه مقادیر ماتریس A منفی باشد(این به شرط پایداری Hurwitz معروف است) آنگاه حالتهای ایستاور پایدار در دینامیک مسئله خواهیم داشت. در شکل (۱) ناحیه حالتهای ایستاور پایدار برای نوسانگر پارامتری

اپتیکی بر حسب انرژی ε و ضریب جفت شدگی نوسانگر با میدان خلاء (k) نشان داده شده است.



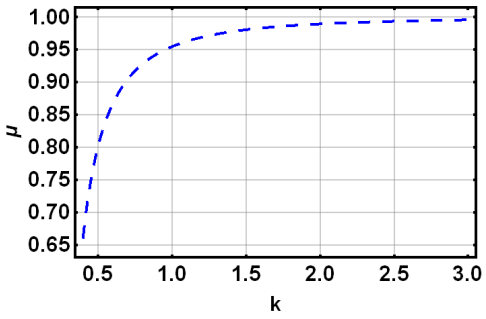
شکل (۱) ناحیه مربوط به حالتهای گاوسی ایستاوار پایداررا به ازای مقادیر مختلف پارامترهای ε, k را نشان می دهد.

مطالعه جوابهای ایستاوار

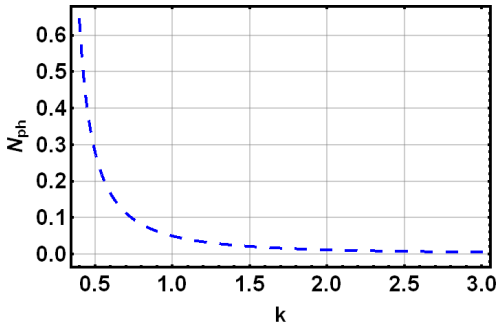
جوابهای ایستاوار را با جاگذاری $\sigma=\begin{pmatrix}\sigma_{11} & \sigma_{12}\\ \sigma_{12} & \sigma_{22}\end{pmatrix}$ و A, D از معدله (۹) در معادله $A\sigma+\sigma A^{\mathrm{T}}+D=0$ به صورت زیر بدست می آوریم.

$$\sigma_{11}=\frac{k}{k-\varepsilon},\quad \sigma_{22}=\frac{k}{k+\varepsilon},\quad \sigma_{12}=0 \qquad (۱۰)$$

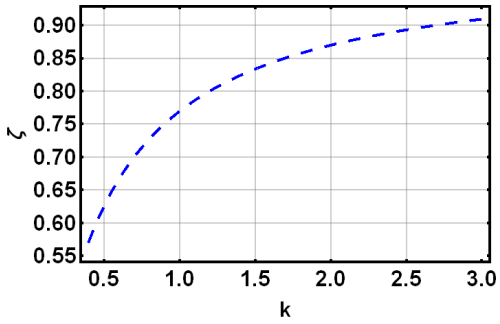
در زیر نمودارهای مربوط به خلوص شکل (۲)، میانگین تعداد فوتون شکل (۳) و همچنین چلاندگی کوانتومی شکل (۴) را برحسب پارامتر جفت شدگی نوسانگر پارامتری اپتیکی و به ازای $\varepsilon=0.3$ رسم کرده ایم.



شکل (۲) درجه خلوص حالتهای گاوسی ایستاوار پایداربرحسب k



شکل (۳) میانگین عد فوتونی حالتهای گاوسی ایستاوار پایداربرحسب k



شکل (۴) مقدار چلاندگی حالتهای گاوسی ایستاوار پایداربرحسب k

اندازه‌گیری پیوسته زمانی

حال تحول زمانی شرطی ناشی از اندازه‌گیری پیوسته زمانی روی مکان نوسانگر در نظر می‌گیریم. معادله اصلی تصادفی مربوطه به صورت زیر است[۳]:

$$d\rho_c = L\rho_c\, dt+\sqrt{\mathrm{k}}(\hat{a}-\langle\hat{a}\rangle)e^{i\phi}\rho_c\sqrt{\eta}\,\mathrm{dw} +\rho_c\sqrt{\mathrm{k}}(\hat{a}^{\dagger}-\langle\hat{a}^{\dagger}\rangle)e^{-i\phi}\sqrt{\eta}\,\mathrm{dw} \qquad (۱۱)$$

جملات دوم و سوم اثر اندازه گیری پیوسته با راندمان η را بر روی نوسانگر توصیف می‌کند[۳]، dw افزایش نا همبسته وینر نامیده می شود. بطوریکه $\mathrm{dw_i dw_j}=dt\,\delta_{\mathrm{ij}}$. انتخاب $\phi=0$ متناظر باندازه گیری روی مکان و $\phi=\pi/2$ متناظربا اندازه گیری روی اندازه حرکت نوسانگرمی باشد. همچنین بر حسب بردار گشتاور اول و ماتریس کوواریانس، معادله اصلی شرطی بالا برای حالت کوانتومی ρ_c در (۱۲) مستلزم تحول زمانی زیر است [۳].

$$dR_c = AR_c dt + (\sigma_c C^T + \Gamma^T)dw$$
$$\dot{\sigma}_c = \tilde{A}\sigma_c + \sigma_c \tilde{A}^T + \tilde{D} - \sigma_c \Gamma^T \Gamma \sigma_c \qquad (۱۲)$$
$$\tilde{A} = A - \Gamma^T C, \qquad \tilde{D} = D - \Gamma^T \Gamma$$

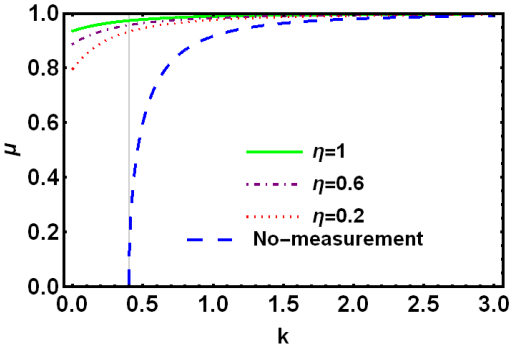
C, Γ عبارتند از:

$$\Gamma = \sqrt{\frac{k\eta}{2}} \begin{pmatrix} \cos^2\phi & \cos\phi\sin\phi \\ \cos\phi\sin\phi & \sin^2\phi \end{pmatrix}, \quad C = \sqrt{\frac{k\eta}{2}} \begin{pmatrix} \cos^2\phi & -\cos\phi\sin\phi \\ -\cos\phi\sin\phi & \sin^2\phi \end{pmatrix}$$

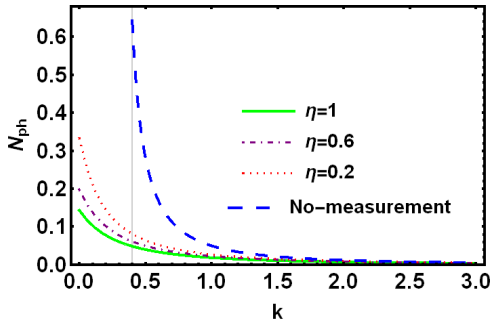
جوابهای ایستاوار ماتریس کوواریانس مربوط به معادله شرطی ناشی از اندازه‌گیری پیوسته را از رابطه زیر بدست می آوریم.

$$\tilde{A}\sigma_c + \sigma_c \tilde{A}^T + \tilde{D} - \sigma_c \Gamma^T \Gamma \sigma_c = 0 \qquad (۱۳)$$

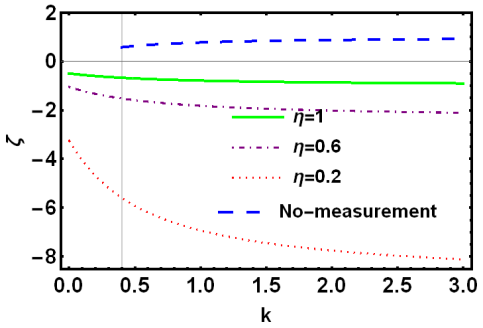
با حل عددی معادله بالا به ازای مقادیر مختلف راندمان های اندازه گیری $(\eta = 0.2, 0.6, 1)$ و $\phi = 0,\ \varepsilon = 0.3$ نمودارهای مربوط به خلوص شکل (۵)، میانگین تعداد فوتون شکل (۶) و همچنین چلاندگی کوانتومی شکل (۷) را برحسب پارامتر جفت شدگی نوسانگر پارامتری اپتیکی k رسم کرده ایم.



شکل (۵) نتیجه حاصل برای درجه خلوص حالتهای گاوسی ایستاوار پایداربرحسب k با اندازه گیری روی مکان نوسانگر



شکل (۶) نمودار میانگین عدد فوتونی حالتهای گاوسی ایستاوار پایداربرحسب k با اندازه گیری روی مکان نوسانگر



شکل (۷) نمودار چلاندگی حالتهای گاوسی ایستاوار پایداربرحسب k با اندازه گیری روی مکان نوسانگر

نتیجه گیری :

الف: نتایج مطالعات ما نشان می دهد دینامیک شرطی ناشی از اندازه گیری روی مکان نوسانگر باعث می شود که به ازای مقادیر مختلف راندمان های اندازه گیری $(\eta = 0.2, 0.6, 1)$ حالتهای ایستاوار با درجه خلوص بالاتری در مقایسه با دینامیک غیر شرطی به ازای مقادیر کوچکتر k تولید نمود. در حقیقت با توجه به رابطه $\mu = 1 - S$، با کاهش انتروپی S، درجه خلوص افزایش می یابد. این همان فرایند خالص سازی حالت بواسطه اندازه گیری، یا استخراج آنتروپی S ازسیستم است واصلاحا تولید حالت خالص بروش خنک سازی معروف است. **ب:** باندازه گیری روی مکان نوسانگر به ازای مقادیر مختلف راندمان های اندازه گیری $(\eta = 0.2, 0.6, 1)$ می توانیم حالتهای گاوسی خالص ایستاوار چلانده پایدار تولید نماییم. توجه داشته باشید که دینامیک شرطی منجر به حالتهای چلانده نمی شود. **ج:** میانگین عدد فوتونی در دینامیک شرطی نسبت به دینامیک غیر شرطی کمتر می باشد. **نکته:** جهت مقایسه، در نمودارهای(۷-۵) نتایج مربوط به دینامیک غیر شرطی نیز نشان داده شده اند

مرجع‌ها

[۱] A. Ferraro, S. Olivares, M. G. A. Paris; "Gaussian states in continuous variable quantum information"; (*Bibliopolis, Napoli, 2005*) **ISBN 88-7088-483-X.**

[۲] A. Serafini, *Quantum continuous variables: A Primer of Theoretical Methods* **(CRC Press, 2023)**.

[۳] H. M.Wiseman and A.C. Doherty, *Phys. Rev. Lett.* **94** 070405, 2005.

بررسی تأثیر برهمکنش همسایه‌های اول و دوم بردینامیک یک سیستم چهارذره ای تحت میدان لیزر چرپ‌شده با شرایط مرزی دوره ای

رستمی دوبانی، کوثر[۱]؛ حسینی، مهدی[۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز، بلوار مدرس ۷۱۵۵۵-۳۱۳ ، شیراز

چکیده

در این پژوهش، دینامیک گذارهای کوانتومی در یک شبکه مربعی چهارذره‌ای با شرایط مرزی دوره‌ای، با استفاده از رویکرد لاندائو-زنر مورد مطالعه قرار گرفته است. با بهره‌گیری از روش‌های تحلیلی و شبیه‌سازی‌های عددی، وابستگی احتمالات گذار به پارامترهای جفت‌شدگی و نرخ تونل زنی بررسی و زمان‌های گذار و مغناطش کل سیستم تحلیل و بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که نه تنها علامت قدرت جفت‌شدگی‌ها، بلکه نسبت آن نیز نقش تعیین‌کننده‌ای در دینامیک گذار و کنترل پذیری سیستم کوانتومی دارد. این یافته‌ها درک عمیق‌تری از دینامیک سیستم‌های کوانتومی چندذرهای ارائه داده و کاربردهای مستقیمی در طراحی کیوبیت‌ها و بهینه‌سازی پروتکل‌های کنترل کوانتومی دارد.

واژه های کلیدی: : *برهمکنش ذرات، لاندائوزنر،زمان گذار کوانتومی*

Investigating the Influence of First and Second Neighbor Interactions on the Dynamics of a Four-Particle System under a Chirped Laser Field with Periodic Boundary Conditions

Rostami Dobani, Kowsar[1]; Hosseini, Mehdi[1]

[1] *Department of Physics, Shiraz University of Technology, modares.blvd, Shiraz*

Abstract

In this research, the dynamics of quantum transitions in a four-particle square lattice with periodic boundary conditions are studied using the Landau-Zener approach. Utilizing analytical methods and numerical simulations, the dependence of transition probabilities on coupling parameters and tunneling rates is investigated, and the transition times as well as the total magnetization of the system are analyzed. The results demonstrate that not only the sign of the coupling strengths, but also their ratio plays a decisive role in the transition dynamics and controllability of the quantum system. These findings provide a deeper understanding of the dynamics of many-body quantum systems and have direct applications in the design of qubits and the optimization of quantum control protocols.

***Keywords**: Particle Interaction, Landau-Zener, Quantum Transition Time*

PACS No. 37,64

مقدمه

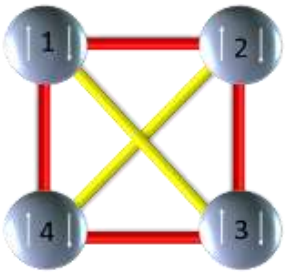
مطالعه سیستم‌های چند ذره‌ای و برهمکنش‌های بین ذرات سنگ بنای بخش وسیعی از فیزیک کوانتومی مدرن را تشکیل می‌دهد[۱]. تئوری لاندائو-زنر[۱] (LZ) یکی از مهمترین و پرکاربردترین مدل‌ها در مطالعه تکامل کوانتومی وابسته به زمان است[۲]. این تئوری انتقال جمعیت بین سطوح انرژی را در یک سیستم دو-سطحی تحت تأثیر

[۱] Landua-zener

یک میدان خارجی متغیر معمولاً مغناطیسی یا نوری توصیف می‌کند[۳]. تئوری لانداو–زنر بر اساس یک هامیلتونی وابسته به زمان با نرخ تغییرات ثابت اختلاف انرژی است. با فرض اینکه سیستم در گذشته نامتناهی در یک حالت خالص قرار دارد، یک نرخ جاروب کلی انرژی، سیستم را به سمت گذارهای غیرآدیاباتیک هدایت می‌کند. سیستم‌هایی با اسپین $\frac{1}{2}$ به عنوان یکی از رایج‌ترین نمونه‌های سیستم‌های دو سطحی در مکانیک کوانتومی شناخته می‌شوند. این سیستم‌ها را می‌توان با مدل لاندائو–زنر مورد مطالعه قرار داد که در آن یک میدان مغناطیسی متغیر با زمان عامل اصلی انتقال جمعیت بین سطوح اسپینی است. روش جایگزین مؤثر برای دستیابی به انتقال جمعیت، استفاده از پالس‌های لیزر چرپ‌شده است. در این تکنیک، با تقویت یک پالس لیزر فوق‌کوتاه به آستانه مورد نظر، محدودیت‌های عملی مدل اولیه از جمله نیاز به بازه‌های زمانی بینهایت مرتفع شده و مسئله با حذف فرضیات ایده‌آل، به شکلی کارآمد و آزمایش‌پذیر ساده‌سازی می‌شود. سادگی و دقت تحلیلی این مدل، آن را به ابزاری اساسی در فهم پدیده‌های بنیادی مانند تونل‌زنی کوانتومیتبدیل کرده است[۴]. تعمیم این تئوری به سیستم‌های چند حالته و چندذره‌ای[۵، ۶]، کاربردهای زیادی در فیزیک اتمی و مولکولی، کیوبیت‌های ابررسانا[۷]، چگالش بوز اینشتین، سیستم‌های اسپین ترونیک[۸] و اپتیک غیرخطی دارد.

مدل نظری

سیستم بررسی شده شامل چهار ذره دوسطحی در آرایش مربعی با شرایط مرزی دوره‌ای است.همان‌گونه که در شکل ۱ مشاهده می شود، خطوط قرمز رنگ نشان دهنده برهمکنش همسایه‌های اول و خطوط زرد رنگ نشان دهنده برهمکنش‌های همسایه‌های دوم است.



شکل ۱: تصویر شماتیک چهار ذره برهمکنش‌دار با شرایط مرزی دوره‌ای

هامیلتونی کل شامل هامیلتونی مدل LZ تک‌ذره و بخش‌های برهمکنش برای همسایگان اول (J_1) و دوم (J_2) است. این مدل در سیستم‌های چندذره‌ای برای مطالعه اثرات برهمکنش‌های فرومغناطیسی و آنتی‌فرومغناطیسی گسترش یافته، جایی که علامت ثابت‌های جفت‌شدگی نقش کلیدی در رفتار سیستم دارد. هامیلتونی تک‌ذره LZ به صورت زیر است.

$$H_{splz} = \begin{pmatrix} \alpha\frac{t}{2} & g \\ g & -\alpha\frac{t}{2} \end{pmatrix} \quad (۱)$$

که α نرخ جاروب انرژی میدان مغناطیسی و g نرخ تونل زنی است. برای سیستم چهار ذره‌ای، فضای هیلبرت ۱۶ بعدی است و حالات ممکن از ترکیب $|\uparrow\rangle$ حالت پایه و $|\downarrow\rangle$ حالت برانگیخته تشکیل می‌شوند. برهمکنش‌های همسایه اول و دوم با استفاده از ماتریس‌های پائولی σ_z مدل‌سازی شده‌اند.

$$H_{n1} = -J_1(\sigma_z^{(1)}\otimes\sigma_z^{(2)} + \sigma_z^{(1)}\otimes\sigma_z^{(4)} + \sigma_z^{(2)}\otimes\sigma_z^{(3)} + \sigma_z^{(3)}\otimes\sigma_z^{(4)})$$

$$H_{n2} = -J_2(\sigma_z^{(1)}\otimes\sigma_z^{(3)} + \sigma_z^{(2)}\otimes\sigma_z^{(4)}) \quad (۲)$$

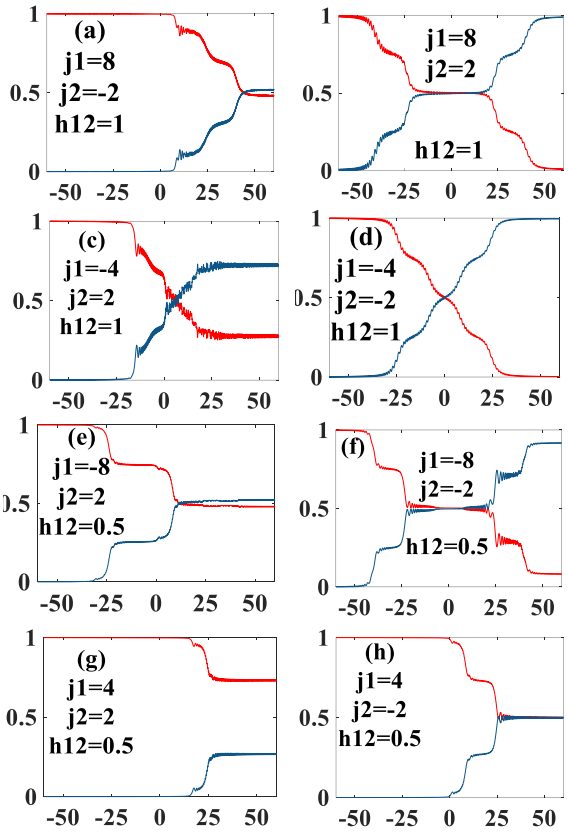
معادلات به صورت بدون بعد حل می‌شوند تا اثرات نرخ جاروب میدان مغناطیسی (α) و جفت‌شدگی‌ها بررسی شود. شبیه‌سازی‌های عددی با استفاده از نرم‌افزار MATLAB انجام شده تا معادله شرودینگر حل شود و احتمال انتقال نهایی به حالات برانگیخته محاسبه گردد.

نتایج

در این بخش، نتایج شبیه‌سازی عددی مربوط به احتمالات گذار کوانتومی در سیستم چهارذره‌ای ارائه شده است. در نمودارهای ارائه‌شده، روند احتمالات گذار برای سیستم چهارذره‌ای تحت پارامترهای مختلف نرخ تونل‌زنی و قدرت جفت‌شدگی تحلیل شده است. محور افقی زمان نرمال شده و محور عمودی احتمال گذار را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که در حالت آنتی‌فرومغناطیس (مقادیر منفی J_1 و J_2)، گذار به حالت برانگیخته

به طور کامل رخ می‌دهد و سیستم پس از مدت زمان مشخصی به احتمال نزدیک به یک در حالت برانگیخته می‌رسد.

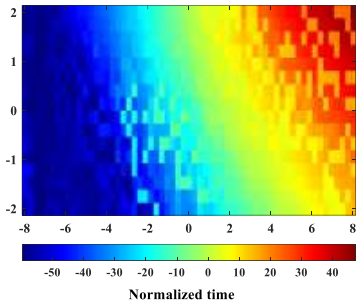
در مقابل، در حالت فرومغناطیس (مقادیر مثبت J_1 و J_2) ، گذار تأثیر کامل اتفاق نمی‌افتد و سیستم در یک احتمال میانی تثبیت می‌شود.



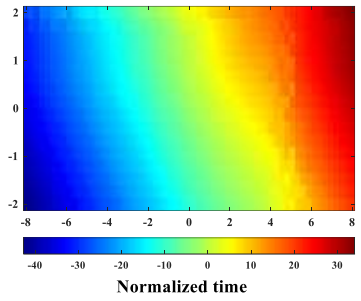
شکل۲: نمودار احتمالات گذار بر حسب نرخ تونل زنی و نرخ جفت شدگی های متقاوت .خط آبی مربوط به احتمال حالت برانگیخته و خط قرمز مربوط به احتمال حالت پایه است.

جفت‌شدگی همسایه دور نیز چشمگیر است: در $J_1 < 0 , J_2 > 0$، افزایش J_2 موجب کاهش زمان لازم برای گذار کامل می‌شود، حال آن که در مناطق $J_1 > 0 , J_2 < 0$ افزایش J_2 باعث کاهش بیش‌تر احتمال نهایی حالت برانگیخته می‌گردد. همچنین، افزایش نرخ تونل‌زنی در هر دو حالت فرومغناطیس و آنتی‌فرومغناطیس، زمان رسیدن به حالت پایدار را کاهش می‌دهد، اما در حالت فرومغناطیس، مقدار نهایی احتمال همچنان محدود باقی می‌ماند.

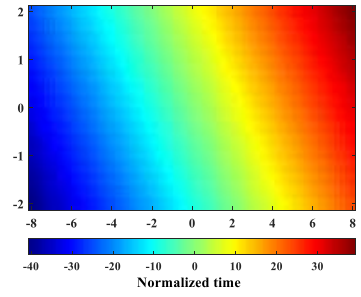
(الف)



(ب)



(ج)



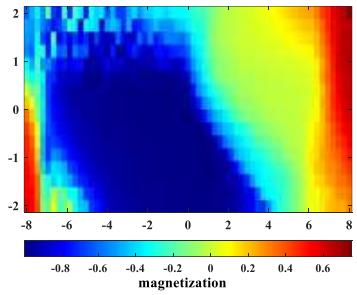
شکل۲: زمان گذار بر حسب جفت‌شدگی همسایه‌های اول و دوم برای یک سیستم چهارذره ای با نرخ تونل زنی الف): ۱ ، ب): ۰/۵ و ج): ۰/۲

در مرحله بعد پس از بررسی احتمالات گذار، زمان احتمالات گذار و وابستگی آن به نرخ تونل زنی و قدرت جفت‌شدگی بررسی شد. شکل ۲ وابستگی زمان گذار نرمال‌شده را به پارامترهای قدرت جفت‌شدگی در سه مقدار مختلف نرخ تونل‌زنی نشان می‌دهند. در هر نمودار، مناطق آبی (زمان گذار کوتاه) عموماً در نواحی با $J_1 < 0$ (رفتار آنتی‌فرومغناطیسی) و به‌ویژه هنگامی که J_2 نیز منفی یا کم‌مقدار است، مشاهده می‌شوند.

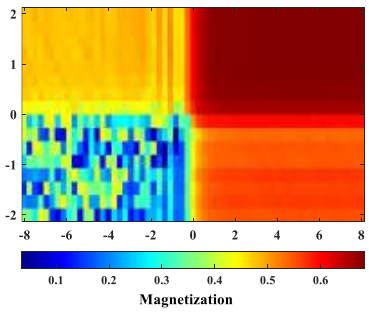
در مقابل، مناطق قرمز (زمان گذار طولانی) عمدتاً در ربع سمت راست بالا ظاهر می‌شوند که مربوط به حالت فرومغناطیس کامل است. در این مناطق، سیستم در یک چاه پتانسیل مؤثر به دام می‌افتد

و فرآیند گذار با تأخیر زمانی قابل توجهی همراه اســـت. نمودار (الف) با نرخ تونل زنی ۱، مناطق آبی گسترده‌تر هستند و گذار در محدوده وسیعی از J_1 و J_2 به سرعت انجام می‌شود. در نمودار (ج) با نرخ تونل زنی ۰/۲ مناطق قرمز گســـترش یافته و تنها در نواحی باریکی با J_1 منفی قوی و J_2 نزدیک به صفر، گذار سریع مشاهده می‌شـــود. در شـــکل ۳ وابســـتگی مغناطش کل ســـیســـتم به قدرت جفت‌شدگی و نرخ تونل‌زنی بررسی شده است. در هر دو نمودار، مناطق با $J_1 < 0$ عموماً با مقادیر بالاتر مغناطش (رنگ‌های زرد و نارنجی) همراه هســـتند.در مقابل مناطق با $J_1 > 0$ با مقادیر پایین‌تر مغناطش (رنگ‌های آبی و ســـبز کمرنگ) مشـــخص می‌شـــوند، که نشان‌دهنده ماندن سیستم در یک حالت ترکیبی و عدم گذار کامل اســـت. در هر دو نمودار، خطوط جدایی بین مناطق با مغناطش بالا و پـــایین، بـــه ویژه در مرز بین ربع‌هـــای مختلف (J_1 و J_2 بـــا علامت‌های متفاوت) مشـــاهده می‌شـــود. این مرزها نشـــان‌دهنده‌ی انتقال فاز دینامیکی در رفتار گذار سیستم هستند.

(الف)



(ب)



شکل۳: مغناطش کل سیستم بر حسب قدرت جفت‌شدگی J_1 و J_2 برای نرخ تونل زنی الف): ۱ و ب): ۰/۲

نتیجه گیری

این نتایج نشـــان می‌دهد که نه تنها علامت جفت‌شـــدگی‌ها، بلکه نســـبت J_1 و J_2 نیز نقش تعیین‌کننده‌ای در دینامیک گذار و کنترل پذیری ســـیســـتم کوانتومی دارد. به‌ویژه مشـــخص شـــد که با کاهش نرخ تونل‌زنی، حســـاســـیت ســـیســـتم به مقادیر دقیق J_1 و J_2 افزایش یافته و گذار کامل تنها در محدوده باریکی از پارامترها قابل دستیابی ا ست. این یافته‌ها تأکید می‌کنند که برای د ستیابی به کنترل دقیق و عملیات ســـریع در ســـیســـتم‌های کوانتومی چندذره‌ای، هماهنگی بهینه‌ای بین برهم‌کنش های داخلی و پارامتر های کنترل خارجی ضروری است.

[1] Fai, L., M. Tchoffo, and M. Jipdi, *Multi-particle and multi-state Landau-Zener model: Dynamic matrix approach.* The European Physical Journal Plus, 2015. **130**(4): p. 71.
[2] Lima, J.R. and G. Burkard, *Partial Landau-Zener transitions and applications to qubit shuttling.* Physical Review B, 2025. **111**(23): p. 235439.
[3] Sarreshtedari, F. and M. Hosseini, *Tunable Landau-Zener transitions using continuous-and chirped-pulse-laser couplings.* Physical Review A, 2017. **95**(3): p. 033834.
[4] Garanin, D., *Interference effect in the Landau-Zener tunneling of the antiferromagnetically coupled dimer of single-molecule magnets.* Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics, 2004. **70**(21): p. 212403.
[5] Maroufian, A., M. Hosseini, and F. Ahmadinouri, *Effect of the next-nearest-neighbor's interaction on the population transfer in a four-particle Landau-Zener system.* OSA Continuum, 2021. **4**(2): p. 290–298.
[6] Maroufian, A. and M. Hosseini, *The investigation of Landau–Zener transition in coupled three-particle systems.* Optik, 2020. **201**: p. 163520.
[7] Liu, L., et al., *Dynamic control of population inversion and high harmonic generation in semiconductors using chirped laser pulses.* Optics Express, 2024. **32**(25): p. 43760–43770.
[8] Graham, D.M., et al. *Controlling the bandwidth and frequency of terahertz pulses generated in a spintronic emitter*. in *Spintronics XVII*. 2024. SPIE.

پایدار سازی درهمتنیدگی کل در یک سامانه چند جزئی

فصیحی، محمدعلی ؛ مجاوری، بشیر؛ محمدی،مهسا؛

گروه فیزیک دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، ۳۵ کیلومتری جاده تبریز –مراغه

چکیده

دراین مقاله به مطالعه دینامیک درهمتنیدگی دریک سامانه چهار جزئی می‌پردازیم. این سامانه چهارجزئی متشکل ازدواتم دوترازی ویک نوسانگر مکانیکی است که درداخل یک کاواک قراردارند ویک میدان لیزری که با اتمها اندرکنش می کند. بامحدودکردن دینامیک سیستم به زیرفضای هیلبرت بایک تحریک و بااستفاده ازمعادله شرودینگرتابع موج سیستم رابدست می‌آوریم. نشان می‌دهیم اگرچه درهمتنیدگی‌ها بین اجزای مختلف این سامانه چندجزئی درطول زمان ثابت نیستند، امادرهمتنیدگی کل رامی‌توان دربازه های زمانی معین ثابت وپایدار نگهداشت.

واژه‌های کلیدی: *درهمتنیدگی، پایدارسازی درهمتنیدگی، درهمتنیدگی سیستم چند جزئی، نوسانگرمکانیکی کوانتومی*

Preservation of total entanglement in a multi-partite system

Mohammad Ali,Fasihi; Bashir, Mojaveri;Mahsa, Mohammadi

Department of Physics, Azarbaijan Shahid Madani University ,Tabriz

Abstract

In this paper, we study the dynamics of the entanglement in a four-partite system. This four-partite system consists of two two-level atoms and a mechanical oscillator located inside a cavity and a laser field interacting with atoms. By restricting the dynamics of the system to the Hilbert subspace with one excitation, we obtain the wave function of the system using the Schrödinger equation. We show that although the entanglements between different components of this four-partite system are not constant over time, the total entanglement can be kept constant and stable over certain time intervals.

Keyword: *Entanglement, Entanglement Preservation, Entanglement of multi-partite system, Quantum mechanical oscillator.*

مقدمه

در همتنیدگی به عنوان پایه و اساس نظریه اطلاعات و محاسبات کوانتومی از اهمیت بسیار زیادی برخوردار است. ازطرفی با توجه به اینکه درهمتیدگی کوانتومی نسبت به اثرات محیطی بسیار حساس و شکننده می باشد ودر اثر اندرکنش سیستم با محیط سریعا میرا می شود، بنابراین حفظ و پایدار سازی آن بسیار مهم می باشد. دراین مقاله، دینامیک درهمتنیدگی در یک سیستم چند جزئی را که متشکل ازدواتم دو ترازی و یک نوسانگر مکانیکی کوانتومی که داخل یک کاواک قرار گرفته است مورد مطالعه قرار می‌دهیم، وبا محدود کردن دینامیک سیستم به زیر فضای هیلبرت با یک تحریک، دینامیک درهمتنیدگی های جزیی، ودینامیک درهمتنیدگی کل سیستم را با استفاده از سنجه وزن اشمیت [۲]مورد مطالعه قرار می‌دهیم و نشان می دهیم که برخلاف در همتنیدگی های جزئی می توان در همتنیدگی کل سامانه را در بازه های زمانی معین پایدار نمود.

دینامیک سیستم

سیستم چند جزئی ازدواتم دوترازی ویک میدان تک مد وصفحه گرافن (که در صفحهX-Z قرارگرفته و درامتدادجهتy، همانطورکه درشکل ۱ نشان داده شده است، ارتعاش می‌کند) تشکیل شده است اتمها با میدان کاواک و میدان لیزر اندرکنش می کنند همچنین

اتمها با غشای گرافن اندرکنش دارند. بنابراین هامیلتونی سامانه عبارت است از

$$\hat{H} = \hat{H}_{J-C} + \hat{H}_m + \hat{H}_I + H_{a-l}, (\hbar = 1) \quad (۱)$$

که $\hat{H}_{J-C}$ هامیلتونی مدل جینزکامینگز نظیر دواتم است، $\hat{H}_m$ هامیلتونی آزاد غشای گرافن ، $\hat{H}_I$ هامیلتونی برهم‌کنش میان غشای گرافن واتم‌های‌دوترازی و H_{a-l} هامیلتونی مربوط به اندرکنش اتمها با میدان لیزر را نشان می دهند.

$$\hat{H}_{J-C} = \omega\,\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{2}\omega_0\hat{\sigma}_z^i + \sum_{i=1}^{2} g(\hat{\sigma}_+^i\,\hat{a} + \hat{\sigma}_-^i\hat{a}^\dagger)$$
$$\hat{H}_m = \omega_m\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m$$
$$\hat{H}_I = \sum_{i=1}^{2} g' x_m\hat{\sigma}_z^i$$
$$H_{a-l} = \sum_{i=1}^{2}\lambda[e^{-i\omega_c t}\hat{\sigma}_+^i + e^{i\omega_c t}\hat{\sigma}_-^i] \quad (۲)$$

در ضمن ω ، ω_0 و ω_c به ترتیب فرکانس‌های میدان کاواک، نوسانگر مکانیکی ومیدان لیزر و g و g' به ترتیب ثابت جفت شدگی اتم ها با میدان کاواک و نوسانگرمکانیکی هستند. λ شدت جفت شدگی میان اتم یک و دو با میدان کلاسیکی را توصیف می‌کند، $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ و $\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m$ عملگرهای شمارش میدان کاواک و نوسانگر مکانیکی کوانتومی (غشای گرافن) هستند، و $\hat{\sigma}_z = |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|$ مولفه z عملگر پائولی و $\hat{\sigma}_+ = |e\rangle\langle g|$ عملگر بالابرنده و $\hat{\sigma}_- = |g\rangle\langle e|$ پایین برنده هستند و $|e\rangle$و $|g\rangle$نشان‌دهنده حالتهای برانگیخته وپایه هر یک از اتمهای دو ترازی هستند. عملگرمکان غشای گرافن برابر است با

$$\hat{x}_m = \sqrt{\frac{1}{2m\omega_m}}\left(\hat{a}_m + \hat{a}_m^\dagger\right) \quad (۳)$$

بنابراین هامیلتونی کل برابراست

$$\hat{H} = \omega\,\hat{a}^\dagger\hat{a} + \tfrac{1}{2}\textstyle\sum_{i=1}^{2}\omega_0\hat{\sigma}_z^i + \sum_{i=1}^{2} g(\hat{\sigma}_+^i\,\hat{a} + \hat{\sigma}_-^i\hat{a}^\dagger) + \sum_{i=1}^{2}\lambda(e^{-i\omega_c t}\hat{\sigma}_+^i + e^{i\omega_c t}\hat{\sigma}_-^i) + \omega_m\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m + \sum_{i=1}^{2} G\left(\hat{a}_m + \hat{a}_m^\dagger\right)\hat{\sigma}_z^i \quad (۴)$$

$G = g'\sqrt{\frac{1}{2m\omega_m}}$ ثابت جفت شدگی تعمیم یافته می‌باشد. از آنجایی که تبدیلات یکانی ویژه مقادیر را تغییر نمی‌دهند ولی شکل هامیلتونی را ساده تر می‌کند تبدیل

$\hat{U}_1 = e^{\sum_{i=1}^{2} -i\omega_c\sigma_z^i/2}$ راروی هامیلتونی کل اعمال می‌کنیم[۱]

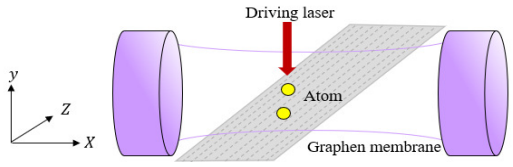
$$\hat{H}_1 = \hat{U}_1^\dagger\hat{H}\hat{U}_1 + i\hat{U}_1\frac{\partial\hat{U}_1^\dagger}{\partial t} = \hat{H}_1^{(1)} + \hat{H}_1^{(2)} \quad (۵)$$

$\hat{H}_1$ بدست آمده را به صورت دو هامیلتونی $H_1^{(1)}$ و $H_1^{(2)}$ انتخاب کنیم

$$\hat{H}_1^{(1)} = \omega\,\hat{a}^\dagger\hat{a} + g(\hat{\sigma}_+^1\hat{a}\,e^{i\omega_c t} + \hat{\sigma}_-^1\hat{a}^\dagger e^{-i\omega_c t}) + g(\hat{\sigma}_+^2\hat{a}\,e^{i\omega_c t} + \hat{\sigma}_-^2\hat{a}^\dagger e^{-i\omega_c t}) + \omega_m\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m + G\left(\hat{a}_m + \hat{a}_m^\dagger\right)\hat{\sigma}_z^1 + G\left(\hat{a}_m + \hat{a}_m^\dagger\right)\hat{\sigma}_z^2 \quad (۶)$$
$$\hat{H}_1^{(2)} = \tfrac{1}{2}\Delta\,\hat{\sigma}_z^1 + \lambda(\hat{\sigma}_+^1 + \hat{\sigma}_-^1) + \tfrac{1}{2}\Delta\,\hat{\sigma}_z^2 + \lambda(\hat{\sigma}_+^2 + \hat{\sigma}_-^2)$$

هامیلتونی $\hat{H}_1^{(2)}$ از هامیلتونی هر دوکیوبیت تشکیل شده، ما ابتدا برای اتم یک در فضای هیلبرت یک محاسبات را انجام می‌دهیم، می‌خواهیم هر دو هامیلتونی را براساس حالتهای پوشیده بنویسیم ابتدا هامیلتونی سیستم درفضای کیوبیت اول را انتخاب می‌کنیم، نمایش طیفی هامیلتونی در فضای هیلبرت تک کیوبیت اول درسیستم دو کیوبیتی به صورت زیر بیان می‌شود

$$\hat{H}^1 = \frac{\Omega}{2}\hat{S}_z^1 \quad (۷)$$



شکل (۱): نمایش اتم های تحریک‌شده که به میدان کاواک و غشای گرافن درحال ارتعاش جفت شده است.

$$\hat{S}_z^1 = \hat{S}_z \bigotimes \hat{I} = |++\rangle\langle++| + |+-\rangle\langle+-| - |-+\rangle\langle-+| + |--\rangle\langle--|$$
$$\hat{S}_+^1 = \hat{S}_+ \otimes \hat{I} = |++\rangle\langle-+| + |+-\rangle\langle--| \quad (۸)$$
$$\hat{S}_-^1 = \hat{S}_- \otimes \hat{I} = |-+\rangle\langle++| + |--\rangle\langle+-|$$

هامیلتونی کل سیستم $\hat{H} = \hat{H}_1^{(1)} + \hat{H}_1^{(2)}$ برحسب حالت های پوشیده را می‌توان به صورت زیر توصیف کرد :

$$\hat{H}_2 = \frac{\Omega}{2}\hat{S}_z^1 + \omega\,\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{g}{2}[\hat{S}_+^1\hat{a}\,e^{i\omega_c t} + \hat{S}_-^1\hat{a}^\dagger e^{-i\omega_c t}] + \omega_m\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m + G(\hat{S}_+^1\hat{a}_m + \hat{S}_-^1\hat{a}_m^\dagger) \quad (۹)$$

هامیلتونی $\hat{H}_2$ با تبدیل یکانی $\hat{U}_2 = e^{i\omega_c\hat{S}_z^1 t/2}$ به صورت زیر می‌باشد

$$\hat{H}_3 = \hat{U}_2^\dagger\hat{H}_2\hat{U}_2 + +i\hat{U}_2\frac{\partial\hat{U}_2^\dagger}{\partial t} \quad (۱۰)$$

با اعمال تبدیل یکانی $\hat{U}_3 = e^{i\omega_c\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m t}$ به هامیلتونی $\hat{H}_3$ هامیلتونی تبدیل شده به صورت زیر بدست می‌آید

$$\hat{H}_4 = \overbrace{\frac{\Omega+\omega_c}{2}\hat{S}_z^1 + \omega\,\hat{a}^\dagger\hat{a} + (\omega_m+\omega_c)\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m}^{\hat{H}_4^{(0)}} \overbrace{G(\hat{S}_+^1\,\hat{a}_m + \hat{S}_-^1\,\hat{a}_m^\dagger) + \frac{g}{2}(\hat{S}_+^1\hat{a} + \hat{S}_-^1\,\hat{a}^\dagger)}^{\hat{H}_4^{(1)}} \quad (۱۱)$$

با اعمال تبدیل یکانی $\hat{U}_4 = e^{-i\hat{H}_4^{(0)}t}$ به هامیلتونی $\hat{H}_4^{(1)}$ هامیلتونی تبدیل شده به صورت زیر بدست می‌آید

$$\hat{H}_5 = \hat{U}_4^\dagger\hat{H}_4^{(1)}\hat{U}_4 = e^{-i\hat{H}_4^{(0)}t}\hat{H}_4^{(1)}e^{i\hat{H}_4^{(0)}t} = \frac{g}{2}[\hat{S}_+^1\hat{a}e^{it\,\Delta_1} + \hat{S}_-^1\hat{a}^\dagger e^{-it\,\Delta_1}] + G[\hat{S}_+^1\hat{a}_m e^{it\,\Delta_2} + \hat{S}_-^1\hat{a}_m^\dagger\, e^{-it\,\Delta_2}] \quad (۱۲)$$

$\Delta_1 = \Omega + \omega_c - \omega$ و $\Delta_2 = \Omega - \omega_c$ مامی‌توانیم $\Delta_1 = 0$ و $\Delta_2 = 0$

و می‌توان با تقریب موج چرخان هامیلتونی را به شکل زیر نوشت

$$\hat{H}_6 = \frac{g}{2}(\hat{S}_+^1\hat{a} + \hat{S}_-^1\hat{a}^\dagger) + G(\hat{S}_+^1\hat{a}_m + \hat{S}_-^1\hat{a}_m^\dagger) \quad (۱۳)$$

حال برای اتم ۲ در فضای هیلبرت دو محاسبات را انجام می‌دهیم، می‌خواهیم هر دو هامیلتونی را براساس حالت های پوشیده بنویسیم هامیلتونی‌کل، مربوط به دو کیوبیت عبارت است:

$$\hat{H}_6 = \frac{g}{2}(\hat{S}_+^1\hat{a} + \hat{S}_-^1\hat{a}^\dagger) + G(\hat{S}_+^1\hat{a}_m + \hat{S}_-^1\hat{a}_m^\dagger) + \frac{g}{2}(\hat{S}_+^2\hat{a} + \hat{S}_-^2\hat{a}^\dagger) + G(\hat{S}_+^2\hat{a}_m + \hat{S}_-^2\hat{a}_m^\dagger) \quad (۱۴)$$

پایه های مربوط به زیرفضای با یک تحریک به صورت زیر می-باشند که برای سادگی، آنها را با کت های

$$\{|1\rangle = |0_f\,0_m e\,g\rangle, |2\rangle = |0_f\,0_m g\,e\rangle, |3\rangle = |1_f\,0_m g\,g\rangle, |4\rangle = |0_f\,1_m g\,g\rangle\}$$

نمایش می‌دهیم. اندیسهای m, f مربوط به حالتهای میدان کاواک و گرافن هستند با انتخاب شکل کلی حالت اولیه سیستم به صورت زیر

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{i=1}^4 a_i\,(0)\,|i\rangle \quad (۱۵)$$

پس از تحول سیستم با حالت اولیه بهنجار $(\sum_{i=1}^4 |a_i(0)|^2 = 1)$ تحت هامیلتونی $\hat{H}_6$ در لحظه t به رابطهٔ $|\psi(0)\rangle$ زیرمی‌رسیم

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^4 a_i\,(t)\,|i\rangle, \quad \sum_{i=1}^4 |a_i(t)|^2 = 1 \quad (۱۶)$$

وزن اشمیت

در یک سیستم چند جزئی بسته به انواع ترکیبات اجزا درهمتنیده انواع مختلف درهمتنیدگی ها وجود دارد. از جمله درهم‌تنیدگی یک جزء با بقیه اجزا و درهمتنیدگی هر جز با هر جز دیگر در هر زیر سیستم دو کیوبیتی. در این کار دینامیک درهمتنیدگی بین یک جز با سه جز دیگر را مورد بررسی قرار خواهیم داد و از معیار وزن اشمیت بهنجار $Y(t)$ برای محاسبه مقدار درهمتنیدگی استفاده خواهیم کرد[۲].

$$Y(t) = 1 - \sqrt{\frac{2}{K(t)} - 1}, \quad K(t) = \frac{1}{\mu_1^2+\mu_2^2} \quad (۱۷)$$

μ_1, μ_2 ویژه مقادیر ماتریس چگالی کاهش یافته یک جز نسبت به به اجزای دیگر (سه جز دیگر) می باشد. عملگر چگالی سیستم برای حالت $|\psi(t)\rangle$ به شکل زیر می نویسیم

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \quad (۱۸)$$

ماتریسهای کاهش یافته اتم اول $\hat{\rho}_1(t)$، اتم دوم $\hat{\rho}_2(t)$، میدان $\hat{\rho}_f(t)$ و غشاء گرافن $\hat{\rho}_G(t)$ به صورت زیرمی‌باشد.

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_1 &= Tr_{2fG}[\hat{\rho}(t)]\\ \hat{\rho}_2 &= Tr_{1fG}[\hat{\rho}(t)]\\ \hat{\rho}_f &= Tr_{12G}[\hat{\rho}(t)]\\ \hat{\rho}_G &= Tr_{12f}[\hat{\rho}(t)]\end{aligned} \quad (۱۹)$$

حال برای استفاده از معیار وزن اشمیت ابتدا ویژه مقادیر هریک از ماتریسهای چگالی کاهش یافته را بدست می آوریم ودرهمتنیدگی دو جزئی (یک جزء با سه جزء دیگر) را طبق روابط زیر بدست می آوریم:

$$\begin{aligned}Y_{1,(2,f,G)}(t) \equiv Y_1 &= 2min(\,|a_2(t)|^2 + |a_3(t)|^2 + |a_4(t)|^2,\ |a_1(t)|^2)\\ Y_{2,(1,f,G)}(t) \equiv Y_2 &= 2min(\,|a_1(t)|^2 + |a_3(t)|^2 + |a_4(t)|^2,\ |a_2(t)|^2)\\ Y_{f,(1,2,G)}(t) \equiv Y_3 &= 2min(\,|a_1(t)|^2 + |a_2(t)|^2 + |a_4(t)|^2,\ |a_3(t)|^2)\\ Y_{G,(1,2,f)}(t) \equiv Y_4 &= 2min(\,|a_1(t)|^2 + |a_2(t)|^2 + |a_3(t)|^2,\ |a_4(t)|^2)\end{aligned} \quad (۲۰)$$

با در نظر گرفتن رابطه (۲۰) وشرط بهنجارش $\sum_{i=1}^4 |a_i(t)|^2 = 1$ و نیز اینکه دینامیک محدود به زیر فضای با یک تحریک می باشد. می توان نشان داد که نامساوی های زیر بین در همتنیدگی های $Y_i = Y_{i(j,k,l)}$ برقرار است:

$$Y_T = Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4 \le 2 \quad (۲۱)$$

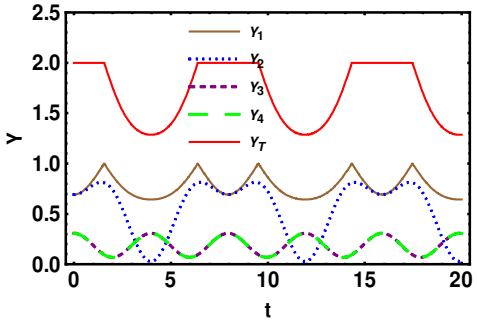
$$Y_i \le Y_j + Y_k + Y_l, \quad (i,j,k,l) \in \{1,2,f,G\} \quad (۲۲)$$

$$Y_i \le Y_T/2 \quad (۲۳)$$

رابطه (۲۰) بیانگر محدودیت در درهمتنیدگی کل Y_T به اشتراک گذاشته شده بین اجزای سیستم را نشان می دهد و حد بالای آن را نشان می دهد. اما رابطه (۲۱) محدودیت اشتراک در درهمتنیدگی کل را برای هر جزءاز سامانه چهار جزئی نشان می دهد. در ضمن

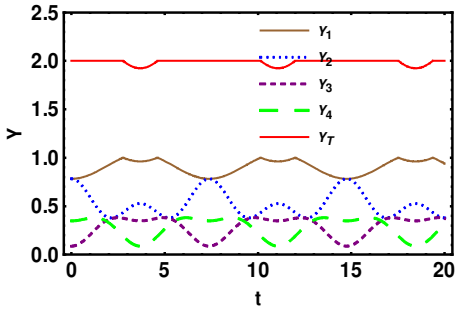
رابطه (۲۲) حد بالای هر یک از در همتنیدگی های هر جزء با سه جز دیگر را نشان می دهد. توجه به این نکته ضروری است که لازمه تحقق کامپیوترهای کوانتومی جهت پردازش و محاسبات کوانتومی، تولید حالتهای درهمتنیده چند جزئی است. Y_T درهمتنیدگی کل به اشتراک گذاشته شده بین اجزای سیستم را نشان می دهد. در حقیقت اگر چنانچه بتوانیم شرایطی را ایجاد نماییم که درهمتنیدگی کل را در بیشینه مقدار آن $(Y_T = 2)$ آن ثابت نگه داریم، آنگاه میزان اشتراک در درهمتنیدگی کل برای هرجزء افزایش می‌یابد ودرضمن‌این اطمینان حاصل می شود که درهمتنیدگی حالت کوانتومی چند جزئی صفر نخواهد بود. اما چنانچه $(Y_T = 0)$ باشد انگاه تک تک در همتنیدگی های جرئی صفر هستند. بنابراین در ادامه بحث شرایطی را بررسی می کنیم که بتوانیم درهمتنیدگی کل به اشتراک گذاشته شده بین اجزای سیستم را ثابت نگه داریم.

در شکل (۲) نمودار مربوط به هریک از درهمتنیدگی های دو جزئی (یک جزء با سه جزء دیگر) ودر همتنیدگی کل را بر حسب زمان و به ازای مقادیر $a_1(0) = \frac{3}{\sqrt{26}}, a_2(0) = \frac{2}{\sqrt{26}}, a_3(0) = -\frac{3}{\sqrt{26}}, a_4(0) = \frac{2}{\sqrt{26}}, g = G = 0.5$ رسم کرده ایم چنانچه مشاهده می شوددر همتنیدگی جزئی نسبت به زمان متغیر هستند اما درهمتنیدگی کل را می توان در با زه های زمانی مشخصی حفظ کرد و پایدار نگه داشت.



شکل(۲) نمودار درهمتنیدگی های سه جزئی Y_i و در همتنیدگی کل Y_T

در شکل (۳) با انتخاب مناسب مقادیر پارامترها مطابق زیر $a_1(0) = \frac{3}{\sqrt{26}}, a_2(0) = \frac{2}{\sqrt{26}}, a_3(0) = -\frac{3}{\sqrt{26}}i, a_4(0) = \frac{2}{\sqrt{26}}, g = 0.1, G = 0.6$ دوباره نمودار مربوط به هریک از درهمتنیدگی های دو جزئی (یک جزء با سه جزء دیگر) ودر همتنیدگی کل را بر حسب زمان رسم کرده ایم چنانچه مشاهده می شود باز در همتنیدگیهای جزئی نسبت به زمان متغیر هستند اما درهمتنیدگی کل را در بازه زمانی بیشتری نسبت به نمودار قبلی حفظ شده است ومقدار آن تقریبا در بیشنه مقدارش حفظ شده است



شکل(۳) نمودار درهمتنیدگی های سه جزئی Y_i و در همتنیدگی کل Y_T

نتیجه گیری

بطور خلاصه دراین مقاله، دینامیک درهمتنیدگی‌های جزئی و کلی را در یک سامانه چند جزئی متشکل از دو اتم دوترازی داخل کاواک که در اندرکنش با میدان لیزری تک مد و همچنین با یک نوسانگر مکانیکی کوانتومی هستند را مورد بررسی قرار دادیم. با فرض اینکه هر دو اتم با میدان کاواک و نوسانگر مکانیکی اندرکنش دارند. همچنین با استفاده از سنجه‌درهمتنیدگی وزن اشمیت[۲, ۳].دینامیک درهمتنیدگی و پایدارسازی آنرا بررسی کردیم ومشاهده کردیم که می توان با انتخاب مناسب جفت شدگیهای سامانه درهمتنیدگی کل را در بازه های زمانی طولانی تری ثابت نگه داشت و حفظ نمود، این پدیده به‌عنوان انجماد درهمتنیدگی کل شناخته‌می‌شود.

مرجع‌ها

[۱] N.Zettili, "Quantum Mechanics" Concepts and Applications, Chichester, **UK: Wiley**, 2009.
[۲] R. Grobe, K. Rzążewski, and J. H. Eberly "Measure of electron-electron correlation in atomic physics" Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, **vol. 27**, pp. L503, 1994.
[۳] X.-F. Qian, M. A. Alonso, and J. H. Eberly "Entanglement polygon inequality in qubit systems" New Journal of Physics, **vol. 20**, pp. 063012, June 2018.

ترابرد کوانتومی گرمایی در سیستم‌های دو-کیوبیتی XXZ با برهم‌کنش ژیالوشینسکی-موریا

جاقوری، حکیمه ؛

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز

h.jaghouri@scu.ac.ir

چکیده

در این مقاله، ترابرد کوانتومی در یک زنجیره XXZ هایزنبرگ تحت تأثیر برهم‌کنش ژیالوشینسکی-موریا، میدان‌های مغناطیسی ناهمگن و دما بررسی شده است. وفاداری ترابرد به عنوان تابعی از پارامترهای مدل، محاسبه و تحلیل شده است. نتایج نشان می‌دهد که ناهمسانگردی، شدت DM ، میدان مغناطیسی و دما به طور چشمگیری بر عملکرد کانال اثر می‌گذارند و شرایط مناسب می‌توانند به افزایش وفاداری منجر شوند.

واژه های کلیدی: *برهم‌کنش ژیالوشینسکی-موریا، ترابرد کوانتومی، زنجیره هایزنبرگ*

Thermal Quantum Teleportation in Two-Qubit XXZ Systems with Dzyaloshinskii-Moriya Interaction

Hakimeh Jaghouri

Department of Physics, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz

Abstract

In this paper, quantum teleportation is investigated within an XXZ Heisenberg spin chain subjected to Dzyaloshinskii-Moriya interaction, inhomogeneous magnetic fields, and temperature. We calculate and analyze the teleportation fidelity as a function of model parameters, demonstrating that anisotropy, DM strength, magnetic fields, and temperature significantly impact performance, with optimal conditions enabling enhanced fidelity.

***Keywords**: Dzyaloshinskii–Moriya (DM) interaction, Teleportation, Heisenberg chains*

PACS No.

مقدمه

ترابرد کوانتومی یکی از مفاهیم بنیادی در علم اطلاعات کوانتومی است که انتقال یک حالت کوانتومی را با بهره‌گیری از درهم‌تنیدگی و کانال‌های کلاسیک امکان‌پذیر می‌سازد [۱]. مدل‌های اسپینی مانند آیزینگ و هایزنبرگ، به دلیل ویژگی‌های فیزیکی مناسب، بستری کارآمد برای پیاده‌سازی کانال‌های کوانتومی فراهم می‌کنند. با این حال، کانال‌های واقعی همواره تحت تأثیر نوسانات گرمایی قرار دارند که می‌تواند منجر به کاهش درهم‌تنیدگی و تضعیف کارایی ترابرد شود [۲–٤]. از سوی دیگر، برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا (DM)که ناشی از جفت‌شدگی اسپین-مدار است، نقش مهمی در تغییر ساختار درهم‌تنیدگی در سامانه‌های اسپینی ایفا می‌کند [٦,٧].

اگرچه مدل XXZ در حضور برهم‌کنش DM پیش‌تر مطالعه شده است، بیشتر این مطالعات بر رفتار کلی سیستم تمرکز داشته‌اند. در این مقاله، توازن میان میدان مغناطیسی و برهم‌کنش DM بررسی می‌شود تا ناحیه‌های بهینه و پایدار وفاداری در ترابرد کوانتومی شناسایی شوند[٦,٧].

هامیلتونی مدل

هامیلتونی کانال مورد مطالعه به صورت یک زنجیره اسپین XXZ هایزنبرگ است، که به شکل زیر نوشته می‌شود [۷و۲]:

$$H=\frac{J}{2}(\sigma_1^x\sigma_2^x+\sigma_1^y\sigma_2^y+\zeta\sigma_1^z\sigma_2^z)+\frac{D_z}{2}(\sigma_1^x\sigma_2^y-\sigma_1^y\sigma_2^x)+\frac{1}{2}((B_1+B_2)\sigma_1^z+(B_1-B_2)\sigma_2^z) \quad (1)$$

در هامیلتونی فوق، پارامتر J نشان‌دهنده جفت‌شدگی اسپینی، ζ معرف ناهمسانگردی، و D_z بیانگر برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا (DM) است. میدان‌های مغناطیسی موضعی ناهمگن با B_2 و B_1 تعریف می‌شوند. برای ارزیابی عملکرد این کانال گرمایی، ما ترابرد حالت ورودی درهم‌تنیده زیر را در نظر می‌گیریم:

$$|\psi_{in}\rangle = \cos\theta|11\rangle + e^{i\phi}\sin\theta|00\rangle$$

آلیس و باب برای اجرای پروتکل از اندازه‌گیری‌های استاندارد حالت بل بهره می‌برند [٦, ٧]. معیار اصلی برای ارزیابی عملکرد ترابرد کوانتومی، وفاداری ترابرد (F) است؛ که با اندازه‌گیری میزان هم‌پوشانی میان حالت ورودی $|\psi_{in}\rangle$ و ماتریس چگالی حالت خروجی ρ_{out} ، کیفیت انتقال را می‌سنجد و به صورت $F = \langle\psi_{in}|\rho_{out}|\psi_{in}\rangle$ تعریف می‌شود [٤]. کارایی این فرایند به کانال کوانتومی وابسته است که توسط ماتریس چگالی زنجیره XXZهایزنبرگ دوکیوبیتی توصیف می‌شود. ماتریس چگالی کانال در دمای T به صورت $\rho(T) = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$ تعریف می‌شود، که در آن Zتابع پارش سامانه به صورت $Z = \mathrm{Tr}(e^{-\beta H})$ نوشته می‌شود. عناصر غیرصفر ماتریس چگالی به صورت زیر هستند:

$$\rho_{22} = \frac{(J^2+2B_2^2+2B_2\sqrt{J^2+B_2^2+D_z^2}+D_z^2)M_2}{Z(J^2+D_z^2)} + \frac{(J^2+2B_2^2-2B_2\sqrt{J^2+B_2^2+D_z^2}+D_z^2)M_3}{Z(J^2+D_z^2)},$$

$$\rho_{23} = \rho_{32}^* = \frac{(B_2+\sqrt{J^2+B_2^2+D_z^2})M_2}{Z(J-iD_z)} + \frac{(B_2-\sqrt{J^2+B_2^2+D_z^2})M_3}{Z(J-iD_z)}, \rho_{44} = \frac{M_4}{Z},$$

$$\rho_{33} = \frac{1}{Z}\left[M_3 + e^{\beta\left(\frac{1}{2}J\zeta - \sqrt{J^2+B_2^2+D_z^2}\right)}\right], \rho_{11} = \frac{M_1}{Z}. \qquad (۲)$$

کمیت‌های M_i به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$M_1 = e^{-\beta\left(B_1+\frac{J\zeta}{2}\right)}, \quad M_2 = e^{\frac{1}{2}\beta\left(J\zeta-2\sqrt{J^2+B_2^2+D_z^2}\right)},$$
$$M_3 = e^{\beta\left(\frac{1}{2}J\zeta+\sqrt{J^2+B_2^2+D_z^2}\right)}, \quad M_4 = e^{\beta\left(B_1-\frac{J\zeta}{2}\right)}.$$

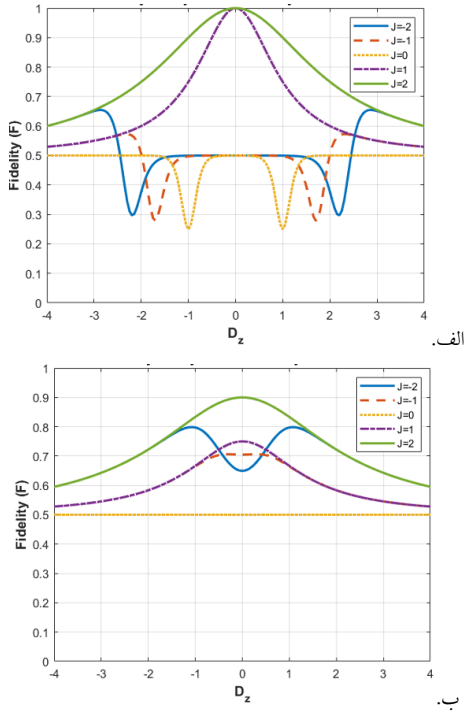
با ترابرد حالت اولیه از طریق این کانال گرمایی، ماتریس چگالی خروجی ρ_{out} به دست می‌آید. برای ارزیابی کیفیت این فرایند از سنجه وفاداری (F) استفاده می‌شود که میزان هم‌پوشانی میان دو حالت کوانتومی را اندازه‌گیری می‌کند. بنابراین هرچه مقدار F بزرگ‌تر باشد، کیفیت ترابرد بهتر خواهد بود. با در نظر گرفتن

$\Delta = J^2 + D_z^2,\ K = B_2^2 + D_z^2, \Lambda = \sqrt{J^2+B_2^2+D_z^2},$

وفاداری به صورت زیر تعریف می‌شود:

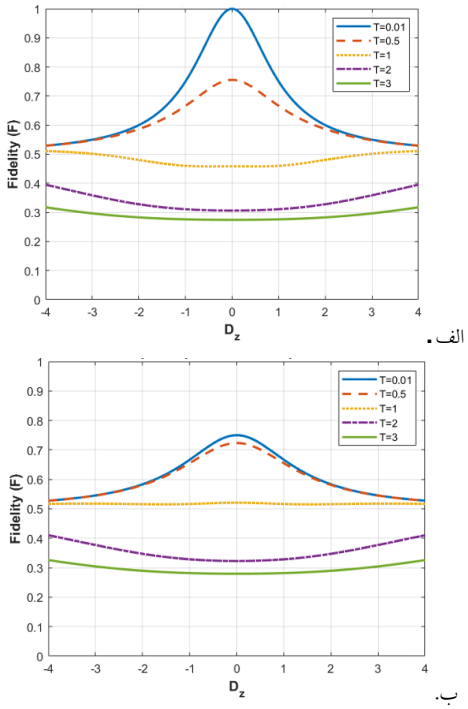
$$F = \frac{8}{Z^2\Delta^2\sin^8(\theta)}\Big[4\Delta X_2 e^{\beta J\zeta} + \Delta^2 S e^{-\beta J\zeta}\cosh^2(\beta B_1) + 2e^{\beta J\zeta}X_1(P\cosh(2\beta\Lambda) - B_2\Lambda\sinh(2\beta\Lambda))\Big], \quad (۳)$$

در تمامی محاسبات و تحلیل‌های این پژوهش، پارامترهای حالت اولیه را به صورت $\phi = 0, \theta = \pi/4$ فرض کنیم. شکل ۱.الف نمودار وفاداری (F) را برحسب برهم‌کنش D_z، برای مقادیر مختلف جفت‌شدگی J در حالت تعادل گرمایی با اعمال میدان مغناطیسی $B_2 = 0$ و $B_1 = 1$ نشان می‌دهد. برای $J > 0$ (منحنی‌های سبز و بنفش)، وفاداری با افزایش $|D_z|$ به‌صورت یکنواخت کاهش می‌یابد و بیشینه آن در $D_z = 0$ رخ می‌دهد؛ این رفتار بیانگر اثر تضعیفی D_z بر کارایی ترابرد است. در مقابل، برای $J \le 0$ (منحنی‌های آبی، نارنجی و زرد)، سامانه رفتار متفاوتی را با نوسانات شدید و افت‌های ناگهانی به نمایش می‌گذارد که نشان‌دهنده وجود نواحی بحرانی و حساسیت سامانه به وجود برهم‌کنش‌های J و D_z است. شکل ۱.ب تغییرات وفاداری را در شرایط میدان مغناطیسی $B_2 = 1$ و $B_1 = 0$ به تصویر می‌کشد. در این حالت، اگرچه برای $J > 0$ روند کلی مشابه شکل ۱ است کاهش یکنواخت با افزایش $|D_z|$ و بیشینه در $D_z = 0$ ، اما قله‌ها اندکی کوچک‌ترند. تفاوت اصلی در ناحیه $J \le 0$ مشاهده می‌شود که در آن، نوسانات نسبت به شکل ۱ هموارتر و پهن‌تر شده‌اند؛ به‌ویژه منحنی $J = 0$ رفتاری تقریباً ثابت دارد و برای $J = -2$ نیز نوسانات محدودتری مشاهده می‌شود. این نتایج نشان می‌دهد که حضور میدان B_2، اگرچه وفاداری بیشینه مشابه حالت $B_1 = 1$ را فراهم نمی‌کند، اما با کاهش افت‌های تند، پایداری نسبی بیشتری در سامانه ایجاد می‌کند.



شکل ۱. (الف) وابستگی وفاداری (F) به برهم‌کنش *ژیالوشینسکی* –موریا D_z برای مقادیر مختلف J با فرض $B_1=1, B_2=0$.ب) مشابه (الف)، اما برای حالت $B_1=0, B_2=1$. در تمامی نمودارها $\zeta=1, T=0.1$ فرض شده است.

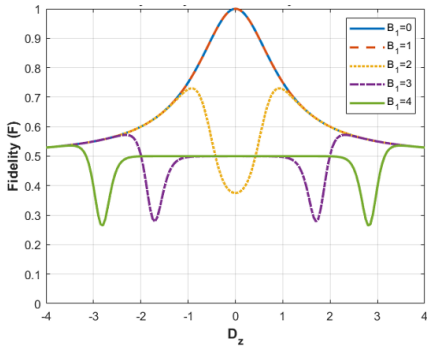
شکل‌های ۲.الف و ب به بررسی اثر دما وقتی $J=1$ است، بر وفاداری ترابرد در حضور میدان‌های مغناطیسی مختلف می‌پردازند . در هر دو حالت، وفاداری با افزایش دما به‌طور یکنواخت کاهش می‌یابد؛ به طوری که در دماهای بالاتر، قله‌های نمودار پهن‌تر شده و مقدار بیشینه وفاداری به‌شدت تضعیف می‌شود. مقایسه نتایج نشان می‌دهد که در حضور میدان B_1 (شکل ۳)، اگرچه در دماهای پایین وفاداری بیشینه بالاتری حاصل می‌شود، اما حساسیت سامانه به افزایش دما بیشتر بوده و افت وفاداری با آهنگ تندتری رخ می‌دهد. در مقابل، در حضور میدان B_2 (شکل ۲.ب)، علی‌رغم کمتر بودن مقدار بیشینه وفاداری، سامانه مقاومت گرمایی بالاتری از خود نشان داده و روند کاهش وفاداری ملایم‌تر است. این رفتار بیانگر آن است که میدان B_1 برای بهینه‌سازی وفاداری در دماهای پایین و میدان B_2 برای ارتقای پایداری گرمایی سامانه مناسب‌تر هستند



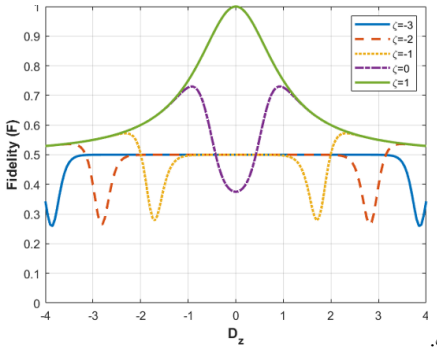
شکل ۲ (الف) وابستگی وفاداری (F) به برهم‌کنش *ژیالوشینسکی* –موریا D_z برای مقادیر مختلف دما با فرض $B_1=1, B_2=0$.ب) مشابه (الف)، اما برای حالت $B_1=0, B_2=1$. در تمامی نمودارها $\zeta=1, J=1$ فرض شده است.

شکل ۳، وابستگی وفاداری ترابرد کوانتومی (F) را به تغییرات شدت برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا (D_z) تحت مقادیر مختلف میدان مغناطیسی (B_1) نشان می‌دهد. تحلیل این نمودار، نشان می‌دهد که برای $B_1=0, B_1=1$، در این پیکربندی، سامانه به بالاترین سطح وفاداری $(F=1)$ دست می‌یابد؛ با این حال، این مقدار تنها در یک نقطه بحرانی $(D_z=0)$ رخ می‌دهد و سیستم به شدت نسبت به کوچک‌ترین نوسانات پارامتر D_z حساس و ناپایدار است. با افزایش شدت میدان مغناطیسی $B_1 \geq 2$، نمودار از حالت تک‌قله‌ای به ساختارهای تخت‌تر و چندقله‌ای تبدیل می‌شود. اگرچه در این ناحیه، مقدار بیشینه وفاداری نسبت به حالت قبل تعدیل می‌شود، اما سامانه در بازه‌های وسیعی از D_zدچار «تخت‌شدگی» شده و به پایداری قابل‌توجهی در برابر نوسانات پارامتری دست می‌یابد. در حضور میدان مغناطیسی بر کیوبیت اول (شکل ٤.الف)، سامانه نسبت به تغییرات پارامتر ناهمسانگردی (ζ) حساسیت بالایی نشان داده و با کاهش این پارامتر، نوسانات دامنه به‌شدت تقویت شده و وفاداری دچار افت‌های عمیق می‌شود. در مقابل، اعمال میدان

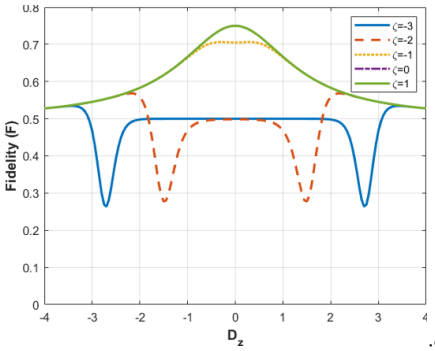
بر کیوبیت دوم (شکل ٤–ب) منجر به تغییر ساختاری در پاسخ سامانه می‌گردد؛ به‌گونه‌ای که اگرچه مقدار وفاداری بیشینه اندکی کاهش می‌یابد، اما منحنی‌ها هموارتر شده و پایداری ساختاریِ سیستم در برابر تغییرات ناهمسانگردی به‌طور ملموسی افزایش می‌یابد. این رفتار نشان‌دهنده تأثیر تعیین‌کننده مکان اعمال میدان بر قابلیت کنترل و پایداری کانال‌های کوانتومی است..



شکل۳.وابستگی وفاداری (F) برحسب D_z برای مقادیر مختلف B_1، $\zeta=1, T=0.1, B_2=0$ را نشان می دهد.



الف.



ب.

شکل ٤. (الف) وابستگی وفاداری (F) به برهم‌کنش *ژیالوشینسکی* –موریا D_z برای مقادیر مختلف ناهمسانگردی ζ با فرض $B_1=1, B_2=0$. ب) مشابه (الف)، اما برای حالت $B_1=0, B_2=1$. در تمامی نمودارها $J=1, T=0.1$ فرض شده است.

نتیجه گیری

این پژوهش یک تحلیل جامع از عملکرد ترابرد کوانتومی در یک زنجیره اسپینی XXZ است. یافته‌ها نشان داد که وفاداری با برهم‌کنش تبادلی J ، برهم‌کنش DM و پیکربندی میدان‌های مغناطیسی خارجی کنترل می‌شود. در حالی که پیکربندی میدان B_1 برای دستیابی به وفاداری بیشینه تحت شرایطی مناسب است، پیکربندی B_2 برتری خود را در تأمین پایداری گرمایی و پایداری پارامتری در برابر تغییرات ناهمسانگردی (ζ) نشان می‌دهد. دما عاملی مخرب برای کیفیت ترابرد است که با افزایش آن، وفاداری به‌سرعت کاهش می‌یابد؛ علاوه بر این، تغییر پارامتر ناهمسانگردی (ζ) به ما اجازه می‌دهد تا شدت و تعداد نوسانات وفاداری را به‌دقت کنترل کنیم. در نهایت، این نتایج ثابت می‌کند که برای ساخت یک کانال کوانتومی بهینه، انتخاب نوع میدان مغناطیسی باید بر اساس نیاز کاربر باشد: اگر هدف دست‌یابی به بیشترین وفاداری است، پیکربندی B_1 ترجیح داده می‌شود، اما اگر پایداری سیستم در برابر گرما اولویت داشته باشد، استفاده از پیکربندی B_2 انتخاب هوشمندانه‌تری خواهد بود.

مرجع‌ها

[1] Kim, Yoon-Ho, Sergei P. Kulik, and Yanhua Shih. "Quantum teleportation of a polarization state with a complete Bell state measurement." *Physical Review Letters* **86**.7 (2001): 1370.
[2] H. Jaghouri, "Effects of magnetic field on quantum correlations dynamics in the anisotropic two-qubit Heisenberg model," *Quantum Information. Processing*., vol. **24**. 10, pp. 313–320, 2025.
[3] Zhang, Guo-Feng, and Shu-Shen Li. "Thermal entanglement in a two-qubit Heisenberg XXZ spin chain under an inhomogeneous magnetic field." *Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics* **72**.3 (2005): 034302.
[4] Y. Zhou and G.-F. Zhang, "Quantum teleportation via a two-qubit Heisenberg XXZ chain–effects of anisotropy and magnetic field," *The European Physical Journal D*, vol. **47**. 2, pp. 227–231, Apr.2008
[5] Zidan, Nour. "Quantum teleportation via two-qubit Heisenberg XYZ chain." *Canadian Journal of Physics* **92**.5 (2014): 406-410.
[6] Zhang, Chang-Yue, et al. "The efficiency of quantum teleportation with three-qubit entangled state in a noisy environment." *Scientific Reports* **13**.1 (2023): 3756.
[7] Houça, Rachid, et al. "Quantum teleportation via a two-qubit Heisenberg XXX chain with x-component of Dzyaloshinskii–Moriya interaction." *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **563** (2022): 16981

تحلیل اطلاعات فیشر کوانتومی حالت‌های *GHZ* در حضور نویزهای کوانتومی

قنواتی ، صغرا [۱] ؛ صبور، عباس [۲]

[۲،۱] گروه فیزیک، واحد امیدیه، دانشگاه آزاد اسلامی ، امیدیه، ایران

چکیده

در این پژوهش، تأثیر سه نوع نویز کوانتومی متداول – میرایی دامنه، میرایی فاز و واقطبش –بر روی اطلاعات فیشر کوانتومی حالت‌های GHZ با تعداد کیوبیت $N = 4, 5, 6, 7$ بررسی شده است. با استفاده از نمایش عملگرهای کراوس و محاسبه مستقیم ماتریس چگالی پس از اعمال نویز، کمیت $\frac{F_Q}{N}$ (اطلاعات فیشر کوانتومی بر واحد ذره) به عنوان تابعی از شدت نویز p محاسبه و مقایسه شده است.

***نتایج نشان می‌دهند که در غیاب نویز، مقدار $\frac{F_Q}{N} = N$ است. تحت نویز میرایی دامنه، میزان افت اطلاعات فیشر کوانتومی برای همه N ها تقریباً مشابه و تدریجی است. نویز میرایی فاز باعث کاهش سریع‌تر اطلاعات فیشر کوانتومی** می‌شود که این اثر برای Nهای کوچکتر بارزتر است. نویز واقطبش مخرب‌ترین رفتار را نشان می‌دهد و حتی برای مقادیر کوچک p، اطلاعات فیشر کوانتومی را به شدت کاهش می‌دهد. این یافته‌ها شکنندگی حالت‌های GHZ نسبت به نویزهای فاز و واقطبش و پایداری نسبی آن‌ها در برابر میرایی دامنه را برجسته می‌کند و برای طراحی حسگرهای کوانتومی مقاوم در برابر نویز مفید است.*

واژه های کلیدی: ***اطلاعات فیشر کوانتومی، حالت GHZ ، میرایی دامنه، میرایی فاز، واقطبش، عملگرهای کراوس.***

Analysis of Quantum Fisher Information of GHZ States in the Presence of Quantum Noises

Ghanavati, Soghra [1], Sabour, Abbass [2]

[1,2] Department of physics, Om.C, Islamic Azad University, omidiyeh, Iran

Abstract

In this study, the effect of three common quantum noise channels—amplitude damping, phase damping, and depolarizing—on the Quantum Fisher Information of N-qubit GHZ states (N=4,5,6,7) is investigated. Using the Kraus operator representation and direct computation of the density matrix after noise, the quantity $\frac{F_Q}{N}$ (QFI per qubit) is calculated as a function of noise strength p.

Results show that, in the absence of noise, the normalized quantum Fisher information reaches, $\frac{F_Q}{N} = N$. Under amplitude damping, the decay is gradual and nearly independent of N. Phase damping causes a faster decay, more pronounced for smaller N. Depolarizing noise is the most destructive, significantly reducing QFI even at small p. These findings highlight the fragility of GHZ states against phase and depolarizing noises and their relative robustness against amplitude damping, with implications for robust quantum metrology.

***Keywords**: Quantum Fisher information, GHZ state, amplitude damping, phase damping, depolarizing, Kraus operators.*

PACS No. 3

۱.مقدمه

اطلاعات فیشر کوانتومی یک کمیت اساسی در نظریه تخمین پارامترهای کوانتومی است که حداکثر دقت قابل دستیابی در اندازه‌گیری یک پارامتر مجهول (مانند فاز) را تعیین می‌کند [۱].

برای یک حالت خالص $|\psi\rangle$ که تحت یک تحول یکانی $e^{-i\theta H}$ تکامل می‌یابد، اطلاعات فیشر کوانتومی با واریانس تولید کننده Hارتباط مستقیم دارد و برابر $F_Q = 4\Delta H^2$ در حالت‌های کاملاً درهم‌تنیده مانند GHZ، اطلاعات فیشر کوانتومی می‌تواند به

مقدار بیشینه $F_Q = N^2$ برسد. طبق کران کرامر–رائو، این مقدار منجر به کران پایینی برای واریانس تخمین‌گر به صورت $\Delta\theta \geq \frac{1}{N^2}$ یا معادل انحراف معیار $\Delta\theta \geq \frac{1}{N}$ می‌شود که با حد هایزنبرگ برای واریانس سازگار است. بنابراین $F_Q = N^2$ شرط لازم برای دستیابی به این حد محسوب می‌شود [۲]. با این حال، در سیستم‌های واقعی، نویزهای محیطی همواره حضور دارند و باعث کاهش همدوسی و در نتیجه کاهش اطلاعات فیشر می‌شوند. در این مقاله، اثر سه کانال نویز مهم – میرایی دامنه (اتلاف انرژی)، میرایی فاز (افت همدوسی فاز) و واقطبش (ترکیبی از خطاهای بیت و فاز) – را بر روی اطلاعات فیشر حالت‌های GHZ برای تعداد کیوبیت‌های ٤ تا ٧ بررسی می‌کنیم.

۲.۱ اطلاعات فیشر کوانتومی F_Q

برای ارزیابی حداکثر دقت ممکن در تخمین پارامترهای سیستم کوانتومی، از F_Q استفاده شد F_Q. حد پایین کرامر–رائو را برای واریانس تخمین‌گر تعیین می‌کند و برای یک ماتریس چگالی ρ که وابسته به پارامتر θ است، اطلاعات فیشر کوانتومی به صورت [۳]

$$F_Q(\rho_\theta) = 2\sum_{i\neq j}\frac{(\lambda_i-\lambda_j)^2}{\lambda_i+\lambda_j}\left|\langle\phi_i|\partial\rho_\theta|\phi_j\rangle\right|^2 \qquad (۱)$$

که در آن λ_i ، λ_j و ϕ_i ، ϕ_j به‌ترتیب مقادیر ویژه و بردارهای ویژه ρ هستند. در این مقاله پارامتر θ مربوط به چرخش حول محور z با عملگر J_z است. به دلیل تقارن حالت GHZ ، بیشینه F_Q در جهت z حاصل می‌شود. کمیت $\left(\frac{F_Q}{N}\right)$ بیشینه F_Q بر واحد ذره) به عنوان معیار کارایی سنجشی در نظر گرفته شده است.

۲.۲ کانال‌های میرایی در سامانه‌های کوانتومی

کانال‌های نویز با استفاده از نمایش عملگرهای کراوس مدل‌سازی می‌شوند. اثر نویز بر روی کل سیستم با اعمال ضرب تانسوری عملگرها روی هر کیوبیت و جمع‌گیری روی همه اندیس‌ها محاسبه می‌گردد [٤]:

$$\rho = \sum_{i_1,i_2,\ldots}(K_{i_1}\otimes K_{i_2}\otimes..)\rho_0(K_{i_1}\otimes K_{i_2}\otimes..)^\dagger \qquad (۲)$$

در ادامه عملگرهای کراوس برای هر نویز آورده شده است.

- **میرایی دامنه**

این کانال مدل رایج اتلاف انرژی به محیط است و موجب گذار از حالت $|1\rangle$ به $|0\rangle$ با احتمال p می‌شود. عملگرهای کراوس [٥]:

$$K_0 = \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \sqrt{1-p}\end{bmatrix},\ K_1 = \begin{bmatrix}0 & \sqrt{p}\\ 0 & 0\end{bmatrix} \qquad (۱)$$

در اینجا، p شدت میرایی دامنه را بیان می‌کند.

- **میرایی فاز**

این کانال بدون تغییر جمعیت‌ها، همدوسی فاز بین حالت‌های پایه را تضعیف می‌کند. عملگرهای کراوس: [٥].

$$K_0 = \sqrt{1-p}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix},\ K_1 = \sqrt{p}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix} \qquad (۳)$$

در اینجا، p شدت میرایی فاز را بیان می‌کند. اثر نویزها بر کل سیستم با ترکیب ضرب تانسوری این اپراتورها روی تمامی کیوبیت‌ها محاسبه خواهد شد.

- نویز واقطبش

این کانال به صورت تصادفی عملگرهای پائولی را روی کیوبیت اعمال می‌کند و حالت را به سمت بیشینه مختلط (حالت کاملاً تصادفی) می‌برد. عملگرهای کراوس [٦]:

$$K_0 = \sqrt{1-\frac{3p}{4}}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix},\ K_1 = \sqrt{\frac{p}{3}}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$$
$$K_2 = \sqrt{\frac{p}{3}}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix},\ K_3 = \sqrt{\frac{p}{3}}\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix} \qquad (۴)$$

در اینجا p شدت نویز واقطبش را بیان می‌کند.

۳. یافته ها

نتایج به صورت نمودارهای $\frac{F_Q}{N}$ بر حسب شدت نویز p برای هر سه کانال و مقادیر مختلف N ارائه می‌شود. در غیاب نویز $(p=0)$، مقدار $\frac{F_Q}{N}=N$ است. (برای $N=4$ مقدار ٤، $N=5$ مقدار ٥، و الی آخر).

۳،۱ نویز میرایی دامنه

با افزایش p، مقدار $\frac{F_Q}{N}$ به تدریج کاهش می‌یابد. منحنی‌ها برای Nهای مختلف تقریباً بر هم منطبق هستند، به این معنی که افت اطلاعات فیشر عمدتاً به p وابسته است و وابستگی ضعیفی به Nدارد. در $p=1$، مقدار نهایی برای همه N ها به حدود ۰،۷ تا ۰،۸ می‌رسد (کمی پایین‌تر برای N بزرگتر). این بدان معناست که حتی با نویز کامل میرایی دامنه، هنوز مقداری همدوسی و در نتیجه قابلیت سنجش باقی می‌ماند. میرایی دامنه عمدتاً با انتقال جمعیت از حالت برانگیخته به حالت پایه عمل می‌کند و در نتیجه به‌طور غیرمستقیم موجب کاهش همدوسی و اطلاعات فیشر کوانتومی می‌شود.

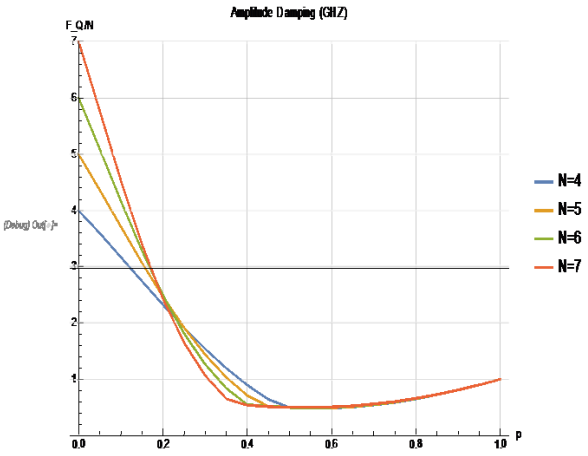
۳،۲ نویز میرایی فاز

شکل ۲ رفتار اطلاعات فیشر کوانتومی نرمال‌شده بر حسب تعداد ذرات $\frac{F_Q}{N}$ را برای حالت GHZ تحت کانال میرایی فاز نشان می‌دهد. با افزایش احتمال میرایی فاز، همدوسی میان مؤلفه‌های حالت GHZ به تدریج از بین می‌رود و در نتیجه مقدار $\frac{F_Q}{N}$ به صورت یکنواخت کاهش می‌یابد. در مقدار$(p=0)$ ، بیشترین مقدار اطلاعات کوانتومی فیشر مشاهده می‌شود که نشان‌دهنده بیشترین حساسیت حالت GHZ نسبت به پارامتر مورد اندازه‌گیری است. با افزایش شدت نویز، کاهش همدوسی موجب افت تدریجی اطلاعات فیشر می‌شود. همچنین اگرچه مقدار اولیه $\frac{F_Q}{N}$ برای سیستم‌های بزرگ‌تر بیشتر است، با افزایش شدت نویز همه منحنی‌ها روند کاهشی مشابهی را نشان می‌دهند.

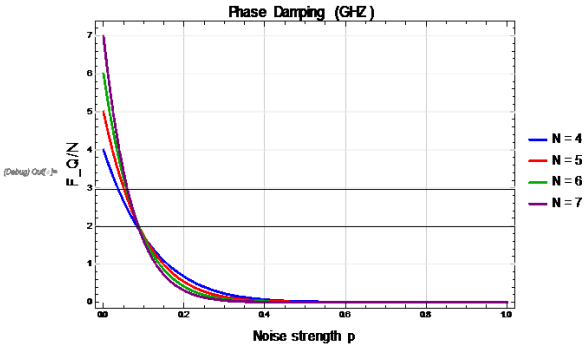
۳،۳ نویز واقطبش (شکل ۳)

نویز واقطبش مخرب‌ترین نویز در بین سه نوع است. برای همه Nها، با افزایش p، $\frac{F_Q}{N}$ به شدت کاهش می‌یابد. در $p=0.2$، مقدار برای $N=4$ حدود ۱ و برای $N=7$ حدود ۲،۵ است. در $p=0.4$ ، همه منحنی‌ها به زیر ۱ می‌رسند.

در $p=1$ ، همه مقادیر به صفر میل می‌کنند. واقطبش حالت را به سمت حالت بیشینه مخلوط (کاملاً تصادفی) می‌برد که در آن هیچ اطلاعات کوانتومی فیشری وجود ندارد. نکته مهم: حتی مقادیر کوچک p (مثلاً ۰،۱) باعث کاهش قابل توجه اطلاعات کوانتومی فیشر می‌شوند.

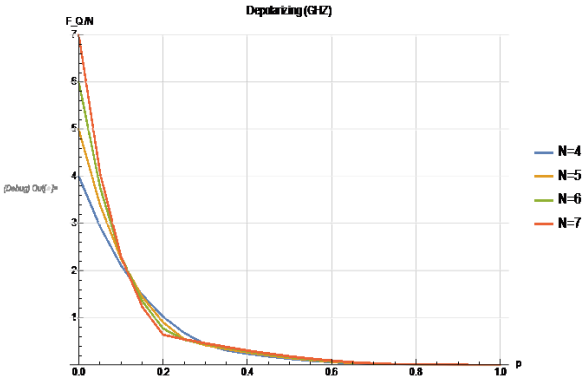


شکل ۱ :نمودار $\frac{F_Q}{N}$ بر حسب شدت نویز p در کانال میرایی دامنه.



شکل ۲ :نمودار $\frac{F_Q}{N}$ بر حسب شدت نویز p در کانال میرایی فاز.

نتایج عددی حاصل از شبیه‌سازی با عملگرهای کراوس، به‌خوبی با روابط تحلیلی موجود برای کانال‌های میرایی فاز و واقطبش در حالت‌های GHZ [۶] همخوانی دارد. همچنین، روند کاهشی F_Q با افزایش شدت نویز در این پژوهش، با نتایج تجربی گزارش‌شده در مرجع [۷] برای حالت‌های مشابه، سازگار است.



شکل ۳ : نمودار $\frac{F_Q}{N}$ بر حسب شدت نویز p در کانال واقطبش

٤.نتایج و بحث

یافته‌های این پژوهش برای طراحی پروتکل‌های سنجش کوانتومی مقاوم در برابر نویز و همچنین برای درک محدودیت‌های عملی حالت‌های GHZ در سیستم‌های واقعی حائز اهمیت است. مقایسه سه کانال نویز نشان می‌دهد که در میان سه کانال بررسی‌شده، میرایی دامنه کمترین کاهش اطلاعات فیشر را ایجاد می‌کند، در حالی که کانال واقطبش بیشترین افت اطلاعات فیشر را به همراه دارد. این موضوع با ماهیت فیزیکی این نویزها همخوانی دارد: میرایی دامنه عمدتاً با انتقال جمعیت از حالت برانگیخته به حالت پایه عمل می‌کند، در حالی که میرایی فاز و واقطبش مستقیماً همدوسی کوانتومی را تضعیف می‌کنند.

از نظر کاربردی، اگر هدف استفاده از حالت‌های GHZ برای سنجش‌های دقیق باشد، باید نویز واقطبش را به حداقل رساند، زیرا حتی مقادیر کوچک p نیز باعث تخریب شدید می‌شوند. در مقابل، در محیط‌هایی که میرایی دامنه غالب است، حالت‌های GHZ می‌توانند تا شدت‌های نویز نسبتاً بالا (مثلاً $p>0.5$) همچنان مقدار قابل توجهی از اطلاعات فیشر کوانتومی را حفظ می‌کنند. علاوه بر این، مقایسه سه کانال نویزی نشان می‌دهد که نوع برهم‌کنش نویز با حالت کوانتومی نقش تعیین‌کننده‌ای در حفظ حساسیت اندازه‌گیری دارد. در حالی که میرایی دامنه عمدتاً بر جمعیت حالت‌های برانگیخته اثر می‌گذارد و کاهش اطلاعات کوانتومی فیشر به‌صورت تدریجی رخ می‌دهد، کانال‌های میرایی فاز و به‌ویژه واقطبش با تخریب همدوسی کوانتومی، افت شدیدتری در اطلاعات فیشر ایجاد می‌کنند. این نتایج نشان می‌دهد که در طراحی سامانه‌های مترولوژی کوانتومی مبتنی بر حالت‌های GHZ، کنترل نویزهای مؤثر بر همدوسی کوانتومی، به‌ویژه نویز واقطبش، از اهمیت بیشتری نسبت به کاهش صرف نویزهای اتلاف انرژی برخوردار است.

٥.نتیجه گیری

در این مقاله، تأثیر سه نوع نویز کوانتومی (میرایی دامنه، میرایی فاز و واقطبش) بر F_Q حالت‌های GHZ برای تعداد ذرات ٤ تا ٧ به طور سیستماتیک بررسی شد. نتایج نشان داد:

در غیاب نویز، برای حالت GHZ مقدار $\frac{F_Q}{N}=N$ به دست می‌آید که متناظر با مقدار بیشینه اطلاعات فیشر برای این حالت است. نویز میرایی دامنه بدون وابستگی شدید به تعداد ذرات باعث کاهش تدریجی و آهسته اطلاعات فیشر می‌شود. نویز میرایی فاز موجب کاهش سریع اطلاعات فیشر کوانتومی می‌شود و رفتار آن به تعداد کیوبیت‌ها وابسته است. نویز واقطبش مخرب‌ترین است و برای $p>0.4$ عملاً اطلاعات فیشر را از بین می‌برد. این نتایج می‌تواند راهنمایی برای انتخاب حالت‌های درهم‌تنیده در حضور نویزهای خاص و نیز توسعه پروتکل‌های مقاوم‌سازی خطا در سنجش کوانتومی باشد.

٦.مراجع

[1] M. G. A. Paris, "Quantum estimation for quantum technology," *International Journal of Quantum Information*, vol. 7, p. 125, 2009.
[2] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*. Cambridge University Press, 2010. (Chapter 8)
[3] J. Liu, X. Jing, W. Zhong, and X. Wang, "Quantum Fisher information for density matrices with arbitrary ranks," *Physical Review A*, vol. 90, no. 4, p. 042126, 2014.
[4] M. M. Wilde, *Quantum Information Theory*, 2nd ed. Cambridge University Press, 2017. (Chapter 4)
[5] J. Preskill, *Lecture Notes for Physics 229: Quantum Information and Computation* (Caltech, 1998).
[6] F. Ozaydin, "Quantum Fisher Information of W States in Decoherence Channels," arXiv:1403.2376 [quant-ph], 2014.
[7] V. Vitale et al., "Estimation of the Quantum Fisher Information on a quantum processor," PRX Quantum, vol. 5, no. 3, p. 030338, 2024.

تنظیم سریع طول‌موج در SPOPO غیرهم‌خط BiBO با کنترل طول کاواک و بدون چرخش بلور

پورقباد، دلنیا[۱] ؛ قطبی، مسعود[۱]
[۱]دانشکده علوم پایه دانشگاه کردستان ، خیابان پاسداران ، سنندج

چکیده
در این مقاله، یک نوسانگر پارامتری نوری فمتوثانیه غیرهم‌خط با پمپاژ همزمان مبتنی بر بلور بیسموت بورات (BiB_3O_6) و جورشدگی فاز نوع I ($o\rightarrow e+e$) در صفحه‌ی yz ارائه شده است. نوسانگر توسط پالس‌های فمتوثانیه ۵۱۵ نانومتری حاصل از هماهنگ دوم لیزر Yb:KGW پمپ شده است. با بهره‌گیری از هندسه‌ی جورشدگی فاز غیرهم‌خط، تنظیم طول‌موج سیگنال بدون نیاز به چرخش بلور و تنها از طریق تغییر طول کاواک انجام شد. طول‌موج سیگنال به‌صورت پیوسته در بازه‌ی ۶۲۰ تا ۶۶۵ نانومتر و طول‌موج آیدلر به‌صورت همزمان در بازه‌ی ۲۲۸۰ تا ۳۰۴۰ نانومتر با تغییر طول کاواک در حدود ۱۲ میکرومتر تنظیم شد. نتایج نشان می‌دهد که این پیکربندی امکان تنظیم سریع، پیوسته و پایدار طول‌موج را -با سرعتی که صرفاً به پاسخ مکانیزم تنظیم طول کاواک است- در نوسانگر پارامتری نوری فمتوثانیه فراهم می‌کند.
واژه های کلیدی: نوسانگر پارامتری نوری فمتوثانیه، پمپاژ همزمان، پیکربندی غیرهم‌خط، تنظیم‌پذیری سریع

Rapid Wavelength Tuning in a Non-Collinear BiBO Based Synchronously Pumped Optical Parametric Oscillator via Cavity Length Control Without Crystal Rotation

Delnia, Pourghobad[1]; Masood, Ghotbi[1]

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

Abstract
In this paper, a non-collinear femtosecond synchronously pumped optical parametric oscillator (SPOPO) based on bismuth borate (BiB_3O_6) crystal with type-I phase matching ($o\rightarrow e+e$) in the yz optical plane is presented. The SPOPO is pumped by 515 nm femtosecond pulses derived from the second harmonic of a Yb:KGW laser. By exploiting the non-collinear phase-matching geometry, signal wavelength tuning is achieved without crystal rotation, solely by changing the cavity length of the SPOPO. The signal wavelength is continuously tuned over the range of 620–665 nm, while the idler wavelength is simultaneously tuned over the range of 2280–3040 nm, by approximate adjusting the cavity length in a 12 μm range. The results demonstrate that this configuration enables rapid, continuous and stable wavelength tuning in this SPOPO, where the tuning speed is governed solely by the response of the cavity length adjustment mechanism.
***Keywords**: optical parametric oscillator, synchronously pumped, non-collinear, rapid tuning*

PACS No.

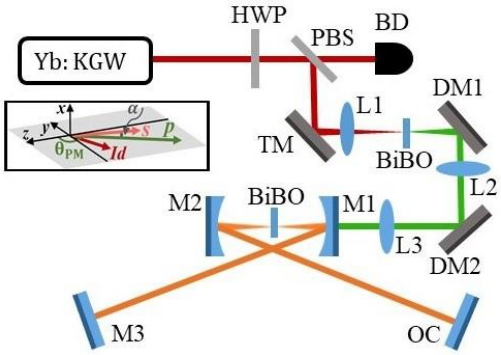
مقدمه
منابع فمتوثانیه‌ی تنظیم‌پذیر نقش مهمی در کاربردهایی نظیر طیف‌سنجی فوق‌سریع، میکروسکوپی غیرخطی، تصویربرداری زیستی و اندازه‌گیری‌های دقیق ایفا می‌کنند. در این میان، نوسانگرهای پارامتری نوری با پمپاژ همزمان (SPOPO) به دلیل قابلیت تولید پالس‌های فوق‌کوتاه با کیفیت پرتو بالا و پوشش گسترده‌ی طول‌موج، به یکی از مهم‌ترین منابع نوری تنظیم‌پذیر تبدیل شده‌اند [۱و۲]. تنظیم طول‌موج در اکثر نوسانگرهای پارامتری نوری از طریق تغییر شرایط جورشدگی فاز بلور غیرخطی انجام می‌شود که معمولاً

مستلزم چرخش بلور [۳] یا تغییر دمای آن است. اگرچه این روش‌ها امکان دسترسی به بازه‌های طیفی وسیع را فراهم می‌کنند، سرعت تنظیم را به فرآیندهای مکانیکی یا حرارتی محدود می‌سازند. در مقابل، تنظیم طول‌موج از طریق تغییر طول کاواک رویکردی بسیار سریع‌تر است؛ در این حالت طول‌موج خروجی تنها با کنترل تأخیر گروه میان پالس‌های در حال گردش در کاواک تغییر می‌کند [۴و۵]. جورشدگی فاز غیرهم‌خط به‌عنوان روشی کارآمد برای افزایش پهنای باند بهره‌ی پارامتری مورد توجه قرار گرفته است [۶] که در ترکیب با تغییر طول کاواک، امکان تنظیم سریع و پیوسته‌ی طول‌موج را بدون نیاز به تغییر شرایط جورشدگی فاز فراهم می‌کند.

در این پژوهش، یک نوسانگر پارامتری نوری فمتوثانیه غیرهم‌خط با پمپاژ همزمان فمتوثانیه (NC SPOPO) مبتنی بر بلور BiB_3O_6 (BiBO) در آرایش غیرهم‌خط ارائه می‌شود که در آن، تنظیم پیوسته‌ی طول‌موج (۶۲۰ تا ۶۶۵ نانومتر) و همزمان آیدلر (۲۲۸۰ تا ۳۰۴۰ نانومتر)، بدون چرخش بلور و صرفاً از طریق تغییر طول کاواک امکان‌پذیر است.

روش آزمایش

شکل۱ نمای کلی چیدمان آزمایشگاهی را نشان می‌دهد. منبع پمپ یک لیزر فمتوثانیه Yb:KGW با طول‌موج ۱۰۳۰ نانومتر، نرخ تکرار ۷۶ مگاهرتز، پهنای پالس ۱۰۰ فمتوثانیه و توان میانگین ۶٫۵ وات بود. برای کنترل توان ورودی، از ترکیب صفحه نیم‌موج و جدا کننده‌ی پرتو قطبیده (PBS) استفاده شد. پرتو ۱۰۳۰ نانومتر پس از تمرکز بر روی بلور BiBO با ضخامت ۱ میلی‌متر، به پالس‌های ۵۱۵ نانومتری با توان ۳۳۰۰ میلی‌وات (بازدهی ۵۰٪~) تبدیل شد و پس از حذف پرتو بنیادی توسط آینه‌های دورنگ، به‌عنوان پمپ همزمان نوسانگر به‌کار رفت. کاواک نوسانگر در پیکربندی X با چهار آینه طراحی شد. آینه‌های M_1 و M_2 مقعر با شعاع انحنای ۱۵۰ میلی‌متر پرتو را در داخل بلور BiBO با ضخامت ۰٫۸ میلی‌متر کانونی می‌کردند؛ آینه M_1 دارای عبوردهی بالا در طول‌موج پمپ (۵۱۵ نانومتر) و آینه خروجی (OC) بازتابندگی ۹۰٪~ در محدوده ۶۲۰ تا ۱۰۳۰ نانومتر داشت. با تنظیم زاویه‌ی غیرهم‌خط داخلی ۲٫۴ درجه، تنظیم پیوسته‌ی طول‌موج سیگنال (۶۲۰ تا ۶۶۵ نانومتر) و همزمان آیدلر (۲۲۸۰ تا ۳۰۴۰ نانومتر) صرفاً از طریق تغییر طول کاواک و بدون چرخش بلور انجام شد. پرتو آیدلر از طریق آینه‌ی M_2 که پوشش آن برای عبور در محدوده‌ی طول‌موجی آیدلر عبوردهی بالایی داشت، از کاواک استخراج گردید. طیف و توان خروجی به‌ترتیب با طیف‌سنج و توان‌سنج اندازه‌گیری شدند.



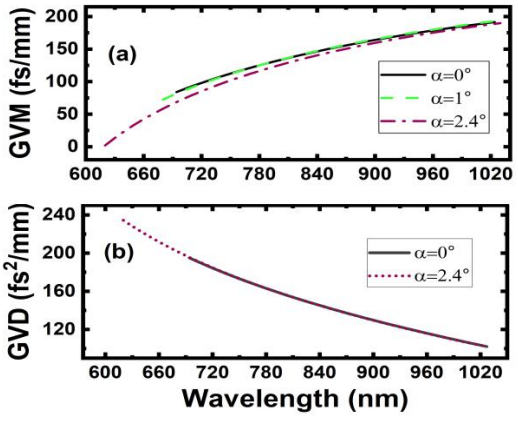
شکل۱ : نمای کلی چیدمان آزمایشگاهی نوسانگر پارامتری نوری. شکل داخلی: هندسه انتشار پرتوهای پمپ (p)، سیگنال (s) و آیدلر (id) برای جورشدگی فاز غیرهم‌خط در صفحه‌ی اپتیکی *yz* بلور BiBO. α: زاویه غیرهم‌خط پمپ و سیگنال. θ_{PM}: زاویه‌ی جورشدگی فاز.

بحث و نتایج

شکل۲ (الف) و ۲ (ب)، به ترتیب تغییرات عدم‌تطابق سرعت گروه (GVM) و پاشندگی سرعت گروه (GVD) را بر حسب طول‌موج سیگنال، برای مقادیر مختلف زاویه‌ی غیرهم‌خط α نشان می‌دهند. همان‌طور که از شکل۲ الف پیداست، در طول‌موج‌های کوتاه‌تر نزدیک به ۶۲۰ نانومتر، مقدار عدم‌تطابق سرعت گروه میان پرتوهای پمپ و سیگنال کاهش

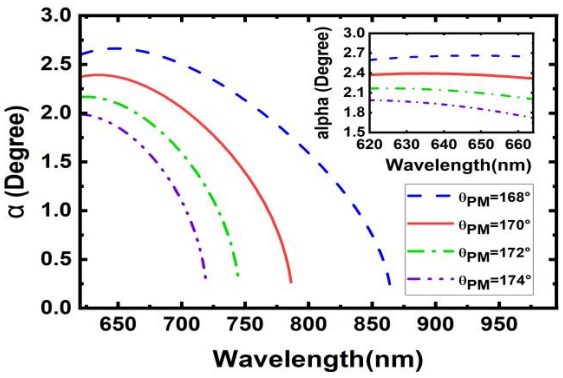
می‌یابد که به معنای همپوشانی زمانی بهتر و بهره‌ی پارامتری مؤثرتر در این ناحیه‌ی طیفی است. شکل۲ب نشان می‌دهد که با اعمال زاویه‌ی غیرهم‌خط، مقدار پاشندگی سرعت گروه در طول‌موج‌های کوتاه‌تر افزایش یافته و امکان گسترش تنظیم‌پذیری سیگنال تا حدود ۶۲۰ نانومتر فراهم شده، در حالی‌که در طول‌موج‌های بلندتر رفتار پاشندگی سرعت گروه تقریباً مشابه حالت هم‌خط باقی می‌ماند.

افزایش پاشندگی سرعت گروه منجر به پهن‌شدگی طیفی پالس‌های سیگنال در داخل کاواک می‌گردد. در نتیجه، کاواک در هر لحظه تنها قادر به پشتیبانی از بخشی از این طیف پهن است و با تغییر طول کاواک، شرط همزمانی برای طول‌موج مرکزی متفاوتی برآورده می‌شود؛ به‌گونه‌ای که پمپ در هر تأخیر گروه با بخش متفاوتی از طیف سیگنال همپوشانی زمانی پیدا می‌کند. به این ترتیب، تنظیم پیوسته‌ی طول‌موج خروجی صرفاً از طریق تغییر طول کاواک امکان‌پذیر می‌گردد. علاوه بر این، پهن‌شدگی طیفی حاصل از هندسه‌ی غیرهم‌خط، پشتیبانی از پالس‌های زمانی کوتاه‌تر را نیز میسر می‌سازد.



شکل۲ : تغییرات الف) عدم‌تطابق سرعت گروه بین امواج پمپ و سیگنال و ب) پاشندگی سرعت گروه، برحسب طول‌موج سیگنال در صفحه‌ی *yz*، برای آرایش هم‌خط و غیرهم‌خط.

شکل۳، زاویه‌ی غیرهم‌خط داخلی (α) را بر حسب طول‌موج سیگنال، به ازای زوایای مختلف جورشدگی فاز، برای جورشدگی فاز نوع I (o→e+e) در صفحه‌ی *yz* نشان می‌دهد. همان‌طور که از این شکل پیداست، منحنی متناظر با زاویه‌ی جورشدگی فاز $\theta_{PM}\approx170°$ در سراسر بازه‌ی ۶۲۰ تا ۶۵۵ نانومتر تقریباً مسطح بوده و مقدار ثابتی از α را حفظ می‌کند. (این ثبات در بازه‌ی ۶۲۰ تا ۶۶۵ نانومتر، همانطور که در شکل داخلی نمودار نشان داده شده، مشهود است). تنظیم‌پذیری پیوسته‌ی طول‌موج در این بازه ناشی از دو عامل است: از یک سو، پهن‌شدگی طیفی ناشی از پاشندگی القاشده‌ی غیرهم‌خط که پهنای طیفی پالس را گسترده‌تر می‌کند؛ و از سوی دیگر، ثابت ماندن شرط جورشدگی فاز در سراسر این بازه با همان زاویه‌ی $\alpha\approx2.4°$ که نیاز به چرخش بلور را حذف می‌کند. این رویکرد تفاوت اساسی با آرایش‌های هم‌خط دارد که در آن‌ها دستیابی به بازه‌ی مشابه مستلزم چرخش بلور و تنظیم مجدد زاویه‌ی جورشدگی فاز است.



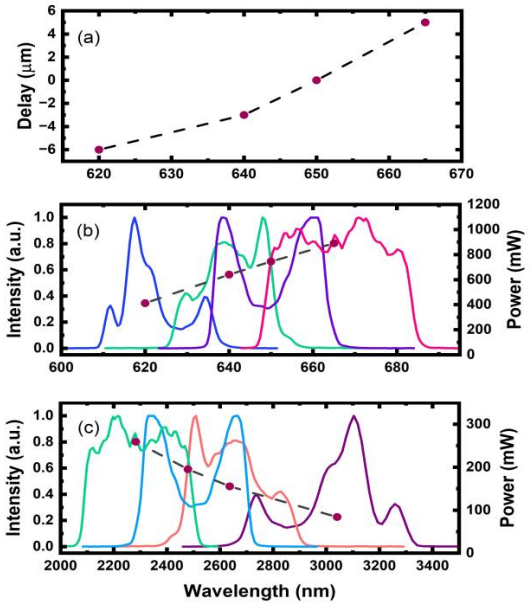
شکل۳ : منحنی‌های زاویه‌ی بین پرتو پمپ و سیگنال بر حسب طول‌موج در زوایای جورشدگی فاز مشخص. (نمای بزرگ شده: نمایش جزئیات ثبات زاویه در بازه‌ی ۶۲۰ تا ۶۶۵ نانومتر).

شکل۴ (الف) تغییرات تأخیر طول کاواک برحسب طول‌موج خروجی سیگنال را نشان می‌دهد که نشان‌دهنده‌ی تنظیم‌پذیری پیوسته‌ی طول‌موج صرفاً از طریق تغییر طول کاواک است. شکل۴ (ب)، طیف‌های ثبت‌شده‌ی سیگنال در چند طول‌موج منتخب در بازه‌ی ۶۲۰ تا ۶۶۵ نانومتر را به همراه توان خروجی متناظر نشان می‌دهد. نتایج نشان دادند که

با تغییر طول کاواک به اندازه‌ی ۱۲ میکرومتر، طول‌موج سیگنال در بازه‌ی ۶۲۰ تا ۶۶۵ نانومتر به صورت پیوسته قابل تنظیم است. همچنین توان خروجی سیگنال در این بازه، روندی افزایشی داشته و از حدود ۴۰۰ میلی‌وات در کوتاه‌ترین طول‌موج تا نزدیک به ۹۰۰ میلی‌وات در طول‌موج‌های بلندتر می‌رسد. کاهش توان در نزدیکی ۶۲۰ نانومتر به محدودیت طیفی پوشش آینه‌های کاواک نسبت داده می‌شود که در لبه‌های بازه‌ی طیفی (۶۲۰ تا ۱۰۳۰ نانومتر) افت بازدهی بازتابشی دارند. در نوسانگر پارامتری نوری، همزمان با نابودی یک فوتون پمپ، یک فوتون سیگنال و یک فوتون آیدلر تولید می‌شود و بقای انرژی به صورت رابطه‌ی (۱) برقرار است.

$$\omega_p=\omega_s+\omega_{id} \quad (۱)$$

بر این اساس، تنظیم طول‌موج سیگنال در بازه‌ی ۶۲۰تا۶۶۵ نانومتر به طور مستقیم منجر به تنظیم همزمان آیدلر در محدوده‌ی ۳۰۴۰ تا ۲۲۸۰ نانومتر می‌گردد.



شکل۴ : الف) تغییرات تأخیر کاواک برحسب طول‌موج. ب) طیف‌های سیگنال و توان خروجی متناظر در بازه‌ی ۶۲۰ تا ۶۶۵ نانومتر. پ) طیف‌های آیدلر و توان خروجی متناظر در بازه‌ی ۲۲۸۰ تا ۳۰۴۰ نانومتر.

توان خروجی آیدلر از حدود ۹۰ میلی‌وات در طول‌موج ۳۰۴۰ نانومتر تا حدود ۲۶۰ میلی‌وات در طول‌موج ۲۲۸۰ نانومتر متغیر است که در شکل۴(پ) نشان داده شده است.

نتیجه گیری

در این پژوهش، یک NC SPOPO مبتنی بر بلور BiBO با جورشدگی فاز نوع I (o→e+e) در صفحه‌ی *yz* و پمپاژ ۵۱۵ نانومتر با قابلیت تنظیم‌پذیری سریع طول‌موج ارائه شد. با بهره‌گیری از هندسه‌ی غیرهم‌خط، تنظیم‌پذیری پیوسته‌ی همزمان سیگنال (۶۲۰ تا ۶۶۵ نانومتر) و آیدلر (۲۲۸۰ تا ۳۰۴۰ نانومتر) تنها با تغییر طول کاواک در حدود ۱۲ میکرومتر و بدون چرخش بلور حاصل شد. توان خروجی سیگنال و آیدلر به ترتیب در محدوده‌ی ۴۰۰ تا ۹۰۰ و ۹۰ تا ۲۶۰ میلی‌وات بود. این نتایج نشان می‌دهد که تغییر طول کاواک روشی ساده و مؤثر برای تنظیم طول‌موج در نوسانگرهای پارامتری فمتوثانیه است که سرعت آن، برخلاف روش‌های مبتنی بر چرخش بلور یا تغییر دما، تنها به پاسخ مکانیزم جابجایی کاواک وابسته است.

مرجع ها

[1] 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., Vol. 42, No. 21 (2017) 4545-4548.
[2] F. Kienle, et al, “Compact, high-pulse-energy, picosecond optical parametric oscillator”, Opt. Lett., Vol. 35, No. 21 (2010) 3580-3582.
[3] D. Pourghobad and M. Ghotbi, “BiB3O6 high power femtosecond optical parametric oscillator pumped at 515nm with phase-matching inside the xz optical plane”, Opt. Lett., Vol. 50, No. 8 (2025) 2735-2738.
[4] T. Lang, , et al. "High power ultra-widely tuneable femtosecond pulses from a non-collinear optical parametric oscillator (NOPO)." Optics express, vol.20, No.2 (2012) 912-917.
[5] R. Mevert, Y. Binhammer, et al. “Widely tunable, high-power, femtosecond noncollinear optical parametric oscillator in the visible spectral range”, Photonics Research, Vol. 9, No. 9 (2021) 1715-1718.
[6] D. Pourghobad and M. Ghotbi, X. Mateos. "Tunability extension and pulse shortening by using a noncollinear configuration in a green-pumped BiB3O6 femtosecond optical parametric oscillator", Opt. Lett., Vol 51, No. 5 (2026) 1172-1175.

ترابرد کوانتومی ایمن حالت همدوس با منبع فشردهٔ گرمایی در محیط‌های اتلافی

عباس‌نژاد، فرخنده[۱]؛ مهربان‌کار، سمیه[۲]؛ افشار، داود [۱]

[۱] گروه فیزیک دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز

[۲] دپارتمان فیزیک نظری و IFIC، دانشگاه والنسیا-CSIC، اسپانیا

چکیده

در این مقاله، ترابرد کوانتومی ایمن یک حالت همدوس در یک سیستم گاوسی دومدیِ باز که با حمام فشردهٔ گرمایی اتلافی برهم‌کنش دارد، بررسی می‌شود. حالت فشردهٔ گرمایی دومدی به‌عنوان منبع ترابرد در نظر گرفته شده و تحول زمانی سیستم با استفاده از معادلهٔ لیندبلاد در تقریب مارکوفی و در قالب ماتریس هموردای گاوسی مطالعه می‌شود. امنیت ترابرد بر اساس تحقق همزمان شرط وفاداری بالاتر از حد کلاسیکی و وجود هدایت‌پذیری کوانتومی دوطرفه تعریف می‌گردد. نتایج نشان می‌دهند که افزایش فشردگی منبع موجب گسترش ناحیهٔ مجاز ترابرد ایمن و افزایش پایداری آن در برابر نوفه‌های محیطی می‌شود، در حالی که افزایش دما، فشردگی و اتلاف محیط، ناحیهٔ مجاز ترابرد ایمن را محدود می‌کند.

واژه های کلیدی: *ترابرد کوانتومی ایمن، وفاداری، فشردگی، هدایت‌پذیری کوانتومی.*

Secure quantum teleportation of a coherent state using a squeezed thermal resource in a dissipative environment

Abbasnezhad, Farkhondeh[1]; Mehrabankar, Somayeh[2]; Afshar, Davood[1]

[1] Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz
[2] Departamento de Física Teórica and IFIC, Universidad de Valencia-CSIC, 46100 Burjassot, Valencia, Spain

Abstract

In this paper, we investigate secure quantum teleportation of a coherent state in an open two-mode Gaussian system coupled to a dissipative squeezed thermal bath. A two-mode squeezed thermal state is considered as the shared resource, and the time evolution is studied using the Lindblad master equation within the covariance-matrix formalism under the Markovian approximation. Security is defined by the simultaneous fulfillment of a fidelity exceeding the classical bound and the presence of two-way quantum steering. Our results show that increasing the squeezing of the resource enhances robustness against environmental noise and enlarges the admissible region of secure teleportation, while higher bath temperature, squeezing, and dissipation reduce the duration of secure quantum teleportation.

***Keywords**: secure quantum teleportation, fidelity, squeezing, quantum steering.*

PACS No

مقدمه

ترابرد کوانتومی یکی از پروتکل‌های بنیادی در نظریهٔ اطلاعات کوانتومی است که امکان انتقال یک حالت کوانتومی را با استفاده از یک کانال کلاسیکی و یک منبع درهم‌تنیده فراهم می‌کند. در سال‌های اخیر، ترابرد کوانتومی با متغیرهای پیوسته به دلیل سادگی پیاده‌سازی، استفاده از ابزارهای اپتیکی خطی و دستیابی به وفاداری بالا، توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده است [۱]. در این چارچوب، حالت‌های گاوسی به‌عنوان منابع عملی و قابل کنترل، نقش مهمی در پیاده‌سازی پروتکل‌های ارتباطی کوانتومی دارند [۲،۳].

در شرایط واقع‌گرایانه، سیستم‌های کوانتومی ناگزیر با محیط برهم‌کنش داشته و تحت تأثیر نوفه و اتلاف قرار می‌گیرند. این اثرات می‌توانند وفاداری و امنیت ترابرد کوانتومی را به‌طور جدی کاهش دهند [٤]. از این‌رو، مفهوم ترابرد کوانتومی ایمن مطرح می‌شود که در آن علاوه بر وفاداری بالاتر از حد کلاسیکی، وجود همبستگی‌های

کوانتومیِ قوی‌تری نظیر هدایت‌پذیری کوانتومی ضروری است [۵،۶].

در این مقاله، ترابرد کوانتومی ایمن یک حالت همدوس در یک سیستم گاوسی دومدیِ باز که با حمام فشردهٔ گرمایی اتلافی جفت شده است، بررسی می‌شود. حالت فشردهٔ گرمایی دومدی به‌عنوان منبع ترابرد در نظر گرفته شده و تمرکز اصلی بر تحلیل تأثیر پارامترهای منبع و محیط بر ناحیهٔ مجاز زمانی ترابرد کوانتومی ایمن است.

حالت‌های گاوسی و تحول سیستم باز

حالت‌های گاوسیِ دومدی زیر مجموعه‌ای از حالت‌های سیستم‌های پیوسته هستند که با توابع ویگنر گاوسی توصیف می‌شوند [۷]. این حالت‌ها در فضای فاز با ابعاد محدود توسط ماتریس هموردای زیر که حقیقی، بلوکی و متقارن است، توصیف می‌شوند [۸]:

$$\sigma_{AB}=\begin{pmatrix} A & C \\ C^T & B \end{pmatrix} \qquad (۱)$$

که در آن $A=\mathrm{diag}(a,a)$ و $B=\mathrm{diag}(b,b)$ ماتریس هموردای مد اول و دوم و $C=\mathrm{diag}(c,-c)$ ماتریس همبستگی بین دو مد در شکل استاندارد هستند. به طور کلی برای اینکه ماتریس هموردای σ متناظر با یک حالت فیزیکی باشد، باید در شرط عدم قطعیت رابرتسون- شرودینگر زیر صدق کند [۸]:

$$\sigma+i\Omega\geq 0,\ \Omega=\bigoplus_{K=1}^{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (۲)$$

سیستم باز را متشکل از دو نوسانگر هماهنگ مستقل جفت شده به یک محیط بوزونی در حالت فشردهٔ گرمایی، در نظر می‌گیریم. این سیستم با هامیلتونی زیر توصیف می‌شود:

$$H=\sum_{i=1}^{2}\hbar\omega a_i^{\dagger}a_i+\sum_j\hbar\omega_j b_j^{\dagger}b_j+\sum_{i=1}^{2}\hbar(\Gamma a_i^{\dagger}+\Gamma^{\dagger}a_i) \qquad (۳)$$

که در آن $\Gamma=\sum_j g_j b_j$، $a^{\dagger}$ و a عملگرهای آفرینش و نابودی سیستم، $b^{\dagger}$ و b همان عملگرها برای محیط، ω و ω_j به‌ترتیب فرکانس مدهای سیستم و مدهای محیط، و g_j قدرت برهم‌کنش سیستم و محیط هستند. واحدها را طوری انتخاب کرده‌ایم که $\hbar=\omega=m=k=1$ باشند. تحول این سیستم برحسب ماتریس هموردا از معادلهٔ لیندبلاد به‌دست می‌آید به گونه‌ای که داریم [۹]:

$$\sigma(t)=\Gamma\sigma(0)+(1-\Gamma)\sigma(\infty),\Gamma=\oplus_{i=1}^{2}e^{-\frac{\gamma t}{2}}diag(1,1) \qquad (۴)$$

که در آن $\sigma(0)$ و $\sigma(\infty)$ حالت اولیه و نهایی سیستم هستند و γ ضریب اتلاف محیط می‌باشد.

هدایت‌پذیری

هدایت‌پذیری کوانتومی، نوعی همبستگی کوانتومی نامتقارن در سیستم‌های دو بخشی است، که امکان هدایت حالت یک زیرسیستم را از طریق اندازه‌گیری‌های موضعی روی زیرسیستم دیگر بدون برهم‌کنش کلاسیکی و انتقال اطلاعات، فراهم می‌کند [۱۰]. بنابراین حالت‌های هدایت‌پذیر در فرآیندهایی که اندازه‌گیری‌های یکی از زیرسیستم‌ها قابل اعتماد نیست، مانند توزیع کلید کوآنتومی، تشخیص کانال و ترابرد کوانتومی ایمن مفید هستند [۱۱].

هدایت‌پذیری مد B وقتی اندازه‌گیری‌های موضعی روی مد A انجام شود با استفاده از رابطهٔ تحلیلی زیر به‌دست می‌آید [۱۲]:

$$S^{A\to B}(\sigma_{AB})=\max\{0,\frac{1}{2}Ln\frac{\det A}{4\det\sigma_{AB}}\} \qquad (۵)$$

با جابجایی نقش زیرسیستم‌های A و B در رابطهٔ بالا، هدایت‌پذیری در جهت دیگر به‌دست می‌آید.

وفاداری و ترابرد کوانتوی ایمن

ترابرد کوانتومی یک حالت همدوس با منبع فشردهٔ گرمایی را در نظر می‌گیریم. ماتریس هموردای حالت همدوس ورودی به‌صورت زیر است:

$$\sigma_{in}=diag(1/2,1/2) \qquad (۶)$$

در فرایند ترابرد کوانتومی حالت منبع تحت تأثیر محیط قرار می‌گیرد و تحول زمانی آن با استفاده از رابطهٔ (۵) به‌دست می‌آید:

$$\sigma_{AB}(t)=\begin{pmatrix} A(t) & C(t) \\ C^T(t) & B(t) \end{pmatrix} \qquad (۷)$$

که در آن:

$$A(t)=\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix},B(t)=\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}$$
$$C(t)=\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix} \qquad (۸)$$

بنابراین حالت همدوس انتقال‌یافته به‌صورت زیر خواهد بود [۱۳]:

$$\sigma_{out}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}+A_{11}+B_{11}-2C_{11} & C_{21}+B_{12}-A_{12}-C_{12}\\ C_{21}+B_{12}-A_{12}-C_{12} & \frac{1}{2}+A_{22}+B_{22}+2C_{22}\end{pmatrix} \quad (۹)$$

وفاداری معیاری برای تعیین کمی شباهت بین حالت‌های کوانتومی ρ_1 و ρ_2 است که در بازهٔ $0\le F(\rho_1,\rho_2)\le 1$ قرار می‌گیرد و $F=1$ به معنای $\rho_1=\rho_2$ است. وفاداری برحسب ماتریس هموردای حالت‌های ورودی و خروجی از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید [۱۳]:

$$F=\frac{1}{\sqrt{MN-O^2}} \quad (۱۰)$$

که در آن

$$\begin{aligned}M&=1+A_{11}+B_{11}-2C_{11},\\ N&=1+A_{22}+B_{22}+2C_{22},\\ O&=C_{21}+B_{12}-A_{12}-C_{12}\end{aligned} \quad (۱۱)$$

ترابرد کوانتومی که حالت را بدون تغییر و از دست رفتن اطلاعات منتقل کند، ترابرد کوانتومی ایمن (SQT) نامیده می‌شود. برای تضمین SQT، لازم است وفاداریِ ترابرد بالاتر از حد کلاسیکی ۲/۳ باشد [۶]. از طرفی به اشتراک گذاشتن یک منبع درهم‌تنیده حیاتی است و اثبات شده که هدایت‌پذیری دوطرفه که همبستگی‌ای قوی‌تر از درهم‌تنیدگی است برای دست‌یابی به SQT ضروری است [۱۴]. این شرایط را می‌توان به‌صورت خلاصهٔ زیر نوشت:

$$\mathcal{L}>0,\ \mathcal{L}=\min\{S^{A\to B},S^{B\to A},F-\frac{2}{3}\} \quad (۱۲)$$

حالت فشردهٔ گرمایی را به عنوان منبع ترابرد در نظر می‌گیریم. عناصر ماتریس هموردای این حالت به‌صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\begin{aligned}a&=n_1(1+\sinh^2 r)+n_2\sinh^2 r+(\sinh^2 r+\frac{1}{2})\\ b&=n_2(1+\sinh^2 r)+n_1\sinh^2 r+(\sinh^2 r+\frac{1}{2})\\ c&=(1+n_1+n_2)\sqrt{\sinh^2 r(1+\sinh^2 r)}\end{aligned} \quad (۱۳)$$

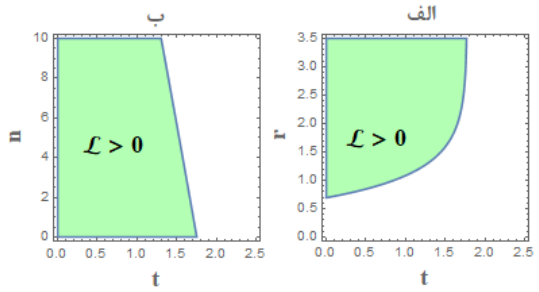
که در آن r، n_1 و n_2 به‌ترتیب پارامترهای فشردگی و متوسط فوتون‌های گرمایی مد اول و دوم هستند. همچنین ماتریس هموردای حالت حمام فشردهٔ گرمایی به‌صورت زیر است:

$$\sigma(\infty)=\begin{pmatrix}(N+1/2)I_2 & M\sigma_z\\ M\sigma_z & (N+1/2)I\end{pmatrix} \quad (۱۴)$$

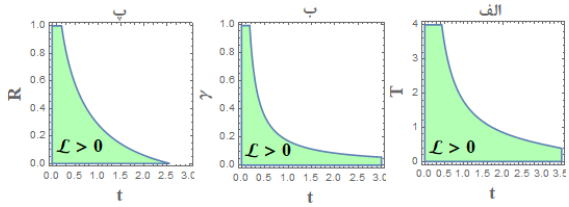
که σ_z ماتریس پائولی در راستای z است و N و M به‌صورت زیر هستند:

$$\begin{aligned}N&=n_{th}(\cosh^2 R+\sinh^2 R)+\sinh^2 R\\ M&=-(2n_{th}+1)\cosh R\sinh R\end{aligned} \quad (۱۵)$$

که R و $n_{th}=\frac{1}{2}(\coth\frac{1}{2T}-1)$ به‌ترتیب پارامتر فشردگی و متوسط فوتون‌های گرمایی محیط هستند. همچنین T در n_{th} دمای محیط است. با استفاده از معادلهٔ (٤) تحول حالت منبع سیستم به‌دست می‌آید. سپس با استفاده از روابط (۵)، (۱۰) و(۱۱) تحول هدایت‌پذیری و وفاداری به‌صورت تابعی از پارامترهای منبع و محیط محاسبه می‌شوند. در شکل ۱ محدودهٔ زمانی ناحیهٔ $\mathcal{L}>0$ نسبت به پارامترهای فشردگی و تعداد فوتون‌های گرمایی منبع رسم شده است. با توجه به ناحیهٔ سبز رنگ درمی‌یابیم که با افزایش r ناحیهٔ $\mathcal{L}>0$ گسترش می‌یابد، زیرا فشردگی بیشترِ منبع، موجب تقویت هدایت‌پذیری و افزایش مقاومت سیستم در برابر نوفه‌های محیط می‌شود. در مقابل، با افزایش تعداد فوتون‌های گرمایی n یا به عبارتی دمای منبع، ناحیهٔ $\mathcal{L}>0$ محدود می‌شود و دوام ترابردِ ایمن کاهش می‌یابد. بنابراین منابع سرد و فشرده برای ترابرد کوانتومی اهمیت زیادی دارند.



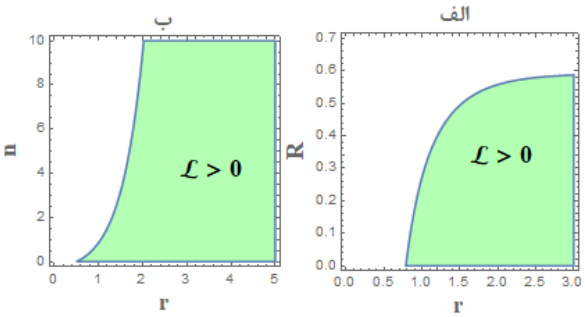
شکل ۱: ناحیهٔ مجاز SQT برحسب زمان و (الف)، فشردگی برای مقادیر $T=1,\ R=0.1,\ n_1=n_2=0.5,\ \gamma=0.1$ و (ب)، فوتون‌های گرمایی منبع برای مقادیر $T=1,\ R=0.1,\ r=2.5,\ \gamma=0.1$.



شکل ۲: ناحیهٔ مجاز SQT برحسب زمان و (الف)، دمای محیط برای مقادیر $\gamma=0.1,\ R=0.1,\ n_1=n_2=0.5$, r=2.5، (ب)، ضریب اتلاف محیط برای مقادیر

$n_1 = n_2 = 0.5$, $R = 0.1$, r=2.5, $T = 1$ و (پ)، فشردگی محیط برای مقادیر $T = 1$, $\gamma = 0.1$, $n_1 = n_2 = 0.5$, r=2.5.

در شکل ۲ محدودهٔ زمانی ناحیهٔ $\mathcal{L} > 0$ نسبت به پارامترهای محیط (دما، ضریب اتلاف و فشردگی) بررسی شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش پارامترهای محیط ناحیهٔ مجاز به طور یکنواخت کوچکتر می‌شود، بنابراین حفظ ترابرد کوانتومی ایمن درسیستم‌های باز با حمام فشرده گرمایی، تنها در ناحیه‌های کم‌نوفه امکان‌پذیر است.



شکل ۳: ناحیهٔ مجاز SQT در لحظهٔ $t = 0.5$ بر حسب (الف)، فشردگی محیط و منبع برای مقادیر $T = 1$, $n_1 = n_2 = 0.5$, $\gamma = 0.1$، (ب)، فشردگی منبع و تعداد فوتون‌های گرمایی برای مقادیر $T = 1$, $R = 0.1$, $t = 0.5, \gamma = 0.1$

همچنین در شکل ۳ الف، ناحیه مجاز SQT در یک لحظهٔ معین برحسب فشردگی منبع و محیط مقایسه شده است. مشخص است که در حالی که با افزایش فشردگی منبع ناحیهٔ مجاز SQT گسترش می‌یابد، اما با افزایش فشردگی محیط شرط $\mathcal{L} > 0$ نقض می‌شود. بنابراین با افزایش فشردگی حالت اولیه، پایداری SQT در مقابل نوفهٔ محیط فشردهٔ گرمایی تقویت می‌شود. در شکل ۳ ب شرط SQT بر حسب فشردگی و متوسط فوتون‌های گرمایی حالت منبع مقایسه شده است. مشاهده می‌شود با افزایش فوتون‌های گرمایی ناحیهٔ مجاز SQT محدودتر می‌شود در صورتی که با افزایش r ناحیه مجاز گسترش می‌یابد. بنابراین اگر نوفهٔ حرارتی بالا باشد حالت منبع باید فشردگی بالاتری برای تأمین شرط ایمن بودن ترابرد کوانتومی داشته باشد.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، ترابرد کوانتومی ایمن یک حالت همدوس در یک سیستم گاوسی دومدیِ باز که با حمام فشردهٔ گرمایی اتلافی برهم‌کنش دارد، مطالعه شد. با استفاده از معادلهٔ لیندبلاد و معیارهای وفاداری و هدایت‌پذیری کوانتومی، ناحیهٔ مجاز زمانی ترابرد ایمن تعیین گردید. نتایج نشان می‌دهند که فشردگی منبع نقش کلیدی در پایداری ترابرد ایمن ایفا می‌کند، در حالی که نوفه‌های محیطی نظیر دما، فشردگی و اتلاف، اثر مخربی بر امنیت ترابرد دارند. این یافته‌ها بر اهمیت استفاده از منابع فشرده و کم‌دما برای تحقق ترابرد کوانتومی ایمن در سیستم‌های باز تأکید می‌کنند.

مرجع‌ها

[1] T. Gonzalez-Raya, S. Pirandola, and M. Sanz; “Satellite-based entanglement distribution and quantum teleportation with continuous variables”; *Commun. Phys.* 7 (2024), 126.
[2] A. Fujimoto and H. Ichihara; “Transfer of squeezed coherent state using quantum teleportation of continuous variables”; *SICE Journal of Control, Measurement, and System Integration* 17 (2024), 2360285.
[3] A. Furusawa, J.L. Sørensen, S.L. Braunstein, C.A. Fuchs, H.J. Kimble, E.S.Polzik, A.Furusawa; “Unconditional quantum teleportation” *Science* 282 (1998), 706–709.
[4] S. Mehrabankar, P. Mahmoudi, F. Abbasnezhad, D. Afshar and A. Isar; “Effect of noisy environment on secure quantum teleportation of unimodal Gaussian states”; *Quantum Information Processing* 23 (2024) 343.
[5] A. Zubarev, M. Cuzminschi, and A. Isar; “Secure Quantum Teleportation of Squeezed Thermal States”; *Symmetry* 17 (2025), 1804.
[6] F. Grosshans and P. Grangier; “Quantum cloning and teleportation criteria for continuous quantum variables*”; Phys. Rev. A 64, No*. 1 (2001) 010301.
[7] Gerardo Adesso, Sammy Ragy, and Antony R. Lee; " Continuous variable quantum information: gaussian states and beyond" ; *Open Syst.Inf. Dyn.* 21, (2014) 1440001-1–47.
[8] G. Adesso and F. Illuminati; "Entanglement in continuous variable systems: Recent advances and current perspectives"; *J. Phys. A: Math.Theor*. 40, (2007) 7821– 7880.
[9] A. Sandulescu, H. Scutaru and W. Scheid; "Open quantum system of two coupled harmonic oscillators for application in deep inelastic heavy ion collisions"; *J. Phys. A: Math.* Gen 20 (1987), 2121-2123.
[10] A. Einstein, B.Podolsky, N. Rosen; “Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?”; *Phys. Rev.* 47 (1935), 777.
[11] S.J. Jones, H.M.Wiseman, A.C. Doherty;” Entanglement, Einstein-Podolsky-Rosen correlations, Bell nonlocality, and steering.”; *Phys. Rev. A* 76 (2007), 052116.
[12] I. Kogias, A.R. Lee, S. Ragy, and G. Adesso; “Quantification of Gaussian quantum steering”; *Phys. Rev. Lett.* 114 (2015), 060403.
[13] G. He, J. Zhang, J. Zhu and G. Zeng; “Continuous-variable quantum teleportation in bosonic structured environments”; *Phys. Rev. A* 84 (2011) 034305.
[14] Q. He, L. Rosales-Zárate, G. Adesso and M. D. Reid; “Secure Continuous Variable Teleportation and Einstein-Podolsky-Rosen Steering”; Phys. Rev. Lett. 115 (2015) 180502.

بررسی جمعیت کوانتومی و بازده تبدیل در مبدل کوانتومی امواج مایکروویو به امواج اپتیکی

کاظمی ، علی [۱] ؛ کدیور، عرفان[۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز، بلوار مدرس، شیراز

چکیده

در این مطالعه، دینامیک جمعیت کوانتومی در یک مبدل هیبریدی پیزواپتومکانیکی با استفاده از معادله اصلی لیندبلاد مدل‌سازی شده است. مدل پیزواپتومکانیکی طراحی‌شده با وجود افت کیفیت فاکتور در برخی فرکانس‌ها، توانسته است نرخ جفت‌شدگی اپتومکانیکی را در محدوده ۱/۵ تا ۲/۲ مگاهرتز حفظ کرده و بازده تبدیل را به‌طور چشمگیری افزایش دهد. حل معادله مستر لیندبلاد نشان می‌دهد که در فرکانس‌های تشدید انتخاب‌شده، جمعیت فوتونی خروجی و کارایی تبدیل تا حدود ۳۵ درصد بهبود می‌یابد.

واژه های کلیدی: *جفت‌شدگی پیزوالکتریک ، مبدل کوانتومی مایکروویو به اپتیکی ، جمعیت کوانتومی*

Investigation of Quantum population and conversion efficiency in a microwave-to-optical quantum transducer

Kazemi, Ali[1]; Kadivar, Erfan[1]

[1] Department of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz

Abstract

In this study, the quantum population dynamics in a hybrid piezo-optomechanical transducer are modeled using the Lindblad master equation. Despite a reduction in quality factor at certain frequencies, the designed piezo-optomechanical structure maintains an optomechanical coupling rate in the range of 1.5 to 2.2 MHz, leading to a significant enhancement in conversion efficiency. The solutions to the Lindblad master equation further indicate that, at the selected resonance frequencies, the output photonic population and overall conversion performance improve by up to 35%.

Keywords: Piezoelectric Coupling, Microwave-to-Optical Quantum Conversion , *Quantum Population*

PACS No 77

مقدمه

تحقق شبکه‌های کوانتومی توزیع‌شده نیازمند واسطه‌هایی است که بتوانند حالت‌های کوانتومی را بین پردازنده‌های مایکروویو و کانال‌های اپتیکی منتقل کنند؛ فرآیندی که در آن حفظ ماهیت کوانتومی سیگنال (مانند درهمتنیدگی و برهمنهی) وابسته به کنترل دقیق دینامیک سیستم است[۱]. در سال‌های اخیر، پیشرفت های قابل توجهی در حوزه مبدل‌های پیزواپتومکانیکی صورت گرفته است. در یکی از رویکردهای نوین جیانگ[۱] و همکاران با بهره گیری از پلتفرم لیتیوم نیوبات روی سیلیکون و ترکیب موجبرهای مکانیکی و بلور های اپتومکانیکی، موفق به دستیابی به بازده تبویل دو طرفه‌ای تا ۵/۵ درصد شدند[۲]. با این حال، چالش اصلی در این سامانه‌ها این است که تبدیل مایکروویو به اپتیکی به‌گونه‌ای انجام شود که تقریباً تمام انرژی یا فوتونِ ورودی به‌طور کامل به خروجی اپتیکی منتقل شود.

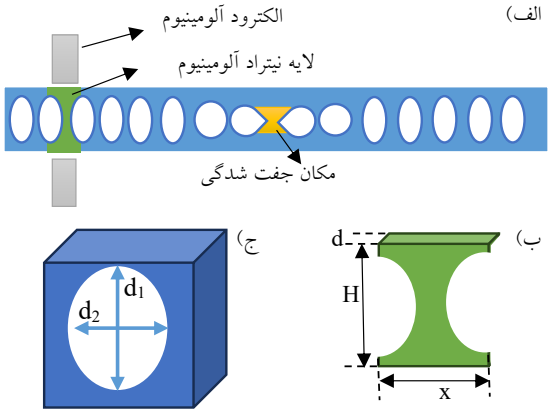
[۱] Jiang

در عین حال باید جمعیت کوانتومی مدهای مکانیکی و الکترومغناطیسی به‌صورت دقیق کنترل شود تا حالت فوتونی پس از تبدیل دچار افت کیفیت یا تغییر نشود[۳].

در این مطالعه، یک مبدل مبتنی بر سامانه پیزواپتومکانیکی طراحی و پیاده‌سازی شده است. داده‌ها در بازه‌های مختلف کاریِ دستگاه گردآوری شده و برای هر بخش، مقادیر مربوط به بازده تبدیل، جمعیت کوانتومی مدهای فعال و همچنین میزان برهم‌کنش میان حالت‌های مختلف سامانه محاسبه و تحلیل شده است.

مدل فیزیکی و معادلات حرکت

در مرحله اول با استفاده از نرم افزار شبیه سازی کامسول سیستم مبدل کوانتومی امواج تک فوتون مایکروویو به اپتیکی طراحی و پیاده سازی شده است. اجزای اصلی این سیستم از سه بخش اصلی حفره‌های مایکروویو، فونونی و فوتونی تشکیل شده است (شکل ۱).



شکل ۱) طرح واره‌ای از اجزای مختلف ساختار
الف) طرح تبدیل مایکروویو به اپتیکی با جفت‌شدگی اپتومکانیکی
ب) لایه آلومینیوم نیتراد
ج) قطرهای کوچک و بزرگ حفره‌ها

ساختار سیستم مبتنی بر پیزواپتومکانیک است که در آن لایه آلومینیوم نیتراد نقش پیزوالکتریک را ایفا می‌کند. اینه لایه، فوتون مایکروویو اعمال شده از طریق الکترود های آلومینیومی را دریافت کرده و به ارتعاشات مکانیکی(فونون) تبدیل می‌کند. سپس این فونون‌ها از طریق موجبر الماسی به بخش اپتومکانیکی سیستم که شامل حفره‌های فونونی و فوتونی است، هدایت می‌شوند. در این بخش بخش برهم‌کنش بین مدهای مکانیکی و نوری، جفت‌شدگی مورد نیاز برای تبدیل نهایی امواج مایکروویو به امواج اپتیکی را با کارایی بالا فراهم می‌آورد. در این ساختار، هشت حفره فونونی به صور متقارن در میانه موجبر تعبیه شده‌اند و بیست حفره مایکروویو و فوتونی نیز به ترتیب در دو طرف آن قرار گرفته‌اند که حفره های مایکروویو در مجاورت آینه‌ها طراحی شده‌اند(شکل ۱). حفره‌ها بر اساس قطرهای بزرگ و کوچک بیضی(شکل ۱ ج) به ترتیب ۸٤/۳۰ و ۲۹٤/۹۸ نانومتر و فاصله ۲٤۷/۵٦ نانومتر از یکدیگر قرار گرفته‌اند. ابعاد لایه پیزوالکتریک، الکترود آلومینیوم و زیر لایه الماس در جدول ۱ آمده اند:

جدول ۱: ابعاد ساختار مبدل کوانتومی

توضیحات	ضخامت (nm)	ارتفاع (nm)	طول (nm)	
لایه پیزوالکتریک	30	389.17	226.96	AlN
الکترود آلومینیوم	200	2105.4	250	Al
زیر لایه الماس	100	389.17	11767	Diamond

حفره‌های اپتومکانیکی به صورت تغییر در قطرهای بیضی تشکیل شده‌اند که طرح متمرکز کننده برای ایجاد جفت‌شدگی قوی بین مدهای مکانیکی و نوری به خود بگیرند.

برای تعیین نرخ جفت‌شدگی پیزوالکتریک، از محاسبه هم‌پوشانی میان میدان الکتریکی و میدان جابه‌جایی استفاده شده است. این کمیت مطابق رابطه‌ی زیر ارزیابی می‌شود[٤]:

$$G = \frac{1}{2\hbar}\int (t^*(r)K^t e(r) + e^*(r)Kt(r))\,dV \qquad (۱)$$

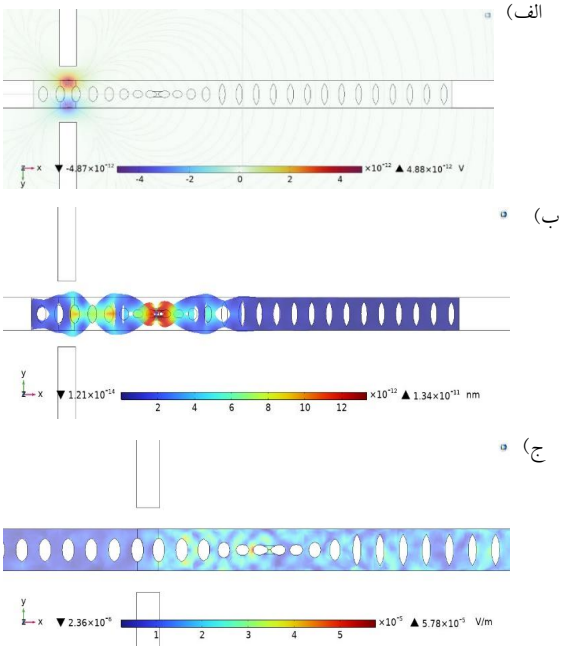
در این رابطه، G بیانگر نرخ جفت‌شدگی میان حوزه مایکروویو و اپتیکی، e معرف میدان الکتریکی و K نیز تانسور جفت‌شدگی پیزوالکتریک را نشان می‌دهد. همچنین فاکتور کیفیت بر اساس نسبت بخش حقیقی و موهومی فرکانس مایکروویو به دست می‌آید.

در این مطالعه از روش المان محدود(FEM) برای طراحی و شبیه سازی مبدل کوانتومی مبتنی بر ساختار پیزواپتومکانیکی استفاده شده است که در آن فرکانس های تشدید برای فوتون‌های اپتیکی، مایکروویو و فونون ها به ترتیب ٤۷۰ تا ٤۸۰ تراهرتز و ۱۲ تا ۱۳ گیگاهرتز بر اساس مقادیر مختلف تعداد حفره‌های مایکروویو و اپتیکی در نظر گرفته شده است. ورودی سیستم به این گونه است که ابتدا فوتون مایکروویو از طریق الکترود آلومینیوم اعمال می‌گردد

و سپس توسط لایه پیزوالکتریک آلومینیوم نیتراد دریافت و به فونون تبدیل شده و به موجبر انتقال داده می شود و در نهایت با استفاده از جفت‌شدگی در حفره‌های اپتومکانیکی به فوتون اپتیکی تبدیل می‌شود.

نتایج و بحث

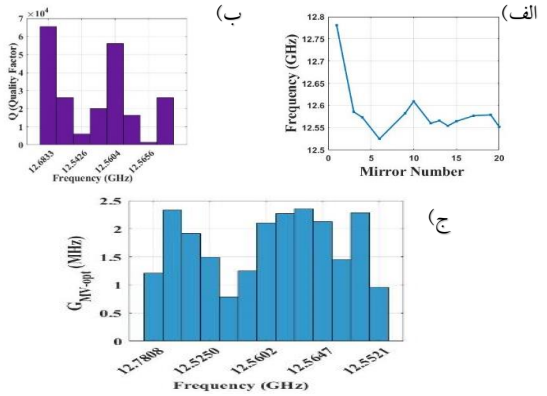
نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های طراحی مبدل کوانتومی پیزواپتومکانیکی با استفاده از نرم‌افزار کامسول استخراج شده است. در گام نخست، سامانه با در نظر گرفتن سیزده حفره مایکروویو تحلیل شد و توزیع میدان‌های مربوطه به‌دست آمد.



شکل۲ : رفتار توزیع میدان و پارامترهای مرتبط در نانوساختار مورد مطالعه
الف) توزیع پتانسیل الکتریکی در لایه پیزوالکتریک برای دریافت فوتون مایکروویو
ب)توزیع جابجایی مد مکانیکی برای انتقال فونون به متمرکز کننده‌ها
ج)توزیع میدان الکتریکی برای تبدیل به فوتون اپتیکی

نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که در فرکانس تشدید ۱۲/۵۶ گیگاهرتز، میدان مایکروویو به‌طور مؤثری در لایه پیزوالکتریک متمرکز شده و به ارتعاشات مکانیکی (فونون) تبدیل می‌شود. این ارتعاشات با تمرکز شدید در حفره‌های اپتومکانیکی، امکان جفت‌شدگی کارآمد با الکترون‌های مرکز رنگی در الماس را فراهم می‌کنند. در نهایت، در فرکانس ٤٧٩/٢٤ تراهرتز، میدان اپتیکی در حجم فوق‌کوچک همان حفره‌ها به‌دقت محدود شده که تبدیل کوانتومی فوتون‌های مایکروویو به فوتون‌های اپتیکی را با کارایی بالا محقق می‌سازد.

در ادامه این مطالعه نتایج فرکانس تشدید مختلف را بر اساس تعداد حفره‌های مایکروویو (آینه ها) به دست آمده است و برای هر فرکانسی نرخ جفت‌شدگی و فاکتور کیفیت طبق معادله۱ محاسبه شده است.



شکل۳: نتایج متفاوت بر اساس مقادیر مختلف
الف)نمودار فرکانس بر حسب تعداد آینه‌ها، ب)نمودار فاکتور کیفیت بر حسب فرکانس، ج)نمودار نرخ جفت‌شدگی برحسب فرکانس

همان‌گونه که در شکل۳ مشاهده می‌شود، چند فرکانس تشدید قابل توجه وجود دارد. در نمودار شکل۳ (ج) ، نرخ جفت‌شدگی بر حسب فرکانس‌های مختلف نمایش داده شده است که نشان می‌دهد اکثر فرکانس‌ها نرخ جفت‌شدگی بالاتر از ۱/۵ مگاهرتز را دارا می‌باشند که مقدار قابل‌توجهی محسوب می‌گردد. با این حال، در شکل۳ (ب) که فاکتور کیفیت بر اساس همان فرکانس‌ها محاسبه شده است، مشاهده می‌شود که اکثر فرکانس‌ها دارای فاکتور کیفیتی کمتر از ۳۰ هزار هستند و برخی مقادیر به مراتب پایین‌تری را نشان می‌دهند. تنها در دو فرکانس، فاکتور کیفیت به بالای ۳۰ هزار می‌رسد: فرکانس ۱۲/۷۸۱ گیگاهرتز با فاکتور کیفیت حدود ٦٥ هزار با نرخ جفت شدگی ۱/۲ مگاهرتز و فرکانس ۱۲/٥٦ گیگاهرتز با فاکتور کیفیت نزدیک به ٥٦ هزاربا نرخ جفت شدگی ۲/۲ مگاهرتز. بر این اساس، این دو فرکانس به عنوان گزینه‌های معقول و بهینه برای فرکانس تشدید مایکروویو انتخاب شده‌اند.

در گام دوم به بررسی انتقال جمعیت بین اجزای مختلف سیستم

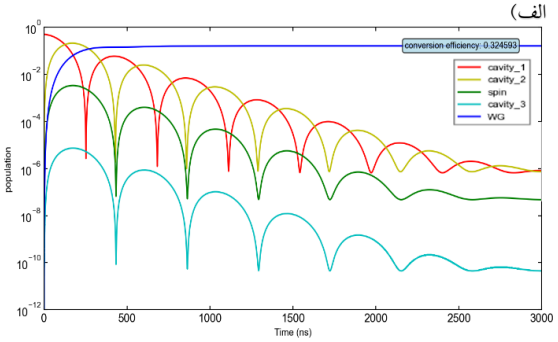
(حفره‌ها، اسپین و موجبر) در طول زمان واپاشی و نمایش آنها به صورت لگاریتمی و محاسبه بازده است.

برای بدست آوردن بازده کل باید از این نرخ در کل مدت زمان برهم‌کنش انتگرال بگیریم:

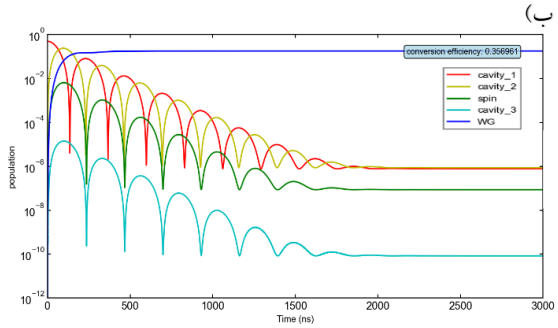
$$\eta = WG(t) = k_{ext}\int_0^t \langle a_{opt}^{\dagger} a_{opt}\rangle(\tau)\, d\tau \qquad (۲)$$

در این رابطه k_{ext} نرخ میرایی خارجی و $\langle a_{opt}^{\dagger} a_{opt}\rangle$ تعداد میانگین فوتون های داخل موجبر می باشد.

الف)



ب)



شکل٤: نمودار دینامیک جمعیت و بازده تبدیل بر حسب زمان
الف)مقادیر با نرخ جفت شدگی ۱/۲مگاهرتز و فاکتور کیفیت ٦٥ هزار
ب)مقادیر با نرخ جفت شدگی ۲/۲مگاهرتز و فاکتور کیفیت ٥٦ هزار

در این نمودار، cavity(1,2,3) به ترتیب معرف جمعیت مد مایکروویو، مد مکانیکی و مد اپتیکی خروجی است.

این محاسبات عددی با استفاده از معادله مستر لیندبلاد و از طریق نرم افزار پایتون با کتابخانه QuTip که برای حل معادلات کوانتومی است انجام می‌شود[٥].

$$\dot{\rho} = -i[H,\rho] + \sum_k \left(L_k P L_k^{\dagger} - \frac{1}{2}\{L_k^{\dagger}L_k,\rho\}\right) \qquad (۳)$$

که در آن H هامیلتونی و ρ ماتریس چگالی سیستم و L_k اپراتور فروپاشی است. همچنین هامیلتونی کل سیستم به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$H = \hbar\begin{bmatrix} \omega_{MW} & G_{MW,m} & 0 & 0 \\ G_{MW,m} & \omega_m & -G_{m,s} & 0 \\ 0 & -G_{m,s} & \omega_s & G_{s,opt} \\ 0 & 1 & G_{s,opt} & \omega_{opt} \end{bmatrix} \qquad (٤)$$

در این رابطه، عناصر روی قطر اصلی $\omega_{MW(cav1)}$، $\omega_{m(cav2)}$، ω_s، $\omega_{opt(cav3)}$ به ترتیب نشان‌دهنده بسامدهای تشدید مدهای مایکروویو، مکانیکی (فونونی)، گذار اسپینی و اپتیکی می‌باشند. عناصر غیرقطری نیز بیانگر نرخ‌های جفت‌شدگی میان مدهای همسایه هستند.

مقایسه نمودارهای شکل٤ نشان می‌دهد که افزایش نرخ جفت‌شدگی از۱/۲ به ۲/۲ مگاهرتز، علی‌رغم افت فاکتور کیفیت مکانیکی از ٦٥ هزار به ٥٦ هزار، منجر به ارتقای بازده تبدیل کل از۳۲/٤ درصد به ۳٥/٦ درصد شده است. این رفتار حاکی از غلبه نرخ تبادل همدوس بر نرخ‌های اتلاف ناهمدوس در کانال انتقال است.

نتیجه گیری

بازده تبدیل ۳٥/٦ درصدی حاصل شده در این ساختار، در مقایسه با نتایج گزارش شده در طرح‌های مشابه نظیر بازده۵/۵ درصدی در پلتفرم لیتیوم نیوبات[۲] حاکی از برتری رویکرد پیشنهادی است. تحلیل دینامیک جمعیت کوانتومی با معادلهخ مستر لیندبلاد نشان داد که بهبود نرخ جفت‌شدگی منجر به ارتقای بازده بالا می‌گردد.

مرجع‌ها

[۱] M. Aspelmeyer, T. J. Kippenberg, and F. Marquardt; "Cavity optomechanics," *Reviews of Modern Physics*, vol. 86, No. 4, pp. (2014) 1391–1452.
[۲] W. Jiang et al., "Efficient bidirectional piezo-optomechanical transduction between microwave and optical frequency," Nature communications, vol. 11, no. 1, p. 1166, 2020.
[۳] A. Clerk, K. Lehnert, P. Bertet, J. Petta, and Y. Nakamura, "Hybrid quantum systems with circuit quantum electrodynamics," *Nature Physics*, vol. 16, No. 3, pp. (2020) 257–267.
[۴] H. Raniwala, S .Krastanov, L. Hackett, M. Eichenfield, D. R. Englund, and M. E. Trusheim; "Spin-phonon-photon strong coupling in a piezomechanical nanocavity," *arXiv preprint arXiv*: (2022) 2202.11291.
[۵] D. Manzano; "A short introduction to the Lindblad master equation ",*Aip advances*, vol. 10, No. 2, (2020).

بهبود دقت پلاریمتری کوانتومی بوسیله اسکن دوبعدی نمونه دوشکستی

سمانه بیرژندی [1] ، حمزه نورالهی [1] ، سمانه مستاجران [1]

مرکز کوانتوم دانشگاه اصفهان اصفهان [1]

Sbirzhandi@gmail.com

چکیده

قطبش یکی از انعطاف‌پذیرترین درجات آزادی نور برای کاربردهای کلاسیک و کوانتومی است. هنگامی که این ویژگی همراه با جفت‌فوتون‌های SPDC مورد استفاده قرار گیرد، توانایی اندازه‌گیری حالت قطبش نور و تغییرات آن در حالی که درهم‌تنیدگی حفظ می‌شود، موجب افزایش دقت و تفکیک‌پذیری خواهد شد. در این پژوهش، یک نظریه جامع برای قطبش‌سنجی کوانتومی در سامانه تصویربرداری ارائه می‌شود که شامل مباحث مرتبط با قطبش کلاسیک و کوانتومی، تبدیل‌های آن‌ها و روش‌های اندازه‌گیری است. از این بستر برای روشن‌سازی مفاهیمی استفاده شده که معمولاً در بررسی‌های صرفاً کلاسیک قطبش نادیده گرفته می‌شوند. با استفاده از روش برازش در اسکن دومحوره پرتو SPDC از میان نمونه دوشکستی، اثر واگرایی پرتو حذف شده است. با بهره‌گیری از تفاوت دایره‌ای بلور BBO، خروجی حلقه‌ای همبسته PPKTP و نمایانی بالا، دقت زیاد و ارزیابی سریع دوشکستی برای کاربردهایی مانند مغناطیس‌سنجی اتمی حاصل شد. دقت برازش پلاریمتری به‌دست‌آمده ($R^2 \approx 0.983$)، میزان نمایانی تقریباً ۹۸٪ و شاخص شباهت ساختاری ($SSIM > 0.90$) را از ارزیابی تصویر قطبشی به دست آوردیم.

واژه های کلیدی *منبع درهمتنیده کوانتومی، همبستگی، قطبش سنجی کوانتومی.*

Retro scan enhances SPDC Quantum State Polarimetry Imaging of a birefringent sample

Samaneh Birzhandi [1], Hamze Noralahi [1],Samaneh Mostajeran[1],
1 Center of Quantum Science and Technology (CQST), University of Isfahan, Hezar Jarib, Isfahan, Iran
Sbirzhandi@gmail.com

Abstract

Polarization is one of light's most versatile degrees of freedom for both classical and quantum applications. When it is used with heralded photon pairs, the ability to measure light's state of polarization and changes therein while conserving entanglement increase both precision and resolution. We present a self-contained theory of quantum polarimetry in an imaging system, including discussions of classical and quantum polarization, their transformations, and measurements thereof. We use this platform to elucidate key concepts that are neglected when polarization and polarimetry are considered only from classical perspectives and used the concept already developed in classical ones to elevate the analyze of the quantum system. Using the fitting method in Reto scan of the SPDC beam through Birefringence sample, the effect of divergence of the beam is removed.

***Keywords**: Quantum source, Correlation, Retro scan polarimetry.*

PACS No.3,42.

مقدمه

تصویربرداری قطبشی اطلاعات پنهان اجسام شفاف را در کاربردهایی نظیر میکروسکوپی نوری و حتی مطالعات نجومی بازیابی می‌کند. انتشار نور در محیط موجب تغییرات قابل توجهی در ویژگی‌های ذاتی آن از جمله شدت، فاز، طول موج و قطبش می‌شود. اگرچه آشکارسازهای تصویربرداری جدید می‌توانند

تغییرات شدت و طول موج را با دقت بالا ثبت کنند، تصویربرداری قطبشی قادر است تغییرات فاز و قطبش پرتو خروجی از جسم مورد مطالعه را بازیابی نماید .[1-4].

از آنجا که حالت قطبش برداری نور با ویژگی‌های ریزساختاری اجسام پیچیده مانند جهت‌گیری مولکول‌های قطبی یا نانوذرات تغییر می‌کند، این روش اطلاعات عمیقی از ساختار ماده فراهم می‌سازد. روش‌های قطبش‌سنجی معمولاً از پرتو گاوسی همدوس و قطبیده برای بررسی نمونه‌های شفاف استفاده می‌کنند. با این حال، تصویربرداری نقطه‌به‌نقطه زمان‌بر بوده و برای تعیین گرادیان قطبش نمونه‌ها در حضور پراکندگی و اتلاف ناکارآمد است [5-8],.

در این مطالعه، پروفایل‌های فضایی مختلف پرتوهای کوانتومی برای بررسی اثر آن‌ها بر تخمین تأخیر فاز و تغییرات آن مقایسه شده‌اند. همچنین مطالعه‌ای درباره اثر تغییرات قطبش در سطح نمونه بر کاهش عدم قطعیت اندازه‌گیری ماتریس مولر انجام شده است.

در سال‌های اخیر، تصویربرداری قطبش‌سنجی مبتنی بر منابع کوانتومی و ابزارهایی مانند درهم‌تنیدگی و squeezing برای فراتر رفتن از محدودیت‌های کلاسیک مورد استفاده قرار گرفته است. در این روش‌ها، تغییرات در جفت‌فوتون‌های درهم‌تنیده بررسی می‌شود و انتقال فاز القاشده توسط نمونه در نمایانی خروجی به عنوان پارامتر طیف‌سنجی خطی به کار می‌رود [9-11]

.

این پژوهش مطالعه‌ای دقیق بر اثرات ایجادشده در نمایانی اسکن قطبش‌سنجی توسط تصویربرداری اسکن دو محوره از نمونه دوشکستی به وسیله فوتون‌های درهم‌تنیده ارائه می‌دهد. در این آزمایش، جفت‌فوتون‌های درهم‌تنیده پیش از ورود به تحلیل‌گر قطبش با نمونه برهم‌کنش و تغییرات تاخیر فاز و چرخش قطبش با تغییر نمایانی مشخص می‌کنند. این روش با استفاده از فیتینگ تابع شدت و حذف اثر واگرایی با تابع تاپ هت امکان بررسی مستقیم تغییرات را با دقت بالا و به وسیله نرخ بالای فوتون‌های درهم‌تنیده در حالت بل با فیدلتی بالا را فراهم می‌کند. با استفاده از برازش تغییرات قطبش کوانتومی با تفکیک مکانی پیکسلی به وسیله تصویربرداری رترو اسکن به دقت بالاتر وخطای کمتر ناشی از نوسانات شدت رسیدیم. فیت تاپ هت به دلیل دقت بالاتر فیت شدت خطای تخمین قطبش را به طرز قابل توجهی کاهش داد. در نهایت ارزیابی به وسیله روشهای معمول ارزیابی تصویر صحه گذاری شد.

نظری

القای پارامتریک رو به پایین (SPDC) یک فرآیند نوری غیرخطی شناخته شده است که در آن یک پرتو لیزر پمپ به یک ماده غیرخطی نوری برخورد می کند که با تطبیق فاز (PM) یعنی حفظ انرژی- تکانه، یک جفت فوتون درهم تنیده در فرکانس‌های پایین‌تر، ایجاد می‌شود. قطبش جفت فوتون برای حالت بل با عبور از ماده دو شکستی به صورت زیر تغییر میکند [11].

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|HV\rangle + |VH\rangle) \qquad (۱)$$

$$I_M = \frac{I_0(1 - \cos 4h_i F_{cos} + \sin 4h_i F_{sin})}{4}$$

در این معادله

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda}(n_e - n_o)d \qquad (2)$$

$$F_{sin} = \sin(4h_s + 4\theta)\sin\delta$$

$$F_{cos} = (\cos 4h_s \cos^2\frac{\delta}{2} + \cos(4h_s + 4\theta)\sin^2\frac{\delta}{2})$$

در این کار، ما یک طرح پلاریمتری کوانتومی بر اساس فوتون های درهم تنیده تولید شده از طریق SPDC نوع II در تداخل سنج Sagnac با بلور PPKTP ارائه می کنیم. ما عملکرد سامانه را در اندازه گیری پارامترهای قطبش با فیت داده به تغییرات قطبش بررسی می کنیم.

فرآیند SPDC یا «تبدیل پارامتری خودبه‌خودی پایین‌تبدیل» فرایندی شناخته‌شده است که در آن دو فوتون جفت‌شده از یک فوتون پمپ در محیط غیرخطی ایجاد می‌شوند. این فوتون‌ها در درجات آزادی مختلفی از جمله قطبش، زمان–انرژی و تکانه عرضی درهم‌تنیده هستند.

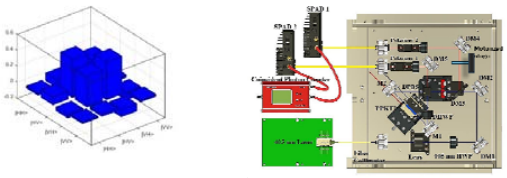
در این کار، حالت اولیه فوتون‌های درهم‌تنیده به صورت حالت بل در پایه قطبش استاندارد در نظر گرفته می‌شود. محدودیت تکانه عرضی ناشی از تطابق فاز در SPDC موجب سرکوب مدهای

عرضی غیرهمبسته می‌شود و در نتیجه هسته مؤثر تصویربرداری باریک‌تر از تابع پخش نقطه‌ای در نور غیر درهمتنیده خواهد بود.
تفاوت اصلی قطبش‌سنجی کوانتومی با قطبش‌سنجی کلاسیک در آشکارسازی دوکاناله با بازوهای «کنترل» و «اندازه‌گیری» است. این ویژگی امکان کنترل از راه دور اندازه‌گیری دوشکستی نمونه را در شرایط مختلف فراهم می‌کند.در تحلیل نتایج، ترکیب مؤلفه‌های قطبیده و غیرقطبیده با استفاده از پارامترهای استوکس بررسی شد. این تحلیل نشان می‌دهد که هر پرتو را می‌توان به صورت ترکیبی احتمالی از یک پرتو کاملاً قطبیده و یک پرتو کاملاً غیرقطبیده در نظر گرفت.

نتایج تجربی

در شکل ۱ برای ثبت نمایانی در پایه‌های مختلف، از ترکیب صفحه نیم‌موج و تقسیم‌کننده قطبش استفاده شد. نمایانی اندازه‌گیری‌شده حدود ۹۸ درصد بود که نشان‌دهنده کیفیت بالای منبع درهم‌تنیدگی است. حالت‌های دو فوتونی با استفاده از اندازه‌گیری‌های همزمانی و بازسازی توموگرافی بررسی شدند. دقت سامانه در اندازه‌گیری تأخیر فاز دوشکستی به شدت به فیدلیتی منبع به دلیل کاهش خطای ناشی از تمیزپذیری فوتونها وابسته است. پروفایل پرتو SPDC که به صورت تجربی اندازه‌گیری شده است، خطاهای سیستماتیک ناشی از واگرایی پرتو و روشنایی غیر یکنواخت را حذف می‌کند .این امر به طور قابل توجهی تخمین تاخیر فاز را در کل تصویر به جای تکیه بر یک پروفایل شدت میانگین واحد، بهبود می‌بخشد.

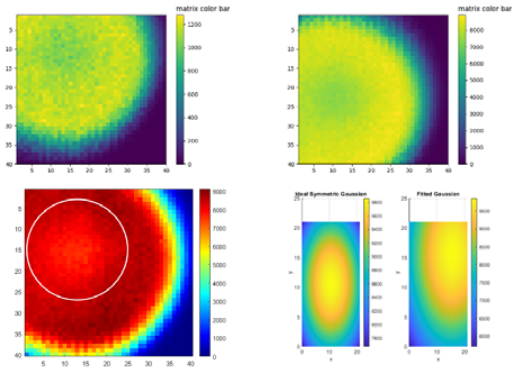
ب) الف)



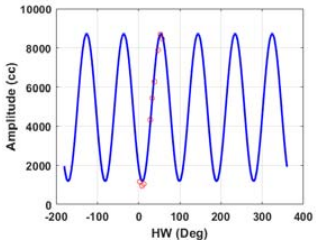
شکل ۱ الف) بخش حقیقی توموگرافی منبع با کانت ۱۱۰۰۰. ب) نمایش تصویری چیدمان منبع آزمایشی، HWP: تیغه نیم‌موج؛ PBS: مکعب تقسیم‌کننده پرتو قطبشگر؛ DM: آینه دورنگی؛ M1، M2: آینه‌ها؛ DHWP: تیغه نیم‌موج با دو طول موج؛ PPKTP: بلور غیرخطی نوع دو ؛ SPAD: دیود بهمنی تک فوتون؛ یک استیج موتوری که موقعیت پرتو را روی نمونه تغییر می‌دهد.

در شکل ۱ ب) برای ارزیابی سامانه، ابتدا یک تیغه ربع‌موج استاندارد با تأخیر فاز نظری ۹۰ درجه مورد آزمایش قرار گرفت.

نرخ‌های همزمانی فوتون‌ها نسبت به زاویه انالیزور در بازوی ایدلر ثبت و با روابط نظری برازش شدند. مقدار استخراج‌شده برای تأخیر فاز برابر با ۸۹.۱ درجه بود که تطابق بسیار خوبی با مقدار نظری دارد.



شکل ۲ نرخ همزمانی فوتونها برای صفحه نیم موج با زوایای مختلف در بازوی B از ۰ تا ۹۰ درجه.



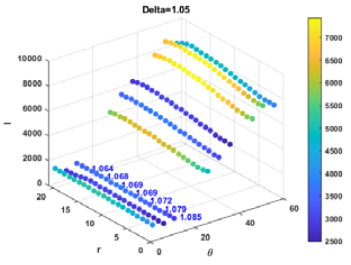
شکل ۳ نمایانی برای صفحات نیم موج با زوایای مختلف (جهت تخمین حساسیت به چرخش قطبش و حساسیت به چرخش قطبش) در بازوی نمونه از ۱۸۰- تا ۱۸۰ درجه

در ازمایش نشان داده شد که پرتو بسل نرخ فوتون بیشتری با نسبت ۱.۲ بدون کاهش فیدلیتی فراهم می‌کند. در آزمایش‌ها، توان لیزر پمپ در ورودی تداخل‌سنج روی ۳ میلی‌وات ثابت نگه داشته شد. همچنین یک stage موتوردار برای ثبت تصاویر اسکن با دقت میکرومتر در دو محور مورد استفاده قرار گرفت.
شبیه‌سازی و مدلسازی نقش مرجع شدت را برای ارزیابی خواص فضایی فوتون‌های همبسته مشخص و استفاده از یک نقطه با مقدار متوسط ریتاردنس به عنوان مرجع پیشنهاد کردند برای ارزیابی از تابع R^2 و خوبی فیت برای تحلیل فیت استفاده شد. نتایج نشان دادند که مدل Top-Hat به‌همراه لبه ERF نسبت به تقریب گاوسی تطابق بسیار بهتری به خصوصو در مرکز بیم با تصویر های

اندازهگیری شده بـه وسـیله SPDC دارد و مقـدار (R^2) را بـه 0.983افزایش می‌دهد. این تحلیل‌هـا نشـان می‌دهنـد کـه اسـکن پروفایل پرتو و مدل‌سازی تابع شدت متناسب با کوروليشـن منبـع نقـش تعیین‌کننـده‌ای در دسـتیابی بـه انـدازه‌گیری دقیـق در تصویربرداری و قطبش‌سنجی کوانتومی دارنـد. تشـخیص تغییـرات بسیار کوچک retardance در سامانه‌های تصویربرداری قطبشـی و مغناطو–اپتیکی وابسته به حفظ شباهت ساختاری بالا در تصـویر بازسازی‌شـده اسـت. در سـامانه‌های NMOR و قطبش‌مدولـه دینامیک، این موضوع به دلیل تغییرات کوچک بر روی مقدار اصلی سیگنال اندازه‌گیری‌شده تنهـا بـه مقـدار چـرخش قطـبش وابسـته نیست، بلکه به همبستگی‌های فضایی بالا وروزلوشن فضـایی بـالا احتیاج دارد.

Parmeter	I_0	$teta_0$ Θ	delta δ	h_i	$delta_{esse}$ δ_{esse}	I_{acc}	Wellness of Fit
Top Hat Fit Sagnac PPKTP	6186 (77%)	0.9551 rad (60.8 deg)	1.09 rad (69 deg	0.72 rad (46 deg)	0.062 rad (4.39 deg)	1710	SSIM = 0.9824 RMSE = 0.0264 R^2= 0.9943 Reduced χ2 = 0.0021

جدول 1 تابع محاسبات افزایش دقت با فیت تاپ هت ***(SSIM Structural Similarity Index Measure)***



شکل۴ خروجی فیت دو بعدی روی پروفایل شدت مقدار ریتاردنس ثابت با تغییر چرخش زاویه قطبش در طول بیم مطابق شکل به دست آمد. دقت فیتینگ ۹۹ درصد به دست آمد.

نتیجه گیری

در ایـ ن پـژوهش، طرح‌هـای قطبش‌سـنجی کوانتـومی مبتن ی بـر ورودی‌های تک‌فوتونی برای تحلیل دوشکستی جبران‌کننده BBO بـه صـورت تجربـ ی بررسـ ی شـد. پروفایـ ل واگـرای فوتون‌هـای درهم‌تنیـ ده بـا قطـبش افقـ ی و عمـودی در هـر پیکسـل تصـویر اندازه‌گیری شد و امکان تعیین retardance در کل تصویر فـراهم گردید. نتایج نشان دادند که تحلیل پیکسلی و برازش ترکیبی مبتنی بر پروفایل شدت، کمترین عدم قطعیت را در تخمین ایجاد می‌کند. همچنین بهره کوانتومی در آشکارسازی فعالیـ ت نـوری نسـبت بـه سامانه‌های کلاسیک مورد بحث قرار گرفت و اثر نـواقص تجربـ ی شناسایی شد. این روش می‌تواند به عنوان راهبردی قدرتمند بـرای کاربردهـای آینـده در حسـگری کوانتـومی ، مغناطیس‌سـنجی اتمی،تصـویربرداری زیسـتی، تحلیـ ل نانوسـاختارها، انـدازه‌گیری ضخامت فیلم‌های نازک، تصویربرداری قطبشی بـا نـور کـم مـورد اسـتفاده قـرار گیـ رد. در پلاریمتـری کوانتـومی بـا آشکارسـازی همزمـانی، قسـمت ناهمبسـته شـدت حـذف شـده و همبسـتگی کوانتومی در پیکسل اندازه گیری شده دقت تخمـین تـاخیر فـاز را افزیش میدهد.

مرجع‌ها

1. Altepeter, Joseph B, Neal N. Oza, Milja Medic, Evan R. Jeffrey, and Prem Kumar, “Entangled photon polarimetry,” Optics Express **19** (27), (2011): 26011–26016.
2. Zhang, Wenlei, Ravi K. Saripalli, Jacob M. Leamer, Ryan T. Glasser, and Denys I. Bondar, “All-optical input-agnostic polarization transformer,” arXiv:2103.05398 [physics.optics] (2021).
3. de Burgh, Mark D, Nathan K. Langford, Andrew C. Doherty, and Alexei Gilchrist, “Choice of measurement sets in qubit tomography,” Physical Review A 78, (2008) 052122.
4. Bushev, P A,V. P. Karassiov, A.V. Masalov, and A. A. Putilin, “Biphoton light with hidden polarization and its polarization tomography,” Optics and Spectroscopy 91 (4), (2001)526–531.
5. de Forges de Parny, L.; Alibart, O.; Debaud, J.; Gressani, S.; Lagarrigue, A.; Martin, A.; Metrat, A.; Schiavon, M.; Troisi, T.; Diamanti, E., Satellite-based quantum information networks: use cases, architecture, and roadmap. Communications Physics, 6 (1), (2023)12.
6. Anwar, A.; Perumangatt, C.; Steinlechner, F.; Jennewein, T.; Ling, A., Entangled photon-pair sources based on three-wave mixing in bulk crystals. Review of Scientific Instruments, 92 (4), (2021) 041101
7. Ecker, S.; Liu, B.; Handsteiner, J.; Fink, M.; Rauch, D.; Steinlechner, F.; Scheidl, T.; Zeilinger, A.; Ursin, R., Strategies for achieving high key rates in satellite-based QKD. npj Quantum Information, 7 (1), (2021) 5.
8. Steinlechner, F.; Gilaberte, M.; Jofre, M.; Scheidl, T.; Torres, J. P.; Pruneri, V.; Ursin, R., Efficient heralding of polarization-entangled photons from type-0 and type-II spontaneous parametric downconversion in periodically poled KTiOPO 4. JOSA B, 31 (9), (2014) 2068-2076.
9. Prajapati, Chandravati, Shankar Pidishety, and Nirmal K. Viswanathan. "Polarimetric measurement method to calculate optical beam shifts." Optics Letters 39.15 (2014): 4388-4391.
10. de Sande, Juan Carlos González, et al. "Mueller matrix polarimetry with invariant polarization pattern beams." Photonics. Vol. 8. No. 11. MDPI, 2021.
11. Xie, Meng-Yu, et al. "Quantum-Enhanced Polarimetric Imaging." arXiv preprint arXiv:2408.04183 (2024).

تولید حالت‌های نزدیک همدوس مرتبه‌ی بالا با تعمیم عملگر تبدیل شرطی

نحوی فرد، الهه[1]؛ بذرافکن، محمدرضا[1]

[1] دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه بین المللی امام خمینی قزوین، انتهای بلوار امام خمینی ، قزوین

چکیده

در این مقاله، روش اپتیکی معرفی‌شده در کار پیشین [4] را، که تولید ترکیبات خطی از حالت‌های نزدیک همدوس بود، تعمیم می‌دهیم. در آن روش، یک عملگر تبدیل شرطی $\hat{Y}$، که مبتنی بر درهم‌تنیدگی، اثر کر، و اندازه‌گیری شرطی تعداد فوتون است، با موفقیت برای تولید حالت‌های نزدیک همدوس به کار گرفته‌شد. در اینجا، با جایگزینی عملگر $\hat{a}^\dagger$ با توان m ام آن، یعنی $\left(\hat{a}^\dagger\right)^m$، در ساختار $\hat{Y}$،عملگر تعمیم‌یافته $\hat{Y}^{(m)}$ را معرفی می‌کنیم. نشان می‌دهیم که اثر این عملگر بر روی حالت خلأ، بر هم‌نهش خطی دو حالت نزدیک همدوس مرتبه‌ی بالا را بدنبال دارد. ضریب m مؤلفه‌های متناظر درفضای فاز را نسبت به حالت معمولی از یکدیگر جدا می‌کند. با افزایش m تمایز ماکروسکوپیک دو مولفه به طور چشمگیری افزایش یافته و حالت خروجی به یک حالت گربه شرودینگر بزرگ مقیاس نزدیک‌تر می‌شود. روش پیشنهادی راه‌کاری مفید برای تولید حالت‌های غیر کلاسیکی با درجه بالاتر از همدوسی ماکروسکوپیک فرآهم می‌کند.

واژه های کلیدی: *حالت نزدیک همدوس مرتبه‌ی بالا، عملگر تبدیل شرطی تعمیم‌یافته، گربه‌ی شرودینگر، غیرکلاسیکی، اندازه‌گیری مشروط .*

Generation of Higher-Order Near-Coherent States via Generalized Conditional Transformation Operator

Nahvifard, Elahe[1]; Bazrafkan, Mohammad Reza[1]

[1] *Department of Science, Physics group, Imam Khomeini International University, Qazvin*

Abstract

In this paper, we generalize the optical scheme introduced in our previous work [4] for generating linear combinations of near-coherent states. In that scheme, a conditional transformation operator, $\hat{Y}$, which relies on entanglement, Kerr nonlinearity, and conditional photon-number measurements, was successfully employed to generate near-coherent states. Here, by replacing the operator $\hat{a}^\dagger$ with its m-th power, $\left(\hat{a}^\dagger\right)^m$, within the structure of $\hat{Y}$, we introduce the generalized operator, $\hat{Y}^{(m)}$. We demonstrate that the action of $\hat{Y}^{(m)}$ on the vacuum state results in a linear superposition of two higher-order near-coherent states. A factor of m separates the corresponding phase-space components in comparison with the conventional case. As m increases, the macroscopic distinguishability of the two components is significantly enhanced, and the output state approaches a large-scale Schrödinger cat state. The proposed scheme thus offers a viable route for generating non-classical states with an enhanced degree of macroscopic quantum coherence.

Keywords: *Higher-order near-coherent state, generalized conditional transformation operator, Schrödinger cat state, non-classicality, conditional measurement.*

PACS No. (11 Times New Roman, italic)

مقدمه

در تعریف ارائه شده در [۱،۲]، حالت‌های نزدیک همدوس، برهم‌نهش خطی دو حالت همدوس با پارامترهای مختلط بی‌نهایت نزدیک به هم هستند؛ به‌گونه‌ای که

$$|\psi_1\rangle \propto \{|z+\delta z\rangle - |z\rangle\}, \qquad \delta z = |\delta z| e^{i\theta_s}, \qquad |\delta z| \to 0. \tag{۱}$$

نخستین فرض آن است که این حالت‌ها را مشتق $|z\rangle$ نسبت به پارامتر مختلط z در نظر بگیریم؛ اما این فرض، فریبنده و نادرست است. چراکه عناصر ماتریسی حالت همدوس در پایه تعداد فوتون، $\langle n|z\rangle = \exp(-zz^*/2)\frac{z^n}{\sqrt{n!}}$، نسبت به z مشتق‌پذیر نیستند. از این‌رو، به جای مشتق معمولی، باید از "مشتق سویی" $\frac{\delta|z\rangle}{\delta z}$ بهره گرفت که به فاز $\delta z = |\delta z| e^{i\theta_s}$ وابسته است.

این موضوع نشان می‌دهد هر حالت نزدیک همدوس دارای دو پارامتر کنترلی z,θ_s است. با استفاده از رابطه

$$|z\rangle = \exp(-zz^*/2)e^{z\hat{a}^\dagger}|0\rangle, \qquad (۲)$$

برای حالت‌های همدوس تک‌مد و محاسبه مشتق سویی مختلط، به نتیجه

$$|\psi_1\rangle \equiv N\delta z\left(\frac{\delta|z\rangle}{\delta z}\right), \qquad (۳)$$

$$|\psi_1\rangle = N\delta z\left\{-\frac{1}{2}\left(z^* + ze^{-i2\theta_s}\right)|z\rangle + \hat{a}^\dagger|z\rangle\right\},$$

می‌رسیم که در آن N نقش ثابت بهنجارش را بازی می‌کند. بنابراین حالت‌های نزدیک همدوس در واقع ترکیبی از حالت همدوس $|z\rangle$ و حالت همدوس فوتون‌افزوده $\hat{a}^\dagger|z\rangle$ هستند. به سادگی می‌توان نشان داد که رابطه

$$N\delta z = \frac{e^{i\theta_s}}{\sqrt{1+|z|^2\sin^2(\theta_s-\theta)}}, \qquad (٤)$$

برقرار است که آشکارا از فاز $|\delta z|$ مستقل است؛ در نتیجه مشتق سویی $\delta|z\rangle/\delta z$ همواره برداری بهنجارشدنی خواهد بود. ویژگی‌های غیرکلاسیکی حالت‌های نزدیک همدوس در مقالات [۱،۲] بررسی شده است. این حالت‌ها در برخی خواص بسیار شبیه حالت‌های همدوس رفتار می‌کنند، در حالی که به دلیل ساختار موضعی خود در نمایش فضای فاز، خواص غیرکلاسیکی از خود نشان می‌دهند. همچنین مشتقات سویی مرتبه بالاتر در [۳] بررسی شده‌اند و مفهوم مشتق سویی حالت کوانتومی برای حالت‌های خالص دیگر یا حالت‌های آمیخته نیز تعمیم داده شده است[٤].

از جمله حالت‌های کوانتومی که حالت نزدیک به آن مطالعه شده‌است، حالت نزدیک گربه شرودینگر است [۵]. در کار پیشین خود [٤]، روشی برای تولید این نوع حالت‌ها براساس طرح اولیه تولید حالت‌های نزدیک همدوس در [۱] ارائه‌کردیم. در آن روش، با استفاده از عملگر تبدیل شرطی $\hat{Y}$ توانستیم ترکیبات خطی از دو حالت نزدیک همدوس تولیدکنیم که به‌طور ماکروسکوپیک از یکدیگر متمایز هستند و می‌توان آنها را نوعی حالت گربه شرودینگر در نظر گرفت.

در مقاله حاضر، گامی فراتر نهاده و عملگر تبدیل شرطی $\hat{Y}$ را تعمیم می‌دهیم. به جای عملگر $\hat{a}^\dagger|z\rangle$ در ساختار $\hat{Y}$، از $\hat{a}^{\dagger m}$ استفاده می‌کنیم و عملگر تعمیم‌یافته $\hat{Y}^{(m)}$ را معرفی می‌نماییم. نشان خواهیم داد که اثر این عملگر بر روی حالت خلأ، ترکیب خطی از دو حالت نزدیک همدوس مرتبه بالا تولید می‌کند که مؤلفه‌های آن در فضای فاز، فاصله‌ای m برابر بیشتر از حالت عادی دارند. با افزایش m، تمایز ماکروسکوپیک دو مؤلفه به طور چشمگیری افزایش یافته و حالت نهایی به گربه‌ی شرودینگر بزرگ مقیاس نزدیک‌تر می‌شود. این تعمیم، افق جدیدی برای تولید حالت‌های غیرکلاسیکی با درجه همدوسی ماکروسکوپیک بالاتر می‌گشاید.

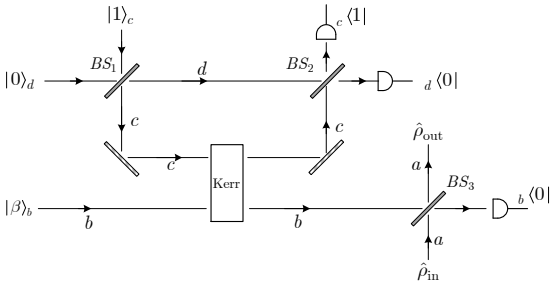
آماده‌سازی حالت نزدیک همدوس با استفاده از درهم‌تنیدگی و اندازه‌گیری شرطی

یک چیدمان اپتیکی برای تولید حالت‌های نزدیک همدوس در نمودار (۱) نشان داده شده‌است [۱]. این چیدمان در واقع یک تداخل سنج ماخ–زندر است که حامل باریکه‌های تک مد چپگرد (c) و راستگرد (d) است که در حالت $|1\rangle_c|0\rangle_d$ تعداد فوتون پیش گزینش شده‌است. باریکه شکاف‌های به‌کار رفته برای درهم‌تنیده سازی حالت‌های ورودی، متقارن و یکسان فرض می‌شوند. باریکه (c) در بر هم‌کنش ضعیف کر با باریکه (b) با هامیلتونی $\hat{U} = e^{-i\phi\hat{b}^\dagger\hat{b}\hat{c}^\dagger\hat{c}}$ قرار می‌گیرد. حالت باریکه (b) که یکی از ویژگی‌های حالت نزدیک همدوس تولید شده را کنترل می‌کند یک حالت همدوس $|\beta\rangle_b$ است. نهایتا باریکه (b) در باریکه شکاف سوم با باریکه (a) ترکیب می‌شود. کل چیدمان چهار ورودی و چهار خروجی دارد. ورودی (a) به حالت کوانتمی باریکه‌ای که قرار است تبدیل حالت روی آن انجام شود اختصاص دارد و خروجی متناظر حامل حالت تولید شده‌است. اگر آشکارسازهای تک فوتون D_d و D_c هر کدام وقوع یک فوتون $|1\rangle_c$ و $|0\rangle_d$ را آشکارسازی کنند حالت خروجی (a) به تقریب خوبی یک حالت نزدیک همدوس خواهدبود[۱].

در [٤] نشان‌داده‌شده‌است که به شرط پس گزینش حالت $|0\rangle_b|1\rangle_c|0\rangle_d$ این چیدمان هنوز حالت نزدیک به همدوس تولید می‌کند. با در نظر گرفتن این روش تولید حالت به عنوان آماده‌سازی حالت مشروط به اندازه‌گیری پس گزینشی (٦) می‌توان

عملگر تبدیل $\hat{Y}$ متناظر را که برابر عنصر ماتریسی جزئی عملگر یکانی تبدیل $\hat{U}$ (از چهار ورودی به چهار خروجی) بین حالت-های پیش و پس‌گزینشی است را محاسبه کرد

$$\hat{Y} = {}_b\langle 0|\,{}_c\langle 1|\,{}_d\langle 0|\hat{U}|\beta\rangle_b\,|1\rangle_c\,|0\rangle_d\,. \qquad (۵)$$



نمودار ۱: چیدمان تولید حالت نزدیک همدوس از روش درهم تنیدگی و اندازه-گیری پس گزینشی

با استفاده از این عملگر تبدیل، حالت خروجی با رابطه

$$\hat{\rho}_{\rm out} = \frac{\hat{Y}\hat{\rho}_{\rm in}\hat{Y}^\dagger}{\mathrm{Tr}\left[\hat{Y}\hat{\rho}_{\rm in}\hat{Y}^\dagger\right]}, \qquad (۶)$$

بدست خواهدآمد. نتایج مقاله [٤] نشان می‌دهد که عملگر تبدیل فرم ساده زیر را خواهدداشت

$$\hat{Y} = \frac{\delta z}{2} e^{-\frac{\beta\beta^*}{2}} \hat{a}^\dagger e^{\beta\hat{a}^\dagger/\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{\hat{a}^\dagger\hat{a}}, \qquad (۷)$$
$$\delta z = -i\phi\beta/\sqrt{2}, \quad |\phi| \ll 1.$$

اثر این عملگر بر روی یک حالت همدوس، ترکیب خطی از دو حالت همدوس دیگر را به همراه دارد که پارامترهای مختلط آنها تنها به میزان بسیار کمی با یکدیگر تفاوت دارند. به همین دلیل، به این حالت‌ها، «حالت‌های نزدیک همدوس» اطلاق می‌شود.

تحقق فیزیکی ترکیبات خطی از عملگرهای تبدیل مرتبه بالا

یکی از نکات برجسته در رابطه (۵) برای عملگر تبدیل حالت مشروط، خطی بودن آن نسبت به حالت ورودی (b) در چیدمان نمودار (۱) است. به بیان دیگر، اگر به جای حالت $|\beta\rangle$ (که نقش کنترل‌کننده‌ی خروجی را بر عهده دارد)، از برهم‌نهش خطی دو حالت همدوس متمایز به شکل زیر بهره ببریم:

$$c_1|\beta_1\rangle_b + c_2|\beta_2\rangle_b\,, \qquad (۸)$$

بر اساس روابط (۵) و (۷)، عملگر تبدیل حالت در چیدمان نمودار (۱) به شکل زیر قابل‌بیان‌است

$$\hat{Y} = c_1\frac{\delta z_1}{2}e^{-\frac{\beta_1\beta_1^*}{2}}\hat{a}^\dagger e^{\beta_1\hat{a}^\dagger/\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{\hat{a}^\dagger\hat{a}} + c_2\frac{\delta z_2}{2}e^{-\frac{\beta_2\beta_2^*}{2}}\hat{a}^\dagger e^{\beta_2\hat{a}^\dagger/\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{\hat{a}^\dagger\hat{a}}, \qquad (۹)$$

که در آن $\delta z_k = -i\phi\beta_k/\sqrt{2}, \quad k = 1,2$ تعریف می-شوند. حال اگر به جای آشکارسازی تک فوتون در خروجی‌های (c) و (d)، آشکارسازی m فوتون را در نظر بگیریم، عملگر تبدیل حاصل به مرتبه بالاتر تعمیم می‌یابد و به شکل زیر در می‌آید:

$$\hat{Y} = c_1\frac{\delta z_1}{2}e^{-\frac{\beta_1\beta_1^*}{2}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^m e^{\beta_1\hat{a}^\dagger/\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{\hat{a}^\dagger\hat{a}} + (1\to 2)$$

در اینجا m یک عدد صحیح مثبت است، که نشان‌دهنده تعداد فوتون‌های آشکارسازی‌شده در فرآیند پس‌گزینش می‌باشد. بدین ترتیب، امکان ایجاد فیزیکی ترکیبات خطی از عملگرهای تبدیل مرتبه‌ی بالا فراهم می‌گردد. زیرا نخست، عملگر $\hat{Y}$ وابستگی خطی به حالت ورودی (b)دارد و بنابراین هر ترکیب خطی از حالت‌های ورودی، به ترکیب خطی متناظری از عملگرهای تبدیل منجر می‌شود، و دوم، با افزایش m (مرتبه‌ی عملگر)، مؤلفه‌های حالت خروجی در فضای فاز تا mبرابر از هم فاصله می‌گیرند که معادل افزایش همدوسی ماکروسکوپیک است.حال این پرسش مطرح می‌شود که اگر حالت ورودی در مد (a) یک حالت همدوس مانند $|\alpha\rangle$در نظر گرفته شود، حالت خروجی چه شکلی خواهد داشت؟ با توجه به ساختار عملگر $\hat{Y}^{(m)}$در رابطه (۹)، می‌توان نوشت:

$$\hat{Y}|\alpha\rangle = c_1\frac{\delta z_1}{2}e^{-\frac{\beta_1\beta_1^*}{2}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^m e^{\beta_1\hat{a}^\dagger/\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{\hat{a}^\dagger\hat{a}} + (1\to 2) \qquad (۱۰)$$

قدم اول ابتدا حالت همدوس را بر پایه انرژی بسط می‌دهیم و داریم $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{\hat{a}^\dagger\hat{a}}|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{4}}\left|\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right\rangle$ این عملگر، اندازه پارامتر همدوس را به اندازه $\sqrt{2}$کوچک می‌کند و یک ضریب نمایی (مربوط به بهنجارش) جلوی آن ظاهر می‌شود. حال

$e^{\beta_1\hat{a}^\dagger/\sqrt{2}}\left|\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right\rangle = e^{\frac{\beta a^*}{\sqrt{2}}-\frac{|\beta|^2}{4}}\left|\frac{\alpha+\beta}{\sqrt{2}}\right\rangle$ این عملگر پارامتر، حالت همدوس را به اندازه $\beta/\sqrt{2}$ جابجا می‌کند و یک فاز و یک ضریب بهنجارش به آن اضافه می‌کند. و در نتیجه با توجه به این‌که

$$(\hat{a}^\dagger)^m\left|\frac{\alpha+\beta}{\sqrt{2}}\right\rangle = \frac{\partial^m}{\partial\beta^m}\left|\frac{\alpha+\beta}{\sqrt{2}}\right\rangle$$

$$\hat{Y}\,|\alpha\rangle = \frac{c_1\delta z_1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{\beta_1\beta_1^*}{2}}\frac{\partial^m}{\partial\beta_1^m}\left(e^{\frac{|\alpha+\beta_1|^2}{4}}\left|\frac{\alpha+\beta_1}{\sqrt{2}}\right\rangle\right) + \frac{c_2\delta z_2}{\sqrt{2}}e^{-\frac{\beta_2\beta_2^*}{2}}\frac{\partial^m}{\partial\beta_2^m}\left(e^{\frac{|\alpha+\beta_2|^2}{4}}\left|\frac{\alpha+\beta_2}{\sqrt{2}}\right\rangle\right).$$

در ادامه با کمک اتحادهای زیر

$$t^{\hat{a}^\dagger\hat{a}}\,|u\rangle = e^{-\frac{|u|^2}{2}\left(1-|t|^2\right)}|tu\rangle, t\in\mathbb{R}^+, |\xi\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\xi|^2}e^{\xi\hat{a}^\dagger}|0\rangle, \quad (۱۱)$$

حال با بهره‌گیری از خواص حالت‌های همدوس، رابطه‌ی (۱۰) به صورت زیر ساده‌سازی می‌شود

$$\hat{Y}\,|\alpha\rangle \propto \left\{\frac{c_1\delta z_1}{2}e^{-\frac{\beta_1\beta_1^*}{2}}\frac{\partial^m}{\partial\beta_1^m}e^{\frac{1}{4}|\alpha+\beta_1|^2}\left|\frac{\alpha+\beta_1}{\sqrt{2}}\right\rangle + (1\to 2)\right. \quad (۱۲)$$

به روشنی مشاهده می‌شود که عبارت فوق، برهم‌نهش خطی مشتقات حالت‌های همدوس (غیربهنجار) نسبت به پارامترهای مختلط β_1,β_2 می‌باشد. در حالت خاص $\beta_1 = -\beta_2 \equiv \beta$، با استفاده از رابطه‌ی بالا می‌توان نوشت

$$\hat{Y}^m\,|\alpha\rangle \propto \frac{\partial^m}{\partial\beta^m}\left(c_1e^{\frac{1}{4}|\alpha+\beta|^2}\left|\frac{\alpha+\beta}{\sqrt{2}}\right\rangle\right) - \frac{\partial^m}{\partial(-\beta)^m}\left(c_2e^{\frac{1}{4}|\alpha-\beta|^2}\left|\frac{\alpha-\beta}{\sqrt{2}}\right\rangle\right). \quad (۱۳)$$

مشتق مرتبه m روی کل براکت اثر دارد. و فقط حالت ها را در بر نمی‌گیرد. این شامل مشتق از $e^{\frac{1}{4}|\alpha+\beta|^2}$ هم می‌شود و جملات جدیدی ایجاد می‌کند. برای این کار از رابطه زیر استفاده می‌کنیم.

$$\frac{\partial^m}{\partial\beta^m}f(\beta) \approx \frac{1}{\varepsilon^m}\sum_{k=0}^{m}(-1)^{m-k}\binom{m}{k}f(\beta+k\varepsilon)$$

می‌دانیم که هر حالت همدوس غیر بهنجار $e^{zz^*/2}\,|z\rangle$ نسبت به متغیر z مشتق پذیر است و

$$\frac{d}{dz}\left(e^{zz^*/2}\,|z\rangle\right) = \frac{d}{dz}\left(e^{z\hat{a}^\dagger}\,|0\rangle\right) = e^{zz^*/2}\hat{a}^\dagger\,|z\rangle,$$

که به سادگی بهنجار شدنی است. حال به کمک تعریف مشتق و با فرض $\alpha = 0$ برای حالت خروجی می‌توانیم بنویسیم

$$\hat{Y}^m\,|0\rangle \propto \frac{c_1}{\varepsilon_1^m}\sum_{k=0}^{m}(-1)^{m-k}\binom{m}{k}e^{\frac{1}{4}|\beta+k\varepsilon_1|^2}\left|\frac{\beta+k\varepsilon_1}{\sqrt{2}}\right\rangle - \frac{c_1}{\varepsilon_2^m}\sum_{k=0}^{m}(-1)^{m-k}\binom{m}{k}e^{\frac{1}{4}|-\beta+k\varepsilon_2|^2}\left|\frac{-\beta+k\varepsilon_2}{\sqrt{2}}\right\rangle.$$

$\varepsilon_k \to 0, k = 1,2$ اعداد مختلط بینهایت کوچکی هستند، و با استفاده از مشتق‌پذیری حالت‌های همدوس غیربهنجار، می‌توان نتیجه‌گرفت که مقدار دقیق این بینهایت کوچک‌ها تأثیری در نتیجه‌ی نهایی ندارد. از سوی دیگر، برای $|\beta| \gg 1$ (شرط تمایز ماکروسکوپیک)، رفتار مجانبی مشتق مرتبه m نسبت به β به گونه‌ای است که حالت خروجی به یک ترکیب خطی از دو حالت نزدیک همدوس با پارامترهای مرکزی $\left|m\frac{\beta}{\sqrt{2}}\right\rangle$ و $\left|-m\frac{\beta}{\sqrt{2}}\right\rangle$ تبدیل می‌شود. به عبارت دیگر، افزایش m باعث افزایش m برابری فاصله‌ی دو مؤلفه در فضای فاز می‌گردد و در نتیجه تمایز ماکروسکوپیک حالت خروجی به طور چشمگیری افزایش می‌یابد.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، با تعمیم عملگر تبدیل شرطی $\hat{Y}$ به $\hat{Y}^{(m)}$ نشان دادیم که می‌توان ترکیبات خطی از حالت‌های نزدیک همدوس مرتبه بالا تولید کرد. این حالت‌ها به دلیل فاصله‌ی بیشتر مؤلفه‌ها در فضای فاز $\left|\pm m\frac{\beta}{\sqrt{2}}\right\rangle$ در مقابل $\left|\pm\frac{\beta}{\sqrt{2}}\right\rangle$، تمایز ماکروسکوپیک قوی‌تری دارند و به گربه‌های شرودینگر بزرگ مقیاس نزدیک‌تر هستند. این روش می‌تواند برای تولید حالت‌های غیرکلاسیکی با درجه همدوسی ماکروسکوپیک بالاتر مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع‌ها

[۱] A. Othman, D. Yevick," Quantum Properties of the Superposition of Two Nearly Identical Coherent States"; *Int. J. Theor. Phys.*, **57**, (2018) 2293–2308.

[۲] J A. Othman, "The Mth Coherent State"; *Int. J. Theor. Phys.*, **58**, No. 8, (2019)2451–2463.

[۳] A. Othman, D. Yevick, "The characteristics of higher-order derivative coherent states (DCS)"; *J. Mod. Opt.*, **68**, No.18, (2022) 1032-1042.

[٤] E. Nahvifard, and M. R. Bazrafkan, "Conditional transformation operator for near state generation"; *Journal of Russian Laser Research*, **45**, No. 2, (2024) 147-154. DOI 10.1007/s10946-024-10197-3.

[٥] A. Dehghani, B. Mojaveri, R. Jafarzadeh Bahrbeig, "Near'-Cat States: Nonclassicality and Generation"; *Journal of Russian Laser Research*, **40**, (2019) 121-131.

[٦] J. Clausen, M. Dakna, L. Knöll, and D. G. Welsch, "Conditional quantum-state transformation at a beam splitter"; *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.*, **1**, (1999), 332-338.

اثرات غیرخطی کر بر روی تابع احتمال خطا و نسبت سیگنال به نویز در مبدل‌های الکترواپتومکانیک

محمد رضا غفارزاده ؛ محمد کاظم توسلی

گروه اتمی و مولکولی، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد

چکیده

در این مطالعه به بررسی اثرات جملات کر و کراس-کر بر روی تابع احتمال خطا و نسبت سیگنال به نویز مبدل‌های الکترواپتومکانیک می‌پردازیم. بدین منظور هامیلتونی محیط‌های کر و کراس-کر به هامیلتونی مبدل‌های الکترواپتومکانیک افزوده می‌شود. معادلات لانژوین این سامانه به صورت عددی حل و نمودار تابع احتمال خطا و نسبت سیگنال به نویز ارزیابی می‌شود. نتایج نشان می‌دهند که اثرات محیط کر و کراس-کر بر روی این سامانه‌ها به ضرایب جفت‌شدگی تشدیدگر مکانیکی با کاواک‌های اپتیکی و ماکروویو وابسته است. هرچه جفت‌شدگی تشدیدگر مکانیکی با کاواک اپتیکی قوی‌تر باشد، مقدار تابع احتمال خطا بیشتر کاهش می‌یابد و به تبع آن نسبت سیگنال به نویز بیشتر افزایش می‌یابد. بیشترین تاثیرات زمانی افتاق می‌افتد که جفت‌شدگی تشدیدگر مکانیکی با کاواک اپتیکی قوی‌تر و در عین حال جفت‌شدگی تشدیدگر مکانیکی با کاواک مایکروویو ضعیف‌تر باشد.

واژه های کلیدی: *تابع احتمال خطا، نسبت سیگنال به نویز، روشن سازی کوانتومی، سامانه الکترواپتومکانیک، کر، کراس-کر.*

Nonlinear Kerr effects on the error probability function and the signal-to-noise ratio of electro-opto-mechanical converters

M. R. Ghafarzadeh, M. K. Tavassoly

Atomic and Molecular Group, Faculty of Physics, Yazd University

Abstract

In this study, we investigate the effects of Kerr and cross-Kerr terms on the error probability function and the signal-to-noise ratio of electro-opto-mechanical transducers. To this end, the Hamiltonians of the Kerr and cross-Kerr media are added to the electro-opto-mechanical transducer Hamiltonian. Subsequently, to solve the dynamics of this composite system, the Langevin equations are solved numerically, and the error probability function as well as the signal-to-noise ratio are evaluated. The results show that the effects of the Kerr and cross-Kerr media on this system depend on the coupling coefficients of the mechanical resonator with the optical and microwave cavities. The stronger the coupling between the mechanical resonator and the optical cavity, the more decrease in the error probability function, and consequently, the signal-to-noise ratio increases. The most significant effects occur when the mechanical-optical coupling is strong while the mechanical-microwave coupling is weak.

***Keywords**: Error probability function, Signal-to-noise ratio, Quantum illumination, Electro-opto-mechanical system, Kerr, Cross-Kerr.*

PACS No. 3

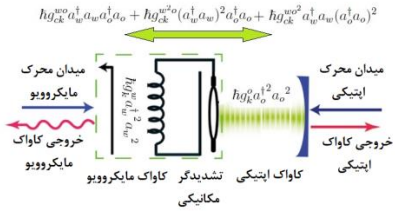
مقدمه: مبدل‌های الکترواپتومکانیک به دلیل تعامل قابل کنترل بین اپتیک، مکانیک و مایکروویو، به عنوان یک منبع اساسی برای کاربردهای متفاوت در حوزه فناوری‌های کوانتومی در نظر گرفته می‌شود[۱]. از کاربردهای این مبدل‌ها به عنوان مثال می‌توان به اندازه‌گیری دقیق کمیت‌های فیزیکی مانند جابجایی [۲]، جرم[۳،٤]، نیرو[٥] و شتاب[٦] اشاره کرد. دقت این سامانه‌ها توسط نویزهای محیطی و ذاتی محدود می‌شود. بنابراین حذف و یا کاهش این نویزها اهمیت بسیار زیادی دارد. مطالعات تحلیلی و عددی نشان می‌دهند که وجود یک محیط غیرخطی کراس-کر می‌تواند اثرات تونل‌زنی القایی فوتون را افزایش دهد [۷]. نتایج تجربی [۹،۸] نشان می‌دهد که جفت‌شدگی‌های اپتومکانیکی تک‌فوتونی ضعیف هستند و مشاهده پدیده‌های کوانتومی تک‌فوتونی را بسیار دشوار می‌کنند. با این حال، در مقابل، جفت‌شدگی‌های اپتومکانیکی چندفوتونی قوی

هستند و تحت این شرایط، درهم‌تنیدگی کوانتومی و حالت‌های میدان غیرکلاسیکی را می‌توان مشاهده کرد.

مدل برهم‌کنش: مبدل‌های الکترواپتومکانیکی از دو کاواک مایکروویو و اپتیکی و یک تشدیدگر مکانیکی تشکیل شده است. شماتیک مبدل‌های الکترواپتومکانیک با حضور محیط کر و کراس-کر در شکل ۱ نمایش داده شده است. هامیلتونی مبدل‌های الکترواپتومکانیک به صورت زیر است [۱۰]:

$$H=\hbar\omega_m b^\dagger b+\hbar\omega_o a_o^\dagger a_o+\hbar\omega_w a_w^\dagger a_w+\frac{\hbar g_w}{2}(b^\dagger+b)(a_w^\dagger+a_w)^2 +\hbar g_o(b^\dagger+b)a_o^\dagger a_o+i\hbar E_w(e^{i\omega_{0w}t}-e^{-i\omega_{0w}t})(a_w^\dagger+a_w) +i\hbar E_o(a_o^\dagger e^{-i\omega_{0o}t}-a_o e^{i\omega_{0o}t}). \quad (۱)$$

در اینجا ω_j با $j=o,w,b$ بسامد میدان‌های اپتیکی، مایکروویو و مکانیکی، ω_{0j} با $j=o,w$ بسامد میدان‌های ورودی اپتیکی و مایکروویو، $a_j,a_j^\dagger$ با $j=o,w$ عملگر نابودی و خلق میدان‌های اپتیکی و مایکروویو، $b\ ,b^\dagger$ عملگر نابودی و خلق میدان مکانیکی، g_j ضریب جفت‌شدگی تشدیدگر مکانیکی با کاواک‌های اپتیکی و مایکروویو، E_j میدان‌های تحریک کاواک‌های اپتیکی و کایکروویو است.



شکل۱ : شماتیکی از مبدل‌های الکترواپتومکانیکی در حضور محیط‌های کر و کراس-کر.

هامیلتونی محیط کر و کراس-کر به شرح زیر است[۱۱،۱۲]،

$$H_k=\hbar g_k^w a_w^{\dagger 2}a_w{}^2+\hbar g_k^o a_o^{\dagger 2}a_o{}^2, \quad (۲)$$

$$H_{ck}=\hbar g_{ck}^{wo^2}a_w^\dagger a_w(a_o^\dagger a_o)^2+\hbar g_{ck}^{w^2o}(a_w^\dagger a_w)^2 a_o^\dagger a_o +\hbar g_{ck}^{wo}a_w^\dagger a_w a_o^\dagger a_o \quad (۳)$$

در اینجا H_k هامیلتونی محیط کر، H_{ck} هامیلتونی محیط کراس-کر، g_k^j ضریب کر در کاواک‌های اپتیکی و مایکروویو، g_{ck}^{wo} ضریب کراس-کر بین میدان‌های اپتیکی و مایکروویو، $g_{ck}^{wo^2}$ ضریب کراس-کر بین مرتبه دوم میدان اپتیکی و مرتبه اول میدان مایکروویو، $g_{ck}^{w^2o}$ ضریب کراس-کر بین مرتبه دوم میدان مایکروویو و مرتبه اول میدان اپتیکی است.

برای حل دینامیکی و ساده سازی هامیلتونی سامانه، ابتدا هامیلتونی در تصویر برهم‌کنش، سپس خطی‌سازی و در نهایت دوباره هامیلتونی در تصویر برهم‌کنش محاسبه و عبارت زیر بدست می‌آید[۱۳]،

$$H=\hbar\sum_{j=w,o}F_j(c_j^\dagger e^{i\Delta_j t}+c_j e^{-i\Delta_j t})+\hbar G_w(bc_w^\dagger+b^\dagger c_w) +\hbar G_o(b^\dagger c_o^\dagger+bc_o)+\hbar F(c_w^\dagger c_o^\dagger+c_w c_o). \quad (۴)$$

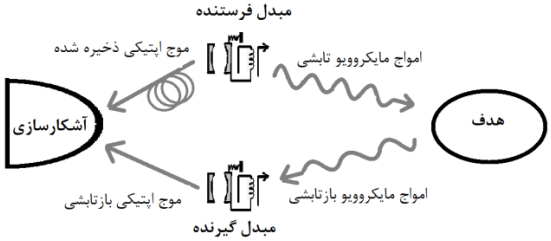
با حل معادلات لانژوین و تعریف حالت‌های خروجی کاواک‌ها به صورت $d_j\equiv c_{j,out}=\sqrt{2\kappa_j^{in}}c_j-c_{j,in}$ بدست می‌آوریم،

$$d_w=A_w c_{w,in}-Bc_{o,in}^\dagger-C_w b_{int}, \quad (۵)$$

$$d_o=B^* c_{w,in}^\dagger+A_o c_{o,in}-C_o b_{int}^\dagger, \quad (۶)$$

ضرایب در سه معادله اخیر در مرجع [۱۳] بیان شده و همچنین κ_j^{in} ضریب اتلاف میدان‌های اپتیکی و مایکروویو است. عملگرهای $c_{w,in}$, $c_{o,in}$, b_{int} به ترتیب متناظر با حالت‌های داخل تشدیدگر مکانیکی، ورودی اپتیکی و ورودی مایکروویو هستند و در حالت‌های حرارتی مستقل از یکدیگر قرار دارند که تعداد متوسط فوتون‌های آنها از رابطه $\bar{n}_j^{th}=\frac{1}{e^{\hbar\omega_j/k_B T_{EOM}}-1}, \quad j=o,w$ بدست می‌آید.

روشن‌سازی کوانتومی[۱]: در روشن‌سازی کوانتومی(QI) از دو مبدل الکترواپتومکانیک استفاده می‌شود. یکی از مبدل‌ها به عنوان فرستنده امواج مایکروویو و دیگری به عنوان گیرنده امواج مایکروویو است. ابتدا مبدل فرستنده، امواج مایکروویو را در محیط منتشر می‌کند. همزمان با آن موج اپتیکی متناظر با آن که از کاواک اپتیکی خارج می‌شود، ذخیره و نگه‌داشته می‌شود. امواج مایکروویو منتشر شده در محیط به هدف برخورد کرده و به سمت مبدل گیرنده بازتاب می‌شود. امواج مایکروویو بازتاب شده وارد مبدل گیرنده شده و در هنگام خروج به موج اپتیکی تبدیل می‌شود. حال موج اپتیکی ذخیره شده و موج اپتیکی بازگشتی با یکدیگر مقایسه می‌شوند. این فرآیند در شکل ۲ به نمایش گذاشته شده است.



شکل۲: فرآیند روشن‌سازی کوانتومی

با در نظر گرفتن اینکه موج مایکروویو تابشی دارای پهنای باند $\Delta\omega$ است، می‌توان گفت در مدت زمان اندازه‌گیری Δt تعداد $M=\Delta\omega\Delta t$ مد تابشی وجود دارد. بنابراین معادله‌های (۵) و (۶) را به صورت زیر بازنویسی می‌کنیم.

[۱] Quantum illumination

$$d_w^k = A_w c_{w,in}^k - Bc_{o,in}^{k\dagger} - C_w b_{\text{int}}^k, \quad (۷)$$

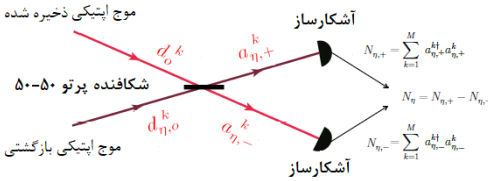
$$d_o^k = B^* c_{w,in}^{k\dagger} + A_o c_{o,in}^k - C_o b_{int}^{k\dagger}, \quad (۸)$$

که در اینجا $1 \le k \le M$ است. برای موج مایکروویو بازگشتی (c_R^k) دو حالت می‌توان در نظر گرفت. در حالت اول فرض می‌کنیم که هدف در محیط وجود ندارد، در این حالت موج مایکروویو بازگشتی به مبدل گیرنده فقط ناشی از نویز محیط (c_B) است. بنابراین در حالت اول داریم: $c_R^k = c_B$. فرض اول را به اختصار با H_0 نمایش می‌دهیم. در حالت دوم فرض می‌کنیم هدف در محیط وجود دارد، در نتیجه موج مایکروویو بازگشتی به مبدل گیرنده شامل نویز محیط و موج مایکروویو بازتابی از هدف است. بنابراین در فرض دوم داریم: $c_R^k = \sqrt{\eta} d_w^k + \sqrt{1-\eta} c_B$. در اینجا η ضریب بازتابندگی هدف است. فرض دوم را به اختصار با H_1 نمایش می‌دهیم. در نهایت موج اپتیکی بازگشتی را می‌توان به صورت زیر نوشت،

$$d_{\eta,o}^k = Bc_R^{k\dagger} + A_o c_{o,in}^{k'} - C_o b_{int}^{k'\dagger}. \quad (۹)$$

در معادله فوق علامت پریم بیانگر این است که عملگرها مربوط به مبدل گیرنده است.

در فرآیند آشکارسازی پرتوهای اپتیکی ذخیره شده و بازگشتی به یک شکافنده پرتو ۵۰–۵۰ تابانیده می‌شوند و خروجی‌های شکافنده پرتو، توسط دو آشکارساز اندازه‌گیری می‌شود و با یکدیگر مقایسه می‌شوند. این فرآیند آشکارسازی در شکل ۳ نمایش داده شده است.



شکل ۳: فرایند آشکارسازی

عملگر میدان‌های خروجی از شکافنده پرتو از رابطه $a_{\eta,\pm}^k = \frac{d_{\eta,o}^k \pm d_o^k}{\sqrt{2}}$ بدست می‌آید. با مقایسه خروجی آشکارسازها با یکدیگر و تعریف یک مقدار آستانه می‌توان به حضور و یا عدم حضور هدف پی‌برد. خروجی آشکارسازها مربوط به شمارش فوتونی است، که معادل اندازه‌گیری عملگرهای عددی $N_{\eta,\pm}^k = a_{\eta,\pm}^{k\dagger} a_{\eta,\pm}^k$ است. در نهایت، مقایسه خروجی آشکارسازها از رابطه $N_\eta^k = N_{\eta,+}^k - N_{\eta,-}^k$ به دست می‌آید.

تابع احتمال خطا[۲] و نسبت سیگنال به نویز[۳]: برای تعیین آستانه تشخیص حضور و یا عدم حضور هدف، احتمال اینکه هدف به اشتباه تشخیص داده شود را با احتمال اینکه هدف به اشتباه تشخیص داده نشود، برابر قرار داده می‌شود و تابع احتمال خطا در حالت QI از رابطه زیر بدست می‌آید[۱۴]،

$$P_{\text{QI}}^M = \frac{P_F + P_M}{2} = \frac{\text{erfc}\left(\sqrt{\text{SNR}_{\text{QI}}^M / 8}\right)}{2}, \quad (۱۰)$$

$$\text{SNR}_{\text{QI}}^M = \frac{4\left(\langle N_\eta\rangle_{H_1} - \langle N_\eta\rangle_{H_0}\right)^2}{\left(\sqrt{\langle(\Delta N_\eta)^2\rangle_{H_0}} + \sqrt{\langle(\Delta N_\eta)^2\rangle_{H_1}}\right)^2}. \quad (۱۱)$$

که در اینجا erfc(.) تابع خطای مکمل، P_{QI}^M تابع احتمال خطا در حالت QI، $\langle N_\eta\rangle_{H_j}, \langle(\Delta N_\eta)^2\rangle_{H_j}$ به ترتیب واریانس و میانگین N_η و SNR_{QI}^M نسبت سیگنال به نویز در حالت QI است. با توجه به اینکه مدها مستقل و به طور یکسان توزیع شده‌اند، می‌توان نسبت سیگنال به نویز یک موج Mمدی را برابر با M برابر نسبت سیگنال به نویز یک موج تک‌مدی قرار داد. بنابراین داریم،

$$\text{SNR}_{\text{QI}}^{(M)} = \frac{4M\left[\left(\langle N_{\eta,+}\rangle_{H_1} - \langle N_{\eta,-}\rangle_{H_1}\right) - \left(\langle N_{\eta,+}\rangle_{H_0} - \langle N_{\eta,-}\rangle_{H_0}\right)\right]^2}{\left(\sqrt{\langle(\Delta N_{\eta,+} - \Delta N_{\eta,-})^2\rangle_{H_0}} + \sqrt{\langle(\Delta N_{\eta,+} - \Delta N_{\eta,-})^2\rangle_{H_1}}\right)^2}. \quad (۱۲)$$

با توجه به تعریف $N_\eta^k = N_{\eta,+}^k - N_{\eta,-}^k$ واریانس به صورت $\langle(\Delta N_\eta)^2\rangle_{H_j} = \langle(\Delta N_{\eta,+} - \Delta N_{\eta,-})^2\rangle_{H_j}$ درمی‌آید و بدون نیاز به محاسبه $\langle N_\eta^2\rangle_{H_j}$ واریانس از رابطه زیر بدست می‌آید[۱۵]،

$$\langle(\Delta N_{\eta,+} - \Delta N_{\eta,-})^2\rangle_{H_j} = \langle N_{\eta,+}\rangle_{H_j}\left(\langle N_{\eta,+}\rangle_{H_j} + 1\right) + \langle N_{\eta,-}\rangle_{H_j}\left(\langle N_{\eta,-}\rangle_{H_j} + 1\right) - \frac{\left(\langle d_{\eta,o}^\dagger d_{\eta,o}\rangle_{H_j} - \langle d_o^\dagger d_o\rangle_{H_j}\right)^2}{2}, j = 1,2. \quad (۱۳)$$

برای مقایسه حالت QI با حالت همدوس[۴](coh)، تابع احتمال خطا در حالت همدوس را از رابطه زیر بدست می‌آوریم[۱۵]،

$$P_{\text{coh}}^{(M)} = \frac{1}{2}\text{erfc}\left(\sqrt{\text{SNR}_{\text{coh}}^{(M)} / 8}\right) \quad (۱۴)$$

$$\text{SNR}_{\text{coh}}^{(M)} = 4\eta M \bar{n}_w / \left(2\bar{n}_B + 1\right) \quad (۱۵)$$

که در اینجا $P_{\text{coh}}^{(M)}$ تابع احتمال خطا، $\text{SNR}_{\text{coh}}^{(M)}$ نسبت سیگنال به نویز در حالت همدوس و $\bar{n}_w$ میانگین تعداد فوتون‌های مایکروویو در کاواک مایکروویو است.

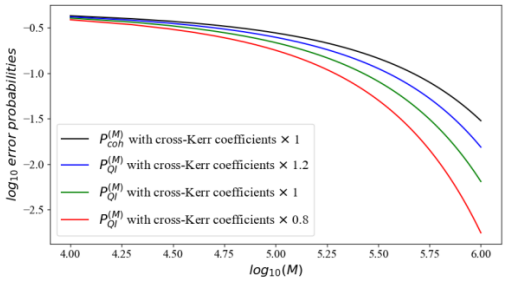
بحث و نتیجه‌گیری: در این بخش تابع احتمال خطا برای حالت QI برای ضرایب کراس–کر متفاوت، تابع احتمال خطا برای حالت همدوس و همچنین نسبت سیگنال به نویز برای حالت‌های QI و همدوس را به صورت عددی حل می‌کنیم و نمودارهای مربوطه را

[۲] Error probability function
[۳] Signal-to-noise ratio
[۴] Coherent state

رسم می‌کنیم. برای رسم نمودارهای تابع احتمال خطا از پارامترهای زیر استفاده شده است[۱۶]،

$$\eta = 0.07\$, \Gamma_w = 51819.5, \Gamma_o = 6684.3, \bar{n}_w = 0.739, \bar{n}_o = 0.681$$

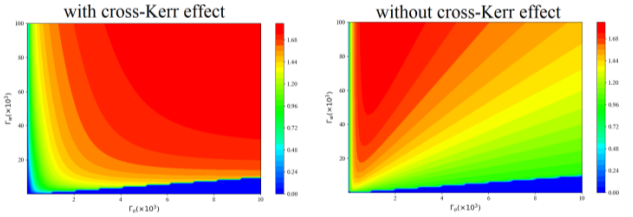
$g_{ck}^{w^2o} = 10^{-22}, g_{ck}^{wo^2} = 10^{-15}, g_{ck}^{wo} = 10^{-6}$. در اینجا $\bar{n}_o$ میانگین تعداد فوتون در کاواک اپتیکی و Γ_o, Γ_w به ترتیب ضریبی از قدرت جفت‌شدگی تشدیدگر مکانیکی با کاواک اپتیکی و کاواک مایکروویو است، که رابطه دقیق آن در مرجع [۱۳] بیان شده است.



شکل ٤: نمودار $\log_{10}(P^{(M)})$ بر حسب $\log_{10}(M)$. نمودار مشکی مربوط به حالت همدوس، نمودار سبز برای حالت QI با ضرایب کراس–کر بیان شده در متن، نمودار قرمز برای حالت QI با ضرایب کراس–کر بیان شده ضرب در ۰/۸ و نمودار آبی برای حالت QI با ضرایب کراس–کر بیان شده ضرب در ۱/۲ است.

شکل ٤ نشان می‌دهد، احتمال خطا در تشخیص هدف در حالت QI با و یا بدون در نظر گرفتن ضرایب کراس–کر از حالت همدوس کمتر است. به عنوان مثال برای $M = 10^6$ احتمال خطا در حالت QI ده مرتبه از حالت همدوس کمتر است. با دقت بیشتر در می‌یابیم که با افزایش ضرایب کراس–کر، احتمال خطا نیز افزایش می‌یابد و کارآمدی مبدل الکترواپتومکانیک کاهش می‌یابد. لازم به ذکر است، این نمودار برای مقادیر ثابت Γ_o, Γ_w رسم شده است. برای کاهش احتمال خطا و افزایش نسبت سیگنال به نویز باید ضرایب جفت‌شدگی مبدل‌های الکترواپتومکانیک را بهینه کرد، به همین منظور نمودار نسبت سیگنال به نویز در حالت QI با و بدون در نظر گرفتن اثرات کراس–کر را برحسب ضرایب جفت‌شدگی رسم می‌کنیم (شکل ۵).

در شکل ۵ مشاهده می‌کنیم، برای مقادیر $\Gamma_o < 2000$ اضافه کردن محیط غیرخطی کراس–کر باعث می‌شود، نسبت سیگنال به نویز کاهش یابد. به عبارت دیگر محیط غیرخطی کراس–کر در مبدل‌هایی که قدرت جفت‌شدگی مکانیکی–اپتیکی ضعیفی دارند، باعث می‌شود نسبت سیگنال به نویز کاهش یابد. اما مبدل‌هایی که جفت‌شدگی مکانیکی–اپتیکی قوی ($\Gamma_o > 2000$) دارند، اضافه کردن اثرات کراس–کر باعث می‌شود، نسبت سیگنال به نویز افزایش می‌یابد. بر اساس نتایج عددی و نمودارهای ارائه شده در شکل ۵ برای محدوده مقادیر $\Gamma_o > 2000, \Gamma_w < 40000$ نسبت سیگنال به نویز بیشترین افزایش را دارد.



شکل ۵: نمودار نسبت سیگنال به نویز در حالت QI با و بدون در نظر گرفتن اثرات کراس–کر بر حسب Γ_o, Γ_w. برای رسم نمودار از پارامترهای زیر استفاده شده است[۱۶]،

$T_{EOM} = 30mK, \omega_m = 10MHz, \omega_w = 10GHz, \lambda_o = 1064nm, \kappa_o = 1MHz, \kappa_w = 2MHz,$
$P_o = P_w = 30mW, \eta = 0.07, g_{ck}^{wo} = 10^{-6}, g_{ck}^{w^2o} = 10^{-22}, g_{ck}^{wo^2} = 10^{-15}.$

با دقت بیشتر در شکل ۵ درمی‌یابیم، در محدوده‌های $\Gamma_o > 2000, \Gamma_w < 40000$ که قبل از لحاظ کردن اثرات کراس–کر، دارای نسبت سیگنال به نویز ضعیفی هستند، با اضافه شدن این اثرات، نسبت سیگنال به نویز افزایش می‌یابد. در نتیجه با استفاده از محیط غیرخطی کراس–کر می‌توان ضرایب جفت‌شدگی مبدل‌های الکترواپتومکانیک را در جهت افزایش نسبت سیگنال به نویز، بهینه‌سازی کرد و بهترین ضریب جفت‌شدگی مکانیکی–اپتیکی و مکانیکی–مایکروویو را انتخاب کرد.

مراجع

[1] Sh. Barzanjeh, A. Xuereb, S. Gröblacher, M. Paternostro, C. A. Regal, and E. M. Weig; "Optomechanics for quantum technologies"; *Nat. Phys*., **18**, 15-24 (2022).
[2] W. Zhao, S. D. Zhang, A. Miranowicz, and H. Jing; "Weak-force sensing with squeezed optomechanics"; *Science China Physics, Mechanics & Astronomy*, **63**, 224211 (2019).
[3] Y. He; "Sensitivity of optical mass sensor enhanced by optomechanical coupling"; *Appl. Phys. Lett*., **106**, 121905 (2015).
[4] T. Li, W. Wang, and X. Yi; "Enhancing the sensitivity of optomechanical mass sensors with a laser in a squeezed state"; *Phys. Rev. A,* **104**, 013521 (2021)
[5] G. J. Milburn and M. J. Woolley; "An introduction to quantum optomechanics"; *Acta Physica Slovaca,* **61**, 483-601 (2011).
[6] A. G. Krause, M. Winger, T. D. Blasius, Q. Lin, and O. Painter; "A high-resolution microchip optomechanical accelerometer"; *Nature Photonics*, **6**, 768-772 (2012).
[7] H. Solki, A. Motazedifard, and M. H. Naderi; "Improving photon blockade, entanglement, and mechanical-cat-state generation in a generalized cross-kerr optomechanical circuit"; *Phys. Rev. A*, **108**, 063505 (2023).
[8] S. Groeblacher, J. B. Hertzberg, M. R. Vanner, G. D. Cole, S. Gigan, K. C. Schwab, and M. Aspelmeyer; "Demonstration of an ultracold micro-optomechanical oscillator in a cryogenic cavity"; *Nature Phys*., **5**, 485-488 (2009).
[9] E. Verhagen, S. Deleglise, S. Weis, A. Schliesser, and T. J. Kippenberg; "Quantum-coherent coupling of a mechanical oscillator to an optical cavity mode"; *Nature,* **482**, 63-67 (2012).
[10] Sh. Barzanjeh, D. Vitali, P. Tombesi, and G. J. Milburn; "Entangling optical and microwave cavity modes by means of a nanomechanical resonator"; *Phys. Rev. A* **84**, 042342 (2011).
[11] R. Khan, F. Massel, and T. T. Heikkilä; "Cross-kerr nonlinearity in optomechanical systems"; *Phys. Rev. A*, **91**, 043822 (2015).
[12] Q. Zheng, W. Zhong, G. Cheng, and A. Chen; "Nonreciprocal tripartite entanglement based on magnon kerr efect in a spinning microwave resonator"; *Optics Communications*, **546**, 129796 (2023).
[13] M. R. Ghafarzadeh and M. K.Tavassoly; "Enhancing quantum illumination efects using kerr and cross-kerr media in electro-opto-mechanical transducer"; *Phys. Scr.,* **100**, 105114 (2025).
[14] See Supplemental material at http://link.aps.org/supplemental/10.1103/physrevlett.114.080503, Supplemental material for *Phys. Rev. Lett.* **114**, 080503 (2015).
[15] S. Guha and B. I. Erkmen; "Gaussian-state quantum-illumination receivers for target detection"; *Phys. Rev. A,* **80**, 052310 (2009).
[16] Sh. Barzanjeh, S. Guha, Ch. Weedbrook, D. Vitali, J. H. Shapiro, and S. Pirandola; "Microwave quantum illumination"; *Phys. Rev. Lett*., **114**, 080503 (2015).

شبیه‌سازی کوانتومی تغییراتی مدل هابرد با شرایط مرزی متناوب به روش VQE

زینلی ، عطیه[1] ؛ بخشی، زهرا[2]

[1] دانشکده فیزیک دانشگاه شاهد ، بزرگراه خلیج فارس ، تهران

[2] گروه فیزیک، دانشگاه شاهد، تهران، ایمیل: z.bakhshi@shahed.ac.ir

چکیده

رشد نمایی ابعاد فضای هیلبرت در سیستم‌های فرمیونی شدیداً همبسته، مانعی بنیادین در شبیه‌سازی دقیق فازهای ماده چگال به شمار می‌رود. در این پژوهش، کارایی الگوریتم ترکیبی کلاسیک-کوانتومی حل‌کننده تغییراتی مقادیر ویژه (VQE) برای محاسبه تراز انرژی حالت پایه مدل هابرد دو جایگاهی در رژیم نصف‌ظرفیت و تحت شرایط مرزی متناوب ارزیابی شده است. در این راستا، هامیلتونی سیستم به کمک نگاشت جردن-ویگنر بر یک مدار ٤ کیوبیتی تصویر شد و از انزاتس‌های سخت‌افزار-کارآمد برای آماده‌سازی حالت کوانتومی بهره‌گیری گردید. با تغییر پیوسته پارامتر همبستگی (U/t) و گذار از فاز فلزی به فاز عایق موت در یک بستر شبیه‌سازی ایده‌آل، نتایج بهینه‌سازی کلاسیک COBYLA با مقادیر حاصل از قطری‌سازی دقیق (ED) مورد سنجش قرار گرفت. یافته‌های محاسباتی حاکی از آن است که در غیاب نویز سخت‌افزاری، این رهیافت کوانتومی انرژی حالت پایه را با خطای مطلقی از مرتبه $10^{\{-11\}}$ استخراج می‌کند؛ نتیجه‌ای که دقت شگفت‌انگیز و کارایی بالای روش‌های تغییراتی را در تحلیل پدیده‌های پیچیده بس‌ذره‌ای به وضوح تایید می‌نماید.

واژه های کلیدی: *حل‌کننده واریانسی مقادیر ویژه، مدل هابرد، شرایط مرزی متناوب، عایق موت، محاسبات کوانتومی.*

Variational Quantum Simulation of the Hubbard Model under Periodic Boundary Conditions via VQE

Zeynali, Atiye[1]; Bakhshi, Zahra[2]

[1] *Department of Physics, Shahed University, Tehran,*
[2] *Department of Physics, Shahed University, Tehran*

Abstract

The exponential scaling of the Hilbert space in strongly correlated fermionic systems poses a fundamental computational challenge in condensed matter physics. In this study, we investigate the efficacy of the hybrid classical-quantum Variational Quantum Eigensolver (VQE) in determining the ground state energy of a two-site Hubbard model at half-filling under periodic boundary conditions. Employing the Jordan-Wigner transformation, the fermionic Hamiltonian is mapped onto a four-qubit register, and a hardware-efficient ansatz is utilized for variational state preparation. By systematically tuning the correlation strength (U/t) across the metal-to-Mott insulator transition within a noiseless simulation framework, the VQE outcomes—optimized via the COBYLA routine—are benchmarked against Exact Diagonalization (ED) results. Our numerical findings reveal that, in the absence of hardware noise, this variational approach extracts the ground state energy with an exceptional absolute error on the order of 10^{-11}. *This validates the high fidelity and robustness of variational quantum algorithms in simulating complex many-body phenomena.*

***Keywords**: Variational Quantum Eigensolver, Hubbard Model, Periodic Boundary Conditions, Mott Insulator, Quantum Simulation*

PACS No. 03.67.Ac, 71.10.Fd, 71.30.+h

مقدمه

توصیف رفتارهای نوظهور ناشی از همبستگی‌های قوی الکترونی، مانند ابررسانایی دمای بالا و گذارهای فاز فلز–عایق، از کلیدی‌ترین مباحث فیزیک ماده چگال مدرن است. در سیستم‌هایی با همبستگی شدید، به دلیل وجود برهم‌کنش‌های موضعی بزرگ، تقریب‌های تک‌ذره‌ای کلاسیک مانند نظریه تابعی چگالی (DFT) و نظریه اختلال، کارایی خود را در پیش‌بینی دقیق فازهای الکترونیکی از دست می‌دهند، چرا که این روش‌ها بر پایه نادیده گرفتن یا کوچک فرض کردن ترم برهم‌کنش بنا شده‌اند. مدل هابرد به عنوان یکی از غنی‌ترین الگوهای نظری در این حوزه، رقابت میان انرژی جنبشی ناشی از پرش الکترون بین جایگاه‌های مجاور (t) و انرژی پتانسیل ناشی از دافعه کولنی موضعی (U) را به تصویر می‌کشد. حل این مدل در ابعاد بزرگ به دلیل رشد نمایی فضای هیلبرت، کامپیوترهای کلاسیک را در روش قطری‌سازی دقیق با بن‌بست مواجه می‌کند. بر اساس ایده فایمن، پردازنده‌های کوانتومی پتانسیل شکستن این سد محاسباتی نمایی را دارا هستند.

در دوران محاسبات کوانتومی مقیاس متوسط نویزدار (NISQ) که سخت‌افزارها بدون سیستم‌های گران‌قیمت تصحیح خطا عمل می‌کنند، اجرای مدارهای عمیق به دلیل پدیده واهمدوسی امکان‌پذیر نیست. از این رو، الگوریتم‌های ترکیبی کلاسیک–کوانتومی و در رأس آن‌ها حل‌کننده واریانسی مقادیر ویژه(VQE) ، به عنوان راهکاری کارآمد توسعه یافته‌اند. این الگوریتم با انتقال فرآیند پرهزینه بهینه‌سازی پارامترها به پردازنده‌های کلاسیک، عمق مدار کوانتومی را به حداقل می‌رساند. در این کار پژوهشی، پایداری، الگوی همگرایی عددی و رفتار گذار فاز فرمیونی الگوریتم VQE در استخراج ترازهای انرژی حالت پایه مدل هابرد دو جایگاهی با اعمال شرایط مرزی متناوب به دقت تحلیل می‌گردد.

روش محاسباتی و فرمول‌بندی

مدل هابرد یک‌بعدی بر روی یک شبکه مجزا در وضعیت نصف‌ظرفیت، با اعمال شرایط مرزی متناوب (Periodic Boundary Conditions)، توسط هامیلتونی محاسباتی زیر توصیف می‌گردد:

$$H = -t \sum_{\{\sigma=\uparrow,\downarrow\}} \left(c^{\dagger}_{\{1\sigma\}} c_{\{2\sigma\}} + c^{\dagger}_{\{2\sigma\}} c_{\{1\sigma\}} \right) + U \sum_{i=1}^{2} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

در این رابطه، عملگرهای $c^{\dagger}_{i\sigma}$ و $c_{i\sigma}$ به ترتیب عملگرهای خلق و فنای فرمیونی در جایگاه i با مؤلفه اسپینی σ هستند و عملگر تعداد نیز به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$n_{\{i\sigma\}} = c^{\dagger}_{\{i\sigma\}} c_{\{i\sigma\}}$$

پارامتر tتعیین‌کننده دامنه پرش الکترون بین دو جایگاه مجاور است که به دنبال ناموضعی کردن توابع موج و ایجاد فاز فلزی است، در حالی که پارامتر Uدافعه درون‌جایگاهی را مشخص می‌کند و اشغال مضاعف یک جایگاه توسط دو الکترون با اسپین مخالف را با جریمه انرژی مواجه می‌سازد. به دلیل اعمال شرایط مرزی متناوب بر روی این ساختار جفت‌شده دو جایگاهی، ترم‌های پرش فیزیکی مابین مرزهای ابتدایی و انتهایی شبکه نیز با قدرت کامل فعال باقی می‌مانند.

پیاده‌سازی این هامیلتونی بر روی سخت‌افزارهای کوانتومی نیازمند تبدیل روابط پادتبدیل فرمیونی به جبر اسپینی کیوبیت‌ها است. در این راستا، نگاشت جردن–ویگنر به عنوان یک تبدیل دقیق ریاضی بکار گرفته می‌شود که در آن فضای فرمیونی به یک مدار ٤ کیوبیتی مپ می‌گردد. بخش کوانتومی الگوریتم VQE بر پایه اصل تغییرات بنا شده است که تضمین می‌کند مقدار چشم‌داشتی انرژی برای هر حالت آزمایشی پارامتریک، همواره بزرگتر یا مساوی انرژی واقعی حالت پایه سیستم است [4]. در این تحقیق، از مدار متغیر سخت‌افزار–کارآمد TwoLocal شامل دروازه‌های چرخشی تک‌کیوبیتی Ry و Rz به همراه لایه‌های درهم‌تنیده‌ساز خطی CNOTاستفاده شده است. پس از آماده‌سازی حالت و اندازه‌گیری مقدار چشم‌داشتی هامیلتونی، پارامترهای زاویه‌ای مدار توسط بهینه‌ساز کلاسیک بدون گرادیان COBYLA در یک چرخه تکرارشونده اصلاح می‌شوند تا سیستم به کمینه انرژی همگرا گردد. شبیه‌سازی‌های عددی این بخش در بستر نرم‌افزاری Qiskit پیاده‌سازی شده است.

بحث

به منظور ارزیابی وفاداری الگوریتم واریانسی، یک اسکن پارامتری جامع با تغییر نسبت برهم‌کنش U/t در بازه 0.00 تا 8.00 انجام شد. برای صحت‌سنجی نتایج، مقادیر حاصل از VQE در برابر حل دقیق حاصل از قطری‌سازی مستقیم کلاسیک (ED) قرار گرفتند که جزییات عددی آن در جدول ۱ منعکس شده است.

جدول ۱: مشخصات عددی همگرایی انرژی حالت پایه مدل هابرد تحت شرایط مرزی متناوب

نسبت همبستگی (U/t)	انرژی تحلیلی دقیق (E_exact)	انرژی محاسباتی (E_VQE)	خطای مطلق $\|\Delta E\|$
۰,۰۰	−۲,۸۲۸۴۲	−۲,۸۲۸۴۲	$۱,۱۱ \times ۱۰^{-10}$
۱,۱٤	−۱,٦۸۵۵۷	−۱,٦۸۵۵۷	$٤,۲۳ \times ۱۰^{-11}$
۲,۲۹	−۰,۸۵۷۱٤	−۰,۸۵۷۱٤	$۸,۸۸ \times ۱۰^{-11}$
۳,٤۳	−۰,۲۸۵۷۱	−۰,۲۸۵۷۱	$۱,۸۲ \times ۱۰^{-11}$
٤,۵۷	۰,۰۰۰۰۰	۰,۰۰۰۰۰	$۳,۰۲ \times ۱۰^{-12}$
۵,۷۱	۰,۰۰۰۰۰	۰,۰۰۰۰۰	$۱,۳۸ \times ۱۰^{-11}$
٦,۸٦	۰,۰۰۰۰۰	۰,۰۰۰۰۰	$۲,۳۳ \times ۱۰^{-12}$
۸,۰۰	۰,۰۰۰۰۰	۰,۰۰۰۰۰	$۹,۳۳ \times ۱۰^{-13}$

یافته‌های محاسباتی مندرج در جدول ۱ نشان می‌دهند که الگوریتم VQE در تمامی پهنه اسکن پارامتری به خطای مطلقی در مرتبه 10^{-11} تا 10^{-13} دست یافته است. تبیین علمی این همگرایی فوق‌العاده بالا این است که محاسبات حاضر در بستر شبیه‌سازی ایده‌آل و بدون نویز (Statevector Simulation) اجرا شده‌اند. در این ساختار شبیه‌سازی، اثرات مخرب نویز واهمدوسی سخت‌افزاری و همچنین خطای آماری ناشی از محدود بودن تعداد شات‌های اندازه‌گیری (Shot Noise) وجود ندارد؛ در نتیجه، بهینه‌ساز بدون گرادیان COBYLA موفق شده است بدون گرفتار شدن در کمینه‌های محلی یا دشت‌های بایر (Barren Plateaus)، به مرز ریاضی دقت ماشین همگرا شود.

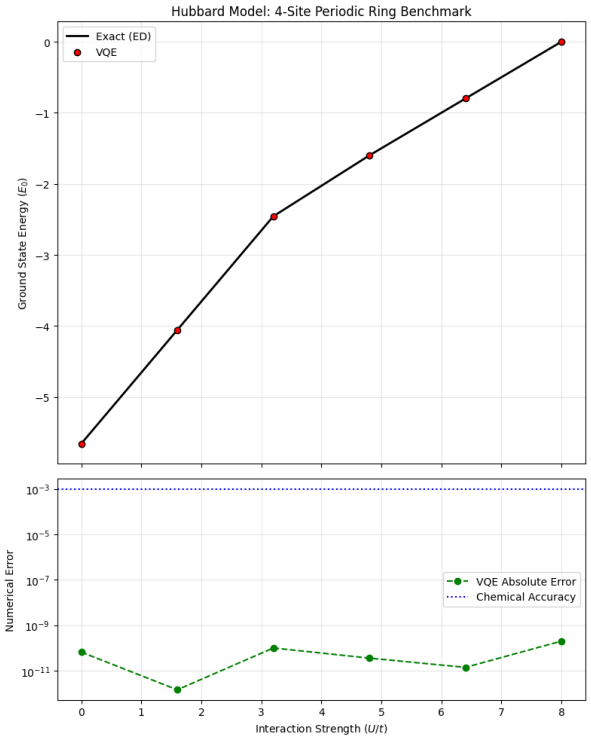
تحلیل فیزیکی داده‌های استخراج‌شده، گذار فاز موضعی‌سازی الکترون‌ها را آشکار می‌سازد. در نقطه آغازین پویش محاسباتی (U/t=0)، انرژی جنبشی جهش الکترونی ترم غالب است و ذرات در سراسر شبکه ناموضعی هستند. با تسلط ترم پرش، انرژی حالت پایه دقیقاً بر روی مقدار مرزی زیر تثبیت می‌شود:

$$E_0 = -2\sqrt{\{2\}t} \approx -2.82842$$

این تطابق دقیق، صحت نگاشت فرمیونی به کیوبیتی را تحت شرایط مرزی متناوب به وضوح نشان می‌دهد. با افزایش پارامتر U/t، جمله دافعه موضعی کولنی شروع به اعمال جریمه بر روی وضعیت‌های جفت‌شدگی اسپینی می‌کند و تراز انرژی روندی صعودی به خود می‌گیرد (قدر مطلق انرژی منفی کاهش می‌یابد). این افزایش تراز، بازتابی مستقیم از مقاومت الکترون‌ها در برابر اشغال دوگانه یک جایگاه فیزیکی است. این ناحیه کراس‌اور، محل ایجاد بیشترین میزان درهم‌تنیدگی کوانتومی بین کیوبیت‌ها در طول فرآیند بهینه‌سازی مدار است.

در رژیم همبستگی شدید ($U/t \geq 4.57$) ، جریمه انرژتیک دافعه، الکترون‌ها را ناگزیر به تک‌اشغالی جایگاه‌ها و موضعی شدن کامل در فضا می‌نماید که شناسنامه اصلی فاز عایق موت است. در این وضعیت، مقدار عددی ثبت‌شده در جدول بر روی سطح 0.0000 اشباع (Saturate) می‌شود. باید تاکید کرد که این مقدار صفر، یک صفر فیزیکی مطلق برای تراز انرژی نیست، بلکه ناشی از انتخاب مبدأ پتانسیل و آفست تنظیم‌شده در ماتریس هامیلتونی محاسباتی کد است؛ بدین معنا که در حد همبستگی شدید، احتمال اشغال مضاعف به صفر رسیده، سهم ترم دافعه بی‌اثر گشته و به دلیل سرکوب کامل ترم پرش، پویایی تراز انرژی نسبت به این مبدأ اشباع می‌شود.

انطباق کامل منحنی‌های محاسباتی بر نتایج کلاسیک در شکل 1، صحت این رفتار فیزیکی را تایید می‌کند. توانایی الگوریتم VQE در ردیابی این جابه‌جایی ظریف ترازهای انرژی با خطای ناچیز، کارایی رویکردهای تغییراتی را در دوره سخت‌افزارهای میان‌مقیاس نویزدار برای شبیه‌سازی سیستم‌های فرمیونی شدیداً همبسته کاملاً تایید می‌کند.



شکل 1 : منحنی تغییرات انرژی حالت پایه مدل هابرد برحسب نسبت همبستگی U/t؛ مقایسه بین نقاط الگوریتم VQE و خط پیوسته قطری‌سازی دقیق (ED)

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، قابلیت الگوریتم‌های تغییراتی در بازسازی فازهای فیزیکی مدل هابرد تحت شرایط مرزی متناوب تایید گردید. نتایج نشان داد که استفاده از مدارهای کم‌عمق پارامتریک در ترکیب با راهبرد کلاسیک COBYLA در یک محیط محاسباتی ایده‌آل، رویکردی بسیار دقیق در استخراج ترازهای انرژی سیستم الکترونی بس‌ذره‌ای است. اگرچه خطای ثبت‌شده در مرتبه خطای ماشین (10^{-11})بازتاب‌دهنده شرایط بدون نویز شبیه‌ساز است، اما پتانسیل بالای این رهیافت واریانسی را برای تحلیل فازهای فرمیونی تایید می‌کند. گام بعدی این تحقیق، ارزیابی پایداری انزاتس در حضور مدل‌های نویز واقعی سخت‌افزارهای NISQ خواهد بود.

مرجع‌ها

[1] A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt, et al.; "A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor"; *Nature Communications* **5**, (2014) 4213.
[2] J. Hubbard; "Electron correlations in narrow energy bands"; *Proceedings of the Royal Society of London A* **276**, (1963) 238-257.
[3] S. Bravyi and A. Kitaev; "Fermionic quantum computation"; *Annals of Physics* **298**, (2002) 210-226.
[4] J. R. McClean, J. Romero, R. Babbush, and A. Aspuru-Guzik; "The theory of variational quantum simulation"; *New Journal of Physics* **18**, (2016) 023023.
[5] J. Preskill; "Quantum Computing in the NISQ Era and Beyond"; *Quantum* **2**, (2018) 79.
[6] M. Cerezo, A. Sone, T. Volkoff, L. Cincio, and P. Coles; "Cost function dependent barren plateaus in shallow parametrized quantum circuits"; *Nature Communications* **12**, (2021) 1791.
[7] A. Kandala, A. Mezzacapo, K. Temme, et al.; "Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets"; *Nature* **549**, (2017) 242-246.

کنترل کوانتومی درهم‌تنیدگی اتم–فوتون در سیستم‌های باز با استفاده از پمپاژ ناهمدوس

محمدی ،داود[1]؛ اسدپور،سیدحسین [2] ؛ جعفری، محمود [1]

1. گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران- ایران

2. پژوهشگاه دانش های بنیادی، IPM ، تهران- ایران

چکیده

در این پژوهش به بررسی و دستیابی به کنترل کوانتومی درهم‌تنیدگی بین اتم و فوتون در یک سیستم کوانتومی باز در حالت پایدار می‌پردازیم. با به‌کارگیری تکنیک پمپاژ ناهمدوس، با دستکاری و افزایش سطح درهم‌تنیدگی کنترل کوانتومی سیستم را مورد بررسی قرار داده ایم. برای این منظور، با استفاده از معیار درهم‌تنیدگی محاسبه شده از فرمالیسم فون–نویمان و حل عددی معادلات دینامیکی سیستم که با استفاده از نرم‌افزار MATLAB پیاده‌سازی شده است، وابستگی متقابل درهم‌تنیدگی به پارامتر دتونینگ (Detuning) میدان‌های ضعیف پمپاژ، مورد تحلیل دقیق قرار گرفته است. نتایج عددی نشان می‌دهد که با تنظیم بهینه‌ی پارامترهای پمپاژ ناهمدوس، می‌توان به سطوح قابل توجهی از درهم‌تنیدگی اتم–فوتون دست یافت که پتانسیل بالایی برای کاربردهای آینده در پردازش و ارتباطات کوانتومی دارد.

واژه های کلیدی: *درهم‌تنیدگی اتم–فوتون، سیستم کوانتومی باز، پمپاژ ناهمدوس، کنترل کوانتومی، حالت پایدار، اطلاعات کوانتومی*

Quantum Control of Atom-Photon Entanglement in Open Systems Using Incoherent Pumping

Mohammadi, Davood [1]; Asadpour, Seyed Hossein [2]; Jafari, Mahmoud [1]

[1] Condensed Matter group, Physics Faculty, K.N. Toosi University of technology, Tehran, Iran

[2] Institute for Research in Fundamental Sciences, Tehran, Iran

Abstract

In this research, we investigate the quantum control of entanglement between an atom and a photon within an open quantum system at steady state. By employing an incoherent pumping technique, we examine the quantum control of the system through the manipulation and enhancement of the entanglement levels. To achieve this, using the entanglement measure calculated via the Von Neumann entropy formalism and numerical solutions of the system's dynamic equations implemented in MATLAB, we have conducted a precise analysis of the interdependence between entanglement and the detuning parameter of the weak pumping fields. Numerical results demonstrate that by optimizing the incoherent pumping parameters, one can achieve significant levels of atom-photon entanglement, which holds great potential for future applications in quantum information processing and quantum communications.

***Keywords**: Atom-Photon Entanglement, Open Quantum Systems, Incoherent Pumping, Quantum Control, Steady State, Quantum Information.*

مقدمه

درهم تنیدگی یکی از پدیده های مکانیک کوانتومی است که یک عنصر کلیدی در کاربردهای ارتباطات و اطلاعات کوانتومی به شمار می رود از درهم تنیدگی در استفاده از راه دور، رمزنگاری، کپی برداری اطلاعات و... استفاده می شود.

از تمام فناوری هایی که در حال حاضربرای علم اطلاعات کوانتومی پیگیری می شود منحصرا اتم های به دام افتاده (تله اندازی شده) معتبرترین گزینه ها برای ذخیره سازی اطلاعات کوانتومی است[1]. از طرف دیگر فوتون ها گزینه بدیهی برای حمل اطلاعات کوانتومی در فواصل زیاد هستند ارسال اطلاعات میان اتم وفوتون صورت می

گیرد که در آن نور به عنوان سامانه ذخیره کننده در نظر گرفته می شود حالتهای پایه اتمی توانایی ذخیره کردن بلند مدت اطلاعات کوانتومی را فراهم می کند[2, 3].

نظریه سیستم های کوانتومی باز که با محیط اطراف خودش اندرکنش دارد دینامیک سیستم های کوانتومی باز با محیط اطراف را توصیف می کند[4].

نظریه کوانتومی سیستم های باز به دلیل این که با محیط اطراف خود اندرکنش می کند دارای اهمیت زیادی می باشد دینامیک سیستم در این حالت دارای اهمیت فراوانی می باشد. برهم کنش سیستم باز با محیط باعث می شود که درهم‌تنیدگی کم‌کم از بین برود . این کار باعث می شود که محققان به دنبال راه حل هایی برای به حداقل رساندن این ناهمدوسی و واپاشی شوند. نظریه سیستم های باز بیان می کند آنچه که باعث این ناهمدوسی می شود، محیط اطراف این سیستم باز، که با آن اندرکنش دارد می شود[5, 6].

روش محاسباتی

در این پژوهش محاسبات را با استفاده از روش ماتریس چگالی انجام می دهیم زیرا محاسبات با استفاده از معادله شرودینگر سخت‌تر می شود خصوصا برای مواقعی که بعضی فرآیندها را در مساله لحاظ کرد. مثل فرآیندهایی نظیر واهلش‌ها، گسیل خودبه‌خودی، برخوردها، اثر دوپلر و... که به صورت اختلال وارد مساله می شوند. در این حالات ها استفاده از معادله شرودینگر سخت است.

مخصوصا مواقعی که سیستم های گازی باشند چون در این سیستم ها اتم ها دائما در حال حرکت اند این حرکت ها یک سری فرآیندهایی را ایجاد می کنند . یکی از این فرآیندها برخورد است مثلا اتم با اتم برخورد می کند این برخورد از جنس برخورد میدان ها است. میدان ها با هم اندرکنش می کنند و هر میدانی بر میدان دیگر تاثیر می گذارد و منجر به جدایی ترازها و از بین رفتن تبهگن می شود. یا مثلا وقتی اتم حرکت می کند گسیل انجام می دهد فرآیندهایی از این قبیل را باید در معادلات لحاظ کرد. ما تا به حال فقط میدانی داشتیم که اتم را تحت تاثیر قرار می داد و معادلات را برای آن می نوشتیم حال یک سری پدیده هایی را داریم که اجتناب‌ناپذیرند و نمی توان از آن ها صرف نظر کرد.

بنابراین ما از روش ماتریس چگال استفاده می کنیم.

در روش ماتریس چگالی معادلات حاکم همان معادلات لیوویل می باشد که به صورت زیر است:

$$\dot{\varrho} = -\frac{i}{\hbar}[\mathrm{H},\varrho] - \frac{1}{2}\{\Gamma,\varrho\} \qquad (1)$$

در معادله(1) جمله سمت راست همیشه صادق است ولی جمله دوم فقط برای سیستم های ساده برقرار است. که به صورت زیر تعریف می شود:

$$\dot{\varrho} = -\frac{i}{\hbar}\left(\mathrm{H}_{ik}\varrho_{kj} - \varrho_{ik}\mathrm{H}_{kj}\right) - \frac{1}{2}\left(\Gamma_{ik}\varrho_{kj} - \varrho_{ik}\Gamma_{kj}\right) \qquad (2)$$

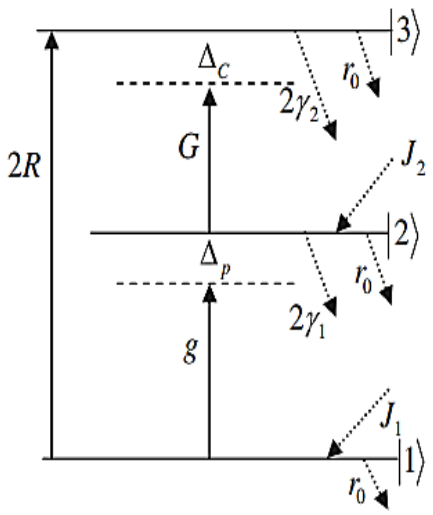
در معادله (2)، H هامیلتونی ،ϱ چگالی و Γ واهلش یا گسیل خود به خودی است. در این پژوهش آرایش سیستم اصلی(سیستم اتمی سه ترازی از نوع نردبانی باز) که مورد مطالعه قرار گرفته است را معرفی و بررسی می کنیم و سپس هامیلتونی مربوط به سیستم را بدست می آوریم وبا استفاده از قضیه لیوویل عناصر ماتریس چگالی را بدست می آوریم و در ادامه به حل عددی معادلات حرکت مربوطه به حل عددی این معادلات را استخراج کرده ایم و به تحلیل شکل ها می پردازیم.

یک سیستم سه ترازی از نوع نردبانی باز با سطح پایینی $|1\rangle$ و سطح بالایی $|3\rangle$ و سطح متوسط $|2\rangle$ در شکل (1) نشان داده شده است را در نظر می گیریم. دو سطح پایین تر $|1\rangle$ و $|2\rangle$ توسط یک میدان قابل تنظیم ضعیف با فرکانس ω_p و فرکانس رابی $\mathcal{g} = \vec{\mu}_{12}.\frac{\vec{E}_P}{\hbar}$ جفت می شوند. در حالی که سطح بالایی $|3\rangle$ و سطح متوسط $|2\rangle$ توسط یک میدان قوی با فرکانس ω_c و فرکانس رابی $G = \vec{\mu}_{12}.\frac{\vec{E}_c}{\hbar}$ جفت می شوند. در این جا $\boldsymbol{\mu_{ij}}$ *گشتاورهای دوقطبی اتمی هستند و* $\vec{E}_c$ *و* $\vec{E}_P$ *دامنه میدان جفت شده هستند.*

انتشار خودبه‌خودی از سطح بالایی $|3\rangle$ به سطح متوسط $|2\rangle$ با $2\gamma_1$ نشان داده می شود.

یک پمپاژ ناهمدوس با نرخ پمپاژ $2R$ بین سطوح $|1\rangle$ و $|3\rangle$ اعمال می شود. فرض می شود که فرآیند پمپاژ ناهمدوس از سطح $|1\rangle$ به سطح $|3\rangle$ از طریق برخی حالت های کمکی نامشخص صورت می گیرد.

بنابراین شرایط مربوط اثر تداخل ناشی از فرآیندهای پمپاژ همه نادیده گرفته می شود. j_1 و j_2 نرخ تزریق اتمی به ترتیب سطوح $|1\rangle$ و $|2\rangle$ هستند. r_0 نرخ خروج اتمی از حفره است که برای ثابت نگه داشتن تعداد کل اتم ها ، آن را $j_1 + j_2 = r_0$ فرض می کنیم.



شکل 1: شماتیک یک سیستم اتمی سه سطحی باز از نوع نردبانی

هامیلتونی سیستم ما به صورت زیر است:

$$H = H_0 + H_1 \qquad (3)$$

که در رابطه (3) H_0، هامیلتونی سیستم بدون اندرکنش می باشد و H_1 هامیلتونی برهم کنشی سیستم می باشد.

بنابراین هامیلتونی کلی سیستم سه ترازی از نوع نردبانی ما به صورت زیر می باشد:

$$H = -\hbar(\Delta_p |2\rangle\langle 2| + (\Delta_p + \Delta_c)|3\rangle\langle 3|) - \hbar(g |2\rangle\langle 1| + G|3\rangle\langle 2| + C.C) \qquad (4)$$

در معادله (4) Δ_p و Δ_c دتونینگ میدان های کاوشگر وجفت هستند که به صورت زیر تعریف می شود.

$$\Delta_p = \omega_{21} - \omega_p$$
$$\Delta_c = \omega_{32} - \omega_c$$

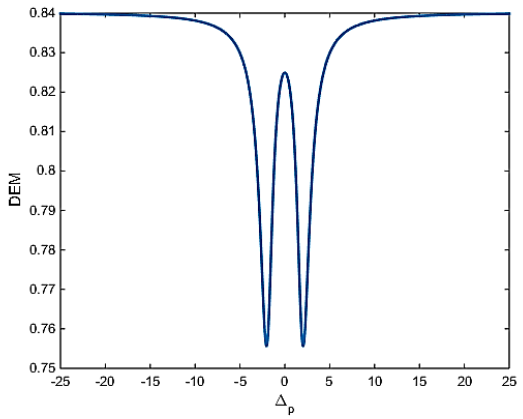
که در آن ω_{ij} اختلاف فرکانس بین سطوح مربوطه می باشد.

در این بخش از پژوهش به بررسی تغییرات درهم‌تنیدگی بر حسب دتونینگ میدان های کاوشگر و جفت Δ_p با استفاده از پمپاژ ناهمدوس R می پردازیم. در این جا مقدار Δ_p از -25 تا $+25$ می باشد و مقدار R=0, 0.4, 0.8 *می باشد.*

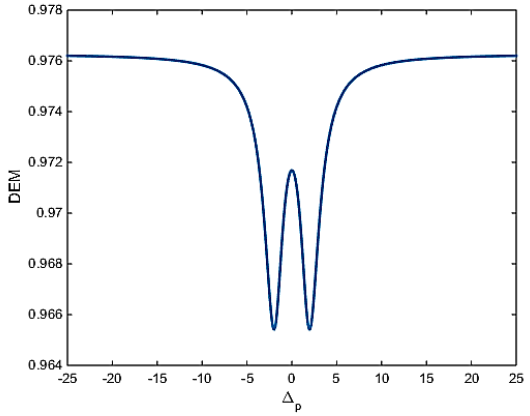
که این مقادیر را برای سیستم باز در نظر گرفته ایم. همچنین پارامترهای ثابتی که در این جا به کار برده ایم به صورت $\gamma_2 = 0.5$ *،* γ_1 =1.2، G =2، P=1 ، g =0.5 *می باشد.*

که در آن γ_1 *و* γ_2 *مربوط به گسیل خود به خودی می باشد.*

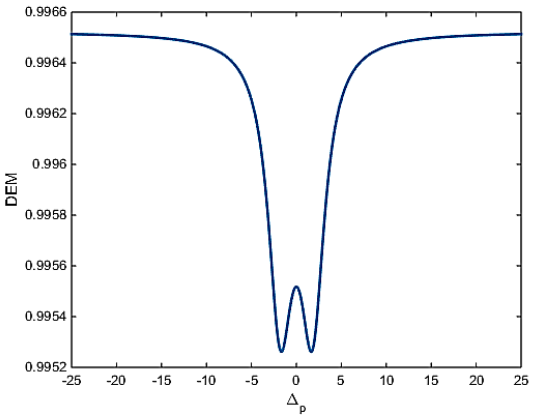
برای بررسی پاسخ مقدار درهم‌تنیدگی سیستم سه ترازی نردبانی مطابق شکل (1) به میدان های اعمال شده، مقدار درهم‌تنیدگی را با استفاده از رابطه فون–نویمان(DEM) مورد بررسی قرار می دهیم . وبا استفاده از نرم افزار متلب آن ها را حل عددی میکنیم سپس شکل های زیر حاصل می شود:



شکل 2: تغییرات درهم تنیدگی بر حسب دتونینگ برای سیستم بازR=0



شکل 3: تغییرات درهم تنیدگی بر حسب دتونینگ برای سیستم بازR=0.4



شکل 4: تغییرات درهم تنیدگی بر حسب دتونینگ برای سیستم باز R=0.8

بحث

همان طور که از شکل (2) پیداست وقتی که پمپاژ ناهمدوس برابر R=0 می باشد مقدار درهم تنیدگی برابر DEM=0.84 می باشد که این مقدار ماکزیمم در حالتی اتفاق می افتد که Δ_p بین ± 5 تا ± 25 است و مقدار مینیمم آن در حالتی که Δ_p برابر ± 2.5 است، اتفاق می افتد. و در حالت $\Delta_p = 0$ مقدار درهم تنیدگی برابر DEM=0.84 است.

شکل(3) درهم‌تنیدگی را برای حالتی که پمپاژ ناهمدوس برابر R=0.4 است را نشان می دهد. همان طور که از شکل پیداست مقدار بیشینه درهم‌تنیدگی در حالتی که دتونینگ میدان های ضعیف بین ± 5 تا ± 25 است اتفاق می افتد و مقدار آن برابر DEM=0.976 است. و مقدار کمینه آن برای حالتی که دتونینگ میدان های ضعیف برابر ± 2.5 می باشد، برابر DEM=0.885 است.

در آخر مقدار درهم تنیدگی را به ازای پمپاژ ناهمدوس R=0.8 مورد بررسی قرار می دهیم همان طور که از شکل (4) دیده می شود مقدار بیشینه درهم تنیدگی در حالتی که دتونینگ میدان های ضعیف بین ± 10 تا ± 25 می باشد برابر DEM=0.995 است.

نتیجه گیری

در این پژوهش، دینامیک درهم‌تنیدگی اتم–فوتون در یک سیستم سه‌ترازی نردبانی باز، تحت تأثیر پمپاژ ناهمدوس تحلیل شد. نتایج عددی نشان داد که نرخ پمپاژ ناهمدوس به‌عنوان یک پارامتر کنترلی کلیدی، نقش مؤثری در جبران اثرات مخرب محیط و تقویت درهم‌تنیدگی ایفا می‌کند.

یافته‌ها حاکی از آن است که با تنظیم بهینه نرخ پمپاژ و دتونینگ، می‌توان نوسانات درهم‌تنیدگی را مدیریت کرد و پایداری همبستگی‌های کوانتومی را در سیستم‌های باز ارتقا داد. این بررسی ثابت می‌کند که پمپاژ ناهمدوس رویکردی کارآمد برای کنترل دینامیک سیستم‌های اتم–فوتون است و می‌تواند در توسعه سامانه‌های پردازش اطلاعات کوانتومی به‌عنوان راهکاری عملیاتی جهت مقابله با اتلاف انرژی و اطلاعات مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع ها

[1] Entezar, S. Roshan. "Controllable atom–photon entanglement near a 3D anisotropic photonic band edge." *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 43.8 (2010): 085503..

[2] Singh, A., et al., *Quantum internet—applications, functionalities, enabling technologies, challenges, and research directions.* IEEE Communications Surveys & Tutorials, 2021. **23**(4): p. 2218-2247.

[3] Monroe, C., *Quantum information processing with atoms and photons.* Nature, 200 :(6877)416 .2p. 238-246.

[4] Breuer, H.-P. and F. Petruccione, *The theory of open quantum systems*. 2002: Oxford University Press, USA.

[5] Zurek, W.H., *Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical.* Reviews of modern physics, 2003. **75** :(3)p. 715.

[6] Zurek, W.H., *Quantum jumps, Born's rule, and objective reality.* Many worlds, 2010: p. 409-432.

تحلیل درهم‌تنیدگی چندبخشی در سیستم‌های ستاره‌ای اسپینی هایزنبرگ XY تحت تأثیر میدان مغناطیسی

صبور ، عباس[۱] ؛ قنواتی، صغرا[۲]

[۲،۱] گروه فیزیک، واحد امیدیه، دانشگاه آزاد اسلامی ، امیدیه، ایران

چکیده

ساختارهای ستاره‌ای در مدل اسپینی هایزنبرگ XY به دلیل توانایی در ایجاد همبستگی‌های کوانتومی پایدار، به عنوان چارچوبی امیدوارکننده برای فناوری‌های کوانتومی نظیر حسگرهای فوق‌حساس و شبکه‌های ارتباطی مطرح شده‌اند. در این پژوهش، رفتار درهم‌تنیدگی چندبخشی در سیستم‌های ستاره‌ای متشکل از ۳ تا ۸ اسپین، تحت تأثیر میدان مغناطیسی خارجی b و برهم‌کنش‌های غیرخطی XY (a=0.5) ، با استفاده از معیارهای Q_1 درهم‌تنیدگی گلوبال و درهم‌تنیدگی چند بخشی Q_2 تحلیل شد. نتایج نشان داد که در میدان‌های ضعیف (b=0.02) ، سیستم‌های با N=4 و N=8 به درهم‌تنیدگی کامل $(Q_1 = 1)$ دست می‌یابند، در حالی که همبستگی Q_2 به دلیل فاصله هندسی، به زیر 0.7 کاهش می‌یابد. افزایش شدت میدان مغناطیسی (b≥1) منجر به فروپاشی ناگهانی درهم‌تنیدگی $Q_1 < 0.1$ و غلبه رفتار شبه‌کلاسیکی می‌شود. همچنین، سیستم‌های بزرگ (N≥7) حتی در میدان‌های ضعیف (b=0.02) ، کاهش قابل توجهی در $Q_2 < 0.7$ نشان می‌دهند که بیانگر حساسیت بالای این معماری به اندازه سیستم است. این یافته‌ها مؤید آن است که سیستم‌های ستاره‌ای کوچک (N≤6) با میدان مغناطیسی ضعیف (b≤0.5) ، گزینه‌ای بهینه برای پیاده‌سازی شبکه‌های کوانتومی مقیاس‌پذیر و حسگرهای مبتنی بر درهم‌تنیدگی هستند.

کلید واژه: *درهم‌تنیدگی چندبخشی، سیستم‌های ستاره‌ای اسپینی، مدل هایزنبرگ XY ، میدان مغناطیسی خارجی، معیار میر–والاخ، معیار اسکات*

Analysis of Multipartite Entanglement in Heisenberg XY Star-Shaped Spin Systems under Magnetic Field Modulation

Sabour, Abbass[1], Ghanavati, Soghra[2]

[1,2] Department of physics, Om.C, Islamic Azad University, omidiyeh, Iran

Abstract

Star-shaped architectures in the Heisenberg XY spin model have emerged as a promising framework for quantum technologies such as ultra-sensitive sensors and quantum communication networks, owing to their ability to sustain robust quantum correlations. In this study, multipartite entanglement behavior in star-shaped systems consisting of 3 to 8 spins is analyzed under an external magnetic field (b) and anisotropic XY interactions with parameter a=0.5, using global entanglement Q_1 and multipartite entanglement Q_2 measures. The results show that in weak magnetic fields (b=0.02), systems with N=4 and N=8 achieve maximal entanglement $Q_1 = 1$, while the Q_2 value drops below 0.7 due to the geometric structure of the system. Increasing the magnetic field strength (b≥1) leads to a sudden collapse of entanglement $Q_1 < 0.1$ and a transition to quasi-classical behavior. Furthermore, in larger systems (N≥7), even under weak fields (b=0.02), a significant reduction in $Q_2 < 0.7$ is observed, indicating the high sensitivity of this architecture to system size. These findings confirm that small star-shaped systems (N≤6) with weak magnetic fields (b≤0.5) are optimal for implementing scalable quantum networks and entanglement-based sensors.

Keywords: *Multipartite entanglement, Star-shaped spin systems, Heisenberg XY model, External magnetic field, Meyer-Wallach measure, Scott measure*
PACS No. 3

۱.مقدمه

امروزه، معماری‌های غیرخطی اسپین‌های کوانتومی، به ویژه ساختارهای ستاره‌ای، به دلیل توانایی ذاتی آن‌ها در ایجاد و نگهداری همبستگی‌های چندبخشی، به یکی از محورهای اصلی پژوهش در زمینه‌های فیزیک ماده چگال و علوم اطلاعات کوانتومی تبدیل شده‌اند [۲-۱]. در این میان، مدل‌های هایزنبرگ به دلیل گنجاندن هم‌زمان برهم‌کنش‌های مبادله‌ای ناهمسانگرد و میدان مغناطیسی خارجی، ابزاری قدرتمند برای مطالعهٔ گذار میان نظم کوانتومی و رفتار کلاسیکی فراهم می‌آورند [٤-۳].

پیشرفت‌های اخیر در پیاده‌سازی تجربی شبکه‌های کوانتومی با توپولوژی ستاره‌ای، مانند تله‌های یونی مقیاس‌پذیر [۵] و سامانه‌های اسپینی مرکز NV در الماس برای حسگری میدان مغناطیسی [٦]، ضرورت مطالعهٔ نظری رفتار درهم‌تنیدگی در این معماری را دوچندان کرده است. همچنین، روش‌های توزیع درهم‌تنیدگی در شبکه‌های ستاره‌ای [۷] و نقش حالت‌های فشردهٔ اسپینی در فرامترولوژی کوانتومی [۹-۸] به طور گسترده بررسی شده‌اند. با این وجود، تأثیر همزمان میدان مغناطیسی خارجی و اندازهٔ سیستم بر پایداری درهم‌تنیدگی چندبخشی در مدل هایزنبرگ XY کمتر مورد توجه قرار گرفته است.

مطالعات پیشین بیشتر بر روی سیستم‌های کوچک با حداکثر پنج اسپین متمرکز بوده‌اند [۱۱-۱۰]، در حالی که رفتار سیستم‌های بزرگ‌تر (با بیش از شش اسپین) به دلیل پیچیدگی محاسباتی کمتر شناخته شده است. همچنین، اگرچه اثر میدان مغناطیسی در مدل‌های آیزینگ بررسی شده است [۸]، تحلیل هم‌زمان ناهمسانگردی XY و میدان مغناطیسی برای اندازه‌های مختلف سیستم تاکنون به طور کامل انجام نشده است. پژوهش‌های تجربی جدید در زمینهٔ حسگرهای نانومغناطیسی [٦] و شبکه‌های توزیع کوانتومی [۱۲] نشان می‌دهند که یافتن محدودهٔ بهینه از پارامترهای کنترلی برای حفظ درهم‌تنیدگی، یک نیاز عملی مهم است.

در این پژوهش، با استفاده از مدل هایزنبرگ XY برای توصیف یک سیستم ستاره‌ای متشکل از ۳ تا ۸ اسپین، به تحلیل کمی درهم‌تنیدگی چندبخشی تحت تأثیر میدان مغناطیسی (b) می‌پردازیم. هامیلتونی این سیستم به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$H = J_x \sum_{n=2}^{N} \sigma_x^n \otimes \sigma_x^1 + J_y \sum_{n=2}^{N} \sigma_y^n \otimes \sigma_y^1 + B_z \sum_{n=1}^{N} \sigma_z^n \qquad ۱$$

که در آن J_x و J_y به ترتیب ضریب برهم‌کنش اسپین مرکزی با اسپین‌های کناری (بیرونی) در راستای x و y و B_z میدان مغناطیسی بر روی همه اسپین ها در راستای z و $\sigma_{i=x,y,z}$ ماتریس پائولی محور i است. با تعریف $a = J_y / J_x$ (ضریب ناهمسانگردی) و $b = B_z / J_x$ (شدت نسبی میدان مغناطیسی)، هامیلتونی بدون بعد به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = J_x h$$

$$h = \sum_{n=2}^{N} \sigma_x^n \otimes \sigma_x^1 + a \sum_{n=2}^{N} \sigma_y^n \otimes \sigma_y^1 + b \sum_{n=1}^{N} \sigma_z^n \qquad ۲$$

در این پژوهش مقدار $a = 0.5$ (ناهمسانگردی متوسط) انتخاب شده است. انتخاب مدل XY به دلیل نزدیکی بیشتر به شرایط واقعی در سیستم‌های اسپینی انجام شده است [۱۳]. ما با استفاده از معیارهای درهم‌تنیدگی میر-والاخ Q_1 و اسکات Q_2 [۱۵-۱٤]، تأثیر میدان مغناطیسی و تعداد اسپین‌ها را بر پایداری همبستگی‌های کوانتومی بررسی می‌کنیم. هدف نهایی، ارائهٔ رهنمودهای عملی برای طراحی شبکه‌های کوانتومی مقیاس‌پذیر و حسگرهای فوق‌حساس مبتنی بر معماری ستاره‌ای است.

۲ . معیارهای درهم‌تنیدگی

برای سنجش درهم‌تنیدگی، از دو معیار میر-والاخ (گلوبال) و اسکات (چندبخشی) استفاده شده است [۱۰-۹]. این سنجه‌ها به ترتیب برای ارزیابی درهم‌تنیدگی کلی سیستم و توزیع آن بین زیرسیستم‌ها به کار می‌روند. مطالعات پیشین نشان داده‌اند که این معیارها در سیستم‌های متقارن مانند ساختارهای ستاره‌ای از دقت بالایی برخوردارند [۱۵].

۲,۱ معیار میر-والاخ Q_1

سنجهٔ گلوبال میر-والاخ با رابطهٔ زیر بیان می‌شود [۹]:

$$Q_1 = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} 2(1 - Tr[\rho_k^2]) \qquad ۳$$

که در آن ρ_k ماتریس چگالی کاهش یافتهٔ k امین کیوبیت، با ردگیری روی بقیهٔ کیوبیت‌ها است. Q_1 برای حالتی با بیشترین مقدار درهم‌تنیدگی برابر یک و برای حالت جداپذیر برابر صفر است.

۲,۲ معیار اسکات Q_2

اسکات در سال ۲۰۰٤ سنجه درهم‌تنیدگی یک سیستم چندبخشی را به صورت زیر معرفی کرد [۱۰]:

$$Q_2 = \binom{N}{2}^{-1} \sum_{|S_2|=2} \left(1 - Tr\left[\rho_{S_2}^2\right]\right) \qquad ٤$$

که در آن s_2 یک زیرمجموعه از دو کیوبیت، و ρ_{S_2} ماتریس چگالی کاهش‌یافته آن دو کیوبیت است. این معیار برای حالت‌های خالص N کیوبیتی تعریف شده و درجه درهم‌تنیدگی زوجی را می‌سنجد.

۳ .نتایج و بحث

در این پژوهش، رفتار درهم‌تنیدگی چندبخشی در سیستم‌های ستاره‌ای مبتنی بر مدل هایزنبرگ XY با ناهمسانگردی $a=0.5$ و تحت تأثیر میدان مغناطیسی متغیر b بررسی شد. یافته‌های کلیدی نشان می‌دهند که میدان مغناطیسی b به‌عنوان یک پارامتر تنظیم‌گر فعال، نقش تعیین‌کننده‌ای در کنترل سطوح درهم‌تنیدگی Q_1 (گلوبال) و Q_2 (زوجی) ایفا می‌کند. در ادامه، رفتار سیستم در سه ناحیه متفاوت بر اساس نمودارهای شکل‌های ۱ و ۲ به تفکیک تحلیل می‌شود.

۳,۱ میدان‌های ضعیف: $b < 0.5$

با مراجعه به شکل ۱(تعداد پرهای سیستم ستاره‌ای با ps نام‌گذاری شده است) مشاهده می‌شود که در این ناحیه، منحنی‌های Q_1 برای تمامی سیستم‌ها در سطوح بالایی قرار دارند که بیانگر غلبه برهم‌کنش‌های تبادلی XY بر اختلال ناشی از میدان مغناطیسی است. نکته برجسته در این ناحیه، دستیابی سیستم‌های با $N=4$ و $N=8$ به بیشینه درهم‌تنیدگی گلوبال $(Q_1 = 1)$ در $b = 0.02$ است که بیانگر تقارن خاص این اندازه‌ها است. با این حال، سنجهٔ Q_2 در همین میدان‌ها به دلیل ساختار هندسی ستاره‌ای به زیر 0.7 کاهش یافته و در $N=3$ کمترین مقدار را دارد که نشان‌دهندهٔ ضعف همبستگی‌های زوجی در مقایسه با همبستگی‌های گلوبال است. این یافته‌ها با نتایج پژوهش‌های پیشین در مدل‌های ستاره‌ای بدون میدان قوی همخوانی کامل دارد [۱٦-۱۷].

۳,۲ میدان‌های متوسط: $b = 0.5$

در آستانه $b = 0.5$، گذار جالبی در رفتار سیستم رخ می‌دهد. همان‌گونه که در شکل ۱ مشخص است، Q_1 برای سیستم‌های $N=5$ و $N=6$ کاهشی ملایم اما محسوس پیدا می‌کند، در حالی که $N=4$ و $N=8$ همچنان مقاومت نسبی از خود نشان می‌دهند. در مقابل، شکل ۲ رفتار غیرمنتظره‌ای را آشکار می‌سازد: در این میدان، برای سیستم‌های $N=4$ و $N=5$ یک افزایش جزئی در Q_2 رخ می‌دهد. این پدیده جالب را می‌توان به توزیع مجدد درهم‌تنیدگی در سیستم تعبیر کرد؛ به این معنا که با اعمال میدان مغناطیسی متوسط، بخشی از همبستگی‌های گلوبال Q_1 شکسته شده و به صورت همبستگی‌های زوجی Q_2 بین کیوبیت‌های محیطی بازتوزیع می‌شود. این یافته با نتایج پژوهش‌های پیشین در سیستم‌های با ناهمسانگردی متوسط همخوانی دارد [۱۸] و نشان می‌دهد که میدان مغناطیسی نه تنها تخریب‌کننده، بلکه می‌تواند در مقادیر خاص خود، بازآرایی الگوی درهم‌تنیدگی را نیز به همراه داشته باشد.

۳,۳ میدان‌های قوی $(b \geq 1)$

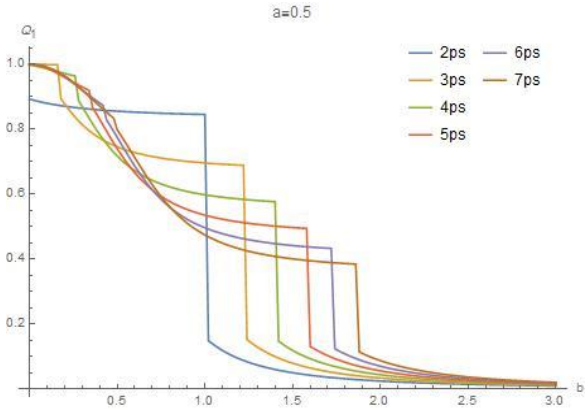
در میدان‌های قوی ، هر دو سنجه دچار فروپاشی ناگهانی می‌شوند $Q_1 < 0.1$ و $Q_2 = 0$ که حاکی از گذار به رفتار شبه‌کلاسیکی است. وابستگی شدید به اندازه سیستم در این ناحیه مشهود است؛ به‌طوری که $N \geq 7$ کاهش نمایی بیشتری در هر دو معیار نشان می‌دهد که با نظریهٔ گذار فاز کوانتومی [۱۹] و آسیب‌پذیری به نویز [۲۰] سازگار است. بنابراین سیستم‌های کوچک $(N \leq 6)$ با میدان ضعیف $(b \leq 0.5)$ گزینهٔ بهینه برای کاربردهای عملی هستند و میدان‌های قوی نیازمند پروتکل‌های بازیابی درهم‌تنیدگی خواهند بود.

٤. نتیجه گیری و پیشنهادها:

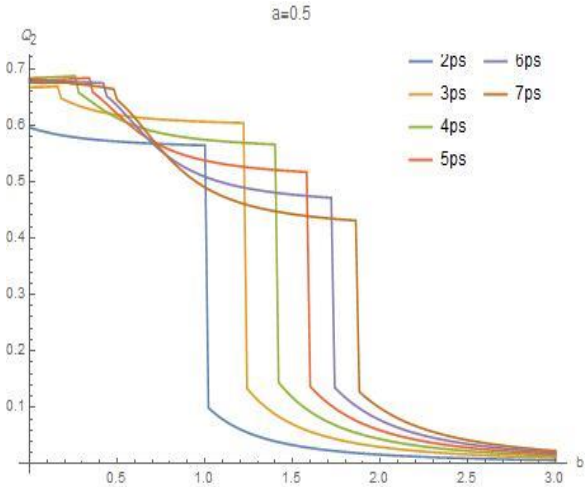
در این مطالعه، نشان دادیم که سیستم‌های ستاره‌ای مبتنی بر مدل هایزنبرگ XY با ناهمسانگردی متوسط $a = 0.5$ قابلیت بالایی در حفظ و تنظیم درهم‌تنیدگی چندبخشی دارند. میدان مغناطیسی b به‌عنوان یک ابزار کنترل پویا، امکان انتقال سیستم از حالت کوانتومی درهم‌تنیده به حالت کلاسیکی جداپذیر را فراهم می‌کند. یافته‌های کلیدی به شرح زیرند:

۱. **میدان‌های ضعیف**: $b<0.5$ بهترین گزینه برای کاربردهای پردازش کوانتومی پایدار و شبکه‌های توزیع درهم‌تنیدگی هستند. در این میدان‌ها پایداری درهم‌تنیدگی گلوبال $(Q_1=1)$ حتی در سیستم‌های بزرگ (۸ کیوبیتی) مشاهده شده است.

۲. **میدان‌های قوی** $b>1$: سیستم به سرعت به حالت فروپاشی کوانتومی نزدیک می‌شود و نیاز به طراحی پروتکل‌های بازیابی درهم‌تنیدگی برای کاربردهای عملی است.



شکل ۱ :نمودار Q_1 بر حسب میدان(b) برای سیستم ستاره‌ای با ۳تا ۸ کیوبیت



شکل۲. نمودار Q2 بر حسب میدان(b) برای سیستم ستاره‌ای با ۳تا ۸ کیوبیت

این مطالعه اثرات ناهمدوسی و نویز محیطی را در نظر نگرفته است. پیشنهاد می‌شود مدل‌سازی با در نظر گرفتن این عوامل انجام شود. همچنین بررسی تأثیر پارامتر ناهمسانگردی a در بازه گسترده‌تر $0<a<1$ می‌تواند به بهینه‌سازی سیستم کمک کند.

مرجع‌ها

[1] M. Kitagawa and M. Ueda, “Squeezed spin states,” *Physical Review A*, vol. 47, no. 6, p. 5138, 1993.
[2] X. Wang, S. Ghose, B. C. Sanders, and B. Hu, “Entanglement in star-shaped spin chains,” *Physical Review A*, vol. 82, no. 1, p. 012303, 2010.
[3] K. Gietka, R. W. Chhajlany, and T. Augusiak, “Quantum phase transitions in XY star systems,” *Physical Review Letters*, vol. 123, no. 18, p. 180602, 2019.
[4] S. Sarkar and S. Ghosh, “Quantum phase transitions in anisotropic Heisenberg star clusters,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 35, no. 25, p. 255801, 2023.
[5] W. C. Campbell et al., “Modular ion trap for scalable quantum information processing,” *AIP Conference Proceedings*, vol. 111, p. 123, 2009.
[6] L. Rondin, J. P. Tetienne, T. Hingant, J. F. Roch, P. Maletinsky, and V. Jacques, “Magnetometry with nitrogen-vacancy defects in diamond,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 77, p. 056503, 2014.
[7] S. Perseguers et al., “Entanglement distribution in star-shaped quantum networks,” *Physical Review A*, vol. 83, p. 052323, 2011.
[8] A. S. Sørensen and K. Mølmer, “Entanglement and extreme spin squeezing,” *Physical Review Letters*, vol. 86, no. 20, p. 4431, 2001.
[9] J. Ma, X. Wang, C. P. Sun, and F. Nori, “Quantum spin squeezing,” *Physics Reports*, vol. 509, no. 2–3, pp. 89–165, 2011.
[10] K. Gietka and T. Augusiak, “Multipartite entanglement in disordered XY spin stars,” *Physical Review B*, vol. 105, no. 18, p. 184422, 2022.
[11] H. J. Briegel and R. Raussendorf, “Persistent entanglement in arrays of interacting particles,” arXiv preprint quant-ph/0104052, 2001.
[12] H. J. Kimble, “The quantum internet,” *Nature*, vol. 453, no. 7198, pp. 1023–1030, 2008.
[13] I. Bengtsson and K. Życzkowski, *Geometry of Quantum States*, 2nd ed. Cambridge University Press, 2017.
[14] D. A. Meyer and N. R. Wallach, “Global entanglement in multiparticle systems,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 43, no. 9, pp. 4273–4278, 2002.
[15] A. J. Scott, “Multipartite entanglement, quantum-error-correcting codes, and entangling power of quantum evolutions,” *Physical Review A*, vol. 69, no. 5, p. 052330, 2004.
[16] A. Hutton and S. Bose, “Mediated entanglement and correlations in a star network of interacting spins,” *Physical Review A*, vol. 69, p. 042312, 2004..
[17] K. Karlóvá and J. Strečka, “Distribution of Bipartite and Tripartite Entanglement within a Spin-1/2 Heisenberg Star in a Magnetic Field,” *Molecules*, vol. 28, no. 10, p. 4037, 2023.
[18] C. Zhang, L. Wang, and M. Liu, “Magnetic field tuning of multipartite entanglement,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 32, no. 45, p. 455702, 2020.
[19] D. Wang, Y. Li, and Z. Zhang, “Critical phenomena in quantum spin systems under external fields,” *Scientific Reports*, vol. 13, no. 1, p. 6789, 2023.
[20] E. Garcia, M. Hernández, and J. López, “Noise resilience in multi-qubit entanglement,” *npj Quantum Information*, vol. 7, no. 1, p. 45, 2021.

معرفی حسگری کوانتومی با فوتون‌های آشکارسازی نشده در حالت چند طیفی با دقت بالا

بدری ، محمد[۱]؛ نوروزی، رحمان[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه، بلوار استاد یوسف ثبوتی، زنجان

چکیده

استفاده از نور غیرکلاسیک در حسگری را نوردهی کوانتومی می‌گویند. یکی از روش‌های جذاب نوردهی کوانتومی، نوردهی با استفاده از فوتون‌های آشکارسازی نشده است. در این روش که مبتنی بر اصل همسانی مسیر است، اطلاعات جسم از دریافت فوتون‌هایی بدست می‌آید که هرگز با آن برخورد نداشته‌اند. در این کار ما این روش را بدین شکل توسعه داده‌ایم که امکان حسگری و تصویربرداری کوانتومی در حالت چند طیفی و با دقت بالاتر، مشابه دقت تداخل‌سنجی حالت NOON ممکن باشد. ایده اصلی این روش، بر طراحی بلور غیرخطی با چند مقطعِ قطبیدگیِ متناوبِ متفاوت برای استفاده در چیدمان حسگری کوانتومی با فوتون‌های آشکارسازی نشده استوار است.

واژه های کلیدی: *همسانی مسیر، فوتون‌های آشکارسازی نشده، حسگری کوانتومی، حسگری چند طیفی، حسگری با دقت بالا.*

High-precision multispectral quantum sensing with undetected photons

Badri, Mohammad[1]; Nouroozi, Rahman[1]

[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan

Abstract

Quantum metrology with undetected photons has attracted considerable interest. In this approach, which relies on the principle of path identity, object information is obtained from photons that have never interacted with it. In this work, we extend this method to enable multispectral quantum sensing and imaging with enhanced precision, comparable to that of NOON-state interferometry. The core idea of our approach is based on engineering a nonlinear crystal with multiple distinct quasi-phase matching sections, designed for use in a quantum sensing setup with undetected photons.

***Keywords**: Path identity, undetected photons, quantum sensing, multispectral sensing, high-precision sensing.*

مقدمه

حسگری کوانتومی منطبق بر روش‌هایی است که از ابزار غیرکلاسیک جهت افزایش دقت در حسگری استفاده می‌کنند. روش فوتون‌های آشکارسازی نشده که برپایه اصل همسانی مسیر، یا به شکل کلی تمییزناپذیری، کار می‌کند این اجازه را می‌دهد که اطلاعات جسم از آشکارسازی فوتون‌هایی بدست بیاید که هرگز با جسم برخورد نداشته‌اند [۱ و ۲].

روش نوردهی دیگری نیز بر پایه تداخل‌سنجی کوانتومی به نام نوردهی حالت NOON وجود دارد که N تعداد فوتون است [۳]. در ساده‌ترین حالت برای دو فوتون، این حالت به وسیله یک باریکه‌شکن و برپایه اصل هونگ–او–مندل ساخته می‌شود. ساخت مراتب بالاتر آن نیاز به انتخاب بعدی[۱] دارد و در پیاده‌سازی آزمایشگاهی دارای پیچیدگی بالایی است [٤ و ٥]. مزیت حاصل از

[۱] Post selection

این روش، افزایش دقت خواندن فاز (θ) با توجه به افزایش تعداد فوتون‌ها به شکل $\theta \rightarrow N\theta$ است [٦].

در حسگری کلاسیک و مخصوصا در شاخه طیف‌سنجی، حوزه‌ای به تکامل رسیده تحت عنوان حسگری چند طیفی وجود دارد. روش چند طیفی امکان استخراج اطلاعات جسم در چند طیف را فراهم می‌کند که می‌تواند بسیار حائز اهمیت باشد [۷].

استفاده از ترکیبی از بلورهای غیرخطی ضمن اصل همسانی مسیر برای ساخت حالات درهمتنیده با ابعاد بالا و تعداد فوتون بیشتر جهت استفاده در مخابرات کوانتومی [۹] و همچنین استفاده از شانه‌های فرکانسی در ترکیب با روش فوتون‌آشکارسازی نشده جهت حذف استفاده از حافظه کوانتومی در حسگری [۱۰] قبلا انجام شده است. در این کار، ما روشی را معرفی خواهیم کرد که حسگری با استفاده از فوتون‌های آشکارسازی نشده را به حالت چند طیفی با دقت بالا مشابه NOON تبدیل می‌کند. روش معرفی شده، پیچیدگی آزمایشگاهی بسیار کمتر و مقاومت بالاتر در برابر نوفه [۱۱] نسبت به حالت NOON است. اساس این روش برپایه بلورهای غیرخطی جدیدی است که به شکل آبشاری تبدیل پایین پارامتری خودبه‌خودی را انجام می‌دهند.

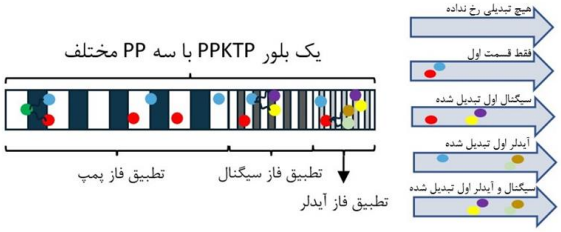
معرفی بلور غیرخطی قطبیده متناوب چند مقطعی

دو روش برای تولید نور دو مده چلانده شده از خلا مرسوم است. یکی استفاده از بلورهای BBO که شرایط تطبیق فاز کامل را با توجه زاویه بلور برای تبدیل پایین پارامتری خودبه‌خودی[۲] برآورده می‌کنند. دیگری استفاده از بلورهای غیرخطی قطبیده متناوب که شرایط شبه تطبیق فاز را برای تبدیل فوتون پمپ به سیگنال و آیدلر ایجاد می‌کنند. استفاده از بلورهای متناوب مقطعی[۳](PP) در آزمایش حسگری با فوتون‌های آشکارسازی نشده به دلیل هم‌مسیر بودن خروجی‌ها بهتر از بلور BBO است.

در استفاده از بلورهای غیرخطی، روشی تحت عنوان SPDC آبشاری وجود دارد. در این روش از دو بلور استفاده می‌شود [۸]. بلور اول، تطبیق فاز را برای تبدیل فوتون پمپ به سیگنال و آیدلر برآورده می‌کند و بلور دوم، جهت تطبیق فاز برای تبدیل سیگنال حاصل از بلور اول به سیگنال و آیدلر جدید تنظیم شده است. اگر هر دو تبدیل رخ دهند و همزمانی سه فوتونی داشته باشیم مزایای قابل توجهی مخصوصا در مخابرات کوانتومی دارد هر چند این روش همواره بازده پایینی داشته است.

برای کار فعلی، ایده تبدیل آبشاری را برای بلورهای PP می‌نویسیم. بدین شکل که یک بلور با سه مقطع PP متفاوت در نظر می‌گیریم که در بخش اول فوتون پمپ می‌تواند به سیگنال و آیدلر تبدیل شود. در بخش‌های دوم و سوم نیز به ترتیب سیگنال و آیدلر تولید شده بخش اول می‌توانند به سیگنال و آیدلر جدید تبدیل شوند (شکل ۱).

حالت‌های محتمل خروجی چنین ترکیبی بدین شکل است که یا هیچ تبدیلی اتفاق نمی‌افتد، یا فقط تبدیل بخش اول رخ می‌دهد (سیگنال و آیدلر اول)، یا بخش اول و دوم (آیدلر اول و سیگنال و آیدلر دوم)، یا بخش اول و سوم رخ می‌دهد (سیگنال اول و سیگنال و آیدلر سوم) یا هر سه بخش رخ خواهند داد (سیگنال و آیدلر دوم و سوم).



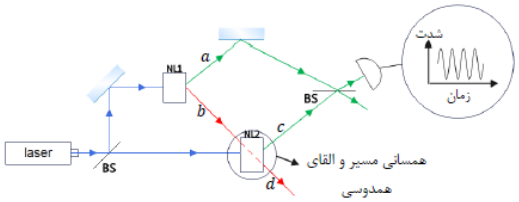
شکل ۱: معرفی بلور PP سه مقطعی. بخش‌های اول تا سوم به ترتیب برای تطبیق فاز تبدیل SPDC فوتون پمپ (سبز)، تبدیل SPDC فوتون سیگنال حاصل از مقطع اول (آبی) و تبدیل SPDC آیدلر حاصل از مقطع اول (قرمز) طراحی شده است. حالت‌های محتمل خروجی در سمت راست نشان داده شده است و فوتون‌های موجود در هر حالت محتمل در یک پنجره زمانی قرار می‌گیرند.

استفاده از بلور چند مقطعی در روش حسگری با فوتون‌های آشکارسازی نشده

روش تصویربرداری با استفاده از فوتون‌های آشکارسازی نشده در سال ۲۰۱٤ توسط زایلینگر و همکاران، بر پایه آزمایش زو–وانگ–مندل معرفی شد که از اصل همسانی مسیر (شکل ۲) برای

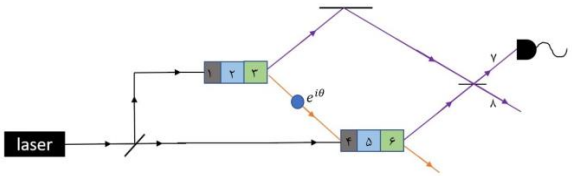
[۲] Spontaneous parametric down conversion (SPDC)
[۳] Periodic Poled

ساخت تصویر تداخلی، از فوتون‌هایی که هرگز با جسم ملاقات نداشته‌اند استفاده می‌کند.



شکل ۲: حسگری با فوتون‌های آشکارسازی نشده. فوتون پمپ بعد از باریکه‌شکن (BS) اول در برهمنهی پمپ بلورهای غیرخطی (NL) یکسان ۱ یا ۲ قرار می‌گیرد. با ایجاد همسانی مسیر (b=d) اطلاعات مسیر از بین رفته و تمیزناپذیری بین بلورها بوجود می‌آید. نهایتا بعد از باریکه‌شکن دوم اطلاعات جسم از سیگنال بدست می‌آید.

در این کار از بلورهای سه مقطعی معرفی شده در شکل ۱ در چیدمان شکل ۲ استفاده کردیم. مقاطع بلورها مطابق شکل ۳ شماره‌گذاری شده و شماره سیگنال و آیدلرها در پانویس آن‌ها بر همین اساس نوشته شده است.



شکل ۳: استفاده از بلور سه مقطعی در حسگری با فوتون‌های آشکار نشده. مقاطع (۱ و ٤)، (۲ و ۵) و (۳ و ٦) در بلورهای غیرخطی دارای PP مشابه هستند و تطبیق فاز یکسان دارند. در مقاطع (۱ و ٤) فوتون پمپ می‌تواند تحت SPDC به سیگنال و آیدلر تبدیل شود. در مقاطع (۲ و ۵) فوتون سیگنال تولید شده در مرحله قبل می‌تواند به سیگنال و آیدلر جدید تبدیل شود. در مقاطع (۳ و ٦) نیز فوتون آیدلر مرحله اول می‌تواند به سیگنال و آیدلر جدید تبدیل شود. همچنین فوتون‌های آیدلر تولیدی در ۱ و ۲ و ۳، فاز جسم را که به اندازه‌ی $\exp(i\theta)$ است، احساس خواهند کرد. نهایتا فوتون‌های سیگنال بعد از باریکه‌شکن دوم و طی مسیرهای ۷ یا ۸ به آشکارساز می‌رسند.

در ادامه معادلات حاکم بر این رخدادها را بررسی می‌کنیم. پمپ بلور اول، حالت

$$|\text{بلور ۱}>= i[g_1(|s_1> e^{i\theta}|i_1>) + g_2(|s_2> e^{i\theta}|i_2> e^{i\theta}|i_2>) + g_3(|s_1>|s_2> e^{i\theta}|i_3>) + g_4(|s_2>|s_3> e^{i\theta}|i_2> e^{i\theta}|i_3>)]. \quad (۱)$$

را نتیجه می‌دهد. ضریب i را به دلیل بازتاب در باریکه‌شکن اول اعمال شده‌است. همچنین آیدلرهای بلور اول تغییرات فاز را احساس کرده‌اند. ضرایب g_{1-4} دامنه احتمال رخدادها را مشخص می‌کنند که برای مقاطع هم‌ارز هر دو بلور، یکسان در نظر گرفته شده است. معادلات بلور دوم نیز به همین شکل برای مقاطع ٤، ۵ و ٦ بدون ضریب i و فاز جسم نوشته می‌شود. در معادله ۱، جمله اول مربوط به بخش ۱، جملات دوم مربوط به رخداد همزمان بخش ۱ و ۲، جملات سوم مربوط به رخداد همزمان بخش ۱ و ۳ و جمله چهارم مربوط به رخداد در همه بخش‌هاست. مجموع معادلات دو بلور حالت سیستم تا قبل از باریکه‌شکن دوم را نتیجه می‌دهد. با اعمال شرط همسانی مسیر به شکل

$$|i_1>=|i_4>, \quad |i_2>=|i_5>, \quad |i_3>=|i_6> \quad (۲)$$

بین آیدلرهای هم‌ارز دو بلور، حالت سیستم به شکل

$$|\psi_1>= g_1(ie^{i\theta}|s_1>+|s_4>)|i_1>+ g_2(ie^{i2\theta}|s_2>+|s_5>)(|i_1>|i_2>)+ g_3(ie^{i\theta}|s_1>|s_3>+|s_4>|s_6>)|i_3>+ g_4(ie^{i2\theta}(|s_2>|s_3>)+(|s_5>|s_6>))(|i_2>|i_3>). \quad (۳)$$

نوشته خواهد شد که تا قبل از باریکه‌شکن دوم است. عملگر اعمال باریکه‌شکن دوم برای وجود فوتون در مسیرهای ۷ و ۸ (مطابق شکل ۳) بدین شکل است که اگر فوتون از مسیرهای ۱، ۲ و ۳ آمده باشد به صورت $\frac{1}{\sqrt{2}}(i|7>+|8>)$ به مسیرهای ۷ و ۸ می‌رود و اگر فوتون از مسیرهای ٤، ۵ و ٦ به باریکه‌شکن رسیده باشد به صورت $\frac{1}{\sqrt{2}}(|7>+i|8>)$ به مسیرهای ۷ و ۸ خواهد رفت. با یک تغییر در نوشتار، مسیرهای ۷ و ۸ را در کت‌ها و شماره مقطع تولیدکننده سیگنال را در پانویس کت خواهیم نوشت. با اعمال عملگر باریکه‌شکن دوم، حالت نهایی به شکل رابطه (۴) خواهد بود. ضرایب جملات چهارگانه به توان ۲، احتمال آشکارسازی را بدست می‌دهد.

$$|\psi_{\text{۲}}>= g_{\text{۱}}\left(ie^{i\theta}\left[\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(i|\text{۷}>_{\text{۱}}+|\text{۸}>_{\text{۱}})\right]+\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(|\text{۷}>_{\text{۴}}+i|\text{۸}>_{\text{۴}})\right)|i_{\text{۱}}>+$$
$$g_{\text{۲}}(ie^{i\text{۲}\theta}\left[\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(i|\text{۷}>_{\text{۲}}+|\text{۸}>_{\text{۲}})\right]+\left(\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(|\text{۷}>_{\text{۵}}+i|\text{۸}>_{\text{۵}})\right)(|i_{\text{۱}}>|i_{\text{۲}}>)+$$
$$g_{\text{۲}}(ie^{i\theta}\left[\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(i|\text{۷}>_{\text{۱}}+|\text{۸}>_{\text{۱}})\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(i|\text{۷}>_{\text{۲}}+|\text{۸}>_{\text{۲}})\right]+$$
$$\left(\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(|\text{۷}>_{\text{۴}}+i|\text{۸}>_{\text{۴}})\right)(\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(|\text{۷}>_{\text{۶}}+i|\text{۸}>_{\text{۶}}))|i_{\text{۲}}>+$$
$$g_{\text{۲}}(ie^{i\text{۲}\theta}\left[\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(i|\text{۷}>_{\text{۲}}+|\text{۸}>_{\text{۲}})\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(i|\text{۷}>_{\text{۳}}+|\text{۸}>_{\text{۳}})\right]+$$
$$\left(\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(|\text{۷}>_{\text{۵}}+i|\text{۸}>_{\text{۵}})\right)(\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(|\text{۷}>_{\text{۶}}+i|\text{۸}>_{\text{۶}}))(|i_{\text{۲}}>|i_{\text{۳}}>). \quad (\text{٤})$$

خواهد بود. با مرتب‌سازی جملات برای مسیر ۷، جملات

$$\text{جمله اول} = g_{\text{۱}}(ie^{i\theta}\frac{i}{\sqrt{\text{۲}}}|\text{۷}>+\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}|\text{۷}>) = g_{\text{۱}}ie^{i\theta}\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(i+\text{۱})|\text{۷}>_{\text{۱,٤}}$$
$$\text{جمله دوم} = ig_{\text{۲}}\left[\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(ie^{i\text{۲}\theta}-\text{۱})\right]|\text{۷}>_{\text{۲,۵}}(|i_{\text{۱}}>|i_{\text{۲}}>)$$
$$\text{جمله سوم} = ig_{\text{۳}}[\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(ie^{i\theta}+\text{۱})]\,|\text{۷}>_{\text{۱,٤}}|\text{۷}>_{\text{۳,٦}}(|i_{\text{۲}}>)$$
$$\text{جمله چهارم} = ig_{\text{۱}}[\frac{\text{۱}}{\sqrt{\text{۲}}}(ie^{i\text{۲}\theta}+\text{۱})]|\text{۷}>_{\text{۲,۵}}|\text{۷}>_{\text{۳,٦}}(|i_{\text{۲}}>|i_{\text{۳}}>) \quad (\text{۵})$$

بدست می‌آید. بنابراین نهایتا چهار جمله در آشکارسازی بدست می‌آید که هر کدام تفسیر خود را دارند و می‌توان آن‌ها بر اساس طول‌موج دسته‌بندی کرد. جمله اول به عنوان ترم ثابت در نظر گرفته می‌شود. در برخی از جملات نهایی، در نمای فاز عبارت 2θ ظاهر شده است که یعنی قدرت تفکیک دو برابر شده است که این موضوع با تعمیم روش و افزایش تعداد مقاطع بلور قابل افزایش مشابه روش NOON است و با اضافه شدن امکان تبدیل هر جفت سیگنال و آیدلر، دقت خواندن فاز با اعداد صحیح افزایش پیدا می‌کند. جملات با طول‌موج‌های متفاوت به راحتی، با استفاده از آینه‌های دو رنگی قابل جداسازی و انتقال به دوربین حساس به خود هستند. در این ترکیب‌بندی، از سه طول‌موج استفاده شده است. جملات آشکارسازی مسیر ۸ مکمل جملات بدست آمده برای مسیر ۷ خواهند بود. برای آشکارسازی اطلاعات و عدم تلفیق جملات با طول‌موج یکسان در یک آشکارساز، باید از حذف اطلاعات ناخواسته با استفاده از تایم‌تگر و قرار دادن پنجره زمانی برای فوتون‌های تولیدی در هر یک از نتایج احتمالی، استفاده کرد.

نتیجه گیری

در این کار با معرفی مفهوم بلور PP سه مقطعی و استفاده از آن در چیدمان حسگری با استفاده از فوتون‌های آشکارسازی نشده، این روش را از دو جهت ارتقا دادیم. اولا در روش معرفی شده از چند طول‌موج به شکل همزمان و در یک چیدمان برای حسگری کوانتومی استفاده می‌شود که می‌تواند اطلاعات مختلفی از هدف را آشکار کند. دوما مطابق روابط بدست آمده، دقت در این روش بر اساس نوع آشکارسازی در یک یا دو طول‌موج از سه طول‌موجِ مورد استفاده دو برابر شده است. این روش با افزایش تعداد مقاطع بلورها قابل تعمیم است. با افزایش تعداد مقاطع متناوب، تعداد طول‌موج‌های استفاده شده و دقت آشکارسازی نیز افزایش پیدا خواهد کرد. همچنین الزامی بر ساخت همه مقاطع در یک بلور وجود ندارد و مقاطع می‌توانند جدا ساخته شده و با تنظیم دمایی مختلف کنار هم قرار گیرند. چیزی که در این روش اهمیت دارد توالی تبدیل‌های پایین پارامتری خودبه‌خودی و امکان آشکارسازی همزمان فوتون‌ها برای تشخیص حالت پدید آمده‌است، بنابراین روش معرفی شده قابلیت پیاده‌سازی بالایی به نسبت حالات پیچیده NOON مخصوصا در مراتب بالا خواهد داشت چراکه صرفا با افزایش تعداد مقاطع بلور و ساخت ادوات اپتیکی منطبق بر طول‌موج‌های تولیدی قابل اجراست.

مرجع‌ها

[۱] X. Y. Zou, L. J. Wang, and L. Mandel, "Induced coherence without induced emission resulting in nonlocal interference," in Optical Society of America Annual Meeting, Technical Digest Series (Optica Publishing Group, 1991), paper FC3.

[۲] Lemos, G., Borish, V., Cole, G. et al. Quantum imaging with undetected photons. Nature 512, 409–412 (2014). https://doi.org/10.1038/nature13586.

[۳] H. Lee, P. Kok, J.P. Dowling, J. Mod. Opt. 49, 2325 (2002)

[٤] C.K. Hong, Z.Y. Ou, L. Mandel, Phys. Rev. Lett. **59**, 2044 (1987)

[۵] Y. Israel, I. Afek, S. Rosen, O. Ambar, Y. Silberberg, Phys. Rev. A 85, 022115 (2012)

[٦] Quantum Metrology, Imaging, and Communication, Springer, David S. Simon, Gregg Jaeger Alexander, V. Sergienko, 2017.

[۷] Christian Fischer and Ioanna Kakoulli ,"Multispectral and hyperspectral imaging technologies in conservation: current research and potential applications", 2006.

[۸] Zhang, Z., Yuan, C., Shen, S. et al. High-performance quantum entanglement generation via cascaded second-order nonlinear processes. npj Quantum Inf 7, 123 (2021). https://doi.org/10.1038/s41534-021-00462-7

[۹] Entanglement by Path Identity, Mario Krenn,1, 2, _ Armin Hochrainer,1, 2 Mayukh Lahiri,1, 2 and Anton Zeilinger, 2017

[۱۰] Quantum Frequency Combs with Path Identity for Quantum Remote Sensing, D. A. R. Dalvit ,1 T. J. Volkoff,1 Y.-S. Choi ,2 A. K..Azad ,2 H.-T. Chen ,2 and P.W. Milonni, prx, 2024

[۱۱] Sebastian Töpfer et al. ,Quantum holography with undetected light.Sci. Adv.8,eabl4301(2022).DOI:10.1126/sciadv.abl4301

پیاده سازی دروازه های کوانتومی پنج بعدی بل با استفاده از تکانه زاویه‌ای مداری نور

کوثری، مهدی[1] ؛ بابازاده، امین[2] ؛ حسینی فرزاد، محمود[3]

[1و3] گروه فیزیک ،دانشکده علوم ، دانشگاه شیراز، شیراز، ایران
[2] دانشگاه وین،موسسه اپتیک کوانتومی و اطلاعات کوانتومی ، وین، اتریش

چکیده

در این مقاله، یک طراحی نوین برای پیاده‌سازی گیت کوانتومی بل پنج‌بعدی با استفاده از نور ساختاریافته معرفی شده است. در حالی که روش‌های پیشین عمدتاً بر پایه ویژگی زوج یا فرد بودن عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای مداری (OAM) در چهار بعد عمل می‌کردند، در این پژوهش از چرخش کنترل‌شده منشورهای داو در تداخل‌سنج ماخ–زندر استفاده شده است. با ایجاد یک آرایش نوری جدید در بازوهای تداخل‌سنج، نوعی تقسیم‌کننده پرتو OAM طراحی شده که توانایی انجام تبدیلات مختلف روی حالت‌های OAM را دارد. این رویکرد امکان تحقق موفق گیت بل پنج‌بعدی را فراهم کرده است؛ دستاوردی که تاکنون گزارش نشده بود. چنین گیت‌هایی می‌توانند نقش مهمی در توسعه ارتباطات کوانتومی سریع و ایمن ایفا کنند.

واژه‌های کلیدی: *حالت پنج بعدی بل ، دروازه کوانتومی، درهمتنیدگی در ابعاد بالا، تکانه زاویه‌ای مداری*

Generation of Five-Dimensional Bell Quantum Gates Using Orbital Angular Momentum of Light

Kowsari, Mahdi[1]; Babazadeh, Amin[2]; Hosseini Farzad, Mahmoud[3]

[1,3] Department of Physics, College of Science, Shiraz University, Shiraz, Iran
[2] University of Vienna, Institute for Quantum Optics and Quantum Information, Vienna, Austria

Abstract

In this paper, a novel five-dimensional Bell quantum gate based on structured light is proposed. Unlike previous approaches limited to four-dimensional systems, the design uses controlled Dove prism rotations inside a Mach–Zhender interferometer to realize new OAM transformations. This method enables the implementation of a five-dimensional Bell gate, which can contribute to faster and more secure quantum communication systems.
***Keywords**: five-dimensional Bell state, Quantum gate, high-dimensional entanglement, orbital angular momentum (OAM)*
PACS No. 3, 42

مقدمه

درهم‌تنیدگی با ابعاد بالا می‌تواند در مقایسه با سامانه‌های دوبعدی، مقدار اطلاعات قابل حمل توسط هر فوتون را به‌طور قابل توجهی افزایش دهد و در نتیجه کارایی پروتکل‌های ارتباطات کوانتومی را بهبود بخشد (1و2). همچنین نشان داده شده است که حالت‌های با بعد بالاتر دارای مقاومت بیشتری در برابر نویز محیطی هستند و امکان نقض قوی‌تر نامساوی بل را فراهم می‌کنند که برای فناوری کوانتومی مستقل از دستگاه اهمیت اساسی دارد (3و4).

فوتون‌های پیچشی حامل تکانه زاویه‌ای مداری (OAM) به دلیل ساختار مدی غنی و روش‌های تولید و کنترل قابل دسترس، یک بستر طبیعی برای پیاده‌سازی کیودیت‌های با ابعاد بالا فراهم می‌کنند (5و6). پیشرفت‌های اخیر امکان تولید، کنترل و جداسازی کارآمد مدهای OAM را فراهم کرده است که این موضوع مسیر را برای کاربردهای عملی در ارتباطات و محاسبات کوانتومی هموار کرده است (7). علاوه بر این، نمایش‌های آزمایشگاهی از توزیع درهم‌تنیدگی OAM در فواصل طولانی، از جمله در کانال‌های

فیبری و فضای آزاد، گامی مهم در جهت تحقق اینترنت کوانتومی مقیاس‌پذیر محسوب می‌شود (8). بنابراین، توسعه دروازه‌های کوانتومی با ابعاد بالا نقش کلیدی در تحقق نسل آینده سامانه‌های پردازش و ارتباطات کوانتومی ایفا می‌کند(9). باوجود پیشرفت‌های قابل توجه در تولید و کنترل حالت‌های OAM، پیاده‌سازی دروازه‌های بل در ابعاد بالاتر از چهار بعد همچنان یک چالش باز محسوب می‌شود.

مبانی نظری:

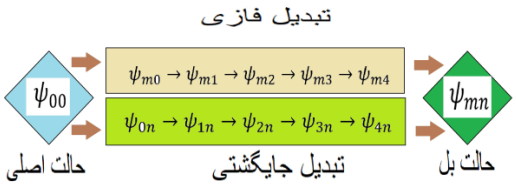
دروازه کوانتومی بل به طور کل در فضای هیلبرت با d درجه‌ی آزادی برای جفت فوتون A و B از رابطه 1 بدست می‌آید:

$$|\psi\rangle_{mn}^{AB} = \frac{1}{\sqrt{d}}\sum_{k=0}^{d-1} e^{i2\frac{\pi}{d}nk} = |k\rangle_A \; |k \ominus m\rangle_B \qquad (1)$$

در حالت دو بعدی همان چهار حالت معروف بل ($\Psi\pm$ و $\Phi\pm$) را می‌توان بوجود آورد. در سال 2017 تولید حالت‌های کوانتومی بل در 4 بعد انجام گرفت (10). برای ساخت چنین امری سه عدد دروازه کوانتومی بل تولید گردید که در آن از یک نوع شکافنده پرتو OAM خاص استفاده شد.

با استفاده از معادله (1)، می‌توان بیست‌وپنج حالت متعامد دوبه‌دو ساخت.

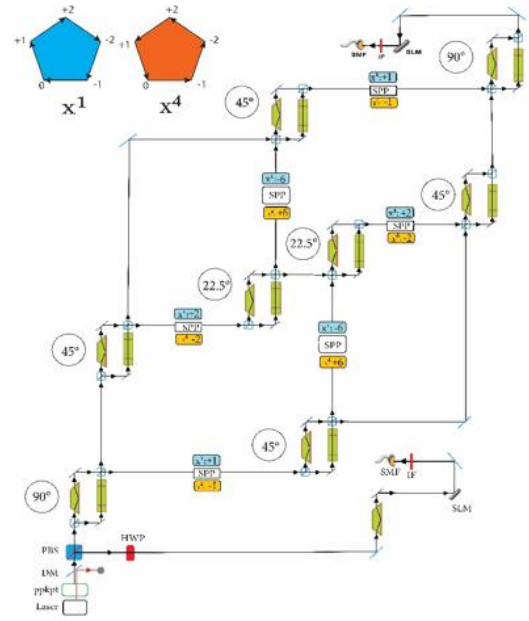
این حالت‌ها می‌توانند به پنج گروه طبقه‌بندی شوند، همان‌طور که در شکل نشان داده شده است. در این نمایش (m, n) می‌توانند مقادیر خود را از مجموعه {0,1,2,3,4} اختیار کنند. در واقع، حالت‌های به‌دست‌آمده از حالت مرجع، از طریق دو سازوکار متمایز به‌دست می‌آیند:این تبدیل‌های فازی و تبدیل‌های جایگشتی .در شکل 1 مشخص شده‌اند.



شکل1 : روش بدست آمدن 25 حالت بل از طریق تبدیل فازی و جایگشتی از حالت اصلی

برای گروه اول که به‌عنوان گروه مرجع شناخته می‌شود، هر دو فوتونِ زوج درهم‌تنیده (A, B) دارای حالت‌های یکسان OAM هستند. در این حالت، حالت مرجع با قرار دادن یک منشور داو با زاویه چرخش صفر درجه به‌دست می‌آید. برای تولید سایر حالت‌ها در این گروه مرجع، کافی است منشور داو را به زاویه‌های مختلفی بچرخانیم.{0 ,π/5,2π/5,3π/5,4π/5}

شکل 2 یک آرایش نوری را نشان می‌دهد که قادر است مقادیر OAM را برای مجموعه ورودی از طریق دو جایگشت متمایز تغییر دهد. این دو پیکربندی متناظر با یک جایگشت ساعت‌گرد یگانه (X_1) و یک جایگشت پادساعت‌گرد سه‌گانه است(X_4).



شکل2 :چیدمانی شامل تبدیل جایگشتی چهارگانهx_4 (پادساعتگرد پنج ضلعی) و تبدیل جایگشتی یگانهx_1 (ساعتگرد پنج ضلعی)

برای پیاده‌سازی تبدیلات جایگشتی، باید یک آرایش نوری مشخص طراحی شود. از آنجا که هدف، یک گیت کوانتومی پنج‌بعدی است، چهار نوع جایگشت برای مقادیر OAM تعریف می‌شود.

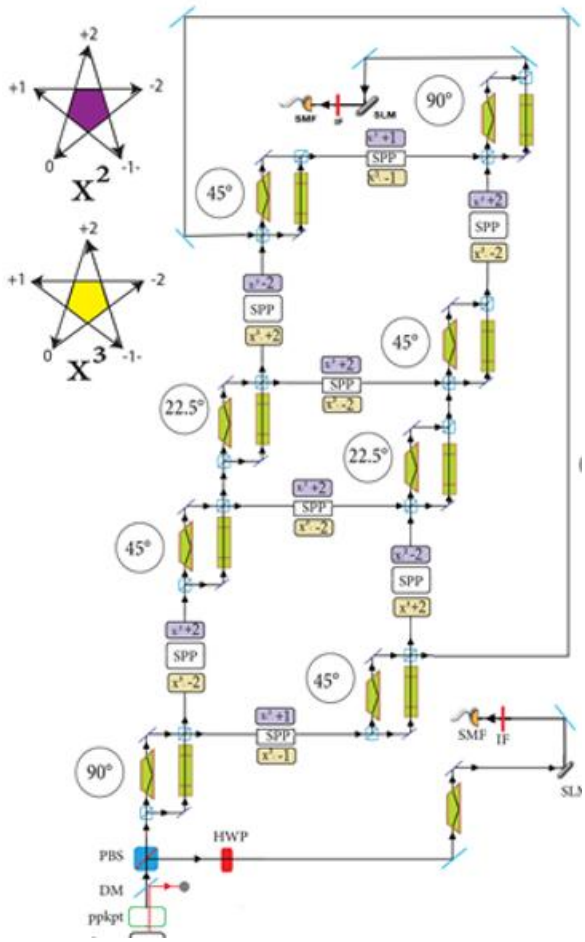
با استفاده از انواع مختلف جداسازهای زوجیت OAM، می‌توان دو معماری جدید شامل یک تفکیک‌کننده و یک ترکیب‌کننده

طراحی کرد. بر این اساس، ما برای نخستین بار چهار پیکربندی مستقل ارائه می‌دهیم که امکان پیاده‌سازی کامل تبدیلات جایگشتی مورد نظر را فراهم می‌کنند.

یک لیزر، زوج فوتون‌های درهم‌تنیده (OAM) را در یک بلور غیرخطی از نوع پتاسیم تیتانیل فسفات با قطبش دوره‌ای (ppKTP) تولید می‌کند که به‌صورت قطعی توسط یک تقسیم‌کننده پرتو قطبشی (PBS) از هم جدا می‌شوند. مسیر پایین‌تر A شامل یک منشور داواست که تبدیلات فازی وابسته به مد را برای زاویه‌های چرخش مختلف اعمال می‌کند. فوتون‌هایی که از PBS عبور می‌کنند به سمت جداساز OAM هدایت می‌شوند. اندازه‌گیری‌های پروژکتیو با استفاده از مدولاتور نور فضایی همراه با فیبر تک‌مد انجام می‌شود.دراین حالت دو جایگشت ساعت‌گرد و دو جایگشت پادساعت‌گرد وجود دارد. در تمام پیکربندی‌ها مقادیر ورودی OAM در ابتدا به صورت $\{-2,-1, 0, 1, 2\}$ تنظیم می‌شوند.

درشکل 2 جایگشت پنج‌ضلعی ساعت‌گرد (پنج ضلعی با رنگ آبی با نماد X_1)، مجموعه $\{-2, -1, 0, 1, 2\}$ در جهت ساعت‌گرد را با یک گام جابه‌جایی به مجموعه $\{-2, -1, 0, 1, 2\}$ تبدیل می‌کند. در این چیدمان مستطیل‌هایی که با نماد SPP مشخص شده‌اند نمایانگرصفحات فاز حلزونی و مستطیل و ذوزنقه سبز روبروی هم بترتیب نمایانگر منشور داو ایستاده و منشور داو چرخنده با زاویه‌ای نسبت به منشور ایستاده هستند که این زاویه در دایره مربوط به جلوی آن نمایش داده شده است. SMF نمایانگر فیبر تک مد وSLM نمایانگر مدولاتور فضایی نور و HWP نمایانگر صفحات نیم‌موج می‌باشند. خاطر نشان می‌شود که هنگام پیاده‌سازی آرایش X_1، باید همان مقدار مربوط به SPP که با برچسب X_1 و به رنگ آبی در بالای هر مستطیل نمایش داده شده است، مورد استفاده قرار گیرد.. علاوه بر این، برای هر جایگشت، اعدادی که داخل دایره‌ها نوشته شده‌اند نشان‌دهنده زاویه چرخش منشور داو چرخنده در تداخل‌سنج ماخ–زِندِر نسبت به زاویه صفر منشور داو مقابل است.

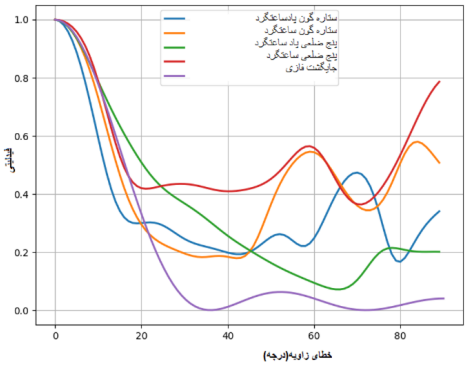
..



شکل 3:چیدمانی شامل تبدیل جایگشتی سه گانهx_3 (پادساعتگرد ستاره‌گون) و تبدیل جایگشتی دوگانه x_2(ساعتگرد ستاره‌گون)

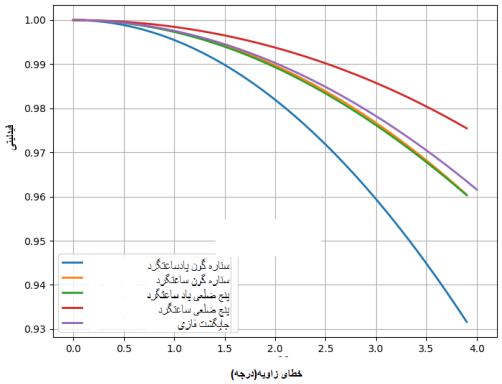
با این توصیف، شکل 2 در یک جایگشت پنج‌ضلعی پادساعت‌گرد، مجموعه ورودی را با یک شیفت چرخشی چهارگانه به مجموعه $\{2, -2, -1, 0, 1\}$ تبدیل می‌کند. این جایگشت با نماد X_4 مشخص شده است. برای تکمیل تبدیل جایگشتی، باید دو گیت کوانتومی اضافی ساخته شود تا نگاشت‌های مجموعه ورودی به $\{1, 2, -2, -1, 0\}$ و $\{0, 1, 2, -2, -1\}$ به‌ترتیب تحقق یابد. با فرض یکسان بودن این که همان مجموعه قبلی مقادیر OAM داده‌شده به رأس‌های یک پنج‌ضلعی منتظم نسبت داده شده ثابت بماند، می‌توان نتیجه گرفت که این دو گیت کوانتومی باید به‌ترتیب به‌صورت جایگشت‌های دوگام و سه‌گام عمل کنند.

جایگشت ستاره‌گون ساعت‌گرد، با یک شیفت چرخشی دوگانه مجموعه ورودی را به مجموعه $\{0,1,2,-2,-1\}$تبدیل می‌کند و با نماد X_2 نشان داده می‌شود.. بنابراین این جایگشت با نماد X_3 مشخص می‌شود که منجر به تبدیل متناظر $\{1,2, -2,-1,0\}$ می‌گردد.



شکل 4: میزان فیدلیتی برحسب خطای زاویه چیدمان برای هر پنج جایگشتی

می‌توان میزان فیدلیتی را به ازای خطای زاویه هر منشور و یا تمام منشورها و یا خطای سیستم بدست آورد. میزان فیدلیتی هر چهار جایگشت به‌همراه جایگشت فازی برحسب خطای زاویه (درصورتی که خطای تمام منشورها به یک اندازه باشند) در شکل 4 رسم شده است .



شکل 5 : میزان فیدلیتی برحسب خطای زاویه چیدمان برای هر پنج جایگشتی در محدوده صفر تا 4 درجه

بصورت دقیق‌تر این مقادیر تا زاویه 4 درجه در شکل 5 رسم شده است که دقت فیدلیتی را تا بالای 93 درصد نشان می‌دهد.

نتیجه گیری

در این مقاله، یک ساختار نوری جدید برای پیاده‌سازی دروازه‌های کوانتومی بل پنج‌بعدی مبتنی بر تکانه زاویه‌ای مداری نور ارائه شد. در این روش، با استفاده از تداخل‌سنج ماخ–زندر و چرخش کنترل‌شده منشورهای داو، تبدیلات فازی و جایگشتی لازم برای تولید حالت‌های بل پنج‌بعدی اعمال گردید. نتایج نشان داد که معماری پیشنهادی قادر به پیاده‌سازی کامل حالت‌های بل در فضای پنج‌بعدی بوده و مقدار فیدلیتی برحسب خطای زاویه در محدوده های 0تا 4 درجه از دقت بالای 93 درصد برخوردار است..

مرجع‌ها

[1] N. J. Cerf, M. Bourennane, A. Karlsson, and N. Gisin; “Security of Quantum Key Distribution Using d-Level Systems”; Physical Review Letters 88, 127902 (2002).
[2] H. Bechmann-Pasquinucci and A. Peres; “Quantum Cryptography with 3-State Systems”; Physical Review Letters 85 (2000) 3313–3316.
[3] D. Collins et al.; “Bell Inequalities for Arbitrarily High-Dimensional Systems”; Physical Review Letters 88, 040404 (2002).
[4] A. Acín et al.; “Quantum Nonlocality in Two Three-Level Systems”; Physical Review A 65, 052325 (2002).
[5] L. Allen et al.; “Orbital Angular Momentum of Light and the Transformation of Laguerre–Gaussian Modes”; Physical Review A 45 (1992) 8185–8189.
[6] G. Molina-Terriza, J. P. Torres, and L. Torner; “Twisted Photons”; Nature Physics 3 (2007) 305–310.
[7] M. Mirhosseini et al.; “High-Dimensional Quantum Cryptography with Twisted Light”; New Journal of Physics 17, 033033 (2015).
[8] M. Krenn et al.; “Twisted Light Transmission over Long Distances”; Optics Express 22 (2014) 20673–20678.
[9] M. Erhard, M. Krenn, and A. Zeilinger; “Advances in High-Dimensional Quantum Entanglement”; Nature Reviews Physics 2 (2020) 365–381.
[10] A. Babazadeh, M. Erhard, F. Wang, M. Malik, R. Nouroozi, M. Krenn, A. Zeilinger, “High-dimensional single-photon quantum gates: Concepts and experiments”, Phys. Rev. Lett., Vol. 119, No. 18, pp. 180510, 2017

مهندسی توابع همبستگی برای مسدودسازی جفت‌فوتون‌های درهم‌تنیده

دهقانی ، علیرضا

گروه فیزیک دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

گروه فیزیک دانشگاه صنعتی سهند ، تبریز ایران

چکیده: *هدف از پژوهش ما، تحلیل پاسخ یک میدان پمپ کلاسیک است که به یک محیط نوری غیرخطی متشکل از یک بازآوارگر نوری کر که مستقیماً به یک بازآوارگر خطی دیگر جفت شده، منتقل می‌شود، به طوری که هر دو بازآوارگر شامل اتلاف ذاتی هستند. ما از یک توصیف کامل کوانتومی بهره برده و با استفاده از تبدیل هامیلتونی یک نوسان‌گر هماهنگ وابسته به زمان دوبعدی، به بررسی ویژگی‌های غیرکلاسیکی امواج الکترومغناطیسی کوانتیزه‌شده گسیل‌شده از سامانه می‌پردازیم. در اینجا، ما سعی داریم از طریق مهندسی توابع همبستگی، به دنبال تحقق شرایط برای یافتن اثرهای کاملاً کوانتومی همچون مسدودسازی فوتونی،پدیده اثرانگشت و درهم‌تنیدگی با کمک یک پمپ کلاسیک خواهیم بود.*

واژه های کلیدی: *توابع همبستگی؛ مسدودسازی فوتونی؛ درهمتنیدگی؛ هامیلتونی وابسته به زمان؛تبدیل بسامد کوانتومی*

Engineering of the correlation functions to block entangled photon-pairs

A. Dehghani

Department of Physics, Payame Noor University, Tehran, ***Iran.***

Department of Physics, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran

Abstract *:The aim of our research is to analyze the response of a classical pump field transmitted into a nonlinear optical medium consisting of a Kerr optical resonator directly coupled to another linear resonator, such that both resonators exhibit intrinsic losses. We employ a full quantum description and, using the Hamiltonian transformation of a two-dimensional time-dependent harmonic oscillator, investigate the non-classical properties of the quantized electromagnetic waves emitted from the system. Here, we aim to, through the engineering of correlation functions, seek to realize the conditions for observing purely quantum effects such as photon blockade, fingerprint effect, and entanglement with the aid of a classical pump.*

Keywords*: Correlation functions; Photon Blockade; Entanglement; Time-dependent Hamiltonian; Quantum Frequency Convertion*

مقدمه

منابع لیزر پرقدرت در توسعه اپتیک کوانتومی، اپتیک غیرخطی و طیف‌بینی لیزری استفاده می‌شوند. پاسخ یک بلور غیرخطی به یک منبع لیزری پرقدرت می‌تواند منجر به بسامد های نوری متفاوتی شود که می‌توانند تقویت یا تضعیف شوند تا بسامد مطلوب حاصل شود. این منابع بیشتر برای ایجاد حالت چلانده استفاده می‌شدند [۱]. با پیشرفت اپتیک کوانتومی، توجه کافی به مطالعه ویژگی‌های غیرکلاسیکی امواج میدان معطوف شده است. نقش اصلی را استفاده از حالت‌های غیرکلاسیکی در محاسبات کوانتومی، ارتباطات کوانتومی [۲] و رمزنگاری کوانتومی [۳] ایفا کرد، که بر اساس آن علاقه به این حالت‌های غیرکلاسیکی به طور قابل توجهی افزایش یافت.

چندین سامانه نوری شبه–خطی کوانتومی برای مطالعه یا بهبود این ویژگی‌های غیرکلاسیکی طراحی شده‌اند [٤]. برای مثال یک منبع لیزری پرقدرت با بسامد ω_3 نظیر به پمپ کلاسیکی در یک بلور غیرخطی را در نظر بگیرید که می‌تواند دو بسامد ω_1 برای مد سیگنال و ω_2 برای مد آیدلر را تولید کند. علاوه بر تقویت‌کننده پارامتری واپاشیده که در ان میدان‌های تولیدشده بسامد یکسانی دارند، اگر بسامد ها برابر نباشند، آنگاه با نسبت $\omega_3 = \omega_1 + \omega_2$، آن را یک تقویت‌کننده پارامتری واگن می‌نامند [۵]. در مبدل بسامد کوانتومی qfc، نسبت بسامد های تولیدشده و ورودی $\omega_3 = \omega_1 + \omega_2$ است [٦] و کاربردهای زیادی در زمینه‌های مختلف دارد. در اینترنت کوانتومی، از qfc به عنوان رابط کوانتومی تار نوری استفاده می‌شود. یک دستگاه qfc برای امکان‌پذیر کردن اتصالات کوانتومی در فناوری اطلاعات کوانتومی و ارتباطات کوانتومی ضروری است. این سامانه برای حفظ درهم‌تنیدگی در سامانه های کوانتومی استفاده می‌شود همچنین می‌تواند در به حداقل رساندن نوفه ناشی از فرآیند رامان کمک کند. تقویت‌کننده‌های پارامتری و مبدل‌های بسامد از دیدگاه مدل مکانیک کوانتومی متفاوت هستند.

در این مقاله، ما سعی می‌کنیم تا اثرهای غیرکلاسیکی مانند ضدهمبستگی و درهم‌تنیدگی ویژه‌تابع‌های مرتبط با یک سامانه qfc را به طور تحلیلی بررسی کنیم. به این دلیل، یک هامیلتونی qfc را به یک سامانه دو نوسان‌گر هماهنگ جداگانه تبدیل می‌کنیم، راه‌حل‌های دقیق

برای مورد آخر پیدا کرده و دینامیک هامیلتونی qfc را در بخش ارائه می‌دهیم. ما مجموعه‌ای از ویژگی‌های غیرکلاسیکی را مطالعه می‌کنیم.

بخش ۲. مبدل بسامد کوانتومی و ارتباط آن با سامانه نوسانگر هماهنگ: طیف انرژی و ویژه حالت های آن

در برهمکنش غیرخطی بین نور و یک محیط غیرخطی، یک مُد پمپ کلاسیک پرقدرت $\cos(\omega_p t+\theta)$ در بسامد ω_p و فاز θ به یک محیط نوری غیرخطی منتقل شده و با مُدهای سیگنال و آیدلر در بسامد های ω_a و ω_b به ترتیب برهمکنش می‌کند. یک هامیلتونی مرتبط برای این نوع برهمکنش می‌تواند به صورت $H=\hbar\omega_a\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}+\hbar\omega_b\mathbf{b}^\dagger\mathbf{b}-\hbar\chi^{(2)}\cos(\omega_p t+\theta)(\mathbf{a}^\dagger-\mathbf{a})(\mathbf{b}^\dagger-\mathbf{b})$ نوشته شود. که در آن $\mathbf{a}(\mathbf{a}^\dagger)$ و $\mathbf{b}(\mathbf{b}^\dagger)$ به ترتیب عملگرهای نابودی(خلق) مرتبط با مُدهای سیگنال و آیدلر را نشان می‌دهند و $\chi^{(2)}$ به حساسیت غیرخطی مرتبه دوم اشاره دارد. با استفاده از تقریب موج چرخان، $\omega_p=\omega_a-\omega_b$ و $\theta=\frac{\pi}{2}$، به هامیلتونی دینامیکی qfc متناظر به صورت زیر رسید

$$H_{\rm qfc}=\hbar\omega_a\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}+\hbar\omega_b\mathbf{b}^\dagger\mathbf{b}+i\hbar\chi^{(2)}\left(e^{i\omega_p t}\mathbf{a}\mathbf{b}^\dagger-e^{-i\omega_p t}\mathbf{a}^\dagger\mathbf{b}\right)\quad(۱)$$

برای به دست آوردن دینامیک نسخه مستقل از زمان سامانه در نظر گرفته شده، ، نویسندگان در مرجع[٤] از معادله حرکت هایزنبرگ با یک هامیلتونی مؤثر مستقل از زمان در تصویر برهمکنش استفاده کردند و ویژگی‌های غیرکلاسیکی امواج الکترومغناطیسی گسیل‌شده از این سامانه را بررسی کردند. برای ساده‌سازی روش‌های ارائه‌شده در برخی از مراجع قبلی و بدون ایجاد هیچ هامیلتونی مؤثری، در اینجا ما از یک تبدیل $D(\eta)=e^{\eta a b^\dagger-\bar{\eta}a^\dagger b}$ برای حل معادله شرودینگر متناظر با هامیلتونی وابسته به زمان (2)به گونه‌ای استفاده می‌کنیم که معادله $D(\eta)H^{\rm qfc}D^\dagger(\eta)\longrightarrow\cdots\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}+\cdots\mathbf{b}^\dagger\mathbf{b}$ محقق شود. که در آن $\eta=re^{i\phi}$ با لحاظ $0<r<\infty$ و $0<\phi<2\pi$ یک متغیر مختلط دلخواه است. بر اساس یک نمایش دومُدی از جبر $su(2)$، هامیلتونی تبدیل‌شده مرتبط با $H^{\rm qfc}$ را می‌توان به صورت زیر به دست آورد:

$$D(\eta)H^{\rm qfc}D^\dagger(\eta)=\hbar\Omega_a a^\dagger a+\hbar\Omega_b b^\dagger b\quad(۲)$$

که برای رسیدن به معادله فوق قیود زیر را تحمیل کرده‌ایم

$$\phi=\omega_p t+\frac{\pi}{2};\tan r=\frac{\omega_p}{2\chi^{(2)}}\pm\sqrt{\left(\frac{\omega_p}{2\chi^{(2)}}\right)^2+1}$$

$$\phi=\omega_p t-\frac{\pi}{2};\tan r=-\frac{\omega_p}{2\chi^{(2)}}\mp\sqrt{\left(\frac{\omega_p}{2\chi^{(2)}}\right)^2+1}$$

معادله (۲)نشان می‌دهد که هامیلتونی $D(\eta)H^{qfc}D^\dagger(\eta)$متناسب با یک ترکیب خطی از دو نوسانگرهماهنگ جداگانه است.همچنین داریم

$$\Omega_a=\frac{\omega_a+\omega_b\tan^2 r-2\chi^{(2)}\tan r}{1+\tan^2 r}$$

$$\Omega_b=\frac{\omega_a+\omega_b\tan^2 r+2\chi^{(2)}\tan r}{1+\tan^2 r}$$

با توجه به ویژه حالت های هامیلتونی تبدیل یافته بصورت $|\psi_n\rangle=|n_a\rangle\otimes|n_b\rangle$، برای طیف انرژی و توابع موج نظیر هامیلتونی مبدل بسامد کوانتومی داریم

$$E_{n_a,n_b}=\hbar\Omega_a n_{a+}\hbar\Omega_b n_b\quad(۳-۱)$$

$$|\eta;n_a.n_b\rangle:=e^{-\eta a b^\dagger+\bar{\eta}a^\dagger b}|n_a\rangle\otimes|n_b\rangle\quad(۳-۲)$$

ذکر این نکته ارزشمند است که روابط کامل بودن و تعامد حالت $(|n_a\rangle)(|n_b\rangle)$، همراه با یکانی بودن عملگر جابجایی D(η)، به طور متناظر ویژگی‌های مشابهی برای حالت‌های $|\eta;n_a.n_b\rangle$به ارث می‌گذارد. همچنین، حالت‌های $|\eta;n_a.n_b\rangle$شرط تمرکز به واحد را در صفحه مختلط $\mathbb{C}^2$ به وسیله یک سنجه معین مثبت و غیرنوسانی برقرار می‌کنند.

بخش۳. تولید جفت فوتون در همتنیده

بر اساس این واقعیت که کوانتومی بودن (یا غیرکلاسیکی بودن) سامانه فیزیکی می‌تواند، برای مثال، در تولید همبستگی‌های کوانتومی مختلف آشکار شود، ابتدا با استناد به تعریف ارایه شده در مراجع [3,5]به بررسی تابع همبستگی متقابل مرتبه دوم بصورت $g^{(2)}_{ab,\eta}(0)=\langle a^\dagger b^\dagger ab\rangle_\eta/\langle a^\dagger a\rangle_\eta\langle b^\dagger b\rangle_\eta$ می پردازیم. در تعریف فوق $\langle\hat{x}\rangle_\eta$ اشاره میکند که تمامی مقادیر انتظاری نسبت به حالت کوانتومی $|\eta\rangle$ محاسبه میشوند، یعنی $\langle\hat{x}\rangle_\eta=\langle\eta|\hat{x}|\eta\rangle$. این تابع برای حالت‌های همبسته مقادیری بزرگتر از یک به خود می‌گیرد که نشان‌دهنده تداخل سازنده کوانتومی بین دو مد بوزونی است، در حالی که $g^{(2)}_{ab,\eta}(0)=1$ یک وضعیت فاقد همبستگی را نشان می‌دهد. یک تداخل مخرب کوانتومی زمانی رخ می‌دهد که فوتون‌های جفت شده متقابلاً ضدهمبسته باشند، یعنی $g^{(2)}_{ab,\eta}(0)=1$. برای سامانه

مـــــــــــــــــــــــورد بحـــــــــــــــــــــــث داریـــــــــــــــــــــــم

$$g^{(2)}_{ab,\eta}(0)-1=-\frac{(n_a+n_b+2n_an_b)\tan^2 r}{n_an_b(1+\tan^4 r)+(n_a^2+n_b^2)\tan^2 r}$$

بـا انتخـاب هـر مقـدار دلخـواه از اعـداد کوانتـومی n_a و n_b، تابع $g^{(2)}_{ab,\eta}(0)$ برای هر مقدار دلخواهی از $\tan r$ کوچک‌تر از یـک است و با دو فوتون ضدهمبسته مواجـه می‌شـویم. پدیـده اثرانگشـت ظاهر شده و آشکار می‌کند کـه فوتون‌هـای آیـدلر و سـیگنال سـامانه QFCبا یکدیگر درهمتنیده هستند، سپس این فوتون‌های جفت شـده در یک فاز تداخل مخرب تولیـد می‌شـوند. بـه ایـن ترتیـب، هـر چـه اختلاف n_a و n_b بیشتر باشد، درهمتنیدگی کاهش می‌یابد. اگر یکـی از اعداد کوانتومی n_a یـا n_b بـه انـدازه کـافی بـزرگ باشـد، پدیـده اثرانگشـــت ناپدیـــد می‌شـــود. در ادامـــه، بـــا قـــرار دادن $n_a=n_b=n\neq 0$، به یک وضعیت جالب می‌رسـیم کـه در آن با آماده کردن هر دو فوتون آیلر و سیگنال سامانه QFC در حالـت برانگیخته اول، یعنی $n_a=n_b=1$، شاهد رخـداد بـالاترین میـزان درهمتنیدگی هستیم (شکل ۲ را ببینید). با افـزایش عـدد برانگیختگـی، میزان درهمتنیدگی به تدریج کاهش می‌یابد، اما سامانه درهمتنیده بـاقی می‌ماند. نتیجه جالب دیگر که می‌توان به آن اشاره کرد ایـن اسـت کـه تـــابع همبســـتگی متقابـــل مرتبـــه دوم در زمـــان یکســـان بـــرای حالت‌های $|\eta;1,1\rangle$ه کمترین مقدار خود یعنی ۰ می‌رسد، به عبارت دیگر، با انتخاب $n_a=n_b=1$و $\tan r=1$، یک حالت بیشـینه درهمتنیده به دست می‌آوریم.

شایان ذکر است که هیچ یک از توابع همبسـتگی متقابـل مرتبـه اول و دوم $g^{(1)}_{ab,\eta}(0)$و $g^{(2)}_{ab,\eta}(0)$ در نقطـه $n_a=n_b=0$تک‌مقـدار نیستند. این به این دلیل است که با انتخـاب مسـیرهای مختلـف بـرای رسیدن به این نقطه، نتایج مختلفی برای حد این توابع به دست می‌آید. بنابراین، سامانه qfc نمی‌تواند در حالت اولیه $n_a=n_b=0$ آمـاده شـود، کـه مبتنـی بـر ایـن واقعیـت اسـت کـه در سـامانهQFC ، اگر $n_b=0(n_a=0)$ یا $n_a=n_b=0$ برای فوتون‌های آیـدلر (یا سیگنال) باشد، پدیده تبدیل بسامد قابل مشاهده نیست.

بر اساس این واقعیت که جفت‌فوتون‌های تولیدشـده از طریـق سـامانه تبدیل بسامد کوانتـومی QFCدر معادلـه (۲) همـواره در فـاز تـداخل مخرب قرار دارند، این پرسـش مطـرح می‌شـود کـه آیـا بـا مهندسـی پارامترهای سامانه می‌توان این فوتون‌های جفت‌شده را مسـدود کـرد؟ برای این منظور، می‌توان از توابع همبستگی مرتبه n در زمـان یکسـان $g^{(n)}_{i,\eta}(0)=\langle(i^\dagger)^n i^n\rangle_\eta/\langle i^\dagger i\rangle^n_\eta$کـه در آن $i=a(b)$ بـــرای سـیگنا ل (آیـدلر) اسـت و در حالـت پایـای $|\eta;n_a,n_b\rangle$ارزیـابی می‌شوند، استفاده کرد. برای یک حالـت میـدان غیرکلاسـیکی، ممکـن است $g^{(2)}(0)<1$ رخ دهـد کـه می‌تـوان آن را بـه عنـوان نقـض نامساوی کوشی در مکانیک کوانتومی تفسیر کرد و از ایـن رو، از ایـن جنبه که هیچ توزیع احتمال معین مثبت زمینه‌ای برای شمار فوتون (یـا شدت) نمی‌تواند وجود داشته باشد، غیرکلاسیکی محسوب می‌شود. با اسـتناد بـه مرجـع [٤]می‌تـوان اسـتنباط کـرد کـه میـدان هنگـامی کـه $g^{(2)}(0)<1$ باشد، دارای ویژگی‌های ضددسته‌ای است، در حـالی که در حالت مقابل، یعنی وقتی $g^{(2)}(0)>1$ باشد، اثـر دسـته‌ای را نشان می‌دهد. شایان ذکر است که شرایطی که در آن $g^{(2)}(0)\to 0$ باشد، به عنوان نشانه‌ای از اثر مسدودسازی کامـل تـک‌فوتون بـه کـار می‌رود. با این حال، اثر مسدودسازی دو فوتون زمانی رخ می‌دهـد کـه $g^{(2)}(0)\geq 1$ و $g^{(3)}(0)<1$ باشـــد [٤]. مطـــابق بـــا حالت $|\eta;n_a,n_b\rangle$، به نتایج زیر می‌رسیم:

$$g^{(2)}_{a,\eta}(0)=\frac{n_a(n_a-1)+n_b(n_b-1)\tan^4 r+4n_an_b\tan^2 r}{(n_a+n_b\tan^2 r)^2}$$

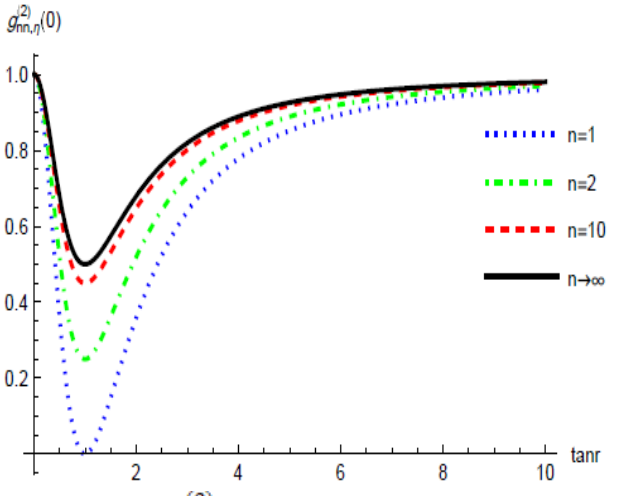
$$g^{(3)}_{a,\eta}(0)=\frac{n_a(n_a-1)(n_a-2)+n_b(n_b-1)(n_b-2)\tan^6 r}{(n_a+n_b\tan^2 r)^3}+\frac{9n_a(n_a-1)n_b\tan^2 r+9n_b(n_b-1)n_a\tan^4 r}{(n_a+n_b\tan^2 r)^3}$$

واضح است که توابع همبستگی مرتبه ۲ (و مرتبه ۳) در زمـان یکسـان $g^{(2)}_{b,\eta}(0)$و $g^{(3)}_{b,\eta}(0)$را می‌توان به ترتیب با استفاده از توابع (١٦) و جـایگزینی $n_a\rightleftarrows n_b$ بـه دسـت آورد. هـر دو تـابع $g^{(2)}_{a,\eta}(0)$ و $g^{(2)}_{b,\eta}(0)$ توابعی با مقادیر مثبت نسبت به $\tan r$ هستند و این ثابت می‌کند که هر دو فوتون سیگنال و آیلر دارای پدیده دسته‌ای هستند.

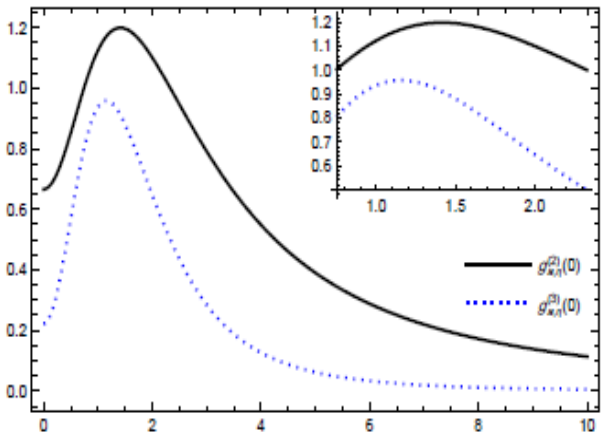
در ادامه، ما به دنبال ارزیابی توابع همبستگی مرتبه سوم $g^{(3)}_{a(b),\eta}(0)$ به منظور بررسی مسدودسازی فوتون‌ها هستیم. در این رابطه، نتایج مـا نشان می‌دهـد کـه هـر دو تـابع همبسـتگی مرتبـه سـوم $g^{(3)}_{a,\eta}(0)$ و $g^{(3)}_{b,\eta}(0)$ مقادیر مثبتی دارند. سپس با تنظیم مناسب اعـداد جـادویی $n_a=3\ n_b=1$و، $0.75\leq\tan r\leq 2.33$، با شرایطی مواجه می‌شـویم کـه در آن $g^{(2)}_{a,\eta}(0)\geq 1$, و $g^{(3)}_{a,\eta}(0)<1$داریـم. بـه عبارت دیگر، ما دریافتیم که یک مسدودسازی قوی دو فوتـون در مـد سیگنال به دست می‌آید، در حالی که مد آیلر در محـدوده کـوچکی از پارامتر $0.43\leq\tan r\leq 1.34$ منجر بـه ایجـاد مسدودسـازی دو فوتون می‌شود.

نتیجه گیری

این پژوهش به طراحی و تحلیل یک سامانه مبدل بسامد کوانتومی مبتنی بر دو بازآواگر نوری جفت‌شده می‌پردازد. با استفاده از یک تبدیل تشابهی، مشخص شد که حالت‌های کوانتومی این سامانه ، حالت‌های درهم‌تنیده هستند. رفتار تابع همبستگی مرتبه اول به‌طور مستقیم به اختلاف جمعیت فوتونی دو مد و پارامتر $\tan r$ بستگی دارد و می‌تواند وضعیت‌های همدوس، ، ناهمدوس یا نیمه همدوس را ایجاد کند. مقدار تابع همبستگی مرتبه دوم (کمتر از ۱) نشان‌دهنده تولید جفت فوتون‌های درهم‌تنیده است. در شرایط خاص، وقتی دو مد دارای جمعیت فوتونی برابر $\tan r = 1$ باشند، یک حالت حداکثر درهم‌تنیده ایجاد می‌شود. ارزیابی همزمان توابع همبستگی مرتبه دوم و سوم نشان می‌دهند که فوتون‌ها در هر دو مد به صورت دسته‌ای هستند و در شرایط خاص پدیده مسدودسازی دو فوتونی قوی در مد سیگنال رخ می‌دهد.



شکل ۱: تابع همبستگی متقابل مرتبه دوم همزمان $g^{(2)}_{nn}(0)$ مربوط به حالت‌های (الف): $|\eta; n.n\rangle$ به عنوان تابعی از دامنه فشردگی $\tan r$ برای اعداد مختلف حالت فوک :(خط پیوسته و سیاه) $n \to \infty$، (خط نقطه‌چین و آبی) $n = 1$، (خط نقطه‌چین و خط تیره و سبز) $n = 2$، (خط چین‌دار و قرمز) $n = 10$



شکل ۲: مطالعه فرآیند مسدودسازی دو فوتونی با در نظر گرفتن همزمان هر دو تابع همبستگی مرتبه دوم همزمان و مرتبه سوم همزمان (خط پیوسته و سیاه) و (خط نقطه‌چین و آبی) که توسط مد سیگنال $n_a = 3$ و مود آیدلر آماده‌شده در حالت تکفوتونی، یعنی $n_b = 1$ القا شده است.

مرجع‌ها

[1] R. Loudon and P. L. Knight, Squeezed light. Journal of Modern Optics, 34(6-7):709.759,1987.
[۲] C. H Bennett and S. J. Wiesner, Communication via one-and two-particle operators on einstein-podolsky-rosen states. Physical Review Letters, 69(20):2881, 1992.
[۳] M. Hillery, Quantum cryptography with squeezed states. Physical Review A,61(2):022309, 2000.
[٤] W. H Louisell, A. Yariv, and A. E Siegman, Quantum fluctuations and noise in parametric processes. I. Physical Review, 124(6):1646, 1961;
[٥] A. Olkhovets, D. W Carr, J. M Parpia, and Harold G. Craighead. Non-degenerate nanomechanical parametric amplifier. In Technical Digest. MEMS 2001. 14th IEEE International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (Cat. No. 01CH37090), pages 298300. IEEE, 2001.
[٦] Eugene Y. C. Lu, Quotum Theory of Nonlinear Optical Processes with Time-Dependent Pump Amplitude and Phase: Frequency Conversion, Phys. Rev. A 8: 1053, 1973.

انتقال اطلاعات کوانتومی از طریق تبخیر سیاه‌چاله: پروتکل هیدن–پرسکیل با رمزگشای فاز کوانتومی به کمک یادگیری ماشین

مظفرناصرآباد ، بنیامین[1]

[1] بخش مهندسی برق، دانشکده فنی و مهندسی دانشگاه لرستان، خرم آباد

چکیده

در این پژوهش، یک شبیه‌سازی عددی از پروتکل هیدن–پرسکیل (HP) برای بررسی دینامیک بازیابی اطلاعات از سیاه‌چاله‌های کوانتومی با اندازه‌های مختلف ($n = 6$، 8 و 10 کیوبیت) ارائه می‌دهیم. با تحلیل منحنی پیج، وفاداری واقعی بازیابی، واپاشی OTOC و تحلیل مقیاس‌بندی اندازه محدود، رفتار عبور اطلاعاتی سیستم در حوالی زمان پیج بررسی شد. نتایج به عنوان شواهدی از تیزشدن تدریجی این عبور با افزایش n گزارش می‌شوند. همچنین یک طبقه‌بند MLP برای شناسایی رژیم‌های قبل و بعد از زمان پیج، صرفاً از طریق ویژگی‌های آماری توزیع‌های اندازه‌گیری بورن، آموزش داده شد.

واژه های کلیدی: *پروتکل هیدن–پرسکیل، پارادوکس اطلاعات، منحنی پیج، همبستگی خارج از ترتیب زمانی (OTOC) ، یادگیری ماشین.*

Quantum Information Transfer Through Black Hole Evaporation: The Hayden-Preskill Protocol with an ML-Assisted Quantum Phase-Transition Decoder

Mozafarnasrabad, Benyamin[1]

[1] *Department of Electrical Engineering, Faculty of Engineering and Technology, Lorestan University, Khorramabad*

Abstract

We present a numerical simulation of the Hayden-Preskill (HP) protocol to investigate information-recovery dynamics for black holes of sizes $n = 6$, 8, and 10 qubits. Using von Neumann entropy (Page curve), unbiased recovery fidelity, OTOC decay, and finite-size scaling analysis, we characterize the system's information crossover near the Page time. Results are reported as evidence of a progressively sharpening crossover with increasing n, rather than a full quantum phase transition. An MLP classifier was trained to distinguish pre- and post-Page-time regimes using only statistical features of Born-rule measurement distributions.

Keywords:*Hayden-Preskill protocol, Information paradox, Page curve, Out-of-time-order correlator (OTOC), Machine learning.*

PACS No. 68, 6835, 7472-h, 73, 7343Qt

مقدمه

پارادوکس اطلاعات سیاه‌چاله هاوکینگ [1] دلالت بر تناقض میان نسبیت عام و مکانیک کوانتومی یکانی دارد. راه‌حل این پارادوکس بر اساس فرضیه پیج [3] نشان می‌دهد اطلاعات در طول تبخیر حفظ شده و انتروپی فون نویمان تابش پس از رسیدن به زمان پیج، رو به زوال گذاشته و در پایان تبخیر به صفر بازمی‌گردد [5]. هیدن و پرسکیل [2] نشان دادند که سیاه‌چاله پس از زمان پیج مانند آینه اطلاعات کوانتومی عمل می‌کند؛ به طوری که اگر دینامیک داخلی آن اطلاعات را به سرعت درهم‌آمیزی (Scramble) کند [6]، هر پیام جدیدی می‌تواند با جمع‌آوری تعداد اندکی کیوبیت جدید تابش و اعمال یک عملگر دکودینگ مناسب روی سیستم تابش بازیابی شود.

در این مقاله، ما دینامیک این عبور اطلاعاتی را با استفاده از کتابخانه Qiskit در قالب یک مدار کوانتومی برای چند اندازه سیاه‌چاله ($n = 6$، 8 و 10 کیوبیت) شبیه‌سازی می‌کنیم. نوآوری اصلی این کار، پیاده‌سازی فیزیکی و عددی فرآیند بازیابی بر پایه قضیه جفت‌زدایی موجز [4] و محاسبه فاصله تریس واقعی سیستم بدون

اعمال مرزهای ریاضی دستی است. علاوه بر این، با تکرار شبیه‌سازی برای چند اندازه سیستم، تیزی این عبور را به‌عنوان تابعی از n می‌سنجیم تا مشخص شود این پدیده تا چه حد ناشی از اثرات ابعاد محدود (finite-size effects) در سیستم‌های کوچک است. سرانجام، توانایی یک شبکه عصبی پرسپترون چندلایه (MLP) را در شناسایی این عبور فیزیکی بررسی می‌کنیم، به طوری که شبکه عصبی صرفاً بر اساس ویژگی‌های آماری بهنجارشده و مستقل از بعد حاصل از اندازه‌گیری‌های قاعده بورن آموزش می‌بیند[7] .

چارچوب نظری و ریاضی

الف. منحنی پیج و انتروپی فون نویمان

برای یک سیستم دو بخشی متشکل از زیرسیستم سیاه‌چاله (B) و سیستم تابش (R) تحت یک حالت خالص کل، انتروپی فون نویمان سیستم تابش به صورت معادله زیر تعریف می‌شود[3] :

$$S(R) = -Tr(\rho_R \log_2 \rho_R) \qquad (1)$$

که در آن $\rho_R = \mathrm{Tr}_B(\rho_{BR})$ ماتریس چگالی کاهش‌یافته تابش است. بر اساس فرضیه پیج، در یک فضای هیلبرت تصادفی، مقدار میانگین این انتروپی با رابطه زیر رفتار می‌کند[3] :

$$S(R) \approx \ln|R| - \frac{|R|}{2|B|} \quad \text{for } |R| < |B| \qquad (2)$$

ب. حد نظری وفاداری بازیابی هیدن–پرسکیل

توانایی یک ناظر خارجی (باب) برای بازیابی پیام آلیس (A) که با یک مرجع خارجی (C) درهم‌تنیده است، توسط قضیه جفت‌زدایی محدود می‌شود [4]. اگر ناظر به سیستم تابش‌های اولیه (B') و تابش‌های جدید (M) دسترسی داشته باشد، حد پایین نظری برای وفاداری بازیابی بهینه بر اساس قضیه جفت‌زدایی تک‌شات (One-shot Decoupling) برابر است با[2, 4] :

$$F \geq 1 - \frac{1}{4} 2^{-(|M|-|A|)} \qquad (3)$$

ج. درهم‌ریزی اطلاعات و شاخص OTOC

مدل‌سازی فیزیکی ویژگی درهم‌ساز سریع (Fast Scrambler) سیاه‌چاله از طریق محاسبه همبستگی‌های خارج از ترتیب زمانی (OTOC) انجام می‌شود[6] :

$$OTOC(t) = \langle W^\dagger(t) V^\dagger(0) W(t) V(0) \rangle \qquad (4)$$

افت نمایی این کمیت نشان‌دهنده پخش‌شدگی موضعی اطلاعات کوانتومی در کل درجات آزادی فضای هیلبرت سیستم است [6، 7]. زمان درهم‌ریزی t_s لحظه‌ای تعریف می‌شود که کمیت به زیر حد آستانه $1/e$ سقوط کند.

متدولوژی و پیاده‌سازی شبیه‌سازی

الف. مشخصات مدار کوانتومی

به منظور ارزیابی سیستماتیک رفتار عبور اطلاعاتی و تفکیک اثرات ابعاد محدود (Finite-size effects) از پدیده‌های حد ترمودینامیکی، شبیه‌سازی برای سه اندازه مختلف سیاه‌چاله ($n = 6$ ، 8 و 10 کیوبیت) پیاده‌سازی شده است. برای هر بعد، منحنی پیج و روند تکاملی وفاداری بازیابی استخراج شده و یک تابع لجستیک به صورت $F(t) \approx \frac{1}{1+e^{-k(t-t_0)}}$ روی داده‌ها برازش داده می‌شود؛ این برازش امکان استخراج کمی پارامتر «عرض گذار» را به صورت $\Delta t = \frac{1}{k}$ فراهم می‌کند. به عنوان معیار کمی تیزی عبور استخراج شود. کاهش سیستماتیک Δt با افزایش n می‌تواند شاهدی برای تیزشدن یک گذار در حد ترمودینامیکی باشد؛ در غیر این صورت، رفتار به یک اثر ابعاد محدود منتسب می‌شود.

بررسی روند تغییرات Δt با افزایش بعد سیستم n ، معیار مناسبی برای سنجش پایداری یا تیز شدن مرزهای عبور اطلاعاتی به دست می‌دهد.

ب. محاسبه فیزیکی وفاداری بدون سوگیری و با در نظرگرفتن اثرات نویز فیزیکی

به منظور تضمین صحت فیزیکی شبیه‌سازی و اجتناب از بروز همگرایی‌های مصنوعی، فرمول وفاداری به‌طور کامل بر مبنای محاسبات مستقیم چگالی حالت تنظیم گردیده است. وفاداری بازیابی مستقیماً از روی فاصله تریس واقعی یعنی:

$$\Delta(t) = \frac{1}{2} \sum \left| \mathrm{eigvals}\left(\rho_{C,B'} - \rho_C \otimes \rho_{B'} \right) \right| \qquad (5)$$

بین ماتریس چگالی مشترک مرجع/سیاه‌چاله‌باقیمانده و حاصل‌ضرب تانسوری حالت‌های تفکیک‌شده به صورت معاد $F(t)=1-\Delta(t)$ محاسبه می‌شود. این فرمول فاقد هرگونه پارامتر محدودکننده دستی یا تحمیلی است. افزون بر این، برای بررسی رفتار دینامیکی سیستم در شرایط فیزیکی غیر ایده‌آل، یک آزمایش مکمل با اعمال مدل نویز depolarizing روی دروازه‌های دوکیوبیتی با نرخ‌های خطای متنوع $p\in\{0,0.002,0.01,0.03\}$ بر روی یک سیستم کوچک‌تر طراحی شده است تا میزان پایداری پاسخ‌ها تحت مدل‌های نویز فیزیکی به‌دقت ردیابی شود.

ج. معماری شبکه عصبی و حذف نشت داده‌ها

طبقه‌بند فاز بر پایه یک شبکه MLP با لایه‌های پنهان $(64,32)$ بنا شد [7]. ورودی شبکه برداری به طول ثابت 5 شامل ویژگی‌های آماری احتمالات حاصل از اندازه‌گیری‌های قاعده بورن (با 1024 شات) است: انتروپی شانون نرمال‌شده، نسبت مشارکت معکوس (IPR)، انحراف معیار، بیشینه و کمینه مقدار احتمال. مجموعه‌داده شامل 300 نمونه (150 نمونه در هر کلاس) است. قاعده برچسب‌گذاری بر اساس مقایسه زمان تبخیر (t) با زمان پیچ (t^*) است (کلاس 0 برای $t<t^*$ و کلاس 1 برای $t>t^*$). ارزیابی نهایی با استفاده از روش اعتبارسنجی متقاطع طبقه‌بندی‌شده 5-تایی (Stratified 5-fold CV) صورت گرفت.

نتایج عددی و یافته‌های تجربی

الف. تحلیل منحنی پیچ،فیدلیتی و مقیاس بندی ابعاد محدود

نتایج عددی حاصل از محاسبه انتروپی فون نویمان در طول تبخیر برای سیستم مرجع $n=10$ در جدول 1 آمده است. جدول 2 نیز نتایج تحلیل مقیاس‌بندی اندازه سیستم $(n=6,8,10)$ شامل عرض گذار برازش‌شده Δt برای هر اندازه را نشان می‌دهد.

جدول 1: انتروپی فون نویمان سیستم تابش به عنوان تابعی از تعداد کیوبیت های تبخیر شده t برای اندازه سیستم $n=10$

میانگین انتروپی (بیت)	تعداد کیوبیت تابش‌یافته(t)
۰.۹۹۷٤±۰.۰۰۱۷	۱
۱.۹۸۷٤±۰.۰۰٤۰	۲
۲.۹۵۱۷±۰.۰۰۸۳	۳
۳.۸۱۲٤±۰.۰۱٦۵	٤
٤.۲٦۸٦±۰.۰۱۹۹	۵ (t^*)
۳.۸۱۰٤±۰.۰۱٤۰	٦
۲.۹۵۱٦±۰.۰۰۷۹	۷
۱.۹۸۱۷±۰.۰۰٤۳	۸
۰.۹۹۷٤±۰.۰۰۱۸	۹
۰.۰۰۰۰±۰.۰۰۰۰	۱۰

جدول 2: پارامترهای عبور اطلاعاتی حاصل از تحلیل مقایس بندی ابعاد محدود

اندازه سیستم n	بیشینه انتروپی S_{peak} (بیت)	عرض گذار برازش شده Δt
٦	۲.۲٦۵٦	۱.۱۱۲
۸	۳.۲٦۷۵	۱.۱۲٦
۱۰	٤.۲٦٤۲	۱.۱۳۰

مطابق با نتایج مندرج در جدول 2، پارامتر عرض گذار Δt با تغییر ابعاد سیستم از $n=6$ به $n=10$ عملاً ثابت مانده و روند کاهشی مشخصی از خود نشان نمی‌دهد (تغییری در حدود کمتر از 2%). این امر بیانگر آن است که پدیده عبور اطلاعاتی مشاهده‌شده در این محدوده ابعادی، ویژگی‌های یک گذار فاز سنتی در حد ترمودینامیکی را بازنمایی نمی‌کند؛ بلکه این پدیده پویای عبور را باید مستقیماً با اثرات درهم‌سازی سریع کوانتومی در مقیاس‌های کوچک فیزیکی مرتبط دانست.

ب. وفاداری واقعی بازیابی اطلاعات هیدن–پرسکیل

محاسبه بدون سوگیری وفاداری نشان می‌دهد که روند بازپس‌گیری اطلاعات پس از زمان پیچ برخلاف الگوهای جهش پله‌ای آنی، یک رفتار هموار و پیوسته به صورت $\Delta(t)\to 0$ را دنبال می‌کند. میانگین وفاداری بازیابی از مقدار تقریبی 0.63 در گام اولیه به طور یکنواخت افزایش یافته و در نقطه پیچ $(t=5)$ به 0.9771 ± 0.0003 و نهایتاً در $t=10$ به جفت‌زدایی کامل و مقدار مرزی 1.0000 ± 0.0000 منتهی می‌گردد. این روند پیوسته تطابق بسیار بالایی با ساختار حد پایین نظری معرفی‌شده در معادله (3) دارد.

ج. آزمایش استحکام در برابر نویز واقعی

نتایج حاصل از اعمال مدل نویز depolarizing روی سیستم آزمایشی با ابعاد $n = 5$ برای نرخ‌های مختلف خطای دروازه در جدول 3 گزارش شده است.

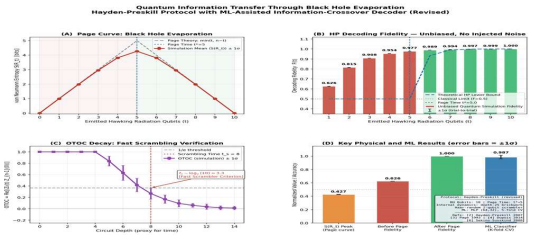
جدول 3: پارامترهای عبور اطلاعاتی حاصل از تحلیل مقایس بندی ابعاد محدود

نرخ خطای دروازه p	فیدیلتی نهایی $F(t=n)\pm\sigma$
۰.۰۰۰	۱.۰۰۰±۰.۰۰۰۰
۰.۰۰۲	۱.۰۰۰±۰.۰۰۰۰
۰.۰۱۰	۱.۰۰۰±۰.۰۰۰۰
۰.۰۳۰	۱.۰۰۰±۰.۰۰۰۰

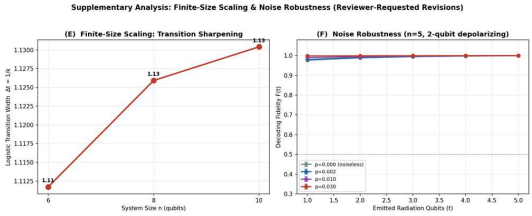
بررسی مقادیر جدول 3 حاکی از آن است که روند بازپس‌گیری اطلاعات کوانتومی در پروتکل هیدن–پرسکیل پایداری بسیار مناسبی در برابر این کلاس از اختلالات فیزیکی دارد، به‌طوری‌که حتی در نرخ خطای $p = 0.03$ نیز وفاداری نهایی بازیابی در تقریب اعشاری بالا پایدار می‌ماند. از آنجایی که در نقطه پایانی تبخیر ($t = n$) کل سیستم تابش جمع‌آوری شده و جفت‌زدایی کامل تضمین شده است، این پایداری توجیه‌پذیر است. بررسی پویایی گام‌های میانی تبخیر در حضور نویز به عنوان یکی از مسیرهای توسعه این پژوهش پیشنهاد می‌شود.

د. زمان درهم‌ریزی فیزیکی(OTOC) و عملکرد رمزگشای یادگیری ماشین

کمیت OTOC با افزایش عمق لایه‌های مداری دچار افت شدید شده و زمان درهم‌ریزی کامل سیستم فیزیکی (سقوط به زیر $1/e$) در عمق لایه مداری 8 ثبت گردید [6]. مدل MLP پیشنهادی با بردار ویژگی مستقل از بعد توانست دقت اعتبارسنجی متقاطع 5-تایی 0.987 ± 0.027 (صحت آموزش: 0.991 ± 0.014) را ثبت کند. همچنین در روش Holdout، دقت‌های 0.947 (آموزش) و 0.973 (آزمون) به‌دست آمد که کارایی بالای آماری مدل را در ردیابی مرز عبور اطلاعات بدون نیاز به فرآیند هزینه‌بر توموگرافی کامل حالت نشان می‌دهد [7].



شکل 1: پنل (A) منحنی پیج بر اساس انتروپی با قله 4.2686بیت در $t = 5$ [3] . پنل (B) وفاداری واقعی بازیابی به صورت یک واپاشی هموار در مقایسه با حد تئوری [2, 4]. پنل (C) واپاشی OTOC با زمان درهم‌ریزی $t_s \approx 8$ [6] . پنل (D) خلاصه آماری عملکرد رمزگشای فاز MLP با دقت 0.987 ± 0.027 [7] .



شکل 2: پنل (E) تحلیل مقیاس‌بندی ابعاد محدود برای Δt در ابعاد $n = 6,8,10$ ؛ پنل (F) استحکام فیدلیتی در برابر نویز depolarizing برای سیستم $n = 5$.

نتیجه‌گیری

شبیه‌سازی عددی ما روی سیستم‌های 6، 8 و 10 کیوبیتی، شواهد محاسباتی استواری را در حمایت از یکانی بودن تحول تبخیر سیاه‌چاله ارائه داد. پیاده‌سازی صریح فاصله تریس واقعی نشان داد که بازپس‌گیری اطلاعات یک رفتار هموار و پیوسته است. تحلیل مقیاس‌بندی نشان داد که عرض گذار Δt با افزایش ابعاد عملاً ثابت می‌ماند (کمتر از 2٪ تغییر) که تاییدکننده ماهیت عبور اطلاعاتی (Information Crossover) به عنوان یک پدیده ابعاد محدود پویا است. آزمایش نویز فیزیکی depolarizing پایداری بسیار مناسبی را برای بازپس‌گیری اطلاعات ثبت کرد. در نهایت، موفقیت مدل MLP در دست‌یابی به دقت اعتبارسنجی 0.987 ± 0.027 اثبات می‌کند که می‌توان مرز عبور اطلاعاتی را صرفاً از روی ویژگی‌های آماری توزیع بورن، بدون نیاز به توموگرافی کامل حالت کوانتومی، شناسایی کرد[7] .

مرجع ها

[1] S. W. Hawking, "Breakdown of predictability in gravitational collapse," Phys. Rev. D 14, 2460 (1976).
[2] P. Hayden and J. Preskill, "Black holes as mirrors: quantum information in radiation from evaporating black holes," J. High Energy Phys. 2007(09), 120 (2007).
[3] D. N. Page, "Average entropy of a subsystem," Phys. Rev. Lett. 71, 3743 (1993).
[4] F. Dupuis, M. Berta, J. Wullschleger, and R. Renner, "One-shot decoupling," Commun. Math. Phys. 328, 251 (2014).
[5] G. Penington, "Entanglement wedge reconstruction and the information paradox," J. High Energy Phys. 2020, 002 (2020).
[6] Y. Sekino and L. Susskind, "Fast scramblers," J. High Energy Phys. 2008(10), 065 (2008).
[7] F. Leone, S. Oliviero, and A. Hamma, "Fast Scrambling and Quantum Phase Transitions," Phys. Rev. A 106, 022428 (2022).

اطلاعات فیشر کوانتومی محلی و سنجه تلاقی حالت ترابرد شده، از طریق زنجیره XXZ هایزنبرگ با برهم‌کنش دژیالوشینسکی–موریا

جاقوری، حکیمه

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز

h.jaghouri@scu.ac.ir

چکیده

این مطالعه به بررسی اطلاعات فیشر کوانتومی محلی (LQFI) و سنجه تلاقی برای یک حالت دوکیوبیتی ترابردشده از طریق کانال کوانتومی زنجیره اسپینی XXZ هایزنبرگ می‌پردازد. در این تحقیق، تأثیر برهم‌کنش دژیالوشینسکی–موریا (DM) در امتداد محور z، پارامتر ناهمسانگردی (ζ)، جفت‌شدگی (J)، میدان‌های مغناطیسی خارجی و دما، بر هم‌بستگی‌های کوانتومی مورد تحلیل قرار گرفته است. یافته‌های ما نشان می‌دهد که برهم‌کنش DM می‌تواند به عنوان ابزاری مؤثر جهت تقویت و حفظ هم‌بستگی‌های کوانتومی در برابرافزایش دما عمل کند. همچنین مشاهده می‌شود که LQFI و سنجه تلاقی نسبت به پارامتر DM به‌صورت تابع زوج رفتار می‌کنند؛ این امر بیانگر آن است که بزرگی برهم‌کنش DM ، و نه جهت آن، عامل تعیین‌کننده در پایداری هم‌بستگی‌های کوانتومی است .

واژه های کلیدی: *برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا، اطلاعات محلی کوانتومی فیشر، همبستگی‌های کوانتومی*

Local quantum Fisher information and concurrence of the teleported state via a Heisenberg XXZ chain with Dzyaloshinskii-Moriya interaction

Hakimeh Jaghouri

Department of Physics, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz

Abstract

This study investigates the local quantum Fisher information (LQFI) and the concurrence measure for a two-qubit state teleported through a quantum channel described by the Heisenberg XXZ spin chain. In this work, the effects of the Dzyaloshinskii–Moriya (DM) interaction along the z-axis, the anisotropy parameter (ζ), the coupling constant (J), external magnetic fields, and finite temperature on quantum correlations are analyzed. Our results show that the DM interaction can act as an effective parameter for enhancing and protecting quantum correlations against thermal effects. Furthermore, it is observed that both LQFI and concurrence behave as even functions of the DM parameter, indicating that the magnitude of the DM interaction, rather than its direction, plays the dominant role in determining the stability of quantum correlations.

***Keywords**: Dzyaloshinskii–Moriya (DM) interaction, Local quantum Fisher information, Quantum correlations*

PACS No.

مقدمه

در قلب پیشرفت‌های علم اطلاعات کوانتومی، پدیده ترابرد کوانتومی قرار دارد؛ پروتکلی که امکان انتقال حالت‌های کوانتومی ناشناخته را در فواصل دور، با استفاده از یک منبع درهم‌تنیده مشترک فراهم می‌کند [۱]. در میان سامانه‌های فیزیکی مختلف، زنجیره اسپینی هایزنبرگ از نوع XXZ به‌عنوان یکی از بسترهای مناسب برای پیاده‌سازی چنین پروتکل‌هایی مورد توجه قرار گرفته است [۲–٤].

سنجه تلاقی برای یک ماتریس چگالی معین ρ، سنجه تلاقی به صورت [۳،۵] تعریف می‌شود:

$$C(\rho) = \max\{0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4}\} \quad (۱)$$

که λ_i ویژه مقادیر ماتریس $R=\rho(\sigma_y\otimes\sigma_y)\rho^*(\sigma_y\otimes\sigma_y)$ هستند که به ترتیب نزولی مرتب شده اند. اطلاعات فیشر کوانتومی محلی (LQFI) حساسیت یک حالت کوانتومی را نسبت به تبدیلات واحدی محلی اندازه‌گیری می‌کند. از نظر مفهومی، این کمیت ماهیتی از جنس هم‌بستگی‌های کوانتومی فراتر از درهم‌تنیدگی دارد و رفتاری مشابه ناهمخوانی کوانتومی نشان می‌دهد؛ به‌گونه‌ای که در دماهای غیرصفر، حتی در شرایطی که سنجه تلاقی صفر می‌شود، مقدار آن می‌تواند غیرصفر باقی بماند. این معیار به صورت زیر تعریف می‌شود [٤]:

$$F(\rho,K_A)=4\sum_{i,j}\frac{(p^i-p^j)^2}{p^i+p^j}\left|\langle\psi_i|K_A\otimes \mathrm{I}|\psi_j\rangle\right|^2 \quad (۲)$$

که در آن p_i و $|\psi_i\rangle$ ویژه مقادیر و ویژه بردارهای ρ هستند. عملگر K_A به عنوان مولد محلی تحول واحد، روی زیرسیستم A به صورت $K_A=\vec{r}.\vec{\sigma}$ تعریف می‌شود که در آن $\vec{\sigma}$ بردار ماتریس‌های پائولی و $\vec{r}$ بردار واحد در فضای سه‌بعدی $(|\vec{r}|=1)$ است.

هامیلتونی مدل

یک زنجیره XXZ هایزنبرگ دوکیوبیتی را به عنوان یک کانال کوانتومی در نظر می‌گیریم، که توسط هامیلتونی به صورت زیر توصیف می‌شود [۳،۵،٦]:

$$H=\frac{J}{2}(\sigma_1^x\sigma_2^x+\sigma_1^y\sigma_2^y+\zeta\sigma_1^z\sigma_2^z)+\frac{1}{2}((B_1+B_2)\sigma_1^z+(B_1-B_2)\sigma_2^z)+\frac{D_z}{2}(\sigma_1^x\sigma_2^y-\sigma_1^y\sigma_2^x) \quad (۳)$$

در هامیلتونی فوق، پارامتر J نشان‌دهنده جفت‌شدگی اسپینی، ζ معرف ناهمسانگردی، و D_z بیانگر برهم‌کنش ژیالوشینسکی–موریا (DM) است. میدان‌های مغناطیسی موضعی ناهمگن با B_2 و B_1 تعریف می‌شوند. برای ارزیابی عملکرد این کانال گرمایی، ما ترابرد حالت ورودی درهم‌تنیده زیر را در نظر می‌گیریم:

$$|\psi_{in}\rangle=\cos\theta|11\rangle+e^{i\phi}\sin\theta|00\rangle \quad (٤)$$

حالت ترابرد شده از کانال هایزنبرگ از رابطه زیر بدست می‌آید

$$\rho=\sum_{i,j}p_{ij}(\sigma_i\otimes\sigma_j)\rho_{in}(\sigma_i\otimes\sigma_j) \quad (٥)$$

که در آن σ_i برای $i=0,1,2,3$ به ترتیب نشان دهنده ماتریس واحد I و سه مؤلفه ماتریس‌های پائولی هستند. هم‌چنین $p_{ij}=Tr[E_i\rho_{ch}(T)]Tr[E_j\rho_{ch}(T)]$ احتمال‌های ترابرد می‌باشند که در آن‌ها $E_i=|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ تصویرگرها روی پایه‌های بل زیر هستند:

$$|\psi_{0,1}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle\pm|10\rangle),\ |\psi_{2,3}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle\pm|11\rangle)\ . \quad (٦)$$

از اعمال پروتکل استاندارد ترابرد کوانتومی بر روی حالت ورودی (ρ_{in}) با استفاده از کانال آمیخته حرارتی $\rho_{ch}(T)$ به دست آمده است. فرستنده (آلیس) یک اندازه‌گیری تصویری بل (E_i) روی کیوبیت خود و یکی از کیوبیت‌های کانال انجام می‌دهد و گیرنده (باب) عملگرهای پائولی متناظر $(\sigma_i\otimes\sigma_j)$ را اعمال می‌کند. از آنجا که کانال به دلیل دمای T یک حالت آمیخته (و نه خالص درهم‌تنیده بیشینه) است، حالت خروجی ترکیب محدبی از حالت‌های ترابری شده با وزن‌های احتمالی p_{ij} خواهد بود.

ماتریس چگالی توصیف کننده‌ی زنجیره XXZ هایزنبرگ دوکیوبیتی کانال در دمای T به صورت $\rho(T)=\frac{e^{-\beta H}}{Z}$ تعریف می‌شود، که در آن Z تابع پارش سامانه به صورت $Z=\mathrm{Tr}(e^{-\beta H})$ نوشته می‌شود. با استفاده از رابطه (٥) ماتریس چگالی ترابرد شده از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$\rho_{41}=\rho_{14}^*=\frac{N_{41}}{D_{41}},\ \rho_{11}=\frac{N_{11}}{D_{11}},\ \rho_{22}=\frac{N_{22}}{D_{22}},\ \rho_{44}=\frac{N_{44}}{D_{44}},$$

$$\begin{aligned}N_{11}=&-8\cos^2(\theta)e2\beta\ B_1e^{2\beta J\zeta}\ B_2(e^{4\beta\alpha}-1)\alpha^3\\&+8e^{2\beta(B_1+J\zeta+\alpha)}[(J^2+D_z^2)\\&+\frac{1}{2}(\alpha^2+B_2^2)(e^{4\beta\alpha}+1)]\alpha^2\cos^2(\theta)\\&+2e^{2\beta\alpha}\ (e^{2\beta B_1}+\frac{1}{2}e^{4\beta B_1}+\frac{1}{2})\sin^2(\theta)(J^2+D_z^2)^2,\end{aligned} \quad (٧)$$

$$D_{11}=e^{\beta(2\alpha+2B_1+J\zeta)}\ Z^2(J^2+D_z^2)^2,$$

$$\begin{aligned}N_{44}=&8\sin^2(\theta)(J^2+B_2^2+D_z^2)e^{2\beta(J\zeta+\alpha+B_1)}(J^2+D_z^2)\\&+\frac{1}{4}\cos^2(\theta)(e^{2\beta B_1}+\frac{1}{2}e^{4\beta B_1}+\frac{1}{2})(J^2+D_z^2)e^{2\beta J\zeta}\\&-8\sin^2(\theta)e^{2\beta(B_1+2\alpha)}[B_2\alpha^3-\frac{1}{2}\alpha^2(J^2+2B_2^2+D_z^2)]\\&-8\sin^2(\theta)e^{2\beta(B_1+J\zeta)}[B_2\alpha^3+\frac{1}{2}\alpha^2(J^2+2B_2^2+D_z^2)],\end{aligned}$$

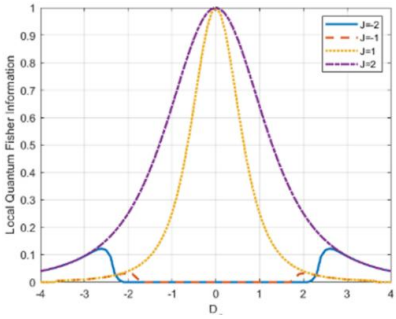
$$D_{44}=e^{\beta(2\alpha+2B_1+J\zeta)}\ Z^2(J^2+D_z^2)^2, D_{22}=Z^2(J^2+D_z^2),$$

$$\begin{aligned}N_{22}=&2e^{-\beta(B_1+\alpha)}[(J^2+B^2{}_2-B_2\alpha+D_z^2)e^{2\beta(B_1+\alpha)}\\&+(J^2+B_2^2-B_2\alpha+D_z^2)e^{2\beta\alpha}\\&+(J^2+B_2^2+B_2\alpha+D_z^2)(e^{2\beta B_1}+1)],\end{aligned}$$

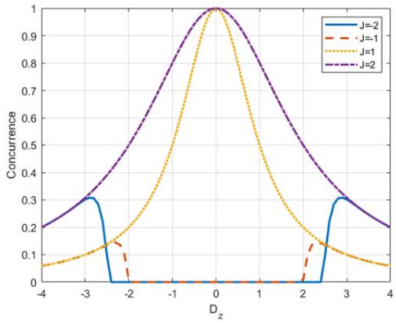
$$N_{41}=2\sin(2\theta)e^{-2\beta\alpha}e^{\beta J\zeta+i\Phi}[J^4-2B_2{}^3\alpha+2B_2\alpha^3 +2J^2B_2{}^2+J^2D_z{}^2-2J^4e^{2\beta\alpha}+J^4e^{4\beta\alpha}+2B_2{}^3e^{4\beta\alpha}\alpha-2B_2D_z{}^2\alpha -2B_2e^{4\beta\alpha}\alpha^3+2J^2B_2{}^2e^{4\beta\alpha}-2J^2D_z{}^2e^{2\alpha\beta} +J^2D_z{}^2e^{4\alpha\beta}+2B_2D_z{}^2e^{4\beta\alpha}\alpha],$$

$$\alpha=\sqrt{J^2+B_2{}^2+D_z{}^2},\ D_{41}=Z^2(J^2+D_z{}^2)^2.$$

در شکل ۱، برای مقادیر جفت‌شدگی مثبت $J>0$ ، هر دو سنجه دارای یک قله مرکزی در $D_z=0$ هستند. با افزایش قدرت جفت‌شدگی از $J=1$ به $J=2$، گستره‌ی قله‌ها به‌طور قابل‌توجهی پهن‌تر شده که نشان‌دهنده‌ی افزایش مقاومت سیستم در برابر تغییرات D_z است. در مقابل، برای $J<0$، رفتار سنجه‌ها تغییرات کیفی چشمگیری را نشان می‌دهد. به‌طوری‌که در حالت $J=-1$، همبستگی‌ها به‌شدت سرکوب می‌شوند. جالب آنکه در حالت $J=-2$ ، پدیده‌ی احیای همبستگی رخ می‌دهد. در بازه‌ی $|D_z|\le 2.7$ همبستگی ناچیز هستیم، اما با افزایش بیشتر D_z، رشد ناگهانی و رسیدن به اوج در هر دو سنجه LQFI و تلاقی در نواحی جانبی (تقریباً در $|D_z|\simeq 3.0$) مشاهده می‌شود.



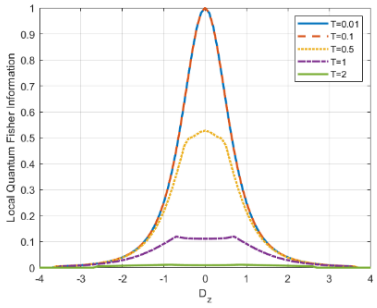
الف:



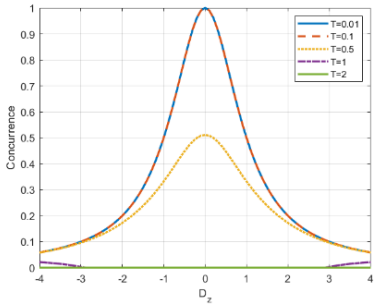
ب:

شکل ۱. (الف) LQFI و (ب) سنجه تلاقی برحسب ناهمسانگردی D_z ، پارامترهای ثابت عبارتند از $\zeta=1, \varphi=0, \theta=\frac{\pi}{4}, B_1=1, B_2=0,\ T=0.1$.

شکل ۲ در دماهای پایین $(T=0.01, T=0.1)$، منحنی‌ها همپوشانی داشته و حداکثر مقدار را در $D_z=0$ نشان می‌دهند. با افزایش دما به $T=0.5$، قله‌ها کاهش می‌یابد. در $T=1$، تلاقی تقریباً صفر می‌شود (مرگ درهم‌تنیدگی)، اما LQFI در $|D_z|\le 0.7$ تقریبا ثابت می‌ماند که مقاومت آن در برابر دما را نشان می‌دهد. در $T=2$، هر دو سنجه با از بین رفتن کامل، به حد کلاسیک می‌رسند.



الف:



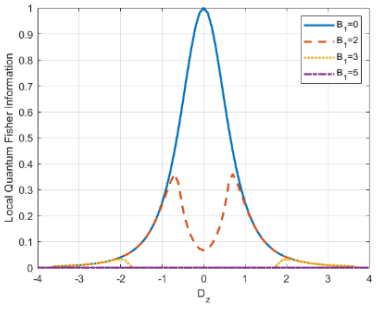
ب:

شکل ۲. (الف) LQFI و (ب) سنجه تلاقی برحسب ناهمسانگردی D_z ، پارامترهای ثابت عبارتند از $\zeta=1, J=1, \varphi=0, \theta=\frac{\pi}{4}, B_1=1, B_2=0$.

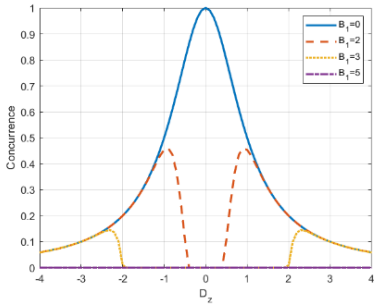
در شکل ۳، برای $B_1=0$ هر دو سنجه در $D_z=0$ دارای قله واحد (بیشینه مقدار) هستند. با افزایش میدان به $B_1=2$، قله مرکزی فروپاشیده و درهم‌تنیدگی در $D_z=0$ سرکوب می‌شود، اما در نواحی جانبی $|D_z|\simeq 0.8$ مجدداً احیا می‌گردد. در $B_1=3$، قله‌ها بیشتر سرکوب شده و به نواحی دورتر $(|D_z|\simeq 2.2)$ منتقل می‌شوند. در نهایت، در $B_1=5$ هر دو سنجه در کل بازه صفر می‌شوند. این امر نشان می‌دهد میدان مغناطیسی B_1 با D_z رقابت کرده و در مقادیر بزرگ، با قطبی کردن اسپین‌ها و ایجاد حالت جداپذیر، همبستگی‌های کوانتومی را نابود می‌کند.

در شکل ٤، وابستگی سنجه‌ها به پارامتر ζ بررسی شده است. برای $\zeta>0$ ، هر دو سنجه در $D_z=0$ به اوج می‌رسند. در $\zeta=0$، قله مرکزی فروپاشیده و در $\zeta<0$، همبستگی‌ها به‌شدت سرکوب می‌شوند؛ به‌طوری‌که در $\zeta=-2$ تقریباً به صفر می‌رسند. این رفتار

نشان می‌دهد که $\zeta > 0$ عاملی سازنده و $\zeta \leq 0$ عاملی تخریبی برای همبستگی‌های کوانتومی است که سرکوب ناشی از میدان خارجی (B_1) را تشدید می‌کند

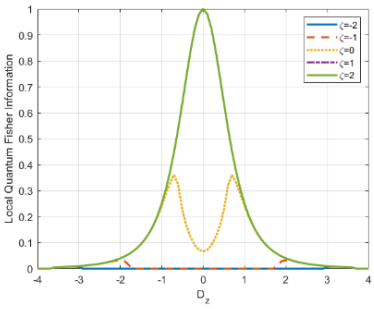


الف:

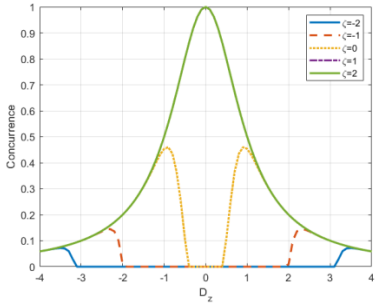


ب:

شکل ۳ . (الف) LQFI و (ب) سنجه تلاقی برحسب ناهمسانگردی D_z ، پارامترهای ثابت عبارتند از $\zeta = 1, \varphi = 0, \theta = \frac{\pi}{4}, J = 1, B_2 = 0, T = 0.1$.



الف:



ب:

شکل ٤.(الف) LQFI و (ب) سنجه تلاقی برحسب ناهمسانگردی D_z ، پارامترهای ثابت عبارتند $\varphi = 0, \theta = \frac{\pi}{4}, J = 1, B_1 = 1, B_2 = T = 0.1$.

نتیجه گیری

در این پژوهش، همبستگی‌های کوانتومی در زنجیره اسپینی XXZ با تکیه بر دو معیار اطلاعات فیشر کوانتومی محلی (LQFI) و سنجه تلاقی مورد تحلیل قرار گرفت. نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که LQFIبه عنوان یک سنجه، پایداری به مراتب بالاتری در برابر گرما نسبت به تلاقی از خود نشان می‌دهد که گویای حساسیت و کارآمدی آن در شناسایی همبستگی‌های کوانتومی در حالت‌های آمیخته است. تحلیل تأثیر میدان مغناطیسی B_1 بیانگر یک رفتار رقابتی است، به‌طوری‌که این میدان می‌تواند در نواحی خاصی از فضای پارامتری، نقش بازدارنده در برابر از بین رفتن همبستگی ایفا کرده و سبب احیای جزئی درهم‌تنیدگی شود. همچنین، نقش پارامتر ناهمسانگردی(ζ) ، افزایش ζ در برخی نواحی باعث تقویت همبستگی‌های حالت پایه شده و مقاومت LQFI و تلاقی را در برابر دما افزایش می‌دهد، در حالی که در نواحی دیگر ممکن است به دلیل تغییر ماهیت حالت پایه، زوال همبستگی‌ها را تسریع کند. یافته‌های این مطالعه راهکارهای نظری مؤثری برای بهینه‌سازی و حفاظت از همبستگی‌های کوانتومی پیش روی محققان قرار می‌دهد.

مرجع‌ها

[1] C. H. Bennett, C. H. Bennett, G. Brassard, A. K. Ekert, R. Jozsa, N. Linden, B. M. Terhal, and A. J. Shor, "Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels," *Phys. Rev. Lett*., vol. **70**. 13, pp. 1895–1903, Apr.1993.
[2] M. C. Arnesen, S. Bose, and V. Vedral, "Natural thermal and magnetic entanglement in the 1D Heisenberg model," *Phys. Rev. Lett*., vol. **87**. 1, p. 017901, Sep. 2001.
[3] Y. Zhou and G.-F. Zhang, "Quantum teleportation via a two-qubit Heisenberg XXZ chain–effects of anisotropy and magnetic field," *The European Physical Journal D*, vol. **47**. 2, pp. 227–231, Apr. 2008.
[4] Kim, Sunho, et al. "Characterizing nonclassical correlations via local quantum Fisher information." *A* **97**.3 (2018): 032326. . *Rev.Phys*
[5] H. Jaghouri, "Effects of magnetic field on quantum correlations dynamics in the anisotropic two-qubit Heisenberg model," *Quantum Inf. Process*., vol. **24**. 10, pp. 313–320, 2025.
[6] A. Ait Chlih, et al. "Entanglement teleportation in anisotropic Heisenberg XY spin model with Herring–Flicker coupling." Modern Phys. Lett. A **37**.06 (2022): 2250038

شارژ یک باتری کوانتومی با گربه های شرودینگر

مجاوری، بشیر؛ فصیحی، محمدعلی؛ عبدی، نسرین
گروه فیزیک، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان

چکیده

ما در این مقاله یک باتری کوانتومی کیوبیت-پایه پیشنهاد می‌دهیم که در آن دو اتم دوترازی در داخل یک کاواک اپتیکی جایگزیده شده اند. باتری به سبب برهم‌کنش با میدان تک-مدی کاواک شارژ می‌شود. ما در شروع شارژ، میدان کاواک را در حالت گربه‌های شرودینگر زوج و فرد و کیوبیت‌ها را در حالت پایه در نظر می‌گیریم و انرژی ذخیره شده در باتری را مطالعه خواهیم کرد. ما تاثیر پارامترهای سامانه را بر کیفیت انتقال انرژی بررسی کرده و نشان خواهیم داد که در مقایسه با گربه‌های زوج، انرژی منتقل شده از گربه‌های فرد بیش‌تر است.

واژه های کلیدی: *باتری کوانتومی، کاواک اپتیکی، گربه شرودینگر، میدان کاواک*

Charging a quantum battery by Schrödinger cats

Mojaveri, Bashir; Fasihi, Mohammad Ali; Abdi, Nasrin
Department of Physics, Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz

Abstract

In this paper, we propose a qubit-based quantum battery consisting of two two-level atoms is located inside an optical cavity. The battery is charged by the single-mode cavity field. At the beginning of the charging process, we consider the cavity field to be in even and odd Schrödinger cat states, while the qubits are taken to be in the ground state and we will study the energy stored in the battery. We analyze the effect of the system parameters on the quality of energy transfer and show that, compared to even cat states, the amount of energy transferred from odd cat states is greater.

***Keywords**: Quantum Battery, Optical Cavity, Schrödinger cat, Cavity Field*

مقدمه

برهم‌کنش یک میدان الکترومغناطیسی کوانتیده تک مدی و اتم دو ترازی، مسئله اساسی در اپتیک کوانتومی است. در تقریب موج چرخان، این نوع برهم‌کنش ها را می‌توان توسط مدل جینز-کامینگز، توصیف کرد [۱]. مدل جینز-کامینگز برخی از اثرات غیرکلاسیک جالب مانند: گسیل خودبه‌خودی اتم [۲] و چلاندگی نور [۳] را پیش‌بینی می‌کند. هم‌چنین مدل جینز-کامینگز می‌تواند برای تولید حالت‌های درهم‌تنیده بکار رود، که در نظریه اطلاعات کوانتومی اهمیت زیادی دارند. برای کشف پدیده‌های کوانتومی جدید، تعمیم‌های مختلفی از مدل جینز-کامینگز با استفاده از میدان‌های چند مدی و چند اتمی در طول دهه های گذشته پیشنهاد شده است. تعمیم مدل جینز-کامینگز به دو اتم، به دو دلیل اهمیت دارد. اولا، ما بیش از یک اتم در کاواک داریم و این مطالعه نقش برهم‌کنش های اتم-اتم مانند جفت شدگی دوقطبی- دوقطبی و آیزینگ بر اثرات کوانتومی را مهیا می سازد. دوما، هنگامی‌که دو اتم داریم، می‌توان پدیده‌ی به دام انداختن پرتو را مشاهده کرد. علاوه بر این، اخیرا نشان داده شده است که مطالعه‌ی دو کیوبیت یکسان، در اپتیک کوانتومی کایرال، اهمیت دارد [٤].

باتریهای کوانتومی سیستم های کوانتومی هستند که در برهمکنش با یک عامل کلاسیکی خارجی یا یک سیستم کوانتومی دیگر (شارژر) شارژ می شوند[۵]. در یک فرایند شارژ، همبستگی های کوانتومی مانند درهمتنیدگی می توانند نقش مهمی در ارتقای عملکرد باتری داشته باشند [٦]. عملکرد باتری توسط میزان انرژی ذخیره شده در

باتری، توان شارژ و مقدار کار قابل استخراج از باتری[۷] مشخص می شود. ما در این مقاله برای اولین بار شارژ باتری های کیوبیت–پایه توسط گربه های شرودینگر را پیشنهاد می دهیم. این کار امکان مقایسه گربه های زوج با گربه های فرد در شارژ باتری کیوبیت–پایه را فراهم می سازد. ما نشان خواهیم داد که گربه‌های فرد بیش‌تر از گربه‌های زوج، باتری را شارژ می‌کنند.

مدل و حل دقیق آن:

در تقریب موج چرخان، سیستم باتری–شارژر ما توسط هامیلتونی زیر توصیف می شود($\hbar = 1$):

$$H = \omega \hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{\omega_0}{2}\sum_{i=1}^{2}\sigma_z^{(i)} + \Lambda\sum_{i=1}^{2}\left(\hat{a}\sigma_+^{(i)} + \hat{a}^{\dagger}\sigma_-^{(i)}\right) + g\left(\sigma_+^{(1)}\sigma_-^{(2)} + \sigma_+^{(2)}\sigma_-^{(1)}\right), \quad (1)$$

که ω و ω_0 فرکانس‌های گذار میدان کاواک و اتم‌ها هستند. Λ ثابت جفت‌شدگی میدان کاواک با هر اتم و g جفت‌شدگی دوقطبی–دوقطبی بین اتم‌ها هستند. می‌توان نشان داد که عملگر تهییج کل $\hat{K} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \left(\sigma_+^{(1)}\sigma_-^{(1)} + \sigma_+^{(2)}\sigma_-^{(2)}\right)$ ثابت حرکت سیستم می باشد. این به ما این امکان را می‌دهد که فضای هیلبرت سیستم را به زیر فضاهای تهییج تجزیه کنیم، یعنی:

$$\mathcal{H}_+ = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus_{n=2}^{\infty}\mathcal{H}_n \quad (2)$$

زیرفضای $\mathcal{H}_0$ یک بعدی بدون تهییج، که توسط بردار $|0,g,g\rangle$ جاروب می‌شود. زیر فضای $\mathcal{H}_1$ سه بعدی است که تنها یک تهییج در آن وجود دارد و توسط بردارهای $|1,g,g\rangle$ ، $|0,e,g\rangle$ و $|0,g,e\rangle$ جاروب می‌شود بقیه زیرفضاها باقی ٤ بعدی هستند:

$$\mathcal{H}_n = span\{|n,g,g\rangle|_{n=1}^{\infty}, |n-1,e,g\rangle|_{n=1}^{\infty}, |n-1,g,e\rangle|_{n=1}^{\infty}, |n-2,e,e\rangle|_{n=2}^{\infty}\} \quad (3)$$

در نتیجه، نمایش ماتریس H نسبت به حالت‌های عریان به صورت قطری بلوکی درمی‌آید، یعنی؛ $H = \oplus_{n=0}^{\infty}H_n$ ، که در آن H_0 ماتریس 1×1 به شکل

$$H_0 = \hbar\left[\frac{\omega}{2} - \omega_0\right]|0,g,g\rangle\langle 0,g,g| \quad (4)$$

و درایه های ماتریس ۳×۳ به صورت زیر بدست می‌آیند:

$$(H_1)_{11} = \frac{3\hbar\omega}{2} - \hbar\omega_0, \qquad (H_1)_{33} = \frac{\hbar\omega}{2},$$
$$(H_1)_{21} = (H_1)_{31} = (H_1)_{12} = (H_1)_{13} = \hbar\Lambda,$$
$$(H_1)_{23} = (H_1)_{32} = \hbar g. \quad (5)$$

تمام بلوک‌های باقی‌مانده H_n به‌ازای $(n = 2, \dots)$ 4×4 با درایه‌های غیر صفر زیر هستند:

$$(H_n)_{11} = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1) - \hbar\omega_0,$$
$$(H_n)_{12} = (H_n)_{13} = (H_n)_{21} = (H_n)_{31} = \hbar\Lambda\sqrt{n},$$
$$(H_n)_{22} = (H_n)_{33} = \frac{\hbar\omega}{2}(2n-1),$$
$$(H_n)_{23} = (H_n)_{32} = \hbar g,$$
$$(H_n)_{24} = (H_n)_{34} = (H_n)_{42} = (H_n)_{43} = \hbar\Lambda\sqrt{n-1},$$
$$(H_n)_{44} = \frac{\hbar\omega}{2}(2n-1) + \hbar\omega_0. \quad (6)$$

برای به دست آوردن ویژه مقادیر و ویژه بردارهای همیلتونی H، کافیست ماتریس‌های بلوکی H_1 و H_n قطری شوند. برای بلوک 3×3 یعنی H_1 ، ویژه مقادیر و ویژه بردارهای متناظر به صورت زیر به‌دست می‌آیند:

$$\varepsilon^{(1)} = (H_1)_{22} - (H_1)_{23},$$
$$\varepsilon^{(2)} = \frac{1}{2}(H_1)_{11} + (H_1)_{22} + (H_1)_{23} + \frac{1}{2}\sqrt{8[(H_1)_{12}]^2 + [(H_1)_{22} - (H_1)_{11} + (H_1)_{23}]^2},$$
$$\varepsilon^{(3)} = \frac{1}{2}(H_1)_{11} + (H_1)_{22} + (H_1)_{23} - \frac{1}{2}\sqrt{8[(H_1)_{12}]^2 + [(H_1)_{22} - (H_1)_{11} + (H_1)_{23}]^2}, \quad (7)$$

$$|\psi^{(j)}\rangle = \alpha^{(j)}|1,g,g\rangle + \beta^{(j)}|0,e,g\rangle + \gamma^{(j)}|0,g,e\rangle, \quad (8)$$
$$\alpha^{(1)} = 0\,, \beta^{(1)} = -\gamma^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \quad j = 1,2,3$$
$$\alpha^{(2)} = \left(\frac{-2(H_1)_{12}}{(H_1)_{11} - \varepsilon^{(2)}}\right)\frac{1}{\sqrt{2 + \left(\frac{2(H_1)_{12}}{(H_1)_{11} - \varepsilon^{(2)}}\right)^2}},$$
$$\beta^{(2)} = \gamma^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2 + \left(\frac{2(H_1)_{12}}{(H_1)_{11} - \varepsilon^{(2)}}\right)^2}},$$
$$\alpha^{(3)} = \left(\frac{-2(H_1)_{12}}{(H_1)_{11} - \varepsilon^{(3)}}\right)\frac{1}{\sqrt{2 + \left(\frac{2(H_1)_{12}}{(H_1)_{11} - \varepsilon^{(3)}}\right)^2}},$$
$$\beta^{(3)} = \gamma^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2 + \left(\frac{2(H_1)_{12}}{(H_1)_{11} - \varepsilon^{(3)}}\right)^2}}. \quad (9)$$

ویژه مقادیر و ویژه بردارهای متناظر بلوک‌های ***4×4*** زوج و فرد برحسب درایه‌های بلوکها به شکل زیر بدست می آیند:

$$E_k^{(1)} = (H_k)_{22} - (H_k)_{23},$$
$$E_k^{(m)} = -\frac{a_k}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{(a_k)^2 - 3b_k}\,cos\left[\frac{2}{3}(m-1)\pi + \emptyset_k\right].$$
$$m = 2,3,4 \quad \text{و} \quad k = 2,3,\dots \quad (10)$$

$$|\Psi_k^{(j)}\rangle = \alpha_k^{(j)}\,|k,g,g\rangle + \beta_k^{(j)}\,|k-1,e,g\rangle + \gamma_k^{(j)}|k-1,g,e\rangle + \delta_k^{(j)}\,|k-2,e,e\rangle. \quad j = 1..4. \qquad (11)$$

در رابطه (۱۰) ضرایب $\emptyset_k$، a_k، b_k و c_k توسط روابط زیر داده می شوند:

$$\emptyset_k = \frac{1}{3}\left[\frac{9a_kb_k - 2a_k^3 - 27c_k}{2(a_k^2-3b_k)^{\frac{3}{2}}}\right], \qquad (12)$$

$$a_k = -[(H_k)_{11} + (H_k)_{22} + (H_k)_{44} + \hbar g],$$

$$b_k = [\hbar g + (H_k)_{22}] + [(H_k)_{11} + (H_k)_{44}] + (H_k)_{11}(H_k)_{44} - 2[(H_k)_{12}]^2 - 2[(H_k)_{24}]^2,$$

$$c_k = 2[(H_k)_{24}]^2(H_k)_{11} + 2[(H_k)_{12}]^2(H_k)_{44} - (H_k)_{11}(H_k)_{44}[\hbar g + (H_k)_{22}]$$

همچنین ضرایب بسط در رابطه (۱۱) بصورت زیر داده می شوند:

$$\alpha_k^{(1)} = 0, \quad \beta_k^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \gamma_k^{(1)} = -\beta_k^{(1)}, \quad \delta_k^{(1)} = 0,$$

$$\alpha_k^{(i)} = \frac{T_k^{(i)}}{\sqrt{1 + \left(T_k^{(i)}\right)^2 + 2\left(s_k^{(i)}\right)^2}},$$

$$\beta_k^{(i)} = \gamma_k^{(i)} = \frac{s_k^{(i)}}{T_k^{(i)}}\alpha_k^{(i)}, \delta_k^{(i)} = \frac{\alpha_k^{(i)}}{T_k^{(i)}}, \quad i = 2,3,4$$

$$T_k^{(i)} = \frac{\left[E_k^{(i)}\right]^2 + \left[a_k^{(i)} + (H_k)_{11}\right]E_k^{(i)}}{2(H_k)_{12}(H_k)_{24}} + \frac{[\hbar g + (H_k)_{22}](H_k)_{44} - 2[(H_k)_{24}]^2}{2(H_k)_{12}(H_k)_{24}},$$

$$s_k^{(i)} = \frac{E_k^{(i)} - (H_k)_{44}}{2(H_k)_{24}}. \qquad (13)$$

حال، حالت اولیه‌ای را در نظر می‌گیریم که در آن میدان در حالت گربه‌های شرودینگر باشد و اتم‌های باتری خالی باشند:

$$|\emptyset_\pm(0)\rangle_{AF} = |\alpha\rangle_\pm|g,g\rangle. \qquad (14)$$

حالت‌های گربه $|\alpha\rangle_\pm$ از برهم‌نهی دو حالت همدوس استاندارد $|\alpha\rangle$ و $|-\alpha\rangle$ ساخته می‌شوند. حالتهای گربه زوج و فرد بهنجار بصورت زیر داده می شوند:

$$|\alpha\rangle_\pm = \left(2 \pm 2e^{-2|\alpha|^2}\right)^{-\frac{1}{2}}(|\alpha\rangle \pm |-\alpha\rangle). \qquad (15)$$

در زمان‌های $t > 0$ طبق همیلتونی‌های (۳) و (٤)، حالت اولیه $|\emptyset_\pm(t)\rangle_{AF}$ به شکل زیر تحول پیدا می‌کند:

$$|\emptyset_+(t)\rangle_{AF} = U(t)|\emptyset_+(0)\rangle_{AF} = e^{-i\left[\frac{\omega}{2}-\omega_0\right]t}P_+(0)|0,g,g\rangle + \sum_{j=1}^{4}\sum_{n=0}^{\infty} e^{-iE_{2n+2}^{(j)}t}\bar{\alpha}_n^{(j)}P_+(2n+2)\left|\Psi_k^{(j)}\right\rangle$$

$$|\emptyset_-(t)\rangle_{AF} = U(t)|\emptyset_-(0)\rangle_{AF} = \sum_{j=1}^{3} e^{-i\varepsilon^{(j)}t}\bar{\alpha}^{(j)}P_-(1)\left|\psi^{(j)}\right\rangle + \sum_{j=1}^{4}\sum_{n=0}^{\infty} e^{-iE_{2n+3}^{(j)}t}\bar{\alpha}_n^{(j)}P_-(2n+3)\left|\Psi_k^{(j)}\right\rangle, \qquad (16)$$

که در آن

$$P_\pm(k) = 2N_\pm e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\left[\frac{\alpha^k}{\sqrt{(k)!}}\right]. \qquad (17)$$

است.

انرژی ذخیره شده در باتری:

انرژی ذخیره شده در باتری طبق تعریف به‌صورت زیر داده می‌شود[۵].

$$\Delta E(t) = \mathrm{Tr}[H_B\rho_A(t)] - \mathrm{Tr}[H_B\rho_A(0)], \qquad (18)$$

که در آن $H_A = \frac{\omega_0}{2}\sum_{i=1}^{2}\sigma_z^{(i)}$ هامیلتونی آزاد باتری و $\rho_A(t)$ ماتریس چگالی کاهیده باتری می‌باشند. با استفاده از معادلات (١٤) –(١٦) غیر صفر ماتریس چگالی کاهیده اتمی پایه‌های $\{|g,g\rangle, |g,e\rangle, |e,g\rangle, |e,e\rangle\}$ به شکل زیر محاسبه می‌شوند:

$$\rho_{11}^{(+)} = |P_+(0)|^2 + \sum_{j,k=1}^{4}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-i\left[E_{2n}^{(j)}-E_{2n}^{(k)}\right]t}\left|\alpha_{2n}^{(j)}\right|^2\left|\alpha_{2n}^{(k)}\right|^2|P_+(2n)|^2,$$

$$\rho_{11}^{(-)} = \sum_{j,k=1}^{4}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-i\left[E_{2n+1}^{(j)}-E_{2n+1}^{(k)}\right]t}\left|\alpha_{2n+1}^{(j)}\right|^2\left|\alpha_{2n+1}^{(k)}\right|^2|P_+(2n)|^2 + |P_-(1)|^2\sum_{i,m=1}^{3} e^{-i[\varepsilon^{(i)}-\varepsilon^{(m)}]t}|\alpha^{(i)}|^2|\alpha^{(m)}|^2,$$

$$\rho_{14}^{(+)} = \sum_{j,k=1}^{4}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-i\left[E_{2n}^{(j)}-E_{2n+2}^{(k)}\right]t}\left|\alpha_{2n}^{(j)}\right|^2\alpha_{2n}^{(k)}\bar{\delta}_{2n+2}^{(k)}P_+(2n)\bar{P}_+(2n+2) + \sum_{j=1}^{4} e^{-i\left[\frac{\omega}{2}-\omega_0-\varepsilon_2^{(j)}\right]t}\alpha_2^{(j)}\bar{\delta}_2^{(j)}P_+(0)\bar{P}_+(2),$$

$$\rho_{14}^{(-)} = \sum_{j,k=1}^{4}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-i\left[E_{2n+1}^{(j)}-E_{2n+3}^{(k)}\right]t}\left|\alpha_{2n+1}^{(j)}\right|^2\alpha_{2n+3}^{(k)}\bar{\delta}_{2n+3}^{(k)}P_-(2n+1)\,\bar{P}_-(2n+3) + \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{4} e^{-i\left[\varepsilon^{(i)}-E_3^{(j)}\right]t}|\alpha^{(i)}|^2\alpha_3^{(j)}\,\bar{\delta}_3^{(j)}P_-(1)\bar{P}_-(3),$$

$$\rho_{23}^{(+)} = \sum_{j,k=1}^{4}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-i\left[E_{2n}^{(j)}-E_{2n}^{(k)}\right]t}\bar{\alpha}_{2n}^{(j)}\alpha_{2n}^{(k)}\beta_{2n}^{(j)}\bar{\gamma}_{2n}^{(k)}|P_+(2n)|^2,$$

$$\rho_{23}^{(-)} = \sum_{j,k=1}^{4}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-i\left[E_{2n+3}^{(j)}-E_{2n+3}^{(k)}\right]t}\bar{\alpha}_{2n+1}^{(j)}\alpha_{2n+1}^{(k)}\beta_{2n+1}^{(j)}\bar{\gamma}_{2n+1}^{(k)} \times |P_-(2n+1)|^2,$$

$$\rho_{22}^{(+)} = \sum_{j,k=1}^{4}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-i\left[E_{2n}^{(j)}-E_{2n}^{(k)}\right]t}\bar{\alpha}_{2n}^{(j)}\alpha_{2n}^{(k)}\beta_{2n}^{(j)}\bar{\beta}_{2n}^{(k)}|P_{+}(2n)|^2,$$

$$\rho_{22}^{(-)} = \sum_{j,k=1}^{4}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-i\left[E_{2n+1}^{(j)}-E_{2n+1}^{(k)}\right]t}\bar{\alpha}_{2n+1}^{(j)}\alpha_{2n+1}^{(k)}\gamma_{2n+1}^{(j)}\bar{\gamma}_{2n+1}^{(k)}|P_{+}(2n+1)|^2 + \sum_{i,m=1}^{3} e^{-i[\varepsilon^{(i)}-\varepsilon^{(m)}]t}\bar{\alpha}^{(i)}\alpha^{(m)}\gamma^{(i)}\bar{\gamma}^{(m)}|P_{-}(1)|^2,$$

$$\rho_{33}^{(+)} = \sum_{j,k=1}^{4}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-i\left[E_{2n}^{(j)}-E_{2n}^{(k)}\right]t}\bar{\alpha}_{2n}^{(j)}\alpha_{2n}^{(k)}\gamma_{2n}^{(j)}\bar{\gamma}_{2n}^{(k)}|P_{+}(2n)|^2 ,$$

$$\rho_{33}^{(-)} = \sum_{j,k=1}^{4}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-i\left[E_{2n+1}^{(j)}-E_{2n+1}^{(k)}\right]t}\bar{\alpha}_{2n}^{(j)}\alpha_{2n+1}^{(k)}\gamma_{2n+1}^{(j)}\bar{\gamma}_{2n+1}^{(k)}|P_{-}(2n+1)|^2 ,$$

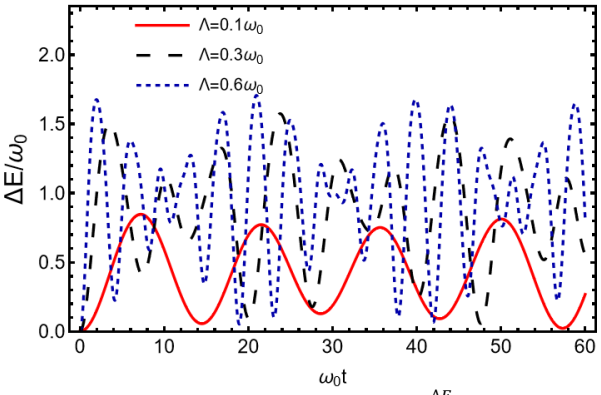
$$\rho_{44}^{(+)} = \sum_{j,k=1}^{4}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-i\left[E_{2n}^{(j)}-E_{2n}^{(k)}\right]t}\bar{\alpha}_{2n}^{(j)}\alpha_{2n}^{(k)}\delta_{2n}^{(j)}\bar{\delta}_{2n}^{(k)}|P_{-}(2n)|^2 ,$$

$$\rho_{44}^{(-)} = \sum_{j,k=1}^{4}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-i\left[E_{2n+1}^{(j)}-E_{2n+1}^{(k)}\right]t}\bar{\alpha}_{n}^{(j)}\alpha_{n+1}^{(k)}\delta_{n+1}^{(j)}\bar{\delta}_{n+1}^{(k)}|P_{-}(n+1)|^2 . \qquad (19)$$

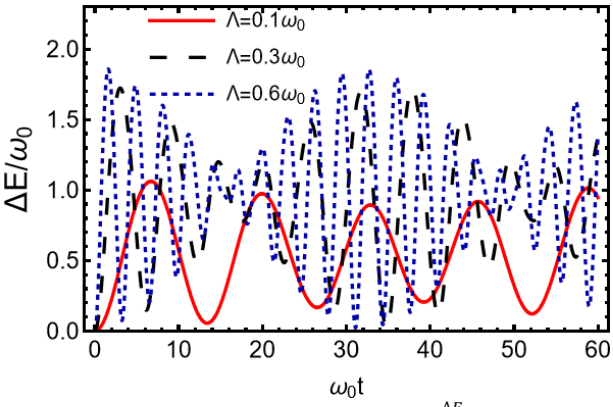
در شکل‌های ۱ و ۲ تحول زمانی انرژی ذخیره شده‌ی بهنجار $\frac{\Delta E}{\omega_0}$ را برحسب $\omega_0 t$ برای مقادیر مختلف Λ رسم کرده‌ایم. در شکل ۱ (۲) میدان در لحظه‌ی t=0، در حالت گربه‌ی شرودینگر زوج(فرد) آماده شده است. این شکل‌ها نشان می‌دهند که میزان انرژی ذخیره شده و زمان شارژ با افزایش جفت‌شدگی اتم–میدان، افزایش پیدا می‌کند و مقدار انرژی ذخیره شده، وقتی که میدان در حالت $|\alpha\rangle_{-}$ آماده می‌شود، بیش‌تر از حالتی است که میدان در حالت $|\alpha\rangle_{+}$ آماده شده است.

نتیجه‌گیری:

یک باتری کوانتومی شامل دو اتم دو ترازی که توسط گربه‌های شرودینگر شارژ می شود را پیشنهاد دادیم. تاثیر شدت برهم‌کنش باتری–شارژر بر زمان و میزان شارژ بررسی گردید. نشان داده شد که با افزایش شدت برهم‌کنش باتری–شارژر، شارژ سریع‌تر انجام می‌گیرد و میزان انرژی ذخیره شده در باتری، افزایش می یابد. هم‌چنین نشان داده شد که در مقایسه با گربه‌های زوج، انرژی بیش‌تری از گربه‌های فرد به باتری منتقل می‌شود. دلیل این موضوع این است که گربه های زوج شامل حالت خلا میدان (شارژر خالی) هستند که طی فرایند شارژ امکان دریافت انرژی بیشتر از باتری و بنابراین کاهش عملکرد آن را فراهم می سازد.



شکل ۱: تغییرات $\frac{\Delta E}{\omega_0}$ برحسب $\omega_0 t$ به ازای Λ های مختلف برای حالت اولیه‌ی سامانه‌ی باتری–شارژر $|\emptyset_{+}(0)\rangle$ و انتخاب $\omega = 1.3\omega_0$ و $g = 0.02\omega_0$ و $\alpha = 0.8$



شکل ۲: تغییرات $\frac{\Delta E}{\omega_0}$ برحسب $\omega_0 t$ به ازای Λ های مختلف برای حالت اولیه‌ی سامانه‌ی باتری–شارژر $|\emptyset_{-}(0)\rangle$ و انتخاب $\omega = 1.3\omega_0$ و $g = 0.02\omega_0$ و $\alpha = 0.8$.

مرجع‌ها

[۱] E.T. Jaynes and F.W. Cumming, Proc. IEEE **51**, 89 (1963).
[۲] J.H. Eberly, N. B. Narozhny and J. J. Sanchez-Mondragon, Phys. Rev. Lett. **44**, 1323 (1980).
[۳] P. Meystre and M.S. Zubairy, Phys. Lett. A **89**, 390 (1982).
[٤] D. G. Suárez-Forero et al., Phys. Rev. X **6**, 020101 (2025).
[٥] R. Alicki and M. Fannes, Phys. Rev. E **87**, 042123 (2013).
[٦] J.-Y. Gyhm and U.R. Fischer, AVS Quantum Sci. **6**, 012001 (2024).
[۷] A.E. Allahverdyan, R. Balian, and T.M, Europhys. Lett. **67**, 565 (2004).

حالت های همدوس برآمده از چندجمله‌ای‌های هرمیت

علیرضا دهقانی

گروه فیزیک دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

گروه فیزیک دانشگاه صنعتی سهند، تبریز ایران

پست الکترونیکی: adehghani@pnu.ac.ir; alireza.dehghani@gmail.com

چکیده: در این پژوهش، دسته‌ی جدیدی از حالت‌های کوانتومی غیرکلاسیکی با عنوان «حالت‌های همدوس برآمده از چندجمله‌ای‌های هرمیت (HCS)» برای نخستین بار معرفی می‌شود. این حالت با اعمال عملگر چندجمله‌ای هرمیت بر روی حالت همدوس چلانده ساخته شده و ضریب بهنجارش آن به‌صورت تحلیلی محاسبه می‌گردد. تابع توزیع ویگنر و پارامتر مندل (Q) برای بررسی رفتار غیرکلاسیکی و اثر پادهمبستگی استخراج و تحلیل می‌شوند. نتایج نشان می‌دهند که حالت HCS وابستگی شدیدی به پارامتر چلاندگی و درجه‌ی چندجمله‌ای هرمیت داشته و با افزایش درجه‌ی چندجمله‌ای، اثرات غیرکلاسیکی به‌طور چشمگیری تقویت می‌شوند. این حالت جدید به دلیل قابلیت کنترل‌پذیری بالا، پتانسیل کاربرد در اپتیک کوانتومی و پردازش اطلاعات کوانتومی را داراست.

واژه‌های کلیدی: حالت همدوس، حالت چلانده، چندجمله‌ای هرمیت، تابع ویگنر، پارامتر مندل.

Hermite polynomial-induced coherent states

A.Dehghani

Department of Physics, Payame Noor University, Tehran, Iran

Department of Physics, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran

Emails: adehghani@pnu.ac.ir; alireza.dehghani@gmail.com

Abstract : In this work, a new class of nonclassical quantum states, named "Hermite Polynomial-Induced Coherent States" (HCS), is introduced for the first time. These states are constructed by applying the Hermite polynomial operator to a squeezed coherent state, and their normalization coefficient is analytically derived. The Wigner distribution and Mandel parameter (Q) are obtained to investigate nonclassicality and antibunching effects. Results demonstrate that HCS strongly depends on the squeezing parameter and Hermite polynomial degree, with nonclassical effects significantly enhanced by increasing the polynomial order. Due to its high tunability, this novel state has potential applications in quantum optics and quantum information processing.

Keywords: Coherent state, Squeezed state, Hermite polynomials, Wigner function, Mandel parameter

۱. مقدمه

حالت‌های غیرکلاسیکی نور نقشی اساسی در درک مفاهیم بنیادی مکانیک کوانتومی ایفا می‌کنند و بستری مناسب برای آزمون اصولی مانند ناهمخوانی کوانتومی و درهم‌تنیدگی فراهم می‌آورند. این حالت‌ها مزیت‌های کوانتومی چشمگیری نسبت به حالت‌های کلاسیکی در پروتکل‌های اطلاعات کوانتومی از جمله محاسبات کوانتومی مقاوم به خطا، دورنوردی کوانتومی با خلوص بالا و توزیع کلید کوانتومی امن ارائه می‌دهند [۱–۳]. از این رو، تولید، درک و دستکاری حالت‌های غیرکلاسیکی نور به عنوان یکی از اهداف بنیادی و راهبردی در اپتیک کوانتومی مدرن تلقی می‌شود.[4,5]

به طور مشخص، حالت‌های گاوسی (نظیر حالت‌های خلأ، همدوس و چلانده) به دلیل سادگی نسبی تولید و توصیف ریاضی، به طور گسترده در نظریه‌پردازی‌های اولیه اپتیک کوانتومی به کار گرفته شده‌اند. اما مطالعات نظری و تجربی دهه اخیر به وضوح نشان داده‌اند که این حالت‌ها به تنهایی برای تحقق بسیاری از برتری‌های کوانتومی، به ویژه در محاسبات کوانتومی جهان‌شمول و تصحیح خطای کوانتومی، کافی نیستند[6, 7]. در مقابل، حالت‌های غیرگاوسی که از برهمنهی‌های غیرخطی یا اعمال عملگرهای غیرخطی بر روی حالت‌های گاوسی حاصل می‌شوند، می‌توانند ویژگی‌های غیرکلاسیکی برجسته‌تری از خود نشان دهند [۹,۸]. در این راستا، دو عملیات غیرگاوسی بنیادی، یعنی افزودن و کاستن تک‌فوتون (یا چندفوتون) به میدان تابش، به عنوان اساسی‌ترین مکانیسم‌هایی شناخته می‌شوند که برهم‌کنش ماده–نور در رژیم غیرخطی را توصیف می‌کنند.[10,11]

تحقیقات گسترده‌ای نشان داده‌اند که اعمال این عملیات بر روی حالت‌های گاوسی اولیه می‌توانند منجر به خلق حالت‌های غیرکلاسیکی با کاربردهای فراوان شود. برای نمونه، حالت حرارتی تک‌فوتون–افزوده [۱۲] و حالت همدوس تک‌فوتون–

افزوده [۱۳] به طور تجربی محقق شده‌اند. این موفقیت‌های تجربی، انگیزه‌ای قوی برای مطالعه نظری و عملی تعمیم این عملیات به چندجمله‌ای‌های متعامد بالاتر ایجاد کرده است. در این میان، چندجمله‌ای‌های هرمیت به دلیل نقش محوری آن‌ها در توصیف توابع ویژه نوسانگر هماهنگ کوانتومی و ارتباط نزدیکشان با عملگرهای خلق و فنا، توجه ویژه‌ای را به خود جلب کرده‌اند [۱٤،۱۵]. به تازگی، پژوهش‌های متعددی به بررسی حالت‌های کوانتومی برانگیخته با چندجمله‌ای‌های هرمیت پرداخته‌اند:

رن و همکاران (۲۰۱٦) ویژگی‌های غیرکلاسیکی حالت همدوس فوتون–افزوده چندجمله‌ای هرمیتی را معرفی و تحلیل کردند [16]. ژانگ و همکاران (۲۰۱۹) واپاشی دامنه حالت همدوس برانگیخته با میدان چندجمله‌ای هرمیتی را بررسی نمودند [17]. در پژوهشی دیگر، حالت‌های همدوس فوتون–افزوده–سپس–کاسته به عنوان حالتی با قابلیت فشردگی بالا معرفی شده‌اند[18]. همچنین برهم‌نهش حالت‌های همدوس چندجمله‌ای هرمیتی فوتون–افزوده و فوتون–کاسته از نظر ویژگی‌های غیرکلاسیکی تحلیل شده است.

علاوه بر این، چندجمله‌ای‌های هرمیت استثنایی نیز اخیراً در ساخت حالت‌های همدوس تعمیم‌یافته برای سیستم‌های کوانتومی غیرخطی به کار رفته‌اند و رفتارهای غیرکلاسیکی جالبی از خود نشان داده‌اند. اخیراً نیز نشان داده شده که حالت‌های غیرگاوسی حاصل از تغییر فوتونی حالت‌های گاوسی که با استفاده از چندجمله‌ای‌های تعمیم‌یافته هرمیت–کامپه دو فریه قابل توصیف هستند، می‌توانند عملکرد سیستم‌های سنجش و ارتباطات کوانتومی را به طور قابل توجهی نسبت به حالت‌های گاوسی بهبود بخشند.

با وجود پیشرفت‌های قابل توجه ذکر شده، بررسی سیستماتیک حالت‌های کوانتومی حاصل از اعمال همزمان دو عملگر غیرگاوسیِ «چندجمله‌ای هرمیت» و « چلاندگی» بر روی حالت همدوس، تاکنون به طور کامل انجام نشده است. در حالی که پیش‌تر حالت خلأ چلانده برانگیخته با چندجمله‌ای هرمیت معرفی شده است ، در این پژوهش برای اولین بار حالت همدوس چلانده چندجمله‌ای هرمیتی با اعمال عملگر چندجمله‌ای هرمیت بر روی یک حالت همدوس چلانده (یک حالت گاوسی تعمیم‌یافته) ساخته می‌شود.

این ترکیب نوین به دلایلی حائز اهمیت است، افزایش درجه غیرکلاسیکی :انتظار می‌رود اعمال متوالی دو اپراتور غیرگاوسی (چندجمله‌ای هرمیت و عملگر چلاندگی) منجر به حالت نهایی با درجه غیرکلاسیکی بالاتری نسبت به هر یک از اعمال به تنهایی شود. انعطاف‌پذیری در کنترل :وجود پارامترهای متعدد (دامنه همدوس، پارامتر چلاندگی، و مرتبه چندجمله‌ای هرمیت) به ما امکان می‌دهد تا ویژگی‌های آماری و غیرکلاسیکی حالت نهایی را در یک فضای پارامتری وسیع، کنترل و بهینه کنیم.ارتباط با حالت‌های شناخته شده :حالت پیشنهادی ما حالت‌های مهم و شناخته شده‌ای همچون حالت خلأ چلانده، حالت همدوس چلانده، و حالت‌های فوتون–افزوده و –کاسته را به عنوان حالت‌های حدی در بر می‌گیرد (بخش ۲)، که نشان‌دهنده عمق و جامعیت فرمول‌بندی ارائه شده است.

این مقاله به شرح زیر سازماندهی شده است: در بخش ۲، حالت پیشنهادی (HCS) را معرفی و نرمالیزه می‌کنیم و ارتباط آن با سایر حالت‌های کوانتومی شناخته شده برقرار می‌نماییم. در بخش ۳، تابع توزیع ویگنر را به عنوان یک معیار حساس برای سنجش غیرکلاسیکی بودن حالت محاسبه و تحلیل می‌کنیم. در بخش ٤، با استفاده از پارامتر مندل Q ، ویژگی‌های آماری زیرپواسونی و اثر پادگروهه را بررسی می‌نماییم. در نهایت، در بخش ۵ به جمع‌بندی و نتیجه‌گیری خواهیم پرداخت.

بخش ۲:معرفی حالت‌های HCS

از نقطه‌نظر نظری، حالت همدوس چلانده چندجمله‌ای هرمیتی که در ادامه با نماد $|\mathrm{HCS}\rangle$ نشان داده می‌شود، با اعمال عملگر چندجمله‌ای هرمیتی بر روی حالت همدوس چلانده تک‌حالتی $|\psi\rangle = N_{\xi_1,\eta_1} H_n(\chi) S(r)|\alpha\rangle$ تعریف می‌گردد. که در آن N_{ξ_1,η_1} ثابت بهنجارش است. عملگرهای $\chi = \xi a + \eta a^\dagger . S(r) = e^{\frac{r}{2}(a^2 - a^{\dagger 2})}$ ترتیب عملگر فشردگی و ترکیب خطی از عملگرهای بوزرونی ـ با ضرایب مختلط دلخواه η و ξ ـ را نمایندگی میکنند. $r \in R$ پارامتر چلانده حقیقی می‌باشد. $|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle$ حالت همدوس چلانده تک ـ مد برآمده از تاثیر عملگر

جابه‌جایی $D(\alpha)=e^{\alpha a^{\dagger}-\alpha^{*}a}$ بروی حالت پایه است. $H_n(\cdot)$ چندجمله‌ای هرمیت از درجه n با $n=0.1.2....$ است. $a.a^{\dagger}$ به ترتیب عملگرهای خلق و نابودی نوسانگر هماهنگ ساده کوانتمی هستند که از رابطه جابه‌جای $[a.a^{\dagger}]=1$ پیروی می‌کنند. تأکید می‌شود که ساختار چندجمله‌ای در رابطه (۱) با آرگومان $\xi a+\eta a^{\dagger}$ به گونه‌ای انتخاب شده است که تحت تبدیل چلاندگی، رفتار همومورفیایی مناسبی از خود نشان دهد. این انتخاب، برخلاف حالت‌های ساده‌تر فوتون–افزوده، امکان بررسی سیستماتیک تأثیر مرتبه چندجمله‌ای هرمیت بر ویژگی‌های غیرکلاسیکی را فراهم می‌آورد.

با بهره‌گیری از نمایش انتگرالی چندجمله‌ای‌های هرمیت، روابط جابه‌جایی و تبدیلات یکانی، می‌توان به ضریب بهنجارش بصورت زیر دست یافت

$$N_{\xi_1,\eta_1}^{-2}=\sum_{k=0}^{n}\frac{C^k}{k!}|A|^{n-k}\left(\frac{n!}{(n-k)!}\right)^2\left|H_{n-k}\left(\frac{iB}{2\sqrt{A}}\right)\right|^2$$

یکی از نقاط قوت حالت معرفی‌شده، آن است که طیف گسترده‌ای از حالت‌های مهم و شناخته‌شده را به عنوان حالت‌های حدی در بر می‌گیرد. این ویژگی نه‌تنها اعتبار فرمول‌بندی پیشنهادی را تأیید می‌کند، بلکه امکان مقایسه مستقیم با نتایج پیشین را نیز فراهم می‌سازد. برای نمونه با انتخاب r=0 به حالت همدوس برانگیخته با چندجمله‌ای هرمیت (معادل با حالت فوتون–افزوده تعمیم‌یافته)[16] ، بازای $r=0,\ \alpha=0$ به حالت فوتون–افزوده (حالت عددی فوک)، با لحاظ $\alpha=0$ به حالت خلأ چلانده برانگیخته با چندجمله‌ای هرمیت، حالت همدوس چلانده استاندارد[23] با انتخاب $n=0$ و برای $n=1$ به حالت همدوس چلانده تک‌فوتون–افزوده[24] تبدیل میشود.

۳. تابع توزیع ویگنر حالت HCS

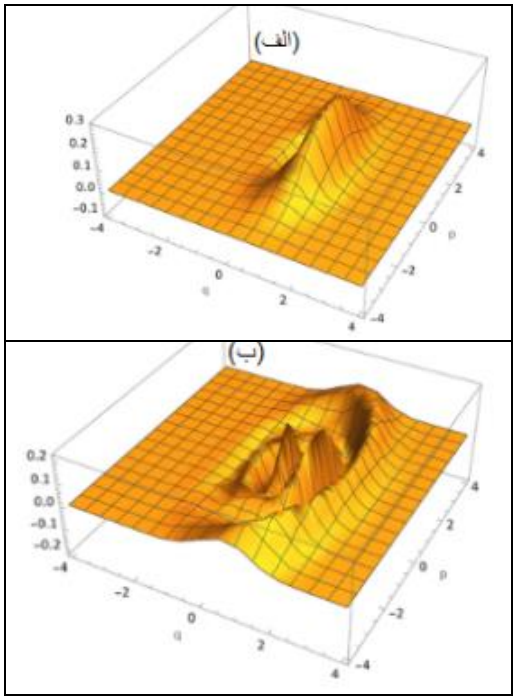
تابع ویگنر یک ابزار شناخته شده برای تحلیل ویژگی‌های غیرکلاسیکی حالت‌های کوانتومی است. وجود منفی‌بودن در تابع ویگنر نشانگر غیرکلاسیکی بودن است. علاوه بررابطه انتگرالی تابع ویگنر W بر حسب حالت همدوس $|\gamma\rangle$

$$W(\beta,\beta^{*})=\frac{2e^{2|\beta|^2}}{\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty}\langle-\gamma|\rho|\gamma\rangle e^{-2(\gamma\beta^{*}-\gamma^{*}\beta)}d^2\gamma$$

تابع مذکور را می‌توان به صورت یک نمایش سری و بر حسب عناصر ماتریس قطری در حالت جابه‌جا شده عددی، نیز ارایه کرد. با استفاده از مفروضات فوق، توزیع ویگنر مربوط به HSC به صورت زیر داده می‌شود :

$$W(\beta,\beta^{*})=\frac{2e^{2|\beta|^2}\left|N_{\xi_1,\eta_1}\right|^2}{\pi}e^{-|\alpha|^2+\tanh r\Re(\alpha^2)}\times\frac{\partial^{zn}}{\partial t^n\partial\tau^n}\{e^{(t^2+\tau^2)(-1+2\xi\eta-2\xi^2\tanh r)+2t\xi\alpha\operatorname{sech}r}\times e^{2\tau\xi\alpha^{*}\operatorname{sech}r+\cosh^2 r(\alpha A_1B_1+A_1^2C_1+B_1^2C_1)}\}_{t,\tau=0}\qquad(۴)$$

در شکل (۱)، مقادیر منفی توزیع ویگنر نشان‌دهنده وجود ویژگی‌های غیرکلاسیکی HCS است.



شکل 1: تابع توزیع ویگنر برای مقادیر مختلف از متغیرهای n و ξ,η با تثبیت $r=0.4,\alpha=0.5$.(الف) $\xi=1,\eta=1,n=1$ و (ب) $\xi=1,\eta=7,n=4$.

٤. پارامتر مندل حالتHCS

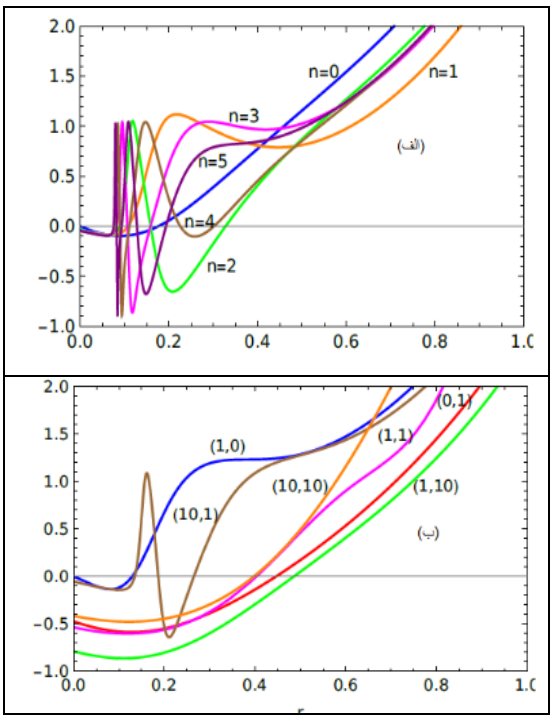
پارامتر مندل Qبرای توصیف خواص آماری میدان نور استفاده می‌شود. آمار زیرپواسونی نشان‌دهنده ویژگی غیرکلاسیکی نور است. اثر غیرکلاسیکی مرتبط با اثر پادگروهه بازای $Q<0$ حاصل میشود پارامتر مندل به صورت زیر تعریف می‌شود

$$Q=\frac{\langle a^{\dagger 2}a^2\rangle}{\langle a^{\dagger}a\rangle}-\langle a^{\dagger}a\rangle\qquad(۴)$$

مقادیر میانگین نظیر عملگرهای شمارش فوتون و توان دوم ان برای ارزیابی پرامتر مندل نظیر HCS به صورت زیر داده می‌شوند :

$$\langle a^m a^{\dagger m}\rangle = \left|N_{\xi_1\eta_1}\right|^2 e^{-|\alpha|^2+\tanh r\Re(\alpha^2)} \frac{\partial^{2n}}{\partial t^n \partial \tau^n}\frac{\partial^{2m}}{\partial x^m \partial y^m}$$
$$\times \{e^{(t^2+\tau^2)(-1+2\xi\eta-2\xi^2\tanh r)+2t\xi\alpha\,\mathrm{sech}r}$$
$$\times e^{2\tau\xi\alpha^*\mathrm{sech}r+\cosh^2 r(\mathcal{A}_2\mathcal{B}_2+\mathcal{A}_2^2\mathcal{C}_2+\mathcal{B}_2^2\mathcal{C}_2)}\}_{t,\tau,x,y=0}$$

با جایگذاری مقادیر چشم‌داشتی فوق میتوان تابع مندل را برای مقادیر مختلف ξ,η و n محاسبه کرد. شکل۲ پارامتر مندلQرا برحسب پارامتر فشردگی r نمایش می‌دهد. مقدار منفی پارامتر مندل نشان‌دهنده اثر پادگروهه حالت **HCS** است. در شکل ۲ (الف) مقادیر ξ و η را ثابت کرده‌ایم. نمودار نشان می‌دهد که مقدار منفی برای n=0 کمتر است. برای n=3,4,5 اثر پادگروهه بیشتری نسبت به مقادیر پایین‌تر n تولید می‌شود. افزایش مقدار nاثر پادگروهه را افزایش می‌دهد. در شکل ۲ (ب) مقدار n را ثابت کرده‌ایم و مقادیر ξ و ηرا تغییر داده‌ایم. مقادیر بزرگتر η اثر پادگروهه بیشتری نسبت به ξ تولید می‌کنند. در هر دو حالت، برای مقادیر کمتر پارامتر فشردگیr ، اثرات زیرپواسونی بیشتری وجود دارد. برای مقادیر بزرگترr، امار فراپواسونی وجود دارند.



شکل ۲: پارامتر مندل برای مقادیر مختلف از متغییرهای ξ,η و n. شکل ۲ **(الف)** $\xi=15,\eta=1\ ,\alpha=0.4$ و شکل ۲ (ب) $n=3\ ,\alpha=0.6$.

٤. نتیجه‌گیری

در این مقاله، دسته‌ای جدید از حالت‌های کوانتومی برآمده از چندجمله‌ای هرمیت را معرفی می‌کنیم که با عنوان حالت همدوس (HCS)شناخته می‌شود. حالت HCS به‌صورت تحلیلی با اعمال عملگر چندجمله‌ای هرمیت بر روی یک حالت چلانده–همدوس ساخته می‌شود. توزیع شبه‌احتمالی ویگنر استخراج شده و منفی‌بودن توزیع ویگنر و پارامتر مندل Q برای تحلیل ویژگی‌های غیرکلاسیکی HCS به کار گرفته می‌شوند. ما به‌طور صریح نرمال‌سازی، توزیع ویگنر و پارامتر مندل مربوط به HPSCS را استخراج می‌کنیم. اثر ضددسته‌ای HPSCS از طریق پارامتر مندل Q مورد بررسی قرار می‌گیرد. این حالت جدید پتانسیل آن را دارد که تأثیر قابل‌توجهی بر کاربردهای مختلف در اپتیک کوانتومی و پردازش اطلاعات کوانتومی داشته باشد.

مراجع:

[1] P. Knight, J. Mod. Opt. 37, 145-146 (1990).
[2] D. Walls, G. J. Milburn, Quantum optics, Springer (2008).
[3] V. V. Dodonov, V. I. Man'ko , Taylor & Francis Group, New York, (2003).
[4] G. S. Agarwal and K. Tara, Phys. Rev.A 43, 492–497 (1991).
[5] G. S. Agarwal and K. Tara, Phys. Rev. A 46, 485 (1992).
[6] C. Weedbrook et al., Rev. Mod. Phys. 84, 621 (2012).
[7] S. L. Braunstein and P. van Loock, Rev. Mod. Phys. 77, 513 (2005).
[8] M. G. Genoni, M. G. A. Paris, and K. Banaszek, Phys. Rev. A 76, 042327 (2007).
[9] F. Dell'Anno et al., Phys. Rev. A 76, 022301 (2007).
[10] S. Wang, L.-L. Hou, X.-F. Chen, and X.-F. Xu, Phys. Rev. A 91, 063832 (2015).
[11] C. Kumar and S. Arora, Phys. Rev. A 107, 012418 (2023).
[12] S. L. Zhang, J. S. Guo, W. S. Bao, J. H. Shi, C. H. Jin, X. B. Zou, and G. C. Guo, Phys. Rev. A 89, 062309, (2014).
[13] L. Fan and M. S. Zubairy, Phys. Rev. A 98, 012319 (2018).
[14] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical* Functions (Dover, 1965).
[15] H. M. Srivastava and H. L. Manocha (Ellis Horwood, 1984).
[16] G. Ren, J. Ma, J. Du, and H. Yu, *Int. J. Theor. Phys.* 55, 2071–2088 (2016).
[17] C. Zhang, J. Du, and G. Ren, *Int. J. Theor. Phys.* 58, 261 (2019).
[18] Z. Wang, H. Yuan, and H. Fan, *J. Opt. Soc. Am. B* 28, 1964–1972 (2011)





کنفرانس فیزیک ایران

دانشگاه قم – ۲ الی ۵ شهریور ۱۴۰۵

مجموعه مقالات شاخه

پلاسما

www.psi.ir/f/physics1405

اعتبارسنجی مدل عددی پتانسیل الکتریکی یک حلقه باردار به‌عنوان جزء پایه گرید کروی در دستگاه IECF با استفاده از حل تحلیلی

مریم قپانوری [1*]، علی باقری [1]

[1] سازمان انرژی اتمی ایران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای ، پژوهشکده گداخت هسته ای

چکیده

در مدل‌سازی عددی دستگاه محصورسازی الکتروستاتیکی اینرسی ایرانی(IR-IECF) ، دقت محاسبه پتانسیل الکتریکی برای تحلیل میدان و رفتار ذرات باردار اهمیت دارد. در این پژوهش، بمنظور اعتبارسنجی مدل عددی گرید کروی، پتانسیل ناشی از یک حلقه باردار با قطر ۱۳.۵ سانتی‌متر و ولتاژ ۸۰- کیلوولت به دو روش تحلیلی و عددی بررسی شد. در روش تحلیلی، رابطه پتانسیل حلقه بر پایه انتگرال بیضوی کامل نوع اول به‌کار رفت و نتایج در امتداد محور تقارن حلقه با نتایج حاصل از مدل‌سازی در نرم‌افزار COMSOL Multiphysics مقایسه شد. ارزیابی پتانسیل نرمال‌شده و خطای نسبی نشان داد که بیشینه خطای نسبی در محدوده مدل‌سازی‌شده حدود ۰.۷۵ درصد است. این تطابق مناسب نشان می‌دهد که مدل عددی استفاده‌شده از دقت کافی برای محاسبه پتانسیل الکتریکی گریدهای کروی متشکل از چند حلقه برخوردار است و می‌تواند در تحلیل الکترواستاتیکی دستگاه IR-IECF به‌کار رود

واژه های کلیدی: *دستگاه محصورسازی الکتروستاتیکی اینرسی ایرانی، گرید کروی، حلقه باردار، پتانسیل الکتریکی، حل تحلیلی، COMSOL، اعتبارسنجی عددی.*

Validation of a Numerical Model for the Electric Potential of a Charged Ring as a Basic Component of the Spherical Grid in an IECF Device Using the Analytical Solution

Maryam Ghapanvari[1]*, Ali Bagheri[1]

[1] *Plasma and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran.*

Abstract

In the numerical modeling of the Iranian Inertial Electrostatic Confinement device (IR-IECF), accurate calculation of the electric potential is important for field analysis and charged-particle behavior studies. In this work, to validate the numerical model of a spherical grid, the electric potential of a charged ring with a diameter of 13.5 cm and an applied voltage of −80 kV was investigated analytically and numerically. In the analytical method, the potential was calculated using the complete elliptic integral of the first kind, and the results along the symmetry axis of the ring were compared with those obtained from COMSOL Multiphysics. The comparison of the normalized potential and relative error showed that the maximum relative error in the modeled region was about 0.75%. This good agreement indicates that the numerical model has sufficient accuracy for calculating the electric potential of spherical grids composed of multiple rings and can be used for electrostatic analysis of the IR-IECF device.

***Keywords**: Iranian Inertial Electrostatic Confinement device, IR-IECF, spherical grid, charged ring, electric potential, analytical solution, COMSOL, numerical validation*
PACS No. (۲۸)

مقدمه

دستگاه محصورسازی الکتروستاتیکی اینرسی ایرانی (IR-IECF) (شکل ۱) یکی از سامانه‌های آزمایشگاهی همجوشی فشرده است که در آن با اعمال اختلاف پتانسیل زیاد میان کاتد و آند، میدان الکتریکی لازم برای شتاب‌دهی و تمرکز ذرات باردار فراهم می‌شود. در این دستگاه، توزیع پتانسیل و میدان الکتریکی نقش

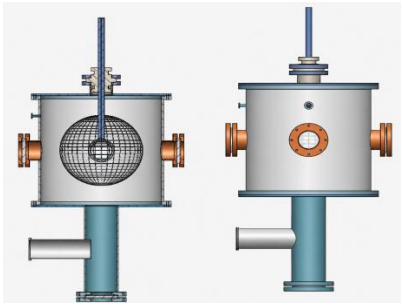
مهمی در شکل‌گیری چاه پتانسیل، مسیر حرکت ذرات و عملکرد کلی سامانه دارد. از این رو، محاسبه دقیق پتانسیل الکتریکی یکی از مراحل اصلی در تحلیل و مدل‌سازی عددی دستگاه IR-IECF محسوب می‌شود. در دستگاه IR-IECF ، گرید کاتد به‌صورت کروی و متشکل از چند حلقه رسانا در نظر گرفته می‌شود. به دلیل هندسه سیمی گرید، توزیع پتانسیل و میدان در فضای اطراف آن می‌تواند با حالت ایده‌آل الکترودهای پیوسته متفاوت باشد. بنابراین، پیش از بررسی گرید کروی چندحلقه‌ای، لازم است دقت مدل عددی در محاسبه پتانسیل ناشی از یک حلقه رسانا ارزیابی شود.در این پژوهش، به‌منظور اعتبارسنجی مدل عددی مورد استفاده در تحلیل الکترواستاتیکی دستگاه IR-IECF ، پتانسیل الکتریکی ناشی از یک حلقه باردار با قطر ۱۳.۵ سانتی‌متر و ولتاژ ۸۰- کیلوولت به دو روش تحلیلی و عددی بررسی شده است. حل تحلیلی بر پایه رابطه پتانسیل حلقه باردار و انتگرال بیضوی کامل نوع اول انجام شده و نتایج آن در امتداد محور تقارن حلقه با نتایج حاصل از شبیه‌سازی در نرم‌افزار COMSOL Multiphysics مقایسه شده است. هدف اصلی این مقایسه، ارزیابی دقت حل عددی و بررسی قابلیت استفاده از آن در مدل‌سازی پتانسیل گریدهای کروی چندحلقه‌ای دستگاه IR-IECF است[1-3].

مواد و روش‌ها (روش کار)

در این پژوهش، برای اعتبارسنجی مدل عددی پتانسیل الکتریکی گرید کروی دستگاه IR-IECF ، ابتدا یک حلقه رسانای منفرد به‌عنوان جزء پایه گرید کروی در نظر گرفته شد. قطر حلقه برابر ۱۳.۵ سانتی‌متر و پتانسیل اعمالی به آن برابر ۸۰- کیلوولت انتخاب گردید. سپس پتانسیل الکتریکی ناشی از این حلقه به دو روش تحلیلی و عددی محاسبه و نتایج حاصل از این دو روش با یکدیگر مقایسه شد.

در روش تحلیلی، پتانسیل الکتریکی ناشی از یک حلقه باردار در نقطه‌ای از فضا با مختصات استوانه‌ای $((\rho,z))$ از رابطه زیر به‌دست می‌آید [4]:

$$V(\rho,z)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Q}{\sqrt{(\rho+R)^2+z^2}}\frac{2}{\pi}K(m)\ldots \quad ..(1)$$



شکل ۱. نمای شماتیکی دستگاه IR-IECF و آرایش کلی اجزای اصلی آن.

که در آن (R) شعاع حلقه، (Q) بار کل حلقه، (ε_0) گذردهی الکتریکی خلأ و (K(m)) انتگرال بیضوی کامل نوع اول است. پارامتر (m) نیز به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$m=\frac{4\rho R}{(\rho+R)^2+z^2} \qquad (2)$$

برای مقایسه مستقیم با نتایج عددی، پتانسیل در امتداد محور تقارن حلقه بررسی شد. در این حالت $(\rho=0)$ بوده و رابطه پتانسیل به فرم ساده‌تر زیر تبدیل می‌شود:

$$V(0,z)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Q}{\sqrt{R^2+z^2}} \qquad (3)$$

در روش عددی، همان هندسه حلقه با قطر ۱۳.۵ سانتی‌متر در نرم‌افزار COMSOL Multiphysics مدل‌سازی شد[5]. برای حلقه، شرط مرزی پتانسیل ثابت برابر ۸۰- کیلوولت اعمال گردید و فضای اطراف حلقه به‌عنوان ناحیه محاسباتی الکترواستاتیکی در نظر گرفته شد. پس از حل مسئله، مقدار پتانسیل الکتریکی در امتداد محور تقارن حلقه استخراج شد.

به‌منظور حذف وابستگی نتایج به مقدار مطلق پتانسیل و فراهم شدن امکان مقایسه مناسب‌تر، پتانسیل‌های تحلیلی و عددی نسبت به قدرمطلق پتانسیل در مرکز حلقه نرمال‌سازی شدند. از آنجا که هدف مقایسه، بررسی شکل تغییرات پتانسیل است، نرمال‌سازی نتایج نسبت به پتانسیل مرکز حلقه باعث می‌شود مقدار بار کل (Q) در مقایسه نهایی اثر مستقیم نداشته باشد. سپس اختلاف میان نتایج دو روش با استفاده از خطای نسبی محاسبه گردید:

$$\varepsilon_{rel}=\frac{|V_{num}-V_{ana}|}{|V_{ana}|} \qquad (4)$$

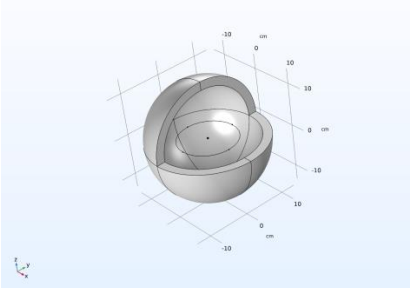
که در آن (V_{num}) پتانسیل به‌دست‌آمده از حل عددی و (V_{ana}) پتانسیل حاصل از حل تحلیلی است. مقدار (ε_{rel}) خطای نسبی

بدون بعد را نشان می‌دهد. در ادامه، برای بیان نتیجه به‌صورت درصد، مقدار خطای نسبی در ۱۰۰ ضرب شده است.این مقایسه مبنایی برای ارزیابی دقت مدل عددی و قابلیت استفاده از آن در شبیه‌سازی پتانسیل گریدهای کروی چندحلقه‌ای دستگاه IR-IECF فراهم می‌کند. اختلاف اندک مشاهده‌شده میان دو روش می‌تواند ناشی از محدود بودن دامنه محاسباتی، شبکه‌بندی عددی و تفاوت میان حلقه خطی ایده‌آل در حل تحلیلی و هندسه سه‌بعدی مدل‌شده در COMSOL باشد. در مدل عددی، دامنه محاسباتی به‌صورت سه‌بعدی و کروی با شعاعی برابر دو برابر شعاع حلقه تعریف شد. برای اعمال شرط پتانسیل صفر در فاصله‌های دور، از Infinite Element Domain با نوع Spherical استفاده گردید. گسسته‌سازی حل در حالت Quadratic انجام شد. شبکه‌بندی اولیه از نوع Physics-controlled mesh در حالت Normal و شامل ۸۴۱۴ المان بود و سپس با Adaptive Mesh Refinement و گزینه Rebuild Mesh اصلاح شد. پایداری پتانسیل نرمال‌شده و بیشینه خطای نسبی حدود ۰.۷۵ درصد، استقلال مناسب شبکه را نشان داد.

نتایج و بحث

در روش عددی، هندسه یک حلقه باردار با قطر ۱۳.۵ سانتی‌متر در نرم‌افزار COMSOL Multiphysics مدل‌سازی شد. شکل ۲ هندسه مدل عددی حلقه را نشان می‌دهد. برای بررسی دقت مدل عددی، پتانسیل الکتریکی حلقه باردار در امتداد محور تقارن آن استخراج و با نتیجه حاصل از حل تحلیلی مقایسه شد. به‌منظور مقایسه مناسب‌تر، مقدار پتانسیل در هر دو روش نسبت به پتانسیل مرکز حلقه نرمال‌سازی گردید. شکل ۳ مقایسه تغییرات پتانسیل نرمال‌شده حاصل از حل تحلیلی و شبیه‌سازی عددی در نرم‌افزار COMSOLرا در امتداد محور (z) نشان می‌دهد.

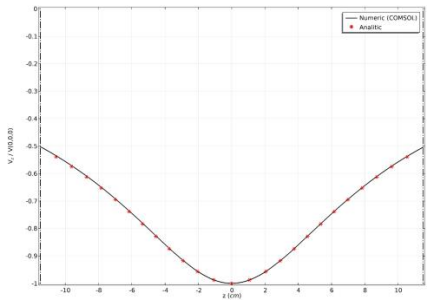
همان‌طور که در شکل ۳ مشاهده می‌شود، نتایج حل عددی و تحلیلی در بیشتر ناحیه بررسی‌شده تطابق مناسبی با یکدیگر دارند. مقدار پتانسیل در مرکز حلقه بیشینه بوده و با دور شدن از مرکز در راستای محور تقارن کاهش می‌یابد. روند تغییرات پتانسیل در هر دو روش یکسان است و این موضوع نشان می‌دهد که مدل عددی توانسته است رفتار فیزیکی پتانسیل حلقه باردار را به‌خوبی بازتولید کند. برای ارزیابی کمی اختلاف میان دو روش، خطای نسبی بین پتانسیل عددی و تحلیلی محاسبه شد. نمودار خطای نسبی در شکل ۴ نشان داده شده است. بر اساس نتایج به‌دست‌آمده، بیشینه خطای نسبی در محدوده مدل‌سازی‌شده حدود (7.5×10^{-3}) است که معادل ۰/۷۵ درصد می‌باشد. این مقدار خطا بسیار کوچک بوده و بیانگر دقت مناسب حل عددی در محاسبه پتانسیل الکتریکی حلقه باردار است. با توجه به اینکه گرید کروی کاتد در دستگاه IR-IECF از چند حلقه رسانا تشکیل می‌شود، تطابق مناسب میان حل عددی و تحلیلی برای یک حلقه می‌تواند مبنایی برای اطمینان از مدل‌سازی عددی گریدهای کروی چندحلقه‌ای باشد. بنابراین، نتایج این بخش نشان می‌دهد که روش عددی به‌کاررفته در نرم‌افزار COMSOL از دقت کافی برای تحلیل الکترواستاتیکی گرید کروی دستگاه IR-IECF برخوردار است. برای تکمیل اعتبارسنجی سه‌بعدی، پتانسیل عددی علاوه بر محور z، در چند صفحه x-y با ارتفاع‌های مختلف z نیز با حل تحلیلی کامل حلقه باردار مقایسه شد. نتایج نشان داد که الگوی دوبعدی پتانسیل در این صفحات با رفتار تحلیلی مورد انتظار سازگار است؛ شکل ۵ یک نمونه از توزیع دوبعدی پتانسیل را نشان می‌دهد.



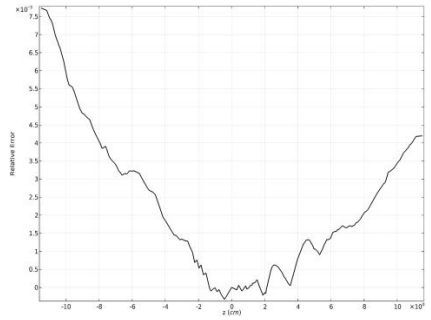
شکل ۲. هندسه مدل عددی یک حلقه باردار با قطر ۱۳.۵ سانتی‌متر در نرم‌افزار COMSOL Multiphysics.

برای بررسی کیفی توزیع فضایی پتانسیل و میدان، نتایج عددی حاصل از حلقه باردار در صفحات مختلف نیز استخراج شد. شکل ۵ توزیع پتانسیل الکتریکی ناشی از حلقه را در صفحه (x-y) نشان می‌دهد. همچنین در شکل ۶ جهت بردارهای میدان الکتریکی در صفحه (z-y) نمایش داده شده است. این نتایج نشان می‌دهند که علاوه بر تطابق کمی پتانسیل در امتداد محور تقارن، الگوی فضایی

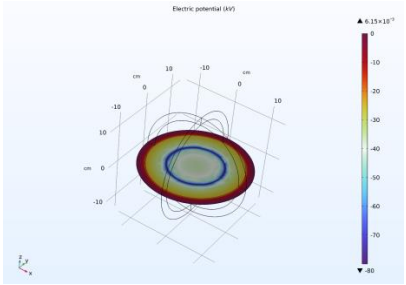
پتانسیل و میدان نیز با رفتار فیزیکی مورد انتظار از یک حلقه باردار سازگار است.



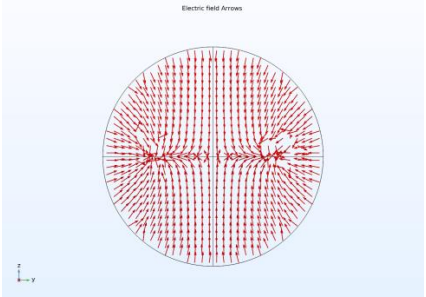
شکل ۳. مقایسه نتایج حل عددی (COMSOL) و حل تحلیلی برای پتانسیل نرمال‌شده حلقه باردار در امتداد محور تقارن Z.



شکل ۴. تغییرات خطای نسبی بین حل عددی (COMSOL) و حل تحلیلی برای پتانسیل حلقه باردار در امتداد محور تقارن Z.



شکل ۵. توزیع پتانسیل الکتریکی ناشی از یک حلقه باردار در صفحه x – y.



شکل ۶. جهت بردارهای میدان الکتریکی ناشی از یک حلقه باردار در صفحه y – z.

نتیجه گیری

در این پژوهش، دقت مدل عددی مورد استفاده برای محاسبه پتانسیل الکتریکی گرید کروی دستگاه IR-IECF با استفاده از حل تحلیلی یک حلقه باردار ارزیابی شد. برای این منظور، پتانسیل ناشی از یک حلقه با قطر ۱۳.۵ سانتی‌متر و ولتاژ ۸۰- کیلوولت به دو روش تحلیلی و عددی محاسبه و نتایج در امتداد محور تقارن حلقه با یکدیگر مقایسه شدند. تطابق مناسب پتانسیل نرمال‌شده و بیشینه خطای نسبی حدود ۰.۷۵ درصد نشان داد که مدل عددی قادر است رفتار پتانسیل حلقه باردار را با دقت مناسبی بازتولید کند. از آنجا که گرید کروی IECF از چند حلقه رسانا تشکیل می‌شود، اعتبارسنجی حاضر برای یک حلقه منفرد می‌تواند به‌عنوان گام پایه در توسعه مدل عددی گریدهای چندحلقه‌ای مورد استفاده قرار گیرد. در مدل واقعی، پتانسیل نهایی از حل هم‌زمان کل هندسه گرید به‌دست می‌آید و خطای عددی به‌صورت جمع ساده خطای حلقه‌های منفرد نیست. با این حال، افزایش تعداد حلقه‌ها، پیچیدگی هندسه و نواحی اتصال می‌تواند موجب افزایش خطاهای موضعی شود که با اصلاح شبکه، افزایش تعداد المان‌ها و تکرار مراحل Adaptive Mesh Refinement قابل کنترل است. بنابراین، نتایج این پژوهش می‌تواند مبنایی برای مدل‌سازی دقیق‌تر گرید کروی چندحلقه‌ای و تحلیل میدان الکتریکی در دستگاه IR-IECF باشد.

مرجع‌ها

[1] R. L. Hirsch; “Inertial-electrostatic confinement of ionized fusion gases”; *Journal of Applied Physics* **38**, No. 11 (1967) 4522-4534.
[2] V. Damideh, A. Sadighzadeh, A. Koohi, A. Aslezaeem, A. Heidarnia, N. Abdollahi, et al.; “Experimental study of the Iranian inertial electrostatic confinement fusion device as a continuous neutron generator”; *Journal of Fusion Energy* **31**, No. 2 (2012) 109-111.
[3] V. Damideh, A. Sadighzadeh, and N. Abdollahi; “Design and construction of inertial electrostatic confinement fusion device”; (2011).
[4] O. Ciftja; “The electrostatic potential of a uniformly charged ring”; *European Journal of Physics* **30** (2009) 623-627.
[5] COMSOL AB; “COMSOL Multiphysics Reference Manual, Version 5.3a”; *COMSOL Multiphysics Documentation*, COMSOL AB, Stockholm, Sweden (2017).

مطالعه امکان‌سنجی استخراج لیتیوم از محلول آبی با استفاده از راکتور جت پلاسمای تخلیه سد دی‌الکتریک

محمودیان ، محمدرضا ؛ حسن بیگی ، علی ؛ بخش زاد محمودی ، مهدی
گروه فیزیک پلاسما و پلاسماپزشکی -دانشگاه خوارزمی - تهران - ایران

چکیده
این مطالعه به بررسی کارایی فناوری پلاسما برای بازیابی لیتیوم از محلول‌های آبی کلرید لیتیوم (LiCl) از طریق رسوب‌دهی کربنات لیتیوم (Li_2CO_3) می‌پردازد. در این پژوهش، از یک راکتور جت پلاسمای تخلیه سد دی‌الکتریک (DBD) با فرکانس رادیویی (۱۳,۵۶ مگاهرتز) و توان ۱۳۰ وات با استفاده از گاز دی‌اکسید کربن (CO_2) به عنوان گاز پیشماده استفاده شده است. محصول رسوب‌شده با استفاده از آنالیز پراش پرتو ایکس (XRD) مشخصه‌یابی شد که تشکیل Li_2CO_3 را در مقایسه با نمونه استاندارد تجاری تأیید کرد. تحلیل‌های مقایسه‌ای بین شرایط با پلاسما و شرایط تنها گاز (بدون پلاسما) نشان داد که تیمار پلاسما به طور قابل توجهی نرخ بازیابی لیتیوم را افزایش می‌دهد. علاوه بر این، مشخصات پلاسمای تولیدشده با استفاده از طیف‌سنجی نشر نوری (OES) مورد بررسی قرار گرفت.

واژه های کلیدی: *پلاسمای DBD Jet، بازیابی لیتیوم، کربنات لیتیوم، استخراج سبز، طیف‌سنجی نشر نوری*

Feasibility Study of Lithium Extraction from Aqueous Solution Using a Dielectric Barrier Discharge (DBD) Plasma Jet Reactor

Mahmoudiyan, Mohammadreza ; Hasanbeigi Ali ; Bakhshzadmahmoudi, Mehdi

Plasma Physics and Plasma Medicine Group, Department of Physics, Faculty of Science, Kharazmi University, Tehran, Iran

Abstract

This study investigates the efficacy of plasma technology for lithium recovery from aqueous lithium chloride (LiCl) solutions via lithium carbonate (Li_2CO_3) precipitation. A radio-frequency (13.56 MHz) dielectric barrier discharge (DBD) plasma jet reactor with a power of 130 W, using carbon dioxide (CO_2) as the precursor gas was employed. The precipitated product was characterized using X-ray diffraction (XRD), confirming the formation of Li_2CO_3 in comparison with a commercial standard. Comparative analyses between plasma-assisted and gas-only (non-plasma) conditions demonstrated that plasma treatment substantially promotes lithium recovery rates. Furthermore, the characteristics of the generated plasma were investigated using optical emission spectroscopy (OES).

Keywords: *DBD Plasma Jet, Lithium Recovery, Lithium Carbonate, Green Extraction, Optical Emission Spectroscopy (OES)*

PACS No. ***52.80.-s***

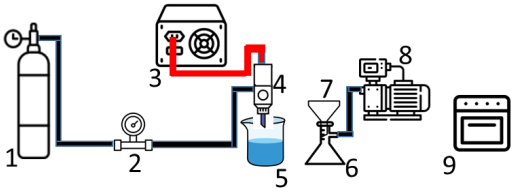
مقدمه:
پلاسما گازی الکتریسیته‌دار است که در آن اتم‌ها به یون‌های مثبت و الکترون‌های منفی تجزیه شده‌اند نمونه‌های طبیعی پلاسما در زندگی روزمره شامل پدیده آذرخش، شفق قطبی، و همچنین گاز درون لامپ‌های فلورسنت و نئون است [۱]. لیتیوم به عنوان یک عنصر حیاتی در ساخت باتری‌های لیتیوم-یون (LIBs) محسوب می‌شود. بازار محصولات مصرفکننده که از لیتیوم و این نوع باتری‌ها

استفاده می‌کنند، با سرعت چشمگیری در حال گسترش است. فراتر از صنعت باتری، ترکیبات لیتیوم در حوزه‌های گوناگونی از جمله صنایع سرامیک و شیشه‌های خاص، تولید اولیه آلومینیوم، صنایع پیشرانه موشکی، انرژی هسته‌ای، داروسازی، تولید روان‌کننده‌ها و گریس‌ها، سنتز ویتامین A، سنتز ترکیبات آلی، ساخت لحیم نقره، تجهیزات زیرآبی و باتری‌ها کاربرد دارند. بنابراین، توسعه روش‌های سریع و دقیق برای جداسازی، خالص‌سازی و بازیابی لیتیوم از منابع اولیه و ثانویه به یک ضرورت تبدیل شده است [۲]. تکنیک‌های متنوعی برای استخراج لیتیوم از دریاچه‌ها و معادن نمک از جمله فرآیندهای هیدرومتالورژی، پیرومتالورژی، متالورژی شیمیایی و لیچینگ بیولوژیکی بررسی شده‌اند. همچنین روش‌های گوناگونی نظیر رسوب‌دهی همزمان، استخراج با حلال، تبادل یونی و جذب سطحی با استفاده از جاذب‌های پلیمری آلی، معدنی و ترکیبی برای بازیابی لیتیوم از آب دریا مورد بحث و مطالعه قرار گرفته است[۳]. یکی از رویکردهای متداول برای استخراج لیتیوم از آب‌های شور یا دریا، استفاده از تکنیک‌های کربناته‌سازی معدنی است که منجر به تشکیل ترکیباتی مانند کربنات لیتیوم (Li_2CO_3) یا کربنات منیزیم ($MgCO_3$) می‌شود. اضافه کردن کربنات‌هایی نظیر Na_2CO_3، $NaHCO_3$ و K_2CO_3 به محلول حاوی لیتیوم اضافه شده و باعث ایجاد رسوب خواهند شد. در روش تزریق CO_2 گاز دی‌اکسید کربن مستقیماً به درون محلول لیتیوم تزریق شده و فرآیند رسوب‌دهی Li_2CO_3 را تسهیل می‌کند. در مطالعه حاضر، روشی نوین و مبتنی بر فناوری پلاسما برای بازیابی لیتیوم ارائه شده است. در این رویکرد، از پلاسمای تولید شده از گاز CO_2 برای واکنش با محلول آبی حاوی لیتیوم استفاده می‌گردد. هدف اصلی، استخراج نمک‌های لیتیوم از آب نمک و بهبود بازده بازیابی نسبت به روش‌های سنتی است[۴].

مواد و روش‌ها

در این پژوهش، از ۶,۲۷ گرم کلرید لیتیوم (LiCl) و ۶,۲۷ گرم سدیوم هیدروکسید (NaOH) با خلوص بالا استفاده شد. محلول آبی با غلظت مشخص با استفاده از ۷۵ میلی لیتر آب مقطر تهیه گردید. گاز دی‌اکسید کربن (CO_2) با خلوص بالا و دبی ۴۵۰ sccm به عنوان گاز خوراک راکتور پلاسما مورد استفاده قرار گرفت. مدت زمان اعمال پلاسما به محلول ۳ دقیقه در نظر گرفته شد. بر این اساس، انرژی کل مصرفی توسط پلاسما در آزمایش حدود ۲۳,۴ (۱۳۰ وات × ۱۸۰ ثانیه) کیلوژول محاسبه گردید.

راه اندازی آزمایشگاهی



شکل ۱ : شماتیک ستاپ آزمایشگاهی: ۱.کپسول گاز CO2 ۲.دبی سنج جرمی ۳. منبع تغذیه RF ۴.جت پلاسمای DBD ۵.محلول آزمایش ۶.ارلن خلا ۷.قیف بوخنر ۸.پمپ ۹.کوره

یک راکتور جت پلاسمای تخلیه سد دی‌الکتریک (DBD Jet) طراحی و ساخته شد. این راکتور شامل الکترودهای فلزی با پوشش دی‌الکتریک، منبع تغذیه و سیستم کنترل جریان گاز بود. فاصله نازل جت تا سطح محلول در بهینه‌ترین مقدار تنظیم گردید.

روش انجام آزمایش

ابتدا محلول ایجاد شده در یک بشر شیشه‌ای ریخته شد. سپس راکتور در موقعیت مناسب قرار گرفت. گاز CO_2 با دبی کنترل‌شده تزریق شد و منبع تغذیه در شرایط عملیاتی بهینه روشن گردید. پس از مدت زمان معین، رسوب تشکیل‌شده با سیستم فیلتراسیون خلا که شامل قیف بوخنر، ارلن خلا و پمپ

است، جداسازی، شسته و داخل کوره خشک شد. مجددا همین آزمایش با پلاسمای CO_2 تکرار شد.

بررسی نقش سدیم هیدروکسید (NaOH) در فرآیند رسوب‌دهی

نتایج تجربی نشان داد که در غیاب افزودنی سدیم هیدروکسید (NaOH)، تزریق تنها گاز CO_2 به محلول آبی، منجر به واکنش کربناته شدن و بازیابی لیتیوم نمی‌شود. بررسی ترمودینامیکی این واکنش نشان داده است که در شرایط محیطی (دمای اتاق)، مقدار انرژی آزاد گیبس (Gibbs Free Energy) مثبت بوده و بنابراین واکنش به صورت خودبه‌خودی (Spontaneous) رخ نمی‌دهد. در مقابل، هنگامی که پلاسما به کار گرفته شد، خروجی محصول (Li_2CO_3) به صورت چشمی قابل مشاهده نبود، اما آنالیزهای انجام‌شده کاهش جزئی در غلظت یون‌های لیتیوم را نشان دادند. این پدیده به این معناست که واکنش با تأمین انرژی خارجی توسط پلاسما تا حدی پیش می‌رود، اما با قطع شدن انرژی، واکنش به حالت اولیه خود بازگشته و محصول تشکیل‌شده مجددا تفکیک می‌شود[4].

مشخصات پلاسمای دی‌اکسید کربن

پلاسمای تولید شده از گاز دی‌اکسید کربن (CO_2) یکی از حوزه‌های مورد توجه در پژوهش‌های مرتبط با تبدیل انرژی و حفاظت از محیط زیست است [۵]. مطالعات گسترده‌ای در سال‌های اخیر به بررسی خواص فیزیکوشیمیایی این نوع پلاسما اختصاص یافته است[۶, ۷].

ویژگی‌های منحصربه‌فرد پلاسمای دی‌اکسید کربن

از جمله ویژگی‌های مهم پلاسمای CO_2 می‌توان به موارد زیر اشاره کرد [۵, ۸]:

- قابلیت فعال سازی مولکول های CO_2 در دمای محیط
- تولید گونه‌های فعال شیمیایی بدون نیاز به افزایش دمای کلی سیستم
- امکان استفاده از گاز گلخانه‌ای CO_2 به عنوان ماده اولیه
- همسویی با اهداف توسعه فناوری‌های سبز و پایدار

مکانیسم تولید گونه‌های فعال

در پلاسمای CO_2، الکترون‌های پرانرژی حاصل از میدان الکتریکی با مولکول‌های گاز برخورد کرده و باعث یونش، برانگیختگی و تفکیک آن‌ها می‌شوند[۵]. این فرآیند منجر به تولید گونه‌های فعالی از جمله رادیکال‌های هیدروکسیل ($OH^{\bullet}$)، اکسیژن اتمی (O)، یون‌های کربن و الکترون‌های پرانرژی می‌گردد[۸]. نکته حائز اهمیت این است که پلاسمای CO_2 در فشار اتمسفر و دمای نزدیک به محیط قابل تولید است [۶].

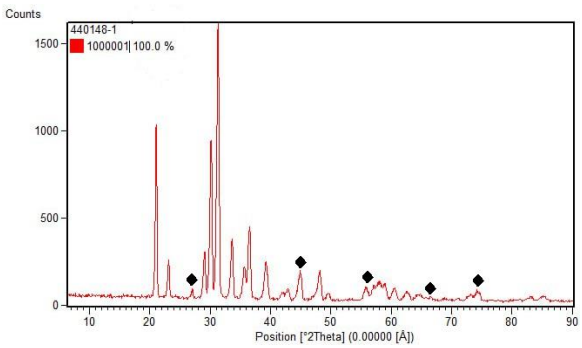
کاربرد در فرآیندهای رسوب‌دهی

حضور گونه‌های فعال در پلاسمای CO_2 می‌تواند با تسریع واکنش‌های کربناته‌سازی، کارایی فرآیند رسوب‌دهی کربنات لیتیوم (Li_2CO_3) را افزایش دهد [۴]. این ویژگی، پلاسمای CO_2 را برای کاربرد در فرآیندهای حساس به دما مانند واکنش‌های رسوب‌دهی در محلول‌های آبی مناسب می‌سازد [۲].

مکانیسم معدنی‌شدن از طریق واکنش کربناته

واکنش کربناته شدن (Mineralization) لیتیوم را می‌توان در قالب دو مرحله اصلی تبیین نمود [۴]. در مرحله اول، پلاسمای دی‌اکسید کربن (CO_2) در تماس با محلول آبی، گونه‌های فعالی تولید می‌کند که منجر به تشکیل یون‌های کربنات (CO_3^{2-}) در محیط می‌شود. حضور گونه های فعال نقش کلیدی در این فرآیند ایفا می‌کنند که با افزایش pH موضعی در فصل مشترک پلاسما-مایع، شرایط شیمیایی مناسب را برای تشکیل یون‌های کربنات فراهم می‌آورند. در مرحله دوم، یون‌های کربنات تشکیل‌شده با یون‌های لیتیوم (Li^+) موجود در محلول واکنش داده و رسوب کربنات لیتیوم (Li_2CO_3) را تشکیل

می‌دهند[۴]. واکنش سدیوم با کلر نیز نمک سدیوم کلرید را تشکیل می دهد. در فرآیند مورد مطالعه در این پژوهش، استفاده از پلاسمای CO_2 در مقایسه با تزریق گاز CO_2 سرد، به طور قابل توجهی سرعت و بازده این واکنش دو مرحله‌ای را افزایش می‌دهد. در حالی که در روش تزریق گاز CO_2، باید ابتدا در آب حل شده و سپس طی یک فرآیند تعادلی به یون کربنات تبدیل شود، در روش پلاسما، مسیرهای واکنش مستقیم‌تر و سریع‌تری به دلیل وجود الکترون‌های پرانرژی و گونه‌های برانگیخته در دسترس است. این یافته‌ها نشان می‌دهد که فناوری پلاسما نه تنها از نظر انرژی به صرفه است، بلکه از نظر سینتیک شیمیایی نیز مسیر مؤثرتری برای واکنش کربناته‌سازی فراهم می‌کند[۴]. پس از اعمال پلاسمای CO_2 بر روی محلول آبی حاوی LiCl، جرم رسوب سفید رنگ در مقایسه با تزریق گاز CO_2 بدون اعمال پلاسما از ۰,۴۹ گرم به ۱,۰۵ گرم افزایش یافت که بیانگر افزایش ۱۱۴% است. این مشاهده نشان‌دهنده تأثیر مثبت پلاسما بر فرآیند رسوب‌دهی کربنات لیتیوم است.



شکل۲ : الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) رسوب حاصل از فرآیند پلاسما (نقاط مشکی نمایانگر NaCl و سایر پیک ها مربوط به Li_2CO_3 هستند.)

آنالیز پراش پرتو ایکس (XRD)

رسوب خشکشده با آنالیز XRD و با مقایسه با Li_2CO_3 تجاری شناسایی شد. همچنین پیک‌های پراش به دست آمده با داده‌های استاندارد موجود در پایگاه داده JCPDS (کمیته مشترک استاندارد های پراش) مقایسه گردید. بر اساس این مقایسه، فازهای کربنات لیتیوم (Li_2CO_3) و سدیم کلرید (NaCl) به ترتیب با شماره کارت‌های ۰۶۲۸-۰۵ و ۲۲-۱۱۴۴ تأیید شدند. تطابق کامل پیک‌های اصلی با این داده‌های مرجع، تشکیل موفقیت‌آمیز هر دو فاز را در محصول نهایی نشان می‌دهد.

نتیجه گیری

نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که پلاسمای CO_2 به دلیل تولید گونه‌های فعال توانایی افزایش قابل توجه بازیابی لیتیوم از محلول‌های آبی را دارد. این یافته‌ها با گزارش‌های قبلی در زمینه کاربرد پلاسما در فرآیندهای استخراج عناصر با ارزش همسو است[۴]. با توجه به ماهیت پاک و کم‌مصرف بودن فرآیند پلاسما، این روش می‌تواند جایگزین مناسبی برای روش‌های شیمیایی مرسوم باشد. هر چند برای تعیین دقیق بازده کمی و بهینه‌سازی پارامترها، انجام مطالعات تکمیلی ضروری است.

سپاسگزاری

این کار با پشتیبانی پژوهشکده پلاسما دانشگاه خوارزمی انجام شد.

مرجع ها

۱. Chen, F., *Introduction to plasma physics and controlled fusion*. 2015: Springer.
۲. Swain, B., *Recovery and recycling of lithium: A review.* Separation and Purification Technology, 2017. **172**.
۳. Ding, T., et al., *Lithium extraction from salt lakes with different hydrochemical types in the Tibet Plateau.* Geoscience Frontiers, 2023. **14**(1).
۴. Yang, J., et al., *Novel approach for recovering lithium from simulated aqueous solutions using carbon dioxide microwave plasma.* Desalination, 2023. **567**.
۵. Pietanza, L.D., et al., *Advances in non-equilibrium CO 2 plasma kinetics: a theoretical and experimental review.* The European Physical Journal D, 2021. **75**(9).
۶. Kim, D.-Y., et al., *Synergistic Plasma Catalysis for CO2 Conversion: Mechanistic Insights, Advanced Characterization, and Rational Design Strategies.* ACS Catalysis, 2025. **15**(22).
۷. Cao, L., et al., *Progress and future of CO2 conversion based on plasma catalysis.* DeCarbon, 2025. **8**.
۸. Eber, Y., L. Winter, and J. Simon. *Assessing Radical Reaction Via Electron Paramagnetic Resonance at a CO2 Generation Plasma-Water Interface*. in *2025 AIChE Annual Meeting*. 2025. AIChE.

بررسی اثر قطبش اسپین و برهم‌کنش تبادل بر ناپایداری مدولاسیونی امواج یونی ـ صوتی در پلاسمای کوانتومی مغناطیده

رضوانی، امیرحسین[1*] ؛ میرابوطالبی، صدیقه [1] ؛ رجایی، لیلا [2] ؛ شریفیان ، محمودرضا [1]

[1] گروه فیزیک، واحد تهران شمال، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

[2] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم، قم، ایران

چکیده

در این پژوهش، ناپایداری مدولاسیونی امواج یونی ـ صوتی در پلاسمای کوانتومی مغناطیده با در نظر گرفتن اثر قطبش اسپین و برهم‌کنش تبادل مورد بررسی قرار گرفته است. برای توصیف سامانه از مدل هیدرودینامیک کوانتومی مبتنی بر تحول مجزای اسپین استفاده شده است که در آن جمعیت‌های الکترونی اسپین بالا و اسپین پایین به صورت دو مؤلفه مجزا در نظر گرفته می‌شوند. با بهره‌گیری از روش اختلال کاهشی، معادله شرودینگر غیرخطی حاکم بر تحول پوش موج استخراج شده و اثر پارامترهای فیزیکی بر نرخ رشد ناپایداری تحلیل می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که افزایش سرعت گروهی و دامنه اولیه موج موجب افزایش نرخ رشد ناپایداری می‌شود. همچنین پارامتر قطبش اسپین نقش تعیین‌کننده‌ای در رفتار ناپایداری دارد و مقدار بحرانی حدود $\kappa \simeq 0.4$ مرز میان دو رژیم متفاوت پایداری را مشخص می‌کند. نتایج این پژوهش می‌تواند در مطالعه پلاسماهای کوانتومی چگال، محیط‌های اخترفیزیکی و سامانه‌های آزمایشگاهی مرتبط مورد استفاده قرار گیرد.

واژه‌های کلیدی: *امواج یونی ـ صوتی، ناپایداری مدولاسیونی، پلاسمای کوانتومی، قطبش اسپین، برهم‌کنش تبادل.*

Modulational Instability of Ion-Acoustic Waves in Magnetized Quantum Plasmas with Spin Polarization and Exchange Interaction

Rezvani , Amirhosein [1*] ; Miraboutalebi , Sedigheh [1] ; Rajaei , Leila [2] ; Sharifian , Mahmoodreza [1]

[1]*Department of Physics, NT.C., Islamic Azad University, Tehran, Iran*
[2]*Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, University of Qom, Qom, Iran*

Abstract

The modulational instability of ion-acoustic Waves in a magnetized quantum plasma is investigated by considering spin polarization and exchange interaction effects. The plasma system is described within the framework of Separate Spin Evolution Quantum Hydrodynamics, in which spin-up and spin-down electron populations are treated as separate fluids. By applying the reductive perturbation method, a nonlinear Schrödinger equation governing the evolution of the wave envelope is obtained. The influence of physical parameters on the instability growth rate is analyzed. The results show that increasing the group velocity and the initial wave amplitude enhances the instability growth rate. Moreover, the spin polarization parameter plays a key role in the stability behavior, and a critical value around $\kappa \simeq 0.4$ separates two different stability regimes. These findings may be useful for understanding nonlinear wave processes in dense quantum, astrophysical, and laboratory plasmas.

***Keywords**: Ion-acoustic waves, Modulational instability, Quantum plasma, spin polarization, Exchange interaction.*

PACS No.: 52.27.Ep, 52.35.Fp, 52.35.Mw

مقدمه

پلاسماهای کوانتومی در محیط هایی با چگالی بسیار بالا و دمای پایین پدیدار می شوند؛ شرایطی که در آن طول موج دوبروی ذرات با فاصله میان ذره ای قابل مقایسه بوده و اثرات کوانتومی نظیر فشار فرمی ، برهم کنش تبادل و قطبش اسپین نقش مهمی در رفتار جمعی ذرات باردار ایفا می کنند [۱،۲،۳].

چنین محیط‌هایی در سامانه‌های اخترفیزیکی چگال، پلاسماهای آزمایشگاهی و برخی ساختارهای ماده چگالی مشاهده می‌شوند [۱،٤].

امواج یونی – صوتی از مهم ترین مدهای نوسانی در پلاسما هستند که در محیط های غیرخطی می تواند به صورت ساختارهای سالیتونی منتشر شوند. پایداری این امواج به تعادل میان پاشندگی و غیرخطی بودن وابسته است ؛ از این رو ، بررسی ناپایداری مدولاسیونی آنها اهمیت ویژه ای دارد .[۵،٦].

در حضور میدان مغناطیسی ، الکترون ها به دو جمعیت اسپین بالا و پایین تقسیم شده و با مدل تحول مجزای اسپین توصیف می شوند. این مدل امکان بررسی اثر قطبش اسپین و بر هم کنش تبادل بر انتشار امواج را فراهم می کند [۷،۸،۹،۱۰،۱۳،۱٤]. امواج یونی ـ صوتی از مهم‌ترین مدهای غیرخطی در پلاسماهای کوانتومی هستند که ویژگی‌های آن‌ها به شدت تحت تأثیر اثرات کوانتومی قرار می‌گیرد. در سال‌های اخیر، مطالعات متعددی نشان داده‌اند که قطبش اسپین و برهم‌کنش تبادل می‌توانند نقش تعیین‌کننده‌ای در انتشار، پایداری و تحول غیرخطی این امواج ایفا کنند [۱۱،۱۲].

این اثرات از طریق تغییر ویژگی‌های جمعی الکترون‌ها و اصلاح ضرایب پاشندگی و غیرخطی، رفتار دینامیکی امواج را دستخوش تغییر می‌کنند. از این‌رو، بررسی ناپایداری مدولاسیونی امواج یونی ـ صوتی در حضور اثرات اسپینی و برهم‌کنش تبادل، گامی مهم در جهت شناخت دقیق‌تر فرایندهای غیرخطی در پلاسماهای کوانتومی مغناطیده به شمار می‌رود. در حالی که در مرجع [۱۱] اثر پتانسیل بوهم در ناپایداری مدولاسیونی سالیتون های یونی – صوتی بررسی شده است ، در این پژوهش اثر قطبش اسپین و بر هم کنش تبادل بر ناپایداری مدولاسیونی امواج یونی – صوتی در چارچوب مدل تحول مجزای اسپین بررسی شده است. همچنین اثر پارامترهای قطبش اسپین κ، سرعت گروهی λ و دامنه اولیه موج Φ_0 بر نرخ رشد ناپایداری تحلیل شده است .

مدل نظری

یک پلاسمای کوانتومی مغناطیده، همگن و نامحدود شامل یون‌ها و الکترون‌های اسپین قطبیده در نظر گرفته می‌شود. دینامیک یون‌ها با معادلات پیوستگی و اندازه حرکت توصیف می‌شود، در حالی که الکترون‌های اسپین بالا و اسپین پایین در چارچوب مدل تحول مجزای اسپین بررسی می‌شوند [۷،۸،۱۲].

معادله پیوستگی یون‌ها به صورت

$$\frac{\partial n_i}{\partial t}+\nabla.(n_iV_i)=0 \qquad (۱)$$

نوشته می‌شود.

معادله اندازه حرکت یون‌ها برابر است با

$$\frac{\partial V_i}{\partial t}+(V_i.\nabla)V_i=-\frac{ze}{m_i}\nabla\phi+\frac{ze}{m_ic}V_i\times B \qquad (۲)$$

که در آن n_i، V_i، m_i، z، e، c، B و ϕ به ترتیب چگالی یون، سرعت یون، جرم یون، عدد بار یونی، بار الکترون، سرعت نور، میدان مغناطیسی و پتانسیل الکتروستاتیکی هستند [۱۲].

پتانسیل الکتروستاتیکی از معادله پوآسون تعیین می‌شود:

$$\nabla^2\phi=-4\pi e(z\,n_i-n_e) \qquad (۳)$$

که در آن چگالی کل الکترونی برابر است با $n_e=n_\uparrow+n_\downarrow$.

پارامتر قطبش اسپین به صورت

$$\kappa=\frac{n_{0\uparrow}-n_{0\downarrow}}{n_{0\uparrow}+n_{0\downarrow}} \qquad (٤)$$

تعریف می‌شود. در این رابطه، $n_{0\downarrow}$ و $n_{0\uparrow}$ به ترتیب چگالی تعادلی الکترون‌های اسپین بالا و اسپین پایین هستند [۱۲].

نیروی برهم‌کنش تبادل برای جمعیت‌های اسپینی به صورت فشرده زیر نوشته می‌شود:

$$F_{ex,\uparrow(\downarrow)}=\chi e^2 n_{\uparrow(\downarrow)}^{1/3}\nabla n_{\uparrow(\downarrow)} \qquad (۵)$$

که در آن χ شدت برهم‌کنش تبادل را مشخص می‌کند. این ضریب به شکل

$$\chi=2^{4/3}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3}\left[1-\left(\frac{1-\kappa}{1+\kappa}\right)^{4/3}\right] \qquad (٦)$$

تعریف می‌شود [۱۲]. رابطه (٦) نشان می‌دهد که شدت برهم‌کنش تبادل مستقیماً به قطبش اسپین وابسته است.

برای بررسی تحول آهسته پوش موج، مختصات کشیده به صورت

$$\xi = \varepsilon(x - \lambda t), \quad \tau = \varepsilon^2 t \qquad (۷)$$

معرفی می‌شوند که در آن ε پارامتر کوچک اختلال و λ پارامتر بی بعد متناظر با سرعت گروهی موج است [۱۱،۱۲].

با استفاده از روش اختلال کاهشی و اعمال شرط سازگاری در مرتبه‌های بالاتر، معادله شرودینگر غیرخطی حاکم بر تحول پوش موج به دست می‌آید:

$$i\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + A\frac{\partial^2 \phi}{\partial \zeta^2} + B|\phi|^2\phi = 0 \qquad (۸)$$

که در آن A ضریب پاشندگی و B ضریب غیرخطی است. این ضرایب تابع پارامترهای فیزیکی سامانه از جمله چگالی زمینه، قطبش اسپین، میدان مغناطیسی و برهم‌کنش تبادل هستند [۱۲].

برای تحلیل ناپایداری مدولاسیونی، جواب موج صفحه‌ای به صورت:

$$\phi = \Phi_0 e^{i(K\xi - \Omega\tau)} + c.c. \qquad (۹)$$

در نظر گرفته می‌شود. با جایگذاری رابطه (۹) در معادله (۸)، رابطه پاشندگی غیرخطی زیر حاصل می‌شود:

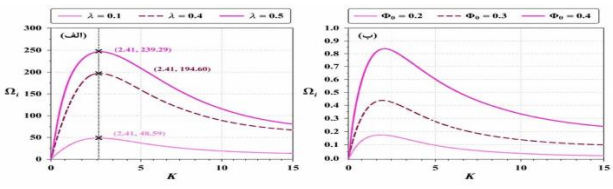
$$\Omega = AK^2 - B\Phi_0^2 \qquad (۱۰)$$

که در آن K عدد موج اغتشاش، Ω بسامد و Φ_0 دامنه اولیه موج است [۱۲].

نتایج و بحث

در این بخش، نرخ رشد ناپایداری مدولاسیونی Ω_i برحسب عدد موج K بررسی می‌شود. تمرکز اصلی بر اثر سرعت گروهی λ، دامنه اولیه موج Φ_0 و پارامتر قطبش اسپین κ است.

● اثر سرعت گروهی و دامنه اولیه موج:

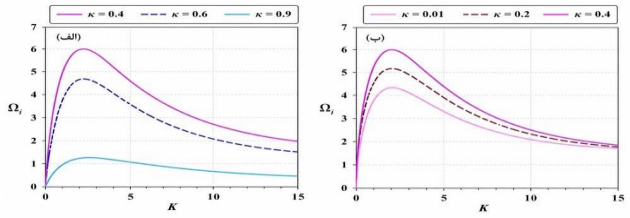


شکل ۱. نرخ رشد ناپایداری مدولاسیونی Ω_i برحسب عدد موج K. (الف) اثر سرعت گروهی λ برای دامنه اولیه ثابت $\Phi_0 = 0.9$. (ب) اثر دامنه اولیه موج Φ_0 برای سرعت گروهی ثابت $\lambda = 0.01$. (سایر پارامترها: $n_0 = 10\times10^{23}\ cm^{-3}$ و $\kappa = 0.01$).

مطابق شکل ۱، افزایش سرعت گروهی λ موجب افزایش بیشینه نرخ رشد ناپایداری می‌شود. در شکل ۱ (الف)، برای $\lambda = 0.1$، $\lambda = 0.4$ و $\lambda = 0.5$، بیشینه نرخ رشد در نزدیکی $K \simeq 2.41$ رخ می‌دهد، اما مقدار بیشینه با افزایش λ افزایش می‌یابد. این نتیجه نشان می‌دهد که سرعت گروهی نقش مهمی در شدت ناپایداری دارد، در حالی که محل تقریبی بیشینه رشد تقریباً ثابت باقی می‌ماند [۱۲].

در شکل ۱ (ب)، اثر دامنه اولیه موج بررسی شده است. برای $\Phi_0 = 0.2$، $\Phi_0 = 0.3$ و $\Phi_0 = 0.4$، افزایش دامنه اولیه موجب افزایش قابل توجه نرخ رشد ناپایداری می‌شود. از نظر فیزیکی، دامنه اولیه موج شدت جمله غیرخطی در معادله شرودینگر غیرخطی را تقویت می‌کند و در نتیجه رشد اغتشاشات مدولاسیونی افزایش می‌یابد [۱۱،۱۲].

● اثر قطبش اسپین:



شکل ۲. نرخ رشد ناپایداری مدولاسیونی Ω_i برحسب عدد موج K برای مقادیر مختلف پارامتر قطبش اسپین κ. (الف) مقادیر $\kappa \geq 0.4$. (ب) مقادیر $\kappa \leq 0.4$. (سایر پارامترها: $n_0 = 10\times10^{23}\ cm^{-3}$، $\lambda = 0.01$ و $\Phi_0 = 0.5$).

شکل ۲ نشان می‌دهد که قطبش اسپین اثر قابل توجهی بر نرخ رشد ناپایداری دارد. برای مقادیر $\kappa \leq 0.4$، افزایش κ موجب افزایش نرخ رشد تا نزدیکی مقدار بحرانی می‌شود. در مقابل، برای مقادیر $\kappa \geq 0.4$، با افزایش بیشتر قطبش اسپین، نرخ رشد کاهش می‌یابد [۱۲].

براساس نتایج عددی، مقدار

$$\kappa \simeq 0.4 \qquad (۱۱)$$

به عنوان مقدار بحرانی قطبش اسپین در سامانه حاضر شناخته می‌شود. در نزدیکی این مقدار، بیشینه نرخ رشد ناپایداری مشاهده

می‌شود. این رفتار ناشی از رقابت میان فشار فرمی، برهم‌کنش تبادل و اثرات غیرخطی سامانه است [۱۲،۱۵].

از آنجا که ضریب تبادل χ در رابطه (٦) تابعی از κ است، تغییر قطبش اسپین نه تنها جمعیت نسبی الکترون‌های اسپین بالا و پایین را تغییر می‌دهد، بلکه شدت برهم‌کنش تبادل را نیز اصلاح می‌کند. در نتیجه، ضرایب A و B در معادله (۸) تغییر کرده و نرخ رشد ناپایداری تحت تأثیر قرار می‌گیرد [۱۲ـ۷].

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، ناپایداری مدولاسیونی امواج یونی ـ صوتی در یک پلاسمای کوانتومی مغناطیده با در نظر گرفتن اثر قطبش اسپین و برهم‌کنش تبادل مورد بررسی قرار گرفت. برای توصیف سامانه از مدل هیدرودینامیک کوانتومی مبتنی بر تحول مجزای اسپین استفاده شد و با بهره‌گیری از روش اختلال کاهشی، معادله شرودینگر غیرخطی حاکم بر تحول پوش موج استخراج گردید. سپس تأثیر پارامترهای فیزیکی مختلف بر نرخ رشد ناپایداری مدولاسیونی مورد مطالعه قرار گرفت.

نتایج نشان داد که افزایش سرعت گروهی λ و دامنه اولیه موج موجب Φ_0 موجب افزایش نرخ رشد ناپایداری مدولاسیونی می شود ، در حالی که محل بیشینه رشد تغییر محسوسی ندارد .

بررسی اثر قطبش اسپین نشان داد که این پارامتر تأثیر قابل توجهی بر رفتار ناپایداری مدولاسیونی دارد. نتایج عددی وجود یک مقدار بحرانی در حدود $\kappa \simeq 0.4$ را نشان می‌دهد که مرز میان دو رژیم متفاوت پایداری را مشخص می‌کند. در نزدیکی این مقدار، نرخ رشد ناپایداری به بیشینه خود می‌رسد، در حالی که در دو سوی این ناحیه رفتار سامانه دستخوش تغییر می‌شود. این رفتار ناشی از رقابت میان فشار فرمی، برهم‌کنش تبادل و اثرات غیرخطی حاکم بر پلاسما است [۱۲،۱۵].

همچنین مشخص شد که برهم‌کنش تبادل از طریق وابستگی مستقیم به قطبش اسپین، ضرایب پاشندگی و غیرخطی معادله حاکم را اصلاح کرده و در نتیجه نقش مهمی در تعیین شرایط پایداری امواج یونی ـ صوتی ایفا می‌کند. از این‌رو، در پلاسماهای کوانتومی چگال و مغناطیده، صرف‌نظر کردن از اثرات اسپینی می‌تواند به توصیف ناقص رفتار غیرخطی امواج منجر شود. نتایج حاضر نشان می‌دهد که قطبش اسپین تنها یک پارامتر اصلاحی در مدل نیست، بلکه به عنوان یک عامل کنترل‌کننده در تحول غیرخطی امواج عمل می‌کند و می‌تواند شرایط پایداری و ناپایداری سامانه را به طور محسوسی تغییر دهد [۱۵ـ ۸].

در مجموع، نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که قطبش اسپین و برهم‌کنش تبادل از مهم‌ترین عوامل مؤثر بر ناپایداری مدولاسیونی امواج یونی ـ صوتی در پلاسماهای کوانتومی مغناطیده هستند. یافته‌های حاضر می‌تواند در مطالعه فرایندهای غیرخطی در پلاسماهای چگال، محیط‌های اخترفیزیکی و سامانه‌های آزمایشگاهی مبتنی بر پلاسماهای کوانتومی مورد استفاده قرار گیرد و زمینه را برای بررسی‌های گسترده‌تر در مدل‌های شامل چندین مؤلفه اسپینی، اثرات نسبیتی و برهم‌کنش‌های کوانتومی پیچیده‌تر فراهم سازد [۱۵ـ۷].

مرجع ها

[1] F. Haas, Quantum Plasmas: An Hydrodynamic Approach, Springer, New York, (2011).

[2] P.K. Shukla and B. Eliasson, Rev. Mod. Phys. 83, 885 (2011).

[3] G. Manfredi, Fields Inst. Commun. 46, 263 (2005).

[4] M. Marklund and G. Brodin, Phys. Rev. Lett. 98, 025001 (2007).

[5] I. Kourakis and P.K. Shukla, Phys, Plasmas 10, 3459 (2003).

[6] T. Taniuti and N. Yajima, J. Math. Phys. 10, 1369 (1969).

[7] P.A. Andreev and L. S. Kuz'menkov, Phys. Rev. E 91, 033111 (2015).

[8] P.A. Andreev, Phys. Plasmas 23, 062103 (2016).

[9] M. Akbari-Moghanjoughi, Phys. Plasmas 29, 032106 (2022).

[10] G. Brodin and M. Marklund, Phys. Rep. 995, 1 (2023).

[11] A. Rezvani, S. Miraboutalebi, L. Rajaei, and M.R. Sharifian, "Modulation instability of the ion-acoustic soliton in spin-polarized plasma under Bohm potential," Phys. Rev. E 111, 035204 (2025).

[12] A. Rezvani, S. Miraboutalebi, L. Rajaei, and M. Sharifian, "The Effect of Spin Polarization on Ion-Acoustic Solitary Waves in Quantum Plasmas," Turkish Journal of Physics 49, 86-9۸ (۲۰۲٦).

[13] P. A. Andreev and M. I. Trukhanova,Phys.Plasmas 22,022128 (2015).

[14] P. A. Andreev and L. S. Kuz'menkov, EPL 113, 17001 (2016).

[15] J. Zamanian, M. Marklund, and G. Brodin, Phys. Rev. E 88, ۰٦۳۱۰۵ (2013).

*Corresponding e-mail: amirhosein.rezvani@iau.ac.ir

تریگر لیزری وابسته به کاتد در سامانه‌های شکاف جرقه‌ای نانوثانیه‌ای: یک بررسی آزمایشگاهی

مقدسی نژاد،السا[۱] ؛ قلمبردزفولی، عبدالمحمد[۱و۲] ؛مرشدیان ، نادر[۳]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهیدچمران اهواز، اهواز،ایران

[۲] مرکزتحقیقات لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

[۳] پژوهشگاه پلاسما و همجوشی هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فناوری هسته‌ای شتابگرها ، تهران ، ایران

چکیده

در این مقاله، تأثیر جنس کاتد (فولاد ضدزنگ(استیل)، مس، آلومینیوم) بر عملکرد سوئیچ شکاف جرقه‌ای با زمان خیز نانوثانیه‌ای، در دو حالت خودتریگر و تریگر لیزری بررسی شده است. آزمایش‌ها با فاصله شکاف ۳ تا ۷ میلی‌متر و لیزر اگزایمر ArF (λ = 193 nm) انرژی ۷۷ mJ انجام شد. در حالت خودتریگر، فولاد ضدزنگ(استیل) سریع‌ترین و آلومینیوم کندترین زمان خیز جریان را نشان داد. با اعمال تریگر لیزری، پدیده «وارونگی سلسله‌مراتب» مشاهده شد: آلومینیوم با زمان خیز جریان ۴ تا ۶ نانوثانیه (بهبود حدود ۳۰ برابری نسبت به حالت خودتریگر) به سریع‌ترین کاتد تبدیل شد. در این میان، مس پایدارترین کاهش ولتاژ شکست (حدود ۳۰ درصد) را از خود نشان داد. این وارونگی به مکانیسم‌های فوتوامیسیون کمکی توسط فوتون‌های ۶٫۴ eV لیزر DUV در حضور لایه اکسیدی Al_2O_3 نسبت داده می‌شود که با تسهیل گسیل الکترون از سطح آلومینیوم، رتبه‌بندی عملکردی کاتدها را به‌طور کامل معکوس می‌کند.

واژه های کلیدی: *شکاف جرقه‌ای، جنس کاتد، تریگر لیزری، فوتوامیسیون، وارونگی سلسله‌مراتب، سوئیچینگ نانوثانیه‌ا ی.*

Cathode-Dependent Laser Triggering in Nanosecond Spark Gap Systems: An Experimental Study

Elsa Moghadasinezhad [1]; Ghalambor Dezfuli, Abdol-Mohammad[1,2] ;Nader Morshedian[3]

[1] *Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran*
[2] *Center for Research on Laser and Plasma, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran*
[3] *Plasma and Nuclear Fusion Research Institute, Institute of Nuclear Science and Technology, Tehran, Iran*

Abstract

In this paper, the effect of cathode material (stainless steel, copper, and aluminum) on the performance of a nanosecond spark-gap switch is investigated under two triggering modes: self-triggered and laser-triggered. Experiments were conducted with gap distances ranging from 3 to 7 mm using an ArF excimer laser (λ = 193 nm, pulse energy = 77 mJ). In the self-triggered mode, stainless steel exhibited the fastest current rise time, whereas aluminum showed the slowest. Upon laser triggering, a "performance hierarchy inversion" was observed: aluminum became the fastest cathode, achieving a current rise time of 4–6 ns (approximately a 30-fold improvement over the self-triggered case). Meanwhile, copper demonstrated the most stable reduction in breakdown voltage (~30%). This inversion is attributed to assisted photoemission driven by 6.4-eV deep-ultraviolet (DUV) photons in the presence of the native Al_2O_3 surface oxide layer. This mechanism facilitates electron emission from the aluminum surface, thereby completely reversing the operational ranking of the cathode materials.

***Keywords**: Spark gap switch, Cathode material, Laser triggering, Photoemission, Hierarchy inversion, Nanosecond switching.*
PACS No.

مقدمه

شکاف‌های جرقه‌ای نانوثانیه‌ای به‌عنوان سوئیچ‌های توان بالا، کاربردهای گسترده‌ای در سیستم‌های قدرت پالسی، رادارهای پالس فشرده، و تحقیقات فیزیک پلاسما دارند [۱, ۲]. عملکرد این سوئیچ‌ها به‌شدت به جنس کاتد وابسته است؛ پارامترهایی نظیر تابع کار، ضریب گسیل ثانویه الکترون و وجود لایه‌های اکسیدی سطحی، رفتار شکست الکتریکی و

زمان خیز جریان را تعیین می‌کنند [۳, ۴]. در حالت خودتریگر (self-triggered)، شکست بر اساس مکانیسم‌های بهمنی در گاز (توصیف‌شده توسط قانون پاشن) و گسیل الکترون از سطح کاتد رخ می‌دهد [۵]. در مقابل، تریگر لیزری با تزریق مستقیم الکترون از طریق فوتوگسیل، کنترل زمانی دقیق (در حد پیکوثانیه) و امکان سوئیچینگ در ولتاژهای پایین‌تر از ولتاژ شکست خودبه‌خودی را فراهم می‌کند [۵–۷]. انتخاب جنس کاتد تأثیر پیچیده‌ای بر عملکرد سوئیچ دارد. فولاد ضدزنگ(استیل) به‌دلیل تابع کار متوسط و سطح نسبتاً پاک، در حالت خودتریگر عملکرد مطلوبی نشان می‌دهد. مس با هدایت حرارتی بالا، پایداری خوبی در تکرار پالس‌ها دارد. آلومینیوم با وجود لایه طبیعی Al_2O_3 با ضخامت ۵–۲ نانومتر و سد انرژی ۹–۷ eV در حالت خودتریگر عملکرد ضعیفی از خود نشان می‌دهد [۸–۱۰].

هدف اصلی این پژوهش، بررسی تأثیر تریگر لیزری بر رتبه‌بندی عملکردی کاتدهای مختلف است. فرضیه اصلی این است که فوتون‌های پرانرژی لیزر DUV با انرژی ۶٫۴ eV برای لیزر ArF با طول موج ۱۹۳nm می‌توانند از طریق مکانیسم‌های فوتوامیسیون کمکی، بر سد اکسیدی Al_2O_3 غلبه کرده و رفتار آلومینیوم را به‌طور چشمگیری بهبود بخشند. این مقاله برای نخستین بار پدیده «وارونگی سلسله‌مراتب عملکردی» کاتدها را تحت تریگر لیزری گزارش می‌کند.

تنظیمات آزمایشگاهی

الکترودهای کروی از سه ماده (فولاد ضدزنگ(استیل) L۳۱۶، مس OFHC، آلومینیوم ۶۰۶۱–T6) با فواصل ۳، ۵ و ۷ میلی‌متر در هوای اتمسفری مورد آزمایش قرار گرفتند. دو حالت کاری بررسی شد: (الف) خودتریگر، با اعمال ولتاژ DC تا شکست خودبه‌خودی؛ و (ب) تریگر لیزری، با پیش‌بایاس ٪۸۰–۶۰ ولتاژ شکست و پالس لیزر ArF (λ = 193 nm، مدت ۱۵ ns، شدت پیک $I \approx 1.43\times10^{10}$ W/cm²) روی سطح کاتد کانونی شد. ولتاژ و جریان به‌صورت همزمان ثبت شدند. زمان خیز جریان به‌صورت $t_r = t_{90\%} - t_{10\%}$ و توان لحظه‌ای به‌صورت $P(t) = V(t) \times I(t)$ محاسبه شد.

نتایج

نتایج آزمایشگاهی در سه بخش مجزا ارائه می‌شوند: ولتاژ شکست، زمان خیز جریان و توان لحظه‌ای. در هر بخش، عملکرد سه کاتد (فولاد ضدزنگ(استیل)، مس و آلومینیوم) در دو حالت خودتریگر و تریگر لیزری، برای فواصل شکاف ۳، ۵ و ۷ میلی‌متر مقایسه شده است. این ساختار امکان تحلیل جداگانهٔ هر پارامتر و در عین حال مشاهده رفتار کلی سیستم را فراهم می‌آورد.

ولتاژ شکست

ولتاژ شکست یکی از مهم‌ترین پارامترهای عملکردی سوئیچ‌های جرقه‌ای است که مستقیماً بر کارایی و ایمنی سیستم تأثیر می‌گذارد. جدول ۱ مقادیر ولتاژ شکست را برای سه کاتد مورد بررسی، در دو حالت خودتریگر و تریگر لیزری، و برای سه فاصله شکاف ۳ تا ۷ میلی‌متر نشان می‌دهد.

جدول ۱. ولتاژ شکست (kV) در دو حالت برای سه ماده و سه فاصله شکاف

جنس کاتد	فاصله شکاف (mm)	ولتاژ شکست خودتحریک (kV)	ولتاژ شکست ناشی از تحریک لیزری(kV)	کاهش ولتاژ با تحریک لیزری
فولاد ضدزنگ(استیل)	۳	۱۲	۷	٪۴۲
	٤	۱۲,٥	۸,٥	٪۳۲
	٥	۱۳,٤	۱۰	٪۲٥
	٦	۱٤,۲	۱۲	٪۱٥
	۷	۱٤,٥	۱۳	٪۱۰
آلومینیوم	۳	۷	٦	٪۱٤
	٤	۸,٥	۸	٪٦
	٥	۱۳	۱۱	٪۱٥
	٦	۱٥,۲	۱۳	٪۱٤
	۷	۱٦	۱٥	٪٥
مس	۳	۹,۲	٥	٪٤٥

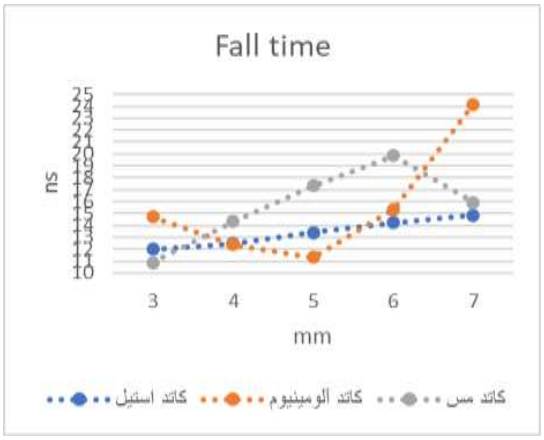
	٤	١١,٦	٧	٤٠٪
	٥	١٣	٨,٢	٣٧٪
	٦	١٥	١٠,٥	٣٠٪
	٧	١٧	١٢	٢٩٪

ولتاژ شکست در هر سه ماده با افزایش فاصله شکاف به‌صورت یکنواخت افزایش یافت. تریگر لیزری در تمام موارد موجب کاهش ولتاژ شکست شد، اما میزان این کاهش به جنس کاتد و فاصله شکاف وابسته بود. مس پایدارترین و بیشترین کاهش را نشان داد (از ۴۵٪ در فاصله ۳ میلیمتر تا ۲۹٪ در ۷ میلیمتر)، که به تابع کار پایین و عدم وجود لایه اکسیدی پایدار نسبت داده می‌شود. فولاد ضدزنگ(استیل) در فاصله‌های کوچک کاهش چشمگیری (۴۲٪ در ۳ میلیمتر) داشت، اما با افزایش فاصله به‌سرعت افت کرد (۱۰٪ در ۷ میلیمتر)، که نشان‌دهنده حساسیت بالای عملکرد آن به فاصله شکاف است. آلومینیوم کمترین کاهش (۵–۱۵٪) را با روندی نامنظم از خود نشان داد. این رفتار به‌طور مستقیم به حضور لایه اکسیدی Al_2O_3 با ضخامت ۵–۲ میلیمتر و سد انرژی ۹–۷ eV نسبت داده می‌شود؛ این لایه مانع از گسیل کارآمد الکترون تحت تابش لیزر می‌گردد.

زمان خیز و افت جریان–وارونگی سلسله‌مراتب

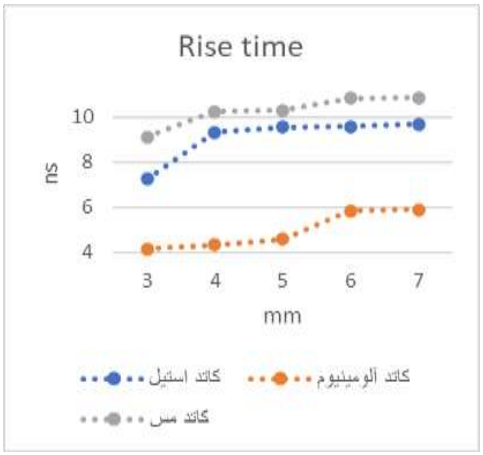
شکل ۱ زمان خیز و افت جریان را برای سه ماده کاتد در حالت خودتریگر، به ازای فاصله‌های گپ مختلف (۳ تا ۷ میلی‌متر) نشان

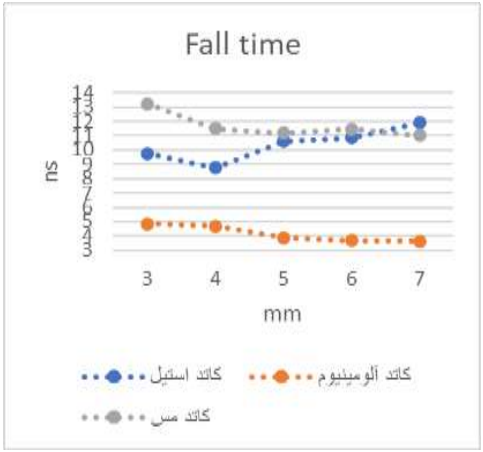




شکل ۱.: زمان‌های خیز و افت جریان در حالت خودتریگر برای کاتدهای فولاد ضدزنگ(استیل)، مس و آلومینیوم در فاصله‌های گپ مختلف.

در نمودار زمان خیز (شکل ۱، چپ)، فولاد ضدزنگ(استیل) با بازه ۸–۹ نانوثانیه سریع‌ترین زمان خیز را در تمامی فاصله‌های گپ از خود نشان داد. مس با بازه ۱۲–۱۰ نانوثانیه در رتبه دوم قرار گرفت، در حالی که آلومینیوم با ۱۳–۱۱ نانوثانیه کندترین عملکرد را داشت. در شکل ۲، زمان‌های صعود و نزول پالس تخلیه برای سه الکترود آلومینیوم، مس و فولاد ضدزنگ(استیل) در حالت تحریک با لیزر DUVمقایسه شده است.





شکل ۲: زمان‌های خیز و افت جریان در حالت تریگر لیزری برای کاتدهای فولاد ضدزنگ(استیل)، مس و آلومینیوم در فاصله‌های گپ مختلف.

در حالت تحریک لیزری، الکترود آلومینیوم بهترین عملکرد را نشان می‌دهد؛ زمان صعود آن در محدوده‌ی ۴ تا ۶ نانوثانیه و زمان نزول آن حدود ۴ تا ۵ نانوثانیه اندازه‌گیری شد. الکترود مسی زمان صعودی مشابه (۴–۵ns) اما زمان نزول بالاتری (۹–۱۱ns) دارد. الکترود فولادی کندترین پاسخ را با زمان صعود (۸–۱۱ns) و زمان نزول مشابه نشان داد. این نتیجه وارونگی کامل سلسله‌مراتب نسبت به حالت خودتریگر است، که در آن آلومینیوم کندترین الکترود بود. این پدیده به فرایند فوتوامیسیون ناشی از فوتون‌های DUV با انرژی ۶٫۴ eV نسبت داده می‌شود که از سد انرژی لایهٔ اکسیدی Al_2O_3 عبور کرده و تراکم الکترون‌های اولیه را به‌طور چشمگیری افزایش می‌دهد.

نتیجه گیری بحث

در این پژوهش، عملکرد سه جنس کاتد (فولاد ضدزنگ(استیل)، مس و آلومینیوم) در یک سوئیچ شکاف جرقه‌ای نانوثانیه‌ای در دو حالت خودتریگر و تریگر لیزری ArF (λ=193 nm) مورد مقایسه قرار گرفت. در حالت خودتریگر، فولاد ضدزنگ(استیل) سریع‌ترین و آلومینیوم به دلیل وجود لایه اکسیدی Al_2O_3 با گاف نواری ۹eV کندترین زمان خیز جریان را نشان داد.

اعمال تریگر لیزری DUV این سلسله‌مراتب را به‌طور کامل معکوس کرد و آلومینیوم با بهبود حدود ۳۰ برابری به زمان خیز جریان ۴ تا ۶ نانوثانیه دست یافت. از دیدگاه فیزیکی، فوتون‌های لیزر با انرژی ۶٫۴ eV به‌تنهایی قادر به عبور از سد ۹eV اکسید آلومینیوم نیستند؛ با این حال، مکانیسم جذب دوفوتونی و برانگیختگی از طریق نقص‌های سطحی لایه Al_2O_3، چگالی الکترون‌های اولیه را به‌شدت افزایش داده و عملاً سد اکسیدی را دور می‌زند. این فرآیند در آلومینیوم به دلیل چگالی بالای نقص‌های سطحی بسیار مؤثرتر از فولاد و مس است. در مقابل، مس با لایه اکسیدی نازک‌تر و نقص سطحی کمتر، بهره‌وری فوتوگسیل پایین‌تری داشته اما پایدارترین کاهش ولتاژ شکست (~۳۰٪) را در هر دو حالت نشان داد.

این نتایج نشان می‌دهد که انتخاب ماده کاتد باید کاملاً مشروط به نوع تریگر باشد. برای کاربردهای نیازمند سوئیچینگ فوق‌سریع با تریگر لیزری DUV ، کاتد آلومینیومی گزینه‌ای بهینه است و این یافته‌ها ضرورت بازنگری در معیارهای طراحی سوئیچ‌های شکاف جرقه‌ای را آشکار می‌سازد.

مرجع‌ها

[1] N. A. Sabiha, M. Lehtonen, N. G. Tarhuni, and P. Hyvönen; "Probabilistic model for MV spark-gap characteristics with lightning induced overvoltage superimposed on AC voltage"; IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation **16**, No. 5 (2009) 1404-1412.
[2] H. Bai, Z. Zhao, and C. Mi; "Framework and Research Methodology of Short-Timescale Pulsed Power Phenomena in High-Voltage and High-Power Converters"; IEEE Trans. Ind. Electron. **56**, No. 3 (2008) 805-816.
[3] C. Liu, Z. Yang, G. Ding, Z. Zhou, Q. Liu, Y. Huang, and Y. Zheng; "Design, Simulation, and Characterization of a Low-Cost In-Plane Spark Gap Microswitch with Dual-Trigger Electrode for Pulsed Power Applications"; IEEE Trans. Ind. Electron. **60**, No. 8 (2012) 3240-3247.
[4] C. Xu, P. Zhu, Q. Zhang, Z. Yang, K. Wang, and R. Shen; "A Shock-Induced Pulsed Power Switch Utilizing Electro-Explosion of Exploding Bridge Wire"; IEEE Trans. Power Electron. **35**, No. 10 (2020) 10770-10777.
[5] C. Xu, P. Zhu, W. Zhang, R. Shen, and Y. Ye; "A Plasma Switch Induced by Electroexplosion of PN Junction for Mini Exploding Foil Initiator"; IEEE Trans. Plasma Sci. **47**, No. 5 (2019) 2710-2716.
[6] J. Zhang, X. Ge, J. Zhang, J. He, Y. Fan, Z. Li, Z. Jin, L. Gao, J. Ling, and Q. Zi; "Research Progresses on Cherenkov and Transit-Time High-Power Microwave Sources at NUDT"; Matter Radiat. Extremes **1**, No. 3 (2016) 163-178.
[8] K. Chu and G. Scott; "A Comparison of High-Voltage Switches"; Technical Report (1999).
[9] X. Wang, H. Luo, and Y. Hu; "Numerical Simulation of the Gas Discharge in a Gas Peaking Switch"; IEEE Trans. Plasma Sci. **35**, No. 3 (2007) 702-708.
[10] A. Larsson, D. Yap, J. Au, and T. E. Carlsson; "Laser Triggering of Spark Gap Switches"; IEEE Trans. Plasma Sci. **42**, No. 10 (2014) 2943-2947.

بررسی اثر پلاسمای گلاید آرک بر کنترل فساد و افزایش ماندگاری فیله قزل‌آلای رنگین‌کمان

سیدالنگی، مائده السادات[۱] ؛ ساری، امیرحسین[۱] ؛ نوروزی، بهاره[۲]
[۱] گروه فیزیک، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران
[۲] گروه زیست شناسی، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایرا ن

چکیده
این پژوهش با هدف بررسی اثر پلاسمای جت آرک لغزان بر کیفیت و ماندگاری فیله قزل‌آلای رنگین‌کمان طی نگهداری سرد انجام شد. نمونه‌ها در سه گروه شاهد، تیمار شده با پلاسما به مدت ۲ دقیقه(P2)وتیمار شده با پلاسما به مدت ۵ دقیقه (P5) قرار گرفتند و به‌مدت ۱۸ روز در دمای ۴ درجه سانتی‌گراد نگهداری شدند. نتایج نشان داد که تیمار پلاسما، به‌ویژه P5، موجب کاهش رشد میکروبی، کند شدن اکسیداسیون لیپیدی و کنترل شاخص‌های فساد شد. بنابراین، پلاسمای جت آرک لغزان می‌تواند به‌عنوان روشی غیرحرارتی برای حفظ کیفیت و افزایش ماندگاری فیله قزل‌آلا پیشنهاد شود.
واژه های کلیدی: *پلاسمای گلاید آرک، ماهی قزل آلای رنگین کمان، افزایش زمان ماندگاری*

Investigation of the Effect of Gliding Arc Plasma on Spoilage Control and Shelf-Life Extension of Rainbow Trout Fillets

Seyedalangi, Maedeh Sadat[1]; Sari, Amir Hosein[1]; Nowrozi, Bahare[2]

[1] *Department of physics, SR.C., Islamic Azad University, Tehran, Iran*
[2] *Department of Biology, SR.C., Islamic Azad University, Tehran, Iran*

Abstract
This study investigated the effect of gliding arc plasma jet on the quality and shelf life of rainbow trout fillets during cold storage. Samples were divided into three groups: control, P2, and P5, and stored at 4°C for 18 days. The results showed that plasma treatment, especially P5, reduced microbial growth, delayed lipid oxidation, and controlled spoilage indices. Therefore, gliding arc plasma jet can be proposed as a non-thermal method for maintaining the quality and extending the shelf life of rainbow trout fillets.
***Keywords**: Gliding arc plasma, rainbow trout, shelf-life extension*

مقدمه

محصولات شیلاتی به دلیل دارا بودن پروتئین‌های باکیفیت، اسیدهای چرب غیراشباع و ترکیبات زیست‌فعال، از ارزش تغذیه‌ای بالایی برخوردارند، اما همین ویژگی‌ها آن‌ها را در برابر فساد میکروبی و اکسیداتیو بسیار حساس می‌سازد(۱). فیله ماهی قزل‌آلای رنگین‌کمان نیز پس از فرآوری و طی نگهداری سرد، به‌سرعت دچار افت کیفیت، تغییرات حسی و کاهش ارزش تغذیه‌ای می‌شود. از این‌رو، افزایش ماندگاری این محصول بدون آسیب به ویژگی‌های طبیعی آن، یکی از چالش‌های مهم صنایع غذایی و شیلاتی است(۲).

در سال‌های اخیر، استفاده از فناوری‌های غیرحرارتی به‌عنوان جایگزینی برای روش‌های متداول نگهداری مورد توجه قرار گرفته است. پلاسما گلاید ارک به دلیل تولید گونه‌های فعال و توانایی کاهش بار میکروبی بدون افزایش قابل توجه دما، به‌عنوان روشی امیدبخش در نگهداری مواد غذایی شناخته می‌شود(۳).

با توجه به نقش همزمان عوامل میکروبی و اکسیداتیو در فساد ماهی، پلاسما گلاید ارک می‌تواند راهبردی عالی برای کنترل فساد و افزایش ماندگاری باشد. بنابراین، در پژوهش حاضر اثر روش پلاسما گلاید ارک بر حفظ کیفیت و افزایش ماندگاری فیله قزل‌آلای رنگین‌کمان طی نگهداری در دمای یخچال بررسی شد.

مواد و روش ها

در این پژوهش، فیله‌های ماهی قزل‌آلای رنگین‌کمان در چند گروه آزمایشی شامل شاهد (C)، پلاسما به مدت ۲ دقیقه (P2)، پلاسما به مدت ۵ دقیقه (P5)، مورد بررسی قرار گرفتند و در نهایت در دمای ۴ درجه سلسیوس تا مدت ۱۸

روز نگهداری شدند. نمونه‌برداری در روزهای ۰، ۳، ۶، ۹، ۱۲، ۱۵ و ۱۸ انجام شد.

آزمون های میکروبی

به‌منظور بررسی وضعیت میکروبی نمونه‌ها و ارزیابی اثر تیمارها بر کنترل رشد میکروارگانیسم‌ها، آزمون‌های میکروبی شامل شمارش کل میکروارگانیسم‌های زنده (TVC)، شمارش باکتری‌های سرمادوست(PTC) ، بررسی حضور سالمونلا و شمارش اشرشیا کلی (E.coli)انجام شد. این شاخص‌ها برای تعیین روند فساد میکروبی و مقایسه کارایی تیمارهای مختلف در طول دوره نگهداری مورد استفاده قرار گرفتند(۴).

ویژگی های فیزیکوشیمیایی

برای ارزیابی تغییرات شیمیایی مرتبط با فساد و افت کیفیت، شاخص‌های اسیدیته، اکسیداسیون چربی بر اساس آزمون تیوباربیوتوریک اسید (TBARS) و مقدار تری‌متیل‌آمین (TMA) اندازه‌گیری شدند. اسیدیته به‌عنوان شاخصی از تغییرات شیمیایی و متابولیکی نمونه‌ها بررسی شد. آزمون TBARS برای سنجش میزان اکسیداسیون ثانویه چربی‌ها به‌کار رفت و مقدار تری‌متیل‌آمین نیز به‌عنوان یکی از شاخص‌های مهم فساد در محصولات شیلاتی مورد ارزیابی قرار گرفت(۵).

ارزیابی آنتی اکسیدانی

فعالیت آنتی‌اکسیدانی نمونه‌ها با استفاده از آزمون‌های FRAP و ABTSتعیین شد. آزمون FRAP برای ارزیابی توان احیاءکنندگی نمونه‌ها و آزمون ABTS برای سنجش ظرفیت مهار رادیکال‌های آزاد به‌کار گرفته شد. این آزمون‌ها امکان بررسی نقش فیکوسیانین و تیمار پلاسما را در حفظ ظرفیت آنتی‌اکسیدانی فیله‌ها فراهم کردند(۵).

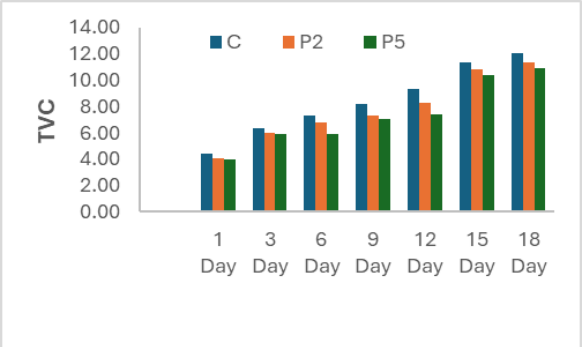
تجزیه و تحلیل اماری

تمامی آزمایش‌ها در سه تکرار مستقل انجام شد و نتایج به‌صورت میانگین ± خطای استاندارد میانگین گزارش گردید. برای مقایسه میانگین‌ها، پس از انجام تحلیل واریانس، از آزمون توکی در سطح معنی‌داری $p<0.05$ استفاده شد(۵).

نتایج و بحث

TVC

بر اساس شکل ۱، در روز اول نگهداری، مقدار TVC در گروه شاهد ۴/۳۹±۰/۰۰۷۸ log CFU/g بود و با گذشت زمان افزایش یافت؛ به‌طوری‌که در روز ۱۸ به ۱۲/۰۸±۰/۰۱۲۸ log CFU/g رسید. این روند بیانگر رشد سریع میکروارگانیسم‌ها و کاهش کیفیت میکروبی نمونه‌های فاقد تیمار طی نگهداری سرد است. در تیمار P2 نیز TVC از ۴/۰۹±۰/۰۲۶۱ CFU/g log در روز اول به ۱۱/۳۳±۰/۰۱۷۹ CFU/g log در روز ۱۸ افزایش یافت، اما مقدار آن در مقایسه با شاهد کمتر بود.

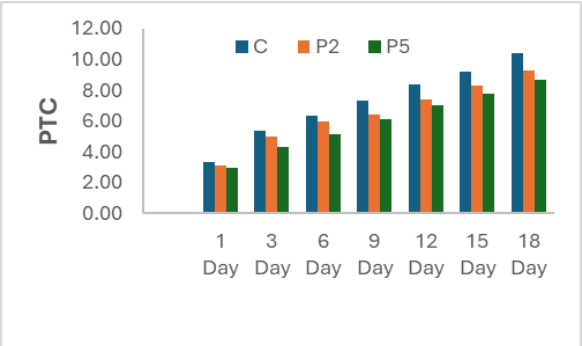


شکل۱: نمودار تغییرات TVC طی ۱۸ روز در فیله های ماهی

در تیمار P5، مقدار TVC در روز ۱۸ به ۱۰/۹۰±۰/۰۳۷۱ log CFU/g رسید که کمتر از شاهد و P2 بود. این کاهش نسبی می‌تواند ناشی از اثر گونه‌های فعال تولیدشده توسط پلاسما باشد که با آسیب به غشای سلولی و اجزای درون‌سلولی میکروارگانیسم‌ها، رشد آن‌ها را محدود می‌کنند. همچنین، اثر بیشتر P5 نسبت به P2 نشان می‌دهد که افزایش زمان تیمار موجب تقویت خاصیت ضدمیکروبی پلاسما شده است.

PTC

براساس شکل ۲، الگوی تغییرات PTC در تمام گروه‌ها طی دوره نگهداری افزایش یافت. در گروه شاهد، مقدار PTC از ۳,۳۲±۰,۰۰۶۳ CFU/g log در روز اول به ۱۰,۳۹±۰,۰۰۴۷ CFU/g log در روز ۱۸ رسید که نشان‌دهنده رشد قابل توجه باکتری‌های سرمادوست در نمونه‌های فاقد تیمار طی نگهداری سرد است. در تیمار P2، مقدار نهایی PTC به ۹,۲۹±۰,۰۱۱۳ CFU/g log و در تیمار P5 به ۸,۷۰±۰,۰۲۲۷ CFU/g log رسید که هر دو کمتر از شاهد بودند.



شکل۲: نمودار تغییرات PTC طی ۱۸ روز در فیله های ماهی

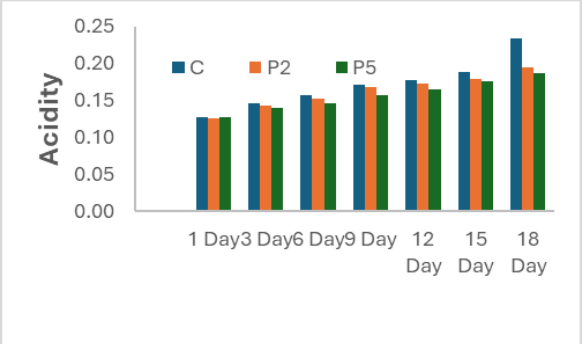
کاهش نسبی PTC در نمونه‌های تیمارشده با پلاسما می‌تواند به اثر گونه‌های فعال تولیدشده در محیط پلاسما نسبت داده شود که با ایجاد آسیب در غشای سلولی و اختلال در عملکردهای حیاتی میکروارگانیسم‌ها، رشد باکتری‌های سرمادوست را محدود می‌کنند(۱). همچنین، مقدار کمتر PTC در تیمار P5 نسبت به P2 نشان می‌دهد که افزایش زمان تیمار موجب افزایش اثر بازدارندگی پلاسما شده است.

سالمونلا و E. coli

الگوی تغییرات PTC در تمام گروه‌ها طی دوره نگهداری افزایش یافت. در گروه شاهد، مقدار PTC از ۰٫۰۰۶۳±۳٫۳۲ log CFU/g در روز اول به ۰٫۰۰۴۷±۱۰٫۳۹ log CFU/g در روز ۱۸ رسید که نشان‌دهنده رشد قابل توجه باکتری‌های سرمادوست در نمونه‌های فاقد تیمار طی نگهداری سرد است. در تیمار P2، مقدار نهایی PTC به ۰٫۰۱۱۳±۹٫۲۹ log CFU/g و در تیمار P5 به ۰٫۰۲۲۷±۸٫۷۰ log CFU/g رسید که هر دو کمتر از شاهد بودند.
کاهش نسبی PTC در

اسیدیته

بر اساس شکل ۳، مقدار acidity در همه گروه‌ها طی نگهداری افزایش یافت. در گروه شاهد، acidity از ۰٫۰۰۱۰±۰٫۱۳ در روز اول به ۰٫۰۰۲۱±۰٫۲۳ در روز ۱۸ رسید که نشان‌دهنده پیشرفت فساد و تجمع ترکیبات اسیدی طی نگهداری سرد است(۶). در تیمارهای P2 و P5 نیز روند افزایشی مشاهده شد، اما شدت آن نسبت به شاهد کمتر بود.

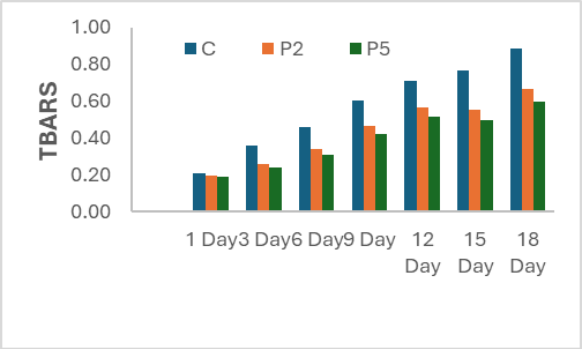


شکل۳: نمودار تغییرات اسیدیته طی ۱۸ روز در فیله های ماهی

کاهش نسبی acidity در تیمارهای پلاسمایی احتمالاً به کاهش رشد میکروبی و کند شدن واکنش‌های فساد مرتبط است. همچنین، تیمار P5 نسبت به P2 اثر بیشتری در کنترل افزایش acidity نشان داد؛ بنابراین، افزایش زمان تیمار پلاسما می‌تواند در حفظ پایداری شیمیایی فیله مؤثرتر باشد.

TBARS

بر اساس شکل۴، شاخص TBARS به‌عنوان نشانگر اکسیداسیون لیپیدی، در تمام گروه‌ها طی نگهداری افزایش یافت. در گروه شاهد، مقدار TBARS از ۰٫۰۰۰۰±۰٫۲۱ در روز ۱ به ۰٫۰۰۵۹±۰٫۸۹ در روز ۱۸ رسید که بیانگر شدت بیشتر اکسیداسیون چربی در نمونه‌های بدون تیمار است(۵).

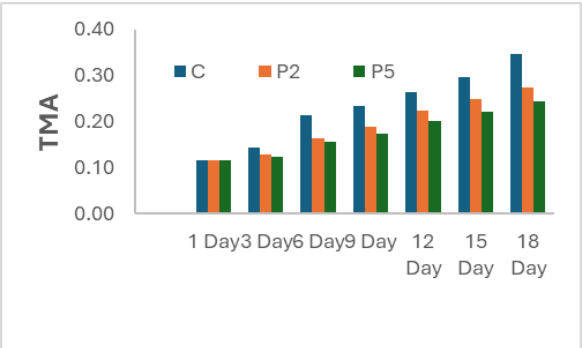


شکل۴: نمودار تغییرات TBARS طی ۱۸ روز در فیله های ماهی

در تیمارهای پلاسمایی، افزایش TBARS کندتر از شاهد بود و تیمار P5 نسبت به P2 اثر بیشتری در کنترل اکسیداسیون لیپیدی نشان داد. این نتیجه احتمالاً به کاهش بار میکروبی و کند شدن واکنش‌های فساد اکسیداتیو تحت اثر پلاسما مربوط است(۱). بنابراین، پلاسما به‌ویژه در زمان ۵ دقیقه توانست روند افزایش TBARS را در فیله قزل‌آلا طی نگهداری سرد کاهش دهد.

TMA

بر طبق شکل ۵، مقدار TMA در همه گروه‌ها طی نگهداری افزایش یافت. در گروه شاهد، TMA از ۰٫۰۰۱۰±۰٫۱۲ در روز ۱ به ۰٫۰۰۲۶±۰٫۳۵ در روز ۱۸ رسید که نشان‌دهنده شدت بیشتر فساد پروتئینی و تولید ترکیبات نیتروژنی فرّار در نمونه‌های بدون تیمار است(۵).

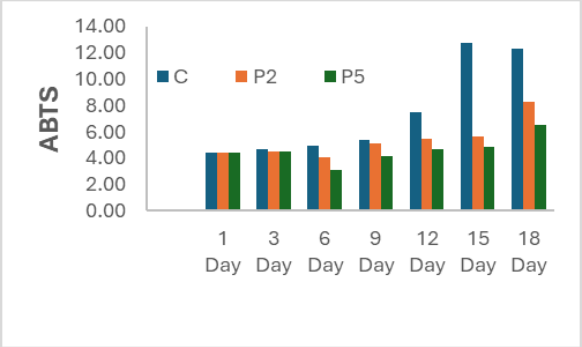


شکل۵: نمودار تغییرات TMA طی ۱۸ روز در فیله های ماهی

در تیمارهای پلاسمایی، افزایش TMA کندتر از شاهد بود و تیمار P5 نسبت به P2 مقدار نهایی کمتری نشان داد. بنابراین، پلاسما بهویژه در زمان ۵ دقیقه توانست با کاهش فعالیت میکروبی و کند کردن تجزیه ترکیبات نیتروژنی، تشکیل TMA را در فیله قزلآلا طی نگهداری سرد محدود کند(۵).

تغییرات ظرفیت مهار رادیکال آزاد ABTS

براساس شکل ۶، نتایج آزمون ABTS نشان داد که مقدار این شاخص در همه گروهها طی نگهداری افزایش یافت. در گروه شاهد، مقدار ABTS از ۴/۴۴±۰/۰۴۴۴ در روز ۱ به ۱۲/۲۹±۰/۱۶۶۱ در روز ۱۸ رسید که بیشترین مقدار نهایی را نشان میدهد.

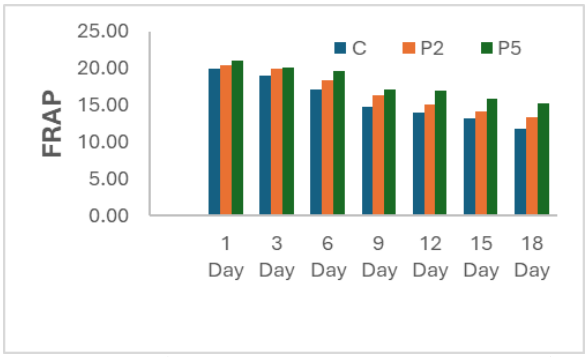


شکل ۶: نمودار تغییرات ABTS طی ۱۸ روز در فیله های ماهی

در تیمارهای پلاسمایی، افزایش ABTS نسبت به شاهد کمتر بود؛ بهطوریکه مقادیر نهایی در P2 و P5 بهترتیب ۸/۳۱±۰/۰۰۰۰ و ۶/۵۶±۰/۰۶۴۷ گزارش شد. بنابراین، تیمار P5 اثر بیشتری در محدود کردن تغییرات ABTS داشت و نشان داد که افزایش زمان تیمار پلاسما میتواند در کنترل تغییرات اکسیداتیو طی نگهداری سرد مؤثرتر باشد.

تغییرات ظرفیت احیای FRAP

شکل۷ مقدار FRAP در همه گروهها طی نگهداری کاهش یافت. در گروه شاهد، FRAP از ۲۰/۰۱±۰/۰۰۰۰ در روز ۱ به ۱۱/۷۵±۰/۲۶۸۶ در روز ۱۸ رسید که نشاندهنده کاهش ظرفیت احیایی نمونه طی نگهداری سرد است.



شکل ۷: نمودار تغییرات FRAP طی ۱۸ روز در فیله های ماهی

در تیمارهای پلاسمایی، کاهش FRAP نسبت به شاهد کمتر بود و تیمار P5 نسبت به P2 ظرفیت احیایی بالاتری را در پایان دوره حفظ کرد. بنابراین، پلاسما بهویژه در زمان ۵ دقیقه توانست افت ظرفیت آنتیاکسیدانی فیله قزلآلا را طی نگهداری سرد کاهش دهد.

نتیجه گیری

نتایج این پژوهش نشان داد که تیمار با پلاسمای گلاید آرک توانست روند فساد میکروبی، شیمیایی و اکسیداتیو فیله قزلآلای رنگینکمان را طی نگهداری سرد کاهش دهد. در تمام شاخصها، تیمارهای پلاسمایی نسبت به شاهد عملکرد بهتری داشتند و تیمار P5 مؤثرتر از P2 بود.
بهطور کلی، پلاسما بهویژه در زمان ۵ دقیقه با کاهش رشد میکروبی، محدود کردن افزایش اسیدیته، TBARS و TMA و حفظ بهتر ظرفیت آنتیاکسیدانی، توانست کیفیت فیله را بهتر حفظ کند. بنابراین، پلاسمای گلاید آرک میتواند بهعنوان یک روش غیرحرارتی مؤثر برای افزایش ماندگاری محصولات شیلاتی پیشنهاد شود.

مرجعها

[۱] Feldhusen, F. (2000). The role of seafood in bacterialfoodborne diseases. *Microbes and infection*, *2*(13), 1651-1660.
[۲] Hosomi, R., Yoshida, M., & Fukunaga, K. (2012). Seafood consumption and components for health. *Global journal of health science*, *4*(3), 72.
[۳] Fridman, A., Nester, S., Kennedy, L. A., Saveliev, A., & Mutaf-Yardimci, O. (1999). Gliding arc gas discharge. *Progress in energy and combustion science*, *25*(2), 211-231.
[۴] Ramachandran, S., Kumar, V., & Bhogilla, S. S. (2025). Parametric Investigation of a Solar PTC-based Transcritical CO 2 Power Plant Integrated with MED-TVC System for Power and Freshwater Generation. In *Proceedings of the 28th National and 6th International ISHMT-ASTFE Heat and Mass Transfer Conference December 9-12, 2025, IIT Jodhpur, Karwar-342030, Jodhpur (Rajasthan), India*. Begel House Inc..
[۵] Seyedalangi, M., Sari, A. H., Nowruzi, B., & Anvar, S. A. A. (2024). The synergistic effect of dielectric barrier discharge plasma and phycocyanin on shelf life of Oncorhynchus mykiss rainbow fillets. *Scientific Reports*, *14*(1), 9174.
[۶] Sadler, G. D., & Murphy, P. A. (2010). pH and titratable acidity. In *Food analysis* (pp. 219-238). Boston, MA: Springer Us.

بررسی پارامترهای پلاسما و شکست الکتریکی در گاف جرقه ی مسی تحت تحریک لیزر اگزایمر

مقدسی نژاد،السا[۱] ؛ قلمبردزفولی، عبدالمحمد[۱و۲]؛مرشدیان ، نادر[۳]؛آتشبارتهرانی،شاهین[۵و۴]

[۱]گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهیدچمران اهواز ، اهواز،ایران
[۲]مرکزتحقیقات لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران
[۳]پژوهشگاه پلاسما و همجوشی هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فناوری هسته‌ای
[۴]پژوهشگاه دانش های بنیادی پژوهشکده ذرات و شتابگرها ، تهران ، ایران.
[۵]گروه فیزیک دانشکده‌ی علوم و فناوری نانو و زیستی ، دانشگاه خلیج فارس ،بوشهر، ایران.

چکیده

در این پژوهش، ویژگی‌های پلاسما ایجادشده توسط لیزراگزایمردر یک گاف جرقه‌ای با استفاده از طیف‌سنجی نشر نوری و اندازه‌گیری‌های الکتریکی بررسی شد. با تحلیل خطوط طیفی مس و استفاده از روش نمودار بولتزمن، دمای الکترونی پلاسما حدود «۲۵۱۶۷ کلوین ۲.۱۷ الکترون ولت» به دست آمد. همچنین پهنای طیفی خط اکسیژن در ناحیه ۴۸۰ نانومتر حدود ۰/۱ نانومتر، و چگالی الکترونی متناظر برابر با($۲/۵\times۱۰^{۱۷}cm^{-۳}$) محاسبه شد. تحلیل قانون پاشن نشان داد که ولتاژ شکست محاسبه‌شده برای فاصله‌ی الکترودی ۳ میلی‌متر در فشار اتمسفری حدود ۸/۷ کیلوولت است که با نتایج تجربی همخوانی دارد. اندازه‌گیری‌های الکتریکی نشان داد که تابش لیزر باعث کاهش زمان تأخیر و پایدار شدن فرایند شکست می‌شود. همچنین رسانندگی پلاسما با دو روش ماکروسکوپی و میکروسکوپی به‌ترتیب ۲۰۵۹/۳۷ و ۲۰۶۵/۲۱زیمنس بر متر محاسبه شد که همخوانی آن‌ها اعتبار نتایج را تأیید می‌کند. . این نتایج نشان می‌دهد که لیزراگزایمرنقش مؤثری در آغاز شکست الکتریکی و کنترل شرایط پلاسما در گاف جرقه دارد و می توان برای تشخیص‌های طیفی و مطالعه تخلیه های القا شده مفید باشد.

واژه های کلیدی: *لیزر اگزایمر، قانون پاشن، دمای الکترونی پلاسما، شکست الکتریکی، گاف جرقه*

Investigation of Plasma Parameters and Electrical Breakdown in a Copper Spark Gap Triggered by an Excimer Laser

Elsa Moghadasinezhad [1]; Abdol-Mohammad Ghalambor Dezfuli [1,2] ;Nader Morshedian[3];Shahin Atashbar Tehrani[5,4]

[1] Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran
[2]Center for Research on Laser and Plasma, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran
[3] Plasma and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, P.O.Box: 14399-51113
[4]School of Particles and Accelerators, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), P.O.Box 19395-5531, Tehran, Iran
[5]Department of Physics, Faculty of Nano and Bio Science and Technology, Persian Gulf University, P.O. Box: 75169, Bushehr, Iran

Abstract

In this study, the characteristics of plasma generated by an excimer laser in a spark gap were investigated using optical emission spectroscopy and electrical diagnostics. By analyzing the copper spectral lines and applying the Boltzmann plot method, the electron temperature of the plasma was determined to be approximately 25,167 K (2.17 eV). The spectral linewidth of the oxygen emission around 480 nm was also measured to be about 0.1 nm, and the corresponding electron density was calculated to be $2.5\times10^{17}cm^{-3}$. Paschen's law analysis showed that the calculated breakdown voltage for a 3 mm electrode gap at atmospheric pressure was about 8.7 kV, which is consistent with the experimental results. Electrical measurements indicated that laser irradiation reduces the delay time and stabilizes the breakdown process. Additionally, the plasma conductivity obtained from macroscopic and microscopic approaches was 2065.21 S/m and 2059.37 S/m, respectively, and the close agreement between them confirms the reliability of the results. Overall, these findings demonstrate that the excimer laser plays an effective role in initiating the electrical breakdown and controlling plasma conditions in the spark gap, and can be useful for spectroscopic diagnostics and the study of laser-induced discharges.

Keywords: *excimer laser, Paschen's law, Temperature of the plasma, Electrical breakdown, Spark gap*
PACS No

مقدمه

پلاسما به عنوان چهارمین حالت ماده، نقش مهمی در بسیاری از سامانه‌های الکتریکی، صنعتی و پژوهشی ایفا می‌کند. در میان انواع روش‌های تولید پلاسما، استفاده از لیزر به دلیل مزایایی مانند کنترل‌پذیری بالا، ایجاد پلاسمای موضعی، و توانایی تحریک مواد مختلف بدون تماس فیزیکی، مورد توجه ویژه قرار گرفته است. یکی از روش‌های پرکاربرد در این زمینه، شکست القایی لیزری است که در آن یک پالس لیزری پرانرژی با برخورد به سطح یا محیط گازی، منجر به یونش، تشکیل جرقه و ایجاد پلاسما می‌شود. لیزرهای اگزایمربه دلیل طول‌موج کوتاه و انرژی بالای پالس، گزینه‌ای بسیار مناسب برای ایجاد پلاسماهای متراکم و قابل‌تحلیل در کاربردهای طیف‌سنجی و تشخیص مواد هستند.از سوی دیگر، گاف‌های جرقه لیزری(Switches Spark Laser-Assisted) به عنوان یکی از اجزای کلیدی سامانه‌های ولتاژ بالا، امکان تولید تخلیه‌های سریع، پایدار و قابل کنترل را فراهم می‌کنند. تابش لیزر در این گاف‌ها با کاهش زمان تأخیر و بهبود پایداری فرایند شکست، عملکرد الکتریکی سیستم را ارتقا می‌دهد. مطالعهٔ دقیق پلاسما و پارامترهای آن در چنین ساختارهایی، نقش مهمی در بهبود طراحی و افزایش راندمان این ادوات دارد. در این پژوهش، ویژگی‌های پلاسما ایجادشده در یک شکاف جرقه‌ای تحت تابش لیزراگزایمربا استفاده از طیف‌سنجی نشر نوری و اندازه‌گیری‌های الکتریکی بررسی شده است. تحلیل خطوط طیفی مس با روش نمودار بولتزمن نشان داده است که دمای الکترونی پلاسما حدود ۲۵۱۶۷ کلوین (معادل ۲٫۱۷الکترون‌ولت) است. همچنین، پهنای طیفی خط اکسیژن در ناحیه‌ی ۴۸۰ نانومتر نزدیک به ۰٫۱ نانومتر اندازه‌گیری شده که بیانگر شرایط چگال و پرانرژی پلاسماست. بررسی ولتاژ شکست با بهره‌گیری از قانون پاشن نشان داد که مقدار محاسبه شده برای فاصله‌ی الکترودیلی‌متر، حدود ۸٫۷کیلوولت است و با نتایج تجربی مطابقت دارد. افزون بر این، رسانندگی پلاسما با دو رویکرد ماکروسکوپی و میکروسکوپی محاسبه شد و مقادیر ۲۰۵۹/۳۷ و ۲۰۶۵/۲۱ *زیمنس بر متر* برای آن به دست آمد که تطابق خوب این دو مقدار، اعتبار اندازه‌گیری‌ها و مدل‌سازی انجام‌شده را تأیید می‌کند. این مطالعات نشان می‌دهد که لیزراگزایمرقادر است به‌طور مؤثر جرقه را آغاز و کنترل کند و شرایطی مناسب برای تحلیل طیفی پلاسما فراهم آورد. یافته‌های این پژوهش می‌تواند در بهبود عملکرد گاف‌های جرقه‌ای لیزری، تشخیص مواد فلزی، و توسعهٔ سامانه‌های برافرازندهٔ ولتاژ بالا مورد استفاده قرار گیرد. کارهایی که در زمینه مس با لیزر ND:YAG انجام شده است را در منابع [۲-۱] میتوان یافت. نوآوری پژوهش: اگرچه پژوهش‌های متعددی به کاربرد لیزر در گاف‌های جرقه پرداخته‌اند، اما غالب آن‌ها به بررسی تک‌بعدی رفتار الکتریکی یا مشاهدات طیفی کیفی محدود شده‌اند و کمتر مطالعه‌ای به ارتباط کمّی میان پارامترهای بنیادین پلاسما و عملکرد الکتریکی گاف جرقه در حضور لیزر اگزایمر پرداخته است. این شکاف پژوهشی، انگیزه‌ی اصلی انجام کار حاضر بوده است. ارزش افزوده‌ی این پژوهش نسبت به کارهای مشابه، در **ترکیب همزمانِ چندین روش تشخیصیِ استاندارد** در یک ساختار خاص (گاف جرقه با تحریک لیزر اگزایمر) است. در سطح روش‌شناختی، اندازه‌گیری همزمان چهار پارامتر کلیدی پلاسما شامل دمای الکترونی (با نمودار بولتزمن)، رسانندگی (با دو رویکرد مستقل ماکروسکوپی و میکروسکوپی) و چگالی الکترونی (از پهنای طیفی خط اکسیژن) در این ساختار انجام شده است. در سطح محتوایی، اثر کمیِ حضور لیزر بر کاهش ولتاژ شکست در بازه‌ی گسترده‌ای از فاصله‌های گاف (۳ تا ۷ میلی‌متر) به‌صورت سیستماتیک استخراج و به‌صورت یک منحنی مشخصه ارائه شده است. فراتر از جنبه‌های بنیادین، داده‌های تجربیِ نظام‌مندِ این پژوهش می‌توانند به‌عنوان مرجعی عملیاتی برای طراحی و بهینه‌سازی سوئیچ‌های پرقدرتِ لیزری در کاربردهایی نظیر سیستم‌های انتقال انرژی پالسی، منابع تغذیه‌ی صنعتی و تجهیزات پزشکی مبتنی بر پالس‌های ولتاژ بالا مورد استفاده قرار گیرند .بدین‌ترتیب، این پژوهش ضمن غنابخشی به دانش بنیادین پلاسمای ناشی از شکست لیزر، پلی میان یافته‌های آزمایشگاهی و نیازهای عملی مهندسی برق‌قدرت ایجاد می‌کند.

چیدمان آزمایشگاهی

در این پژوهش، پلاسما در یک شکاف جرقه‌ای (گاف جرقه) شامل دو الکترود مسی (آند و کاتد) در فشار اتمسفری ایجاد شده است. مکانیسم ایجاد پلاسما به این صورت است که ابتدا یک ولتاژ مستقیم (DC) با مقدار کمتر از آستانه‌ی شکست خودبه‌خودی، به دو سر الکترودها اعمال می‌شود؛ در این لحظه، هنوز شکستی رخ نمی‌دهد. سپس یک پالس لیزر اگزایمر با طول‌موج ۱۹۳ نانومتر، انرژی ۷۷ میلی‌ژول و پهنای زمانی ۱۵ نانوثانیه، از طریق یک روزنه و عدسی همگرا بر روی سطح کاتد مسی متمرکز می‌شود. برخورد فوتون‌های پرانرژی لیزر (با انرژی حدود ۶.۴ الکترون‌ولت) با سطح کاتد، که از تابع‌کار مس (حدود ۴.۶۵ الکترون‌ولت) فراتر است، باعث گسیل فوتوالکترون از سطح مس می‌شود. این الکترون‌های اولیه با برخورد به مولکول‌های هوا در ناحیه‌ی گاف، فرایند بهمن یونش را آغاز کرده و در کسری از نانوثانیه، مسیری رسانا بین دو الکترود تشکیل می‌شود. این پدیده منجر به شکست الکتریکی(جرقه)و متعاقباً ایجاد پلاسمایی متشکل از بخار مس و هوای یونیزه‌شده می‌گردد. بنابراین، لیزر در این ساختار صرفاً نقش محرک (Trigger) و تولیدکننده‌ی الکترون‌های اولیه را ایفا می‌کند و منبع اصلی تأمین انرژی پلاسما، همان تخلیه‌ی الکتریکی است. مشخصه‌های الکتریکی گذرای پلاسما با استفاده از یک اسیلوسکوپ پهن‌باند انجام شده است. لازم به ذکر است که مقدار پهنای خط اکسیژن (۰.۱ نانومتر) و چگالی الکترونی متناظر با آن، بر اساس داده‌های مرجع [۳] و با در نظر گرفتن تصحیح پهنای ابزاری گزارش‌شده در آن مرجع، محاسبه شده است

نتایج تجربی

در این پژوهش به بررسی و مقایسه زمان خیز و زمان افت ولتاژ و جریان گاف‌های جرقه ساخته‌شده از جن مس و شکاف پر شده از هوا با فاصله‌های میان آند و کاتد متفاوت ۳، ۴، ۵، ۶ و ۷ میلی‌متر، در دو حالت که حالت اول بدون حضور لیزر تنها با اعمال ولتاژ به دو سر کاتد و آند و حالت دوم با اعمال ولتاژ کمتر به الکترود با حضور لیزر پرداخته شده است. جهت انجام این پژوهش از لیزر اگزایمری با مشخصات زیر استفاده شده است: انرژی = ۷۷ میلی ژول ، توان = $۱۰^{۶}$ × ۵/۱۳ طول موج لیزر = ۱۹۳نانومتر، زاویه واگرایی لیزر = ۱/۸میلی رادیان، مدت زمان پالس = ۱۵ نانو ثانیه ، فاصله شکاف جرقه تا روزنه = ۱۰ سانتی متر و فاصله روزنه تا عدسی = ۲۷/۵ سانتی متر، اعمال ولتاژ اولیه به گاف‌های جرقه مورد بررسی به منظور ایجاد پدیده شکست مطابق جدول ۱ صورت گرفت. تمامی مقادیر ولتاژ گزارش‌شده در جدول ۱ با دقت ۰.۲ ± **کیلوولت** قرائت شده‌اند.

مطابق نتایج جدول ۱، مشاهده شد که در هر سه نمونه گاف برق با افزایش فاصله شکاف، ولتاژ اولیه مورد نیاز جهت دستیابی به پدیده شکست میان دو الکترود افزایش یافته است؛ که این نتیجه ممکن است به دلیل افزایش ناحیه گاز بوده که نیازمند میدان الکتریکی قوی‌تری برای دستیابی به پدیده شکست می‌باشد، لیزر استفاده شده در تمامی نمونه‌ها ثابت بوده و در حالت‌های با فاصله شکاف بزرگتر برای تأمین میدان الکتریکی مورد نیاز جرقه کافی نبوده است. در دو گاف جرقه ساخته شد از کاتد مس ولتاژ اولیه در حضور لیزر با کاهش چشمگیری همراه بود که با کاهش فاصله شکاف این روند کاهشی افزایش یافته و به کاهش بیشتر از ۴۰ % ولتاژ اولیه رسیدند. حضور لیزر بیشترین میزان اختلاف ولتاژ اولیه مورد نیاز را در گاف جرقه ساخته‌شده با کاتد مس ایجاد کرد که در بیشترین فاصله شکاف نیز حدود ۳۰ درصد کاهش جریان اولیه مورد نیاز مشاهده شد.

جدول ۱ اعمال ولتاژ اولیه به گاف جرقه جهت ایجاد پدیده شکست

جنس کاتد	فاصله شکاف (mm)	ولتاژ اولیه در حالت بدون لیزر (kV)	ولتاژ اولیه در حالت با لیزر (kV)	کاهش ولتاژ در حضور لیزر
جنس کاتد (مس)	۳	۹/۲	۵	% ۴۶
	۴	۱۱/۶	۷	% ۴۰
	۵	۱۳	۸/۲	% ۳۷
	۶	۱۵	۱۰/۵	% ۳۰
	۷	۱۷	۱۲	% ۲۹

قانون پاشن ولتاژ شکست لازم برای آغاز یک تخلیهٔ الکتریکی میان دو الکترود در یک محیط گازی را توصیف می‌کند. ولتاژ شکست V_b به صورت زیر بیان می‌شود:

$$V_b = \frac{Bpd}{\ln(Apd) - \ln[\ln(1+1/\gamma_{se})]} \qquad (۱)$$

که در آن p فشار گاز، d فاصله‌ی گپ بین الکترودها، A و B ضرایب یونش وابسته به نوع گاز، و γ_{se} ضریب گسیل الکترون ثانویه از ماده کاتد است. این رابطه نقش کلیدی حاصلضرب pd را در تعیین شدت میدان الکتریکی لازم برای یونش نشان می‌دهد. مقدار این ضریب برابر با ۸/۷ کیلوولت برای مس برای عرض ۳ میلیمتر بدست آمده است.

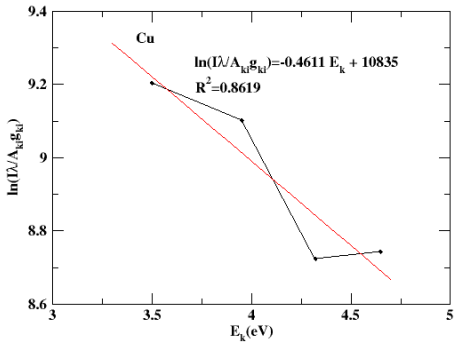
در این آزمایش در جدول۲ در طول موج های متفاوت شدت و انرژی های متفاوت اندازه گیری شده است و میتوان از روی این جدول دما را محاسبه نمود.

جدول ۲ داده‌های بدست آمده از تابش لیزر اگزایمر و بانک داده‌های NIST و مقالات معتبر برای کاتد مس

E (eV)	Ag (10^5 s^{-1})	I	λ (nm)
۴/۶۵	۱۴۸	۳۲۵۰/۴	۲۸۵/۲
۴/۳۲	۱۵۲	۲۹۸۷/۶	۳۲۱/۷
۳/۹۵	۱۶۵	۴۱۵۵/۳	۳۵۶/۱
۳/۵	۱۷۵	۴۲۱۰/۳	۴۱۲/۵

دما با استفاده از معادله بولتزمن بدست می‌آید و به صورت زیر تعریف می‌شود[۴]:

$$T_e = ۱.۴۴ - \frac{E_۲ - E_۱}{\ln\left[\frac{I_۱\lambda_۱A_۲g_۲}{I_۲\lambda_۲A_۱g_۱}\right]} \qquad (۲)$$



شکل۱-بررسی طیف مس براساس داده های جدول ۲و معادله بولتزمن

در این پژوهش از ۴ خط طیفی اصلی مس استفاده شده است، ضریب تعیین (R^2) حاصل از برازش خطی برابر با ۰.۸۶ بوده که نشان‌دهنده‌ی همبستگی قابل‌قبول داده‌هاست. همچنین با توجه به غلظت کم پلاسما در این شرایط، اثر خودجذبی برای خطوط مورد نظر ناچیز فرض شده است. از روی شکل ۱، شیب خط برابر با ۰.۴۶۱۱- بدست آمد که با استفاده از رابطه‌ی (۲)، دمای الکترونی پلاسما برابر با ۲.۱۷ الکترون‌ولت (معادل ۲۵۱۶۷ کلوین) محاسبه می‌شود. با در

نظر گرفتن خطای برازش خطی در نمودار بولتزمن، عدم‌قطعیت این دما حدود ۰.۱۵ ± الکترون‌ولت برآورد می‌شود.

در این مقاله رسانندگی ماکروسکوپی و رسانندگی میکروسکوپی مس هم محاسبه شده است که هر کدام را توصیف خواهیم نمود.

رسانندگی پلاسما از رابطه زیر بدست می آید[۵]:

$$\tilde{\sigma} = \frac{e^2 n_e}{m_e \upsilon_{ei}} \quad (۳)$$

که در رابطه (۳) فرکانس را از رابطه زیر میتوان بدست آورد:

$$\upsilon_{ei}[s^{-1}] = 2.9\times10^{-6}\frac{Z^2 n_e(cm^{-3})\ln\Lambda}{[T_e(eV)]^{3/2}} \quad (۴)$$

در این رابطه، Te دماي الکترونی بوده و Z درجه یونش (مقدار واحد فرض میشود) وهمچنین مقدار $\ln\Lambda$ (Λ نسبت طول دباي به پارامتر برخورد) طبق داده هاي تجربی در متون استاندارد، برابر ۱۵ انتخاب شده است.

و همچنین رسانندگی از فرمول زیر بدست می آید:

$$\sigma = \frac{I^2}{P}\left[\frac{4l}{\pi d^2}\right] \quad (۵)$$

با استفاده از روابط ۵ و ۳ مقدار این رسانش ها برابر با رویکرد ماکروسکوپی و میکروسکوپی محاسبه شد و مقادیر ۲۰۵۹/۳۷و ۲۰۶۵/۲۱ زیمنس بر متر میباشد.

همچنین برای محاسبه چگالی الکترون ها از فرمول زیر استفاده شده

$$n_e = \left(\frac{\lambda_{1/2}}{2w}\times10^{16}\right)$$

است:

$$n_e = \left(\frac{0.1}{2\times0.071}\right)\times10^{16} = 7.042\times10^{15}\,cm^{-3} \quad (۶)$$

در این رابطه مقدار w از مرجع [۵] برای OI برای طول موج ۴۸۰ نانومتر بدست آمده است. با استفاده از رابطه‌ی (۶) و پهنای اندازه‌گیری‌شده‌ی خط اکسیژن (OI) در طول‌موج ۴۸۰ نانومتر($\Delta\lambda$ = ۰/۱ نانومتر) و مقدار w=۰.۰۴ نانومتر از مرجع [۳]، چگالی الکترونی پلاسما به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$N_e = \frac{\Delta\lambda}{\omega} = \frac{0.1}{0.04} = 2.5\times10^{17}\,cm^{-3}$$

این مقدار با محدوده‌ی گزارش‌شده برای چگالی پلاسمای جرقه‌های اتمسفری در منابع معتبر (که معمولاً در بازه‌ی ۱۰^۱۶ تا ۱۰^۱۸ cm^{-3} قرار دارد) همخوانی دارد و نشان‌دهنده‌ی تشکیل پلاسمایی نسبتاً چگال در گاف جرقه است.

نتیجه گیري

نتایج این پژوهش نشان داد که استفاده از لیزر اگزایمردر یک گاف جرقه‌ای می‌تواند نقش مؤثری در ایجاد و کنترل پلاسما ایفا کند. تحلیل طیف‌های نشر نوری و به‌کارگیری روش نمودار بولتزمن برای خطوط طیفی مس، دمای الکترونی پلاسما را در حدود ۲۵۱۶۷ کلوین (۲/۱۷ الکترون‌ولت) نشان داد که بیانگر شکل‌گیری پلاسمای با انرژی مناسب در شرایط آزمایش است. همچنین اندازه‌گیری پهنای طیفی خط اکسیژن در حوالی ۴۸۰ نانومتر و بررسی آن نشان داد که ویژگی‌های طیفی پلاسما با دقت قابل قبولی قابل تحلیل و تفسیر هستند.

از سوی دیگر، بررسی قانون پاشن و مقایسه نتایج محاسباتی با داده‌های تجربی نشان داد که ولتاژ شکست برای فاصله الکترودی ۳ میلی‌متر در فشار اتمسفری حدود ۸/۷ کیلوولت است که تطابق مناسبی با نتایج عملی دارد. همچنین اندازه‌گیری‌های الکتریکی بیانگر آن بود که تابش لیزر موجب کاهش زمان تأخیر در شکست الکتریکی و افزایش پایداری فرایند جرقه می‌شود. علاوه بر این، محاسبه رسانندگی پلاسما به دو روش ماکروسکوپی و میکروسکوپی و نزدیکی مقادیر به‌دست‌آمده از این دو روش، اعتبار نتایج و صحت تحلیل‌ها را تأیید می‌کند. مقدار چگالی الکترونی محاسبه‌شده (۲/۵ ×۱۰^۱۷cm^{-3}) نیز در محدوده‌ی گزارش‌شده برای این نوع پلاسماها قرار دارد

در مجموع، یافته‌های این تحقیق نشان می‌دهد که به‌کارگیری لیزراگزایمرمی‌تواند ابزاری مؤثر برای آغاز شکست الکتریکی، کنترل ویژگی‌های پلاسما و فراهم‌سازی شرایط مناسب برای مطالعات طیف‌سنجی و تشخیص‌های پلاسما باشد.

مرجع‌ها

[۱] Safeen, A., et al. Digest journal of nanomaterials and biostructures **14.1** : 29-35(2019).
[۲] Shayganmanesh, Mahdi, et al. Journal of Instrumentation **19.10** P10010(2024).
[۳] N. Alonizan et al., J. Astrophys. Astron. **36** 661 (2015)
[۴] C.S. Reddy et al., in the proceedings of the 2014 IEEE International Power Modulator and High Voltage Conference (IPMHVC), Santa Fe, NM, U.S.A., June 1–5 (2014) DOI:10.1109/ipmhvc.2014.72873
[۵] S.M. Tabatabaei1, N. Morshedian, et al., Journal of Nuclear Science, Engineering and Technology, Vol. 46 (4), Serial Number 114, 2026

اعضای کمیته اجرایی



دکتر محمدمهدی اتفاقی
دانشگاه قم



مهندس وحید جلیلی
دانشگاه قم



دکتر لیلا رجائی
دانشگاه قم



دکتر عباس عابدینی
دانشگاه قم



دکتر سید هاشم عارف
دانشگاه قم



دکتر مهدی غفاریان
دانشگاه قم



دکتر سید مهدی فاضلی
دانشگاه قم



دکتر رضا معظمی
دانشگاه قم



سید وحید موسوی ا دبیر اجرایی
دانشگاه قم



دکتر محمدرضا مظفری
دانشگاه قم

پیام دبیر اجرایی کنفرانس



سید وحید موسوی
دانشگاه قم

به نام خداوند جان و خرد

خداوندمنان راشاکرم که مارادرپیمودن مسیراین رویدادملی تانقطه پایان یاری نمود. از تمامی همکاران، اعضای کمیته‌های علمی و اجرایی، دانشجویان، انجمن فیزیک ایران و مجموعه دانشگاه قم که با همراهی، مسئولیت‌پذیری و تلاش خود در برگزاری این کنفرانس نقش داشتند، صمیمانه سپاسگزارم. بی‌تردید، آنچه حاصل شده است، ثمره تلاش و همراهی جمعی همه عزیزانی است که در این مسیر در کنار ما بودند.

امیدواریم در فرصت‌های آتی بتوانیم در شهر کریمه اهل بیت، حضرت فاطمه معصومه سلام الله علیها، به صورت حضوری در خدمت پژوهشگران و فرهیختگان گرامی باشیم.

سیدوحید موسوی
دبیراجرایی کنفرانس

