

Quasiparticle interference in unconventional superconducting phases

Akbari,Alireza

Asia Pacific Center for Theoretical Physics (APCTP)

Abstract

Bogoliubov quasiparticle interference (QPI) spectroscopy has emerged as an important tool to understand the pairing symmetry in unconventional and high T_c superconductors. This method is based on scanning tunneling microscopy (STM) and essentially involves investigating how the local density of states (LDOS) is modulated due to the presence of impurities. In recent years, QPI been used to determine the gap symmetry of unconventional superconductors, e.g. CeCoIn5. It has also been developed for non-centrosymmetric (NCS) superconductors with mixed singlet-triplet gap function. Qualitatively new effects in the QPI pattern originate from Rashba spin-orbit coupling and its associated coherence factors. This is discussed for a gap model with accidental node lines due to its composite singlet-triplet nature.

ساخت و کاربردهای زیستی آشکارسازهای پیشرفته ابرسانا در محدوده مادون قرمز و تراهرتز

میرزایی، سید ایمان

آزمایشگاه ادوات و مدارهای ابرسانا، دانشگاه صنعتی شریف

چکیده

ابرسانایی و مجموعه غنی پدیده های فیزیکی همراه آن، این امکان را برای دانشمندان فراهم می کند تا انواع مختلفی از آشکارسازهای تابش الکترومغناطیس را در طیف های مختلف تولید کنند. در این سخنرانی، پس از مقدمه مختصری بر انواع مختلف تابش سنج های ابرسانا، پیشرفت های اخیر ما در زمینه طراحی و ساخت برخی از این تابشگر ها در محدوده مادون قرمز و تراهرتز ارائه می شود. آشکارسازهای بالومتر و آشکارسازهای مبتنی بر پیوند های جوزفسونی ابرسانا های دمای بالا به منظور کارکرد در محدوده طیفی وسیع از میکروویو تا امواج زیر میلیمتری و مرئی با کمک فیلم های نازک YBCO طراحی و ساخته شده اند. فیلم های فوق با کمک ترکیبی از روشهای *magnetron sputtering* و *MOD* بر روی زیر لایه های کریستالی مهندسی شده مانند $SrTiO_3$ و $LaAlO_3$ ساخته شده اند. در این سخنرانی تمرکز اصلی ما بر کاربرد های زیستی این آشکارساز ها خواهد بود.

Fabrication and some bio-applications of advanced high-Tc superconducting radiation detectors (IR and THz)

Mirzaei, Seyed Iman

Superconducting Electronics Research Laboratory (SERL)
Sharif University of Technology

Abstract

Superconductivity and its rich collection of physics provide scientists with a variety of devices that can detect electromagnetic radiation at different wavelengths. In this talk, after a brief introduction to different types of superconducting radiation detectors, our recent progress in design and fabrication of some of these detectors in the IR and THz range will be presented. The high temperature superconductive bolometric and JJ based detectors for operation in wide band applications from optical to microwave and millimeter waves have been designed and fabricated using superconductive YBCO thin films. The films have been developed by a combination of magnetron sputtering and/or MOD techniques on various engineered crystalline substrates such as SrTiO₃ and LaAlO₃ substrates. We will mainly focus on biomedical applications of such detectors.

ابررسانایی و آخرین دستاوردها

حمیده شاکری پور

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۴۱۵۶-۸۳۱۱۱

چکیده

یکی از سوالات بنیادین در زمینه ابررسانایی، فهم مکانیزم میکروسکوپی ابررسانایی در ترکیبات جدید ابررساناها، برای رسیدن به هدف والاتر یعنی دست یابی به ابررسانایی در دمای اتاق بوده است. طبق تئوری میکروسکوپی باردین-کوپر-شریفر (BCS)، عامل رسانش در ترکیبات ابررسانا، جفت الکترون ها با میانجیگری فونون ها می باشد. اما، کشف ابررسانایی در گروه های بسیاری از مواد مانند مواد فرمیون سنگین، ابررساناهای کوپراتی، مواد آلی و سپس در مواد با پایه آهن، که در نمودار فاز همه آنها هم-زیستی دو فاز به ظاهر متفاوت ابررسانایی و مغناطیسی دیده می شود، موجب شد که فرضیه هم بستگی بین مکانیزم ابررسانایی و مغناطیس و یا به عبارتی مدل های جفت شدگی مغناطیسی الکترون ها [1-8] مورد توجه اساسی قرار بگیرند، به طوری که در حدود سی سال ذهن جامعه ابررسانایی به دنبال یافتن ابررساناهای با دماهای بالاتر براساس مکانیزم جفت شدگی مغناطیسی متمرکز شده بود. کشف اخیر [9] ابررسانایی با دمای ۲۰۳ کلوین، تحت اعمال فشار ۱۵۰ گیگاپاسکال، در ترکیب H_2S در سال ۲۰۱۴ و پیشنهاد جفت شدگی الکترون-فونون در این مواد، شوک بزرگی را به ذهن ها وارد کرد (با انجام آزمایش مشابه بر روی D_2S ، اثر ایزوتوپ، که طبق تئوری BCS، بیانگر برهمکنش الکترون-فونونی است، تایید شد). علیرغم مخالفت های بعضی از تئوریسین ها با این پیشنهاد و بیان نیاز به شواهد بیشتر برای اثبات این ادعا، در ۱۳ دسامبر ۲۰۱۸ [10-11] کشف مواد حاوی مقادیر بالای هیدروژن، LaH_{10} با دمای گذار ۲۵۰ کلوین، یعنی فقط ۲۳ درجه زیر دمای ذوب یخ، تحت فشار ۱۷۰ گیگاپاسکال، پیشنهاد قبلی را تایید نمود و به اندیشمندان یادآور شد که همیشه طبیعت آنگونه که ما فکر می کنیم و می خواهیم، رفتار نمی کند.

مکانیزم جفت شدگی الکترون ها، با ساختار گاف یک ابررسانا رابطه ی مستقیم دارد. در ادامه، نشان می دهیم که اندازه گیری هدایت گرمایی در دماهای زیر یک کلوین و در راستاهای مختلفی از شبکه بلوری، بهترین ابزار برای تعیین ساختار گاف ابررسانایی بوده [12] و در این راستا، مشاهده سه فاز متفاوت ابررسانایی، برای اولین بار در خانواده فرمیون سنگین ۱۱۵ [13-15]، ارائه خواهد شد.

واژه های کلیدی: مکانیزم جفت شدگی الکترون ها، ابررساناهای جدید، ابررساناهای هیدروژن دار، ساختار گاف، هدایت گرمایی

Superconductivity and the Latest Findings

Hamideh Shakeripour

Departement of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan ۸۴۱۵۶-۸۳۱۱۱, Iran

Abstract

One of the main questions in the field of superconductivity is: what leads to the cooper-pairing in new superconductors. The answer paves the road to reach to the room temperature superconductivity. In the BCS theory the electrical conduction is through cooper pairs mediated by phonon. However, while many new compounds like Heavy fermions, Cuprates, Organics and Fe-based compound show superconductivity in proximity to or coexistence with magnetic order in their phase diagram, this led scientists to accept and pay attention mainly to the spin fluctuations models, to provide glue for pairing [1-8], and to search for new high Tc superconductors which obey the new models, in nearly thirty years. Recently, observation of conventional superconductivity with $T_c=203$ K in H_2S compound under about 150 GPa pressure [9] (the pronounce isotope shift of T_c in D_2S is evidence of an electron-phonon mechanism of superconductivity, consistent with the BCS scenario.) shocked the superconducting scientist community. Although many theoreticians believed that it needs more evidences and experiments to be confirmed, however, in 13 Dec 2018, the German group discovered

another conventional superconductor with the highest temperature yet in LaH₁₀: T_c=250 K (under 170 GPa pressure), or -23 degrees Celsius below the melting ice temperature [10-11]. This gave a lesson that the nature does not behave as we think or want.

There is a direct relation between the pairing mechanism and the gap structure in superconductors. At the end, in short, we show the thermal conductivity measurements below 1K is a key tool to identify the gap structure [12]. In this road, we present the first observation of three different gap structures in heavy-fermion 115 family [13-15].

Key words: Electron pairing mechanism, New superconductors, Hydrogenated superconductors, gap structure, heat transport.

- [1] N.D. Mathur, *et al.*, Nature **394**, 39 (1998).
- [2] C.C. Tsuei and J. R. Kirtley, Rev. Mod. Phys. **72**, 969 (2000).
- [3] A.V. Chubukov, D. Pines, and J. Schmalian, edited by K. H. Bennemann & J. B. Ketterson (Springer Berlin Heidelberg, 2003), p. 495-590 .
- [4] P. Monthoux and G.G. Lonzarich, PRB **71**, 054504 (2005).
- [5] T. Moriya and K. Ueda, Advances in Physics **49**, 555 (2000).
- [6] D.J. Scalapino, Physics Reports **250**, 329 (1995).
- [7] D. Pines, Physica B: Cond. Matt. **199-200**, 300 (1994).
- [8] P. Monthoux, A.V. Balatsky, and D. Pines, PRL. **67**, 3448 (1991).
- [9] A.P. Drozdov, M.I. Erements, *et al.*, Nature **525**, 73 (2015); arxiv. 1412.0460.
- [10] A.P. Drozdov, M.I. Erements, *et al.*, arxiv. 1812.01561 (2018).
- [11] D. Castelvetti, Nature **565**, 12 (2019)
- [12] H. Shakeripour, *et al.*, NJP. **11**, 055065 (2009).
- [13] H. Shakeripour, *et al.*, PRL. **99**, 187004 (2007).
- [14] H. Shakeripour, *et al.*, PRB **82**, 184531 (2010).
- [15] H. Shakeripour, *et al.*, Submitted to PRX.

Spin-orbit coupling and magnetic fluctuations: new pairing mechanisms and topological superconductivity

Kargarian, Mehdi

Department of Physics, Sharif University of technology

Abstract

Many novel states of matter stem from the close interplay between strong correlations and spin-orbit coupling. In this talk I discuss that the helical electron states such as the surface of topological insulators or electron states in the presence of Rashba spin-orbit coupling are unstable to exotic superconducting states when coupled to magnetic fluctuations. The transverse components of in-plane ferromagnetic fluctuations lead to attractive current-current interactions between electrons: The Amperean pairing. The out-of-plane fluctuations mediate an attractive interaction in channels that breaks the time-reversal symmetry spontaneously. In our settings, the order parameter spontaneously breaks the time-reversal symmetry and has a non-zero phase winding number around the Fermi surface. Our setting provides a concrete example of a two-dimensional topological superconductor.

مغناطش و ناهمسانگردی در لایه‌های نازک فریت کبالت

کاملی، پرویز

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

چکیده

مغناطش لایه های نازک فریت کبالت اغلب زیر مقدار مربوط به نمونه های حجمی (455 kAm^{-1}) به دست می آید. این مقدار مغناطش نمونه ی حجمی ناشی از توزیع کاتیون‌ها در ساختار اسپینلی معکوس است. علاوه سهم قابل توجه گشتاور مداری به اندازه ی 0.6 مگنتون بور مربوط به یونهای کبالت در جایگاه هشت وجهی است. همچنین گشتاور مداری عامل ایجاد مغناطو تنگش و ناهمسانگردی مغناطوبلوری می باشد که به مقدار تنش ناشی از زیرلایه هم حساس است. ما ویژگیهای ساختاری و مغناطیسی لایه های نازک فریت کبالت را که با استفاده از لیزر پالسی روی زیر لایه های (TiO_2 , MgO , MgAl_2O_4 , SrTiO_3 , LSAT , LaAlO_3) دمای زیر لایه ی ($500-700^\circ\text{C}$) و فشار اکسیژن ($10^{-4}-10 \text{ Pa}$) لایه نشانی شده است را به صورت سیستماتیک مطالعه کردیم. مغناطش در دمای اتاق از 60 تا 440 kAm^{-1} متغیر بود و ناهمسانگردی تک محوره ی القا شده توسط زیر لایه $+220 \text{ kJm}^{-3}$ برای لایه های رشد داده شده روی زیرلایه ی (100) MgO و -2100 kJm^{-3} برای لایه های رشد داده شده روی زیرلایه ی (100) MgAl_2O_4 به دست آمد. باز توزیع یونهای آهن و کاتیونهای کبالت با حالت اسپینی بیشینه در جایگاههای هشت و چهاروجهی نمی تواند مغناطش را به زیر مقدار نمونه ی حجمی کاهش دهد، لیکن تغییر حالت ظرفیت آهن از 3 به 2 و کبالت از 2 به 3 با حالت اسپینی پایین در جایگاههای هشت وجهی می تواند باعث کاهش مغناطش به حدود 120 kAm^{-1} در دماهای پایین شود و به طبع آن کاهش دمای کوری مقدار مغناطش را در دمای اتاق به میزان قابل توجهی کاهش دهد. برخی دلایل برای ایجاد حالت اسپینی پایین برای کبالت در لایه های نازک فریت کبالت بحث خواهد شد.

Magnetization and anisotropy of cobalt ferrite thin films

P. Kameli,

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran

Abstract

The magnetization of thin films of cobalt ferrite frequently falls far below the bulk value of 455 kAm^{-1} , which corresponds to an inverse cation distribution in the spinel structure with a significant orbital moment of about $0.6\mu\text{B}$ that is associated with the octahedrally coordinated Co^{2+} ions. The orbital moment is responsible for the magnetostriction and magnetocrystalline anisotropy and its sensitivity to imposed strain. We have systematically investigated the structure and magnetism of films produced by pulsed-laser deposition on different substrates (TiO_2 , MgO , MgAl_2O_4 , SrTiO_3 , LSAT , LaAlO_3) and as a function of temperature ($500-700^\circ\text{C}$) and oxygen pressure ($10^{-4}-10 \text{ Pa}$). Magnetization at room-temperature ranges from 60 to 440 kAm^{-1} , and uniaxial substrate induced anisotropy ranges from $+220 \text{ kJm}^{-3}$ for films on deposited on MgO (100) to -2100 kJm^{-3} for films deposited on MgAl_2O_4 (100), where the room-temperature anisotropy field reaches 14 T . No rearrangement of high-spin Fe^{3+} and Co^{2+} cations on tetrahedral and octahedral sites can reduce the magnetization below the bulk value, but a switch from Fe^{3+} and Co^{2+} to Fe^{2+} and low-spin Co^{3+} on octahedral sites will reduce the low temperature magnetization to 120 kAm^{-1} , and a consequent reduction of Curie temperature can bring the room temperature value to near zero. Possible reasons for the appearance of low-spin cobalt in the thin films are discussed.

ابرشارگی در گازهای فرمیونی دوقطبی در ساختارهای لایه‌ای

عابدین پور، سعید

دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

چکیده

سیستمهای فراسرد بستر منحصر به فردی برای آزمودن و شبیه سازی نظریه‌های فیزیکی ماده چگال فراهم کرده‌اند. از این منظر اتمهای مغناطیسی و مولکولهای قطبی به دلیل برهمکنشهای بلند برد دوقطبی-دوقطبی بین ذراتشان شاید قرابت بهتری با سیستمهای الکترونی مورد علاقه در ماده چگال داشته باشند. در این سخنرانی رقابت بین فازهای مختلف در ساختارهای دولایه‌ای از گازهای دوقطبی فرمیونی فراسرد را بررسی خواهیم کرد. بطور مشخص نشان خواهیم داد که چگونه جفت شدگی و فاز موج چگالی می‌تواند در پیکربندی‌های مختلفی از این ساختارهای خود را نشان دهد. در نهایت ناپایداری ساختارهای دوقطبی با چگالی نامقتارن به سوی فازهای ابرشاره عجیب را بحث خواهیم کرد.

Superfluidity in layered dipolar Fermi gases

Abedinpour, Saeed

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

Abstract:

Ultra-cold systems have provided a unique platform for testing and simulating condensed matter theories. In this regard, polar molecules and magnetic atoms with long-range dipolar interactions have much better correspondence with electronic systems. In this talk, I will discuss the competition between different orders in double layer systems of dipolar fermions. I will show how superfluid pairing and/or density modulated phases can emerge in different setups of these systems. Moreover, I will also discuss instabilities toward exotic superfluid phases in density imbalanced bilayers of dipolar fermions.

تقویت اثر مگنتو اپتیکی کر به وسیله نانو لوله‌های کربنی

مرادی، مهرداد

دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان

چکیده

شاخه مگنتو اپتیکی یکی از زمینه‌های تحقیقاتی است که از پیدایش نانو فناوری بهره‌مند شده است. اثرات مگنتو اپتیکی فارادی و کر دو اثر مهم مگنتو اپتیکی هستند. اثر کر به طور معمول ضعیف بوده و برای استفاده در کاربردهای مختلف نیازمند تقویت و افزایش است. نانولوله‌های کربنی با توجه به خواص منحصر به فرد خود می‌توانند پتانسیل خوبی در استفاده به این منظور در ساختارهای مگنتو اپتیکی از خود نشان دهند. یکی از فرآیندهای افزایش اثر کر افزایش جذب نور در ساختار است که به افزایش برهم‌کنش نور با ماده مغناطیسی و افزایش اثر کر منتهی می‌شود. علاوه بر این نانولوله‌های کربنی را می‌توان به عنوان یک عامل مفید در حسگرهای زیستی بر پایه تحریک پلاسما سطحی نیز در نظر گرفت که با تقویت اثر کر افزایش حساسیت حسگر را ممکن می‌کند. دستیابی به اهداف بحث شده با طراحی نانو ساختارهای چند لایه شامل ماده مغناطیسی و لایه نانولوله‌های کربنی امکان پذیر است. در این راه ضخامت لایه مغناطیسی و همچنین روش و نحوه لایه‌نشانی نانولوله‌های کربنی بر پاسخ مگنتو اپتیکی ساختار تاثیر گذار خواهد بود. تحقیقات انجام شده نشان داده است که پوشش دهی نانولوله‌های کربنی با لایه فلزات پلاسماونیک مانند طلا و نقره می‌تواند به تقویت و تغییر خواص پلاسماونیک نانولوله‌های کربنی منتهی شود.

در این تحقیق از لایه‌ای از نانولوله‌های کربنی برای افزایش جذب نور درون ساختار و بررسی اثر آن بر افزایش اثر مگنتو اپتیکی کر بهره گرفته شده است. در این راه از روش‌های لایه‌نشانی مختلف از جمله لایه‌نشانی غوطه‌وری و لایه‌نشانی چرخشی برای لایه‌نشانی نانولوله‌های کربنی استفاده شده است. لایه‌نشانی نانولوله‌های کربنی به روش غوطه‌وری دارای پیچیدگی بیشتر و وجود عامل‌های تعیین کننده بیشتری می‌باشد، به نحوی که نیازمند زیر لایه ایندیوم برای افزایش چسبندگی بر بستر شیشه‌ای بوده و عوامل لایه‌نشانی از جمله غلظت محلول، زمان غوطه‌وری، زمان خشک شدن و تعداد دفعات غوطه‌وری بر پاسخ مگنتو اپتیکی ساختار تاثیر گذار بوده و باعث تغییر خواص ساختار می‌شوند. در این تحقیق با بررسی و ساخت ساختارهای مختلف نحوه تاثیر گذاری این عوامل بر پاسخ مگنتو اپتیکی ساختار شامل نانولوله‌های کربنی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان دادند هر کدام از عوامل بحث شده یک حالت بهینه داشته که در بهترین حالت بررسی شده سیگنال مگنتو اپتیکی کر فقط به اندازه ۱۷ درصد افزایش یافت. در ادامه لایه‌نشانی نانولوله‌های کربنی به روش چرخشی بر روی لایه نیکل انجام شد که پیچیدگی‌های کمتری نسبت به روش غوطه‌وری داشت. نتایج نشان داد که لایه پوششی نانولوله‌های کربنی در بهترین حالت باعث افزایش ۱۸۸ درصدی اثر مگنتو اپتیکی کر می‌شود. در همین راستا نتایج طیف جذب نیز نشان دهنده افزایش جذب نور در ساختار و تایید فرآیند پیش‌بینی شده بودند.

Amplify the magneto-optical Kerr effect using carbon nanotubes (CNTs)

Moradi Mehrdad

Department of Physics, University of Kashan,

Abstract

Magneto-optical (MO) branch is one of the research areas that has benefited from nanotechnology. The Faraday and Kerr effects are the two most important effects in this field. The Kerr effect is usually weak and for using in different application, it needs amplification. Carbon nanotubes (CNTs) due to their special properties show a great potential to be employed in MO structures in order to fully fit this matter. One of the common approaches to amplify Kerr effect is enhancement of light absorbance in nanostructures which leads to amplifying the interaction of light and magnetic materials. In addition,

CNTs can be considered as a useful agent in surface plasmon resonance (SPR) based biosensors where they enhance sensor's sensitivity by amplify the Kerr signal. Achieving discussed proposes is possible by designing multilayer nanostructures containing magnetic and CNT layers. Magnetic layer's thickness along with method and deposition details of the CNT coating have an important role in MO response of the structure. Recent studies showed coating CNTs with plasmonic metals such as gold and silver thin film can improve and change plasmonic properties of CNTs.

In this research, CNTs are used for enhancement of the light absorption and its effect on MO Kerr effect have been investigated. Spin-coating and dip-coating methods have been carried out for deposition of CNT thin film. Deposition of CNTs with dip-coating method has more complication. It needs indium as interface layer to enhance layer adhesion on glass substrate. Also coating factors such as solution concentration, dipping time, dry time and number of dipping have effect on MO Kerr response and change the structure properties. In this research, effect of these factors on MO Kerr effect response of the structures containing CNTs have been investigated. Results showed each one of these factors has its optimum which in best case enhancement of 17% in MO Kerr signal obtained. In the next step, the deposition of CNTs was carried out using spin-coating. The results of spin-coating the CNT layer on Ni layers led to 188% enhancement of the MO Kerr effect in the best conditions. Absorbance spectra of the samples were approved our discussion on the physics of MO enhancement and showed higher absorbance in CNT coated samples.

Induced superconductivity in Dirac/Weyl solids

Jafar, Seydakbar

Department of Physics, Sharif University of Technology

Abstract

In this talk I will show that induced superconductivity in Dirac solids can have novel forms including but not limited to pseudoscalar form of superconductivity. I discuss experimental signatures of this form of superconductivity from transport to NMR measurements. Finally I discuss how the superconductivity is induced in Fermi arc states of Weyl semimetals.

آلایش ترکیبات Sm123 و Sm358 با پراسیدیمیموم

صندوقچی، محمد^۱؛ اخوان، محمد^۲

^۱آزمایشگاه پژوهشی مغناطیس، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، خیابان آزادی، تهران

چکیده

مطالعه رفتار مقاومت بر حسب دمای ترکیبات $Sm_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_7$ و $Sm_{3-x}Pr_xBa_5Cu_8O_{19}$ به ازای درصد های آلایش مشابه پراسیدیمیموم انجام شد. نتایج نشان دادند که کاهش دمای گذار این دو ترکیب با آلایش بصورت خطی می باشد. نزدیکی شیب این رفتار کاهش نشان می دهد که این دو فاز در عمل شبیه هم رفتار می کنند. در توجیه کاهش دمای گذار به صورت خطی، با استفاده از نظریه شکست جفت ابریکوسوف-گرکوف نشان داده شد که احتمالاً کاهش دمای گذار ترکیب $Sm_{3-x}Pr_xBa_5Cu_8O_{19}$ ، مشابه ترکیب $Sm_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_7$ به علت هیبرید شدن اوربیتال های $Pr 4f$ با حالت های $O 2p-Cu 3d$ می باشد.

Doping of Sm123 and Sm358 Compounds with Praseodymium

Sandoghchi, Mohammad¹; Akhavan, Mohammad²

¹Magnet Research Laboratory (MRL), Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran

Abstract

Investigation of doping effect on electrical resistivity of $Sm_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_7$ and $Sm_{3-x}Pr_xBa_5Cu_8O_{19}$ compounds for different values of x has been done. The results indicate that transition temperature reduces almost linearly in both compounds. The slopes of this reduction in transition temperature are nearly the same which suggest that these phases behave like each other under the Pr doping. According to application of Abrikosov-Gor'kov pair-breaking theory, it is concluded that, like the case of $Sm_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_7$ compound, hybridization of Pr 4f states with O 2p-Cu 3d states is important in depression of transition temperature of $Sm_{3-x}Pr_xBa_5Cu_8O_{19}$.

PACS No. 70, 74

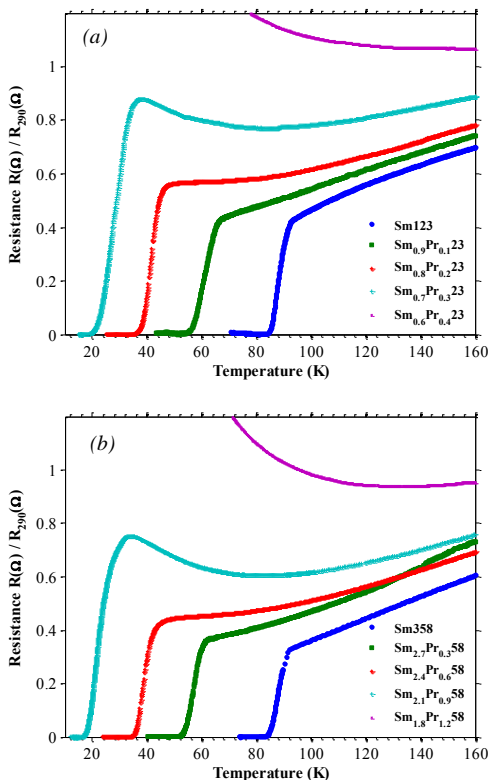
مقدمه

ترکیب $Y_3Ba_5Cu_8O_{18}$ (Y358) [1,2] توجهات زیادی را جلب کرده است. با این حال مطالعات بعدی شباهت یا همزیستی میان دوفاز Y123 و Y358 را پیشنهاد می کنند [3-6]. به علاوه آلایش ترکیب R358 با عناصر مختلف از جمله Ca, Ag, Nd, Sm, Lu, Gd بهبودی در دمای گذار این ترکیب نشان نمی دهد [7-17]. با این حال افزایش دما با آلایش F نیز گزارش شده است [11,18] که در تضاد با نتیجه ای دیگر [19] است. این نتایج یاد آور رفتار ترکیبات R123 است که مطالعه های وسیعی روی آن صورت گرفته است. با توجه به موارد اشاره شده به نظر می رسد که ساخت ترکیب تک فاز R358 با دمای گذار بالای ۱۰۰ کلوین مشکل می باشد. همچنین آلایش این ترکیبات معمولاً باعث بهبود دمای گذار نمی شود. بنابراین در رهیافت متفاوت می توان اثرات جانشینی

ترکیبات ابررسانای $REBa_2Cu_3O_7$ خانواده ای از ابررساناهای اکسید مس را تشکیل می دهند (خانواده R123) که دارای دمای گذار حدود ۹۰ کلوین می باشند (در اینجا RE شامل Y و همه عناصر خاکی نادر بجز Pr, Ce, Tb می شود). این ترکیبات به دلایل مختلف از جمله دمای گذار بالا، چگالی جریان بحرانی زیاد و سادگی ساختشان مورد مطالعه زیادی قرار گرفته اند. بسیاری از این تحقیقات به بررسی عوامل مؤثر بر روی دمای گذار این ترکیبات پرداخته اند، که از جمله آنها می توان به آلایش های متفاوت ترکیبات R123 یا تلاش برای افزایش تعداد صفحات CuO_2 این ترکیبات اشاره کرد. برای مثال افزایش دمای گذار به بیش از ۱۰۰ کلوین از طریق افزایش تعداد صفحات مؤثر در

نتایج و بحث

شکل ۱ نتیجه اندازه گیری مربوط به تغییرات مقاومت نمونه ها را نسبت به مقاومت دمای 290°C نشان می دهد. همان طور که از این شکل دیده می شود، در ترکیب $\text{Sm}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ با افزایش مقدار x به مقدار بیش از ۰٫۱ رفتار مقاومت نمونه بر حسب دما از حالت خطی خارج می شود. همچنین به ازای مقادیر $0.3 < x < 0.4$ ابررسانایی در این ترکیب از بین می رود که سازگار با مقدار آلایش بحرانی ۰٫۳۲~ گزارش شده قبلی برای این ترکیب می باشد [21]. در مورد ترکیب $\text{Sm}_{3-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_5\text{Cu}_8\text{O}_{19}$ نیز رفتار مشابهی دیده می شود. در این ترکیب ابررسانایی به ازای مقدار آلایش $0.9 < x < 1.2$ از بین می رود. با در نظر گرفتن تعداد عناصر Sm در دو ترکیب $\text{Sm}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ و $\text{Sm}_{3-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_5\text{Cu}_8\text{O}_{19}$ ملاحظه می شود که عملاً مقدار آلایش بحرانی Pr برای دو ترکیب در بازه درصدی یکسانی اتفاق می افتد، که تایید دوباره ای بر شباهت یا همزیستی دو فاز ذکر شده است.



شکل ۱: تغییرات مقاومت بر حسب دما برای ترکیبات $\text{Sm}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (a) و $\text{Sm}_{3-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_5\text{Cu}_8\text{O}_{19}$ (b).

مخرب روی دمای گذار ترکیب R358 را با R123 مقایسه کرد. مناسب ترین گزینه برای این کار آلایش ترکیب با پراسیدیمیم است؛ از آن جهت که داده های فراوانی برای ترکیبات R123 آلاییده شده با این عنصر وجود دارد [20]. از این رو در این مقاله اثر آلایش Pr روی دمای گذار ترکیبات $\text{Sm}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ و $\text{Sm}_{3-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_5\text{Cu}_8\text{O}_{19}$ مورد مطالعه قرار گرفته است. برای مقایسه بهتر مقادیر آلایش در ترکیب 358 طوری انتخاب شده اند که مضرب ۳ متناظر مقدار x در ترکیب 123 باشد (درصدها آلایش برابر).

جزئیات ساخت و اندازه گیری

چندین نمونه $\text{Sm}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ($\text{Sm}_{1-x}\text{Pr}_x\text{23}$) به ازای $x=[0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4]$ و $\text{Sm}_{3-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_5\text{Cu}_8\text{O}_{19}$ ($\text{Sm}_{3-x}\text{Pr}_x\text{58}$) به ازای $x=[0, 0.3, 0.6, 0.9, 1.2]$ به روش استاندارد حالت جامد ساخته شدند. برای این منظورها پودرهای با خلوص بالا Sm_2O_3 , Pr_6O_{11} , BaCO_3 , CuO به نسبت مناسب وزن شدند. سپس پودرها با افزودن مقدار کافی ایزوپروپیل الکل آمیخته و آسیاب شدند، سپس پودر اولیه حاصل به مدت ۲۴ ساعت در دمای 850°C کلسینه شد. این فرایند یک بار دیگر برای پودر سیاه حاصله تکرار شد. پودرهای نهایی تحت فشار تقریبی 10 ton/cm^2 به صورت قرص درآمدند. قرصهای حاصل در دمای 1000°C تحت اتمسفر اکسیژن کلوخه سازی شدند، سپس با آهنگ دمایی کمتر از 1°C/min تا دمای 500°C سرد شده و در این دما به مدت ۲۴ ساعت در معرض اکسیژن نگهداشته شده و سپس کاهش دما با آهنگ دمایی آهسته تا دمای اتاق انجام شد. برای داشتن نمونه های مناسب کاهش آهسته دما و وجود اتمسفر اکسیژن در فرایند کلوخه سازی ضروری است.

اندازه گیری مقاومت نمونه ها به روش استاندارد چهار میله انجام شد. برای این منظور از جریان 9.24 mA و فرکانس 50 Hz استفاده گردید. اندازه گیری اختلاف پتانسیل توسط دستگاه تقویت کننده قفلی Princeton Applied Research 124A انجام شده، کنترل و اندازه گیری دما توسط دستگاه Lake Shore 330 و مقاومت Pt-100 صورت گرفت.

است. هر چند که بنظر اثر تخریبی روی ترکیب Sm358 کمی بیشتر است. همچنین صرف نظر از اثر آلیش، دمای گذار ترکیب Sm123 و Sm358 بسیار نزدیک به هم است. در نتیجه بنظر می‌رسد، حداقل در ارتباط با خواص رسانندگی، ترکیب Sm358 نسبت به ترکیب Sm123 مزیت محسوسی ندارد.

برای توجیه کاهش دمای گذار با آلیش، ناکافی بودن مدل پرشدگی حفره به واسطه حضور یونهای دارای ظرفیت متغیر Pr (با ظرفیتی میان ۳+ تا ۴+) موضوعی شناخته شده است [20,21]. به زبان ساده اگر تنها نقش یونهای Pr پرکردن حفره‌های صفحات CuO₂ بخاطر داشتن ظرفیت متفاوت با ظرفیت ۳+ عنصر خاکی نادر بود، با توجه به شباهت ساختار شبکه‌های R123 انتظار مقدار آلیش بحرانی Pr یکسانی (مستقل از شعاع عنصر R) را باید داشت، که خلاف شواهد تجربی است [21]. سازوکار دیگری که در ارتباط با کاهش دمای گذار با آلیش Pr مطرح است هیبرید شدن حالت‌های Pr 4f با حالت‌های O 2p - Cu 3d می‌باشد [20,21]. از طرف دیگر مساله تغییر دمای گذار ابررسانایی به واسطه حضور یونهای پارامغناطیس از مدت‌ها پیش شناخته شده است [22] که امروزه از آن تحت عنوان نظریه شکست جفت ابریکوسوف-گروکوف (نظریه AG) یاد می‌شود [21,23,24]. بر اساس نظریه AG تغییرات دمای گذار برحسب یونهای ناخالصی پارامغناطیس به صورت زیر خواهد بود:

$$\ln\left(\frac{T_c}{T_{c0}}\right) = \psi\left(\frac{1}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\rho}{2}\right), \rho = \frac{\hbar}{\pi k_B T_c \tau_s} \quad (1)$$

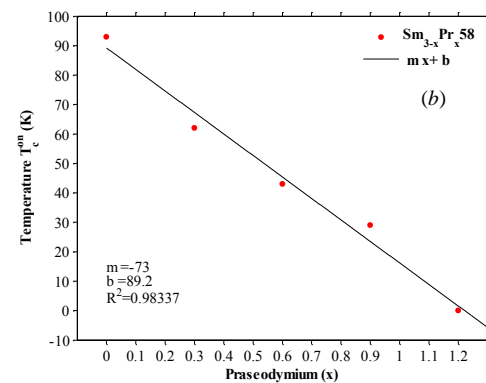
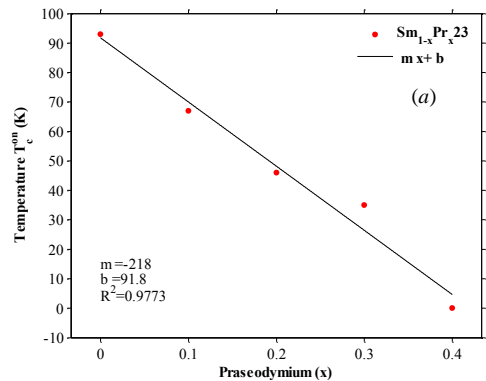
که در آن پارامتر شکست جفت عبارت است از

$$\hbar/\tau_s = 2\pi n_I N(0) (g-1)^2 J_{ex}^2 J(J+1) \quad (2)$$

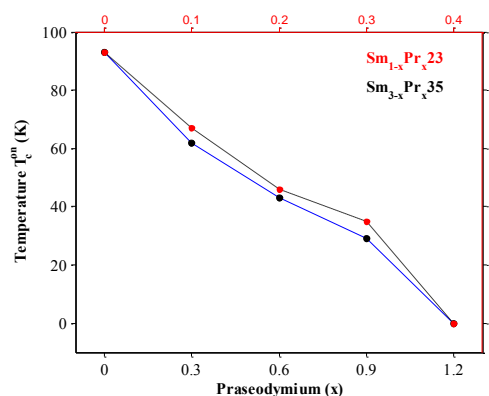
کمیت n_I نشان دهنده غلظت ناخالصی‌های جفت-شکننده (در اینجا یونهای Pr)، T_{c0} دمای گذار در حالت بدون ناخالصی، ψ تابع دیگاما، $N(0)$ چگالی حالتها در تراز فرمی، g ضریب لانده عنصر مغناطیسی جفت-شکننده و J اندازه حرکت زاویه‌ای کل است. J_{ex} ثابت برهمکنش تبدالی میان اسپین یون مغناطیسی و الکترونهای رسانش است. در حد مقادیر غلظت کم ($\rho \ll 1$) معادله ۱ به شکل زیر در می‌آید:

$$T_c - T_{c0} = -\frac{\hbar\pi}{4k_B\tau_s} \quad (3)$$

برای بررسی بهتر تغییرات دمای گذار این دو ترکیب با آلیش مقدار Pr در شکل ۲ نشان داده شده است. همانطور که دیده می‌شود، کاهش دمای گذار آستانه T_c^{on} برای هر دو ترکیب تقریباً خطی است. مقایسه شیب (با در نظر گرفتن درصد آلیش) این دو خط مقدار تقریباً برابری را نشان می‌دهد ($218 \sim 219 \times 3$).



شکل ۲: تغییرات دمای گذار آستانه بر حسب آلیش Pr برای ترکیبات (a) Sm_{1-x}Pr_xBa₂Cu₃O₇ و (b) Sm_{3-x}Pr_xBa₅Cu₈O₁₉.



شکل ۳: مقایسه تغییرات دمای گذار آستانه بر حسب آلیش برای ترکیبات Sm_{1-x}Pr_xBa₂Cu₃O₇ (خط چین) و Sm_{3-x}Pr_xBa₅Cu₈O₁₉ (خط پر).

شکل ۳ نتایج مربوط به شکل ۲ را با هم مقایسه می‌کند. ملاحظه می‌شود که اثر آلیش پراسیدیمیم روی هر دو ترکیب تقریباً مشابه

کاهش دمای گذار با افزایش آلایش برای هر دو ترکیب به صورت خطی می‌باشد که قابل بررسی با نظریه شکستگی جفت ابریکوسوف-گرگوف است. با استفاده از این نظریه، مقدار $J_{ex}=104 \text{ meV}$ برای ترکیب $\text{Sm}_{3-x}\text{Pr}_x\text{58}$ تخمین زده شد که به مقدار متناظر برای ترکیب $\text{Sm}_{1-x}\text{Pr}_x\text{23}$ نزدیک است. با توجه به اندازه J_{ex} می‌توان سازوکار هیبرید شدن حالت‌های $4f$ Pr با حالت‌های $3d$ O $2p$ -Cu در این ترکیب را عامل مهم در کاهش دمای گذار آن دانست. در نهایت بنظر می‌رسد که فرایند ساخت ترکیبات R358 به روش حالت جامد معمول منجر به تجزیه این ترکیب به فاز غالب R123 می‌شود.

مرجع‌ها

- [1] A. Aliabadi, Y. Akhavan Farshchi, M. Akhavan, Phys. C Supercond. 469 (2009) 2012–2014.
- [2] A. Tavana, M. Akhavan, Eur. Phys. J. B 73 (2010) 79–83.
- [3] S. Gholipour, V. Daadmeh, A.T. Rezakhani, H. Khosroabadi, F. Shahbaz Tehrani, R. Hosseini Akbarnejad, J. Supercond. Nov. Magn. 25 (2012) 2253–2258.
- [4] H. Khosroabadi, M. Rasti, M. Akhavan, Phys. C Supercond. Its Appl. 497 (2014) 84–88.
- [5] P. Udomsamuthirun, T. Kruaehong, T. Nilkamjon, S. Ratreng, J. Supercond. Nov. Magn. 23 (2010) 1377–1380.
- [6] S.P.K. Naik, M. Santosh, J. Supercond. Nov. Magn. 31 (2018) 3415–3421.
- [7] M. Rekaby, M. Roumié, A. Abou-Aly, R. Awad, M. Yousry, J. Supercond. Nov. Magn. 27 (2014) 2385–2395.
- [8] A.O. Ayaş, A. Ekicibil, S.K. Çetin, A. Coşkun, A.O. Er, Y. Ufuktepe, T. Firat, K. Kıymaç, J. Supercond. Nov. Magn. 24 (2011) 2243–2252.
- [9] A. Ekicibil, S.K. Çetin, A.O. Ayaş, A. Coşkun, T. Firat, K. Kıymaç, Solid State Sci. 13 (2011) 1954–1959.
- [10] A. Esmaili, H. Sedghi, M.M. Golzan, M. Amniat-Talab, J. Supercond. Nov. Magn. 24 (2011) 2237–2242.
- [11] K. Srinivasan, C. George Thomas, P. Padaikathan, others, J. Miner. Mater. Charact. Eng. 10 (2011) 1277.
- [12] U. Topal, M. Akdogan, J. Supercond. Nov. Magn. 25 (2012) 239–244.
- [13] D. Martínez Buitrago, N.C. Reyes-Suarez, J.P. Peña, O. Ortiz-Diaz, J. Otálora, C.A. Parra Vargas, J. Supercond. Nov. Magn. 26 (2013) 2269–2271.
- [14] J.L. Pimentel, D.M. Buitrago, I. Supelano, C.A. Parra Vargas, F.R. Mesquita, P. Pureur, J. Supercond. Nov. Magn. 28 (2015) 509–512.
- [15] N. Zarabini, V. Daadmeh, F.S. Tehrani, M. Abbasi, Procedia Mater. Sci. 11 (2015) 242–247.
- [16] D.A. Castellanos Coronado, F. Maloberti, E. Bonizzoni, Cult. Científica 14 (2016) 104–109.
- [17] M.Z. Shoushtari, G. Heidarzadeh, S.E.M. Ghahfarokhi, J. Supercond. Nov. Magn. 3 (2018) 3475–3483.
- [18] K. Srinivasan, C. George Thomas, P. Padaikathan, N.V. Ashoka, Int. J. Eng. Res. Appl. IJERA 3 (2013) 927–930.
- [19] T. Kruaehong, J. Aust. Ceram. Soc. Vol. 51 (2015) 109–115.
- [20] M. Akhavan, Phys. B Condens. Matter 321 (2002) 265–282.
- [21] S.K. Malik, C.V. Tomy, P. Bhargava, Phys. Rev. B 44 (1991) 7042–7045.
- [22] A.A. Abrikosov, L.P. Gor'kov, Sov Phys JETP 12 (1961) 1243–1263.
- [23] P. Fulde, Mod. Phys. Lett. B 24 (2010) 2601–2624.
- [24] A.A. Abrikosov, Sov. Phys. Uspekhi 12 (1969) 168.
- [25] S.K. Malik, A.M. Umarji, G.K. Shenoy, Phys. Rev. B 32 (1985) 4426–4430.

با افزایش بیشتر ρ و در نتیجه کاهش T_c سرانجام تحت شرط زیر ابررسانایی از بین می‌رود:

$$\frac{1}{\tau_s} = \left(\frac{\pi k_B T_{c0}}{2\hbar\gamma} \right), \gamma = 1.78 \quad (4)$$

با توجه به رابطه ۲ و ۳ دیده می‌شود که در مقادیر غلظت کم، دمای گذار بصورت خطی با افزایش ناخالصی مغناطیسی کاهش پیدا می‌کند، که سازگار با نتایج شکل ۲ است. از روی این رابطه می‌توان مقدار J_{ex} را برای ترکیب $\text{Sm}_{3-x}\text{Pr}_x\text{58}$ تخمین زد. با پیروی از روش استفاده شده در [25] برای مقادیر کم ناخالصی با استفاده از معادله ۳ و ۲ می‌توان نوشت:

$$\frac{dT_c}{dn_I} = 3 \frac{dT_c}{dx} = - \frac{\pi^2 N(0) (g-1)^2 J_{ex}^2 J(J+1)}{2k_B} \quad (5)$$

که در آن با توجه به حضور 3 اتم به ازای هر سلول واحد $\text{Sm}_{3-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_5\text{Cu}_8\text{O}_{19}$ از رابطه $x=3n_I$ استفاده شده است. با فرض آنکه یونهای پراسیدیمیم در حالت Pr^{3+} (از اثر پرشدگی حفره‌ها چشم پوشی می‌کنیم) باشند مقدار J برابر ۴ و در نتیجه مقدار $g=0.8$ خواهد شد. با توجه به شکل ۲ (b) مقدار $dT_c/dx=-73 \text{ K/atom}$ در نتیجه خواهیم داشت:

$$N(0) J_{ex}^2 \approx 4.78 \left(\frac{\text{meV} \cdot \text{state}}{\text{atom spin}} \right) \quad (5)$$

که نزدیک به مقدار محاسبه شده ۴,۵ (در همان واحد) مرجع [21] است. با توجه به شباهت رفتار دو ترکیب $\text{Sm}123$ و $\text{Sm}358$ ، اگر فرض کنیم چگالی حالت‌ها در سطح فرمی مقدار مشابهی داشته باشند، یعنی $N(0) \cong 0.44 \text{ state/eV atom spin}$ [21] آنگاه مقدار $J_{ex}=104 \text{ meV}$ بدست می‌آید. این مقدار J_{ex} می‌تواند نشانه‌ای از علت کاهش دمای گذار به واسطه سازوکار هیبرید شدن حالت‌های $4f$ Pr با حالت‌های $3d$ O $2p$ -Cu در سیستم $\text{Sm}_{3-x}\text{Pr}_x\text{58}$ باشد.

نتیجه‌گیری

مقایسه اثر آلایش پراسیدیمیم روی ترکیبات $\text{Sm}_{3-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_5\text{Cu}_8\text{O}_{19}$ و $\text{Sm}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ عمل ابررسانایی این ترکیبات در درصد آلایش تقریباً برابری از Pr از بین می‌رود. با این حال دمای گذار آستانه ترکیب $\text{Sm}_{3-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_5\text{Cu}_8\text{O}_{19}$ نسبت به $\text{Sm}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ کمی حساس‌تر به مقدار آلایش است. همچنین دیده شد که رفتار

خواص مغناطیسی و گذار فاز در نقاط کوانتومی سهموی: اثرات دما، فشار و میدانهای خارجی

مهناز خسروی، کاووس عباسی، بهروز وائقی، قاسم رضایی

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه یاسوج

چکیده

تأثیرات همزمان فشار، دما و میدان مغناطیسی خارجی بر پذیرفتاری مغناطیسی یک نقطه کوانتومی استوانه‌ای با پتانسیل سهموی مورد بررسی قرار گرفته است. برای به دست آوردن ویژه توابع و ویژه مقادیر نقطه‌ی کوانتومی، معادله شرودینگر سیستم را در دستگاه مختصات استوانه‌ای حل کرده و سپس با استفاده از فرمول بندی آنسامبل کانونی پذیرفتاری مغناطیسی سیستم مورد نظر را محاسبه می‌کنیم. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که دما، فشار و میدان مغناطیسی خارجی تأثیر قابل توجهی بر پذیرفتاری مغناطیسی سیستم دارد، به طوری که با تغییر این پارامترها گذار فازی از حالت دیامغناطیس به پارامغناطیس اتفاق می‌افتد و نقطه گذار تابعی از فشار، دما و میدان مغناطیسی خارجی است.

Magnetic properties and phase transition in parabolic quantum dot: Temperature, pressure and external field

M. Khosravi, K. Abbasi, B. Vaseghi, G. Rezaei

Department of Physics, College of Sciences, Yasouj University

Abstract

Pressure, temperature and external magnetic field effects on magnetic susceptibility of a cylindrical parabolic quantum dot have been investigated. Energy eigenvalues and eigenfunctions are obtained by solving the Schrödinger equation in cylindrical coordinates and then, the canonical ensemble formalism is used to calculate the magnetic susceptibility of the system. Our results reveal that, the pressure, temperature and magnetic field have a great influence on the magnetic susceptibility. It is clearly seen that phase transition from diamagnetic to paramagnetic state occurs with modifying these parameters and transition points depend on pressure, temperature and magnetic field.

PACS No. 75

جالب‌ترین موضوع‌ها در علم فیزیک است [۹]. از بین خواص مغناطیسی، پذیرفتاری مغناطیسی از اهمیت بسیار بالایی برخوردار است. به عنوان مثال: خرداد در سال ۲۰۱۸ اثر همزمان برهم‌کنش الکترون-الکترون، اسپین مدار راشبا و میدان مغناطیسی را بر روی پذیرفتاری نقاط کوانتومی بررسی کرد و به این نتیجه دست یافت که پذیرفتاری در میدان‌های مغناطیسی کم منفی است و با افزایش میدان مثبت می‌شود [۱۰]. علاوه بر این، در سال‌های اخیر اثرات دما و فشار بر خواص مغناطیسی و نوری نقاط کوانتومی بررسی شده است. از جمله وائقی و همکاران در سال ۲۰۱۵ خواص نوری نقاط

مقدمه

نانو بلورهای نیم‌رسانا، که همان نقاط کوانتومی نامیده می‌شوند، طیف گسترده‌ای از خواص را دارا می‌باشند [۱]. نقاط کوانتومی با روش‌های مختلفی از جمله لیتوگرافی شیمیایی [۲]، لیتوگرافی پرتو الکترونی [۳] و سنتز کلوئیدی [۴] تهیه می‌شوند. امروزه نقاط کوانتومی به علت ویژگی‌های فیزیکی منحصر به فرد خود، مورد توجه بسیاری از محققین قرار گرفته‌اند. در این رابطه خواص الکترونی [۵]، نوری [۶]، مکانیکی [۷] و مغناطیسی [۸] آنها بسیار مهم است. مطالعه خواص مغناطیسی از مهم‌ترین و

$$f(\rho, \varphi) = \frac{1}{L^{1+|m|} |m|!} \sqrt{\frac{(m+n)!}{2\pi n^{|m|} |m| n!}} \times \quad (4)$$

$$\exp\left(\frac{-\rho^2}{4L^2}\right) \exp(im\varphi) \rho^{|m|} F(-n, 1+|m|, \frac{\rho^2}{2L^2})$$

که در این روابط $L = \sqrt{\frac{\hbar}{m^* \Omega}}$ مقیاس طول مؤثر، تابع $F(a, b, x)$

فوق هندسی همشار، n, m به ترتیب اعداد کوانتومی شعاعی، مغناطیسی و n_z عدد کوانتومی مربوط به راستای z می باشد. علاوه بر این، $H_n(x)$ چندجمله ای هرمیت است. با حل معادله ویژه مقداری ویژه مقدار انرژی سیستم به صورت زیر محاسبه می شود

$$E = \hbar\Omega\left(n + \frac{1+|m|}{2} + \frac{m\hbar\omega_c}{2}\right) + \hbar\omega_0\left(n_z + \frac{1}{2}\right) - \frac{e^2 F^2}{2m^* \omega_0^2} \quad (5)$$

اثر دما و فشار

برای بررسی دما و فشار بر ویژگی های فیزیکی سیستم، تغییرات جرم مؤثر $m^*(T, P)$ با دما و فشار را می توان به شکل زیر تعریف کرد [۱۳ و ۱۴]

$$\frac{m_e}{m^*(T, P)} = 1 + E_p^\Gamma \left[\frac{2}{E_g^\Gamma(T, P)} [E_g^\Gamma(T, P) + \Delta_0]^{-1} \right] \quad (6)$$

که در این رابطه $\Delta_0 = 0.341 \text{ eV}$ جدا شدگی ناشی از اسپین-مدار، m_e جرم الکترون آزاد و $E_p^\Gamma = 7.51 \text{ eV}$ ثابت نواری در نقطه Γ و $E_g^\Gamma(T, P)$ گاف انرژی وابسته به دما و فشار در این نقطه می باشد. برای GaAs در نقطه Γ این انرژی به شکل زیر نوشته می شود.

$$E_g^\Gamma(T, P) = E_g^\Gamma(0, 0) - \frac{\alpha T^2}{T + 204} + \delta P + \mu P^2 \quad (7)$$

که در این رابطه:

$$\delta = 1.26 \times 10^{-2} \left(\frac{\text{eV}}{\text{kbar}}\right), \alpha = 5.405 \times 10^{-4} \left(\frac{\text{eV}}{\text{K}}\right)$$

$$E_g^\Gamma(0, 0) = 1.519 \text{ eV} \text{ و } \mu = 3.77 \times 10^{-5} \left(\frac{\text{eV}}{\text{kbar}^2}\right)$$

کوانتومی سهموی را در حضور ناخالصی بررسی کرده و اثرات فشار، دما و شدت میدان لیزری قوی را با استفاده از روش قطری سازی ماتریس ها بر ویژگی های نوری سیستم به دست آوردند [۱۱]. همچنین اوجی در سال ۲۰۱۷ اثرات دما و فشار را بر ویژگی های نوری نقاط کوانتومی استوانه ای با روش عددی محاسبه کرد و به این نتیجه رسید که با افزایش فشار (دما) خواص نوری تغییر می کند [۱۲]. در این مقاله یک نقطه کوانتومی استوانه ای با پتانسیل سهموی را در نظر گرفته و اثرات همزمان فشار، دما و میدان مغناطیسی خارجی را بر پذیرفتاری مغناطیسی آن بررسی می کنیم.

تئوری مسئله

در تقریب جرم مؤثر، هامیلتونی الکترون محبوس در نقطه کوانتومی تحت تاثیر دما، فشار و میدان های الکتریکی و مغناطیسی خارجی به صورت زیر نوشته می شود.

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (1)$$

که در آن 1_z مؤلفه z اندازه حرکت زاویه ای مداری، m^* جرم مؤثر الکترون، F میدان الکتریکی، ω_c فرکانس سیکلوترونی و ω_0 فرکانس محدودیت کوانتومی به صورت $\Omega = \sqrt{\omega_c^2 + 4\omega_0^2}$ می باشد. با توجه به تقارن موجود از جداسازی متغیرها در مختصات استوانه ای استفاده کرده و تابع موج سیستم را به صورت زیر می نویسیم.

$$\psi = f(\rho, \varphi) g(z) \quad (2)$$

به طوری که [۱۱]

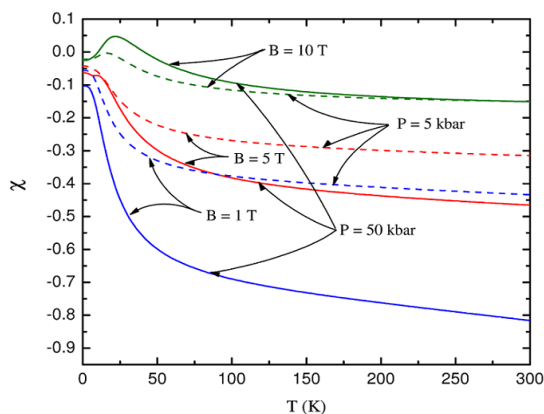
$$g(z) = \frac{1}{\sqrt{2^{n_z} n_z!}} \left(\frac{-m^* \omega_0}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[\frac{-m^* \omega_0}{2\hbar} z\right] \quad (3)$$

$$\left(z - \frac{eF}{m^* \omega_0}\right)^2 H_n \left[\sqrt{\frac{m^* \omega_0}{\hbar}} \left(z - \frac{eF}{m^* \omega_0}\right) \right]$$

و میدان مغناطیسی متغیر و در دما و فشارهای متفاوت انجام داده و نتایج زیر را به دست آورده ایم.

هرچند تا کنون تحقیقاتی بر روی خواص الکترونی و اپتیکی و تا حد کمتر بر روی خواص مغناطیسی سیستم مورد مطالعه قرار گرفته است اما بررسی تاثیر همزمان دما، فشار و میدان مغناطیسی خارجی بر روی خواص مغناطیسی سیستم مذکور صورت نگرفته است [۱۰ و ۱۵].

از مزایای این روش امکان بررسی شرایط تغییر فاز مغناطیسی و نقاط بحرانی در مقادیر مشخص از پارامترهای ذکر شده که امکان کنترل آنها وجود دارد می باشد.



شکل ۱: پذیرفتاری بر حسب تابعی از دما و به ازای مقادیر مختلف میدان مغناطیسی و فشار و به ازای $\omega_0 = 1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$.

در شکل ۱ پذیرفتاری به ازای مقادیر متفاوتی از B و P بر حسب تابعی از دما رسم شده است. همانطور که ملاحظه می شود در دماهای پایین برای میدانهای مغناطیسی بزرگ گذار فازی از حالت دیامغناطیس به پارامغناطیس در دمای حدود 20 K ، $B=10 \text{ T}$ و $P=50 \text{ kbar}$ مشاهده می گردد. با کاهش میدان مغناطیسی سیستم کوانتومی خاصیت دیامغناطیسی خود در تمامی دماها را حفظ می کند. نکته جالب توجه در این است که برای مقادیر کوچکتر B با افزایش فشار χ کاهش می یابد ولی برای $B=10 \text{ K}$ با افزایش فشار χ افزایش می یابد. علاوه بر این، در میدانهای مغناطیسی بیشتر اثرات میدان بر اثرات فشار غالب است.

گاف انرژی برای GaAs در نقطه Γ در دمای $T=0$ و فشار $P=0$ می باشد. علاوه بر این، اثرات فشار به دست آمده از تغییرات جزئی در حجم با فشار هیدرواستاتیک به صورت زیر داده می شود.

$$\Delta V/V = -3P(S_{11} + S_{12}) \quad (8)$$

$$d(P) = d_0 [11 - 3P(S_{11} + S_{12})]^{1/3} \quad (9)$$

که در آن d_0 شعاع اصلی نقطه و $S_{11} = 1.16 \times 10^{-3} (\text{kbar}^{-1})$ و $S_{12} = 3.7 \times 10^{-4} (\text{kbar}^{-1})$ ثابت های الاستیک GaAs می باشد. همچنین فرکانس محدودیت نقطه کوانتومی با توجه به رابطه زیر تعیین می شود

$$\omega_0 \sim \frac{\hbar}{m^* d^2 \sqrt{\frac{\hbar^2}{m^* d^2 s^2} + 1}} \quad (10)$$

که در این رابطه $s = 10^8 (\text{cm/s})$ ، پارامتر اثرات غیر سهموی نوارهای انرژی می باشد.

مغناطش و پذیرفتاری

به طور کلی برای محاسبه خواص ترمودینامیکی یک سیستم ابتدا تابع پارش را بدست می آوریم. که تابع پارش با جمع بندی مستقیم بر روی سطح انرژی دسترس پذیر سیستم محاسبه شود [۱۰].

$$Q = \sum_s e^{-\beta E_s} \quad (11)$$

در این رابطه $\beta = 1/k_B T$ و k_B ثابت بولتزمن است.

از طرفی، مغناطش سیستم به صورت زیر نتیجه می شود

$$M = \frac{1}{Q} \sum_s \left(-\frac{\partial E_s}{\partial B} \right) e^{-\beta E_s} \quad (12)$$

در نهایت پذیرفتاری را می توان با توجه به رابطه زیر محاسبه کرد

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} \quad (13)$$

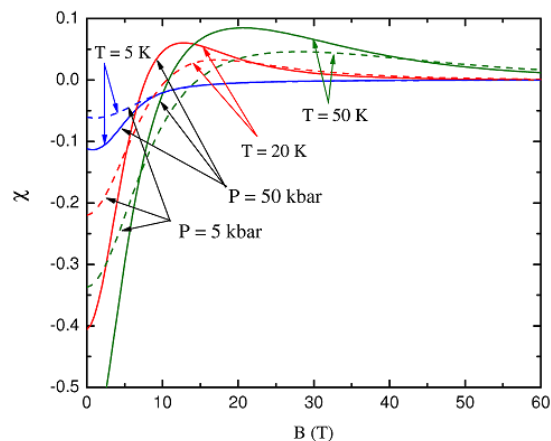
نتیجه گیری

در این قسمت به بررسی نتایج حاصل از محاسبات پذیرفتاری مغناطیسی سیستم، می پردازیم. محاسبات را برای یک نقطه کوانتومی از جنس گالیم- آرسناید با $m^* = 0.067 m_e$ (m_e جرم الکترون آزاد می باشد) در حضور میدان الکتریکی ثابت $(15 \frac{\text{kV}}{\text{cm}})$

را برای سیستم مهیا نمی‌کند و در رقابت با اثرات B و T اثرات فشار کمتر می‌باشد. مقایسه شکل‌های ۲ و ۳ نشان می‌دهد که با افزایش B و P ، پذیرفتاری به سمت یک مقدار اشباع (تقریباً صفر) رفته و ماده پارامغناطیس می‌شود. این رفتار در شکل ۱ مشاهده نمی‌گردد زیرا اثرات دمایی مانع از سمتگیری مغناطیسی شده و ماده دیا مغناطیس می‌ماند.

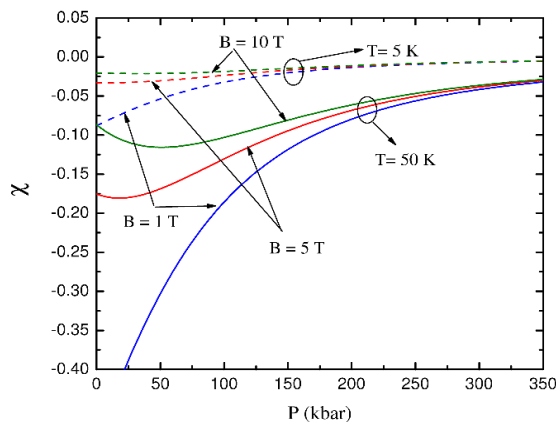
مرجع‌ها

- [۱] P. Yin, Yi Tan, H. Fang, M. Hegde and Pavle V. Radovanovic; "Plasmon-induced carrier polarization in semiconductor nanocrystals"; *Nature nanotechnology* **13**, (2018) 463–467.
- [۲] S. Hersee, J. P. Duchemim, "Low-Pressure Chemical Vapor Deposition"; *Annu. Rev. Mater. Sci.* **12**, (1982) 65.
- [۳] Yuan Pu, Fuhong Cai, Dan Wang, Jie-Xin Wang, and Jian-Feng Chen; "Colloidal Synthesis of Semiconductor Quantum Dots toward Large-Scale Production"; *A Review*, *Ind. Eng. Chem. Res.* **57**, (2018) 1790–1802.
- [۴] Yu Hong, Ding Zhao, Dongli Liu, Binze Ma, Guangnan Yao, Qiang Li, Anpan Han, and Min Qiu; "Three-dimensional in situ electron beam lithography using water ice"; *Nano let* **18**, (2018) 5036–5041.
- [۵] A. L. Efros, J. B. Delehanty, A. L. Huston, I. L. Medintz, M. Barbic, T. D. Harris; "Evaluating the potential of using quantum dots for monitoring electrical signals in neurons"; *Nature Nanotechnology* **13**, (2018) 278–288.
- [۶] S. Chen, N. Ullah, T. Wang and R. Zhang; "Tuning the optical properties of graphene quantum dots by selective oxidation: a theoretical perspective"; *J. Mater. Chem. C* **6**, (2018) 6875–6883.
- [۷] B. Karimi, B. Ramezanzadeh, "A comparative study on the effects of ultrathin Luminescent graphene oxide quantum dot (GOQD) and graphene oxide (GO) nanosheets on the interfacial interactions and mechanical properties of an epoxy composite"; *Journal of Colloid and Interface Science* **17**, (2017) 30013-9.
- [۸] J. S. Nascimento, D. R. da Costa, M. Zarenia, Andrey Chaves, and J. M. Pereira, Jr, "Magnetic properties of bilayer graphene quantum dots in the presence of uniaxial strain"; *Phys. Rev. B* **96**, (2017) 115428.
- [۹] L. Pei, S. Tao, S. Haibo, X. Song; "Structural stability, electronic and magnetic properties of MoS₂ quantum dots based on the first principles"; *Solid State Commun* **218**, (2015) 25-30.
- [۱۰] R. Khordad, "Simultaneous effects of electron-electron interactions, Rashba spin-orbit interaction and magnetic field on susceptibility of quantum dots"; *J. Mag. Mag. Mat.* **449**, (2018) 510–514.
- [۱۱] B. Vaseghi, G. Rezaei, T. Sajadi, "Optical properties of parabolic quantum dots with dressed impurity: Combined effects of pressure, temperature and laser intensity"; *Physica B* **456**, (2015) 171-175.
- [۱۲] E. Owji, H. Mokhtari, A. Keshavarz, "Effects of Temperature, Pressure, and Size on Different Transitions of Optical Properties of Spherical Quantum Dot"; *Iran J. Sci. Technol. Trans. Sci.* **42**, (2017) 1669-1675.
- [۱۳] A. Zamani, F. Setareh, T. Azargoshasb, E. Niknam, "Electronic structure and Lande g-factor of a quantum ring in the presence of spin-orbit coupling: Temperature and Zeeman effect"; *Superlattices and Microstructures* **110**, (2017) 243-251.
- [۱۴] W.Wang, J.Y.Fu, "Temperature dependence of the Rashba and Dresselhaus spin-orbit interactions in GaAs wells"; *Phys. B* **482**, (2016) 14-18.
- [۱۵] F. Bzour, M. K.Elsaid, A. Shaer "The Effects of Pressure and Temperature on the Magnetic Susceptibility of Semiconductor Quantum Dot in A Magnetic Field"; *Applied Phys. Res.* **9**, (2017) 77-85.



شکل ۲: پذیرفتاری بر حسب میدان مغناطیسی و دما و فشار مختلف و به ازای $\omega_0 = 1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$.

در شکل ۲ پذیرفتاری بر حسب میدان مغناطیسی به ازای مقادیر متفاوت از T و P رسم شده است. در دماهای پایین و میدان مغناطیسی ضعیف گذار فازی رخ نداده است ولی با افزایش B در دمای $T = 50 \text{ K}$ به ازای مقادیر وسیع تری از B سیستم در حالت پارا مغناطیسی می‌باشد. علاوه بر این، اثرات همزمان میدان مغناطیسی خارجی و فشار در تطابق کامل با شکل ۱ می‌باشد.



شکل ۳: پذیرفتاری بر حسب تابعی از فشار و به ازای مقادیر مختلف میدان مغناطیسی و دما و $\omega_0 = 1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$.

در شکل ۳ پذیرفتاری مغناطیسی بر حسب تابعی از فشار و مقادیر مختلف دما و میدان مغناطیسی ترسیم شده است. ملاحظه می‌گردد که اثرات فشار در دماهای بالاتر بیشتر است و این اثرات با کاهش دما کاهش می‌یابد. علاوه بر این، تغییرات فشار در مقایسه با عوامل دیگر امکان گذار از حالت پارامغناطیس به دیامغناطیس و بالعکس

ساخت، ویژگی ساختاری و الکتریکی ابررسانای بر پایه آهن $NdFeAs_{0.95}Sb_{0.05}O_{0.8}F_{0.2}$

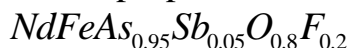
البرزی، زهرا^۱؛ دادمهر، وحید^۱

^۱ آزمایشگاه تحقیقاتی مغناطیس و ابررسانا، دانشکده فیزیک و شیمی دانشگاه الزهرا سلام الله علیها، ونک میدان شیخ بهایی، تهران

چکیده

پلی کریستال ابررسانای بر پایه آهن با ترکیب اسمی $NdFeAs_{0.95}Sb_{0.05}O_{0.8}F_{0.2}$ به روش واکنش حالت جامد تک مرحله‌ای ساخته شد. با استفاده از تحلیل الگوی پراش اشعه‌ی ایکس توسط نرم افزار MAUD پارامترهای شبکه، حجم سلول واحد، زوایای چهاروجهی FeAs-4 و ضخامت لایه‌ی ابررسانایی FeAs در این ترکیب محاسبه و با نمونه‌ی خالص آن مقایسه شد. در بررسی دمایی گذار ابررسانایی برای نمونه‌ی $NdFeAs_{0.95}Sb_{0.05}O_{0.8}F_{0.2}$ کاهش را نسبت به دمایی گذار نمونه‌ی خالص ابررسانای بر پایه آهن مشاهده کردیم. هر چه زاویه‌ی چهاروجهی FeAs-4 در این ترکیبات به زاویه‌ی چهاروجهی ایده‌آل نزدیک‌تر باشد دمایی گذار ابررسانایی بالاتری را می‌توان مشاهده کرد.

Synthesis, structural and electrical properties of the Iron-based superconductor



Z. Alborzi¹ and V. Daadmehr¹

¹Magnet and Superconducting Res. Lab., Faculty of Physics & Chemistry, Alzahra University, Tehran

Abstract

Polycrystalline of Iron-based superconductor with nominal composition $NdFeAs_{0.95}Sb_{0.05}O_{0.8}F_{0.2}$ was synthesized by one-step solid state reaction method. By using of analyzing of X-ray diffraction pattern with MAUD software, the lattice parameters, unit cell volume, FeAs-4 tetrahedron's angles and superconducting layer thicknesses of FeAs were calculated and compared with the pure sample. In the study of the superconducting transition temperature of $NdFeAs_{0.95}Sb_{0.05}O_{0.8}F_{0.2}$, we observed a decrease in the superconductivity transition temperature than the pure sample of iron-based superconductor. Generally, if the FeAs-4 tetrahedron angles in these compounds are closer to the ideal FeAs-4 tetrahedron angles, it can be observed the higher superconducting transition temperature.

PACS No. (11 Times New Roman, italic)

کشف ابررسانایی با فرمول $LaO_{1-x}F_xFeAs$ را با دمایی گذار ۲۶ کلوین گزارش کردند [۳] و این باعث شد تا دریچه‌ای تازه به سوی دنیای ابررسانایی باز شود. بی‌درنگ بعد از آن محققین، تحقیقات گسترده‌ای را برای ترکیبات مشابه آن و فهم مکانیسم ابررسانایی در این خانواده آغاز کردند.

مشاهده‌ی ابررسانایی در ترکیبات حاوی عناصر با ممان مغناطیسی بالا از جمله آهن و حضور همزمان پدیده‌ی ابررسانایی

مقدمه

اولین مشاهده‌ی ابررسانایی در ترکیبات آهن‌دار توسط کامیهارا^۱ و همکارانش در سال ۲۰۰۶ میلادی، با دمایی گذار ۳/۵ کلوین برای ترکیبی که اولین بار توسط زیمر^۲ و همکارانش کشف شده بود [۱]، مشاهده شد [۲]. در فوریه‌ی ۲۰۰۸ کامیهارا و همکارانش

¹ Kamihara

² Zimmer

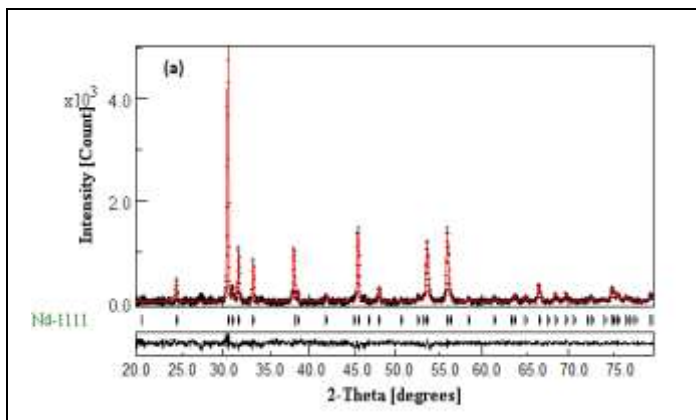
حرارتی کوره خاموش شده و اجازه می‌دهیم به دمای اتاق برسد. در این مرحله از آنجایی که نمونه‌ی حاصل ظاهری پودری در لوله‌ی کوارتز دارد، آن را از لوله‌ی کوارتز خارج کرده و دوباره به صورت قرص در می‌آوریم و فرآیند حرارتی مذکور را بر نمونه تکرار می‌کنیم. بعد از این مرحله قرصی محکم و مشکی به دست می‌آید.

نتایج و بحث

تکنیک پراش اشعه‌ی ایکس برای تعیین ساختار بلوری ابررسانای بر پایه‌ی آهن نمونه‌های مذکور توسط دستگاه اشعه‌ی ایکس X'Pert PRO MPD, PANalytical Company انجام شد. با استفاده از نرم‌افزار تحلیلی مواد با استفاده از تکنیک پراش (MAUD)^۴ پارامترهای ساختار بلوری این نمونه در مقایسه با نمونه‌ی بدون آلیش بررسی شد. در شکل ۱ می‌توانید الگوی تحلیل شده‌ی پراش اشعه‌ی ایکس این نمونه‌ها را توسط نرم‌افزار MAUD مشاهده بفرمایید.

در این بررسی، ساختار بلوری هر دو ترکیب یک پلی-کریستال با ساختار تتراگونال در تقارن فضایی $P4/nmm:2$ به دست آمد.

در نمونه‌ی بدون آلیش تقریباً هیچ فاز ناخالصی مشاهده نمی‌شود. برای نمونه‌ی آلییده با آنتیمونی دو پیک در زوایای $27/5$ و $28/59$ درجه ظاهر شد که با محاسبات انجام شده توسط نرم-افزار MAUD، می‌توان آن‌ها را با فاز ناخالصی NdF_2, Sb مرتبط دانست.



Materials Analysis Using Diffraction (MAUD)^۴

و خاصیت مغناطیسی در ناحیه‌های مختلف ماده، تصور تضاد این دو خاصیت با یکدیگر را از بین برد. از بین این ترکیبات، در سال ۲۰۱۸، دمای گذار ابررسانایی نمونه‌ی $NdFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ ساخته شده به روش واکنش حالت جامد تک‌مرحله‌ای ۵۶ کلوین گزارش شد [۴]. امروزه اثر آلیش عناصر هم‌ظرفیت^۳ در دمای گذار ابررسانایی در ترکیبات ابررسانای بر پایه‌ی آهن موضوع مورد توجه بسیاری از محققین است [۵، ۶]. در این راستا بر آن شدیم تا اثر آلیش عنصر آنتیمونی با مقدار آلیش ۰/۰۵ به جای آرسنیک در ترکیب ابررسانای بر پایه‌ی آهن $NdFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ را بررسی کنیم.

روش ساخت نمونه

پلی‌کریستال ابررسانای بر پایه‌ی آهن با ترکیب اسمی $NdFeAs_{0.95}Sb_{0.05}O_{0.8}F_{0.2}$ به روش واکنش حالت جامد تک-مرحله‌ای ساخته شد. پیش مواد اولیه برای ساخت این ترکیب برابر با شمش Nd و پودرهای Fe ، As ، Fe_2O_3 ، FeF_3 و Sb با درصد خلوص ۹۹/۹۹ است. بعد از استوکیومتری دقیق پیش‌مواد اولیه در جعبه‌دستکش حاوی اتمسفر نیتروژن با ترازوی دیجیتال با دقت 10^{-5} گرم توزین شد و درون هاون عقیق به مدت دو ساعت سائیده شد. پودر حاصل را درون قالب قرص ریخته و تحت فشار ۴۵ کیلوگرم بر سانتیمتر مربع به صورت قرص درآوردیم. قرص را درون لوله‌ی کوارتز در فشار ۷۰ میلی‌تور مهر و موم می‌کنیم. در روش واکنش حالت جامد انتخاب فرآیند حرارتی برای تشکیل صفحات بلوری از اهمیت بالایی برخوردار است. البرزی و همکارش با استفاده از آنالیز حرارتی TGA از نمونه‌ی $NdAs$ فرایند حرارتی مطلوبی برای ساخت این ابررسانا به دست آوردند [۴]. بر قرص مهر و موم شده در لوله‌ی کوارتز، فرایند حرارتی زیر را در کوره‌ی استوانه‌ای اعمال می‌کنیم: در دمای ۳۵۰ سانتیگراد به مدت ۵ ساعت، دمای ۶۴۰ سانتیگراد ۱۴ ساعت، دمای ۸۸۰ درجه سانتیگراد ۲۰ ساعت و در نهایت دمای ۱۱۵۰ سانتیگراد به مدت ۲۰ ساعت. لازم به ذکر است آهنگ تغییر دما در این فرایند حرارتی ۲ درجه بر دقیقه است. بعد از اتمام فرآیند

Isovalent^۳

در نمونه‌ی بدون آرایش به ترتیب افزایش و کاهش پیدا کرده‌است. اگر بخواهیم این زوایا را با چهاروجهی ایده‌آل مقایسه کنیم مشهود است که زاویه‌ی α در نمونه‌ی $NdFeAs_{0.95}Sb_{0.05}O_{0.8}F_{0.2}$ از مقدار ایده‌آل آن یعنی $\alpha = 109.47^\circ$ فاصله‌ی بیشتری نسبت به نمونه‌ی بدون آرایش پیدا کرده است. این می‌تواند به دلیل اثر الکترونگاتیوی عنصر آنتیمونی نسبت به آرسنیک در این ساختار باشد. از آنجایی که الکترونگاتیوی اتم آنتیمونی (۲/۰۵) نسبت به اتم آرسنیک (۲/۱۸) کوچک‌تر است به همین دلیل طول باند $FeAs/Sb$ کاهش پیدا می‌کند و زاویه‌ی α افزایش و زاویه‌ی β در ارتباط مقابل با زاویه‌ی α است کاهش پیدا می‌کند.

جدول ۱. پارامترهای شبکه، زوایای α و β چهاروجهی $FeAs-4$ ، ضخامت لایه‌ی d $FeAs$ و حجم سلول واحد دو ترکیب ابررسانای بر پایه‌ی آهن

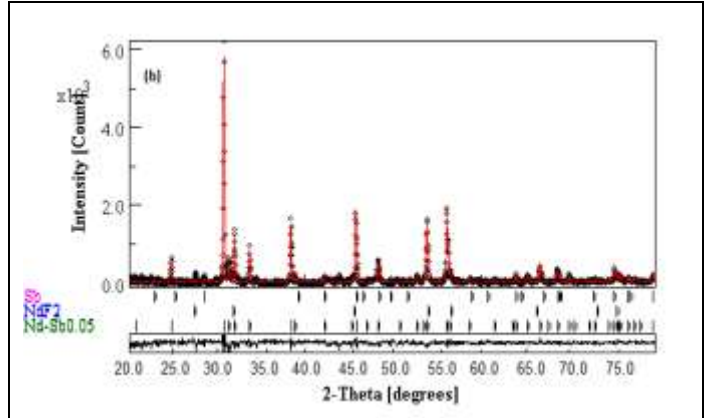
$$NdFeAs_{0.95}Sb_{0.05}O_{0.8}F_{0.2} \text{ و } NdFeAsO_{0.8}F_{0.2}$$

نمونه	$NdFeAsO_{0.8}F_{0.2}$	$NdFeAs_{0.95}Sb_{0.05}O_{0.8}F_{0.2}$
a (nm)	0.3967	0.3962
c (nm)	0.8596	0.8560
V (nm ³)	0.135276	0.134370
α (deg.)	111.20	111.93
β (deg.)	108.61	108.26
d: FeAs (nm)	0.2716	0.2675

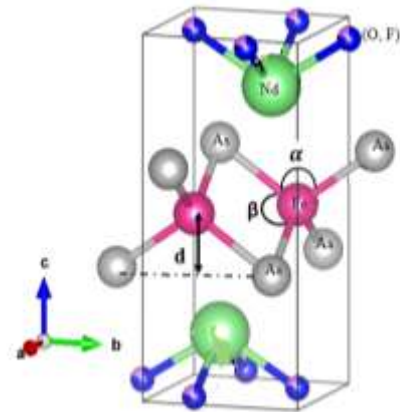
طبق تحقیقات قبل در این دسته از ترکیبات ابررسانای بر پایه‌ی آهن، هر چه زاویه‌ی چهاروجهی آن ترکیب نزدیک به زاویه-ی $\alpha = 109.47^\circ$ چهاروجهی ایده‌آل $FeAs-4$ باشد بیشترین دمای گذار را برای آن نمونه انتظار دارند [۷]. از این رو انتظار می‌رود در اندازه‌گیری مقاومت الکتریکی نمونه‌ها با کاهش دمای گذار در نمونه‌ی آلییده مواجه باشیم.

برای بررسی مقاومت الکتریکی نمونه‌ها بر حسب دما و بررسی گذار ابررسانایی در این نمونه‌ها، ما روش چهارمیله را استفاده کردیم.

در اندازه‌گیری مقاومت الکتریکی از دستگاه 20 K Closed Cycle Cryostat (QCS 101), ZSP Cryogenics Technology استفاده شده است. شکل ۳ مقاومت الکتریکی نرمالایز شده به مقاومت دمای اتاق را برای هر دو نمونه‌ی بدون آرایش و آلییده نشان می‌دهد.



شکل ۱. طیف پراش اشعه‌ی ایکس از نمونه‌ی ابررسانای بر پایه‌ی آهن (a) نمونه‌ی $NdFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ ، (b) نمونه‌ی $NdFeAs_{0.95}Sb_{0.05}O_{0.8}F_{0.2}$

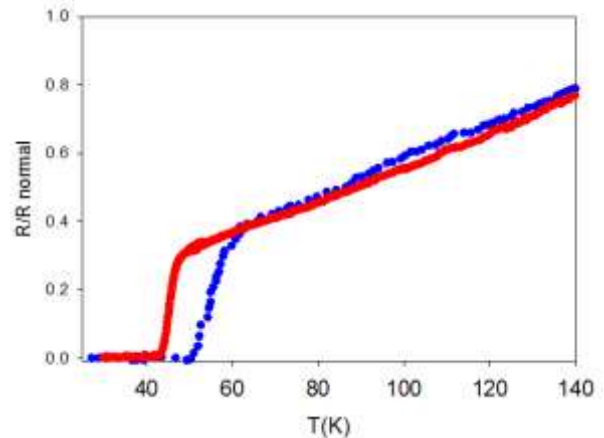


شکل ۲. نمایی از ساختار کریستالی تتراگونال با تقارن فضایی $P4/nmm:2$ نمایی از ساختار کریستالی تتراگونال با تقارن فضایی $P4/nmm:2$ را می‌توانید در شکل ۲ مشاهده بفرمایید. پارامترهای a و c شبکه، زوایای چهاروجهی $FeAs-4$ ، d ضخامت لایه‌ی $FeAs$ و V حجم سلول واحد در این دو ترکیب در جدول ۱ آمده است. بر اساس نتایج به دست آمده از تحلیل الگوی پراش اشعه‌ی ایکس این نمونه‌ها، مشاهده می‌شود که با آرایش عنصر آنتیمونی در ترکیب بدون آرایش، پارامتر a و c شبکه کاهش پیدا کرده است. حجم سلول واحد نمونه‌ی بدون آرایش نیز با آرایش آنتیمونی دچار انقباض شده کاهش پیدا کرده است. از آنجایی که شعاع یونی اتم آنتیمونی نسبت به اتم آرسنیک بزرگ‌تر است با کوچک‌تر شدن حجم سلول واحد شبکه انتظار می‌رود که میکروتنش شبکه رو به افزایش باشد. همچنین، مشاهده می‌شود که زاویه‌ی α و β در چهاروجهی $FeAs-4$ با آرایش آنتیمونی

با آنتیمونی ۴۶ درجه‌ی کلون به دست آمد که نسبت به دمای گذار ابرسانایی نمونه‌ی بدون آرایش یعنی ۵۶ درجه‌ی کلون، کاهش مشهودی پیدا کرده است که این می‌تواند متاثر از تغییر در زاویه‌ی چهاروجهی $FeAs-4$ و تغییر در چگالی حاملین بار در صفحات ابرسانشی در این ترکیب باشد.

مرجع‌ها

- [۱] B. I. Zimmer, W. Jeitschko, J. H. Albering, R. Glaum, M. Reehuis, *Journal of Alloys and Compounds*, ۲۴۲-۲۳۸ (۱۹۹۵), ۲۲۹.
- [۲] Y. Kamihara, H. Hiramatsu, M. Hirano, R. Kawamura, H. Yanagi, T. Kamiya, H. Hosono, *J. AM. CHEM. SOC.* ۱۰۰۱۳-۱۰۰۱۲ (۲۰۰۶), ۱۲۸.
- [۳] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, H. Hosono, *J. AM. CHEM. SOC.*, ۱۳۰ (۲۰۰۸), ۳۲۹۷-۳۲۹۶.
- [۴] Z. Alborzi, V. Daadmehr, *Physica C: Superconductivity and its Applications*, ۵۴۹ (۲۰۱۸), ۱۱۸-۱۱۶.
- [۵] K. Kudo, T. Mizukami, Y. Kitahama, D. Mitsuoka, K. Iba, K. Fujimura, N. Nishimoto, Y. Hiraoka, M. Nohara, *Journal of the Physical Society of Japan*, ۸۳ (۲۰۱۴), ۰۲۵۰۰۱.
- [۶] S. J. E. Carlsson, F. Levy-Bertrand, C. Marcat, A. Sulpice, J. Marcus, S. Pairis, T. Klein, M. Núñez-Regueiro, G. Garbarino, T. Hansen, V. Nassif, P. Toulemonde, *Physical Review B*, ۸۴ (۲۰۱۱), ۱۰۴۵۲۳.
- [۷] C. H. Lee, A. Iyo, H. Eisaki, H. Kito, M. T. Fernandez-Diaz, T. Ito, K. Kihou, H. Matsuhata, M. Braden, K. Yamada, *Journal of the Physical Society of Japan*, ۷۷ (۲۰۰۸), ۰۸۳۷۰۴.



شکل ۳. مقاومت الکتریکی نرمالایز شده بر حسب دما برای نمونه‌ی ابرسانایی بر پایه‌ی آهن $NdFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ (نقاط آبی رنگ) و نمونه‌ی ابرسانایی بر پایه‌ی آهن $NdFeAs_{0.95}Sb_{0.05}O_{0.8}F_{0.2}$ (نقاط قرمز رنگ) همانطور که مشهود است نمونه‌ی ابرسانایی بر پایه‌ی آهن $NdFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ دمای گذار ابرسانایی از نقطه‌ی تقریبی ۶۲ درجه‌ی کلون شروع شده و در دمای ۵۰ درجه‌ی کلون به مقاومت زمینه‌ی تقریبی صفر می‌رسد و دمای گذار ابرسانایی متوسط ۵۶ درجه‌ی کلون را از خود نشان داده است. در ترکیب $NdFeAs_{0.95}Sb_{0.05}O_{0.8}F_{0.2}$ کاهش سریع مقاومت الکتریکی نمونه در دمای گذار بالایی ابرسانایی ۴۸ درجه‌ی کلون شروع و در دمای ۴۴ درجه‌ی کلون به مقدار تقریبی صفر می‌رسد. دمای گذار ابرسانایی متوسط برای این نمونه در محدوده‌ی ۴۶ درجه‌ی کلون مشاهده شد. از شکل ۳ مشهود است که هر دو ترکیب در ناحیه‌ی نرمال رفتاری فلزگونه با شیب تقریباً یکسانی را از خود نشان می‌دهند.

نتیجه‌گیری

به طور خلاصه باید یادآوری شود که نمونه‌ی ابرسانایی بر پایه‌ی آهن $NdFeAs_{0.95}Sb_{0.05}O_{0.8}F_{0.2}$ به روش واکنش حالت جامد تک‌مرحله‌ای ساخته شد. با استفاده از تحلیل الگوی پراش اشعه ایکس این نمونه‌ی آلاییده و مقایسه‌ی آن با نمونه‌ی بدون آرایش به این نتیجه رسیدیم که زوایای α و β در چهاروجهی این ترکیب نسبت به نمونه‌ی بدون آرایش به ترتیب افزایش و کاهش داشته است. پارامترهای شبکه در ساختار آلاییده نسبت به نمونه‌ی بدون آرایش کاهش داشته است. دمای گذار ابرسانایی در ترکیب آلاییده

مقایسه فراماده تراهرتز بر پایه ابررسانای دما بالا $YBa_2Cu_3O_7$ و $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$

کلهر، سمانه^۱؛ دلفان آذری، کاوه^۲، قناعت شعار، مجید^۱

^۱آزمایشگاه نانو مغناطیس و نیم رساناهای مغناطیسی، پژوهشکده لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید بهشتی، تهران

^۲گروه مهندسی برق، دانشکده مهندسی، دانشگاه کمبریج، کمبریج، انگلستان

^۳آزمایشگاه کاوندیش، دانشکده فیزیک، دانشگاه کمبریج، کمبریج، انگلستان

چکیده

در این مقاله یک فراماده تراهرتز مبتنی بر رزوناتورهای حلقه شکافته به شکل C ارائه داده شده و به مقایسه پاسخ الکترومغناطیسی فراماده ساخته شده از $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ (بیسکو) با دمای گذار ۸۵ کلوین با $YBa_2Cu_3O_7$ (ایبیکو) با دمای گذار ۸۸ کلوین پرداخته شده است. برای هر دو فراماده در پایینترین دما، در اینجا دمای ۱۰ کلوین، قویترین رزونانس را مشاهده کردیم. همانطور که دما افزایش پیدا می‌کند قدرت رزونانس کاهش پیدا می‌کند که منجر به افزایش کمینه عبور و پهنای فرکانسی رزونانس می‌شود. کوک پذیری فرکانسی نسبی برای هر دو فراماده تقریباً یکسان بدست آمد. در مقابل، فراماده ایبیکو نرخ بالاتر تغییرات کمینه عبور در نزدیکی دمای گذار را داشت. سپس به منظور تبیین بهتر پاسخ الکترومغناطیسی این دو فراماده از امیدانس سطحی بهره بردیم. این مطالعه در توسعه ادوات تراهرتزی می‌تواند راهگشا باشد.

A comparison of high- T_c superconducting $YBa_2Cu_3O_7$ and $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ THz metamaterials

Kalhor, Samane¹, Delfanazari, Kaveh^{2,3}, Ghanaatshoar, Majid¹

¹Laser and Plasma Research Institute, Shahid Beheshti University, Evin, Tehran, Iran

²Electrical Engineering Division, Engineering Department, University of Cambridge, Cambridge CB3 0FA, U.K.

³Cavendish Laboratory, University of Cambridge, Cambridge CB3 0HE, U.K.

Abstract

We report terahertz metamaterial (MM) split ring resonators made from high- T_c superconducting $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ (BSCCO) with transition temperature $T_c=85$ K and $YBa_2Cu_3O_7$ (YBCO) with $T_c=88$ K and compare their electromagnetic response at temperatures close and below T_c . As the temperature decreases, the resonance strength increases resulting in a sharp dip in the transmission versus frequency curves of both MMs. We find a resonance relative frequency tuning of around 6% for both metasurfaces. However, a larger relative transmission minimum tuning, close to T_c , is found for YBCO MM. We explain this difference by the temperature dependence surface impedance of superconducting thin films. This study may be helpful for the development of terahertz devices for bridging the terahertz gap.

PACS No. 74-78-84

تصویربرداری زیستی دارند [۲]. فراماده‌های مرسوم از موادی با رسانندگی بالا همانند طلا برای کاهش تلفات اهمی ساخته می‌شوند. در این نوع از فراماده‌ها کوک پذیری توسط مجتمع سازی با سایر موادی که قابلیت کوک پذیری دارند انجام می‌شود. در مقابل، فراماده‌های مبتنی بر ابررسانا نه تنها تلفات اهمی پایینی دارند بلکه

مقدمه

ویژگی‌های منحصر به فرد فراماده‌ها به عنوان ماده ساخت بشر از فرا-اتم‌ها این امکان را فراهم می‌کند تا این مواد قابلیت کاربری به منظور پر کردن گاف تراهرتزی را داشته باشند [۱]. ادوات تراهرتزی کاربردهای فراوانی همانند تست‌های غیر مخرب و

الکترومغناطیسی به صورت عمود و در صفحه $a-b$ بلور ابررسانا به دلیل رسانندگی بالاتر ابررسانای مس اکسید در این صفحه انتخاب شد. جهت قطبش میدان الکتریکی موج تابیده شده موازی گپ متا-اتم است. ضریب عبور فراماده در بازه فرکانسی 0.1 تا 0.8 تراهرتز در دمای 10 تا 140 کلوین با استفاده از روش المان محدود مورد بررسی قرار گرفت. ضریب گذردهی مختلط ابررسانا بیسکو از اندازه‌گیری طیف سنجی زمانی تراهرتز استخراج شد [۱۵] و برای ضریب گذردهی مختلط ایبکو از مدل معروف دو-سیال استفاده شد [۱۶].

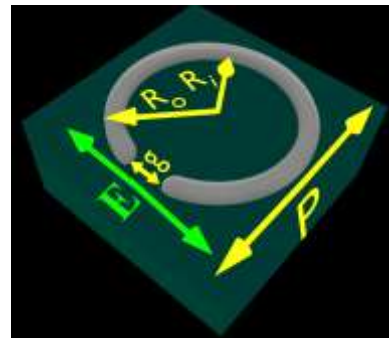
امپدانس سطحی لایه نازک این دو ابررسانا می‌تواند در فهم پاسخ متفاوت رزونانسی فراماده ساخته شده از این دو ابررسانای مس اکسید کمک کند. معادله زیر امپدانس سطحی مختلط یک لایه نازک رسانا با رسانش σ و ضخامت d را می‌دهد:

$$Z_s = R_s + iX_s = \sqrt{i\omega\mu_0/2\sigma} \coth(d\sqrt{i\omega\mu_0\sigma}) \quad (2)$$

که R_s ، X_s ، ω و μ_0 به ترتیب مقاومت سطحی، راکتانس سطحی، فرکانس زاویه ای و تراوایی خلاء هستند. مقاومت سطحی لایه نازک دو ابررسانا در شکل ۲(a) نشان داده شده است. در هر دو ابررسانا افزایش دما منجر به افزایش مقاومت سطحی می‌شود. از آنجا که کمینه ضریب عبور فراماده متناسب با مقاومت سطحی ماده سازنده تشدیدگر آن است [۱۴] انتظار می‌رود با افزایش دما این کمینه افزایش پیدا کند. همچنین این کمینه در مورد فراماده بیسکو بزرگتر از فراماده ایبکو خواهد بود زیرا همانطور که شکل ۲(a) نشان می‌دهد مقاومت سطحی بیسکو بیشتر است.

راکتانس سطحی این دو ابررسانا در شکل ۲(b) نشان داده شده است. از آنجاییکه راکتانس ماده متناسب با خودالقایی آن است و طبق رابطه $\omega_0^2 = 1/LC - R^2/4L^2$ فرکانس رزونانس (ω_0) یک تشدیدگر نسبت وارون با خودالقایی آن دارد، بنابراین تغییرات راکتانس منجر به شیفت فرکانس رزونانس می‌شود. در این رابطه R مقاومت، C ظرفیت خازنی و L خودالقایی ماده است. با توجه به راکتانس دو ابررسانا، در هر دو فراماده انتظار شیفت قرمز سپس شیفت آبی و در نهایت دوباره شیفت قرمز فرکانسی را با افزایش

دارای کوک پذیری ذاتی در پاسخ به المان‌های خارجی همچون دما، میدان مغناطیسی، جریان و غیره هستند [۳]. این کوک پذیری ذاتی ناشی از پاسخ زوجهای کوپر به این المان‌های خارجی است. تاکنون، تمامی فراماده‌های ابررسانای دمای بالا بر روی ابررسانای YBa_2Cu_3O (ایبکو) به جهت دسترسی تجاری آسان و تابع پاسخ اپتیکی (ضریب گذردهی) شناخته شده متمرکز شده‌اند [۳ و ۴]. در این مقاله برآنیم تا به مقایسه پاسخ تراهرتزی دو فراماده ساخته شده از دو نمونه مهم از ابررساناهای دما بالا مبتنی بر مس اکسید $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ (بیسکو) و YBa_2Cu_3O (ایبکو) پردازیم. دمای گذار این دو ابررسانا به ترتیب 85 و 88 کلوین است. بیسکو با ناهمسانگردی بالا به جهت ساختار بلوری خاص خود به عنوان پایه فرستنده‌های مبتنی بر پیوند جوزفسون استفاده می‌شود [۵-۱۳]. مطالعه پیشین ما بر روی فراماده بیسکو [۱۴] محرک این مطالعه و مقایسه فراماده ساخته شده از این دو ابررسانای مس اکسید بوده است.

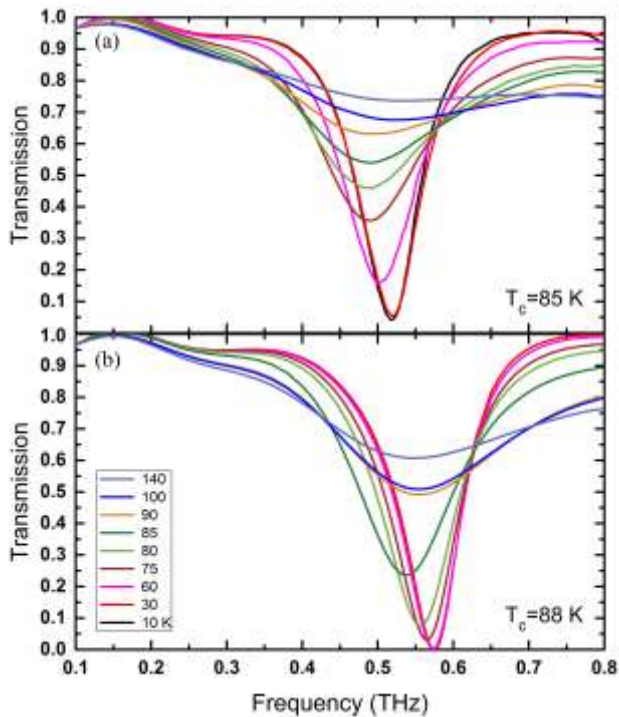


شکل ۱: فرا-اتم به شکل تشدیدگر حلقه C با شعاع داخلی $R_i = 35 \mu m$ شعاع خارجی $R_o = 40 \mu m$ اندازه گاف $g = 1 \mu m$ و تناوب $P = 90 \mu m$ بر روی زیر لایه سفایر. قطبش نور تابیده شده موازی جهت گاف انتخاب شده است.

روش

از یک تشدیدگر حلقه ای به شکل C به عنوان فرا-اتم با ضخامت $0.2 \mu m$ ، شعاع داخلی $R_i = 35 \mu m$ ، شعاع خارجی $R_o = 40 \mu m$ ، اندازه گاف $g = 1 \mu m$ و تناوب $P = 90 \mu m$ استفاده کردیم. طرحواره ای از فرا-اتم در شکل ۱ نشان داده شده است. این اعداد برای بدست آوردن بالاترین ضریب کیفیت تشدید در دمای 10 کلوین بهینه شده است. این تشدیدگر به منظور ایجاد تشدید مغناطیسی استفاده شده و آرایه‌ای از این تشدیدگرها بر روی زیرلایه از جنس سفایر در نظر گرفته شده است. جهت تابش موج

کمینه عبور افزایش پیدا می‌کند که منجر به کاهش ضریب کیفیت رزونانس می‌شود که در تطابق با افزایش مقاومت سطحی ماده است.

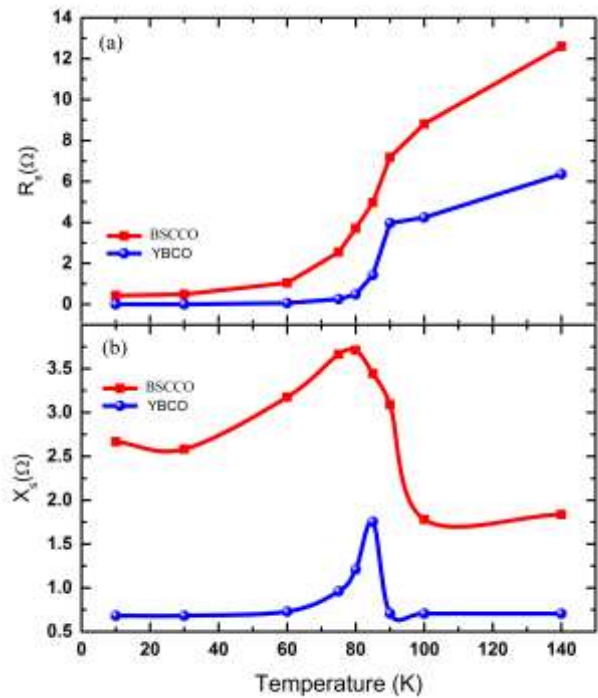


شکل ۳: منحنی ضریب عبور فراماده بر حسب فرکانس به ازای دماهای مختلف برای (a) فراماده بیسکو و (b) فراماده ایبکو.

همانطور که شکل ۴(a) نشان می‌دهد برای هر دو فراماده فرکانس رزونانس با دما شیفت پیدا می‌کند. به این صورت که در ابتدا با افزایش دما به سمت فرکانسهای پایتتر جابه جا می‌شود، سپس به سمت فرکانس های بالاتر برمی‌گردد. در مورد خاص فراماده ایبکو بالاتر از دمای گذار شاهد شیفت قرمز مجدد هستیم. این شیفت در فراماده بیسکو به دلیل میرا شدن رزونانس مشاهده نمی‌شود. همچنین فراماده ایبکو در فرکانس بالاتری رزونانس می‌دهد. تغییرات دمایی رآکتانس سطحی این روند را تایید می‌کرد.

بعلاوه، بیشینه کوک‌پذیری فرکانسی نسبی $(f_{\max} - f_{\min})/f_{\max}$ فراماده ایبکو $6/3$ درصد و فراماده بیسکو $6/5$ درصد و تقریباً برابر با فراماده ایبکو است که در اینجا f_{\min} و f_{\max} فرکانس رزونانس کمینه و بیشینه است.

دما خواهیم داشت. رآکتانس بیشتر بیسکو نشان می‌دهد فراماده مبتنی بر این ابرسانا در فرکانس کمتری رزونانس خواهد داد.



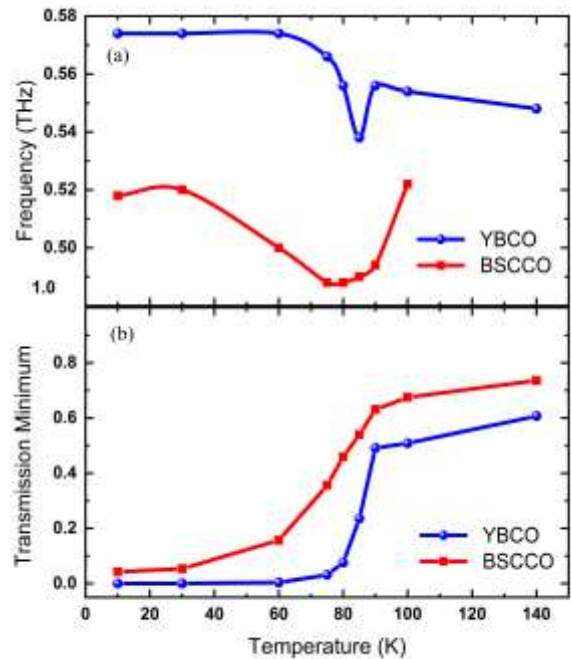
شکل ۴: وابستگی دمایی (a) مقاومت سطحی و (b) رآکتانس سطحی لایه نازک بیسکو (خط قرمز) و ایبکو (خط آبی) در فرکانس $0/5$ تراهرتز.

رفتار متفاوت امپدانس این دو ابرسانا ناشی از ساختار شبکه‌ای متفاوت و تفاوت در نحوه چگال شدن حامل های ابررسانایی در این دو ماده است. چگالی حاملهای ابررسانایی وابسته به دما است و با کاهش دما از مقدار چگالی حاملهای نرمال کاسته شده و به چگالی حاملهای ابررسانایی اضافه می‌شود. انتظار می‌رود که در نزدیک دمای صفر کلون کلیه حامل‌های ابررسانایی چگال شوند. در ایبکو به طور کامل این انتظار برآورده می‌شود اما بررسی رسانش بیسکو نشان می‌دهد که قریب به سی درصد حامل‌های بار آن چگال نشده است [۱۷].

نتایج

در شکل ۳ ضریب عبور بیسکو و ایبکو نشان داده است. این ضریب عبور به ضریب عبور سفایر نرمال شده است تا آرایه فراماده به صورت مستقل از زیرلایه در نظر گرفته شود. برای هر دو فراماده ساخته شده از ایبکو و بیسکو 10 کلون کمترین عبور کمینه (قویترین رزونانس) را دارد. با افزایش دما در هر دو فراماده

- 105 (2010) 1-4.
- [5] U. Welp, K. Kadowaki and R. Kleiner; "Superconducting emitters of THz radiation" *Nat. Photonics* **7** (2013) 702-10.
- [6] K. Delfanzari, H. Asai, M. Tsujimoto, T. Kashiwagi, T. Kitamura, T. Yamamoto, M. Sawamura, K. Ishida, C. Watanabe, S. Sekimoto, H. Minami, M. Tachiki, R.A. Klemm, T. Hattori and K. Kadowaki; "Tunable terahertz emission from the intrinsic Josephson junctions in acute isosceles triangular $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ mesas" *Opt. Express* **21** (2013) 2171-84.
- [7] K. Delfanzari, H. Asai, M. Tsujimoto, T. Kashiwagi, T. Kitamura, T. Yamamoto, M. Sawamura, K. Ishida, M. Tachiki, R.A. Klemm, T. Hattori and K. Kadowaki; "Study of coherent and continuous terahertz wave emission in equilateral triangular mesas of superconducting $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ intrinsic Josephson junctions" *Phys. C Supercond. its Appl.* **491** (2013) 16-9.
- [8] K. Delfanzari, H. Asai, M. Tsujimoto, T. Kashiwagi, T. Kitamura, K. Ishida, C. Watanabe, S. Sekimoto, T. Yamamoto, H. Minami, M. Tachiki, R.A. Klemm, T. Hattori and K. Kadowaki; "Terahertz oscillating devices based upon the intrinsic Josephson junctions in a high temperature superconductor" *J. Infrared, Millimeter, Terahertz Waves* **35** (2014) 131-46.
- [9] M. Tsujimoto, T. Yamamoto, K. Delfanzari, R. Nakayama, T. Kitamura, M. Sawamura, T. Kashiwagi, H. Minami, M. Tachiki, K. Kadowaki and R.A. Klemm; "Broadly tunable subterahertz emission from Internal Branches of the current-Voltage characteristics of superconducting $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ single crystals, *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 1-5.
- [10] K. Delfanzari, H. Asai, M. Tsujimoto, T. Kashiwagi, T. Kitamura, T. Yamamoto, W. Wilson, R.A. Klemm, T. Hattori and K. Kadowaki; "Effect of Bias Electrode Position on Terahertz Radiation from Pentagonal Mesas of Superconducting $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ " *IEEE Trans. terahertz Sci. Technol.* **5** (2015) 505-511.
- [11] K. Kadowaki, M. Tsujimoto, K. Delfanzari, T. Kitamura, M. Sawamura, H. Asai, T. Yamamoto, K. Ishida, C. Watanabe, S. Sekimoto, K. Nakade, T. Yasui, K. Asanuma, T. Kashiwagi, H. Minami, M. Tachiki, T. Hattori and R.A. Klemm; "Quantum terahertz electronics (QTE) using coherent radiation from high temperature superconducting $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ intrinsic Josephson junctions" *Phys. C Supercond. its Appl.* **491** (2013) 2-6.
- [12] T. Kashiwagi, T. Yamamoto, H. Minami, M. Tsujimoto, R. Yoshizaki, K. Delfanzari, T. Kitamura, C. Watanabe, K. Nakade, T. Yasui, K. Asanuma, Y. Saiwai, Y. Shibano, T. Enomoto, H. Kubo, K. Sakamoto, T. Katsuragawa, B. Marković, J. Mirković, R.A. Klemm and K. Kadowaki; "Efficient Fabrication of Intrinsic-Josephson-Junction Terahertz Oscillators with Greatly Reduced Self-Heating Effects" *Phys. Rev. Appl.* **4** (2015) 054018.
- [13] T. Kashiwagi, T. Yamamoto, T. Kitamura, K. Asanuma, C. Watanabe, K. Nakade, T. Yasui, Y. Saiwai, Y. Shibano, H. Kubo, K.O Sakamoto, T. Katsuragawa, M. Tsujimoto, K. Delfanzari, R. Yoshizaki, H. Minami, R.A. Klemm and K. Kadowaki; "Generation of electromagnetic waves from 0.3 to 1.6 terahertz with a high-Tc superconducting $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ intrinsic Josephson junction emitter" *Appl. Phys. Lett.* **106** (2015) 092601.
- [14] S. Kalhor S, M. Ghanaatshoar, T. Kashiwagi, K. Kadowaki, M.J. Kelly and K. Delfanzari; "Thermal Tuning of High- T_c Superconducting $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ Terahertz Metamaterial" *IEEE Photonics J.* **9** (2017) 1-8.
- [15] R. Mallozzi, J. Corson, J. Orenstein, J.N. Eckstein and I. Bozovic; "Terahertz conductivity and c-axis plasma resonance in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ " *J. Phys. Chem. Solids* **59** (1998) 2095-2099.
- [16] A. Tsiatmas, V.A. Fedotov, F. Abajo and N.I. Zheludev; "Low-loss terahertz superconducting plasmonics" *New J. Phys.* **14** (2012) 115006.
- [17] J.R. Schrieffer and J.S. Brooks; "handbook of high temperature superconductivity theory and experiment", Springer (2007) 655.



شکل ۴: (a) فرکانس رزونانس و (b) کمینه ضریب عبور در فرکانس رزونانس برای فراماده ایکو و بیسکو.

افزون بر این، شکل ۴(b) نشان می‌دهد که در مورد فراماده ایکو با افزایش دما تغییرات ضریب عبور در ابتدا بسیار کم است. این تغییرات در نزدیکی دمای گذار سرعت می‌یابد. در مقابل برای فراماده بیسکو این تغییرات روند نرمی را دارد.

نتیجه گیری

ما به مقایسه فراماده ساخته شده از تشدیدگر حلقه C شکل ایکو با بیسکو پرداختیم. کوک پذیری دمایی در هر دو فراماده مشاهده شد. فراماده بیسکو بیشینه کوک پذیری فرکانسی نسبی تقریباً برابری با بیسکو نشان داد. در مقابل کوک پذیری دمایی فراماده ایکو در نزدیک دمای گذار نرخ بالاتری نسبت به فراماده بیسکو داشت. ما انتظار داریم که این بررسی کمک به فهم مطلوبتر تفاوت های ذاتی این دو ابررسانا و توسعه ادوات تراهرتزی کند.

مرجع ها

- [1] V. Savinov, K. Delfanzari, V.A. Fedotov and N.I. Zheludev, "Giant nonlinearity in a superconducting sub-terahertz metamaterial"; *Appl. Phys. Lett.* **108** (2016) 101107.
- [2] M. Tonouchi; "Cutting-edge terahertz technology" *Nat. Photonics*, **1** (2007) 97-105.
- [3] J. Gu, R. Singh, Z. Tian, W. Cao, Q. Xing, M. He, J.W. Zhang, J. Han, H.T. Chen and W. Zhang; "Terahertz superconductor metamaterial" *Appl. Phys. Lett.* **97** (2010) 3-6.
- [4] H.Y. Chen, H. Yang, R. Singh, J.F. O'Hara, A.K. Azad, S.A. Trugman, Q.X. Jia and A.J. Taylor; "Tuning the resonance in high-temperature superconducting terahertz metamaterials" *Phys. Rev. Lett.*

بررسی تاثیر گرادیان میدان مغناطیسی بر زمان آرامش اسپین-اسپین در پروتون پریسیژن مگنتومتر

سرداری، هادی؛ محبوبیان، فائزه؛ سررشته‌داری، فرخ

آزمایشگاه تحقیقاتی تشدید مغناطیسی، دانشکده فیزیک دانشگاه تهران، انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران، ایران

چکیده

در این مقاله تاثیر گرادیان میدان مغناطیسیهای متفاوت بر زمان آرامش اسپین-اسپین هسته‌های پروتون در یک مگنتومتر پروتون پریسیژن بصورت تجربی و تئوری بررسی شده است. در این راستا یک سیستم کوئل ماکسول برای ایجاد میدان مغناطیسی با گرادیان ثابت پیاده سازی شده و از مگنتومتر پروتون پریسیژن که پیش از این برای اندازه گیری دقیق میدان مغناطیسی زمین ساخته ایم بهره برده شده است. مگنتومترهای پروتون پریسیژن براساس ساختاری که دارند به ناهمگنی در میدان مغناطیسی خارجی حساس بوده و این ناهمگنی تاثیر زیادی بر اندازه ی سیگنال آنها و زمان آرامش اسپین-اسپین آنها دارد. در این کار نتایج بدست آمده از اندازه گیریهای تجربی تاثیر گرادیان بر سیگنال NMR، با نتایج قابل انتظار از مدل تئوری مقایسه شده و مشاهده می شود که توافق بسیار خوبی بین نتایج تجربی و مقادیر قابل انتظار وجود دارد. این نتایج میتوانند در بهینه کردن ساختار سنسور پروتون پریسیژن مورد استفاده قرار بگیرند.

Investigation of the magnetic field gradient on the spin-spin relaxation time in a Proton Precession Magnetometer

Hadi Sardari, Faeze Mahboubian, Farrokh Sarreshtedari

Magnetic Resonance Research Laboratory, Department of Physics, University of Tehran, Tehran, Iran

Abstract

In this paper, the effect of different magnetic field gradients on the proton nuclei spin-spin relaxation time for a proton precession magnetometer have been experimentally and theoretically investigated. To produce a magnetic field gradient a Maxwell coil system has been implemented. Proton precession magnetometer, based on its structure, is sensitive to the inhomogeneity of external magnetic field and this inhomogeneity has a strong effect on the amplitude of the NMR signal including spin-spin relaxation time. In this work, the obtained experimental results have been compared to expected theoretical results which have a good agreement. These results could be used to optimize the configuration of proton precession sensor.

مغناطیسی ذاتی هستند که این ممان با ضریب ژیرومغناطیسی اش

متناسب است:

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{S} \quad (1)$$

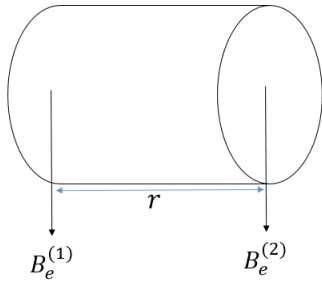
می توان نشان داد که اگر ذره‌ای با ممان دوقطبی مغناطیسی غیرصفر در یک میدان مغناطیسی خارجی قرار بگیرد، شروع به حرکت تقدیمی حول این میدان مغناطیسی با بسامد لارمور خواهد کرد:

$$\omega_L = \gamma B \quad (2)$$

مقدمه

مگنتومتر پروتون پریسیژن مگنتومتری اسکالر است که عملکرد آن بر اساس تشدید مغناطیسی هسته‌ای است (NMR) [۱]. این مگنتومتر به طور گسترده در کاربردهای مختلفی از جمله ژئوفیزیک و اندازه‌گیری میدان مغناطیسی زمین مورد استفاده قرار می‌گیرد [۲]-[۱]. این نوع مگنتومترها با استفاده از اصول مربوط به پدیده تشدید مغناطیسی هسته‌ای اساسا قادر به اندازه‌گیری تغییرات بسیار کوچک میدان مغناطیسی زمین هستند. از آنجایی که پروتون‌ها بار الکتریکی و اسپین دارند، دارای ممان دوقطبی

ثابت زمان آرامش اسپین-اسپین کاهش خواهد یافت و سیگنال پریسژن سریعتر افت می کند زیرا بسامد لارمور در نمونه مورد نظر تغییر خواهد کرد و تداخل حاصل منجر به افت سریعتر سیگنال می شود. بعد از قطبیده کردن، پروتون ها شروع به چرخش از راستایی یکسان می کنند، اگرچه به خاطر گرادیان، میدان ها در دو انتهای نمونه متفاوت اند.



شکل ۱: تفاوت میدان مغناطیسی در دو نقطه انتهایی

$$\omega_1 = \gamma_p \cdot B_e^{(1)}; \omega_2 = \gamma_p \cdot B_e^{(2)} \quad (5)$$

بعد از گذشت زمان t ، اختلاف فازی بین پروتون ها در دو سر نمونه ایجاد می شود:

$$\Delta\phi = (\omega_1 - \omega_2) \cdot t = \gamma_p \cdot (B_e^{(1)} - B_e^{(2)}) = \gamma_p \cdot \frac{\partial B}{\partial r} \cdot \Delta r \cdot t \quad (6)$$

زمانی که $\Delta\phi = \pi$ ، قطبش دو انتهای حسگر پادموازی می شوند، و سیگنال NMR به صورت قابل توجهی کاهش می یابد. با استفاده از معادله ۶، T_2 به دست می آید:

$$T_2 = \pi / (\gamma_p \cdot \frac{\partial B}{\partial r} \cdot \Delta r) \quad (7)$$

نتایج و بررسی

کوئیل ماکسول نوعی پیکربندی است که با استفاده از دو جریان یکسان و در خلاف جهت، تولید گرادیان میدان مغناطیسی می کند. این کوئیل ها شعاع یکسان R دارند و فاصله بین شان باید $\sqrt{3}R$ باشد. این پیکربندی به صورت تقریبی گرادیان میدان مغناطیسی یکنواختی را در مرکز کوئیل ها ایجاد می کند. با این ملاحظه، میدان مغناطیسی ایجاد شده کل در مرکز آن صفر می باشد و در راستای

زمانی که مایعی مملو از پروتون نظیر آب یا اتانول در میدان مغناطیسی زمین قرار گیرد، مغناطش سراسری بسیار کوچکی در امتداد میدان مغناطیسی زمین تولید خواهد شد. می توان به مایع میدانی مغناطیسی که بسیار قوی تر از میدان مغناطیسی زمین و عمود بر آن است، اعمال کرد. این میدان مغناطیسی شدیدی، مغناطشی جدید ایجاد می کند که عمود بر جهت میدان مغناطیسی زمین و بسیار قوی تر از مغناطش اولیه است. اگر ما میدان مغناطیسی شدیدی را قطع کنیم، مغناطش ثانویه شروع به حرکت تقدیمی حول میدان مغناطیسی زمین می کند. فرکانس این حرکت تقدیمی متناسب با میدان مغناطیسی زمین است. اگر ما تنها یک ذره در میدان مغناطیسی زمین داشته باشیم، این ذره تا ابد حول میدان مغناطیسی زمین حرکت تقدیمی خواهد کرد، اما به سبب آنکه با مجموعه ای از ذرات سر و کار داریم و آن ها با همدیگر اندرکنش خواهند داشت، هر ذره میدانی مغناطیسی که اندکی متفاوت از ذرات دیگر است را احساس خواهد کرد. بنابراین سیگنال هایی که از هر ذره ساطع می شوند بسامدهای لارمور متفاوتی خواهند داشت. دامنه این سیگنال ها به خاطر تداخلشان، با یک ثابت زمانی که به نام ثابت زمان آرامش اسپین-اسپین شناخته می شود، کاهش می یابد. می توان مولفه های طولی و عرضی مغناطش را تجزیه کرد. تغییر مغناطش عرضی (M_{xy}) که منجر به تولید ولتاژ می شود، با معادله زیر داده می شود:

$$\frac{dM_{xy}}{dt} = -\frac{M_{xy}}{T_2} \quad (3)$$

که در آن T_2 زمان آرامش اسپین-اسپین است. با استفاده از این معادله، وابستگی زمانی مغناطش از این طریق داده خواهد شد:

$$M_{xy}(t) = M(0) \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right) \quad (4)$$

در اینجا در حالی که از مگنتومتر پروتون پریسژن طراحی و ساخته شده مان استفاده می کنیم [۳]، تاثیر گرادیان میدان مغناطیسی را بر روی پارامتر T_2 در معادله ۴ بررسی می کنیم. بدین منظور یک سیستم کوئیل ماکسول برای اعمال گرادیان میدان یکنواخت عمود بر راستای کوئیل های مگنتومتر ساخته شده است.

تاثیر گرادیان میدان مغناطیسی خارجی

اگر گرادیان میدان مغناطیسی خارجی در اطراف حسگر تولید شود،

در شکل ۴ نحوه چیدمان ابزار آزمایش را مشاهده می کنیم که شامل دستگاه پروتون پرسیژن و همچنین کویل های ماکسول می باشد. طول سنسور شامل مخلوطی از آب و الکل ۱۵ سانتی متر بوده و آنرا به گونه ای در میان کویل ماکسول قرار می دهیم که هر دو دارای یک محور مشترک باشند. در نتیجه میدان حاصل از کویل ماکسول در مرکز سنسور صفر خواهد بود.

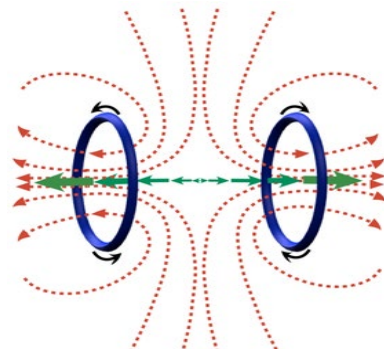
باید به این نکته توجه داشت که هر نوع ماده فرومغناطیس خود به عنوان یک منشا تولید کننده گرادیان میدان مغناطیسی خواهد بود. در نتیجه برای محدود کردن هرچه بیشتر این گرادیان های میدان ناخواسته، آزمایش را در بیرون ساختمان و در حیاط دانشکده فیزیک انجام دادیم.



شکل ۳: نحوه چیدمان ابزار آزمایش در حضور گرادیان میدان

برای بررسی وابستگی زمان آرامش اسپین-اسپین نسبت به گرادیان میدان مختلف، سیگنال پروتون پرسیژن را به ازای جریان های متفاوت گذرنده از کویل ماکسول اندازه گیری کرده ایم. شکل های (F)-(A) نتایج بدست آمده به ازای گرادیان میدان های متفاوت می باشد. مطابق انتظار با افزایش گرادیان میدان، زمان آرامش اسپین-اسپین کاهش می یابد. باید در نظر داشت که در شکل های ۵ محور عمودی دامنه ولتاژ سیگنال بدست آمده با مقیاس 2 Volt/div و محور افقی زمان برحسب ۲۰۰ میلی ثانیه در هر قسمت می باشد. ما همچنین زمان آرامش اسپین-اسپین را به صورت نظری و با استفاده از فرمول (۷) محاسبه کرده ایم. جدول ۱ مشخصه های اندازه گیری شده و مقایسه آن ها با نتایج نظری را نشان می دهد.

محور به صورت خطی به سمت خارج کویل ها تغییر می کند. شکل ۲ خطوط میدان مغناطیسی این سیستم را نشان می دهد.

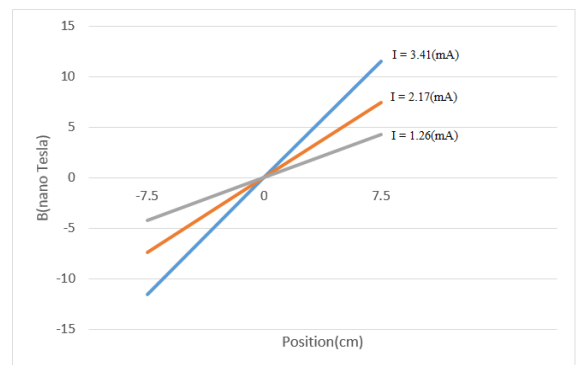


شکل ۲: خطوط میدان مغناطیسی کویل های ماکسول [۴]

باید توجه شود که اگرچه طول کویل های مگنتومتر ما حدود ۱۵ cm است، کویل های ماکسول به نحوی طراحی شده اند که خطای گرادیان میدان در دو انتهای نمونه کمتر از ۱ درصد شود. به این علت که ابعاد کویل برای چنین دقتی باید به اندازه کافی بزرگ باشد. سیستم کویل ساخته شده شعاعی برابر با $R=65$ (cm) دارد و فاصله بین کویل ها $d=115$ (cm) است. تعداد دورهای هر کویل $n=31$ بار است و برای داشتن دامنه جریان یکسان به طور سری بسته شدند. واضح است که با افزایش جریان اعمال شده به کویل ها، گرادیان میدان مغناطیسی نیز افزایش می یابد. رابطه جریان اعمال شده و گرادیان میدان ایجاد شده برابر است با:

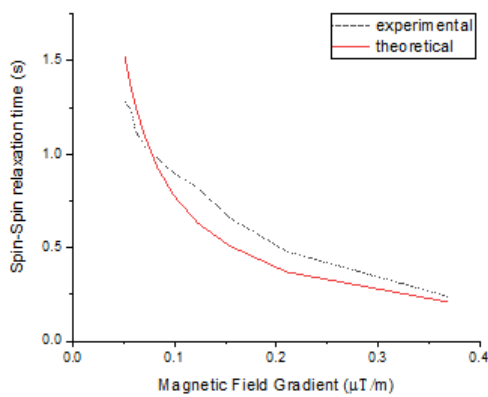
$$\frac{\partial B}{\partial r} / I = 44 \mu T / m \cdot A. \quad (8)$$

شکل ۳ تغییرات میدان مغناطیسی در طول کویل مگنتومتر را به ازای جریان های متفاوت نشان می دهد. توجه شود که میدان مغناطیسی ذکر شده باید با میدان مغناطیسی زمین که توسط مگنتومتر اندازه گیری شده بود، جمع شود.



شکل ۳: مقایسه گرادیان میدان مغناطیسی به ازای جریان های متفاوت در طول مگنتومتر

شکل ۶ تغییرات زمان آرامش را با توجه به گرادیان میدان مغناطیسی برای نتایج تجربی و نتایج بدست آمده به صورت تئوری نشان می دهد. هر دو مورد در توافق خوبی با یکدیگر بوده و تقریباً به طور یکسان رفتار می کنند. ما بر این باوریم که تفاوت جزئی بین نتایج تجربی و عملی بدلیل ناهمگنی میدان مغناطیسی زمین ناشی از حضور مواد فرومغناطیسی می باشد. همچنین با کاهش دامنه سیگنال تمایز بین سیگنال و نویز سخت تر شده سبب ایجاد خطا در محاسبه زمان آرامش اسپین-اسپین به صورت تجربی می شود.



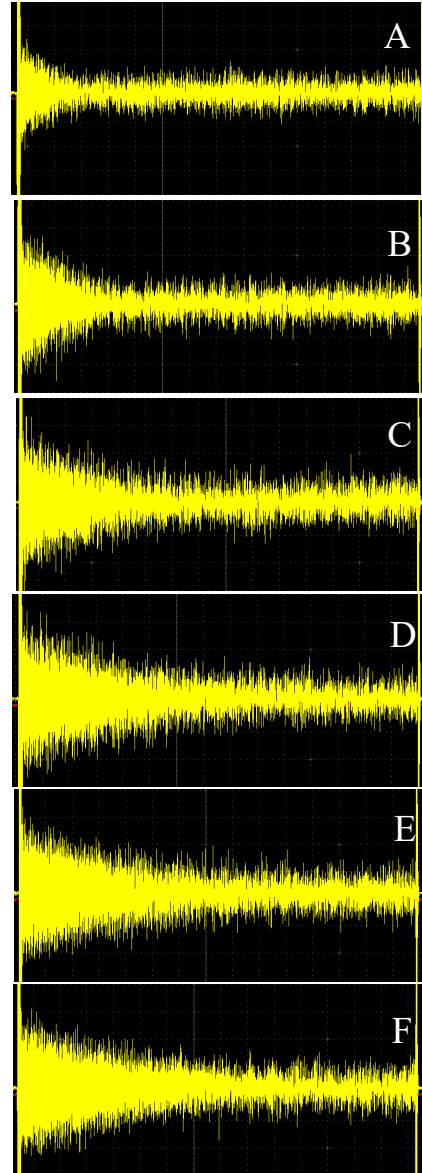
شکل ۶: تغییرات زمان آرامش اسپین-اسپین بر حسب گرادیان میدان مغناطیسی

نتیجه گیری

در این مقاله تغییر زمان آرامش اسپین-اسپین را برای گرادیان میدان مغناطیسی های متفاوت بررسی کرده ایم. در این راستا یک مگنتومتر پروتون پرسیشن برای اندازه گیری سیگنال NMR و همچنین یک سیستم کویل ماکسول برای ایجاد گرادیان میدان مغناطیسی طراحی و ساخته شده است. با بررسی نتایج تجربی و مقایسه آنها با نتایج تحلیل، توافق بسیار خوبی بین نتایج مشاهده شد به گونه ای که خطای نسبی در بدترین حالت ۰٫۳ می باشد. این نتایج به وضوح ثابت می کنند که زمان آرامش اسپین-اسپین با معکوس گرادیان میدان مغناطیسی اعمالی رابطه دارد.

مرجع ها

- [1] Pavel Ripka; "Magnetic Sensors and Magnetometer"; Artech House Publication. (2001).
- [2] Asaf Grosz, Michael J. Haji-Sheikh, Subhas C. Mukhopadhyay, "High Sensitivity Magnetometers", Springer. 2017.
- [3] F.Mahboubian and H. Sardari and S. Sadeghi and F. Sarreshtedari; "Design and Implementation of a Low Noise Earth Field Proton Precession Magnetometer"; To be accepted in ICEE2019- 27rd Iranian Conference on Electrical Engineering, Yazd (2019).
- [4] web address; <http://mriquestions.com/how-do-z-gradients-work.html>.



شکل ۵: سیگنال های بدست آمده برای گرادیان میدان متفاوت .

$$A: \frac{\partial B}{\partial r} = 0.368 \mu T/m, \quad B: \frac{\partial B}{\partial r} = 0.368 \mu T/m, \quad C: \frac{\partial B}{\partial r} = 0.368 \mu T/m, \quad D: \frac{\partial B}{\partial r} = 0.368 \mu T/m, \quad E: \frac{\partial B}{\partial r} = 0.368 \mu T/m, \quad F: \frac{\partial B}{\partial r} = 0.368 \mu T/m$$

جدول ۱: مشخصه های اندازه گیری شده تجربی و مقایسه با مقادیر تحلیلی

Case	$\frac{\partial B}{\partial r} (\mu T/m)$	$T_2(S)$ (Experiment)	$T_2(S)$ (Analysis)	Relative error
A	0.368	0.24	0.21	0.14
B	0.21	0.48	0.37	0.29
C	0.123	0.82	0.63	0.29
D	0.062	1.12	1.25	0.1
E	0.057	1.24	1.36	0.08
F	0.051	1.28	1.52	0.15

بررسی تونل زنی کوانتومی با استفاده از ضرایب آندریف در اتصال عایق توپولوژیک/ابررسانای وایل با تقارن اسپین تکتایی و تابع موج-S

نوروزی، میلاد؛ سیدیادی، جمیله

گروه فیزیک، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان

چکیده

در این پژوهش به صورت نظری به بررسی تونل زنی کوانتومی با استفاده از ضرایب بازتاب آندریف در فصل مشترک ساختار غیرمتجانس (ناهمگن) ابررسانای وایل تکتایی موج-S با حالت های سطحی عایق توپولوژیک سه بعدی پرداخته شد. با استفاده از معادله دیراک انرژی پاشندگی حامل های دیراک مربوط به سطح رسانای بدون گاف با نقاط کم انرژی دیراک در حالت های سطحی عایق توپولوژیک مورد مطالعه قرار گرفت. با استفاده از معادله دیراک-بوگولیوبوف-دوژن، هامیلتونی، انرژی پاشندگی و اسپینورهای شبه-ذرات و شبه-حفره ها محاسبه شدند. در پایان با استفاده از قابلیت تنظیم پتانسیل الکترواستاتیکی شیمیایی در هر دو طرف اتصال و اثر جابجایی بورستین ناشی از اعمال ولتاژ و به وجود آمدن حالت های n -type و p -type در دو طرف اتصال، رسانندگی ناشی از تونل زنی کوانتومی بررسی شد. نتایج نشان داد که بسته به پتانسیل نسبی دو ناحیه، رسانندگی بر حسب انرژی نزولی یا دارای تشدید می باشد.

Investigation of quantum tunneling via Andreev reflection coefficients in topological insulator/Weyl superconductor with s-wave singlet

Norouzi, Milad; Seyedyazdi, Jamileh

Department of Physics, Faculty of Science, Vali-e-Asr University of Rafsanjha, Iran.

Abstract

In the present study, we quantified the quantum tunneling using the Andreev reflection coefficients at the interface of the non-homogeneous s-wave singlet Weyl superconductor induced by proximity effect on the surface states of a three-dimensional topological insulator. Using the Dirac equation, the dispersion energy of Dirac carriers related to the gapless conductive surface with low energy Dirac points studied in topological insulating surface states. Using the Dirac-Bogoliubov-de Gennes formalism, Hamiltonian, electron-hole quasiparticle excitation energy and spinors has been calculated. Finally, based on the ability of adjusting the electrostatic chemical potential on both sides of the junction and the effect of Burstein shift due to the applied voltage, and the creation of n-type and p-type modes, conductivity due to quantum tunneling has been investigated. The result show that depends on the relative potential between two regions, conductivity versus energy is either descending or it shows a resonance peak.

PACS No. (74.20)

می کنند. نیمی از یک فرمیون دیراک باردار با یک کایرالیته مشخص، یک فرمیون وایل می باشد [۱]. فرمیون های وایل ممکن است به صورت شبه ذرات متحرک در یک سیستم ماده چگال با

مقدمه

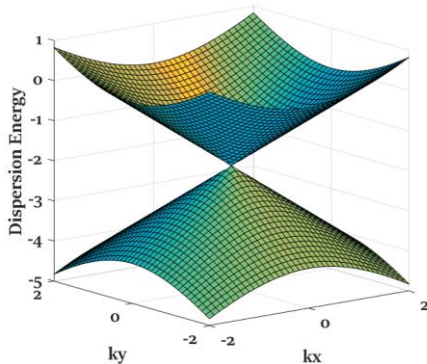
فرمیون های وایل^۱، فرمیون های کایرال بدون جرمی هستند که در نظریه میدان کوانتومی و مدل استاندارد نقش مهمی را ایفا

¹Weyl

$$\hat{H}_{TI_s}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_0(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & -H_0^*(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2)$$

که در آن $H_0(\mathbf{k}) = v_f(\sigma_x k_x + \sigma_y k_y) - \mu_N \sigma_0$ ، هامیلتونی ذرات نسیتی دیراک را در سطح دوبعدی عایق توپولوژیک توصیف می‌کند و همچنین v_f سرعت فرمی حامل‌های نسیتی دیراک است. μ_N پتانسیل الکترواستاتیکی اعمالی عایق توپولوژیک می‌باشد که قابل تنظیم است. انرژی پاشندگی عایق توپولوژیک (شکل ۱) به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\varepsilon_N^{e(h)} = \pm v_f |\mathbf{k}| - \mu_N$$



شکل ۱: انرژی پاشندگی نزدیک تقاطع دیراک روی سطح عایق توپولوژیک.

ابررسانای وایل

توصیف سیستم مربوط به ابررسانای وایل با تک مد وایل^۷ را به روش DBdG و با در نظر گرفتن حالت‌های پایه نامبو^۸ (الکترون-حفره) $\psi_{wsc}^{e(h)}(\mathbf{k}) = [\psi_{\uparrow}(\mathbf{k}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{k}) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k})]^{\dagger}$ به صورت زیر می‌توان نوشت:

$$\begin{pmatrix} v_f \sigma \cdot \mathbf{k} - \mu_s \sigma_0 & \frac{\Delta}{2} \mathbb{I} \\ \frac{\Delta}{2} \mathbb{I} & -v_f \sigma \cdot \mathbf{k} + \mu_s \sigma_0 \end{pmatrix} \psi_{wsc}^{e(h)} = \varepsilon_{wsc}^{e(h)} \psi_{wsc}^{e(h)} \quad (3)$$

که در آن σ ماتریس‌های پاولی و v_f سرعت حامل‌ها و μ_s پتانسیل شیمیایی اعمالی در منطقه ابررسانای وایل است. همچنین پارامتر نظم ابررسانایی وابسته به تقارن اسپینی و اوربیتالی جفت کوپر را با ماتریس گاف $\Delta = |\Delta_s|$ با تقارن اسپین تکتایی و تابع موج-S در نظر می‌گیریم. برانگیختگی شبه الکترون-حفره برای

انرژی کم تحقق یابند که اولین بار توسط هرینگ^۲ در زمینه‌ی ساختار نواری سیستم‌های حالت جامد مانند کریستال‌های الکترونیکی پیش‌بینی شد [۲-۴]. با توجه به توپولوژی غیر بدیهی، از نیم‌رسانای وایل انتظار می‌رود که حالت‌های الکترونی با قوس فرمی در سطح آن دیده شود [۵، ۶]. رفتار شبه فلز وایل با اثر مجاورت ابررسانا، می‌تواند تقارن معکوس زمانی را با توجه به شکست پارته در گره‌های وایل حفظ کند، که می‌توان آن را با کمک کوانتش دوم هامیلتونی دیراک-بوگولیوبوف-دوژن (DBdG)^۳ مربوط به ابررسانای وایل نوشت [۷]. در این پژوهش امکان تحقق اتصال ناهمگن حالت‌های فلزی عایق توپولوژیک با ابررسانای وایل با اسپین تکتایی موج-S و رسانندگی ناشی از تونل‌زنی کوانتومی به روش BTK^۴ با قابلیت تنظیم پتانسیل الکترواستاتیکی شیمیایی در هر دو طرف اتصال و اثر جابجایی بورستین^۵ ناشی از اعمال ولتاژ را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

مدل و فرمالیسم

حالت‌های سطحی فلزی عایق توپولوژیک

سیستم حالت‌های سطحی عایق توپولوژیک به وسیله معادله زیر توصیف می‌شود [۸].

$$H\psi(r) = E\psi(r) \quad , \quad r = (x, y, 0) \quad (1)$$

هامیلتونی مؤثر عایق توپولوژیک به دلیل وجود فرمیون‌های سنگین و جفت شدگی اسپین-مدار در توده^۶ ساختار، حالت‌های سطحی تقارن معکوس زمانی را حفظ می‌کنند و حالت‌های کایرال رسانای پایدار را در سطح عایق توپولوژیک به وجود می‌آورند. هامیلتونی مؤثر حامل‌های فرمیونی دیراک عایق توپولوژیک، در سطح و در فضای بردار موج و اسپین به صورت کلی زیر است [۹-۱۲].

² C. Herring

³ Dirac-Bogoliubov-de Gennes

⁴ Blonder-Tinkham-Klapwijk

⁵ Burstein shift

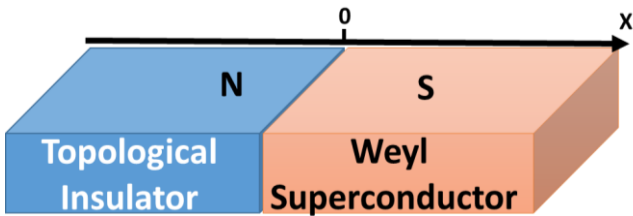
⁶ Bulk

⁷ Weyl node

⁸ Nambu basis

با استفاده از رابطه ۵ زاویه θ_s در منطقه ابررسانا برای شبه-الکترون‌ها و شبه-حفره‌ها با توجه به انرژی برانگیختگی هر کدام از آنها تعریف می‌شود.

اتصال هیبرید عایق توپولوژیک/ابررسانای وایل تابع موج-s



شکل ۳: شماتیک مربوط به ساختار عایق توپولوژیک/ابررسانای وایل.

خواص انتقال در ساختار هیبرید حالت‌های سطحی عایق توپولوژیک/ابررسانای وایل تابع موج-s بر روی یک صفحه x-y مربوط به عایق توپولوژیک مورد بررسی قرار گرفت. با توجه به شماتیک شکل ۳، عایق توپولوژیک در منطقه $x < 0$ است و همچنین قسمت ابررسانای وایل در منطقه $0 < x$ قرار دارد. در ضمن پارامتر نظم در منطقه نرمال به صفر می‌رسد. با توجه به شرایط مرزی مسأله $(\psi_N(x=0) = \psi_{wsc}(x=0))$ در نقطه $x=0$ ، انتقال الکترون (یا حفره) از ناحیه نرمال به ناحیه ابررسانایی با زاویه زیر رخ خواهد داد.

$$\theta_s = \text{ArcSin} \left[\frac{k_N^y y}{k_{wsc}^y y} \text{Sin}(\theta_e) \right]$$

با توجه به تنظیم پتانسیل شیمیایی منطقه نرمال و اعمال اختلاف پتانسیل به ساختار و اثر جابجایی، پتانسیل شیمیایی منطقه نرمال p-type و منطقه ابررسانا n-type در نظر گرفته شد.

با استفاده از شرایط مرزی می‌توان ضرایب آندریف را در فصل مشترک اتصال به صورت زیر محاسبه کرد (شکل ۴).

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta_e} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\theta_h} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + r_A \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -e^{-i\theta_h} \end{pmatrix} \\ & = t \begin{pmatrix} e^{\theta_s} \\ -e^{-\theta_s} \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} + \bar{t} \begin{pmatrix} -e^{-\theta_s} \\ -e^{-\theta_s} \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ r & = \frac{(M_4 - M_3)(e^{i\theta_e} + e^{-i\theta_h})}{M_1 M_3 - M_2 M_4} \\ r_A & = \frac{(M_4 e^{\theta_s} - M_3 e^{-\theta_s})(e^{i\theta_e} + e^{-i\theta_h})}{M_1 M_3 - M_2 M_4} - 1 \end{aligned}$$

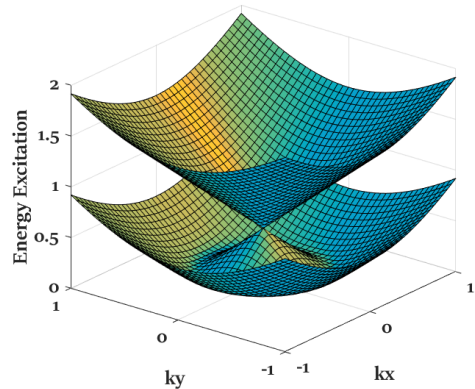
منطقه ابررسانای وایل از رابطه ۳ با توجه به این که $k_z=0$ باشد، به صورت زیر حساب می‌شود (شکل ۲).

$$\epsilon_{wsc}^{e(h)} = \zeta \sqrt{\mu_s^2 + \frac{\Delta^2}{4} + 2\eta\mu_s v_f |\mathbf{k}| + |\mathbf{k}|^2 v_f^2} \quad (۴)$$

که $\zeta = \pm$ برانگیختگی‌های شبه الکترون و شبه حفره را مشخص می‌کند و $\eta = \pm$ جداکننده نوار رسانش و نوار ظرفیت است و همچنین با در نظر گرفتن $k_z = 0$ ، $|\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ خواهد بود. پارامتر نظم مربوط به ابررسانایی در $T \rightarrow T_c$ از معادله زیر محاسبه می‌شود.

$$\Delta_{\sigma\sigma}(k) = \frac{1}{4} \sum_k \frac{V_{k-\bar{k}} \Delta_{\sigma\sigma}(k)}{\zeta \sqrt{\mu_s^2 + 2\eta\mu_s v_f |\mathbf{k}| + |\mathbf{k}|^2 v_f^2}} \tanh \left(\frac{\zeta \sqrt{\mu_s^2 + 2\eta\mu_s v_f |\mathbf{k}| + |\mathbf{k}|^2 v_f^2}}{2k_B T} \right)$$

که در آن $V_{k-\bar{k}}$ پتانسیل جفت‌شدگی جفت کوپر می‌باشد.



شکل ۲: انرژی برانگیختگی شبه الکترون و شبه حفره با پارامتر نظم ابررسانای ۰٫۲ و پتانسیل شیمیایی منطقه ابررسانا ۰٫۵.

تابع موج منطقه ابررسانای وایل شامل ترکیبی از هر دو شبه الکترون و شبه حفره به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$\begin{aligned} \psi_{wsc}^e & = \begin{pmatrix} e^{\theta_s} \\ -e^{-\theta_s} \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i(k_{wsc}^x x + k_{wsc}^y y)}, \\ \psi_{wsc}^h & = \begin{pmatrix} -e^{-\theta_s} \\ -e^{-\theta_s} \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i(-k_{wsc}^x x + k_{wsc}^y y)} \end{aligned}$$

که در آن رابطه زیر در نظر گرفته شده است

$$\cosh(\theta_s) = \frac{2\epsilon_{wsc}^{e(h)}}{\Delta_s} \quad (۵)$$

نتیجه گیری

در این پژوهش انرژی پاشندگی مربوط به ابررسانای وایل مورد بررسی قرار گرفت. در اتصال نرمال-ابررسانا با در نظر گرفتن پتانسیل شیمیایی منطقه ابررسانا به میزان $\mu_S = 1$ و $\mu_N = 0.8$ و پتانسیل شیمیایی $\mu_N = -0.95$ برای منطقه نرمال با زاویه ورودی صفر حاملها، تونل زنی کوانتومی در اتصال عایق توپولوژیک/ابررسانای وایل تابع موج-s رخ می دهد. با توجه به پتانسیل نسبی دو ناحیه، رسانندگی بر حسب انرژی نزولی یا دارای تشدید می باشد.

مرجع ها

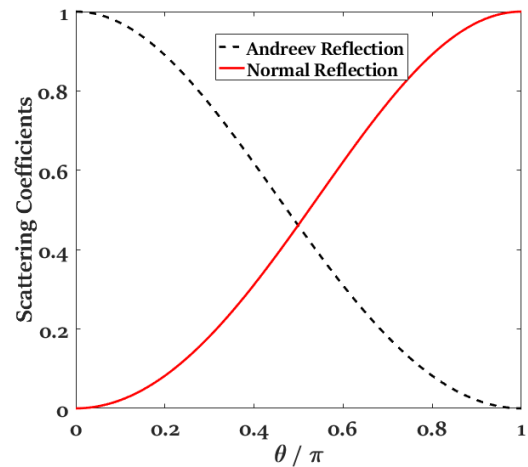
- [1] H. Weyl, "Elektron und gravitation. I", *Zeitschrift für Physik*, **56**(5-6) (1929) 330-352.
- [2] C. Herring, "Accidental degeneracy in the energy bands of crystals", *Phys. Rev.*, **52**(4) (1937) 365.
- [3] P. V. McClintock, "The Universe in a helium droplet, *Contemporary Physics* **45**(2) (2004) 187-188.
- [4] S. Murakami, "Phase transition between the quantum spin Hall and insulator phases in 3D: emergence of a topological gapless phase", *New J. Phys.*, **9**(9) (2007) 356.
- [5] S.-Y. Xu, I. Belopolski, N. Alidoust, M. Neupane, G. Bian, C. Zhang, R. Sankar, G. Chang, Z. Yuan, C.-C. Lee, "Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs", *Science* **349**(6248) (2015) 613-617.
- [6] A. Burkov, L. Balents, "Weyl semimetal in a topological insulator multilayer", *Phys. Rev. Lett.*, **107**(12) (2011) 127205.
- [7] T. Meng, L. Balents, "Weyl superconductors" *Phys. Rev. B*, **86**(5) (2012) 054504.
- [8] G. Tkachov, "Topological insulators: The physics of spin helicity in quantum transport", Pan Stanford 2015.
- [9] H. Goudarzi, M. Khezerlou, J. Alilou, "Transport Properties of Topological Insulator-Based Ferromagnet/f-Wave Superconductor Junction", *J. Supercond. Nov. Magn.*, **26**(12) (2013) 3355-3362.
- [10] H. Goudarzi, M. Khezerlou, S. Asgarifar, "Novel Majorana mode and magnetoresistance in ferromagnetic superconducting topological insulator", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **87** (2017) 155-160.
- [11] M. Khezerlou, H. Goudarzi, S. Asgarifar, "Dominant Majorana bound energy and critical current enhancement in ferromagnetic-superconducting topological insulator", *Eur. Phys. J. B*, **90**(3) (2017) 44.
- [12] J. Linder, Y. Tanaka, T. Yokoyama, A. Sudbø, N. Nagaosa, "Interplay between superconductivity and ferromagnetism on a topological insulator." *Phys. Rev. B*, **81**(18) (2010) 184525.
- [13] G. Blonder, M. Tinkham, T.M. Klapwijk, "Transition from metallic to tunneling regimes in superconducting microconstrictions: Excess current, charge imbalance, and supercurrent conversion", *Phys. Rev. B*, **25**(7) (1982) 4515.

$$M_1 = 2 \cosh(\theta_s)$$

$$M_2 = 2e^{-\theta_s}$$

$$M_3 = 1 + e^{-i\theta_n}$$

$$M_4 = e^{-i\theta_n} - 1$$

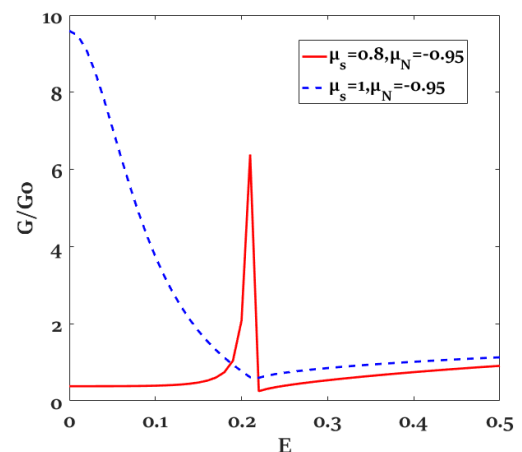


شکل ۴: ضرایب پراکندگی شبه ذرات و آندریف بر حسب زاویه ورودی شبه ذرات.

با توجه به شکل ۴، برای زاویه تابشی صفر، انعکاس آندریف با احتمال واحد اتفاق خواهد افتاد و احتمال انعکاس عادی برابر با صفر خواهد بود و در نتیجه در زاویه تابشی صفر، بیشترین مقدار رسانش را خواهیم داشت. با توجه به فرمالیسم BTK می توان رسانندگی ناشی از تونل زنی کوانتومی را در این اتصال مورد بررسی قرار داد [۱۳].

$$G(eV) = G_0 \int_0^{\theta_c} d\theta_e \cos(\theta_e) [1 + |r_A|^2 - |r|^2] \quad (6)$$

که G_0 عامل بهنجارش^۹ مربوط به اتصال نرمال می باشد.



شکل ۵: رسانندگی ناشی از تونل زنی کوانتومی با استفاده از ضرایب آندریف.

^۹Normalization Factor

گرافن عاملدار شده با گروه متیل (CH_3) به عنوان نیمرسانای مغناطیسی دو قطبی

گرگیان، حمیده؛ صفایی، رزا؛ دهقانی، سجاد

دانشکده فناوری‌های نوین، دانشگاه شیراز، شیراز

چکیده

در مقاله حاضر، به بررسی خصوصیات هندسی و الکترونی گرافن عاملدار شده با گروه (متیل) CH_3 بر پایه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی پرداخته شده است. نتایج محاسبات نشان می‌دهند که جذب گروه CH_3 روی گرافن از طریق پیوند شیمیایی کووالانسی همراه با ایجاد اعوجاج ساختاری در شبکه‌ی آن می‌باشد. این تغییرات ساختاری منجر به شکسته شدن تقارن وارونی در شبکه گرافن و از بین رفتن تنه‌گنی حالت‌های اسپینی در آن می‌شود. همچنین در حضور گروه متیل گرافن از یک نیمرسانای غیرمغناطیسی با گاف صفر به یک نیمرسانای مغناطیسی دو قطبی با گاف غیرصفر تبدیل می‌شود که درافزارهای اسپینترونیکی کاربرد زیادی دارد.

Methylated Graphene as a Bipolar Magnetic Semiconductor

Gorgian, Hamideh; Safaiee, Rosa; Dehghani, Sajjad

Faculty of Advanced Technology, Shiraz University, Shiraz

Abstract

In the present article, the geometrical and electronic properties of CH_3 functionalized (methylated) graphene are investigated based on the density functional theory. The results of calculations demonstrate that the adsorption of CH_3 onto graphene occurs via a chemical covalent bond, causing the structural distortion in the graphene lattice. Inversion-symmetry breaking of the graphene structure, due to lattice distortion, leads to spin-states degeneracy removal. Furthermore, the presence of CH_3 on graphene converts it from a nonmagnetic zero-gap semiconductor to a gapped bipolar magnetic one, having vast applications in the spintronic devices.

PACS No.68,73

مقدمه

اسپینی جریان در این دسته از مواد، نیاز به اعمال میدان مغناطیسی خارجی دارد [1]. اما از آنجایی که میدان الکتریکی، بر خلاف میدان مغناطیسی، به سادگی می‌تواند به طور جایگزیده روی تراشه تولید شود، ایجاد وارونگی در قطبش اسپینی جریان حاملها نیز با استفاده از آن در قطعات الکترونیکی مطلوب‌تر است [1-4]. دسته جدیدی از مواد که به نیمه هادی‌های مغناطیسی دو قطبی² (BMS) موسوم هستند، می‌توانند جریانهای کاملاً قطبیده‌ی اسپینی با قطبش اسپینی قابل تنظیم بوسیله اعمال یک گیت پتانسیل تولید کنند [1-4]. در این نوع نیمه هادی‌ها، نوارهای هدایت و ظرفیت از کانال‌های اسپینی مخالف هم هستند. این ساختار الکترونی منحصر بفرد مواد نیمه هادی مغناطیسی دو قطبی، امکان دستیابی به خاصیت نیم فلزی با قطبش اسپینی قابل تنظیم از طریق تغییر مقدار انرژی فرمی با اعمال گیت پتانسیل را فراهم می‌کند [1-4]. این

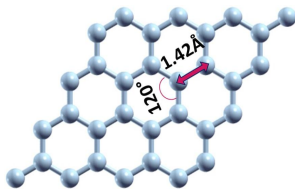
در نظر گرفتن درجه آزادی اسپینی الکترونها علاوه بر بار آنها یا تنها اسپین الکترونها در قطعات الکترونیکی منجر به ایده جدیدی به نام اسپینترونیک شده است [1-4]. از مزایای این قطعات، مصرف انرژی کم و سرعت بالاست. به دست آوردن قطعات اسپینترونیکی با کارایی بالا، با چالش‌هایی از جمله تزریق حامل‌های قطبیده‌ی اسپینی، انتقال اسپینی (قطبیده) بلندبرد، دستکاری و تشخیص موثر جهت گیری اسپینی حاملها روبه روست [1]. بنابراین شناسایی موادی که دستکاری حالت‌های اسپینی و در نتیجه جریان اسپینی امکان پذیر باشد، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. یک نوع از این مواد، نیم فلزات¹ هستند که یک کانال اسپینی فلزی و یک کانال اسپینی نیمه هادی دارند که منجر به تولید جریان کاملاً قطبیده‌ی اسپینی توسط آنها می‌شود [1]. تغییر جهت قطبش

² Bipolar Magnetic Semiconductors¹ Half Metals

همبستگی در تقریب گرادیان تعمیم یافته¹ (GGA) [11] است. علاوه بر آن، اثر برهم‌کنش‌های بلندبرد و اندروالسی از طریق بکارگیری روش Grimme DFT-D2 [12] لحاظ شده است. با توجه به تحقیقات انجام شده [13]، در جذب‌های فیزیکی و حتی شیمیایی، نتایج این روش در مورد ساختار هندسی (ارتفاع جذب، طولها و زوایای پیوندی)، انرژی جذب و خصوصیات الکترونی ترکیب حاصل به نتایج تجربی نزدیک‌تر است. ابریاخته‌ی به کار رفته در محاسبات، شامل 32 اتم کربن (ابریخته‌ی 4×4) می‌باشد که در آن فضای خالی 15 Å در راستای عمود بر صفحات گرافن، برای به حداقل رساندن برهم‌کنش بین آنها در نظر گرفته شده است. مقادیر بهینه‌ی انرژی قطع در بسط توابع موج بر حسب امواج تخت و تعداد نقاط k برای انتگرال‌گیری‌ها در منطقه اول بریلوئن به ترتیب برابر با 50 Ry و 18×18×1 بدست آمده است. برای ساختارهای مورد مطالعه، فرآیند واهلش ساختاری تا جایی که اندازه تک تک مؤلفه‌های نیروی وارد بر هر اتم کمتر از 0/001 Ry/Bohr شود، انجام شده است.

اعتبارسنجی محاسبات: گرافن خالص

ساختار هندسی ابریخته‌ی 4×4 گرافن در شکل 1 آمده است.



شکل 1: ساختار هندسی ابریخته‌ی 4×4 گرافن.

نتایج حاصل از محاسبات ما نشان می‌دهند که طولهای پیوندهای C-C و زوایای پیوندی در این ساختار، به ترتیب برابر با 1/42 Å و 120° می‌باشند که با نتایج گزارشات قبلی کاملاً مطابقت دارند [14 و 15]. تقارن وارونی موجود در صفحه گرافن $(E_+(\vec{k}) = E_+(-\vec{k}))$ به همراه تقارن تحت وارونی زمان $(E_+(\vec{k}) = E_-(-\vec{k}))$ ، تبهگنی اسپینی در هر نقطه‌ی \vec{k} از منطقه اول بریلوئن را به دنبال دارد که در ساختار نواری آن به طور واضح دیده می‌شود. بدیهی است که عواملی که باعث شکستن هر کدام از دو تقارن موجود شوند، تبهگنی اسپینی در ساختار الکترونی گرافن

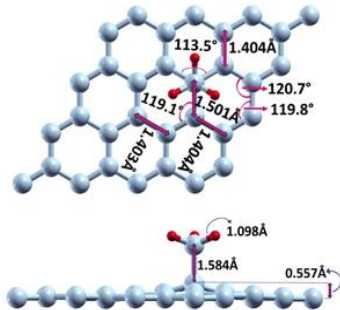
بدان معناست که تنها با تغییر علامت ولتاژ گیت (به جای اعمال میدان مغناطیسی) می‌توان جریان کاملاً قطبیده‌ی اسپینی در جهت مخالف را در مدار ایجاد کرد که منجر به ساخت قطعات اسپینترونیکی قابل کنترل به صورت الکتریکی می‌شود. علاوه بر این، برای کاربردهای عملی نانومواد کربنی مانند نانولوله کربنی، گرافان، گرافن و ... به خاطر تحرک پذیری بالای حاملها، اندازه‌های خیلی کوچک (مینیاتوری) و طولهای بلند پراکندگی اسپینی نامزدهای مطلوبی هستند [5]. اما با وجود این خصوصیات، مواد مذکور از جمله گرافن غیرمغناطیسی هستند و جریان قطبیده‌ی اسپینی را نمی‌توانند تولید کنند. برای حل این مشکل، راهکارهایی مانند ایجاد نقص در ساختار [6]، آلابیدن و یا آراییدن با عناصر فلزی مختلف (به ویژه فلزات واسطه) [7]، اصلاح شیمیایی مانند اکسید شدن یا هیدروژن‌دار کردن سطح [1 و 2 و 8] و عامل‌دار کردن سطح با گروه‌های عاملی مختلف [9] پیشنهاد شده است. بنابراین، در مقاله حاضر، با استفاده از نظریه تابعی چگالی، تأثیر جذب گروه عاملی متیل (CH_3) بر خواص هندسی و الکترونی گرافن، با توجه ویژه به قطبش اسپینی حاملها بررسی شده است. محاسبات ما نشان می‌دهند که عامل‌دار شدن گرافن با گروه عاملی CH_3 ، آن را از یک نیمه هادی غیرمغناطیسی با گاف صفر به یک نیمه هادی مغناطیسی دو قطبی با گاف غیرصفر تبدیل می‌کند.

روش محاسبات

برای بررسی ساختار الکترونی سامانه های بس ذره ای، از نظریه تابعی چگالی که بر پایه اصول مکانیک کوانتومی بنا شده است، استفاده می‌شود. محاسبات در مقاله حاضر، بر اساس این نظریه و رهیافت کوهن-شم با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو [10] انجام شده است. در رهیافت کوهن-شم با در نظر گرفتن یک سامانه‌ی کمکی غیر برهمکنشی، معادله شرودینگر بس ذره‌ای به یک معادله شرودینگر تک ذره‌ای برای سامانه کمکی تبدیل می‌شود. خواص حالت پایه سامانه‌ی بس ذره‌ای از حل معادله کوهن-شم به روش شبه پتانسیل به دست می‌آید. شبه پتانسیلهای مورد استفاده در محاسبات ما از نوع فوق نرم همراه با پتانسیل تبدالی-

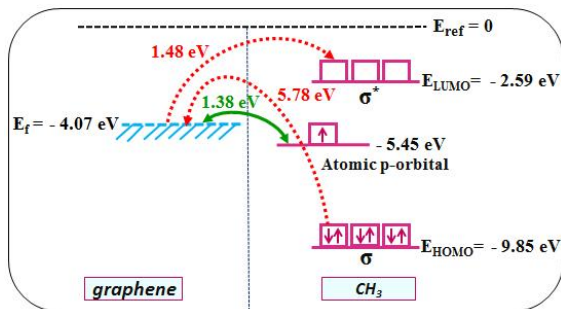
¹ Generalized Gradient Approximation

با تشکیل پیوند مذکور، هیبرید هر دو اتم کربن درگیر در پیوند از sp^2 به sp^3 تبدیل شده است.



شکل 3: ساختار واهلیده گرافن عاملدار شده با گروه متیل.

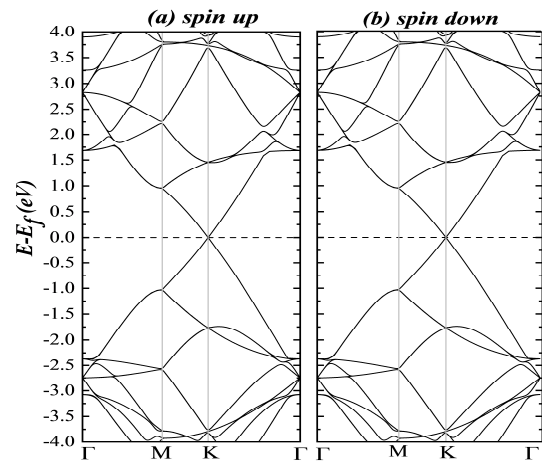
بنابراین ساختار هر دوی آنها از حالت مسطح به ساختار چهاروجهی تبدیل شده و اعوجاجی (انحراف از صفحه) به اندازه $d_z = 0.557 \text{ \AA}$ را در شبکه‌ی گرافن ایجاد کرده است. همانطور که در بخش قبل اشاره شد، شکسته شدن تقارن وارونی صفحه‌ی گرافن در اثر اعوجاج، تبهگنی اسپینی را از بین می‌برد.



شکل 4: شمایی از ترازهای انرژی گروه متیل در مقایسه با تراز فرمی گرافن.

علاوه بر این، الکترونیخواهی بیشتر کربن نسبت به هیدروژن، باعث تجمع الکترونیهای پیوندهای C-H گروه عاملی بر روی اتم کربن آن می‌شود. در نتیجه جفت الکترون پیوندی در پیوند کووالانسی اتم کربن گروه عاملی با اتم کربن گرافن، از گروه عاملی به سمت صفحه گرافن دفع شده و جابه‌جایی بار به اندازه $0.02 e$ را به دنبال دارد. این جابه‌جایی بار، در مکان جذب یک میدان الکتریکی عمود بر صفحه گرافن را ایجاد می‌کند. میدان الکتریکی به همراه اعوجاج ایجاد شده در مکان جذب، هم‌ارزی شیمیایی زیرشبکه‌های حاصل از کربن‌های نوع A و نوع B را به طور موضعی از بین برده است. تأثیر مهم عدم تقارن موضعی زیرشبکه‌ها و عدم تقارن وارونی شبکه، تشکیل گاف در ساختار نواری گرافن عاملدار (شکل 5) می‌باشد. همان طور که از شکل 5 مشاهده می‌شود،

را از بین خواهند برد. ساختار نواری به دست آمده از محاسبات ما برای گرافن به تفکیک اسپین در شکل 2 نمایش داده شده است. با توجه به شکل، ساختار نواری گرافن در دو حالت اسپینی نمایان‌گر این است که گرافن یک نیم‌رسانای غیر مغناطیسی با گاف صفر در نقطه‌ی K (شبه فلز) می‌باشد. به بیان دیگر، جریان حاصل از حامل‌های بار در گرافن خالص هیچ گونه قطبش اسپینی نخواهد داشت. این نتیجه نیز در تطابق با نتایج به دست آمده توسط دیگران است [14 و 15].



شکل 2: ساختار نواری گرافن به تفکیک اسپین.

اثر گروه متیل بر خصوصیات هندسی و الکترونی گرافن

برای شروع محاسبات در زمینه عاملدار کردن گرافن با گروه عاملی CH_3 ، با توجه به تقارنهای صفحه گرافن و احتمال بیشتر حضور الکترونیهای π در اطراف اتمهای کربن، مکان تقریبی اولیه برای قرار گرفتن عامل متیل را به این صورت به نرم افزار معرفی کردیم که اتم کربن آن در بالای یکی از اتمهای کربن در صفحه گرافن باشد. پس از انجام واهلش ساختاری، ساختار به دست آمده برای گرافن با وجود گروه عاملی CH_3 به همراه طول و زوایای پیوندی در شکل 3 نمایش داده شده است. همان طور که مشاهده می‌شود، اتم کربن متعلق به گروه عاملی و اتم کربن گرافن با به اشتراک گذاردن تک الکترونیهای خود (با اسپین مخالف)، یک پیوند کووالانسی تشکیل داده‌اند. با توجه به شمایی کیفی از ترازهای انرژی گروه CH_3 و گرافن که در شکل 4 ارائه شده است، درمی‌یابیم که نزدیک بودن تراز انرژی اوربیتال اتمی p کربن CH_3 به تراز فرمی گرافن منجر به تشکیل این پیوند کووالانسی شده است.

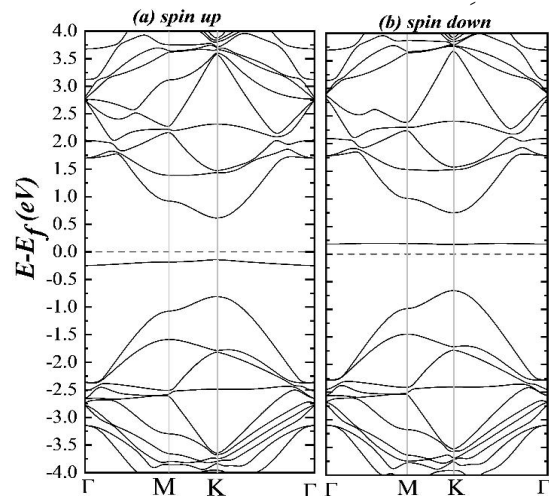
نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو و نظریه تابعی چگالی به بررسی اثر جذب گروه عاملی CH_3 بر ساختار هندسی و الکترونی گرافن پرداخته شده است. نتایج حاصل نشان می دهند که جذب این گروه عاملی تاثیر زیادی بر روی خواص الکتریکی و مغناطیسی گرافن دارد، به گونه ای که گرافن که یک نیمه هادی غیرمغناطیسی با گاف صفر است، در اثر جذب عامل CH_3 به یک نیمه هادی مغناطیسی دو قطبی تبدیل می گردد.

مرجع ها

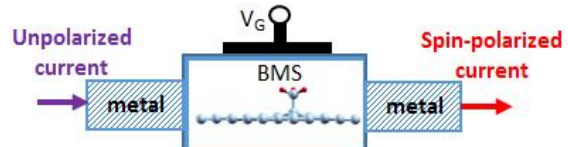
- [1] X. Li, X. Wu, Z. Li, J. Yang, J.G. Hou, "Bipolar Magnetic Semiconductors: A New Class of Spintronic Materials", *Nanoscale* **4** (2012) 5680-5685.
- [2] X. Li, J. Yang, "Bipolar magnetic materials for electrical manipulation of spin-polarization orientation", *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** (2013) 15793-15801.
- [3] L. Yuan, Zh. Li, J. Yang, "Hydrogenated bilayer wurtzite SiC nanofilms: a two dimensional bipolar magnetic semiconductor material", *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** (2013) 497-503.
- [4] J. He, G. Ding, C. Zhong, S. Li, D. Li, G. Zhang, "Cr₂TiC₂-based double MXenes: novel 2D bipolar antiferromagnetic semiconductor with gate-controllable spin orientation toward antiferromagnetic spintronics", *Nanoscale* **11** (2019) 356-364.
- [5] B. Gharekhanlou, S. Khorasani, R. Sarvari, "Two-Dimensional Bipolar Junction Transistors", *Mater. Res. Express* **1** (2014) 015604.
- [6] A.L. Ivanovskii, "Magnetic effects induced by sp impurities and defects in nonmagnetic sp materials", *Phys.-Usp.* **50** (2007) 1031-1052.
- [7] Y. Li, Zh. Zhou, P. Shen, Zh. Chen, "Spin Gapless Semiconductor-Metal-Half-Metal Properties in Nitrogen-Doped Zigzag Graphene Nanoribbons", *ACS Nano* **3** (2009) 1952-1958.
- [8] W. Chen, Y. Li, G. Yu, Ch. Li, Sh.B. Zhang, Zh. Zhou, Zh. Chen, "Hydrogenation: A Simple Approach To Realize Semiconductor-Half-Metal-Metal Transition in Boron Nitride Nanoribbons", *J. Am. Chem. Soc.* **132** (2010) 1699-1705.
- [9] Ch. Si, J. Zhou, Zh. Sun, "Half-Metallic Ferromagnetism and Surface Functionalization-Induced Metal-Insulator Transition Graphene-like Two-Dimensional Cr₂C Crystals", *ACS Appl. Mater. Interfaces* **7** (2015) 17510-17515.
- [10] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, A. Dal Corso, "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials", *J. Phys. Condens. Matter* **21** (2009) 395502.
- [11] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, "Generalized gradient approximation made simple", *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865.
- [12] S. Grimme, "Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long range dispersion correction", *J. Comput. Chem.* **27** (2006) 1787-1799.
- [13] P. Janthon, F. Viñes, S. M. Kozlov, J. Limtrakul, and F. Illas, "Theoretical assessment of graphene-metal contacts", *J. Chem. Phys.* **138** (2013) 244701.
- [14] Sh. Nasresfahani, R. Safaiee, M.H. Sheikhi, "Influence of Pd/Pd₂ decoration on the structural, electronic and sensing properties of monolayer graphene in the presence of methane molecule: A dispersion-corrected DFT study", *Surface Science* **662** (2017) 93-101.
- [15] R. Ghanbari, R. Safaiee, M.M. Golshan, "A dispersion-corrected DFT investigation of CH₄ adsorption by silver decorated monolayer graphene in the presence of ambient oxygen molecules", *Applied Surface Science* **457** (2018) 303-314.

ساختارهای الکترونی اسپین های بالا و پایین، نمایانگر نیمه هادی-هایی به ترتیب از نوع P با گاف نواری 0/75 eV و نوع N با گاف نواری 0/88 eV هستند. از ادغام این دو ساختار نواری، یک نیمه هادی با گاف 0/32 eV (گاف نواری لازم برای وارونگی اسپین) داریم که نوارهای هدایت و ظرفیت آن از کانالهای اسپینی مختلفی است. این امر می تواند ناشی از ظهور نوارهای حاصل از اوربیتال P اتمی نیمه پر گروه متیل در نزدیک انرژی فرمی باشد.



شکل 5: ساختار نواری گرافن عاملدار شده با CH_3 به تفکیک اسپین.

بنابراین گرافن همراه با گروه متیل از یک نیمه هادی غیر مغناطیسی با گاف صفر به یک نیمه هادی مغناطیسی دو قطبی تبدیل شده است. در چنین نیمه هادی های، با تنظیم میزان انرژی فرمی از طریق اعمال ولتاژ گیت (میدان الکتریکی) می توان به نیم فلزاتی با قطبش اسپینی معکوس پذیر دست یافت. به عبارت دیگر، گرافن همراه با گروه متیل، در مدارات الکترونیکی به مثابه یک فیلتر اسپینی اثر-میدانی دو قطبی (شکل 6) رفتار می کند.



شکل 6: طرحی از یک فیلتر اسپینی اثر-میدانی دو قطبی.

در این افزاره، ماده BMS بین دو لایه فلزی با مسافت پراکندگی اسپینی زیاد ساندویچ می شود. اعمال ولتاژ گیت مثبت به BMS سبب کاهش انرژی فرمی و تولید جریان کاملاً قطبیده اسپینی با اسپین بالا می شود و برعکس.

آشکارسازی بایاس تبادلی در نمونه $Ni_{80}Fe_{20}$ اکسید شده در بازه دمایی ۱۸ تا ۳۰۰ کلوین

کنه، نرجس^۱؛ شافعی، مهدی^۲؛ طهرانچی، محمدمهدی^۱

^۱دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی، ولنجک، تهران

^۲پژوهشکده لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید بهشتی، ولنجک، تهران

چکیده

به دلیل وابستگی شدید خواص مغناطیسی به دما، مطالعات وسیعی در این زمینه انجام شده است. در این مقاله، به جهت مشخصه‌یابی مواد مغناطیسی در دمای پایین، یک سیستم اپتیکی بر پایه‌ی اثر مغناطو نوری کر طولی، طراحی شده است که در آن از یک دستگاه سرماساز سیکل بسته‌ی هلیومی، جهت پایین آوردن دما استفاده می‌شود. اثر دما بر روی حلقه‌های پسماند اثر مغناطو نوری کر طولی نمونه‌ی پرمالوی ($Ni_{80}Fe_{20}$)، از دمای اتاق تا دمای ۱۸ کلوین بررسی شده و تغییرات میدان وادارندگی، بر حسب دما بر اساس بایاس تبادلی بحث شده است.

Exchange Bias Detection in oxidized $Ni_{80}Fe_{20}$ in temperature range of 18 K to 300K

Konh, Narjes¹; Shafei, Mahdi²; Tehranchi, Mohammad Mahdi^{1,2}

¹ Department of Physics, University of Shahid Beheshti, Tehran

² Laser and Plasma institute, University of Shahid Beheshti, Tehran

Abstract

Due to the strong dependence of magnetic properties on the temperature, this subject has been extensively studied. In this paper, for characterizing the materials at low temperature, an optical system based on the Magneto-optical Kerr Effect (MOKE) is designed, in which, a closed-cycle Helium Cryostat is used to lower the temperature. The effect of temperature variations on the MOKE hysteresis loops of a Permalloy sample ($Ni_{80}Fe_{20}$), from room temperature up to 18 K is investigated, and coercive field changes due to the temperature variations, based on exchange bias are discussed.

PACS No. 75.30.Et, 75.30.Gw, 75.30.Sg, 75.50.-y, 75.50.Bb, 75.60.Ej, 07.20.Mc

چیدمان تجربی اثر مغناطو نوری کر طولی

چیدمان اپتیکی کر طولی شامل، لیزر دیودی mW ۵ میلی‌وات، منشور گلن-تیلور، منشور ولاستون، سه عدسی با فاصله کانونی 10 cm ، دو آشکارساز مشابه، الکترومگنت با هسته‌های آهنی، تقویت کننده قفل شونده^۱ و منبع تغذیه قابل کنترل است. بخش‌های تقویت کننده قفل شونده، منبع تغذیه و کامپیوتر با کابل‌های $GPIB$ و رابط PCI به هم متصل‌اند. همچنین لیزر و آشکارسازها با کابل‌های BNC به تقویت کننده قفل شونده متصل هستند و داده‌ها با برنامه‌ی لب‌ویو کنترل می‌شوند. چیدمان کر طولی در شکل ۱ نشان داده شده است.

مقدمه

مواد مغناطیسی، اغلب در دماهای پایین و یا بالا، رفتاری از خود بروز می‌دهند که کاملاً متفاوت از رفتار آن ماده در دمای اتاق است. پس دانستن اینکه مواد مغناطیسی در محدوده دمایی که مورد استفاده قرار می‌گیرند، چطور رفتار می‌کنند، حائز اهمیت است. یکی از روش‌های مشخصه‌یابی مواد در دماهای مختلف، اثر مغناطو نوری کر است. نمونه‌ی مورد بررسی، فیلم نازک پرمالوی ($Ni_{80}Fe_{20}$)، با ضخامت ۴۰ نانومتر با زیرلایه‌ی سیلیکون بدون لایه محافظ در برابر اکسید شدن است. به دلیل فیلم نازک بودن، و ناهمسانگردی شکلی، پیشینی می‌شود مغناطش نمونه در صفحه‌ی فیلم باشد، بنابراین، چیدمان کر در هندسه طولی مورد استفاده قرار گرفته است.

^۱Lock-in amplifier

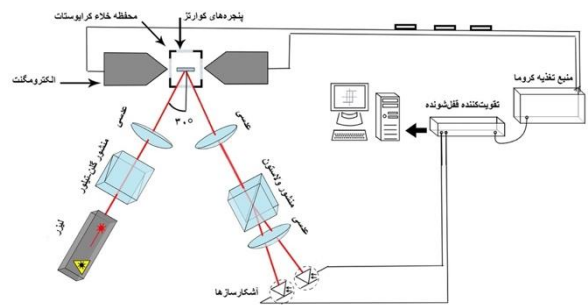
داشتن دما با دقت $0,1$ کلوین در دماهای پایین و با دقت 1 کلوین در دماهای بالاتر از 80 کلوین را فراهم می‌سازد.

نتایج و بحث

از بررسی حلقه‌های پسماند و نمودار H_C بر حسب دما، سه پدیده مشاهده می‌شود:

- (۱) با کاهش دما از دمای اتاق تا دمای 30 کلوین، H_C افزایش یافته و با کاهش دما از دمای 30 کلوین، H_C کاهش می‌یابد (شکل ۲). این بیشینه، در دمای 30 کلوین در شکل ۳ نشان داده شده است.
- (۲) در شکل ۲، یک جابجایی در راستای محور میدان به سمت چپ در منحنی‌های پسماند، مشاهده می‌شود که تقریباً از محدوده 30 کلوین آغاز شده و با کاهش دما، این جابه‌جایی افزایش می‌یابد. شکل ۴، منحنی جابه‌جایی حلقه‌های پسماند با کاهش دما از دمای 30 کلوین را نمایش می‌دهد.
- (۳) در منحنی‌های پسماند، بعد از دمای 30 کلوین، نمودارها به آرامی شکل مربعی خود را از دست می‌دهند (شکل ۵).

همانطور که گفته شد، در حلقه‌های پسماند، یک جابجایی در راستای محور میدان به سمت چپ و همچنین افزایش H_C با کاهش دما، مشاهده شده است. این جابجایی و افزایش H_C می‌تواند از مشخصه‌های بایاس تبادلی باشد. بایاس تبادلی در سیستم‌هایی مشاهده می‌شود که یک فیلم نازک فرومغناطیس در تماس با یک لایه‌ی پادفرومغناطیس قرار گیرد. هنگامی که چنین ساختاری با مغناطش ثابت شده‌ی فرومغناطیس، از دماهای بالا سرد می‌شود، اسپین‌های پادفرومغناطیس، از طریق نیروهای تبادلی، خودشان را هم‌راستا با جهت اسپین‌های فرومغناطیس موجود خواهند کرد. از آنجایی که پادفرومغناطیس، ممان مغناطیسی خالصی ندارد، حداقل در تقریب اول با میدان مغناطیسی برهمکنش نمی‌کند و حلقه‌ی پسماند در امتداد محور میدان جابه‌جا می‌شود [۱].

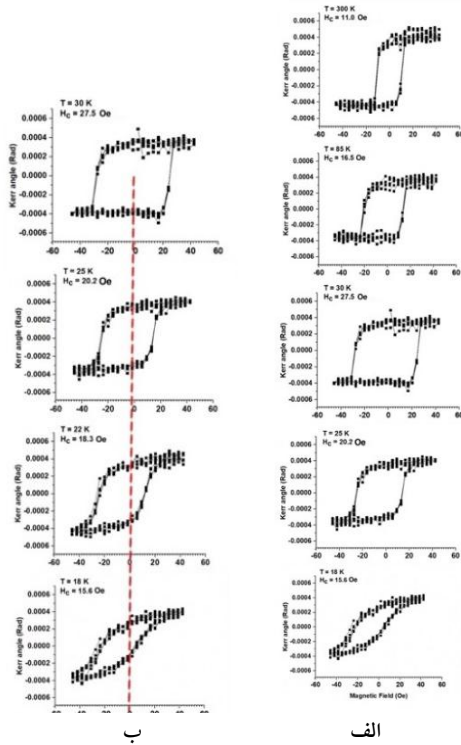


شکل ۱: چیدمان اثر مغناطی نوری کر طولی

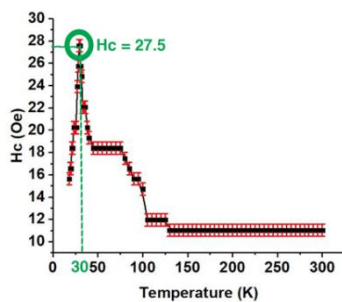
در این چیدمان، زاویه‌ی پرتو فرودی به سطح نمونه، 30° است. برای تولید میدان مغناطیسی از الکترومگنتی که توانایی تولید میدان تا $0,3$ تسلا را دارد، استفاده می‌شود و توسط منبع تغذیه قابل کنترل، تغذیه می‌شود. مقاومت سیم‌پیچ‌های این الکترومگنت 25 اهم است و برای ارتقای دقت و تفکیک‌پذیری اندازه‌گیری، سه مقاومت 10 اهم با سیم‌پیچ‌های الکترومگنت سری شده است. نمونه بین دو هسته‌ی الکترومگنت و در محفظه‌ی دستگاه سرماساز قرار دارد و با اعمال میدان مغناطیسه می‌شود. برای مدولاسیون لیزر، با استفاده از تقویت‌کننده قفل‌شونده، یک موج مرجع سینوسی با دامنه 5 ولت و فرکانس 922 هرتز روی پرتو لیزر سوار می‌شود. پرتو لیزر مدوله شده پس از عبور از منشور گلن-تیلور، قطبیده‌ی خطی شده و از یک عدسی عبور کرده و روی نمونه کانونی می‌شود. پرتو بازتابیده از نمونه‌ی مغناطیسه، از طریق عدسی مجاورش موازی شده و سپس از منشور ولستون عبور می‌کند و به علت چرخش قطبش نور، به دو پرتو با شدت‌های متفاوت تبدیل می‌شود. هر دو پرتو توسط یک عدسی روی دو آشکارساز متمرکز می‌شوند. شدت هر دو پرتو در آشکارسازها ثبت شده و توسط تقویت‌کننده قفل‌شونده که در مد تفاضلی $A-B$ قرار دارد، خوانده می‌شوند. کامپیوتر سیستم را توسط برنامه لب ویو کنترل کرده و داده‌ها را پردازش و ذخیره می‌کند. با استفاده از این چیدمان کر و همچنین دستگاه سرماساز، می‌توان از دمای اتاق تا دمای 18 کلوین را اندازه‌گیری کرد.

دستگاه سرماساز، یک یخچال سیکل بسته‌ی هلیومی بر پایه‌ی تراکم و انبساط گاز هلیوم، در محدوده دمای 18 کلوین تا دمای اتاق می‌باشد که با استفاده از کنترل‌کننده‌ی دما، قابلیت ثابت نگه

باعث یک انرژی اضافی شده و H_C افزایش می‌یابد. رفتاری مشابه در میدان برعکس مشاهده می‌شود. در این صورت، میدان مغناطیسی مورد نیاز برای برگشتن مغناطش در هر دو شاخه‌ی مثبت و منفی بزرگتر شده و حلقه‌ی پسماند پهن‌تر می‌شود. این روند تا دمای ۳۰ کلوین ادامه دارد و با کاهش دما، H_C افزایش می‌یابد.



شکل ۲: الف) افزایش H_C از دمای اتاق تا ۳۰ کلوین و کاهش آن از دمای ۳۰ تا ۱۸ کلوین. ب) مقایسه‌ی جابجایی منحنی پسماند به سمت چپ در دماهای پایین‌تر از ۳۰ کلوین



شکل ۳: منحنی H_C بر حسب دمای نمونه‌ی پرمالوی ($Ni_{80}Fe_{20}$)

نمونه‌ی پرمالوی اندازه‌گیری شده، یک فیلم نازک $Ni_{80}Fe_{20}$ به ضخامت ۴۰ نانومتر با زیرلایه‌ی سیلیکون است. اما این نمونه، مدت زیادی بدون حفاظ در معرض هوا قرار گرفته است و یک لایه اکسید نیکل NiO ، روی سطح نمونه تشکیل شده است و جفت‌شدگی تبدلی شدیدی را نشان می‌دهد. در گزارشات چاپ شده، در نمونه‌ی پرمالوی بدون اکسید، هیچ نشانه‌ای از جابجایی حلقه‌ی پسماند مشاهده نشده است. به این ترتیب، نتایج به دست آمده، مشخصه‌ی فیلم پرمالوی نیستند بلکه برهمکنش با اکسید سطح را نمایش می‌دهند [۷-۲]. اکسید نیکل NiO در سطح، مانند مجموعه‌ای از ذرات پادفرومغناطیس کوچک هستند، که هرکدام تنها با فیلم فرومغناطیس برهمکنش می‌کنند و حساس به سرعت نوسان‌های گرمایی در بالای دمای انسداد^۲ هستند [۲, ۳]. وجود پدیده‌ی بایاس تبدلی رابطه‌ی نزدیکی با نظم مغناطیسی پادفرومغناطیس دارد، از این رو با افزایش دما تا دمای نیل اکسید و یا پایین‌تر از آن، اثرهای بایاس تبدلی ناپدید می‌شوند. دمایی که میدان بایاس تبدلی در آن صفر می‌شود، $H_E = 0$ یا به بیان دیگر، دمایی که دیگر در آن جابجایی حلقه‌ی پسماند نداریم، به عنوان دمای انسداد T_B شناخته شده است، یعنی در این دما ممان‌های مغناطیسی پادفرومغناطیس ثابت (مسدود) خواهند شد. بنابراین در نمونه‌ی پرمالوی اکسیدشده، دمای انسداد در نزدیکی ۳۰ کلوین قرار دارد که جابجایی حلقه‌ی پسماند H_E تقریباً از آن دما شروع شده و با کاهش دما، افزایش می‌یابد.

در دماهای خیلی بالاتر از دمای انسداد، مثلاً در محدوده‌ی دمای اتاق، نظم پادفرومغناطیس، از بین می‌رود و به پارامغناطیس تبدیل می‌شود و اثرشان بر روی فیلم فرومغناطیس ضعیف می‌شود. پس ممان‌های فرومغناطیس به راحتی با اعمال میدان معکوس، می‌چرخند و پدیده‌ی بایاس تبدلی در آن دیده نمی‌شود و H_C نزدیک به میدان وادارندگی زیرلایه‌ی فرومغناطیس است.

با کاهش دما از دمای اتاق تا بالاتر از دمای انسداد، با اعمال میدان مغناطیسی معکوس، اسپین‌ها در فرومغناطیس شروع به چرخیدن می‌کنند، همچنین اسپین‌های پادفرومغناطیس توسط اسپین‌های فرومغناطیس کشیده می‌شوند و با هم می‌چرخند که

²Blocking temperature

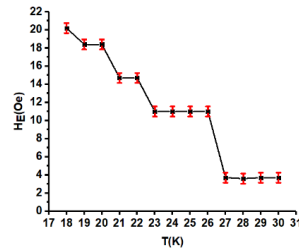
با اعمال میدان مغناطیسی خارجی به نمونه، فرآیند تغییر مغناطش از طریق حرکت دیوار حوزه‌ها، آغاز می‌شود. این حرکت‌ها، هنگام مواجه شدن با نقص‌های ماده نامنظم می‌شوند و باعث تغییر شکل حلقه‌ی پسماند در دماهای پایین شده و شکل مربعی خود را از دست می‌دهد. همچنین ممکن است، نمونه دارای ناهمسانگردی باشد که جهت آن با جهت میدانی که نمونه در آن سرد شده و جهت میدان اعمالی در طول اندازه‌گیری حلقه‌های پسماند، متفاوت است و این باعث خارج شدن حلقه‌های پسماند از حالت مربعی در دماهای پایین می‌شود [۱].

نتیجه گیری

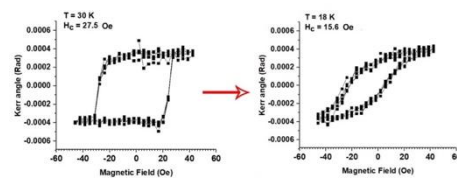
در این مقاله، به اندازه‌گیری اثر مغناطو نوری کر نمونه‌ی پرمالوی $Ni_{80}Fe_{20}$ ، از دمای اتاق تا ۱۸ کلوین، پرداخته شده و نمودارهای H_C و H_E بر حسب دمای این نمونه بررسی شده است. نمودار H_C ، یک رفتار دمایی غیر عادی نشان می‌دهد، همچنین در دماهای پایین حلقه‌های پسماند، شکل مربعی خود را از دست می‌دهند و یک جابه‌جایی در طول محور میدان مغناطیسی دیده می‌شود. بررسی و تحلیل داده‌های دما پایین، نشان می‌دهد که روی سطح نمونه یک لایه NiO تشکیل شده است و دلیل این رفتارهای دمایی، سطح اکسید شده است که پدیده‌ی بایاس تبادلی را رقم می‌زند. از این روش می‌توان برای تشخیص اکسید شدن سطح مغناطیسی استفاده کرد.

مرجع‌ها

1. Nogués, J., et al., *Exchange bias in nanostructures*. Physics reports, 2005. **422**(3): p. 65-117.
2. Fulcomer E, Charap S. Temperature and frequency dependence of exchange anisotropy effects in oxidized NiFe films. *Journal of applied physics*. 1972;43(10):4184-90.
3. Fulcomer E, Charap S. Thermal fluctuation aftereffect model for some systems with ferromagnetic- antiferromagnetic coupling. *Journal of applied physics*. 1972;43(10):4190-9.
4. Lin T, Tsang C, Fontana RE, Howard JK. Exchange-coupled ni-fe/fe-mn, ni-fe/ni-mn and nio/ni-fe films for stabilization of magnetoresistive sensors. *IEEE transactions on magnetics*. 1995;31(6):2585-90.
5. Khapikov A, Harrell J, Fujiwara H, Hou C. Temperature dependence of exchange field and coercivity in polycrystalline NiO/NiFe film with thin antiferromagnetic layer: Role of antiferromagnet grain size distribution. *Journal of applied physics*. 2000;87(9):4954-6.
6. Charap S, Fulcomer E. Magnetic Aftereffect in Oxidized Ni-Fe Films. *Journal of applied physics*. 1971;42(4):1426-8.
7. Carey M, Berkowitz A. Exchange anisotropy in coupled films of $Ni_{81}Fe_{19}$ with NiO and $Co \times Ni_{1-x}O$. *Applied Physics Letters*. 1992;60(24):3060-2.



شکل ۴: منحنی جابه‌جایی حلقه‌های پسماند. با کاهش دما از دمای ۳۰ کلوین، جابه‌جایی حلقه‌ی پسماند افزایش می‌یابد.



شکل ۵: با کاهش دما از دمای ۳۰ کلوین تا ۱۸ کلوین، منحنی پسماند شکل مربعی خود را از دست می‌دهند.

در دماهای به اندازه‌ی کافی پایین، یعنی زیر دمای انسداد، در محدوده‌ی ۳۰ کلوین، اسپین‌های سطح پادفرومغناطیس نمی‌توانند همراه با اسپین‌های فرومغناطیس بچرخند و ذرات پادفرومغناطیس، ثابت می‌شوند. با اعمال میدان مغناطیسی معکوس، اسپین‌های فرومغناطیس شروع به چرخیدن می‌کنند، در حالی که اسپین‌های پادفرومغناطیس، ثابت خواهند ماند. در نتیجه به دلیل جفت‌شدگی در سطح مشترک، یک گشتاور میکروسکوپی به اسپین‌های فرومغناطیس وارد می‌شود و سعی می‌کند آن‌ها را در موقعیت اصلی نگه دارد. پس نیاز به یک میدان مغناطیسی اضافی برای غلبه بر گشتاور میکروسکوپی اعمال شده توسط اسپین‌های پادفرومغناطیس، دارد و میدان وادارندگی، H_C ، در شاخه‌ی میدان منفی افزایش می‌یابد. برعکس، زمانی که میدان مغناطیسی به مقادیر مثبت برمی‌گردد، چرخش اسپین در فرومغناطیس راحت‌تر است، زیرا اسپین‌های پادفرومغناطیس یک گشتاور میکروسکوپی در جهت مشابه با میدان اعمال خواهد کرد. پس میدان وادارندگی، H_C ، در شاخه‌ی میدان مثبت کاهش خواهد یافت. در نهایت اثر خالص، یک جابه‌جایی حلقه‌ی پسماند در طول محور مغناطیسی، به سمت چپ خواهد بود. بنابراین، با توجه به استدلال بایاس تبادلی که به دلیل اکسید شدن نمونه اتفاق می‌افتد، توانستیم رفتار بیشینه غیرعادی نمونه‌ی پرمالوی را توجیه کنیم.

ساخت فریت لیتیوم به روش مکانوشیمیایی و بررسی ویژگی های مغناطیسی آن

اسلامی فر^۱، رضا^۱؛ مظفری، مرتضی^۲

^۱ گروه فیزیک، دانشگاه اصفهان

^۲ گروه فیزیک، دانشگاه اصفهان

چکیده

در این پژوهش فاز منظم فریت لیتیوم (α -LiFe₅O₈) با روش مکانوشیمیایی دو مرحله‌ای، با پودرهای آهن، کربنات لیتیوم و پخت در دمای °C ۱۰۰۰ به مدت دو ساعت تهیه شد. دمای کوری، مغناطش اشباعی و نیروی وادارندگی به ترتیب °C ۶۲۰، ۶۳ emu/g و ۱۰ Oe به دست آمد که با مقدارهای به دست آمده برای فریت لیتیوم کپه‌ای در پژوهش‌های پیش‌هم-خوانی خوبی دارد. برتری این روش با روش متداول سرامیکی، کاربرد پودر آهن به جای اکسید آهن است که معمولا در این روش به کار برده می‌شود. این به دستیابی به فاز منظم فریت لیتیوم در دمای برشتن °C ۱۰۰۰ می‌انجامد که نسبت به دمای معمول برشتن در روش متداول سرامیکی (°C ۱۲۰۰) پایین‌تر است.

Synthesis of Lithium Ferrite by Mechanochemical Method and Investigation on its Magnetic Properties

Eslamifar, Reza¹; Mozafari, Morteza²

¹ Department of Physics, University of Isfahan

² Department of Physics, University of Isfahan

Abstract

In this research, order phase of lithium ferrite (α -LiFe₅O₈) were prepared via two steps mechanochemical processing with Fe and Li₂CO₃ powders and subsequent heat treatment at 1000°C for two hours. Curie temperature, magnetic saturation and coercive force obtained 620°C, 63 emu/g and 10 Oe respectively. These values have good agreement with bulk lithium ferrite in literature. The advantage of this method to conventional is application of iron powder instead of Fe₂O₃ that is usually used in this method. It is about to reach order phase of lithium ferrite in calcination temperature of 1000°C which is less than the usual calcination temperature in conventional method (; 1200°C).

مقدمه

برای گارنت‌ها و فریت‌های اسپینلی دیگر در ابزارهای ریزموجی و همچنین به عنوان ماده اولیه در گسترش فناوری ساخت قوس پلاسما مورد توجه قرار گرفته است [۲]. با توجه به حساسیت به تنش و هزینه‌ی ساخت و همچنین تلفات مغناطیسی کمتر و آستانه قدرت بالا، فریت لیتیوم نسبت به گارنت‌ها برتر است [۳]. فریت لیتیوم در دو ساختار اسپینلی فاز منظم (α) و نامنظم (β) متبلور

فریت‌های اسپینلی به سبب داشتن ویژگی‌های الکتریکی و مغناطیسی ویژه کاربردهای بسیاری در زمینه‌های گوناگون از جمله ابزارهای ریزموجی، حسگرها و حافظه‌های مغناطیسی دارند [۱]. فریت لیتیوم با فرمول شیمیایی LiFe₅O₈ به عنوان جایگزینی

الگوی بیناب جذبی فرسرخ (FT-IR) نمونه با یک دستگاه بیناب‌سنج ساخت شرکت JASCO ژاپن ثبت شد. منحنی پسماند نمونه با یک دستگاه مغناطش‌سنج نمونه مرتعش ساخت شرکت Lake Shore Cryotronics آمریکا رسم و پارامترهای مغناطیسی نمونه به دست آمد. منحنی تغییرات مغناطش برحسب دمای نمونه برای اندازه‌گیری دمای کوری با یک ترازوی حساس فارادی و ترموکوپل در یک میدان مغناطیسی ناچیز ($\approx 50 \text{ Oe}$) رسم و داده‌ها با نرم‌افزار CassyLab ساخت شرکت LeyBold آلمان ثبت شدند.

نتایج و بحث‌ها

شکل ۱ الگوی پراش پرتو ایکس نمونه پس از پخت در دمای $^{\circ}\text{C}$ ۱۰۰۰ را نشان می‌دهد. همان‌گونه که دیده می‌شود افزون بر قله‌های پراش صفحه‌های (۲۲۰)، (۳۱۱)، (۴۰۰)، (۴۲۲) و ... ساختار اسپینلی، قله‌های دیگری نیز وجود دارد که مربوط به ویژگی ساختاری فاز منظم فریت لیتیوم ($\alpha\text{LiFe}_5\text{O}_8$) است. این قله‌های پراش صفحه‌های مربوط به: (۲۱۰)، (۲۱۱)، (۲۲۱)، (۳۱۰)، (۳۲۰)، (۳۲۱)، (۳۰۰)، (۴۲۱)، (۴۳۱) و ... است که در میان آن‌ها قله‌های (۲۱۰)، (۲۱۱) و (۴۲۱) پر شدت‌تراند. این الگو نشان از تک فاز بودن نمونه‌ی تهیه شده است. میانگین اندازه بلورک‌ها پیرامون ۲۴۰ نانومتر و ریزکرنش $10^{-4} \times 4/7$ با رابطه ویلیامسون-هال برآورد شد.

می‌شود [۴]. روش‌های تهیه‌ی گوناگونی برای دست‌یابی به ساختارهای بلورین منظم یا نامنظم فریت لیتیوم وجود دارد [۵]. معمولاً تهیه‌ی فریت لیتیوم به روش مرسوم سرامیکی با پخت دوگانه صورت می‌گیرد که مخلوط اکسید آهن و کربنات لیتیوم با واکنش حالت جامد در دمای نسبتاً بالا ($^{\circ}\text{C}$ ۱۲۰۰) واکنش می‌دهند که بیشتر به تشکیل فاز ناخواسته هماتیت ($\alpha\text{Fe}_2\text{O}_3$) می‌انجامد [۶-۷]. در این پژوهش فاز منظم فریت لیتیوم از پودر آهن فلزی و کربنات لیتیوم با دمای $^{\circ}\text{C}$ ۱۰۰۰ به روش مکانوشیمیایی تهیه و ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی آن بررسی شد.

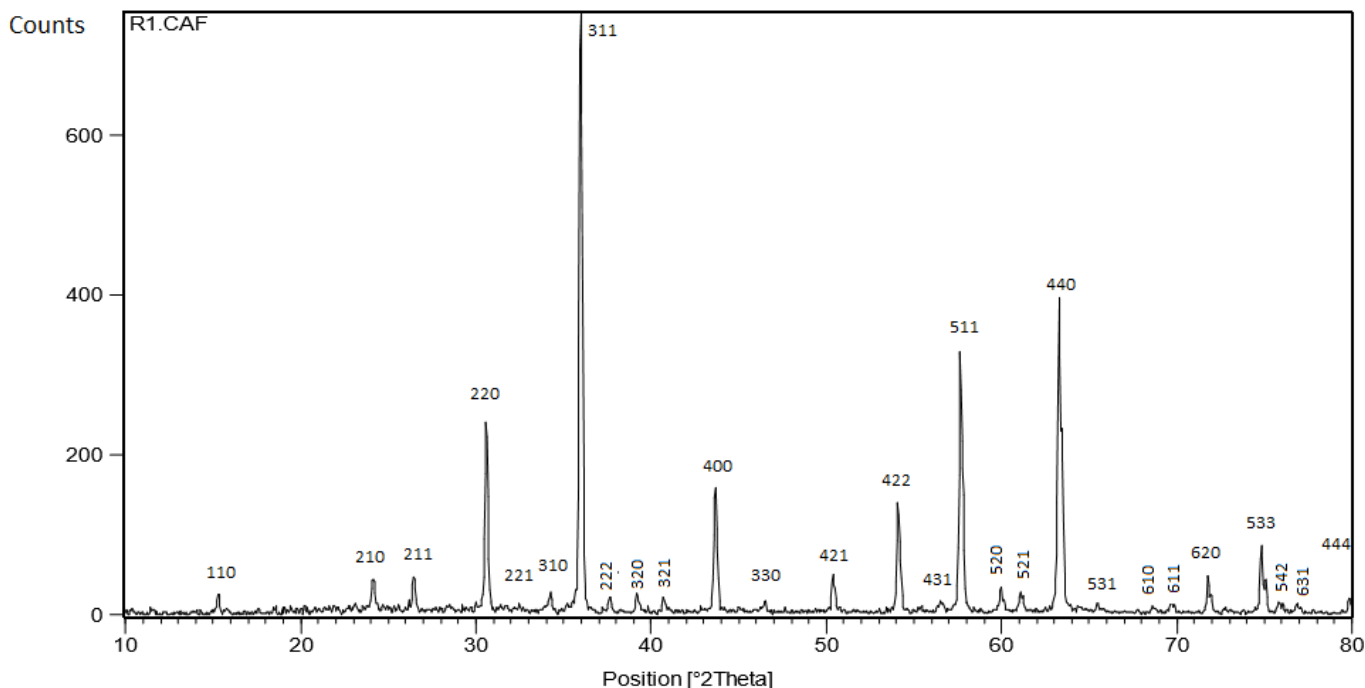
روش ساخت و شناسایی

فریت لیتیوم با فرمول شیمیایی LiFe_5O_8 به روش مکانوشیمیایی دو مرحله‌ای تهیه شد. پودر آهن فلزی (Fe) و کربنات لیتیوم (Li_2CO_3) هر دو از شرکت مرک آلمان با کمینه خلوص ۹۹ درصد به نسبت مولی پنج به یک وزن و مخلوط حاصل به مدت ۲ ساعت در یک دستگاه آسیاب سیاره‌ای فریچ تک مخزنه با سرعت 400 rpm در یک مخزن زیرکونیوم و گلوله‌هایی از همین جنس آسیاب‌کاری شدند. سپس مخلوط آسیاب‌کاری شده به مدت دو ساعت در یک کوره‌ی قابل برنامه‌ریزی لوله‌ای با آهنگ افزایش دمای $^{\circ}\text{C}/\text{min}$ ۸ درجه‌ی سلسیوس بر دقیقه و در جو اکسیژن در دمای $^{\circ}\text{C}$ ۱۰۰۰ پخته شد. سپس نمونه آزادانه همراه با کوره تا دمای اتاق سرد شد.

الگوهای پراش پرتو ایکس با یک دستگاه پراش‌سنج پرتو ایکس شرکت Ricago ژاپن و با پرتو ایکس لامپ مسی ($\lambda=1.5406\text{\AA}$) ثبت شد. میانگین اندازه بلورک‌ها با ویلیامسون-هال به دست آمد [۸].

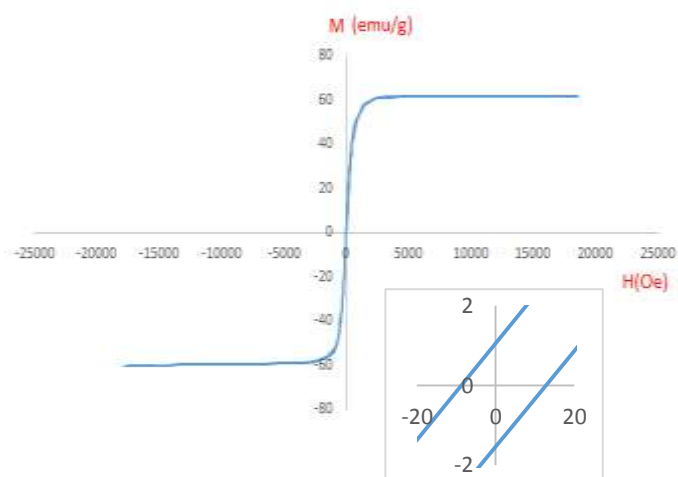
$$\beta \cos \theta = 0.9 \lambda / d + 2 \varepsilon \sin \theta$$

که در آن d میانگین اندازه‌ی بلورک‌ها، λ طول موج پرتو ایکس، θ زاویه براگ پر شدت‌ترین قله، β پهنای آن قله در نیم شدت و ε ریز کرنش است.



شکل ۱ الگوی پراش پرتو ایکس نمونه تهیه شده در دمای 1000°C

شکل ۳ چرخه‌ی پسماند نمونه را نشان می‌دهد. همان‌گونه که دیده می‌شود مغناطش اشباعی نمونه 63 emu/g است که با مقادارهای گزارش‌های 65 emu/g [۹] و 67 emu/g [۳] مقایسه شدنی است و نشان از فری مغناطیس بودن نمونه دارد. هم‌چنین نیروی وادارندگی آن پیرامون 10 Oe است که نشان‌دهنده این است که این فری مغناطیس یک فریت مغناطیسی نرم است.



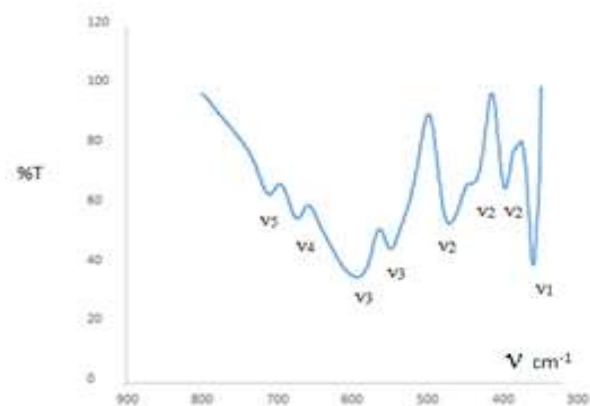
شکل ۳ منحنی پسماند نمونه پخت شده در 1000°C

شکل ۴ منحنی مغناطش-دمای نمونه را نشان می‌دهد. همان‌گونه که دیده می‌شود دمای کوری نمونه $620 \pm 5^{\circ}\text{C}$ است که با مقدار گزارش داده شده برای فاز منظم فریت لیتیوم کپه‌ای (627°C)

شکل ۲ بیناب جذبی فروسرخ (FT-IR) نمونه را نشان می‌دهد. بیشتر فریت‌های اسپینلی سه باند فعال فروسرخ در نواحی زیر دارند:

ν_1 (335 تا 385 cm^{-1})، ν_2 (390 تا 450 cm^{-1}) و ν_3 (560 تا 630 cm^{-1}) [۵].

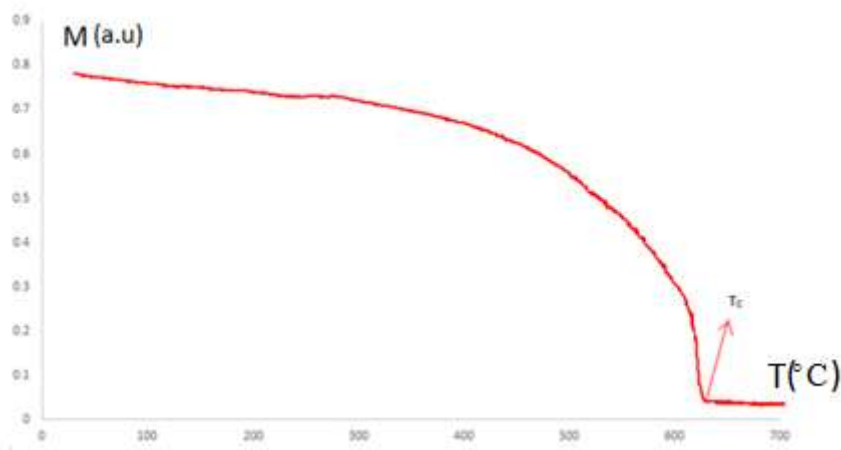
فاز منظم فریت لیتیوم علاوه بر سه باند فعال بالا دو باند دیگر ν_4 و ν_5 پیرامون 650 تا 710 cm^{-1} دارد. همان‌گونه که در شکل ۲ دیده می‌شود باندهای فاز منظم فریت لیتیوم در نمونه پخت شده در 1000°C به خوبی دیده می‌شود که نشان از تشکیل فاز $\alpha\text{-LiFe}_5\text{O}_8$ است.



شکل ۲ بیناب جذبی فروسرخ

دمای کوری فری مغناطیس است.

[۳] همخوانی خوبی دارد. همان گونه که انتظار داریم فریت‌ها زیر دمای کوری فری مغناطیس هستند بنابراین نمونه تهیه شده زیر



شکل ۴: منحنی تغییرات مغناطش برحسب دما

4. N. Todorov, V. M. Iliev, V. Ivanov, Marinova, M. Abrashev, R. Petrova, Y.-Q. Wang, and A. Litvinchuk, "Lattice dynamics of the α and β phases of LiFe_5O_8 ," *Physical Review B* **83**, 174111 (2011).
5. E. Wolska, P. Piszora, W. Nowicki, and J. Darul, "Vibrational spectra of lithium ferrites: infrared spectroscopic studies of Mn-substituted LiFe_5O_8 ," *International Journal of Inorganic Materials* **3**, 503-507 (2001).
6. S. Soreto, M. Graça, M. Valente, and L. Costa, "Lithium Ferrite: Synthesis, Structural Characterization and Electromagnetic Properties," in *Magnetic Spinels-Synthesis, Properties and Applications* (InTech, 2017).
7. S. Mazen, and N. Abu-Elsaad, "Structural, magnetic and electrical properties of the lithium ferrite obtained by ball milling and heat treatment," *Applied Nanoscience* **5**, 105-114 (2015).
8. C. Suryanarayana, *Mechanical Alloying and Milling* (Marcel Decker, New York, 2004).
9. J. Smit, *Magnetic Properties of Materials* (McGraw Hill, New York, 1971).

نتیجه گیری

این پژوهش نشان می‌دهد که می‌توان فاز منظم فریت لیتیوم ($\alpha\text{LiFe}_5\text{O}_8$) را با آسیاب کاری پرانرژی و به کارگیری پودر آهن به دست آورد. بدین منظور پودرهای آسیاب شده در دمای $^{\circ}\text{C}$ ۱۰۰۰ برشته شد که از دمای برشتن همین ترکیب با روش متداول سرامیکی ($^{\circ}\text{C}$ ۱۲۰۰) پایین تر است. پارامترهای مغناطیسی نمونه ی تهیه شده همخوانی خوبی با مقادیر گزارش شده در پژوهش های پیشین دارد.

مرجع ها

1. G. M. Argentina, and P. Baba, "Microwave lithium ferrites: An overview," *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques* **22**, 652-658 (1974).
2. J. D. Adam, L. E. Davis, G. F. Dionne, E. F. Schloemann, and S. N. Stitzer, "Ferrite devices and materials," *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques* **50**, 721-737 (2002).
3. G. White, and C. Patton, "Magnetic properties of lithium ferrite microwave materials," *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **9**, 299-317 (1978).

بررسی رسانندگی نانوکامپوزیت مغناطیسی گرافن-کبالت تولید شده به روش رسوب‌دهی

الکتروشیمیایی

آقائی دوست رودبانه، سیده فاطمه^۱؛ انصاری، نرگس^{۱*}

^۱دانشکده فیزیک دانشگاه الزهرا، خیابان ده ونک، تهران

چکیده

در سال‌های اخیر نانوکامپوزیت‌های مغناطیسی گرافن به علت خواص ویژه نظیر قابلیت کنترل با میدان مغناطیسی، جداسازی آسان و رسانندگی بالا بسیار مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است. در این مقاله به بررسی رسانندگی نانوکامپوزیت مغناطیسی گرافن-کبالت تولید شده با کاتدهای پلاتین و نیکل به روش تک‌مرحله‌ای رسوب‌دهی الکتروشیمیایی پرداخته شده است. آنالیز فازی این نانوکامپوزیت توسط پراش پرتو ایکس (XRD) و پراش انرژی پرتو ایکس (EDX)، نوع پیوندها و گروه‌ها عاملی نمونه با کمک طیف سنجی مادون قرمز (FTIR)، مورفولوژی سطح نانوکامپوزیت به وسیله تصاویر میکروسکوپ الکترونی عبوری (SEM)، خواص مغناطیسی نمونه از طریق منحنی پسماند مغناطیسی (VSM) و رسانندگی نانوکامپوزیت با استفاده نمودار I-V بررسی شد. نانوکامپوزیت مغناطیسی تولید شده متشکل از پوسته‌های گرافن کم لایه و کریستال‌های کبالت که دارای رسانندگی بالا با مغناطش 124 emu/g و 119 emu/g ایجاد گردید که قابلیت کاربرد در دارورسانی هدفمند، پاک‌کنندگی آب، حسگرهای مغناطیسی و ... را دارد. کلمات کلیدی: نانوکامپوزیت مغناطیسی، گرافن، کبالت، رسانندگی، رسوب‌دهی الکتروشیمیایی.

Study of magnetic graphene cobalt nanocomposite's conductivity synthesized via electrochemical deposition method

Aghaie doost roodbaneh, seyedeh fatemeh¹; ansari, narges^{1*}

¹ Department of Physics, University of alzahra, Tehran.

Abstract

Recently, magnetic graphene nanocomposites have been of significantly interest to researchers due to their special properties such as magnetic field control, easy separation and high conductivity. In this paper, the conductivity of magnetic graphene/cobalt nanocomposite produced with platinum and nickel cathodes using a one-step electrochemical deposition method is studied. The phase analysis of this nanocomposite has estimated by X-ray diffraction (XRD) and energy-dispersive X-ray (EDX) spectroscopy, the type of bonds and groups of the sample, using Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR), surface morphology of the nanocomposite by means of scanning electron microscopy (SEM), the magnetic properties of the sample, through the vibration sample magnetometer (VSM) and the conductivity of the nanocomposite using Chart I-V are characterized. The produced magnetic nanocomposite consists of few-layer graphene flakes and cobalt crystals which have high conductivity with 124 emu/g and 119 emu/g magnetism. It can be used in targeted medicine deliveries, water purifiers, magnetic sensors, and so on.

Keywords: magnetic nanocomposite, graphene, cobalt, conductivity, electrochemical deposition.

PACS No. 70,75,81.

مقدمه

محققین قرار گرفته اند. نانوکامپوزیت‌های مغناطیسی گرافن دارای کاربردهای متنوعی در الکترونیک [۱]، انرژی [۲]، تصفیه آب [۳] و دارورسانی هستند [۴].

امروزه نانوکامپوزیت‌های مغناطیسی به علت جداسازی آسان و هدایت با استفاده از میدان مغناطیسی خارجی بسیار مورد توجه

در این مقاله با استفاده از روش رسوب‌دهی الکتروشیمیایی با استفاده از کاتدهای پلاتین و نیکل (عناصر گروه پلاتین) به تولید نانو کامپوزیت مغناطیسی گرافن-کبالت پرداخته شده است و رسانندگی این نمونه‌ها بعد از مشخصه‌یابی بررسی شدند.

سنتز نمونه و مکانیزم تشکیل نانوکامپوزیت

سنتز نمونه‌ها به روش رسوب‌دهی الکتروشیمیایی در سلول دو الکترودی با اعمال ولتاژ مستقیم ثابت ۱۰ ولت به مدت ۹۰ دقیقه انجام شده است که در آن از گرافیت فشرده به عنوان آند و از دو ماده پلاتین و نیکل به صورت جداگانه به عنوان کاتد استفاده شده است. الکترولیت در این چیدمان، محلول ۰/۱ مولار سولفات کبالت ۷ آبه ($\text{CoSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ شرکت مرک) صورتی رنگ با pH اولیه ۵ می‌باشد. در انتهای آزمایش ماده‌ی مغناطیسی تولید شده با استفاده از آهنربا جدا شده و پس از شستشو خشک می‌شود.

با اعمال ولتاژ به الکترودها، مولکول‌های آب درون محلول به تدریج به H^+ و OH^- تجزیه می‌شوند. برخورد یون‌های OH^- با لبه‌ها و مرزهای گرافیت، باعث اکسایش در لبه‌ها و منبسط شدن ورقه‌های گرافیت از هم می‌شود. از سوی دیگر یون‌های سولفات با بار منفی به راحتی بین صفحات گرافیت باز شده وارد می‌شوند. بعد از ورود این یون‌ها بین صفحات گرافیتی فرآیند کاهش اتفاق می‌افتد و یون سولفات بر اساس واکنش



به گازهای SO_2 و O_2 تبدیل شده و باعث جدا شدن ورقه‌های گرافیت می‌شود. در این مرحله صفحات گرافن لایه برداری شده از آند گرافیتی به صورت گرافن کم لایه وارد محلول می‌شود. الکترون‌های آزاد شده از فرآیند کاهش سولفات روی صفحات گرافن نشسته و یون‌های کبالت دو مثبت را به دام می‌اندازد و نانوکامپوزیت مغناطیسی گرافن متورق شده-کبالت (EG-Co) را تشکیل می‌دهند.

نمونه‌ها با نام کاتدی که در ستاپ از آن استفاده شده است نامگذاری می‌شوند نمونه تولیدی با استفاده از کاتد پلاتین، EG-Co/Pt و نمونه تولیدی با استفاده از کاتد نیکل EG-Co/Ni گفته می‌شود.

آهن، نیکل و کبالت به علت مغناطش بالا عناصر رایجی برای تولید کامپوزیت‌های مغناطیسی می‌باشند. در بین این عناصر کبالت با توجه به خواص الکتریکی و مغناطیسی، رسانندگی بالا و واکنش پذیری کمتر نسبت به آهن و مغناطش بالاتر نسبت به نیکل از اهمیت بالایی برخوردار است [۵]. از سوی دیگر صفحات گرافن با سطح مقطع زیاد نیز رسانای خوب جریان الکتریکی هستند. در نتیجه انتخاب گرافن به عنوان فاز زمینه در نانوکامپوزیت مغناطیسی کبالت سبب تولید ماده‌ای با رسانندگی بسیار زیاد می‌گردد بنابراین کامپوزیت این دو ماده نیز رسانا خواهد بود.

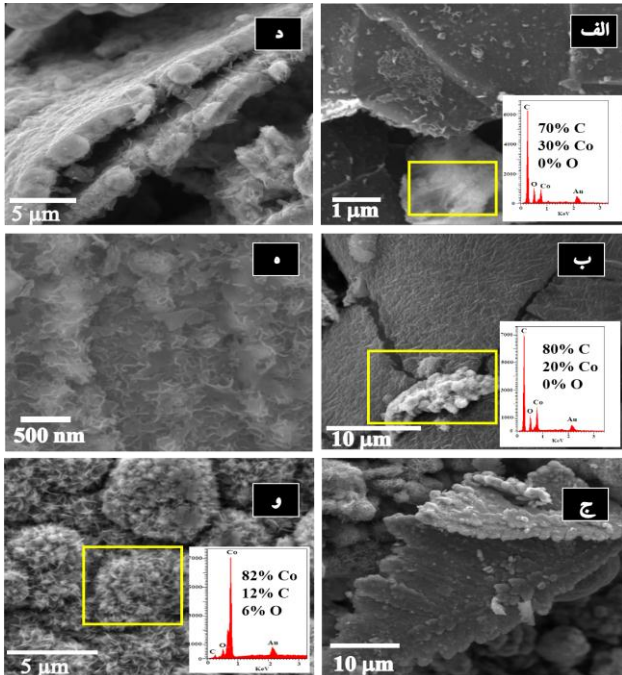
برای تولید نانوکامپوزیت مغناطیسی بر پایه گرافن روش‌های متعددی مانند سنتز شیمیایی، رسوب بخار شیمیایی (CVD) و رسوب‌دهی الکتروشیمیایی وجود دارد. سنتز نانوکامپوزیت مغناطیسی گرافن به روش رسوب‌دهی الکتروشیمیایی به علت سادگی، تک مرحله‌ای و مقرون به صرفه بودن از اهمیت بالایی برخوردار است. این روش با قابلیت تغییر پارامترهای کلیدی مانند pH محیط، مولاریته‌ی محلول، جنس کاتد و چگالی جریان یا افزودن سورفکتانت جهت کنترل مورفولوژی، رسانندگی و مغناطش مواد سنتز شده، بسیار مناسب می‌باشد.

در این روش با قرار دادن گرافیت به عنوان آند به علت تشکیل اکسیداسیون بالا برای انجام واکنش‌های زنجیره‌ای گرافن در یک مرحله از آند گرافیتی لایه برداری شده و با نانوذرات مغناطیسی کامپوزیت می‌شود.

جنس و پتانسیل الکتروشیمیایی کاتدها، روی واکنش‌های درون الکترولیت و تشکیل فازهای پایدار مختلف از ماده بسیار تاثیر گذار است. موادی که ظرفیت بالا و هزینه‌ی کمی داشته باشند و سمی یا رادیواکتیویته نباشند، ماده‌ی مناسبی برای انتخاب کاتد هستند. الام و همکارانش اثر جنس کاتد در ابعاد نانومواد و میزان ناخالصی وارد شده به ماده در روش الکتروشیمیایی را بررسی کرده‌اند و با دسته بندی کاتدها به سه دسته‌ی عناصر گروه پلاتین، عناصر انتقالی گروه غیر پلاتین و عناصر غیر انتقالی دریافتند که مواد تولیدی با گروه پلاتین مورفولوژی، ساختار و ابعاد بهتری داشته و میزان ناخالصی وارد شده به ماده در هنگام استفاده از این مواد به عنوان کاتد کمتر بوده است [۶].

مشخصه یابی

رنگ EDX گرفته شده است که نمودار و درصد اتم‌های آن در هر شکل نشان داده شده است. تصاویر SEM نمونه‌های تولید شده با کاتد پلاتین در شکل ۲ (الف-ج) و کاتد نیکل در شکل ۲ (د-و) آورده شده است. تصاویر SEM و EDX گرفته شده از نمونه‌های سنتز شده نشان می‌دهد که گرافن پوسته شده به صورت فاز زمینه و نانو ذرات کروی کبالت به عنوان تقویت کننده مغناطیسی رشد کرده‌اند و نانوکامپوزیت گرافن کبالت تشکیل شده است.



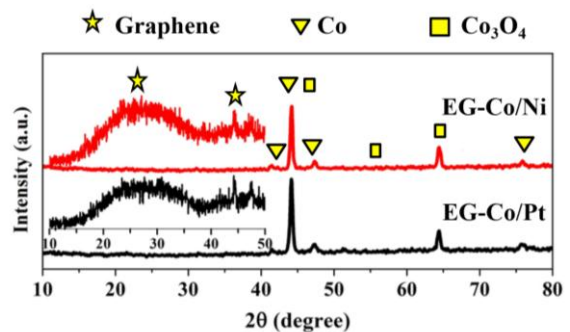
شکل ۲ تصویر SEM/EDX نانوکامپوزیت EG-Co/Pt (الف-ج) و

نانوکامپوزیت EG-Co/Ni (د-و)

برای تشخیص پیوندهای آلی موجود در نانوکامپوزیت تولید شده از طیف سنجی مادون قرمز (FTIR) استفاده شد که نمودار آن در شکل ۳ نشان داده شده است. پیک 1741 cm^{-1} مربوط به گروه کربوکسیل C=O و پیک 1641 cm^{-1} مربوط به ارتعاشات کششی پیوند C=C در کربن SP^2 است. پیک 1457 cm^{-1} مربوط به پیوند کووالانسی C-C است که به دلیل شکستگی در لبه‌های ورقه گرافیتی به وجود آمده است. زوج پیک کوچک 2923 cm^{-1} و 2854 cm^{-1} به علت کشش متقارن و نامتقارن CH_2 است. پیک‌های در محدوده $3600 - 3400 \text{ cm}^{-1}$ به علت ارتعاش کششی O-H از لایه هیدروکسید فلزی متصل به هیدروژن و مولکول‌های آب بین لایه‌های ناشی از خمش مولکولی آب جذب شده در نانو ذرات کبالت است. پیک در 670 و 620 cm^{-1} متناظر با ارتعاشهای کششی

برای مشخصه‌یابی نانوکامپوزیت مغناطیسی EG-Co ساختار بلوری و آنالیز فازی توسط پراش پرتو ایکس (XRD)، نوع پیوندها و گروه‌های عاملی با کمک طیف سنجی مادون قرمز (FTIR)، مورفولوژی سطح، اندازه ذرات، نحوه‌ی ترکیب مواد و توزیع فازها به وسیله تصاویر میکروسکوپ الکترونی عبوری (SEM)، خواص مغناطیسی از طریق منحنی پسماند مغناطیسی (VSM) و رسانندگی نمونه با استفاده از نمودار I-V بررسی شده است.

جهت آنالیز فازی، الگوی پراش پرتو ایکس با فیلمان مس $\lambda = 1.54060 \text{ \AA}$ از نمونه گرفته شده است. تصویر XRD از نمونه‌ها با گام اشعه بالا برای مشاهده‌ی ذرات کریستالی کبالت با بلورینگی بالا در شکل ۱ و بار دیگر با گام اشعه پایین برای مشاهده‌ی تپه‌ی گرافن با بلورینگی کم داخل شکل ۱ گرفته شده است.



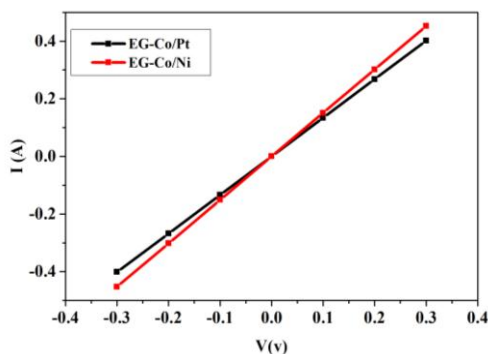
شکل ۱ طیف XRD نانوکامپوزیت EG-Co

الگوی پراش شامل پیک‌های ۴۱، ۴۴ و ۴۷ درجه مربوط به کبالت خالص (Co) و پیک‌های ۳۰، ۳۷، ۴۴ و ۵۵ درجه مربوط به درصد کمی از Co_3O_4 می‌باشد و دو پیک پهن در ۲۵ و ۴۴ درجه مربوط به صفحات گرافن می‌باشد. نتایج حاصل از XRD در بررسی فازهای تشکیل دهنده و اندازه‌ی نانو بلورک‌ها تشکیل نانوکامپوزیت گرافن-کبالت با درصد کمی اکسید کبالت با اندازه‌ی نانوبلورک در حدود ۱۹ تا ۲۳ نانومتر را تایید می‌کند.

تصاویر SEM/EDX نمونه‌ها از نقاط مختلف نانوکامپوزیت‌های تشکیل شده شامل فاز ماتریکس و تقویت کننده، در بزرگنمایی ۱۰، ۵، ۱ و ۰/۵ میکرومتر گرفته شده است و از داخل کادرهای زرد

شده در مقالات دیگر است [۴].

رسانندگی نانوکامپوزیت با رسم منحنی ولتاژ-جریان آن مورد بررسی قرار گرفت. به این منظور ابتدا از پودر نانوکامپوزیت با اعمال فشار قرص تهیه کرده و سپس رسانندگی از طریق چیدمان دو نقطه ای به کمک دستگاه (Keithley) اندازه گیری شد که نمودار جریان بر حسب ولتاژ نمونه در شکل ۵ رسم شده است. همان طور که مشاهده می شود این نمودار خطی است که نشان دهنده رسانندگی نمونه ها می باشد.



شکل ۵ نمودار I-V نانوکامپوزیت EG-Co

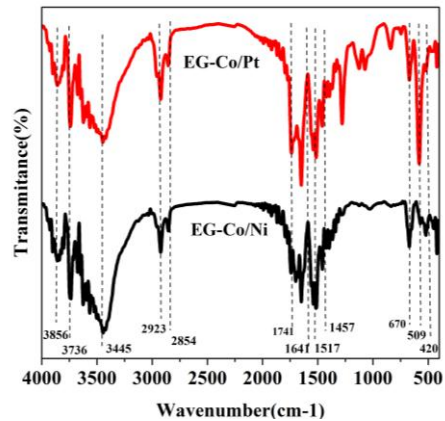
نتیجه گیری

ما در این مقاله با روش ساده و تک مرحله ای رسوبدهی الکتروشیمیایی با استفاده از دو کاتد متفاوت پلاتین و نیکل نانوکامپوزیت EG-Co را تولید کردیم. مغناطش نانو کامپوزیت های تولیدی 124 emu/g و 119 emu/g بوده و رسانندگی خوبی از خود نشان داده اند.

مرجع ها

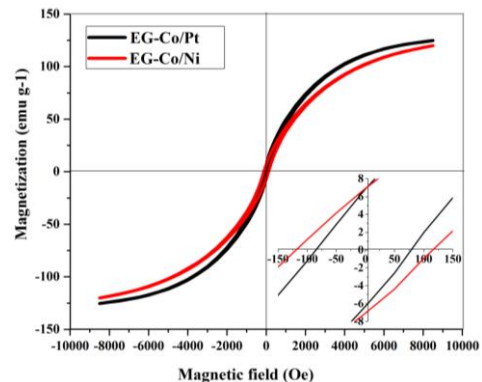
- [1] C. Liu, F. Su, J. Liang, "Producing cobalt-graphene composite coating by pulse electrodeposition with excellent wear and corrosion resistance", *Appl. Surf. Sci.* **351** (2015) 889–896.
- [2] Z. Yang, C. Lei, X. Sun, Y. Zhou, Y. Liu, "Enhanced GMI effect in tortuous-shaped Co-based amorphous ribbons coated with graphene", *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* **27** (2016) 3493–3498.
- [3] N. Danesh, M. Hosseini, M. Ghorbani, A. Marjani, "Fabrication, characterization and physical properties of a novel magnetite graphene oxide/Lauric acid nanoparticles modified by ethylenediaminetetraacetic acid and its applications as an adsorbent for the removal of Pb (II) ions", *Synth. Met.* **220** (2016) 508–523.
- [4] K.-Y.A. Lin, F.-K. Hsu, W.-D. Lee, V.A. Online, "Magnetic cobalt-graphene nanocomposite derived from self-assembly of MOFs with graphene oxide as an activator for peroxymonosulfate", *J. Mater. Chem. A.* **3** (2015) 9480–9490.
- [5] A.J. Ahamed, P.V. Kumar, G. Srikanth, "Low temperature synthesis and characterization of rGO-CoO nanocomposite with efficient electrochemical properties", *J. Environ. Nanotechnol.* **4** (2015) 1–8.
- [6] N.K. Allam, C.A. Grimes, "Effect of cathode material on the morphology and photoelectrochemical properties of vertically oriented TiO₂ nanotube arrays", *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* **92** (2008) 1468–1475.

بواسطه واکنش بین اکسیژن و کاتیون های موجود در مکان های اکتاهدرال است که وجود درصد کمی اکسید کبالت را در کامپوزیت تایید می کند. پیک های FTIR گرفته شده از نانوذرات نشان دهنده تشکیل ساختار کامپوزیت EG-Co است.



شکل ۳ طیف FTIR نانوکامپوزیت گرافن کبالت با کاتدهای پلاتین و نیکل

برای مطالعه رفتار مغناطیسی نانوکامپوزیت EG-Co از مغناطیس سنج ارتعاشی، VSM، استفاده شده است. منحنی پسماند مغناطیسی و بزرگنمایی مرکز منحنی در شکل ۴ نشان داده شده است.



شکل ۴ منحنی پسماند مغناطیسی نانوکامپوزیت با کاتدهای پلاتین و نیکل

با توجه به نمودار پسماند مغناطیسی، نانوکامپوزیت های EG-Co فرومغناطیسی بوده و برای کاتدهای پلاتین و نیکل به ترتیب مغناطش اشباع 124 emu/g و 119 emu/g ، پسماند مغناطیسی $6/8 \text{ emu/g}$ و $6/8 \text{ emu/g}$ ، میدان وادارندگی 68 و 117 اورستد، نسبت مربعیت $0/054$ و $0/057$ اندازه گیری شده است. مغناطش اشباع نانوکامپوزیت گرافن کبالت به علت وجود صفحات غیر مغناطیسی گرافن از مغناطش اشباع کبالت حجمی (168 emu/g) کمتر می باشد با این وجود این مقادیر بسیار بیشتر از اعداد گزارش

اثر فشار شیمیایی بر چگالی بار الکترونی و ویژگی‌های پیوندی در آرسنیدهای آهن ۱۲۲

آقاجانی، مهدیه^۱؛ هادی‌پور، حنیف^۲؛ اخوان، محمد^۳^۱ آزمایشگاه تحقیقاتی مغناطیس، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، خیابان آزادی، تهران^۲ گروه فیزیک، دانشگاه گیلان، رشت، گیلان^۳ قطب علمی ماده چگال و سیستم‌های پیچیده، دانشگاه صنعتی شریف، خیابان آزادی، تهران

چکیده

محاسبات ابتدا به ساکن در چهارچوب نظریه تابعی چگالی برای بررسی ویژگی‌های پیوندی، توزیع چگالی بار الکترونی و چگالی حالت‌های جزئی در سه ترکیب آرسنید آهن ۱۲۲، $AeFe_2As_2$ ($Ae=Ba, Sr, Ca$)، انجام شده‌اند. طول پیوندهای مختلف و گشتاور مغناطیسی اتم‌های آهن در اثر فشار شیمیایی انقباضی کاهش می‌یابند. اوربیتال‌های d_{xy} و d_{z^2} نسبت به سه اوربیتال دیگر $Fe-3d$ از نظر مغناطیسی فعال‌تر هستند و در فاز پادفرومغناطیسی دارای چگالی بار بیشتری هستند. فشار شیمیایی منجر به افزایش ضخامت لایه‌های $Fe-As$ و در نتیجه کاهش (افزایش) قدرت برهمکنش‌های درون‌لایه‌ای (بین‌لایه‌ای) می‌شود. همچنین توزیع بار حول اتم‌های Fe و Ae کاهش و حول As افزایش می‌یابد که اثری مشابه با اثر آلاش حفره در آرسنیدهای آهن است.

Chemical Pressure Effects on Electron Charge Density and Bonding Properties in 122 Iron Arsenides

Aghajani, Mahdieh¹; Hadipour, Hanif²; Akhavan, Mohammad^{1,3}¹ Department of Physics, Sharif University of Tehran, Tehran² Department of Physics, University of Guilan, Rasht, Iran³ Center of Excellence in Complex Systems and Condensed Matter, Sharif University of Technology, Tehran, Iran

Abstract

First principle calculations in the framework of density functional theory have been done to investigate the bonding properties, the electron charge density distribution and the partial density of states in three 122 iron arsenides, $AeFe_2As_2$ ($Ae=Ba, Sr, Ca$). Different bond lengths and the magnetic moment of Fe atoms decrease by compressive chemical pressure. The d_{z^2} and d_{xy} orbitals are magnetically more active than three other Fe-3d orbitals and have more charge density in the antiferromagnetic phase. The compressive chemical pressure results in the increase of Fe-As layer thickness and thus the strength of inter-(inter-)layer interactions decreases (increases). Also, charge distribution decreases around Fe and Ae atoms, and it increases around the As atoms. These effects are same as the hole doping effects in the iron arsenides.

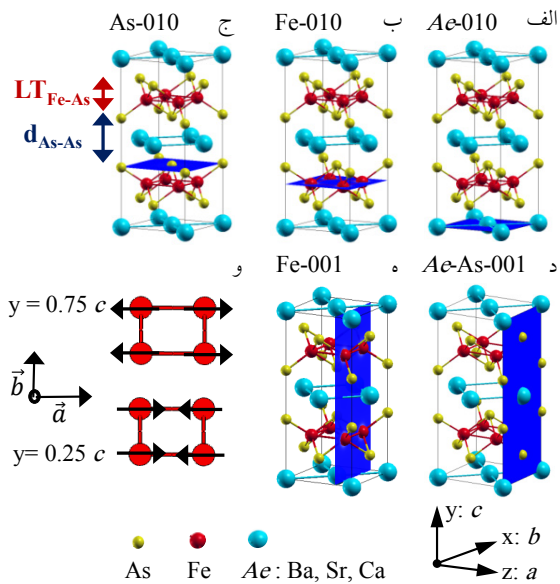
PACS No. 70, 71, 74.

شبکه راست‌گوشه (گروه تقارنی $Fmmm$) هستند. CCP باعث می‌شود تا گذار فازهای ساختاری، مغناطیسی و ابررسانایی ناشی از فشار در فشارهای کمتری رخ دهد [۲]. نویسندگان در تحقیق قبلی [۳]، به بررسی ویژگی‌های فیزیکی این ترکیبات در اثر فشارهای شیمیایی و به ویژه فشار مکانیکی پرداخته‌اند و نیاز به بررسی دقیق‌تر برخی از ویژگی‌های فاز فشار-صفر فاز پادفرومغناطیسی، احساس شد. اثر CCP بر چگالی حالت‌های (DOS) جزئی مربوط به هر یک از پنج اوربیتال $Fe-3d$ و نیز هر یک از سه اوربیتال $As-$

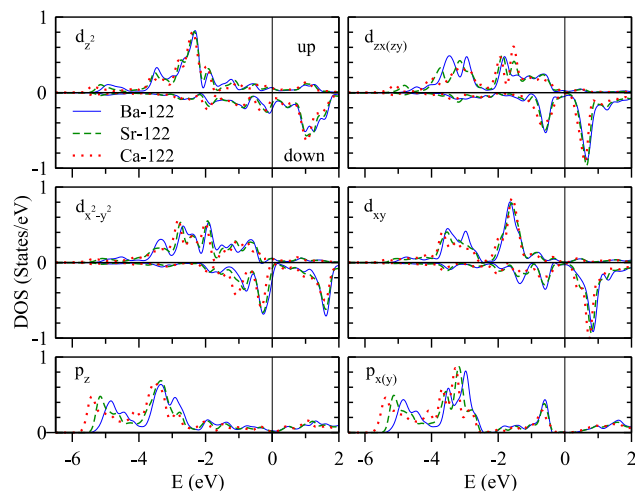
مقدمه

با کشف بروز ابررسانایی در ترکیب $BaFe_2As_2$ در اثر آلاش یا اعمال فشار [۱]، علاقه دانشمندان به مطالعه و توجیه ویژگی‌های فیزیکی این ترکیب افزایش یافته است. با جاننشینی عنصر Ba با عناصر هم‌ظرفیت با شعاع اتمی کوچکتر، از قبیل Sr و Ca، فشار شیمیایی انقباضی (CCP: Compressive Chemical Pressure) در ترکیب $BaFe_2As_2$ ایجاد می‌شود. آرسنیدهای آهن ۱۲۲، در دماهای پایین و فشار محیط، فلزات پادفرومغناطیسی با ساختار

یکسان بوده و مجموع آن‌ها در شکل ۲ نشان داده است. این عنصر غیرمغناطیسی است و انتقال حالت‌های الکترونی در آن به نواحی عمیق‌تر و پر انرژی‌تر با اعمال CCP بیشتر از اوربیتال‌های Fe-3d است. این انتقال نشان دهنده کاهش انرژی ابرتبادلی است.



شکل ۱: الف تا ه) محل صفحه‌های مختلف در محاسبه چگالی بار در ابرسلول. هر صفحه با نماد عنصر(های) موجود در آن و شاخص میلر صفحه هم‌راستا با آن نامیده شده است. (و) جهت اسپین‌های Fe در دو صفحه Fe موجود در ابرسلول. نکته مهم: محور مختصات چرخانده شده برای لحاظ کردن اسپین‌های درون صفحه‌ای در محاسبات اسپین قطبیده هم‌خط نیز نشان داده شده است.



شکل ۲: نمودارهای DOS جزئی مرتبط با پنج اوربیتال Fe-3d و سه اوربیتال As-4p روی یک اتم در ترکیبات Ba-122، Sr-122 و Ca-122 به ترتیب برابر با درون صفحه‌ای d_{zy} و d_{zx} یکسان هستند.

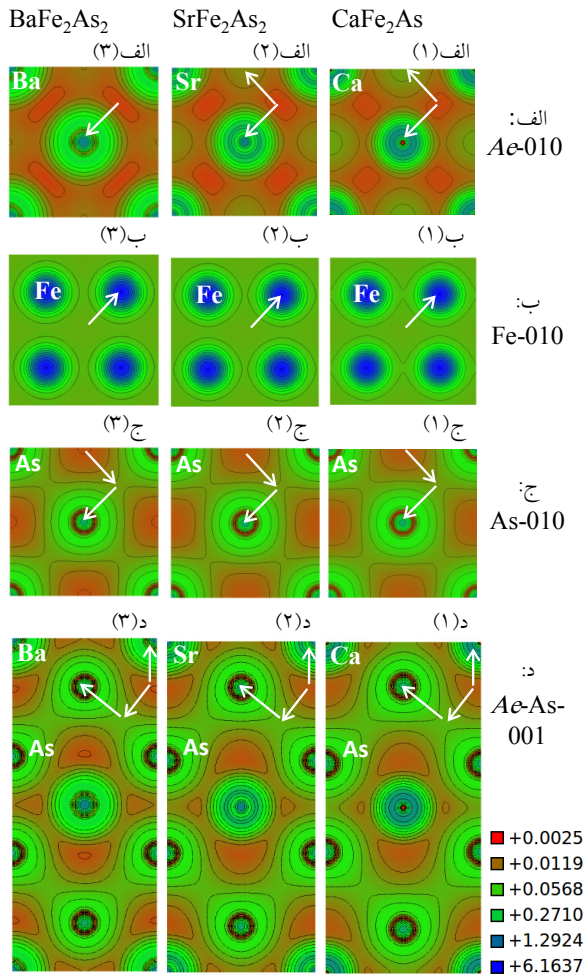
چگالی بار الکترونی (ECD: Electron Charge Density) در صفحات مختلف و ارتباط آن با ویژگی‌های پیوندی فاز پادفرومغناطیسی $BaFe_2As_2$ در مقاله حاضر بررسی شده‌اند.

روش محاسبات

محاسبات نسبیتی اسکالر با روش شبه‌پتانسیل بر پایه نظریه تابعی چگالی و تقریب گرادیان تعمیم‌یافته انجام شده‌اند [۳]. برای در نظر گرفتن نظم پادفرومغناطیسی نواری [۴]، محاسبات به صورت اسپین قطبیده هم‌خط در یک ابرسلول (شکل ۱) انجام شده‌اند. ویژگی‌های پیوندی از محاسبات واهلش ساختاری برای ساختار شبکه راست‌گوشه با پارامترهای شبکه آزمایشگاهی [۵-۷] بدست آمده‌اند. شعاع اتم‌های Ae (Ba, Sr, Ca) و پارامترهای شبکه ترکیبات $AeFe_2As_2$ در جدول ۱ نوشته شده‌اند. ویژگی ECD روی صفحات مختلف درون ابرسلول در شکل ۱، از توابع موج بدست آمده از محاسبات میدان خودسازگار بدست آمده‌اند. به منظور دقت بیشتر در محاسبه بار الکترون‌های ظرفیت، از شبه‌پتانسیل‌هایی با تصحیحات مغزه غیرخطی استفاده شده است.

نتایج و بحث

برای هر ترکیب، محاسبات به دو صورت غیرمغناطیسی (NM) و پادفرومغناطیسی (AFM) انجام شده‌اند. ابرسلول در فاز AFM به مقدار 95 ± 5 meV پایدارتر از فاز NM بدست آمد. نمودارهای DOS برای اوربیتال‌های Fe-3d و As-4p در شکل ۲ نشان داده شده‌اند. اختلاف DOS مرتبط با اسپین‌های بالا و پایین نشان‌دهنده گشتاور مغناطیسی غیرصفر برای اتم آهن است. اوربیتال d_{z^2} در راستای اسپین اتم‌های Fe است و بیشترین مقدار گشتاور مغناطیسی را دارد. پس از آن، اوربیتال d_{xy} که بین دو نوع جهت‌گیری پادفرو و فرومغناطیسی قرار دارد دارای بیشترین گشتاور مغناطیسی است. در نتیجه، این دو اوربیتال از نظر مغناطیسی نسبت به بقیه فعال‌تر هستند. اوربیتال $d_{x^2-y^2}$ دارای کمترین گشتاور مغناطیسی است. گشتاور مغناطیسی اتم‌های Fe (m_{Fe}) در ترکیبات Ba-122، Sr-122 و Ca-122 به ترتیب برابر با $2.21 \mu_B/Fe$ و 2.29 ، 2.38 بدست آمده است که با اعمال CCP کاهش می‌یابد. سهم اسپین‌های بالا و پایین اوربیتال‌های As-4p



شکل ۳: توزیع چگالی بار کل روی صفحات مختلف در ترکیبات ۱۲۲. پیکانها جهت افزایش مقدار چگالی بار را نشان می دهند.

Fe-Fe از نوع فلزی است و به صورت زمینه‌ای یکنواخت از بار در صفحه Fe-010 دیده می شود. در اثر CCP عمده بارهای حول Fe از مرکز اتم دورتر شده و در این صفحه پخش می شوند. تغییر در مکان ایزوخطها در صفحه As-010 (شکل ۳-ج) با اعمال CCP نشان می دهد که بارها در این صفحه، به ویژه در راستای پیوند As-As روی قطر، افزایش یافته اند. توزیع بار روی صفحه‌ای شامل دو نوع اتم Ae و As را می توان در شکل ۳-د مشاهده کرد. در اثر CCP، توزیع بار اتم‌های As موجود در دو لایه مجاور Fe-As به یکدیگر نزدیک می شود تا پیوند کوالانسی As-As تشکیل شود. به طور کلی نتیجه می شود که در اثر CCP، توزیع بار حول Fe و Ae کاهش و حول As افزایش می یابد. توزیع مجدد ECD تحت تاثیر افزایش در کمیت LT_{Fe-As} است. CCP منجر به انتقال بار از صفحه Ae به As و افزایش برهمکنش نسبی بین این اتم‌ها می شود.

نتایج ویژگی‌های پیوندی در ترکیبات ۱۲۲، از قبیل طول (d) پیوندهای Fe-As (درون لایه‌ای)، As-As (بین لایه‌ای) و Ae-As و همچنین ضخامت لایه Fe-As در واحد c (LT_{Fe-As}) در جدول ۱ بیان شده اند. طول تمام پیوندها با اعمال CCP کاهش می یابد. اما این امر به تنهایی معنای افزایش نسبی قدرت این پیوندها نیست. افزایش LT_{Fe-As} با CCP نشان دهنده کاهش (افزایش) قدرت برهمکنش‌های درون لایه‌ای (بین لایه‌ای) است. بیشترین کاهش در d_{As-As} (0.6561 \AA) دیده شده است. این امر نتیجه افزایش در LT_{Fe-As} است. تشکیل پیوند کوالانسی کشیده As-As، که عامل گذار فاز ساختاری است، در مقدار بحرانی 3.00 \AA روی می دهد [۸]. نزدیکی d_{As-As} ترکیب Ca-122 به این مقدار بحرانی، تایید کننده گذار فاز ساختاری در فشارهای مکانیکی کمتر برای این ترکیب است [Error! Bookmark not defined.].

جدول ۱: شعاع اتمی عناصر Ae (r_{Ae}) به همراه پارامترهای شبکه آزمایشگاهی و ویژگی‌های پیوندی در ترکیبات ۱۲۲.

کمیت	$BaFe_2As_2$	$SrFe_2As_2$	$CaFe_2As_2$
r_{Ae} (Å)	۲.۱۵ [۹]	۲.۰۰ [۹]	۱.۸۰ [۹]
a (Å)	۵.۶۱۴۶ [۷]	۵.۵۷۸۲ [۶]	۵.۵۳۱۳ [۵]
b (Å)	۵.۵۷۴۳ [۷]	۵.۵۱۸۳ [۶]	۵.۴۵۷۶ [۵]
c (Å)	۱۲.۹۴۵۳ [۷]	۱۲.۲۹۶۵ [۶]	۱۱.۶۸۳۱ [۵]
d_{Fe-As} (Å)	۲.۳۹۴۹	۲.۳۸۴۲	۲.۳۷۲۹
d_{As-As} (Å)	۳.۷۷۲۱	۳.۴۳۷۷	۳.۱۱۶۰
d_{Ae-As} (Å)	۳.۳۷۳۶	۳.۲۶۳۳	۳.۱۵۸۲
$LT_{Fe-As/c}$	۰.۲۰۸۶	۰.۲۲۰۴	۰.۲۳۳۳

به منظور بررسی انتقال بار الکترونی در اثر CCP، چگالی بار کل بدست آمده روی چهار صفحه مختلف در شکل ۳ نشان داده شده است. تمامی شکل‌ها در بازه معینی، بین 0.0025 تا e/a_B^3 ، از چگالی بار و در مقیاس لگاریتمی رسم شده اند. همان طور که در شکل ۳-الف (۳) دیده می شود، توزیع بار کوچکی از اتم‌های As در میانه ضلع‌های صفحه Ba-010 وجود دارد. این توزیع بار در ترکیب Ca-010 (شکل ۳-الف (۱)) بسیار افزایش یافته است. همچنین در اثر CCP، شعاع ناحیه‌های با چگالی بار زیاد حول Ae کاهش می یابد که با کاهش شعاع اتمی Ae متناظر است. در تمامی این صفحات، بیشترین چگالی بار در صفحه Fe-010 (شکل ۳-ب) و به ویژه حول اتم‌های Fe دیده می شود که با سهم زیاد DOS جزئی اوربیتال‌های Fe سازگار است. پیوندهای

۱۰۰ به تفاوت توزیع چگالی بار در این دو راستا شده است. توزیع $\Delta\rho$ در صفحه‌های Fe-100 و Fe-001 به ترتیب مشابه مقطعی از اوربیتال‌های d_{xy} و d_{z^2} است که در شکل ۲ به‌عنوان اوربیتال‌هایی با بیشترین گشتاور مغناطیسی شناخته شده‌اند.

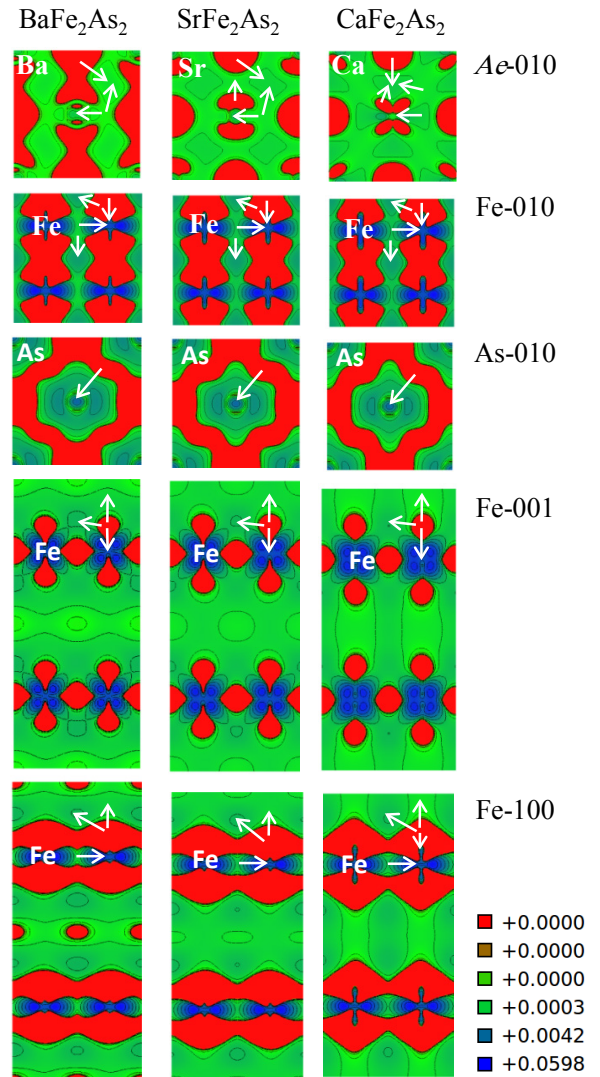
نتیجه گیری

محاسبات ابتدا به ساکن برای توصیف ویژگی‌های پیوندی و چگالی حالت‌ها و چگالی بار الکترونی در فاز AFM ترکیبات ۱۲۲ انجام شده‌اند. ابرسلول فاز AFM به مقدار 95 ± 5 meV پایدارتر از فاز NM است و مقدار m_{Fe} در ترکیبات ۱۲۲ با اعمال CCP، از 2.38 به $2.21 \mu_B/Fe$ کاهش می‌یابد. این کاهش در اثر دور شدن حالت‌های الکترونی $As-4p$ از تراز فرمی و نشانه کاهش انرژی ابرتبادلی است. اوربیتال‌های d_{xy} و d_{z^2} نسبت به سه اوربیتال دیگر $Fe-3d$ دارای بیشترین گشتاور مغناطیسی و در نتیجه از نظر مغناطیسی فعال‌تر هستند. توزیع $\Delta\rho$ نیز پُر بودن و نقش این اوربیتال‌ها در فاز AFM را نشان می‌دهد. افزایش LT_{Fe-As} با CCP نشان‌دهنده کاهش (افزایش) قدرت برهمکنش‌های درون‌لایه‌ای (بین‌لایه‌ای) است. در اثر CCP توزیع بار حول Fe و Ae کاهش و حول As افزایش می‌یابد و انتقال بار از صفحه Ae به As روی می‌دهد. این امر پیامد افزایش حامل‌های حفره در این ترکیبات است.

مرجع‌ها

- [1] S. Uchida, "High Temperature Superconductivity"; Springer, Japan, Tokyo, 2015.
- [2] A.S. Sefat, *Rep. Prog. Phys.* **74**, No. 12 (2011) 124502.
- [3] M. Aghajani, H. Hadipour and M. Akhavan, *Computational Materials Science*, **160** (2019) 233.
- [4] Q. Huang, Y. Qiu, W. Bao, M.A. Green, J.W. Lynn, Y.C. Gasparovic, T. Wu, G. Wu, X.H. Chen, *Phys. Rev. Lett.* **101** (2008) 257003.
- [5] A. Kreyssig, M.A. Green, Y. Lee, G.D. Samolyuk, P. Zajdel, J.W. Lynn, S.L. Bud'ko, M.S. Torikachvili, N. Ni, S. Nandi, J.B. Leão, S.J. Poulton, D.N. Argyriou, B.N. Harmon, R.J. McQueeney, P.C. Canfield, A.I. Goldman, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 184517.
- [6] M. Tegel, M. Rotter, V. Weiß, F.M. Schappacher, R. Pöttgen, D. Johrendt, *J. Phys.: Condens. Matter* **20** (2008) 452201.
- [7] M. Rotter, M. Tegel, D. Johrendt, I. Schellenberg, W. Hermes, R. Pöttgen, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 020503.
- [8] A. Sama, G. Profeta, S. Massidda, E.K.U. Gross, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 014507.
- [9] www.webelements.com.
- [10] D.C. Freitas, G. Garbarino, R. Weht, A. Sow, X. Zhu, F. Han, P. Cheng, J. Ju, H.H. Wen, M. Núñez-Regueiro, *J. Phys. Condens. Matter* **26** (2014) 155702.
- [11] M. Gooch, B. Lv, B. Lorenz, A.M. Guloy, C.-W. Chu, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 180508.

نتیجه مشابهی در اثر آرایش حفره در ترکیبات $CaFeAsF$ ، $SrFeAsF$ [۱۰] و $K_xSr_{1-x}Fe_2As_2$ [۱۱] گزارش شده است. همچنین گستردگی بسته‌های حفره‌گونه در سطح فرمی در اثر CCP گزارش شده است [۳].



شکل ۴: توزیع $\Delta\rho$ روی صفحات مختلف در ابرسلول ترکیبات ۱۲۲. پیکان‌ها جهت افزایش مقدار چگالی بار را نشان می‌دهند.

به‌منظور بررسی اثر m_{Fe} بر روی چگالی بار، اختلاف ECD بین فازهای AFM و NM ($\Delta\rho = \rho_{AFM} - \rho_{NM}$) برای ترکیبات ۱۲۲ محاسبه شده است (شکل ۴). مقدار $\Delta\rho$ در صفحات شامل اتم‌های غیرمغناطیسی As و Ae غیر صفر است. بنابراین در نظر گرفتن نظم مغناطیسی به توزیع مجددی حول تمامی اتم‌ها منجر می‌شود. همچنین، وجود نظم‌های AFM و FM در راستای صفحات ۰۰۱ و

پیش‌بینی ضریب برهمکنش الکترون-فونون عناصر ابررسانا با استفاده از یادگیری ماشینی

علیزاده، زهرا؛ محمدی زاده، محمدرضا

آزمایشگاه پژوهشی ابررسانایی، دانشکده فیزیک، دانشگاه تهران

چکیده

پیدا کردن خواص جدید مواد توسط ابزارهای یادگیری ماشینی یک شاخه جدید و رو به رشد در علم مواد است. در میان مواد مختلف، ابررسانایی با وجود مطالعات و پژوهش‌های فراوان به خوبی شناخته نشده است. در این مقاله، اثر چهارده خاصیت مهم در ابررسانایی را بر روی عناصر جدول تناوبی مورد بررسی قرار داده و این ویژگی‌ها را با استفاده از الگوریتم‌های انتخاب بهترین ویژگی برحسب اهمیتشان اولویت‌بندی کرده‌ایم. سپس، با استفاده از الگوریتم جنگل تصادفی، یکی از مهم‌ترین عوامل در ابررسانایی، یعنی ضریب برهمکنش الکترون-فونون، مورد بررسی قرار گرفته است. در این مدل دمای دیبای و دمای گذار به ابررسانایی به عنوان ویژگی‌های توصیف‌کننده برای پیش‌بینی هدف یعنی ضریب برهمکنش الکترون-فونون برای ۲۸ عنصر جدول تناوبی استفاده شده است. نتایج پیش‌بینی شده با دقت ۸۸٪ مطابق با مقادیر تجربی و محاسباتی موجود در کارهای دیگران است. بنابراین ما قادر به ساخت یک مدل برای پیش‌بینی ضریب برهمکنش الکترون-فونون برای ترکیباتی هستیم که مقدارشان موجود نیست.

Predicting Electron-Phonon Coupling Constants of Superconducting Elements by Machine Learning

Z. Alizadeh and M.R. Mohammadzadeh

Superconductivity Research Laboratory (SLR), Department of Physics, University of Tehran

Abstract

Finding new properties of materials by machine learning is an active branch in materials research. Among the various materials groups, superconductivity is not well known despite numerous studies. In this work, we have investigated the effect of fourteen important properties in superconductivity on the elements of periodic table by the SELECT BEST ATTRIBUTE algorithm. Then, one of the most important factors in superconductivity, i.e. electron-phonon coupling constant is investigated using Random Forest algorithm. Our predicted electron-phonon coupling constant results are in accordance with the available values by 88% accuracy. So, we are able to build up a model to predict the unavailable electron-phonon coupling constant of elements.

PACS No. 07.05.Mh, 71.38.Cn, 74.70.-b.

مقدمه

پیکیده [۵]، دسته‌بندی پروسکایت‌ها [۶،۷] و کارهای انجام شده در ابررسانایی [۸،۹] و سایر مطالعات [۱۰،۱۱] اشاره کرد. ابررسانایی بیش از یک قرن است که در علوم مختلف فیزیک، شیمی و مواد مطالعه و تحقیق می‌شود ولی هم‌چنان یکی از موضوعات ناشناخته است. با گذشت سال‌ها از توسعه نظریه‌ها هنوز نمی‌توان براساس ویژگی‌های

در علم مواد مطالعات بر پایه داده‌کاوی به سرعت در حال رشد است [۱-۳]. با استفاده از اطلاعات موجود و معنی‌دار و الگوریتم‌های یادگیری ماشینی می‌توان خاصیت فیزیکی مورد نیاز را پیش‌بینی کرد. کارهای مختلفی در این زمینه انجام شده است که می‌توان به محاسبه تابع کار نیمه‌رساناها [۴]، محاسبه انرژی سطح فلزات هگزاگونال تنگ

نتایج و بحث

نتایج نشان می‌دهد که تمام پارامترها به‌جز در دو مورد مدول حجمی و دمای دیبای که در این کار در مرتبه پایین‌تری نسبت به کار Hirsch قرار گرفته با کار Hirsch یکسان هستند.

جدول ۱: مقایسه نتایج حاصل از یادگیری ماشینی با نتایج Hirsch

نتایج Hirsch	نتایج ما	اهمیت ویژگی‌ها
ضریب هال	ضریب هال	۱
تابع کار	تابع کار	۲
مدول حجمی	دمای ذوب	۳
دمای ذوب	حجم اتمی	۴
حجم اتمی	انرژی یونش دوم	۵
دمای دیبای	جرم یونی	۶
انرژی یونش دوم	انرژی یونش اول	۷
جرم یونی	مدول حجمی	۸
انرژی یونش اول	دمای دیبای	۹
پذیرفتاری مغناطیسی	پذیرفتاری مغناطیسی	۱۰
رسانندگی الکتریکی	رسانندگی الکتریکی	۱۱
ظرفیت گرمایی ویژه	ظرفیت گرمایی ویژه	۱۲
رسانندگی گرمایی	رسانندگی گرمایی	۱۳

از نتایج حاصل شده در جدول (۱) می‌توان به این نتیجه مهم پی برد که ضریب هال و تابع کار عناصر نقش مهمی در ابرسانایی آنان دارند.

طبق رابطه زیر برای دمای بحرانی، نظریه‌ی BCS بیان می‌کند که ضریب برهمکنش الکترون-فونون در ابرسانایی و دمای بحرانی نقش مهمی را ایفا می‌کند.

$$T_c \approx \theta_D \exp(-1/N_{(0)}V) \quad (1)$$

که $N_{(0)}$ چگالی الکترونی در سطح فرمی θ_D دمای دیبای و V پتانسیل برهمکنش الکترون-الکترون است که شامل پتانسیل جاذبه الکترون-

فیزیکی و شیمیایی مشخص کرد که یک ماده ابرسانا هست یا خیر؟ در این مقاله تاثیر ۱۴ خاصیت در ابرسانایی بررسی شده و به ترتیب اهمیت در ابرسانایی مواد دسته‌بندی شده‌اند. سپس یکی از مهم‌ترین ویژگی‌ها، ضریب برهمکنش الکترون-فونون با استفاده از الگوریتم جنگل تصادفی بر حسب ورودی‌های دماهای دیبای و گذار به ابرسانایی پیش‌بینی شده است.

جزئیات محاسبات

ویژگی‌های مختلفی می‌توانند در خانواده‌های مشخصی از ابرساناها تأثیرگذار باشند. در این مورد می‌توان به مطالعه‌ی Hirsch [۱۲] اشاره کرد که سیزده ویژگی مهم در ابرسانایی را بر روی مجموعه داده‌های ۴۴ عنصر از جدول تناوبی [۱۳-۱۵] مورد بررسی قرار داده است. داده‌های ما شامل نمونه‌ها و ویژگی‌های Hirsch است. وی در کار خود تاثیر ویژگی‌های مختلف بر ابرسانایی عناصر را با روش‌های آماری بررسی کرده تا به پاسخ این سؤال دست یابد که چرا برخی عناصر در دماهای پایین ابرسانا می‌شوند و برخی خیر.

ما در این کار از روش‌های "sequential forward selection" و "wrapper" [۱۶-۱۸] که در نرم‌افزار WEKA [۱۹] اعمال شده است، استفاده کرده و از نتایج میانگین‌گیری کرده‌ایم. در روش Cfs Subset Eval زیرمجموعه‌ای از ویژگی‌ها را انتخاب کرده و احتمال پیش‌بینی نمونه‌ها در کلاس ابرسانایی برحسب این زیرمجموعه از ویژگی‌ها، نمونه‌ها سنجیده می‌شوند. سپس با اضافه و کم کردن ویژگی‌ها به زیرمجموعه و با دست‌یابی به بیشترین همبستگی بین ویژگی‌ها و توانایی کلاس‌بندی، ویژگی‌ها اولویت‌بندی می‌شوند. Wrapper Subset Eval تمام ویژگی‌ها را با استفاده از یک الگوریتم یادگیری شروع به پردازش می‌کند و ویژگی‌ها که بیشترین قدرت تفکیک نمونه‌ها در کلاس ابرسانایی/غیرابرسانایی را دارد به ترتیب انتخاب می‌شود.

جدول ۲: عملکرد مدل بر روی داده‌ها

اهمیت و ویژگی‌ها	ویژگی‌های جدول ۱ با در نظر گرفتن ضریب برهمکنش الکترون-فونون
۱	ضریب هال
۲	ثابت جفت شدگی الکترون-فونون
۳	تابع کار
۴	دمای ذوب
۵	حجم اتمی
۶	انرژی یونش دوم
۷	مدول حجمی
۸	انرژی یونش اول
۹	دمای دیبای
۱۰	رسانندگی الکتریکی
۱۱	پذیرفتاری مغناطیسی
۱۲	ظرفیت گرمایی ویژه
۱۳	جرم یونی
۱۴	رسانندگی گرمایی

تغییرات دمای بحرانی ترکیبات پیچیده‌ای مانند RBCO ها نباشد و حتی ممکن است این به خاطر نقص دانش ما از این پدیده باشد. ولی با این حال، برهمکنش الکترون-فونون یکی از پارامترهای اساسی خانواده بزرگی از ابرساناهاست. در جدول (۱) و (۲) برای گزارش تاثیر هر ویژگی نمی‌توان از اعداد و درجه استفاده کرد. این نتایج صرفاً با این تعداد و ویژگی‌ها صحیح است و اگر ویژگی دیگری اضافه شود ممکن است ترتیب این اولویت‌ها عوض شود.

این نتایج ما را بر آن داشت تا مدلی برای پیش‌بینی مقدار این ضریب برای ابرساناها ایجاد کنیم. این مدل را با دو ویژگی دمای دیبای که به نوعی معرف جفت شدگی فونونی سیستم و دمای گذار به ابرسانایی که در بردارنده چگالی حالات سطح فرمی است و با تعداد ۲۸ عنصر ابرسانای جدول تناوبی ساختیم. با استفاده از این دو ویژگی دمای دیبای و دمای بحرانی، مدلی با استفاده از جنگل تصادفی و تکنیک cross-validation ساخته و توانسته‌ایم ویژگی هدف یعنی ضریب برهمکنش الکترون-فونون را پیش‌بینی کنیم. در جدول (۳) ضریب همبستگی بین ویژگی‌ها آورده شده‌اند که همبستگی ویژگی‌های توصیف‌کننده با ویژگی هدف را دارد و چون اعداد به یک نزدیک هستند پس توصیفگرهای مناسبی برای مدل می‌باشند. در انجام یک داده‌کاوی انتخاب الگوریتم مناسب گام مهمی است. اما مهم‌ترین بخش، انتخاب داده‌های معنی‌دار ویژگی‌های مرتبط و سازگار با خروجی است. نتایج حاصل در نمودار شکل (۱) تحلیل شده‌اند که تقریباً بر روی یک خط راست قرار گرفته‌اند که مقدار دقت به دست آمده ۸۸٪ است که دقتی قابل قبول از یک داده‌کاوی در علم مواد است. اگر می‌توانستیم در حالت ایده آل خط را به صفر برسانیم و مقادیر پیش شده دقیقاً مساوی مقادیر واقعی بودند تمام نقاط بر روی خط $y = x$ قرار می‌گرفت. بزرگ‌ترین مشکلی که در این کار وجود داشت، نبودن مقدار یکتای تجربی یا محاسباتی برای مقادیر این ضریب است. به همین دلیل از مقادیر موجود این ضریب برای هر عنصر

فونون (V_{e-ph}) و پتانسیل دافعه الکترون-الکترون (V_{e-e}) زوج کوپر است.

$$\mu = N_{(0)}V_{e-e} \quad (۲)$$

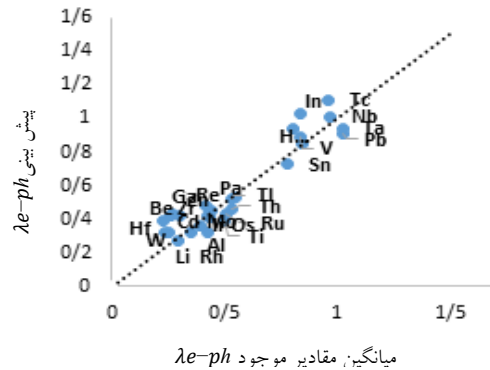
$$\lambda = N_{(0)}V_{e-ph} \quad (۳)$$

نظریه‌های مختلفی در رابطه با مقادیر μ وجود دارد که در این میان طبق نظریه Allen و Dyne [۲۰] که $\mu = 0.1$ را برای تمام فلزات در نظر گرفته‌اند. چون تقریباً مقدار ثابتی است و از یک عنصر به عنصر دیگر تفاوت آن‌چنانی ندارد، به عنوان ویژگی وارد نمی‌کنیم و λ ضریب برهمکنش الکترون-فونون است. در گام بعد، ضریب برهمکنش الکترون-فونون به عنوان یک ویژگی دیگر به مجموعه ویژگی‌ها اضافه می‌کنیم تا نتایج را در حضور این ویژگی بررسی کنیم. همان‌طور که در جدول (۲) مشاهده می‌شود این ویژگی در اولویت دوم و بعد از ضریب هال به عنوان مؤثرترین ویژگی در ابرسانایی محاسبه شده است. ممکن است سازوکار برهمکنش الکترون-فونون پاسخگوی

مراجع

- [۱] S. Curtarolo, G.L.W. Hart, M. B. Nardelli, N. Mingo, S. Sanvito, O. Levy, *Nat. Mater.* **12** (2013) 191.
- [۲] G. Ceder, *MRS Bull.* **35** (2010) 693.
- [۳] S. Curtarolo, D. Morgan, K. Persson, J. Rodgers, G. Ceder, *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 135503.
- [۴] T.O. Owolabi, K.O. Akande, S.O. Olatunji, *Appl. Phys. Res.* **6** (2014) 122.
- [۵] T.O. Owolabi, K.O. Akande, S.O. Olatunji, *Mater. Sci. Eng. C* **3** (2015) 104.
- [۶] G. Pilania, P.V. Balachandran, J.E. Gubernatis, T. Lookman, *Acta Cryst. B* **71** (2015) 507.
- [۷] G. Pilania, P.V. Balachandran, C. Kim, T. Lookman, *Front. Mater.* **3** (2016) 19.
- [۸] T.O. Owolabi, K.O. Akande, S.O. Olatunji, *J. Supercond. Novel Magn.* **28** (2015) 75.
- [۹] V. Stanev, C. Oses, A.G. Kusne, E. Rodriguez, J. Paglione, S. Curtarolo, I. Takeuchi, *Npj Comput Mater* **4** (2018) 9.
- [۱۰] O.P. Isikaku-Ironkwe, *arXiv*. (2012) 1204.0233.
- [۱۱] L. Ward, A. Agrawal, A. Choudhary, C. Wolverton, *Npj Comput Mater* **2** (2016) 16028.
- [۱۲] J.E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **55** (1997), 9007.
- [۱۳] C. Kittel, P. McEuen, P. McEuen, *Introduction to solid state physics*, New York: Wiley (1996).
- [۱۴] R.C. Weast, *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, West Palm Beach (1978).
- [۱۵] C.M. Hurd, S.P. McAlister, *J. Appl. Phys.* **50** (1979) 7526.
- [۱۶] R. Kohavi, G.H. John, *artificial intelligence* **1-2** (1997) 273.
- [۱۷] M.A. Hall, Correlation-based feature subset selection for machine learning PhD thesis, Department of Computer Science, University of Waikato, Hamilton, New Zealand, Apr. 1999.
- [۱۸] K. Kira, L. A. Rendell, *In Machine Learning Proceedings* (1992) 249.
- [۱۹] M. Hall, E. Frank, G. Holmes, B. Pfahringer, P. Reutemann, I.H. Witten, *ACM SIGKDD explorations newsletter* **1** (2009) 1.
- [۲۰] P.B. Allen, R. C. Dynes, *Phys. Rev. B* **12**, (1975), 905.

میانگین گرفتیم و عمل داده‌کاوی با میانگین روی هر عنصر انجام شده است. البته در بعضی موارد مقادیر پرت کنار گذاشته شده و در میانگین‌گیری در نظر گرفته نمی‌شوند.



شکل ۱: همبستگی بین ضرایب برهمکنش الکترون-فونون پیش‌بینی شده و مقادیر موجود

جدول ۳: ضریب همبستگی ویژگی‌ها با مقدار

ویژگی‌ها	ضریب همبستگی
T_c, λ_{e-ph}	۰.۹۷
θ_D, λ_{e-ph}	۰.۸۹

نتیجه‌گیری

در این کار با استفاده از داده‌های آموزشی شامل دماهای دیبای و گذار به ابرسانایی و به کمک الگوریتم یادگیری جنگل تصادفی توانستیم مدلی برای پیش‌بینی ضریب برهمکنش الکترون-فونون بسازیم. مقادیر پیش‌بینی با دقت ۸۸٪ با مقادیر موجود منطبق هستند. در ادامه قصد داریم این روش را به ترکیبات چند اتمی ابرسانایی تعمیم دهیم.

سپاسگزاری

بخشی از هزینه‌های این پژوهش توسط معاونت پژوهشی دانشگاه تهران تأمین شده است که نهایت تشکر و قدردانی را داریم.

اثر جوزفسون با ابرسانایی آمیخته در عایق توپولوژیک

خضرلو، مریم^۱؛ گودرزی، هادی^۱

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ارومیه

^۲ بنیاد ملی نخبگان

چکیده

در کار حاضر به بررسی القای ابرسانایی با تقارن آمیخته اسپین تک گانه و سه گانه بر حالت های سطحی یک عایق توپولوژیک سه بعدی بواسطه اثر مجاورت می-پردازیم. جفت شدگی ابرسانایی آمیخته باعث نتایج جالب توجهی در انرژی برانگیختگی شبه ذرات الکترون - حفره و گاف ابرسانایی مؤثر می گردد. طیف انرژی بدون گاف دیراک در عایق توپولوژیک، در حضور ابرسانایی آمیخته به حالت فرمیونهای جرم دار تبدیل شده و جریان جوزفسون ساختار تحت تاثیر این گاف ناشی از تقارن آمیخته قرار می گیرد.

Josephson effect with mixed superconductivity in topological insulator

Khezerlou, Maryam^{1,2}; Goudarzi, Hadi¹

¹ Department of Physics, Faculty of Science, Urmia University

² National Elites Foundation

Abstract

We investigate proximity-induced mixed spin-singlet and spin-triplet superconducting state on the surface states of a topological insulator. Such hybrid structure features fundamentally distinct electron-hole excitations and also effective superconducting subgap. We find, interestingly, the role of mixed superconducting state as representing a mass-like gap in a topological insulator. The mixed superconductivity in topological insulator manifests itself in Josephson effect.

PACS No. 68, 74

رفتار می کنند. این حالات سطحی دارای تقارن معکوس زمانی بوده و در برابر اختلالات و بی نظمی ها مقاوم می باشند. خواص ویژه این مواد آنها را برای استفاده در صنعت اسپینترونیک و ابزار کوانتومی توپولوژیکی توانا می سازد [۳ و ۴]. در کنار این خواص، القای خاصیت ابرسانایی با استفاده از اثر مجاورت در عایق توپولوژیک در سالهای اخیر توجه بسیار زیادی به خود جلب کرده است. پتانسیل جفت شدگی می تواند در سیستم نرمال عایق توپولوژیک، بدون هیچ اندرکنش بلکه به واسطه نفوذ چگالش جفت کوپر از یک ابرسانا ایجاد شود [۵ و ۶].

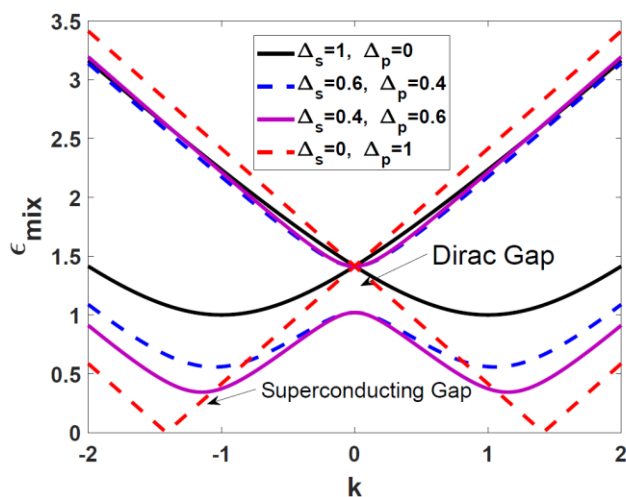
مقدمه

شکست تقارن وارونی در عایق توپولوژیک امکان بررسی ابرسانایی آمیخته اسپین تک گانه و سه گانه را فراهم می کند که گزارش های تجربی اخیر نیز مؤید این مطلب است [۱]. قبل از این، ابرسانایی آمیخته در کوپراتها گزارش شده بود که در این مواد نیز شکست تقارن وارونی منجر به اندرکش قوی اسپین - مدار می شود [۲]. در فیزیک ماده چگال، عایق توپولوژیک به علت فاز غیر بدیهی توپولوژیکی، در مقایسه با عایق های معمول دارای ویژگی - های منحصر بفرد الکترونیکی می باشد. در سطح عایق توپولوژیک سه بعدی حامل های بار به صورت فرمیونهای دیراک بدون جرم

سرعت حامل‌های بار و μ پتانسیل شیمیایی است. تقارن ذره-حفره با عملگر پادیونیتاری Ξ توصیف می‌شود که بر روی هامیلتونی دیراک و پتانسیل جفت‌شدگی ابررسانا اثر می‌کند. قطری سازی هامیلتونی (۱) منجر به رابطه انرژی پاشندگی می‌شود:

$$\varepsilon_{mix} = \alpha \sqrt{v_F^2 k^2 + \tilde{\Delta}_1 + \mu^2} + \beta \sqrt{\varepsilon_R}, \quad (2)$$

که ε_R بازبهنجاش مربوط به جفت‌شدگی آمیخته می‌باشد. $\alpha = \pm 1$ برانگیختگی الکترون و حفره را از هم جدا کرده و $\beta = \pm 1$ نوارهای ظرفیت و رسانش را نشان می‌دهد. $\tilde{\Delta}_1$ تابعی از دو کانال اسپینی $\Delta_{1(2)} = \Delta_s \pm \Delta_p e^{i\chi\theta}$ می‌باشد.



نمودار ۱: انرژی پاشندگی ابررسانایی آمیخته در عایق توپولوژیک و ایجاد گاف دیراک ناشی از دو نوع تقارن جفت‌شدگی

اگر این انرژی را با انرژی ابررسانایی نامتقارن معمول (بدون حضور سیستم دیراکی) دارای جفت‌شدگی آمیخته مقایسه کنیم به نتایج جالبی می‌رسیم. یکی از نکات مهم آن است که هامیلتونی و انرژی ابررسانایی نامتقارن معمول به ازای دو کانال اسپینی $\Delta_{1(2)}$ جدا می‌شوند، بطوریکه تغییر علامت بردار موج باعث تغییر طیف انرژی می‌شود [۸]. از اینرو پتانسیل جفت‌شدگی به تنهایی با جهت حرکت در ارتباط است. اما در حضور عایق توپولوژیکی، انرژی پاشندگی تابعی آمیخته از دو کانال اسپینی $\Delta_{1(2)}$ می‌باشد.

در طیف انرژی پاشندگی حالت تک‌گانه یا سه‌گانه، نوار رسانش و ظرفیت همدیگر را در نقطه دیراک قطع می‌کنند که این موضوع از نظر الکترونیکی دارای اهمیت ویژه‌ای می‌باشد. اما در حالت جفت‌شدگی آمیخته توپولوژی نواری دچار تغییر می‌شود بطوریکه

گزارش‌های تجربی در القای ابررسانایی اسپین تک‌گانه و سه‌گانه در حالت‌های سطحی عایق توپولوژیک سه بعدی ارائه شده است. در این حوزه، یکی از کاربردی‌ترین نتایج، مشاهده فرمیونهای مایارونا در حالات مقید آندریف تشکیل شده در فصل مشترک ابررسانا/فرومغناطیس بر پایه عایق توپولوژیک می‌باشد. فو و کین در مطالعات خود نشان دادند که معادله بوگولیوبوف-دوژن با ابررسانای معمول نوع s جفت‌شدگی غیر معمول با مولفه‌های اسپین سه‌گانه را در عایق توپولوژیکی القا می‌کند [۷]. این موضوع به علت قفل‌شدگی اسپین-اندازه حرکت رخ می‌دهد که منجر به شکست تقارن دورانی اسپین می‌شود. همچنین انرژی شبه ذرات عایق توپولوژیک در مجاورت ابررسانا با تقارن سه‌گانه، دارای گاف موثر ابررسانایی صفر است که منجر به توقف فرآیند آندریف در اتصالات مربوطه می‌شود. در کار حاضر، اثر تقارن آمیخته بر روی خواص دینامیکی عایق توپولوژیک با جزئیات مورد بحث و بررسی قرار می‌گیرد. سطوح انرژی آندریف و جریان جوزفسون برای جفت‌شدگی آمیخته محاسبه و تحلیل می‌شود.

گاف موثر ابررسانایی آمیخته

ساختار عایق توپولوژیک را بر پایه اثر مجاورت به گونه‌ای که دارای پتانسیل جفت‌شدگی آمیخته تک‌گانه و سه‌گانه باشد در نظر می‌گیریم. فرم عمومی پتانسیل جفت‌شدگی آمیخته به صورت

$$\hat{\Delta}(\vec{k}) = [\Delta_s(\vec{k})\hat{\sigma}_0 + \vec{d}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma}]i\hat{\sigma}_2 e^{i\varphi}$$

می‌باشد که ماتریس‌های پائولی بر روی فضای اسپینی اثر می‌کنند و φ بیانگر فاز ابررسانایی می‌باشد. مولفه اسپین تک‌گانه تابعی زوج از عدد موج می‌باشد که فرض بر ثابت بودن آن است. پارامتر نظم حالت سه‌گانه با تابع فرد $\vec{d}(\vec{k})$ توصیف می‌شود. برای محاسبه رابطه انرژی پاشندگی حالات سطحی عایق توپولوژیک در مجاورت ابررسانا از هامیلتونی دیراک-بوگولیوبوف-دوژن استفاده می‌شود:

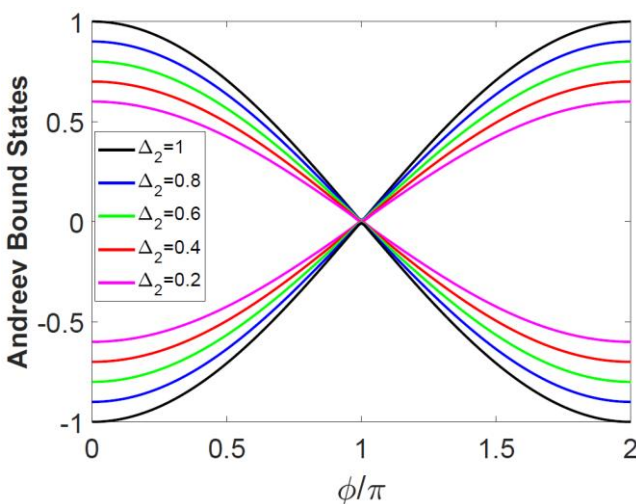
$$H = \begin{pmatrix} \hat{h}_{II}(\vec{k}) & \hat{\Delta}(\vec{k}) \\ \Xi \hat{\Delta}(\vec{k}) \Xi^{-1} & \Xi \hat{h}_{II}(\vec{k}) \Xi^{-1} \end{pmatrix} \quad (1)$$

که در این رابطه هامیلتونی ذره آزاد $\hat{h}_{II}(\vec{k}) = v_F(\hat{\sigma}_1 k_x + \hat{\sigma}_2 k_y) - \mu$ می‌باشد. v_F معرف

غیرنسبیتی مشاهده نمی‌شود. در اتصال جوزفسون، این ویژه حالات را برای دو ناحیه چپ و راست و به ازای شبه ذرات الکترون و حفره مینویسیم. پتانسیل جفت‌شدگی ابرسانا در ناحیه عایق برابر صفر است و عرض این ناحیه کوچکتر از طول همدوسی ابرسانا می‌باشد. پتانسیل شیمیایی این ناحیه امکان وقوع تونل زنی کلین را در فصل مشترک فراهم می‌کند. در این شرایط با اعمال شرط مرزی میتوان رابطه زیر را بین ویژه حالات ناحیه چپ و راست ابرسانایی در نظر گرفت:

$$\psi^L_{mix.}(x=0) = \begin{bmatrix} 1 + iZ\sigma_x & 0 \\ 0 & 1 - iZ\sigma_x \end{bmatrix} \psi^R_{mix.}(x=0),$$

که پارامتر بدون بعد Z بیانگر شدت سد ناحیه عایق می‌باشد. از جایگذاری ویژه حالات ابرسانایی آمیخته در این رابطه، به چهار معادله جبری بر حسب احتمالات گذار می‌رسیم. با اعمال شرط لازم برای داشتن پاسخ این معادلات و انجام محاسبات تحلیلی و عددی طاق فرسا سطوح انرژی آندریف در این ساختار محاسبه می‌شود. همانطور که در محاسبات تحلیلی شاهد بودیم، با افزایش دامنه جفت‌شدگی نوع سه‌گانه، گاف مؤثر ابرسانایی کاهش یافته و به ازای ابرسانایی نوع-p، مقدار آن به صفر می‌رسد. لذا باید انتظار داشته باشیم با افزایش Δ_p ، فرآیند آندریف در فصل مشترک عایق/ابرسانا متوقف شود. این موضوع به وضوح در نمودار سطوح انرژی آندریف (نمودار ۲) دیده می‌شود.



نمودار ۲: سطوح انرژی آندریف به ازای زاویه تابش صفر بر حسب اختلاف فاز دو ناحیه ابرسانا

به جای یک طیف دیراک بدون گاف، شاهد گاف انرژی در نقطه دیراک خواهیم بود که اندازه آن به دامنه‌های پراکندگی پتانسیل‌های جفت‌شدگی ابرسانایی Δ_s و Δ_p مرتبط است (نمودار ۱). در واقع جرم مؤثر نقطه دیراک به همبستگی دامنه‌های Δ_p و Δ_s مرتبط است. به روش ریاضی می‌توان با یک تبدیل یونیتاری بر روی هامیلتونی (۱)، فرم دقیق هامیلتونی گافدار را بدست آورد. گاف مؤثر ابرسانایی نیز تحت تاثیر دامنه‌های جفت‌شدگی اسپین تک‌گانه و سه‌گانه می‌باشد. فرم دقیق گاف مؤثر ابرسانایی برای حالت آمیخته از رابطه (۲) قابل محاسبه است:

$$\Delta_{eff} = \sqrt{\tilde{\Delta}_1 - \frac{|\Delta_1 - \Delta_2|^2}{4} - \frac{\tilde{\Delta}_2^2}{\mu' + \sqrt{\mu'^2 + 4\tilde{\Delta}_2^2}}} \quad (3)$$

که در این رابطه μ' بازه‌نچارش پتانسیل شیمیایی و $\tilde{\Delta}_2$ نیز تابعی از دو کانال اسپینی $\Delta_{1(2)}$ می‌باشد. موقعیت گاف مؤثر ابرسانایی بر حسب بردار موج نیز با رابطه $\Gamma = \frac{1}{2} \sqrt{\mu' + \sqrt{\mu'^2 + 4\tilde{\Delta}_2^2}}$ تعیین می‌شود (نمودار ۱).

سطوح انرژی آندریف و جریان جوزفسون

جفت‌شدگی آمیخته می‌تواند در کمیت‌های آزمایشگاهی مانند رسانندگی و جریان جوزفسون نمود پیدا کند. لذا ویژگی‌های دینامیکی بحث شده می‌تواند این کمیت‌ها را تحت تاثیر قرار دهد. برای مطالعه جریان جوزفسون در یک ساختار ابرسانا/عایق/ابرسانا، ویژه حالات هامیلتونی دیراک-بوگولیوبوف-دوژن باید محاسبه شود. این ویژه حالات بر حسب توابعی از دو کانال اسپینی $\Delta_{1(2)}$ معرفی می‌شود:

$$\psi_{mix.} = \sqrt{\frac{2}{A}} \begin{pmatrix} M_1 \\ v_F |k| M_2 e^{i\theta} \\ v_F |k| M_2 e^{i\theta} \\ M_4 \end{pmatrix} \quad (4)$$

که در این رابطه

$$A = M_1^2 + v_F^2 |k|^2 M_2^2 + v_F^2 |k|^2 M_3^2 + M_4^2$$

ضریب نرمالیزاسیون می‌باشد. هر دو کانال اسپینی بطور همزمان در ویژه حالات ظاهر می‌شود که این موضوع در سیستم‌های

دینامیک غیرنسبیتی می‌گردد. به علت نقش گاف مؤثر ابرسانایی در فرآیند انعکاس آندریف، محاسبه جریان جوزفسون از نظر کاربردی و مقایسه با داده های تجربی اهمیت فراوانی دارد. این نتایج را می‌توان با نتایج تجربی حوزه ابرسانایی آمیخته مورد مقایسه قرار داد.

سپاسگزاری

نویسندگان مقاله از حمایت مالی معاونت علمی فناوری ریاست جمهوری و بنیاد ملی نخبگان کمال تشکر و قدردانی را دارند.

مرجع‌ها

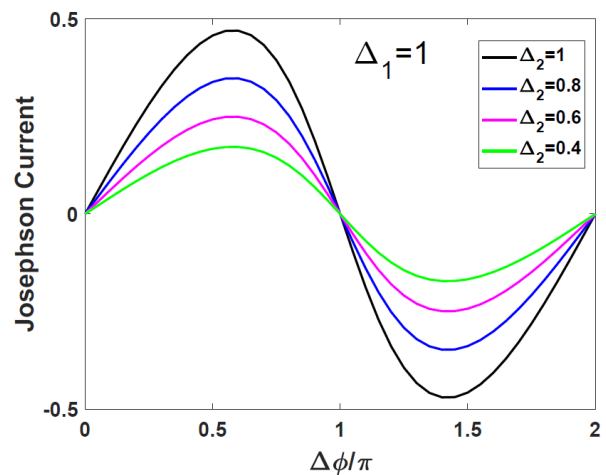
- [1] M. P. Stehno, N. W. Hendrickx, M. Snelder, T. Scholten, Y. K. Huang, M. S. Golden and A. Brinkman, *Semicond. Sci. Technol.* **32**, 094001 (2017).
- [2] P. A. Frigeri, D. F. Agterberg, A. Koga, and M. Sigrist, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 097001 (2004).
- [3] C. L. Kane, E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146802 (2005).
- [4] M. Z. Hasan, C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
- [5] J. Wang, C. Z. Chang, H. Li, K. He, D. Zhang, M. Singh, X. C. Ma, N. Samarth, M. Xie, Q. K. Xue and M. H. W. Chan, *Phys. Rev. B*, **85**, 045415 (2012).
- [6] G. Koren, T. Kirzhner, E. Lahoud, K. B. Chashka and A. Kanigel, *Phys. Rev. B*, **84**, 224521 (2011).
- [7] L. Fu, C. L. Kane, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 096407 (2008).
- [8] P. Burset, F. Keidel, Y. Tanaka, N. Nagaosa and B. Trauzettel, *Phys. Rev. B*, **90**, 085438 (2014).

سطوح انرژی بدون گاف با دوره تناوب 4π که به ازای زاویه تابش صفر بدست می‌آید، بیانگر حضور حالات مایارونا در این سیستم می‌باشد. شیب این سطوح تحت تاثیر پارامتر ابرسانایی قرار می‌گیرد و باید انتظار داشت جریان جوزفسون نیز تغییر کند. اگر زاویه تابش ابرسانایی مقداری مخالف صفر داشته باشد سطح انرژی گافدار در $\varphi = \pm\pi$ نتیجه خواهد شد.

در ادامه به بررسی جریان ناشی از سطوح انرژی آندریف در دمای صفر می‌پردازیم. جریان جوزفسون نرمالیزه ناشی از سطوح انرژی آندریف از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$I(\Delta\varphi) = I_0 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \cos\theta \frac{d\varepsilon(\phi)}{d\phi},$$

که $\varepsilon(\phi)$ سطوح انرژی آندریف می‌باشد. جریان سینوسی با دوره تناوب 2π در نمودار ۳ نشان داده شده است.



نمودار ۳: جریان جوزفسون بر حسب اختلاف فاز به ازای مقادیر مختلف جفت شدگی آمیخته

همانطور که انتظار داشتیم با افزایش دامنه جفت شدگی سه گانه از میزان جریان جوزفسون کاسته می‌شود.

نتیجه گیری

با معرفی هامیلتونی دیراک- بوگولیوبوف-دوژن در حضور جفت شدگی ابرسانایی آمیخته، فرم دقیق انرژی پاشندگی بر پایه عایق توپولوژیک محاسبه شد. تابعیت پیچیده انرژی برانگیختگی حالت آمیخته برای دو کانال اسپینی در عایق توپولوژیک منجر به اهمیت مطالعه این سیستم‌ها در مقایسه با سیستم‌هایی دارای

تأثیر شرایط مرزی و شدت برهمکنش بر جابجایی جمعیت در سیستم‌های سه ذره‌ای در مدل لاندائو-زینر

سید آرش معروفیان، سید مهدی حسینی

دانشگاه صنعتی شیراز، دانشکده فیزیک، شیراز، ایران

چکیده

در این مقاله به بررسی جابجایی جمعیت در سیستم‌های متشکل از سه ذره‌ی دو ترازه توسط میدان مغناطیسی خارجی با شرایط مرزی دوره‌ای و خطی می‌پردازیم. برای این کار همیلتونی سیستم سه ذره‌ای را بدست آورده، معادله شرودینگر وابسته به زمان را حل می‌کنیم و احتمال گذار هر ذره را به حالت برانگیخته محاسبه می‌کنیم. نتایج نشان می‌دهد که برای شرایط مرزی دوره‌ای، در حوالی شدت برهم‌کنش صفر که به معنی تغییر خواص مغناطیسی ماده است تغییرات احتمال گذار ناگهانی رخ می‌دهد، درحالی که برای مقادیر دیگر شدت برهم‌کنش، احتمال گذار، تغییرات نوسانی کمی دارد. اما برای شرایط مرزی باز، شدت برهم‌کنش تأثیر کمتری بر احتمال گذار دارد.

The Effect of boundary condition on population transfer for tree particle system in Landau-Zener model

Maroufian Seyed Aarash, Hosseini Seyed Mehdi

Shiraz University of Technology, Physics Dep., Shiraz, Iran

Abstract

In this paper the magnetic field induced population transfer for a three atoms system with periodic and free boundary conditions have been investigated. For this purpose the mentioned system Hamiltonian is obtained, with the time depended Schrodinger equation is solved and the transition probability from ground state to exited state is calculated. Results show that in periodic boundary condition, around $J = 0$, where the magnetic properties of matter changes, there is a drastic change in transition probability, while in open boundary condition, the transition probability has small oscillatory changes.

PACS No 32, 75

مدل وابستگی تابع موج به شدت جفت‌شدگی و نرخ تغییرات

انرژی با زمان اهمیت دارند [۶].

جابجایی جمعیت در سیستم‌های تک ذره‌ای و دو ذره‌ای قبلا

بررسی شده‌اند [۷و۵]. در اینجا سیستم‌های سه ذره‌ای را در دو شرط

مرزی دوره‌ای (چینش مثلثی ذرات) و شرط مرزی باز (چینش

خطی) ذرات بررسی می‌کنیم.

روش محاسبات

همیلتونی لاندائو-زینر برای سیستم تک ذره‌ای دو ترازه در به

صورت زیر داده می‌شود [۷]

مقدمه

مطالعه‌ی سیستم‌های دو ترازه کاربردهای گسترده‌ای دارند. در این

زمینه می‌توان از پردازش اطلاعات کوانتومی [۱]، کنترل دینامیک

مولکولی [۲]، تشدید مغناطیسی هسته‌ای [۳] و طیف‌سنجی و

بیوفیزیک [۴] به عنوان مواردی یاد کرد که از این مدلسازی استفاده

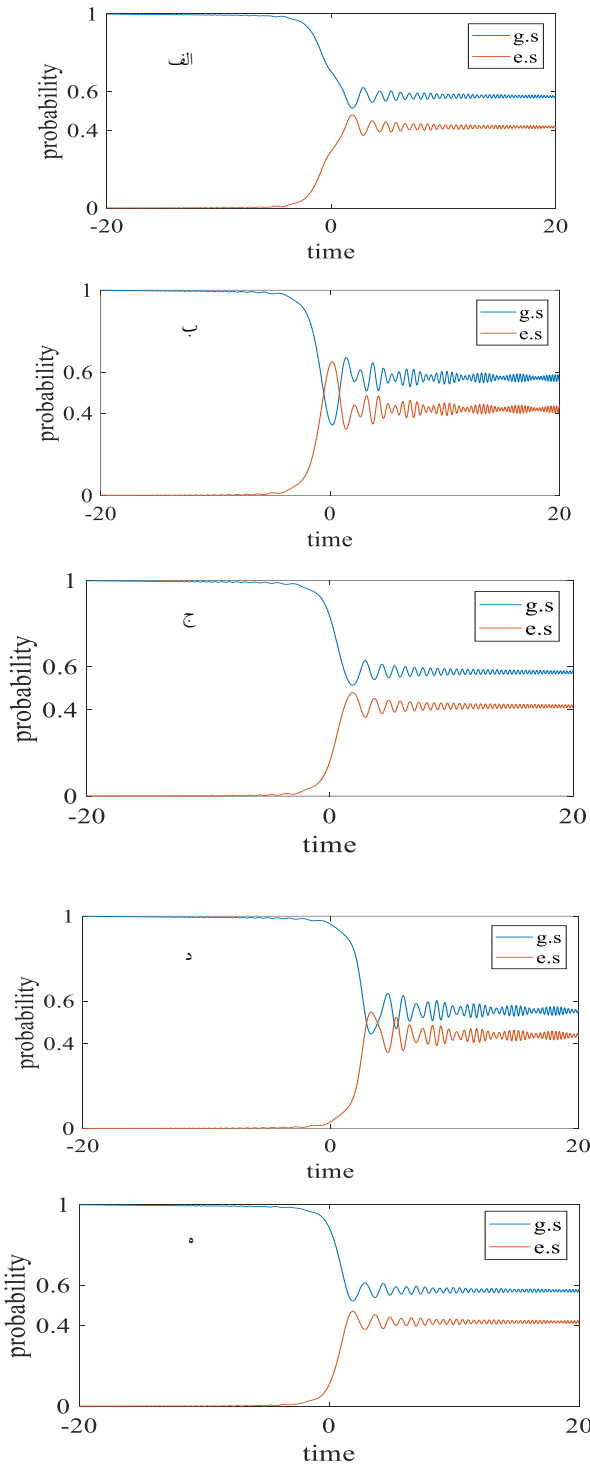
می‌کنند. سیستم‌های کوانتومی مختلف چند ترازوی را می‌توان با

تقریب خوبی به عنوان سیستم‌های دو ترازه در نظر گرفت. یکی از

مدل‌های شناخته شده در مدلسازی سیستم‌های کوانتومی، مدل

لاندائو-زینر است که با استفاده از میدان مغناطیسی وابسته به زمان

جابجایی جمعیت ترازها را مورد بررسی قرار می‌دهد [۵]. در این



شکل ۱- احتمال گذار با شدت برهم‌کنش‌های متفاوت برای ذرات اول و دوم شرط مرزی باز، الف - ذره‌ی اول با $J=1$ ، ب - ذره‌ی دوم با $J=1$ ، ج - ذره‌ی اول با $J=-1$ ، د - ذره‌ی اول با $J=0$ و ه - $J=-1$

شکل ۱ احتمال گذار برای ذره‌ی اول و دوم در شرط مرزی باز تحت پتانسیل لاندائو زرن را نشان می‌دهد. از آنجایی که شرایط

$$H_{LZ}(t) = \begin{pmatrix} \alpha t/2 & g \\ g & -\alpha t/2 \end{pmatrix} \quad (1)$$

α نرخ تغییر انرژی در مدل لاندائو-زرن است که متناسب با تغییر میدان مغناطیسی می‌باشد و عددی حقیقی است. g نرخ تونل‌زنی بین ترازها در $t=0$ می‌باشد. همانطور که مشخص است همیلتونی لاندائو-زرن اولیه برای سیستمی دو ترازه‌ی تک ذره‌ای تعریف شده است که به روش زیر آن را برای سیستمی سه ذره‌ای تعمیم می‌دهیم:

$$H = H_{LZ} + H_1 \quad (2)$$

$$H_{LZ} = H_{in} \otimes I_{2 \times 2} \otimes I_{2 \times 2} + I_{2 \times 2} \otimes H_{in} \otimes I_{2 \times 2} + I_{2 \times 2} \otimes I_{2 \times 2} \otimes H_{in} \quad (3)$$

برای سیستمی که از بیشتر از یک ذره تشکیل شده جمله‌ی برهم‌کنشی بین ذرات را بصورت زیر در نظر می‌گیریم [۷].

$$H_{int} = J(\sigma_z \otimes \sigma_z \otimes I_{2 \times 2} + I_{2 \times 2} \otimes \sigma_z \otimes \sigma_z + \sigma_z \otimes I_{2 \times 2} \otimes \sigma_z) \quad (4)$$

در نتیجه همیلتونی اولیه و همیلتونی برهم‌کنشی دو ماتریس 8×8 خواهند بود. $I_{2 \times 2}$ ماتریس یک 2×2 و σ_z ماتریس پاولی هستند. پارامتر J را به عنوان شدت جفت‌شدگی تبادلی بین ذرات تعریف می‌کنیم که عددی صحیح است.

در این مقاله کمیت‌ها را به روش زیر بی‌بعد کردیم: $J = J/g, \tau = \hbar/g$ همچنین تعریف می‌کنیم $\hat{t} = t/\tau$ و $\alpha = \alpha\hbar/g$. کمیت‌هایی که با علامت $\hat{}$ تعریف شده‌اند بدون بعد هستند. اکنون معادله شرودینگر را به صورت زیر بازنویسی می‌کنیم.

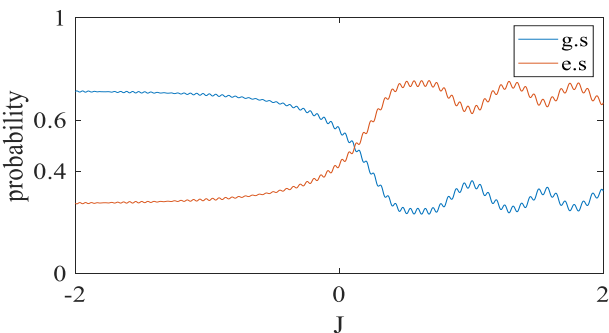
$$i \frac{\partial \psi(\hat{t})}{\partial \hat{t}} = (\alpha \hat{t} + g) \psi(\hat{t}) \quad (5)$$

حالا با حل معادله شرودینگر و بدست آوردن معادله موج مربوط به گذارهای مربوطه می‌توانیم احتمال گذار را حساب کنیم.

نتایج و بحث

شکل های ۲- الف و ۲- ب نشان دهندهی احتمال گذار در شرایط مرزی باز با شدت برهم کنش های ۱ و ۱- می باشند. چون در شرط مرزی دوره ای شرایط برای هر سه ذره یکسان است، نمودارهای احتمال گذار مربوط به هر سه ذره یکسان می باشد. در این شکل مشاهده می شود که برای شدت برهم کنش برابر ۱ احتمال نهایی گذار ۰/۶ است در حالی که برای $J = -1$ این مقدار به حدود ۰/۵ کاهش می یابد. در این حالت نیز افت و خیزهایی قبل از رسیدن احتمال گذار به مقدار نهایی مشاهده می شود. در این شرط مرزی علامت J در احتمال نهایی گذار موثر است، درحالی که همانطور که در شکل ۱ دیدیم علامت شدت برهم کنش تاثیر قابل مشاهده ای در احتمال نهایی گذار ندارد.

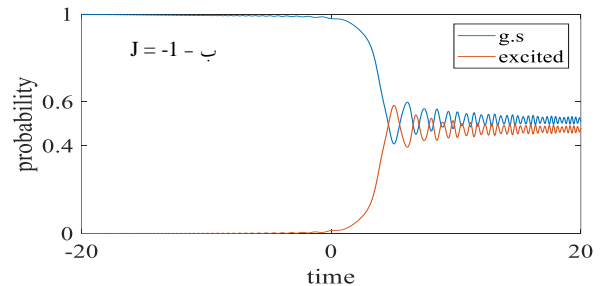
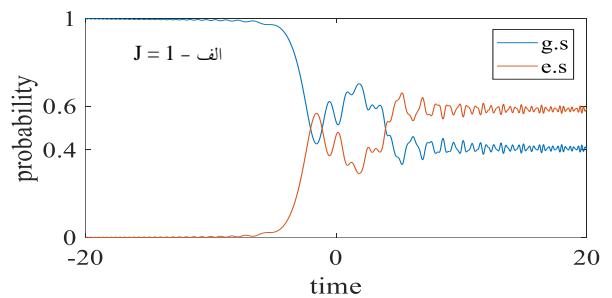
در ادامه به بررسی دقیق تر تاثیر شدت برهم کنش بر احتمال نهایی گذار در این دو شرط مرزی می پردازیم. برای این منظور احتمال نهایی گذار را بصورت میانگین ده درصد پایانی احتمال گذار بر حسب زمان محاسبه می کنیم.



شکل ۳- نمودار احتمال نهایی بر حسب J برای شرط مرزی دوره ای.

شکل ۳ نشان دهندهی تغییرات احتمال نهایی گذار بر حسب J در شرط مرزی دوره ای است. در این شرط مرزی احتمال گذار در حوالی $J=0$ تغییرات شدیدتری دارد. محدوده ی تغییر علامت J در واقع محدوده ی تغییر خواص ماده از فرومغناطیس (برای J های منفی) به پادفرومغناطیس (برای J های مثبت) است. برای J های مثبت رفتار نوسانی با دو فرکانس دیده می شود در حالیکه برای J های منفی رفتار نوسانی نامحسوس است.

مرزی برای ذره ی اول و سوم یکسان است از نشان دادن نتایج برای ذره ی سوم صرف نظر کردیم. شکل ۱- الف نشان می دهد که ذره اول که در حالت پایه قرار داشته است با گذشت زمان از حالت پایه خارج می شود و نهایتاً با احتمال ۰/۶ در حالت پایه می ماند و با احتمال ۰/۴ به حالت برانگیخته گذار می کند. شکل ۱- ب نیز نشان می دهد که ذره دوم نیز اتفاق مشابهی را تجربه می کند، اما احتمال برحسب زمان دارای افت و خیزهای اضافه ای نیز است. دلیل تفاوت آن است که برهم کنش ذره دوم از هر دو سمت است در حالی که ذره اول تنها از یک طرف برهم کنش دارد. شدت برهم کنش در این دو شکل برابر ۱ است. شکل های ۱- ج و ۱- د احتمال گذار برای ذره های اول و دوم با شدت برهم کنش ۱- را نشان می دهد. در این شکل ها دیده می شود که احتمال نهایی گذار مشابه حالت قبل است. شکل ۱- ه احتمال گذار برای شرط مرزی باز با مقدار J برابر با صفر را نشان می دهد. در این حالت شرایط مرزی برای هر سه ذره یکسان است. همچنین با شدت برهم کنش برابر با صفر احتمال گذار برای هر سه ذره در هر دو شرط مرزی دقیقاً برابر با هم است. از مقایسه این شکل ها دیده می شود که برای شدت برهم کنش مثبت زمان گذار به سمت زمان های منفی و برای شدت برهم کنش منفی زمان گذار به سمت برهم کنش مثبت انتقال می یابد که با نتایج سیستم دو ذره ای نیز همخوانی دارد [۷].

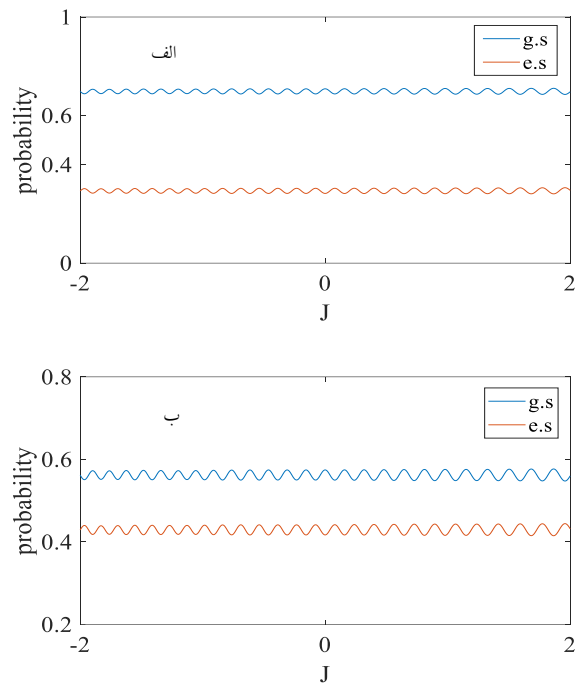


شکل ۲- احتمال گذار در شرط مرزی دوره ای برای شدت برهم کنش ۱ (الف)، ۱- (ب)

[۵] F. Sarreshtedari and M. Hosseini: "Tunable Landau-Zener transitions using continuous-and chirped-pulse-laser couplings": *Physical Review A* **95**, No. 3 (2017) 033834, 1-6.

[۶] Y. Avishai and Y. B. Band; "Landau-Zener problem with decay and dephasing": *Physical Review A* **90**, No. 3 (2014) 032116, 1-15.

[۷] M. Hosseini, and F. Sarreshtedari: "Investigation of the laser controlled Landau-Zener mechanism in a coupled quantum system": *Journal of the Optical Society Of America B* **34**, No 10 (2017) 2097 - 2103



شکل ۴ - نمودار تغییرات احتمال گذار بر حسب J برای ذرات اول (الف) و دوم (ب) در شرط مرزی باز.

شکل های ۴ الف و ب برای ذرات اول و دوم در شرط مرزی باز هستند. در این شکل ها مشاهده می شود که تغییرات J تنها باعث تغییر نوسانی کوچکی در احتمال گذار نهایی می شود.

نتیجه گیری

در این مقاله تاثیر شرایط مرزی و شدت جفت شدگی بین ذرات را در سیستم های سه ذره ای با شرایط مرزی دوره ای باز بر میزان احتمال گذار بررسی کردیم. دیدیم که در شرایط مرزی دوره ای، تغییرات J تفاوت زیادی در احتمال گذار بوجود می آورد. هرچند تغییر مقدار J تاثیری بر میزان احتمال گذار در شرط مرزی باز ندارد. احتمال گذار بر حسب J نشان می دهد که نظم ماده از فرومغناطیس به پادفرومغناطیس تغییر می کند.

مراجع

- [۱] M. Saffman, T. G. Walker and K. Mølmer: "Quantum information with Rydberg atoms of *Modern Physics*": **82**, No. 3 (2010) 2313-2363
- [۲] S. A. Diddams, J. C. Bergquist, S. R. and C. W. Oates: "Standards of time and frequency at the outset of the 21st century"; *Science* **306**, No. 5700 (2004) 1318-1324.
- [۳] M. Shapiro and P. Brumer: "Coherent control of molecular dynamics": *Reports on Progress in Physics* **66**, No. 6 (2003) 859-942.
- [۴] W. S. Warren: "Effects of pulse shaping in laser spectroscopy and nuclear magnetic resonance": *Science* **242**, No. 4880 (1988) b878-884.

بررسی پایداری ساختاری، ساختار الکترونی و ویژگی‌های نیم‌فلزی و مغناطیسی ترکیبات نیم-

هویسلر d^0-d KXC (X=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co)

دهقان، علی؛ دعوت‌الحق، سعید

بخش فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز، شیراز ۷۱۹۴۶

چکیده

با استفاده از محاسبات اصول اولیه ساختار الکترونی و در چارچوب نظریه تابعی چگالی، ویژگی‌های الکترونی، مغناطیسی و پایداری ساختاری ترکیبات جدید نیم-هویسلر d^0-d KXC (X=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co) مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهد که $KTiC$ ، KVC ، $KCrC$ و $KMnC$ فرومغناطیس-های نیم‌فلزی می‌باشند در حالی که بقیه ترکیبات رفتار فلزی بروز می‌دهند. بررسی دقیق چگالی حالت‌های الکترونی جزئی اتمی نشان داد که هیبریداسیون کووالانسی بین ترازهای $3d$ فلزات واسطه با اوربیتال تراز $2p$ اتم C موجب بروز رفتار نیم‌فلزی می‌شود. گشتاورهای مغناطیسی کل به دست آمده برای ترکیبات نیم‌فلز تحت مطالعه در توافق با رابطه اسلیتر-پاولینگ $M_{tot}=Z_{tot}-8$ می‌باشد. با توجه به انرژی تشکیل منفی، شبه پایداری ترمودینامیکی، دمای کوری بالا و گاف نیم‌فلزی بزرگ، ترکیبات فوق نامزدهای خوبی برای کاربردهای اسپینترونیکی محسوب می‌شوند.

Study of structural stability, electronic structure, half-metallic and magnetic properties of d^0-d half-Heusler compounds KXC (X=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co)

Dehghan, Ali; Davatolhagh, Saeed

Dept. of Physics, College of Sciences, Shiraz University, Shiraz 71946

Abstract

Using first-principles electronic structure calculations based on density functional theory, the electronic, magnetic, and structural properties of novel d^0-d half-Heusler compounds KXC (with X=Sc, Ti, V, Mn, Fe, Co) are investigated. The results indicate that $KTiC$, KVC , $KCrC$ and $KMnC$ are half-metallic ferromagnets, while the other compounds behave like metals. A detailed study of the partial density of states showed that the covalent hybridization between transition metal $3d$ and C $2p$ states is mainly responsible for the half-metallic behavior. The total magnetic moments of the half-metallic compounds under study are in agreement with $M_{tot}=Z_{tot}-8$. In the light of their negative formation energies, thermodynamic metastability, high Curie temperatures and large half-metallic gaps, the above compounds are good candidates for spintronic applications.

PACS No.

دیگر به منظور انتقال اطلاعات انجام گرفته که منجر به ظهور علم اسپینترونیک در دهه ۱۹۸۰ گردید [۱]. هدف نهایی اسپینترونیک استفاده عملی از ترابرد اسپینی در پردازش، ذخیره و انتقال اطلاعات می‌باشد. در بسیاری از مواد به علت وجود تقارن‌های برگشت زمان و وارونی فضا، الکترون‌ها با اسپین بالا و پایین تبهگن بوده و مانند یکدیگر رفتار می‌کنند؛ لذا قطبش اسپینی در

مقدمه

علم الکترونیک تنها از درجه آزادی فضایی الکترون‌ها برای انتقال اطلاعات استفاده می‌کند و پیشرفت‌های این علم به حرکت انتقالی الکترون محدود می‌شود. با کشف درجه آزادی اسپینی، علاوه بر بار الکتریکی، به عنوان یکی از مشخصه‌های مهم الکترون، تلاش‌های زیادی برای استفاده از اسپین به عنوان خاصیت ذاتی

حاصل می‌شوند، به عنوان یکی از جذاب‌ترین گروه‌های بروز دهنده رفتار نیم‌فلزی معرفی گردیده‌اند [۵،۶]. در این مقاله ساختار الکترونی، ویژگی‌های مغناطیسی، و پایداری ساختاری ترکیبات نیم‌هویسلر d^0 - d KXC (X=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co) بر مبنای محاسبات اصول اولیه مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که خاصیت نیم‌فلزی در حالت پایه ۴ مورد از این ترکیبات شامل KCrC، KVC، KTiC و KMnC بروز می‌کند.

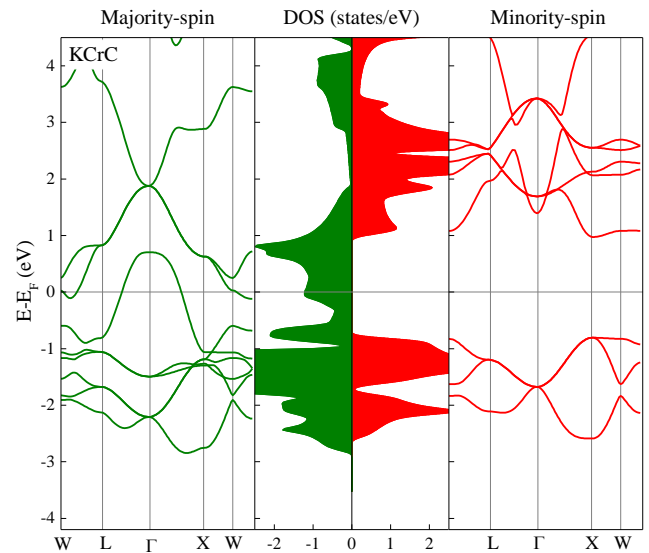
روش محاسبات

محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی Wien2k [۷] انجام شده است. این بسته محاسباتی، معادلات تک ذره‌ای کوهن-شم را با استفاده از روش امواج تخت بهساخته‌ی خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) حل می‌کند. از تابعی تبادل همبستگی در تقریب شیب تعمیم‌یافته (GGA) استفاده گردید. مقدار پارامتر مهم $R_{mt}K_{max}$ که در آن R_{mt} و K_{max} به ترتیب بیانگر کوچکترین شعاع کره مافین-تین و بزرگترین بردار موج قطع می‌باشند، ۸ انتخاب گردید. انرژی جداسازی الکترون-های مغزه و رسانشی ۶- ریدبرگ و تعداد نقاط در منطقه اول بریلوئن $27 \times 27 \times 27$ در نظر گرفته شده‌اند.

نتایج و بحث

ساختار بلوری ترکیبات سه‌تایی نیم‌هویسلر (گروه تقارنی $F\bar{4}3m$ ، شماره بلورشناسی ۲۱۶) شامل یک شبکه براوه fcc با پایه سه اتمی است که اتم‌ها بر روی قطر مکعب و در موقعیت‌های $(0, 0, 0)$ ، $(0.25, 0.25, 0.25)$ و $(0.50, 0.50, 0.50)$ قرار گرفته‌اند.

خواص الکترونی: به منظور مطالعه ساختار الکترونی ترکیبات نیم-هویسلر مورد بررسی؛ ابتدا انرژی کل بر حسب حجم یاخته بسط بلور محاسبه و با استفاده از برازش منحنی توسط معادله حالت مورناگان [۸] ثابت شبکه بهینه هر ترکیب حاصل گردید. سپس محاسبات ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی کل برای هر ترکیب در ثابت شبکه بهینه انجام گرفت. نتایج نشان می‌دهد که از مجموع ۷ ترکیب تحت مطالعه، KCrC، KVC، KTiC و KMnC در نزدیکی تراز فرمی برای یک کانال اسپینی رفتاری فلزی دارند و برای کانال دیگر مانند عایق رفتار می‌کنند و در نتیجه



شکل (۱): ساختار نواری انرژی و چگالی حالت‌های الکترونی (DOS) ترکیب KCrC. ساختار نواری قطعه سمت راست و چپ به ترتیب مربوط به اسپین بالا و پایین می‌باشد.

این مواد وجود نداشته و خواص برابر مستقل از اسپین الکترون است. از آنجایی که وجود قطبش اسپینی از ملزومات ابزارهای اسپینترونیک می‌باشد، دستیابی به موادی که در آن‌ها اسپین الکترون در حالت بالا و پایین رفتار کاملاً متفاوتی از خود نشان دهند و منجر به قطبش اسپینی کامل گردند از اهمیت بالایی برخوردار می‌باشد.

در سال ۱۹۸۳ دسته جدیدی از مواد تحت عنوان نیم‌فلز معرفی شدند که در نزدیکی تراز فرمی برای یک کانال اسپینی رفتاری فلزی داشته و برای کانال اسپینی دیگر مانند عایق رفتار می‌کردند و در نتیجه منجر به قطبش اسپینی کامل در تراز فرمی می‌گردید [۲]. با توجه به اهمیت خاصیت نیم‌فلزی در توسعه صنعت اسپینترونیک، مطالعات زیادی به منظور کشف، بررسی و ساخت آلیاژهای نیم‌فلزی انجام گرفت که منجر به معرفی ساختارهای نیم-فلزی بسیاری گردید. در میان ترکیب‌های نیم‌فلزی معرفی شده، ساختارهای نیم-هویسلر به دلیل سهولت در ساخت، دمای کوری بالا و سازگاری ساختاری با نیم‌رساناهای مرسوم، بیشتر از دیگر ترکیبات مورد بررسی قرار می‌گیرند [۳،۴]. به تازگی و برای اولین بار ترکیبات نیم-هویسلر d^0 - d که از جایگزین کردن فلز واسطه پایین‌ظرفیتی در نیم-هویسلرهای مرسوم، با یک اتم d^0 فلزات قلیایی و یا قلیایی خاکی با پیکربندی الکترونی $ns^{l+2}, (n-1)d^0$

قلیایی **K** در شکل (۲) به میزان ۱۰ برابر بزرگتر است). بنابراین پر واضح است که هیبریداسیون $p-d$ بین ترازهای اتم فلزات واسطه و اتم کربن نقش اساسی در بروز خاصیت نیم‌فلزی در بلورهای مورد مطالعه ایفا می‌کند؛ همچنین عدم بروز این خاصیت در ترکیبات دیگر را نیز می‌توان به ضعیف بودن هیبریداسیون $p-d$ مطلوب، نسبت داد.

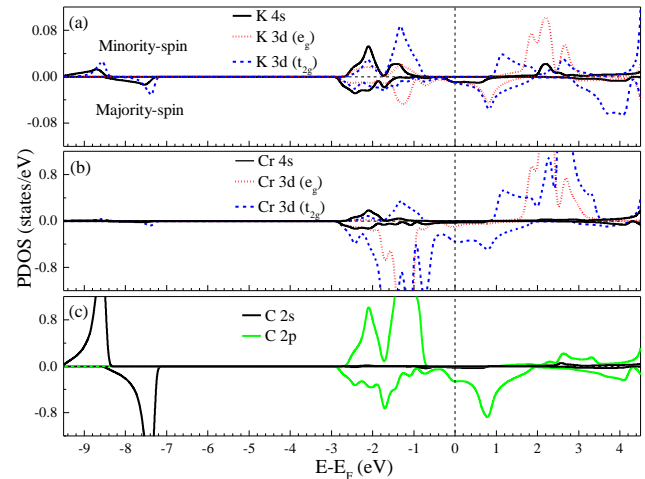
خواص مغناطیسی: شرط لازم برای بروز رفتار نیم‌فلزی در یک ترکیب، عدد صحیح بودن گشتاور مغناطیسی کل می‌باشد. گشتاورهای مغناطیسی جزئی و کل برای ترکیبات نیم‌فلز تحت مطالعه مطابق با جدول (۲) محاسبه شدند. مشاهده می‌گردد که گشتاورهای مغناطیسی کل اعدادی صحیح می‌باشند که در توافق کامل با رابطه $M_{\text{tot}} = Z_{\text{tot}} - 8$ اسلیتر-پاولینگ قرار دارند (Z_{tot} تعداد کل الکترونهاى ظرفیت بر واحد فرمول شیمیایی است). با دقت در مقادیر گشتاورهای مغناطیسی جزئی ملاحظه می‌شود که سهم غالب در هر ترکیب عمدتاً ناشی از فلزات واسطه V ، Ti ، Cr و Mn می‌باشد که این نتیجه سازگار با شکاف تبادلی بزرگ در اوربیتال d این اتم‌ها، نمایش داده شده در شکل (۲) می‌باشد.

جدول (۲): گشتاورهای مغناطیسی جزئی و کل ترکیبات KVC ، $KTiC$ ، $KCrC$ و $KMnC$ بیانگر گشتاور مغناطیسی در ناحیه بین جایگاهی بلور است. (همه مقادیر بر حسب μ_B می‌باشند).

KXC	KTiC	KVC	KCrC	KMnC
M_K	۰٫۰۴	۰٫۰۲	-۰٫۰۱	۰٫۰۱
M_X	۰٫۹۰	۲٫۳۷	۳٫۷۳	۴٫۳۲
M_C	-۰٫۲۲	-۰٫۵۹	-۰٫۹۲	-۰٫۵۵
M_{int}	۰٫۲۸	۰٫۲۰	۰٫۲۰	۰٫۲۲
M_{tot}	۱٫۰۰	۲٫۰۰	۳٫۰۰	۴٫۰۰
T_c	۲۲۵	۱۱۰٫۸	۱۱۳۵	۹۲۱

از ویژگی‌های یک ترکیب نیم‌فلز با جذابیت‌های کاربردی، وجود دمای کوری به حد کافی بالاتر از دمای اتاق می‌باشد. جهت تخمین این مشخصه مهم در ترکیبات مورد مطالعه، ابتدا با اندازه‌گیری اختلاف انرژی کل در حالت‌های فرومغناطیسی و غیرمغناطیسی، ثابت‌های جفت‌شدگی تبادلی توسط رابطه زیر محاسبه گردید [۹]:

$$J = \frac{\Delta E_{NM-FM}}{12|M_{TM}|^2}, \quad (1)$$



شکل (۲). منحنی چگالی حالت‌های جزئی اتمی (PDOS) اتمی ترکیب نیم-هویسلر $KCrC$

منجر به بروز خاصیت نیم‌فلزی با قطبش اسپینی کامل در تراز فرمی می‌گردند. شکل (۱) ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی کل مربوط به ترکیب $KCrC$ را به عنوان نمونه نشان می‌دهد. ثابت شبکه بهینه (تعادلی) و گاف انرژی نیم‌فلزی (حداقل انرژی لازم برای برانگیختگی اسپینی) ترکیبات نیم‌فلز در جدول (۱) گزارش شده‌اند. از مشخصه‌های قابل ذکر این ترکیبات گاف انرژی نیم‌فلزی بزرگ و ثابت شبکه‌های بهینه کوچک در مقایسه با نیم‌فلزات نیم‌هویسلر معمولی می‌باشد [۳، ۴].

جدول (۱): ثابت شبکه تعادلی a بر حسب آنگستروم و گاف انرژی نیم‌فلزی E_{HM} بر حسب الکترون‌ولت برای ترکیبات نیم‌فلز تحت مطالعه.

	KTiC	KVC	KCrC	KMnC
a (Å)	۵٫۹۷	۵٫۹۶	۶٫۰۷	۶٫۱۳
E_{HM} (eV)	۰٫۰۴	۰٫۲۴	۰٫۷۲	۰٫۲۰

به منظور بررسی ماهیت نوارهای مختلف انرژی و نیز منشأ خصوصیت نیم‌فلزی ترکیبات تحت مطالعه، چگالی حالت‌های جزئی اتمی به صورت وابسته به اسپین مورد محاسبه قرار گرفت که برای ترکیب $KCrC$ در شکل (۲) به عنوان نمونه نشان داده شده است. لازم به ذکر است که رفتار ترکیبات نیم‌فلز دیگر کاملاً مشابه این ترکیب بوده و در اینجا نشان داده نشده‌اند. با دقت در نحوه مشارکت اوربیتال‌های مختلف اتم‌ها در شکل (۲) مشاهده می‌شود که نقش حالت‌های $Cr-3d$ و $C-2p$ در انرژی‌های نزدیک به تراز فرمی بسیار برجسته‌تر از اوربیتال‌های K می‌باشد (مقیاس چگالی حالت‌های جزئی در مورد اتم‌های Cr و C نسبت به فلز

ترکیبات نیم فلز تحت مطالعه مطابق جدول (۳) محاسبه گردید. لازم به ذکر است که به دلیل تقارن مکعبی ساختارهای نیم هویسلر تنها سه ضریب مستقل C_{11} ، C_{12} و C_{44} وجود خواهد داشت. مدول حجمی ترکیبات نیز طبق رابطه $B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12})$ محاسبه و در جدول (۳) گزارش شده است. معیار پایداری مکانیکی (یا شبه پایداری ترمودینامیکی) یک ترکیب با تقارن مکعبی برقرار بودن همزمان چهار شرط زیر می باشد [۱۰]:

$$\begin{cases} \text{I) } C_{11} > 0 \\ \text{II) } (C_{11} - C_{12}) > 0 \\ \text{III) } C_{44} > 0 \\ \text{IV) } C_{12} < B < C_{11} \end{cases} \quad (2)$$

مطابق با نتایج جدول (۳) ملاحظه می شود که تمامی ترکیبات نیم-فلز مورد مطالعه، شرایط پایداری مکانیکی فوق را در ثابت شبکه بهینه خود دارند که از دیدگاه عملی بسیار حائز اهمیت می باشد.

نتیجه گیری

ویژگی های الکترونی، مغناطیسی و پایداری ساختاری ترکیبات نیم هویسلر d^0-d جدید ($X=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co$) با استفاده از محاسبات اصول اولیه ساختار الکترونی و در چارچوب نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان می دهد که ۴ مورد از این ترکیبات شامل $KTiC$ ، KVC ، $KCrC$ و $KMnC$ در ثابت شبکه بهینه خود رفتار نیم فلزی بروز می دهند. گشتاورهای مغناطیسی کل به دست آمده برای این مواد در توافق با رابطه اسلیتر-پاولینگ $M_{tot} = Z_{tot} - 8$ قرار دارد. با توجه به انرژی تشکیل منفی، شبه پایداری ترمودینامیکی، دمای کوری بالا و گاف نیم فلزی بزرگ، ترکیبات فوق نامزدهای خوبی برای کاربردهای اسپینترونیکی محسوب می شوند.

مرجع ها

- [1] S. Bhatti, et al., *Mater. Today* **20**, 530 (2017).
- [2] R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen, and K. H. J. Buschow, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 2024 (1983).
- [3] S. Esteki, F. Ahmadian, *J. Magn. Magn. Mater.* **438**, 12 (2017).
- [4] I. Galanakis, P. H. Dederichs, and N. Papanikolaou, *Phys. Rev. B* **66**, 174429 (2002).
- [5] A. Dehghan, S. Davatolhagh, *J. Alloys Compd.* **772**, (2019) 132.
- [6] S. Davatolhagh, A. Dehghan, *Physica C* **552**, (2018) 53.
- [7] K. Schwartz, P. Blaha, *Comput. Mater. Sci.* **128**, 259 (2003).
- [8] F. D. Murnaghan, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **30**, 244 (1944).
- [9] N. Sivasdas, M. W. Daniels, R. H. Swendsen, S. Okamoto, D. Xiao, *Phys. Rev. B* **91**, 235425 (2015).
- [10] M. Born and K. Huang, *Dynamical Theory and Experiment I*, Springer Verlag, Berlin, (1982).

که صورت کسر بیانگر اختلاف انرژی کل در حالت های فرومغناطیسی و غیرمغناطیسی و M_{TM} گشتاور مغناطیسی اتم فلزات واسطه می باشند. سپس با شبیه سازی مونت کارلو مدل آیزینگ، دمای کوری توسط رابطه $T_c = 9.79 \frac{J}{k_B}$ مطابق با جدول (۲) حاصل گردید (k_B ثابت بولتزمن می باشد). ملاحظه می گردد که دمای کوری ترکیبات نیم فلز KVC ، $KCrC$ و $KMnC$ بسیار بالاتر از دمای اتاق است.

پایداری: همان طور که در مقدمه بیان شد یکی از مشکلات اساسی در مسیر کاربردی کردن ترکیبات نیم فلزی، ناپایداری شیمیایی و یا ساختاری آنهاست؛ به گونه ای که آلیاژهای نیم فلزی با جذابیت های فراوان نظری، در عمل تنها به صورت لایه های نازک و با ضخامت بسیار اندک، قابل ساخت یا بهره برداری عملی هستند. انرژی تشکیل هر ساختار که از تفاضل انرژی کل و مجموع انرژی های عناصر سازنده آن ساختار حاصل می شود، معیار مناسبی برای پایداری شیمیایی می باشد. منفی بودن انرژی تشکیل دلالت بر ترجیح هر کدام از عناصر به تشکیل بلور نسبت به مجزا بودن از یکدیگر دارد. مقادیر انرژی تشکیل ΔE_f برای نیم فلزات تحت مطالعه در جدول (۳) گزارش شده است؛ که ملاحظه می شود برای همه ترکیبات مقادیر منفی حاصل شده است و این دلیلی بر پایداری شیمیایی این ترکیبات می باشد.

جدول (۳): انرژی تشکیل ΔE_f بر حسب الکترون ولت، ضرایب الاستیک C_{11} ، C_{12} ، C_{44} بر حسب گیگاپاسکال و مدول حجمی B بر حسب گیگاپاسکال برای نیم فلزات تحت مطالعه.

	$KTiC$	KVC	$KCrC$	$KMnC$
ΔE_f	-۱٫۰۸	-۰٫۲۱	-۰٫۱۵	-۰٫۰۹
C_{11}	۱۱۳٫۷	۱۴۰٫۰	۹۰٫۴	۳۷٫۲
C_{12}	۱۰٫۱	۱۳٫۲	۱۵٫۸	۱۶٫۴
C_{44}	۱۹٫۳	۵٫۱	۸٫۸	۱۲٫۰
B	۴۴٫۴	۵۵٫۵	۴۰٫۵	۲۳٫۴

یکی از ملاک های اساسی کاربردی کردن ترکیبات نیم فلز در صنعت اسپینترونیک، پایداری مکانیکی آنهاست. محاسبه ضرایب الاستیک و مطالعه روابط بین آنها معیاری مناسب جهت بررسی پایداری مکانیکی یک ترکیب می باشد. بدین منظور ضرایب الاستیک

گشتاور اسپینی القائی توسط کوپلاژ اسپین-مدار راشبا و درسلهائوس در نانودیواره مغناطیسی

وحید فلاحی

گروه مهندسی اپتیک و لیزر، دانشگاه بناب، ۵۵۵۱۷۶۱۱۶۷ بناب، ایران

چکیده

ترابرد نظری از یک دیواره مغناطیسی سنجاق شده در یک نانوتنگش ایجاد شده در نانوسیم های $(Ga,Mn)As$ در حضور برهمکنش های اسپین-مدار راشبا و درسلهائوس مورد بررسی قرار گرفته است. مؤلفه های آدیاباتیکی و غیرآدیاباتیکی گشتاور اسپینی که بر حسب گرادیان چگالی جریان اسپینی بیان می شوند، محاسبه شده است. یک رفتار نوسانی در گشتاور انتقال اسپینی به دلیل بازتابهای شدید در دیواره های تیز با گرادیان مغناطش بزرگ مشاهده گردیده است. نشان داده شده است که شدت نوسانات برای گشتاور اسپینی غیرآدیاباتیکی با مقدار منفی پارامتر راشبا α_x افزایش یافته، در حالی که با افزایش مقادیر مثبت α_x رفتار کاهشی دارد. با این حال، گشتاور اسپینی غیرآدیاباتیکی با مقدار $|\alpha_y|$ ، بدون توجه به علامت آن، افزایش می یابد. بعلاوه، کوپلاژ درسلهائوس β به طور قابل ملاحظه ای نمی تواند مؤلفه Z گشتاور اسپینی را تغییر دهند، در حالی که دو مؤلفه دیگر به طور موثرتری توسط برهمکنش اسپین-مدار درسلهائوس تغییر می یابند.

Spin Torque Induced by the Rashba and Dresselhaus Spin-orbit Couplings in Nano-magnetic Domain Wall

Fallahi, Vahid

Department of Laser and Optical Engineering, University of Bonab, 5551761167 Bonab, Iran

Abstract

The transport through a domain wall pinned at a nanoconstriction in $(Ga,Mn)As$ wires is investigated theoretically by considering the Rashba and Dresselhaus spin-orbit interactions. The adiabatic and nonadiabatic components of the spin torque, expressed in terms of the gradient of the spin current density, are computed. An oscillatory behavior in the spin-transfer torque is observed within the atomically sharp domain walls, due to the strong reflections at the wall caused by the large magnetization gradient. It is demonstrated that the strength of the oscillations for nonadiabatic spin torque increases by the negative Rashba parameter α_x , while it decreases with increasing positive values of α_x . However, the nonadiabatic spin torque increases with $|\alpha_y|$, regardless of its sign. Furthermore, it is shown that the Dresselhaus coupling β does not considerably alter the z component of the spin torque, while the other two components are effectively changed by the Dresselhaus spin-orbit coupling.

PACS No.

چرخش دیواره مغناطیسی $\omega_{\text{Wall}} = \pi v_F/d$ ، در چارچوب مرجع لخت الکترون متحرک با سرعت فرمی v_F در مقایسه با فرکانس لارمور که توسط انرژی برهمکنش تبدلی Δ_{ex} به صورت $\omega_{sd} = \Delta_{ex}/\hbar$ تعیین می شود، قابل چشمپوشی است؛ بنابراین محور پولاریزاسیون حامل ها به طور بی دررو راستای مغناطش موضعی را طی خواهند کرد و رژیم ترابرد پخشی، رژیم غالب خواهد بود.

مقدمه

پس از پیش بینی پدیده گشتاور انتقال اسپینی در اثر اعمال جریان الکتریکی توسط اسلونوسکی [۱] و برگر [۲]، فرمول بندی های متفاوتی برای بررسی برهمکنش بین ممان های مغناطیسی موضعی و جریان پولاریزه اسپینی در دو رژیم ترابرد بالیستیک و پخشی پیشنهاد گردید. برای یک دیواره مغناطیسی عریض با پهنای d ، فرکانس

مبانی نظری

من یک ساختار فرومغناطیسی شامل یک دیواره مغناطیسی باریک از نوع سر به سر با پهنای یک نانومتر در نانوسیم نیمرسانای مغناطیسی نوع p را در نظر می‌گیرم. ممان‌های مغناطیسی موضعی تحت زاویه $\theta(z) = \cos^{-1} \left[-\tanh \left(\frac{\pi^2 z}{2d} \right) \right]$ در صفحه دیواره مغناطیسی به ازای $-\infty \leq z \leq +\infty$ چرخیده و یک دیواره مغناطیسی 180° درجه را تشکیل می‌دهند. هامیلتونی سیستم در تقریب جرم مؤثر و در حضور جفت‌شدگی اسپین-مدار راشبا و در سلهاوس را می‌توان بصورت زیر نوشت:

$$H = \frac{p_z^2}{2m^*} - \frac{\Delta_{ex}}{2} \hat{\sigma} \cdot \mathbf{m}(z) + \frac{\beta}{\hbar} \sigma_z p_z - \frac{1}{\hbar} (\alpha_x \sigma_y - \alpha_y \sigma_x) p_x \quad (1)$$

که در آن $\mathbf{m}(z) = [\sin \theta(z), 0, \cos \theta(z)]$ بردار واحد موازی با مغناطش موضعی و $\hat{\sigma}$ عملگر ماتریس پائولی است. پارامترهای $\alpha_x(y)$ و β به ترتیب قدرت برهمکنش‌های راشبا و در سلهاوس را نشان می‌دهند. معادلات شرودینگر جفت شده برای مؤلفه‌های توابع موج اسپین بالا و پائین به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{d^2}{dz^2} + k_F^2 \right) \begin{pmatrix} \Phi^\uparrow(z) \\ \Phi^\downarrow(z) \end{pmatrix} \\ & = \begin{bmatrix} k_{ex}^2 \cos \theta(z) & k_{ex}^2 \sin \theta(z) \\ k_{ex}^2 \sin \theta(z) & -k_{ex}^2 \cos \theta(z) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \Phi^\uparrow(z) \\ \Phi^\downarrow(z) \end{pmatrix} \quad (2) \\ & + 2 \begin{pmatrix} -ik_D & -k_R e^{-i\phi_R} \\ k_R e^{i\phi_R} & ik_D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi'^\uparrow(z) \\ \Phi'^\downarrow(z) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

که در آن $k_F = \sqrt{\frac{2m^* \epsilon_F}{\hbar^2}}$ بردار موج فرمی، $k_{ex} = \sqrt{\frac{2m^* \Delta_{ex}}{\hbar^2}}$ بردار موج مربوط به برهمکنش تبدالی است. قدرت برهمکنش‌های اسپین-مدار راشبا و در سلهاوس به ترتیب بر حسب بردار موج مشخصه $k_R = \frac{m^* \alpha_R}{\hbar^2}$ ، $k_D = \frac{m^* \beta}{\hbar^2}$ بیان شده است که در آن $\alpha_R = \sqrt{\alpha_x^2 + \alpha_y^2}$ بوده و $\phi_R = \tan^{-1} \frac{\alpha_y}{\alpha_x}$ جهت برهمکنش راشبا را نشان می‌دهد.

تابع موج کلی برای حامل‌های فرودی از طرف چپ با انرژی فرمی ϵ_F را می‌توان بصورت زیر بیان کرد:

$$\Phi = e^{\pm ik_i(r,t)z} \begin{pmatrix} A_i(r,t) \\ B_i(r,t) \end{pmatrix}$$

در فرایند کاملاً بی‌دررو، سهم غالب گشتاور انتقال اسپینی به دلیل از بین رفتن تکانه زاویه‌ای اسپینی حامل‌ها در حین عبور دیواره مغناطیسی است. این گشتاور انتقال اسپینی بی‌دررو یک گشتاور انفعالی است که تمایل به پیچش مغناطیش دیواره دارد. این نوع گشتاور اسپینی که تقارن وارونی زمانی را حفظ می‌کند متناسب با $-(\mathbf{j} \cdot \nabla) \mathbf{u}_M(r)$ است که در آن بردار یکه $\mathbf{u}_M(r)$ در راستای مغناطش بوده و \mathbf{j} بردار چگالی جریان بار را نشان می‌دهد. برای دیواره‌های مغناطیسی نسبتاً عریض، ناچهمندی اسپینی بین اسپین حامل‌ها و مغناطش موضعی منجر به گشتاور اسپینی غیرآدیاباتیکی متناسب با $-\mathbf{u}_M(r) \times (\mathbf{j} \cdot \nabla) \mathbf{u}_M(r)$ شده که عمود بر مؤلفه گشتاور اسپینی آدیاباتیکی است. چنین گشتاوری تحت تبدیل وارونی زمانی ناوردا نبوده $(\mathbf{u}_M(r) \rightarrow -\mathbf{u}_M(r))$ و بنابراین به یک فرایند اتلافی منجر خواهد شد. اگرچه قدرت گشتاور غیرآدیاباتیکی دو مرتبه کوچکتر از گشتاور آدیاباتیکی در دیواره‌های عریض است، اما چگالی جریان بحرانی مورد نیاز برای به حرکت درآوردن دیوار مغناطیسی در میدان مغناطیسی صفر را تعیین می‌کند. علاوه بر این، گشتاور غیرآدیاباتیکی پس از اعمال جریان dc مستقیماً به دیواره مغناطیسی فشار ایجاد می‌کند، در حالیکه در حالت جریان ac به حرکت دیواره کمک می‌کند [۳، ۴]. از سوی دیگر، در حد دیواره‌های مغناطیسی باریک $(d \ll k_F^{-1})$ ، فرایند بی‌درروی انجام نمی‌گیرد و بازتاب شدید توسط دیواره ممکن است رخ دهد. یک دیواره مغناطیسی در ابعاد اتمی مقدار مقاومت مغناطیسی بالیستیکی قابل ملاحظه‌ای را نشان می‌دهد. مقاومت مغناطیسی بالیستیکی بزرگ می‌تواند در افزایش تجمع اسپینی و در نتیجه افزایش هر دو مؤلفه گشتاور اسپینی آدیاباتیکی و غیرآدیاباتیکی نقش بسزایی داشته باشد [۵].

مکانیسم دیگری که می‌تواند گشتاور انتقال اسپینی جریان-تحریکی را تحت تأثیر قرار دهد، بر پایه برهمکنش اسپین-مدار دیاکونوف-پرل استوار است [۶-۸]. در این مقاله، من یک دیواره مغناطیسی بالیستیک محصور شده بین دو ناحیه فرومغناطیسی پادموازی را در نظر می‌گیرم و اثر جفت‌شدگی اسپین-مدار راشبا و در سلهاوس را بر روی گشتاور انتقال اسپینی در رژیم تراپردی بالیستیک مطالعه و بررسی می‌کنم.

که $\vec{\pi}_z^{\mathcal{L}\leftrightarrow\mathcal{R}} = \pm p_z \pm \frac{m}{\hbar}(\alpha_y \sigma_x - \alpha_x \sigma_y + \beta \sigma_z)$ و $\vec{\pi}_{x(y)}^{\mathcal{L}\leftrightarrow\mathcal{R}} = 0$ سه مؤلفه عملگر تکانه جنبشی هستند که دارای تقارن فرد تحت عملگر وارونی زمانی دارند. همانطور که واضح است، چند جمله اضافی به تکانه کانونیک p_z در حضور جفت‌شدگی اسپین-مدار اضافه شده است. از آن جایی که جریان پایا در راستای محور z شارش می‌یابد، تانسور \vec{Q} را می‌توان به صورت یک بردار با سه مؤلفه Q_{zz} ، Q_{yz} ، Q_{xz} در دستگاه مختصات اسپین-فضا در نظر گرفت. چگالی جریان بار کل و سه مؤلفه چگالی جریان اسپینی کل به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\langle j_z(z) \rangle = \frac{3epI_0}{4G\epsilon_F} \cdot \frac{\langle j_z(z) \rangle^{\mathcal{L}\rightarrow\mathcal{R}} + \langle j_z(z) \rangle^{\mathcal{R}\rightarrow\mathcal{L}}}{2}$$

$$\langle Q(z) \rangle = \frac{3epI_0}{4G\epsilon_F} \cdot \frac{\langle Q(z) \rangle^{\mathcal{L}\rightarrow\mathcal{R}} + \langle Q(z) \rangle^{\mathcal{R}\rightarrow\mathcal{L}}}{2}$$

که در آن I_0 شدت جریان خارجی، p چگالی حجمی حفره‌ها، G رسانندگی دیواره و $\frac{3p}{4\epsilon_F}$ چگالی حالات را بر حسب انرژی فرمی نشان می‌دهد.

گشتاور انتقال اسپینی موضعی بر واحد سطح (بر واحد طول) توسط رابطه زیر بدست می‌آید:

$$\vec{N}_{\text{STT}}(z) = -\frac{\partial}{\partial z} \vec{Q}(z).$$

نتایج و بحث

مطالعه بر روی رسانندگی مغناطیسی در یک نانواتصال شامل یک نانودیواره مغناطیسی باریک به طول یک نانومتر از جنس نیمرسانای مغناطیسی رقیق شده (Ga,Mn)As با انرژی شکافتگی اسپینی $\Delta_{ex} = 500 \text{ meV}$ ، جرم مؤثر حفره $m^* = 0.47m_e$ که در آن m_e جرم الکترون آزاد است، انجام شده است. محاسبات انجام شده در ترابرد بالیستیک حامل‌ها، نشان می‌دهد که گشتاور انتقال اسپینی در غیاب برهمکنش‌های اسپین-مدار به صورت نوسانی می‌تواند در یک سیستمی با یک دیواره مغناطیسی در مقیاس اتمی در اثر کوپلاژ غیرآدیاباتیکی بین اسپین حامل‌ها و مغناطش موضعی پدیدار گردد. گشتاورهای انتقال اسپینی آدیاباتیکی (در سطح) و همچنین غیرآدیاباتیکی در ابعاد بسیار پائین دیوار مغناطیسی دیگر به صورت گرادیان مغناطش داده نمی‌شود.

که در آن بردار $k_{i(r,t)}$ بردار موج طولی در سطح تراز فرمی برای حالت‌های اسپینی (اندیس‌های i و t) به ترتیب امواج فرودی و بازتابی (عبوری) را نشان می‌دهند) است. برای یافتن بردار موج فرودی $k_i^{\uparrow(\downarrow)}$ و بازتابی (عبوری) $k_r^{\uparrow(\downarrow)}$ برای حالت‌های اسپینی بالا و پائین، دترمینان ماتریس $H - \epsilon_F I$ را برابر صفر قرار می‌دهیم:

$$(k^2 - k_F^2)^2 - (k_{ex}^2 \mp 2kk_D)^2 - 4k^2 k_R^2 = 0$$

سپس با جایگذاری بردارهای موج $k_i^{\uparrow(\downarrow)}$ در معادله مشخصه ماتریس H ، می‌توانیم ضرایب تابع موج اسپینی A_i و B_i را برای حالت‌های اسپینی بالا و پایین بدست آوریم. در ادامه در طی فرآیند مشابهی ویژه توابع موج بازتابی و عبوری را محاسبه می‌کنیم.

ویژه حالت‌های سیستم در فواصل دور از دیواره مغناطیسی ($z \gg d$) به صورت امواج تخت بوده و می‌توان برای امواج فرودی از طرف چپ (L)، توابع موج در دو طرف نانودیواره مغناطیسی را به صورت زیر نوشت:

$$\Psi_{k,L}(z) = I^{\uparrow} \begin{pmatrix} A_i^{\uparrow} \\ B_i^{\uparrow} \end{pmatrix} e^{ik_i^{\uparrow} z} + I^{\downarrow} \begin{pmatrix} A_i^{\downarrow} \\ B_i^{\downarrow} \end{pmatrix} e^{ik_i^{\downarrow} z} \quad (3\text{-الف})$$

$$+ r^{\uparrow} \begin{pmatrix} A_r^{\uparrow} \\ B_r^{\uparrow} \end{pmatrix} e^{-ik_r^{\uparrow} z} + r^{\downarrow} \begin{pmatrix} A_r^{\downarrow} \\ B_r^{\downarrow} \end{pmatrix} e^{-ik_r^{\downarrow} z}$$

$$\Psi_{k,R}(z) = t^{\uparrow} \begin{pmatrix} A_t^{\uparrow} \\ B_t^{\uparrow} \end{pmatrix} e^{ik_t^{\uparrow} z} + t^{\downarrow} \begin{pmatrix} A_t^{\downarrow} \\ B_t^{\downarrow} \end{pmatrix} e^{ik_t^{\downarrow} z} \quad (3\text{-ب})$$

حالت‌های $\Psi_{k,L}(z)$ و $\Psi_{k,R}(z)$ نشان دهنده توابع موج فرودی غیرقطبیده‌ای هستند که از $z = -\infty$ به طرف راست (\mathcal{R}) آمده و به طور جزئی در دو کانال اسپینی بازتاب و عبور پیدا می‌کنند. ضرایب $t^{\downarrow} = t^{\uparrow\downarrow} + t^{\downarrow\downarrow}$ و $t^{\uparrow} = t^{\uparrow\uparrow} + t^{\uparrow\downarrow}$ دامنه‌های عبور و ضرایب $r^{\downarrow} = r^{\downarrow\uparrow} + r^{\downarrow\downarrow}$ و $r^{\uparrow} = r^{\uparrow\uparrow} + r^{\uparrow\downarrow}$ دامنه‌های بازتاب را در دو کانال اسپینی مشخص می‌کنند. توابع موج در ناحیه نانودیواره را می‌توان با استفاده از روش تفاضل محدود و با استفاده از شرایط مرزی در نقاط $z = \pm L$ به اندازه کافی دور از نانودیواره ($L \gg d$) به صورت عددی بدست آورد [۹].

چگالی جریان بار (j) و چگالی جریان اسپینی (\vec{Q}) در حضور برهمکنش اسپین-مدار به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\vec{j}^{\mathcal{L}\leftrightarrow\mathcal{R}} = \frac{e}{m} \text{Re} \langle \psi | \vec{\pi} | \psi \rangle^{\mathcal{L}\leftrightarrow\mathcal{R}}$$

$$\vec{Q}^{\mathcal{L}\leftrightarrow\mathcal{R}} = \frac{\mu_B}{m} \text{Re} \langle \psi | \hat{\sigma} \otimes \vec{\pi} | \psi \rangle^{\mathcal{L}\leftrightarrow\mathcal{R}}$$

نتیجه گیری

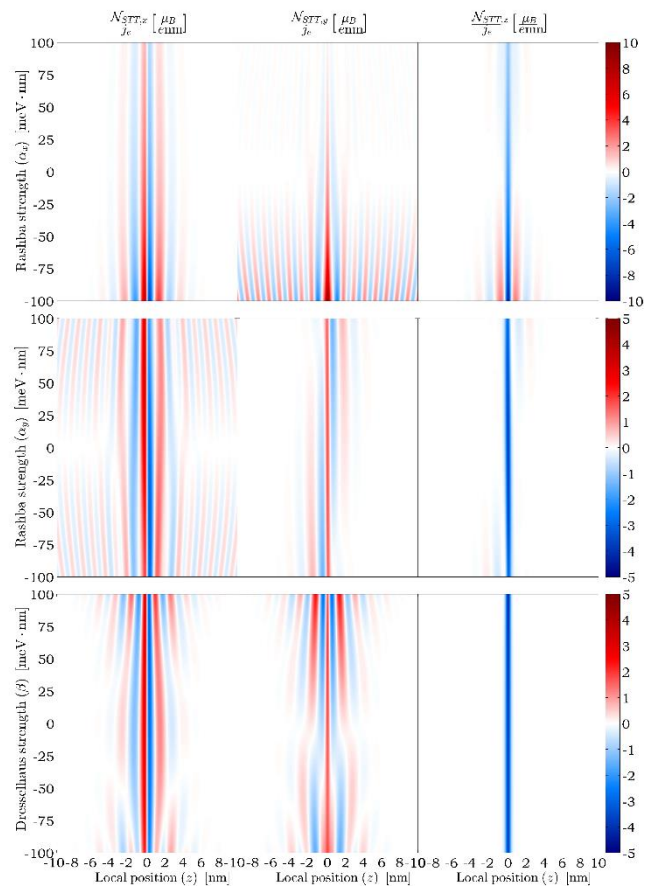
در این مقاله، تأثیر مکانیسم دیاکونوف-پرل را بر روی گشتاور انتقال اسپینی در دیواره و نواحی اطراف آن بررسی شد. نشان داده شد که هر دو گشتاور اسپینی در سطح و خارج از سطح در مقیاس طولی یک نانومتر از دیواره مغناطیسی دیگر به گرادیان مغناطش وابسته نیست. به طور خاص، مؤلفه‌های گشتاور اسپینی در پایانه‌ها و در فواصل دور از نانو تنگش در حضور کوپلاژ اسپین-مدار رفتار نوسانی دارند. همچنین، وابستگی قوی گشتاور اسپینی به علامت پارامترهای اسپین-مدار بدست آمد. نشان داده شد که پارامتر کوپلاژ راشبا با علامت منفی α_x اثر مؤثرتری بر روی گشتاور اسپینی داشته، در حالی که مقادیر مثبت آن به طور مؤثر قادر به تغییر مؤلفه‌های گشتاور اسپینی نیست. همچنین، افزایش پارامتر راشبا $|\alpha_y|$ بدون توجه به علامت آن باعث افزایش گشتاور اسپینی می‌گردد. نشان داده شد که کوپلاژ در سلهاوس به طور قابل ملاحظه‌ای نمی‌تواند مؤلفه Z گشتاور اسپینی را تغییر دهند، در حالی که دو مؤلفه دیگر به طور مؤثرتری توسط برهمکنش اسپین-مدار تغییر می‌یابند.

قدردانی

این مقاله مطابق قرارداد به شماره ۲۹۰۲/آپ/۹۶/د مورد حمایت مالی توسط دانشگاه بناب قرار گرفته است.

مرجع‌ها

- [1] J. C. Slonczewski; "Current-driven excitation of magnetic multilayers"; J. Magn. Magn. Mater. 159 (1996) L1-L7.
- [2] L. Berger; "Emission of spin waves by a magnetic multilayer traversed by a current"; Phys. Rev. B 54 (1996) 9353.
- [3] P. B. He, X. C. Xie, and W. M. Liu; "Domain-wall resonance induced by spin-polarized current in metal thin films with stripe structures"; Phys. Rev. B, 72 (2005) 172411.
- [4] E. Martinez, L. Lopez-Diaz, O. Alejos, and L. Torres; "Resonant domain wall depinning induced by oscillating spin-polarized currents in thin ferromagnetic strips"; Phys. Rev. B 77 (2008) 144417.
- [5] S. Bohlens and D. Pfannkuche; "Width dependence of the nonadiabatic spin-transfer torque in narrow domain walls"; Phys. Rev. Lett. 105 (2010) 177201.
- [6] A. K. Nguyen, H. J. Skadsem, and A. Brataas; "Giant current-driven domain wall mobility in (Ga,Mn)As"; Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 146602.
- [7] Z. Yuan and P. J. Kelly; "Spin-orbit-coupling induced torque in ballistic domain walls: Equivalence of charge-pumping and nonequilibrium magnetization formalisms"; Phys. Rev. B 93 (2016) 224415.
- [8] K. Obata and G. Tatara; "Current-induced domain wall motion in rashba spin-orbit system;" Phys. Rev. B 77 (2008) 214429.
- [9] V. Fallahi; "Spin density and spin torque induced by the D'yakonov-Perel' mechanism in magnetic semiconductor nanowires with a constriction"; Phys. Rev. B 99 (2019) 024408.



شکل ۱: توزیع فضایی مؤلفه‌های گشتاور انتقال اسپینی در سطح $(N_{STT,x})$ و خارج از سطح $(N_{STT,y})$ و $(N_{STT,z})$ که شامل یک دیواره مغناطیسی سربه‌سر به طول یک نانومتر در حضور برهمکنش اسپین-مدار راشبا با میدان مغناطیسی مؤثر در راستای محور x (بالا)، محور y (میانی)، و در حضور برهمکنش اسپین-مدار در سلهاوس با میدان مغناطیسی مؤثر در راستای محور Z (پائین).

همانطور که مشاهده می‌شود، پارامتر کوپلاژ راشبا با علامت منفی اثر بیشتری بر روی گشتاور اسپینی دارد، در حالی که مقادیر مثبت آن چندان در افزایش مؤلفه‌های گشتاور اسپینی مؤثر نیست. همچنین این پارامتر کوپلاژ، یک گشتاور نوسانی خارج از سطح را در پایانه‌ها ایجاد می‌کند که می‌تواند بافت مغناطیسی پایانه را تغییر دهد. همچنین، پارامتر کوپلاژ راشبا می‌تواند گشتاور اسپینی را چه در حالت منفی و چه در حالت مثبت افزایش دهد. کوپلاژ در سلهاوس نمی‌تواند مؤلفه گشتاور اسپینی را به طور چشمگیری تغییر دهد، در حالی که دو مؤلفه دیگر با در نظر گرفتن برهمکنش در سلهاوس به طور مؤثر تغییر می‌یابند.

پیش‌بینی و ساخت فاز جدید ابررسانای پایه $Y_xBa_yCu_zO$

قدیمی نوران ، امیررضا ؛ عمویی ، مهتاب ؛ راستی ، محمد ؛ محمدی زاده ، محمدرضا

آزمایشگاه پژوهشی ابررسانایی، دانشکده فیزیک، دانشگاه تهران،

چکیده

برای پیش‌بینی و ساخت ماده جدید که خاصیت ابررسانایی داشته باشد از یک فضای انتزاعی با پایه‌های ضرایب استوکیومتری (X ضریب ایتیریم، Y ضریب باریم و Z ضریب مس) استفاده می‌کنیم. با استفاده از این فضا چند نمونه را پیش‌بینی کردیم و $Y4-7-11$ را ساختیم که خاصیت ابررسانایی دارد. برای پیش‌بینی دمای بحرانی، دما را به عنوان بعد چهارم به این فضا اضافه می‌کنیم و با قرار دادن ضرایب استوکیومتری در معادله‌های به‌دست آمده دمای بحرانی را نیز با خطایی از مرتبه چند کلونین پیش‌بینی می‌کنیم. پیش‌بینی دمای بحرانی ترکیب $Y4-7-11$ 90.9 درجه کلونین است که ما دمای 87 درجه کلونین را در آزمایشگاه مشاهده کردیم.

Prediction and preparation of a new superconducting structure of $Y_xBa_yCu_zO$

Ghadimi Nooran, Amirreza ; Amooei, Mahtab ; Rasti, Mohammad ; Mohammadizade, Mohammad Reza

Superconductivity Res. Lab. (SRL), Department of Physics, University of Tehran, Tehran

Abstract

We introduce an abstract space with stoichiometric coefficients basis (X, Y, Z) to predict and construct new materials that have superconductivity property. Using this space, we obtained some theoretical candidates and produced $Y4-7-11$ which has the anticipated property. For predicting the critical temperature, we added the temperature to this space, as the fourth dimension. By putting the stoichiometric coefficients in the obtained formula, we are able to predict the critical temperature with a reasonable error. In the case of $Y4-7-11$, our prediction for the critical temperature is 90.9 K which is in a very good agreement with our experimental result 87 K.

PACK NO. 74.72.-h, 74.72.BK

مقدمه

باشند. فرض می‌کنیم که برای ابررسانایی شرایط خاصی وجود دارد و این شرایط باعث به‌وجود آمدن خانواده‌های مختلفی می‌شود. برای پیدا کردن این خانواده‌ها ضرایب استوکیومتری (X, Y, Z) را مانند پایه‌های فضایمان در نظر می‌گیریم. در این صورت هر کدام از ابررساناها در این فضای انتزاعی مانند یک نقطه از فضا هستند و وجود خانواده به معنای شکل خاصی در این فضا یا به عبارت دیگر وجود یک معادله برای استوکیومتری‌های ممکن است. به عنوان تقریب اول این شکل خاص را یک صفحه‌ی تخت در نظر می‌گیریم. پس برای پیدا کردن ترکیب جدید که پایدار باشد فرض می‌کنیم که اگر نقطه‌ای در اکثر صفحات (به‌دست آمده از سه نقطه‌هایی که

از خانواده YBCO ترکیبات بسیاری مانند $Y145, Y124, Y123, \dots$ ساخته شده‌اند که دارای دمای بحرانی متفاوت‌اند. ما به دنبال پیدا کردن ترکیب جدیدی از این خانواده هستیم که دمای بحرانی بالایی داشته باشد.

پیدا کردن استوکیومتری جدید

در این قسمت سعی می‌کنیم تا با بررسی ساختار ابررساناهای خانواده ایتیریم باریوم کوپرات اکسایدها ضرایب استوکیومتری جدیدی به‌دست آوریم که خاصیت ابررسانایی داشته باشند و البته پایدار نیز

و چهار ترکیب دیگر [۲-۴] هستند.

Y5-6-11, Y7-9-16, Y1-1-2, Y3-4-7

تمام مواد ابررسانای ساخته شده تا به امروز دو ویژگی دارند $(Z \leq 33 \text{ و } X \leq Y < Z)$ که ما نیز این ویژگی‌ها را در برنامه اعمال می‌کنیم.

حال برای این که تاثیر Y7-9-16, Y1-1-2, Y3-4-7 و Y5-6-11 کم شود، با انتخاب دو ترکیب دلخواه از این چهار ترکیب و یازده ترکیب دیگر، این سیزده نقطه را در برنامه قرار داده و اجرا می‌کنیم. بنابراین شش بار برنامه را اجرا کرده و تمام نقاطی را که در تمام این شش بار اجرای برنامه تکرار شده بودند را انتخاب می‌کنیم که این نقاط در جدول ۱ آمده اند.

می‌گیریم) باشد، یعنی در اکثر خانواده‌ها وجود دارد و با احتمال بیشتری پایدار خواهد بود. با در نظر گرفتن این حقیقت که از هر سه نقطه یک صفحه (هر صفحه به معنی یک خانواده است) یکتا می‌گذرد، سه تا سه تا، نقاط را گرفته و معادلات صفحات به دست می‌آید. با قطع کردن هر سه صفحه با یکدیگر دو حالت به وجود می‌آید که یا یکدیگر را در یک نقطه قطع می‌کنند یا نمی‌کنند، که نقاط به دست آمده پیش‌بینی ما از ضرایب ممکن است. البته صفحات لزوماً در یک نقطه یکدیگر را قطع نمی‌کنند بلکه می‌توانند در یک خط همدیگر را قطع کنند یا اصلاً همدیگر را قطع نکنند که ما به طور دستی این حالت‌ها را کنار می‌گذاریم. ما برای اجرای برنامه از سیزده نقطه استفاده می‌کنیم؛ یازده ترکیب: (با مراجع معتبرتر) [۱-۷]

Y1-2-3, Y1-2-4, Y1-4-5, Y1-5-6, Y2-4-7, Y3-5-8, Y3-8-11, Y7-11-18, Y5-8-13, Y13-20-33, Y2-1-1

جدول ۱: تمام نقاطی که در همه‌ی برنامه‌ها تکرار شده‌اند

ردیف	ایتیریم (x)	باریم (y)	مس (z)		ردیف	ایتیریم (x)	باریم (y)	مس (z)		ردیف	ایتیریم (x)	باریم (y)	مس (z)	
۱	۱	۱	۲	*	۱۲	۴	۵	۹		۲۳	۹	۱۷	۲۶	
۲	۱	۲	۳	*	۱۳	۴	۷	۱۱		۲۴	۱۱	۲۰	۳۱	
۳	۱	۳	۴	*	۱۴	۴	۱۱	۱۵		۲۵	۱۳	۱۴	۲۷	
۴	۱	۴	۵	*	۱۵	۵	۶	۱۱	*	۲۶	۱۳	۲۰	۳۳	*
۵	۱	۵	۶	*	۱۶	۵	۷	۱۲		۲۷	۱۳	۲۳	۳۶	
۶	۲	۳	۵	*	۱۷	۵	۸	۱۳	*	۲۸	۱۹	۲۰	۳۹	#
۷	۲	۵	۷	*	۱۸	۵	۹	۱۴		۲۹	۱۹	۳۲	۵۱	#
۸	۲	۷	۹		۱۹	۵	۱۶	۲۱		۳۰	۲۳	۳۸	۶۱	#
۹	۳	۴	۷	*	۲۰	۷	۸	۱۵		۳۱	۳۷	۵۹	۹۶	#
۱۰	۳	۵	۸	*	۲۱	۷	۱۱	۱۸	*	۳۲	۵۵	۸۶	۱۴۱	#
۱۱	۳	۸	۱۱	*	۲۲	۷	۱۲	۱۹		۳۳	۷۹	۱۲۲	۲۰۱	#

تمام ابررساناهای ساخته شده در آزمایشگاه دارای ضریب استوکیومتری کمتر از چهارده برای ایتیریوم هستند (نقاطی که دارای # در جدول هستند از این شرط پیروی نمی‌کنند) پس سیزده نقطه از برنامه سه بعدی گزینه‌ی مناسبی برای ساخت هستند. از پانزده ترکیب ساخته شده که در شرط $Z=Y+X$ صدق می‌کنند چهارده

نتیجه اجرای برنامه‌ی ۳ بعدی این است که ۳۳ ترکیب جدول (۱) به احتمال زیاد باید پایدار باشند که از این مقدار ۱۴ عدد * دارها در جدول (۱) قبلاً در آزمایشگاه ساخته شده‌اند. [۱-۷] تمام داده‌های یاد شده در جدول ۱ قید $Z=Y+X$ را دارند و این انتخاب به این دلیل است که اکثر مواد ساخته شده در آزمایشگاه دارای این خاصیت اند و

$$\frac{\mu X+a}{A} = \frac{\sigma Y+b}{B} = \frac{\gamma Z+d}{D} = \frac{\alpha T+e}{E} \quad (1)$$

ضرایب X, Y, Z از استوکیومتری و مابقی ضرایب موجود در معادله (۱) نیز از معادله خطی که از برنامه ۴ بعدی حاصل می‌شود به دست می‌آید. با جایگذاری ضرایب استوکیومتری یک ابرسانا در معادله بالا ۳ دمای بحرانی به دست می‌آید. اگر عددهای به دست آمده دقیقاً یکسان باشند، پس نقطه در خط دقیقاً صدق می‌کند. پس دمای به دست آمده دمای بحرانی ابرساناست. با جایگذاری نقاط در معادلات خط‌های به دست آمده نقاطی که در خط‌ها صدق می‌کنند را به دست آوردیم و سپس تمام دماهای به دست آمده را میانگین می‌گیریم و در جدول ۲ قرار می‌دهیم.

ترکیب در تمام برنامه‌ها وجود داشت (به جز ۷-۹-۱۶-۹-۷ که در آزمایشگاه ساخته شده است ولی برنامه ۳ بعدی ما آن را پیش‌بینی نکرده است).

پیش بینی دمای بحرانی نمونه‌ها

ما دمای بحرانی را نیز به عنوان یک پایه از فضا می‌گیریم. پس هر یک از ابرساناها به عنوان یک نقطه از فضای ۴ بعدی ما هستند. در فضای ۴ بعدی به ازای هر ۴ نقطه یک ابرصفحه‌ی یکتا داریم و با قطع ۳ ابرصفحه دو حالت به وجود می‌آید، یا خط به وجود می‌آید یا به وجود نمی‌آید که ما فقط حالتی که خط به وجود می‌آید را انتخاب می‌کنیم که با جایگذاری نقاط، دما را پیش‌بینی می‌کنیم.

معادله‌ی خط در فضای ۴ بعدی به صورت ذیل است:

جدول ۲: پیش بینی دمای بحرانی ابرساناهای ساخته شده به وسیله‌ی برنامه چهار بعدی

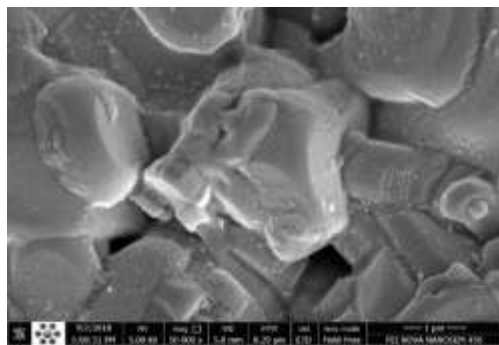
خطا (کلوین)	میانگین دما (کلوین)	بازه دمای پیش بینی (کلوین)	دمای تجربی (کلوین)	ترکیب
۰.۳	۹۱.۲۳	۸۲.۵۵-۱۰۲.۵	۹۱.۲	Y1-2-3
۱.۰۲	۸۹.۷۸	۸۶.۵۸-۹۹.۷۵	۹۰.۸	Y5-8-13
۱.۶۷	۸۹.۱۳	۷۹.۸-۹۵.۹۵	۹۰.۸	Y7-11-18
۰.۴۲	۹۰.۹۲	۹۰.۷۵-۹۱.۱	۹۰.۵	Y2-5-7 *
۰.۶۲	۹۰.۸۸	۸۴.۴-۱۰۶	۹۱.۵	Y3-5-8
۴.۸	۹۱.۸	۹۰.۸۴-۹۲.۷۷	۸۷	Y7-9-16
۰.۳۱	۹۰.۶۹	۸۹.۹۷-۹۱.۸۵	۹۱	Y1-3-4
۰.۲۵	۸۹.۶۵	۷۷.۸۷-۱۰۱.۵	۸۹.۴	Y13-20-33

یک دمای بحرانی به ما می‌دهد. اگر ۳ دمای داده شده برابر بود پس این عدد برای دمای بحرانی قابل قبول است.

پیش بینی دمای بحرانی داده‌های برنامه ۳ بعدی

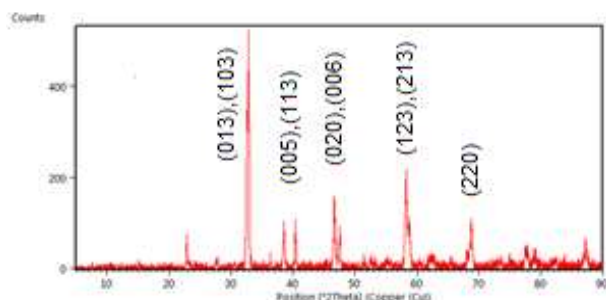
تنها بعضی از نمونه‌های به دست آمده از نتایج برنامه‌ی ۳ بعدی در خط‌های به دست آمده از برنامه ۴ بعدی صدق می‌کنند که این نمونه‌ها چون در هر دو برنامه صدق می‌کنند نمونه‌های مناسبی برای

فقط هشت ترکیب از ترکیبات ساخته شده در خط‌ها صدق می‌کردند و بقیه صدق نمی‌کنند که یک ترکیب (*دار جدول ۲) از داده‌های اولیه‌ی برنامه نبود. حال باید ترکیباتی را که از برنامه‌ی ۳ بعدی به دست می‌آید. را برداشت و با پیدا کردن خط مناسب از برنامه ۴ بعدی دمای بحرانی آن را پیش‌بینی کرد و با ساخت آن ترکیب، درستی فرضیه را بررسی کرد. برای استخراج دمای بحرانی از برنامه، ضرایب هر ماده را در معادله (۱) قرار می‌دهیم که هر کدام از ضرایب



شکل ۳: SEM نمونه‌ی Y4.7.11

با توجه به شکل ۳ اندازه دانه‌ها تقریباً از ۱۲ نانومتر تا ۲ میکرومتر هستند.



شکل ۴: EDS نمونه‌ی Y4.7.11

باتوجه به شکل ۴ و جدول ۳ XRD Y4.7.11 با نمونه Y1.2.3 تقریباً یکسان است.

نتیجه گیری

با اتخاذ ضرایب استوکیومتری موجود از ترکیبات YBCO توانستیم ترکیب جدیدی را پیش بینی کنیم که دارای خاصیت ابررسانایی است و دمای ترکیبات را نیز می‌توانیم پیش بینی کنیم.

سپاسگزاری

بخشی از هزینه‌های این پژوهش توسط معاونت پژوهشی دانشگاه تهران تامین شده که نهایت تشکر و قدردانی را داریم.

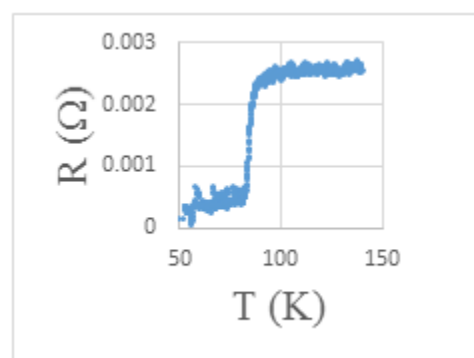
مراجع

- [1] S. Tajima, et al., Phys. Rev. B 55, (1997) 6051.
- [2] P.Udomsamuthirun, et al., Magn. 23, (2010) 1377
- [3] SSUJINNAPRAM, et al., Bull. Mater. Sci.34, (2011) 1053
- [4] Georgeta Alecu, Romanian Reports in Physics 56 (2004) 404
- [5] S.Horii, et al., Physica C 302 (1998) 10
- [6] D.E. Morris, et al., Phys.Rev.B39, (1989) 7347
- [7] T.Panklang, et al., scientific.net 851 (2016) 57

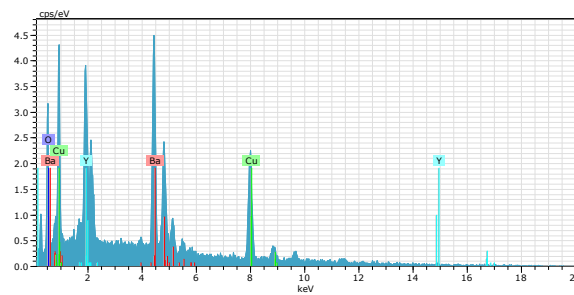
ساخت هستند، یکی از این نمونه‌ها Y4-7-11 است که دمای پیش بینی شده از برنامه‌ی ۴ بعدی ۹۰.۹ کلوین است.

ساخت نمونه Y4-7-11

نمونه Y4-7-11 را به روش استاندارد حالت جامد می‌سازیم و مقاومت بر حسب دمای آن را اندازه‌گیری می‌کنیم که در شکل ۱ نشان داده شده است. و همچنین آزمایش‌های XRD (شکل ۲)، SEM (شکل ۳) و EDS (شکل ۴) را تهیه کردیم.



شکل ۱: نمودار مقاومت بر حسب دمای نمونه‌ی Y4.7.11



شکل ۲: EDS نمونه‌ی Y4.7.11

با توجه به آنالیز شکل ۲ معادله شیمیایی نمونه $Y_4Ba_{6.21}Cu_{10.2}O_{24.23}$ است.

ساخت لایه نازک ابررسانای YBCO به روش لایه‌نشانی از محلول شیمیایی

با ترکیبات آلی بدون فلئور

راستی، محمد^۱؛ محمدی‌زاده، محمدرضا^۱

^۱آزمایشگاه پژوهشی ابررسانایی، دانشکده فیزیک، دانشگاه تهران

چکیده

روش لایه‌نشانی از محلول شیمیایی با ترکیبات آلی (metal organic chemical solution deposition) برای ساخت لایه نازک ابررسانای YBCO به کار گرفته شده است. در این روش لایه مورد نظر با روش لایه‌نشانی چرخشی تهیه شده و تحت عملیات حرارتی تکلیس و کلوخه‌سازی قرار می‌گیرد. نتایج آنالیز ساختاری نشان دهنده رشد جهت‌مند لایه در جهت محور C و اندازه‌گیری مقاومت بر حسب دما نشان‌دهنده دمای گذار حدود ۷۰ کلوین و پهنای ۱۰ درجه است. کیفیت نهایی نمونه ابررسانا به شدت به عوامل مختلف ساخت وابسته است و بهینه‌سازی‌های بیشتر برای دستیابی به نمونه ایده‌آل در حال انجام است.

Fabrication of YBCO Superconducting Thin Film by Fluorine-Free Metal Organic Chemical Solution Deposition Route

Rasti, Mohammad¹; Mohammadizadeh, Mohammadreza¹

¹ Superconductivity Research Lab. (SRL), Department of Physics, University of Tehran

Abstract

Metal organic chemical solution deposition route was used to prepare YBCO thin film. Precursor solution was spin coated on the substrate and then the as-deposited film heat treated for calcination and sintering processes. XRD analysis and four point probe measurement show good epitaxy in the c direction and $T_c=70K$ ($\Delta T_c=10K$), respectively. Final quality of the films strongly related on the experimental condition and more optimizations are in processing to obtain an ideal film.

PACS No. 74.72.-h ; 74.78.Bz ; 84.71.Mn.

مقدمه

گرفته است [۲۰۱]. محققان توانسته‌اند با این روش که نیاز به تجهیزات خلأ ندارد، نمونه‌های با کیفیت ابررسانای YBCO که دمای گذار و چگالی جریان بحرانی بالایی دارند، تولید کنند. دو رویکرد عمده در ساخت نمونه‌های YBCO با این روش وجود دارد: استفاده از پیش ماده‌های فلئوردار (MOD-TFA) و استفاده

لایه‌نشانی ترکیبات اکسید فلزی به روش رسوب از محلول آلی در سالیان اخیر برای ساخت لایه نازک ابررسانای اکسید مسی به جهت کاربردهایی که در ساخت سیم‌های نسل دوم ابررسانا، قطعات میکروویو، سیستم‌های قدرت و ... دارند، بسیار مورد توجه قرار

دمای 80°C حل می‌شوند. محلول آمونیاک یا مشتقات آن مثل دی‌اتانول آمین، تری‌اتانول آمین، پایریدین و... نقش چنگاله‌سازی دارند؛ به این صورت که اتم‌های نیتروژن با فلز مرکزی پیوند برقرار کرده و باعث می‌شود محلول همگن‌تری به دست آید. پس از آن اجازه می‌دهیم که حلال کاملاً تبخیر شده و ژل به دست آمده در متانول حل می‌شود. غلظت نهایی محلول $1/5$ مولار است. محلول حاصل با روش لایه‌نشانی چرخشی روی زیرلایه تک‌بلور LAO(100) با سرعت 3000rpm لایه‌نشانی شده و در دمای 100°C روی صفحه داغ خشک می‌شود. سپس بلافاصله نمونه در کوره استوانه‌ای با نرخ $1^{\circ}\text{C}/\text{min}$ تا دمای 500°C در اتمسفر اکسیژن مرطوب تکلیس می‌شود. مرحله کریستالی شدن یا کلوخه‌سازی با گرم کردن نمونه با نرخ $15^{\circ}\text{C}/\text{min}$ تا دمای 830°C و نگه داشتن در این دما به مدت یک ساعت و در اتمسفر آرگون/اکسیژن با نسبت تقریبی $1/10$ انجام شد. در نهایت نمونه به مدت ۳ ساعت در دمای 525°C اکسیژن‌دهی می‌شود. ضخامت نهایی لایه با این شرایط ساخت، حدود 200 نانومتر می‌شود. به منظور یافتن شرایط مناسب برای تجزیه ترکیبات آلی آنالیز TGA/DSC انجام شده است. آنالیز XRD برای بررسی تشکیل فاز مورد نظر و جهت‌مندی رشد لایه انجام شده است. همچنین آنالیز SEM و EDS برای بررسی مورفولوژی سطح و رشد دانه‌ها و توزیع عناصر فلزی و اندازه‌گیری مقاومت بر حسب دما برای تعیین دمای گذار نمونه انجام شده است.

تحلیل نتایج

مقداری از محلول نهایی برای به دست آوردن پودر جهت آنالیز TGA/DSC خشک می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش دما، جرم پودر کاهش پیدا می‌کند. کاهش جرم در 100°C درجه به علت از دست دادن رطوبت است. همچنین کاهش وزن شدیدی از دمای حدود 220°C شروع شده و تا 420°C ادامه دارد. این کاهش وزن مربوط به تجزیه ترکیبات آلی است. قله‌های نمودار Heat Flow نشان‌دهنده واکنش‌های مربوط به تجزیه ترکیبات آلی است (شکل ۱). استات‌ها در اثر حل شدن در پروپیونیک اسید به پروپیونات

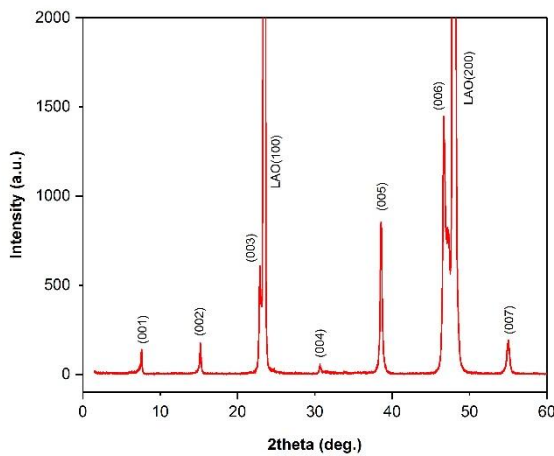
از پیش ماده‌های فاقد فلوئور (FF-MOD) [۳و۴]. در روش اول ترکیبات آلی موجود در فیلم پس از مرحله تکلیس به اکسی فلورید تبدیل می‌شود؛ به طور خاص به جای فاز میانی BaCO_3 ، فاز BaF تشکیل می‌شود [۵]. این موضوع از این جهت حائز اهمیت است که کربنات باریوم که به عنوان یکی از پیش ماده‌های ساخت ابررسانای YBCO مورد استفاده قرار می‌گیرد پایداری بالایی حتی در دماهای بالا دارد و باقی ماندن آن در مرز دانه‌ها، باعث اتصال ضعیف بین دانه‌ای و کاهش چگالی جریان بحرانی می‌شود. روش MOD-TFA برای ساخت نمونه‌های با چگالی جریان بحرانی بالا موفقیت‌آمیز بوده است اما دو عیب کلی نیز دارد: زمان‌های طولانی برای تجزیه ترکیبات آلی به اکسی فلورید و آزاد شدن گاز HF در مرحله کلوخه‌سازی. از طرف دیگر در روش FF-MOD زمان‌های واکنش کوتاه‌تر و با محیط زیست سازگار است. برای تجزیه کامل باریوم کربناتی که در این روش به عنوان فاز میانی تشکیل می‌شود باید شرایط کلوخه‌سازی یعنی دما و فشار جزئی اکسیژن را به دقت کنترل کرد تا نمونه‌های با چگالی جریان بحرانی بالا حاصل شود.

در روش FF-MOD فازهای میانی شامل اکسید فلزی یعنی Y_2O_3 ، BaCO_3 و CuO در نمونه تشکیل می‌شود. در مرحله کریستالی شدن از واکنش کربنات باریوم و اکسید مس، ترکیب BaCuO_2 تشکیل می‌شود که واکنش این فاز با CuO موجب می‌شود که یک فاز مذاب در نمونه به وجود آید. در نهایت واکنش این فاز مذاب با Y_2O_3 فاز نهایی YBCO را نتیجه می‌دهد [۶]. تمامی این واکنش‌ها شدیداً به دما و فشار جزئی اکسیژن وابسته هستند و باید طبق دیاگرام فاز دما و فشار جزئی اکسیژن انتخاب شوند. مزیت تشکیل فاز مذاب این است که هم سرعت رشد لایه را بالا می‌برد و هم با کاهش زاویه مرز دانه‌ها، چگالی جریان بحرانی را افزایش می‌دهد [۷و۸].

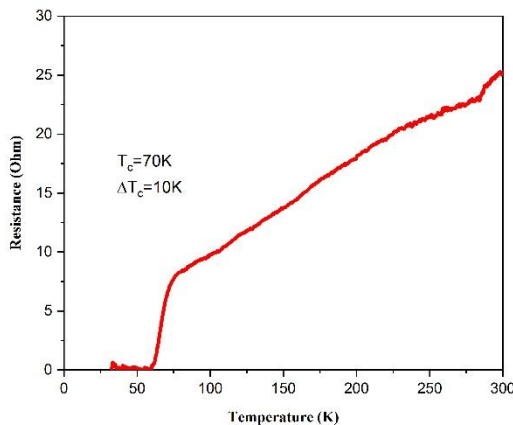
جزئیات آزمایش

ابتدا پودرهای استات ایتروم، باریوم و مس با استوکیومتری $1:2:3$ در پروپیونیک اسید و محلول آمونیاک به مدت یک ساعت در

دما و فشار جزئی اکسیژن مطابق دیاگرام فاز دما-فشار جزئی اکسیژن نباشد، واکنش‌های مربوطه به خوبی انجام نمی‌شوند [۱۱].



شکل ۲: نمودار طیف XRD لایه نازک YBCO

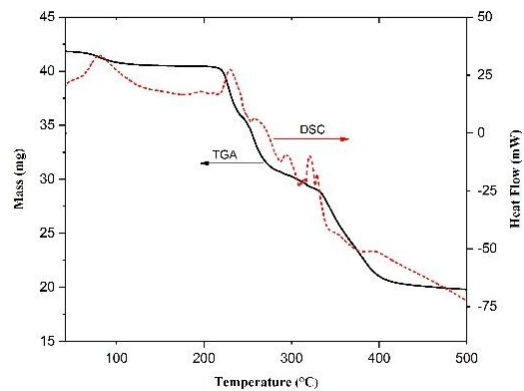


شکل ۳: منحنی مقاومت بر حسب دمای لایه نازک YBCO

از آنجا که دمای گذار نمونه کمتر از ۷۷ کلوین بود امکان اندازه‌گیری چگالی جریان بحرانی وجود نداشت و تغییر شرایط ساخت برای بهبود دمای گذار نیز تاکنون منجر به نتیجه بهتر نشده است.

تصویر SEM سطح لایه ابررسانا (در دو مقیاس ۱ و ۵ میکرون) و طیف EDS آن در شکل ۴ نشان داده شده است. اندازه دانه‌های کوچکتر و دایره‌ای شکل که دانه‌های تک‌بلور YBCO هستند زیرمیکرونی‌اند. دانه‌های بزرگی که روی سطح تشکیل شده به خاطر به هم پیوستن دانه‌ها به دلیل کند سرد شدن نمونه از دمای

تبدیل شده و در نهایت در مرحله تکلیس به ترکیبات اکسید فلزی تبدیل می‌شوند [۹ و ۶].



شکل ۱: نمودار TGA/DSC پودر پیش ماده در اتمسفر اکسیژن

نتایج آنالیز XRD نشان می‌دهد که لایه ابررسانا به صورت جهت‌مند در جهت محور *c* رشد یافته است. همچنین هیچ‌گونه قله مربوط به فازهای میانی دیده نمی‌شود (شکل ۲). در اینجا دمای کلوخه‌سازی 830°C و فشار جزئی اکسیژن حدود 0.1 atm جایی بین دو خط $c2$ (رشد در جهت *c*) و $c1$ (رشد شدیداً در جهت *c*) است که معادلات این دو خط به شکل زیر هستند [۱۰]:

$$\text{Log}(P)_{c2} = -5.07 \left(\frac{10000}{T} \right) + 45.70$$

$$\text{Log}(P)_{c1} = -5.28 \left(\frac{10000}{T} \right) + 45.32$$

در معادلات فوق *P* فشار جزئی اکسیژن بر حسب atm و *T* دمای کلوخه‌سازی بر حسب کلوین است.

اندازه‌گیری مقاومت بر حسب دما نشان می‌دهد که دمای گذار نمونه برابر ۷۰ کلوین با پهنای تقریبی ۱۰ درجه است (شکل ۳). همچنین رفتار نمونه در فاز هنجار فلزگونه است. رفتار ابررسانایی لایه‌هایی که به این روش ساخته می‌شوند شدیداً به شرایط ساخت وابسته است. تغییر کوچکی در شرایط ساخت باعث می‌شود که نمونه در فاز هنجار رفتار عایق گونه داشته باشد یا اصلاً ابررسانا نشود. دلیل این موضوع آن است که در مرحله تشکیل فاز YBCO اگر شرایط

تجزیه می‌شود. دمای سینترینگ نمونه 830°C و فشار جزئی اکسیژن حدود 0.1 atm بود که این پارامترها بین دو خط c1 و c2 قرار می‌گیرد. نتایج XRD نیز نشان می‌دهد که نمونه با این شرایط ساخت، به طور کامل در جهت محور C رشد یافته است. دمای گذار نمونه در حدود 70 کلوین و پهنای آن 10 درجه است.

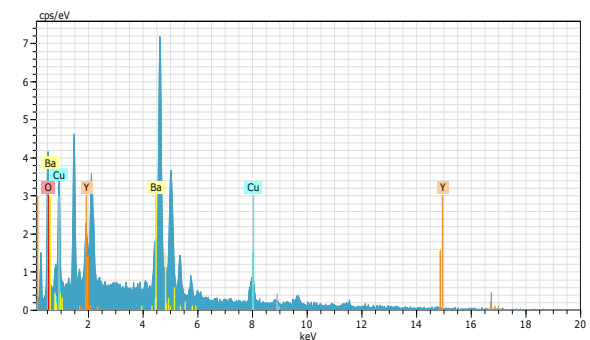
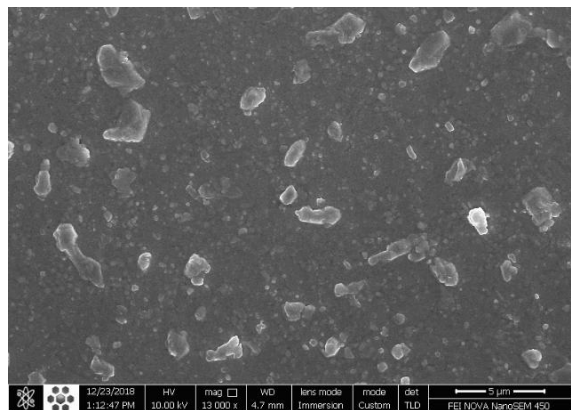
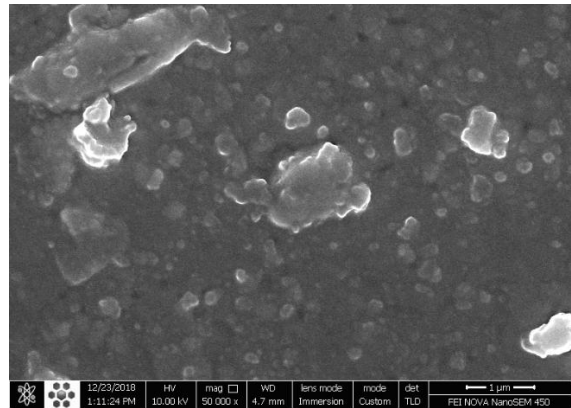
سپاسگزاری

بخشی از هزینه‌های این پژوهش توسط معاونت پژوهشی دانشگاه تهران تأمین شده که نهایت تشکر و قدردانی را داریم.

مراجع

- [1] T. Schneller, "Chemical Solution of Functional Oxide Thin Films", Springer, (2013).
- [2] X. Obradors et al., "Chemical solution deposition: a path towards low cost coated conductors" *Supercond. Sci. Technol.* **17** (2004) 1055-1064.
- [3] T. Araki and I. Hirabayashi, "Review of chemical approach to $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ coated conductors –metal organic deposition using trifluoroacetates", *Supercond. Sci. Technol.* **16** (2003) R71-R94.
- [4] Y. Zhao et al., " Structural and superconducting characteristics of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ films grown by fluorine-free metal-organic deposition route", *Acta mater.* **144** (2018) 844-852.
- [5] L. H. Jin et al., "Evolution of low fluorine solution in decomposition and crystallization for $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ film growth" *J. Alloy. Compd.* **568** (2013) 36-41.
- [6] P. Vermeir et al, "Elucidation of the Mechanism in Fluorine-Free Prepared $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ Coatings" *Inorg. Chem.*, **4** (2010) 4471-4477.
- [7] P. Y. Chu and R. C. Buchanan, "Reactive liquid phase sintering of solution-derived $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ superconducting thin films: Part I. Ambient and precursor effects on BaO-CuO liquid phase formation" *J. Mater. Res.*, **8** (1993) 2134-2142.
- [8] P. Y. Chu and R. C. Buchanan, " Reactive liquid phase sintering of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ superconducting thin films: Part II. Sintering mechanism and film properties" *J. Mater. Res.*, **9** (1994) 844-851.
- [9] M. Nasui et al., "Fluorine-free propionate route for the chemical solution deposition of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ superconducting films" *Ceram. Int.* **41** (2015) 4416-4421.
- [10] Y. Xu et al., "Processing Dependence of Texture, and Critical Properties of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ Films on RABiTS Substrates by a Non-Fluorine MOD Method" *J. Am. Ceram. Soc.*, **89** (2006) 914-920.
- [11] P. Vermeir et al., " Influence of sintering conditions in the preparation of acetate-based fluorine-free CSD YBCO films using a direct sintering method" *Mater. Res. Bull.* **47** (2012) 4376-4382.

کلوخه‌سازی است. همچنین دانه‌هایی که در راستای $a-b$ رشد یافته باشند (میله‌ای شکل) دیده نمی‌شود که با نتایج XRD مطابقت دارد. طیف EDS نیز برآورد نسبی از نسبت کاتیون‌های فلزی لایه به دست می‌دهد. برای نمونه مورد نظر این نسبت برابر $1:2.04:2.52$ است.



شکل ۴: تصویر SEM و طیف EDS لایه ابررسانا

جمع‌بندی

لایه نازک ابررسانای YBCO با روش MOD با استفاده از ترکیبات بدون فلئوئور ساخته شد. نمونه لایه نشانی شده با گرم کردن تا دمای 500°C تکلیس شده و تمام ترکیبات آلی موجود در فیلم

بررسی خواص مغناطیسی ابررسانای YBCO آرایش داده شده با منگنز

امیری مقدم، مهشید؛ حسینی، سید سجاد؛ شاکری پور، حمیده؛ سلامتی، هادی

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۴۱۵۶-۸۳۱۱۱

چکیده

خواص مغناطیسی نمونه های ابررسانای بس بلور کپه ای $Y_{1-x}M_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ آراییده شده با عنصر مغناطیسی ($x=0.00, 0.004, 0.02$) در جایگاه ایتیریم که با روش سل ژل ساخته شدند، و نیز تغییر دمای پخت بر روی دمای گذار، بررسی شد. آنالیز پراش ایکس نمونه ها، تشکیل فاز ۱۲۳ را نشان داد و ناخالصی قابل آشکارسازی در طیف پراش نمونه ها دیده نشد. با اندازه گیری پذیرفتاری مغناطیسی AC دیده شد، با آرایش ۲ درصد عنصر مغناطیسی، که انتظار می رود کاهش شدیدی در دمای گذار ابررسانایی نشان دهد، دمای گذار تغییر چندانی نکرد.

Investigation of superconducting properties of YBCO doped by Mn

Amiri-Moghadam, Mahshid; Hosseini, Seyed Sajjad; Shakeripour, Hamideh; Salamati, Hadi

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156 -83111, Iran

Abstract

Magnetic properties of superconducting $Y_{1-x}M_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ samples doped by magnetic element Mn ($x = 0.00, 0.004, 0.02$) for the yttrium site were investigated. The samples were prepared by sol-gel method. The analysis of X-ray diffraction of the samples showed that all the samples are crystallized in single phase 123 with no detectable impurity phases. As demonstrated by AC magnetic susceptibility measurements, the transition temperature of 2% doped sample, which was expected to strongly reduce T_c , did not decrease and showed nearly the same T_c as the pure ones.

PACS No. 74

درون صفحات CuO_2 را Cu-II و مس در زنجیره مس که در راستای b قرار دارد را Cu-I می نامند. آزمایش های پراش نوترون در این تحقیقات نشان می دهند که منگنز در جایگاه Cu-I قرار می گیرد [۲]. همچنین آرایش منگنز بیش از ۱ درصد، پهن شدگی گذار و کاهش دیامغناطیس ابررسانایی را نشان می دهد. با آرایش منگنز، نیکل، آهن و روی در جایگاه مس با مقدار آرایش ۲/۵ درصد، کاهش دمای گذار برای نمونه حاوی منگنز، کمتر از سایر عناصر جاینشانی شده، بوده است [۳]. در کارهای انجام شده با مقادیر آرایش های متفاوت عنصر مغناطیسی منگنز در جایگاه مس، کاهش دمای گذار گزارش شده است [۴]. در تحقیقی دیگر،

مقدمه

پس از دست یابی محققین به تکنولوژی سرد سازی، پدیده ابررسانایی برای اولین بار در عنصر جیوه مشاهده شد [۱]. با کشف ابررسانای دمابالای YBCO محققین برای بهبود این ترکیب و استفاده کاربردی آن تلاش های فراوانی همچون آرایش عناصر در جایگاه عناصر متفاوت این ترکیب انجام دادند. در ترکیب ابررسانای YBCO، جاینشانی عناصر مغناطیسی در جایگاه های متفاوت ابررسانا، باعث تخریب ابررسانایی می شود. محققین با جاینشانی های فراوان در جایگاه مس، سعی در مطالعه خواص ابررسانایی و بهبود خواصی مانند مراکز میخکوبی کرده اند. مس دو جایگاه متفاوت در ساختار کریستالی ترکیب، دارا می باشد. مس

پس از تهیه نمونه ها، جهت بررسی خواص مغناطیسی اندازه گیری پذیرفتاری مغناطیسی AC توسط دستگاه پذیرفتاری مغناطیسی انجام گرفت. دستگاه پذیرفتاری شرکت Lake-shore مدل ۷۰۰۰ دارای قابلیت اندازه گیری در محدوده دمایی $325 \leq T \leq 77$ کلوین می باشد. اندازه گیری در میدان مغناطیسی متناوب به بزرگی 0.8 A.m^{-1} و فرکانس 333 Hz انجام شد. همچنین آنالیز پراش پرتو ایکس نمونه‌ها به منظور بررسی تشکیل فاز اصلی و تک فاز بودن نمونه‌ها در محدوده $100 \leq 2\theta \leq 10$ انجام شد.

نتایج و تحلیل

با بررسی و مقایسه طیف پراش نمونه‌های خالص و دارای ۲٪ ناخالصی منگنز در دمای اتاق، مطابق شکل ۱، نشان می‌دهد که فاز ۱۲۳ در کلیه نمونه‌ها ایجاد شده و فاز ناخالصی قابل مشاهده ای دیده نمی‌شود.

پذیرفتاری مغناطیسی مواد، که واکنش نمونه در مقابل میدان مغناطیسی می باشد، شامل دو جمله حقیقی و موهومی است. جمله حقیقی، رفتار دیامغناطیسی در نمونه را نشان می دهد و جمله موهومی، بیانگر مقدار اتلاف انرژی است. با اندازه گیری پذیرفتاری مغناطیسی می توان دمای گذار ابررسانا و نیز درصد حجم نمونه که ابررسانا شده است را به دست آورد.

اندازه گیری پذیرفتاری نمونه ها، شکل ۲، نشان می دهد، دمای گذار نمونه منگنز با آلیش ۰/۰۰۴، کاهش بیشتری نسبت به آلیش ۰/۰۲ داشته است. نمونه منگنز با آلیش ۰/۰۲ دمای گذاری در محدوده نمونه خالص نشان می دهد. طبق نظریه BCS انتظار می رود با آلیش ۲ درصد عنصر مغناطیسی، دمای گذار شدیداً کاهش یابد. ممان مغناطیسی منگنز ۵/۲۷ مگنتون بور می باشد [۶]. این مشاهده ممکن است بیانگر تبعیت کردن این ترکیبات از نظریه های جدید جفت شدگی الکترون ها با واسطه گری نوسانات اسپینی باشد [۷-۱۳].

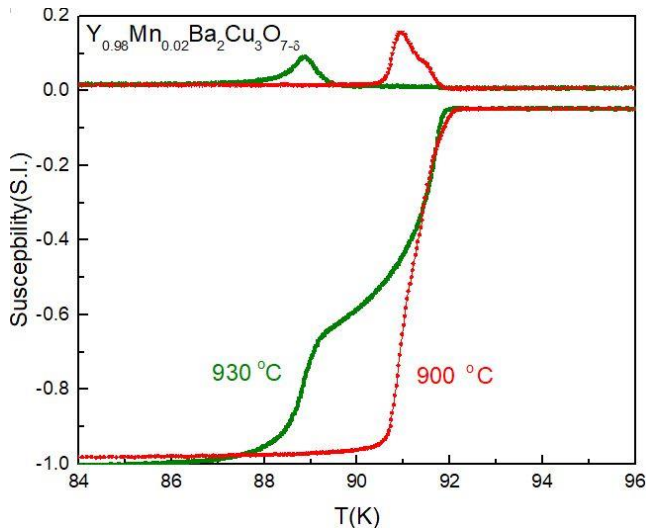
جهت بررسی اثر دمای پخت، دو نمونه حاوی ۰/۰۲ منگنز، در دو دمای ۹۳۰ و ۹۰۰ درجه سانتی گراد، زینتر شدند. همانگونه که

جاینشینی منگنز و کبالت در جایگاه مس، به دلیل ممان مغناطیسی این عنصر، موجب کاهش دمای گذار شده است [۵].

در کارهای قبلی گروه دیده شد که با اضافه کردن مقدار $x=0.004$ نیکل یا آهن و نیز $x=0.02$ کبالت به جای ایتیم دمای گذار کاهش نیافت. منگنز دارای شعاع یونی نزدیک به آهن و کبالت می باشد. با جاینشانی مقادیر مشابه از عنصر مغناطیسی منگنز در پی فهم این مشاهده بودیم. در این تحقیق، با جاینشانی عنصر مغناطیسی منگنز با مقادیر آلیش ۰/۰۲، ۰/۰۰۴، ۰/۰۰۰ در جایگاه ایتیم و با تغییر دمای پخت، به بررسی خواص مغناطیسی این ترکیب پرداخته شد. نمونه ها با روش سل ژل ساخته شدند. در روش سل ژل نمونه ها دارای همگنی بیشتر و اندازه ذرات کوچکتری می باشند. بررسی خواص مغناطیسی توسط پذیرفتاری مغناطیسی AC انجام شد.

ساخت

نمونه های $Y_{1-x}M_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ($M = Mn$) با مقادیر متفاوت استوکیومتری آلیش ۰/۰۲۰، ۰/۰۰۴، ۰/۰۰۰ به روش سیترات ژل، که فرایندی متداول برای ساخت نمونه های ابررسانای YBCO می باشد، ساخته شدند. جهت تهیه محلول سل، نیترات فلزات اولیه $Y(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$ ، $Ba(NO_3)_2$ ، $Mn(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$ ، $Cu(NO_3)_2 \cdot 3H_2O$ با درصد خلوص ۹۹/۹٪ درون آب مقطر حل می شوند. پس از تهیه سل و تنظیم pH بر روی عدد ۶/۸، سل نهایی را در دمای ۶۵ درجه سانتیگراد قرار داده و ژل حاصل طی فرایند خوداحتراقی و افزایش دما تا ۵۲۰ درجه، پودری به رنگ قهوه ای تیره به دست می دهد. پودر حاصل را پس از سایش و دو مرحله کلسینه در دمای ۸۸۰ درجه سانتی گراد، جهت فرایند پخت نهایی به صورت مکعب مستطیل با ابعاد $1 \times 3 \times 1 \text{ mm}^3$ تحت فشار ۴۰ bar تهیه کرده سپس در دمای ۹۰۰ و ۹۳۰ درجه سانتی گراد برای ۲۴ ساعت تحت شار اکسیژن خالص و با نرخ یک حباب بر ثانیه، باقی می ماند و مرحله زینتر انجام می شود. سپس به آرامی و تحت شار اکسیژن مشابه تا دمای اتاق خنک می شوند.



شکل ۳: منحنی پذیرفتاری مغناطیسی بر حسب دمای دو نمونه با آلیش ۰/۰۲ منگنز، زیتتر شده در دمای ۹۰۰ و ۹۳۰ درجه سانتی گراد.

نتیجه گیری

با آلیش ترکیب $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ با عنصر مغناطیسی منگنز تا مقدار ۲ درصد، ساخته شده به روش سل ژل، دمای گذار برای نمونه حاوی منگنز، برخلاف انتظار نظریه BCS، کاهش قابل ملاحظه ای را نشان نداد و دمای گذار در محدوده دمای گذار نمونه خالص است. این مشاهده ظاهرا بیانگر تبعیت کردن این ترکیبات از نظریه های جدید جفت شدگی الکترون ها با واسطه گری نوسانات مغناطیسی می باشد.

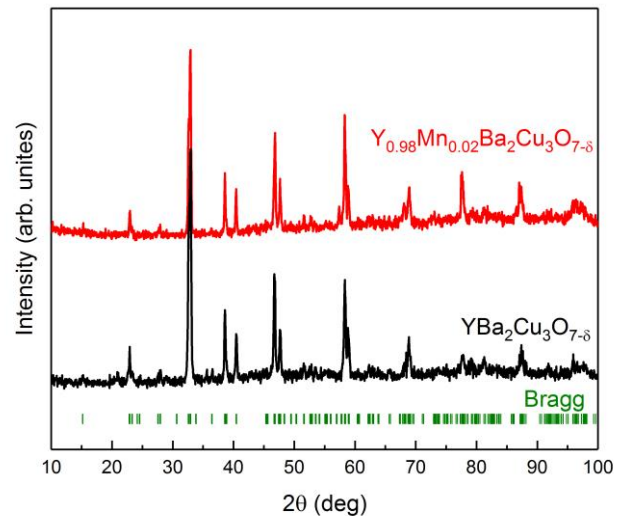
سپاسگزاری

بدین وسیله از همکاری آقای خالد رحمانی و خانم بهناز هادی، صمیمانه تشکر می کنیم.

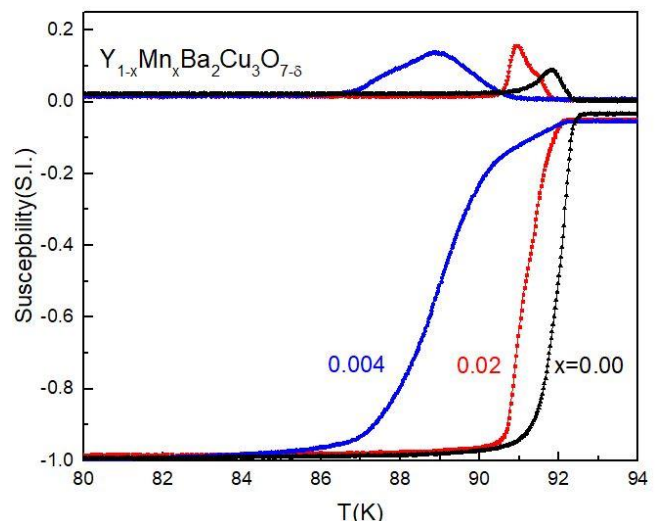
مرجع ها

[۱] de Bruyn Ouboter, R., *Superconductivity: Discoveries during the early years of low temperature research at Leiden 1908-1914*. IEEE Transactions on magnetics, 1987. **23**(2): p. 355-370.
 [۲] Saini, N., et al., *Neutron diffraction and Hall effect measurements on $YBa_2(Cu_{1-x}Mn_x)_3O_7$ system*. Solid state communications, 1992. **82**(11): p. 895-899.
 [۳] Samuel, E.I., et al., *Dc magnetic properties of Mn doped $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ superconductor*. Superconductor Science and Technology, 2001. **14**(7): p. 429.
 [۴] Gahtori, B., et al., *Thermal transport in $(Y,Gd)Ba_2(Cu_{1-x}Mn_x)_3O_{7-\delta}$ for $x \leq 0.02$* . Journal of Physics: Condensed Matter, 2007. **19**(25): p. 256212.

در شکل ۳ مشاهده می شود در نمونه با دمای پخت ۹۳۰ درجه، دو فاز تشکیل شده است. فاز اول، فاز اصلی ۱۲۳ با دمای گذار حدود ۹۲ کلون بوده و فاز ناخالصی دوم، دمای گذار حدود ۸۹ کلون نشان می دهد. این مشاهده نشان می دهد که دمای ۹۳۰ درجه جهت پخت، بالا بوده و احتمالاً باعث ذوب منطقه ای و منجر شدن به تشکیل فاز دومی با دمای گذاری پایین تر در نمونه شده است. بنابراین دیده شد بهترین دما جهت پخت نمونه با آلیش منگنز، ۹۰۰ درجه سانتی گراد می باشد.



شکل ۱: نمودار XRD مربوط به نمونه خالص و آلیش یافته توسط ۲٪ منگنز.



شکل ۲: منحنی پذیرفتاری مغناطیسی بر حسب دمای نمونه با آلیش ۰/۰۰۴ و ۰/۰۲ منگنز در جایگاه ایتريم در ترکیب $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$.

- [۵] Isaac Samuel, E. and V. Seshu Bai, *Temperature and field variation of AC susceptibility on Mn doped $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ superconductor*. International Journal of Modern Physics B, 2003. **17**(03): p. 383-392.
- [۶] Salama, A., et al., *Effect of magnetic and nonmagnetic nano metal oxides doping on the critical temperature of a YBCO superconductor*. Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology, 2015. **6**(4): p. 045013.
- [۷] Mathur, N., et al., *Magnetically mediated superconductivity in heavy fermion compounds*. Nature, 1998. **394**(6688): p. 39.
- [۸] Chubukov, A.V., D. Pines, and J. Schmalian, *A spin fluctuation model for d-wave superconductivity*, in *The physics of superconductors*. 2003, Springer. p. 495-590.
- [۹] Monthoux, P., A. Balatsky, and D. Pines, *Toward a theory of high-temperature superconductivity in the antiferromagnetically correlated cuprate oxides*. Physical Review Letters, 1991. **67**(24): p. 3448.
- [۱۰] Moriya, T. and K. Ueda, *Spin fluctuations and high temperature superconductivity*. Advances in Physics, 2000. **49**(5): p. 555-606.
- [۱۱] Pines, D., *Understanding high-temperature superconductivity: a progress report*. Physica B: Condensed Matter, 1994. **199**: p. 300-309.
- [۱۲] Scalapino, D.J., *The case for dx^2-y^2 pairing in the cuprate superconductors*. Physics Reports, 1995. **250**(6): p. 329-365.
- [۱۳] Tsuei, C. and J. Kirtley, *Pairing symmetry in cuprate superconductors*. Reviews of Modern Physics, 2000. **72**(4): p. 969.

نقاط ویل در کایرال مگنت-ابررسانا

بروکانلو، سمیه^۱؛ گودرزی، هادی^۱؛ خضرلو، مریم^۲^۱گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ارومیه^۲بنیاد ملی نخبگان

چکیده

در این مقاله، ابرساختاری متشکل از یک ابررسانا نوع-s و یک مگنت کایرال مکعبی را در نظر می‌گیریم. این سیستم دارای بافت اسپینی توپولوژیک، یعنی یک اسکیرمیون می‌باشد. نشان می‌دهیم که در طیف انرژی شبه ذرات باگالیوف در این سیستم، نقاط ویل جدید و برانگیختگی‌های حفره ای ظاهر می‌شوند که می‌توان نقاط ویل را با استفاده از جفت شدگی اسپین-مدار جابجا کرد.

Weyl points in superconducting-chiral magnet

Broukanlou, Somayeh¹; Goudarzi, Hadi¹; Khezerlou, Maryam^{1,2}¹ Department of Physics, Faculty of Science, Urmia University² National Elites foundation

Abstract

In this paper, we investigate a heterostructure including s-wave superconductor and a cubic chiral magnet. Chiral magnet stabilizes a topological spin texture, which is described by a Skyrmion. We study the band structure of Bogoliubov quasiparticles and introduce existence of hole excitations and new Weyl points, that position of Weyl points can be controlled by the magnetization.

PACS No. 74, 75

مطالعات در ساختارهای اسپینی، توجه ویژه‌ای به اسکیرمیون^۲ مغناطیسی دارد، که با یک عدد توپولوژیکی صحیح مشخص می‌شود [۸-۹]. اسکیرمیون‌ها یک برآشفتگی موضعی در فضا هستند که در میدانی از اسپین‌ها ایجاد می‌شوند. این نواحی، مغناطش‌های معکوس دارند که با اسپین‌های چرخان احاطه شده‌اند. شبه ذرات اسکیرمیون می‌توانند نمایش کلی از میدان‌های مغناطیسی و الکتریکی گردابی باشند، که در برخی از آهنرباهای کایرال همچون ترکیبات B20 مکعبی (مانند $MnSi$ و $Fe_{0.5}Co_{0.5}Si$) بصورت تجربی مشاهده شده‌اند [۱۰]. ساختار توپولوژیکی اسکیرمیون‌ها

مقدمه

در سال‌های اخیر ساختارهای توپولوژیکی به دلیل کاربردهای فراوانی که در فناوری دارند توجه خاصی را به خود جلب کرده‌اند، که به علت ناوردایی توپولوژیکی ویژگی‌های خاصی دارند. این مواد دارای مخروط‌های سطحی دیراک هستند و حامل‌های بار روی سطح آنها، با اسپین قطبیده حرکت می‌کنند [۱-۲]. حضور نقاط ویل^۱ در ساختار نواری، وجود پدیده‌های بسیاری، از جمله حالت‌های سطحی قوس فرمی، ناهنجاری‌های کایرال و اثر غیرعادی هال را پیش بینی می‌کند [۳-۷].

^۲ Skyrmion^۱ Weyl points

که در آن $\vec{\sigma}$ ماتریس های پائولی در فضای اسپینی و $\mathcal{E}_k = -t \sum_{i=\{x,y,z\}} \cos(k_i a)$ انرژی بستگی با ثابت شبکه ی a است. جهت گیری جفت شدگی اسپین مدار در یک مدل شبکه ای مکعبی را می توان با بردار زیر توصیف کرد:

$$\vec{g}(\vec{k}) = (\sin(k_x a), \sin(k_y a), \sin(k_z a)). \quad (2)$$

پتانسیل شیمیایی با μ و ضریب جفت شدگی تبدالی نیز با J مشخص شده است. گشتاور مغناطیسی موضعی نیز با $M \vec{n}$ توسط بردار واحد $\vec{n} = (\cos \phi \sin \theta, \sin \phi \sin \theta, \cos \theta)$ نشان داده شده است. ویژه مقادیر هامیلتونی برای کایرال مگنت بصورت زیر بدست می آید:

$$E_{CM} = (\mathcal{E}_k - \mu) \pm \sqrt{(J_x - \alpha_x)^2 + (J_y - \alpha_y)^2 + (J_z - \alpha_z)^2} \quad (3)$$

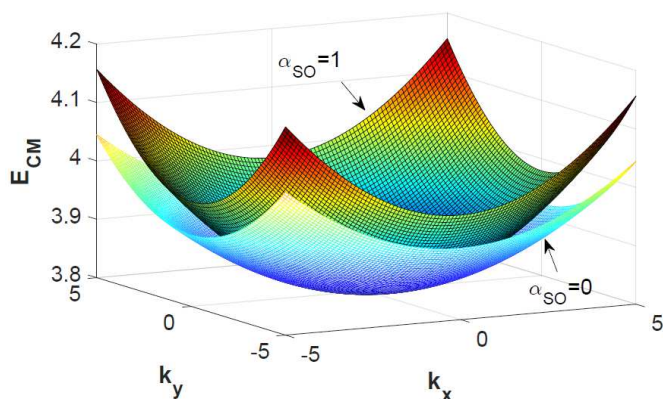
که توسط پارامترهای زیر معرفی می شود:

$$\alpha_x = \alpha_{SO} \sin \theta \cos \phi, \quad \alpha_y = \alpha_{SO} \sin \theta \sin \phi,$$

$$\alpha_z = \alpha_{SO} \cos \theta$$

$$J_x = JM \sin \theta_1 \cos \phi_1, \quad J_y = JM \sin \theta_1 \sin \phi_1,$$

$$J_z = JM \cos \theta_1$$



نمودار ۱: اثر جفت شدگی اسپین-مدار بر روی انرژی کایرال مگنت برحسب k_x, k_y . طیف انرژی کایرال مگنت برای پارامترهای $t=0.1, \Delta=0.2, JM=2.0, \mu=-4.8, \alpha_{SO}=0.6$ و $\theta=0, \phi=\pi/4$ رسم شده است.

در نمودار ۱ انرژی کایرال مگنت را به ازای دو مقدار مختلف جفت شدگی اسپین-مدار ($\alpha_{SO}=0$ و $\alpha_{SO}=1$) رسم کرده ایم.

باعث ایجاد نیروی مگنوس^۳ می شود که مانند نیروی لورنتس بر اسکیرمیون ها تاثیر می گذارد [۱۱]. این نیرو از اسکیرمیون ها در مقابل ناخالصی ها یا نقص شبکه، محافظت می کند. گشتاور انتقال اسپینی یک نوع گشتاور اسپینی القا شده توسط جریان است که حضور آن به بافت اسپینی غیرخطی نیاز دارد [۱۲]. جفت شدگی اسپین-مدار نیز نوع دیگری از گشتاور ناشی از جریان، به اسم گشتاور اسپین-مدار (SO) را ایجاد می کند که می تواند اسکیرمیون-ها را از طریق جریان حرکت دهد [۱۳]. جفت شدگی اسپین-مدار در مگنت های کایرال منجر به برهمکنش زیالوشنسکی-موریا^۴ می شود، منشاء نظم های مغناطیسی غیرخطی، مانند نظم اسپینی مارپیچ و فاز کریستالی اسکیرمیون می باشد. در اثر مجاورت مگنت با ابررسانا، در ساختاری نواری این سیستم نقاط ویل ظاهر می شوند، که با توجه به قدرت جفت شدگی اسپین-مدار می توان شیب مخروط های ویل را تغییر داد [۱۴].

مطالعات اخیر نشان داده است که ابررسانایی دیدگاه های جدیدی در مورد اسپینترونیک ارائه می دهد. از دیدگاه تئوری، سیستم هایی با مغناطیس و ابررسانایی از نظر بررسی توپولوژی نواری شبه ذرات باگالیوبوف^۵ بسیار جالب توجه هستند. با جفت شدگی اسپین-مدار راشبا، حالت های شبه ذرات باگالیوباف می تواند توپولوژی غیر بدیهی داشته باشد [۱۴].

در این مقاله طیف انرژی کایرال مگنت MnSi را در حضور جفت شدگی اسپین-مدار مورد مطالعه قرار می دهیم. از مجاورت یک ابررسانای نوع-s با این کایرال مگنت میتوانیم شاهد تشکیل نقاط ویل و برانگیختگی های حفره ای باشیم.

فرمالیسم هامیلتونی موثر و طیف پاشندگی

هامیلتونی کایرال مگنت در حضور بردار مغناطش و جفت

شدگی اسپین-مدار به صورت زیر تعریف می شود:

$$H_0(\vec{k}) = (\mathcal{E}_k - \mu) - JM \vec{n} \cdot \vec{\sigma} + \alpha_{SO} \vec{g}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma} \quad (1)$$

^۳ Magnus force

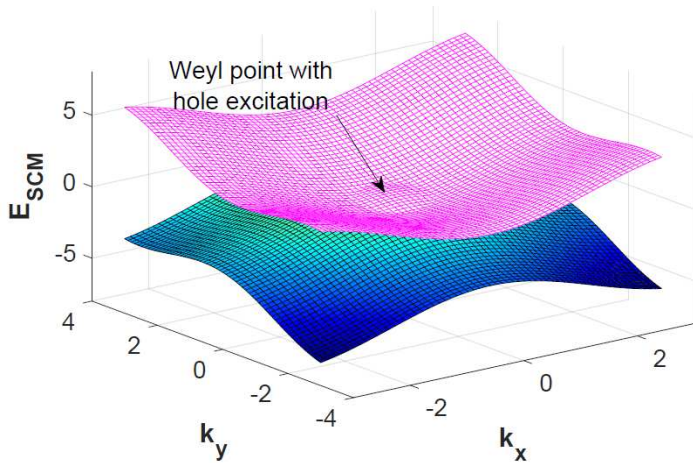
^۴ Dzyaloshinskii-Moriya

^۵ Bogoliubov quasiparticle

$$\eta_1 = (\alpha_{SO} (k_x \cos \varphi \sin \theta + k_y \sin \varphi \sin \theta + k_z \cos \theta),$$

$$\eta_2 = \left\{ \varepsilon_k - JM - \mu - \frac{|\Delta|^2}{2\mu} + \left[\frac{\alpha_{SO}^2}{2JM} \right] [(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - (k_x \cos \varphi \sin \theta + k_y \sin \varphi \sin \theta + k_z \cos \theta)^2] \right\}^2,$$

$$\eta_3 = \left(\frac{|\Delta| \alpha_{SO} (JM + |\mu|)}{2JM |\mu|} \right)^2 [(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - (k_x \cos \varphi \sin \theta + k_y \sin \varphi \sin \theta + k_z \cos \theta)^2]$$



نمودار ۲: اثر جفت شدگی اسپین-مدار بر روی انرژی ابرساختار متشکل از ابرسانای نوع-s و یک کایرال مگنت مکعبی. که انرژی برای پارامترهای $t = 0.1, \Delta = 0.2, JM = 2.0, \mu = -4.8, \alpha_{SO} = 0.6, \theta = 0, \varphi = \pi/4$, و $k_y = 0$ رسم شده است.

نمودار (۲) طیف انرژی این سیستم را تحت تاثیر جفت شدگی اسپین-مدار برحسب k_x, k_z نشان می دهد، که α_{SO} در این نمودار برابر $\pi/6$ است. تشکیل حالات حفره و قوس فرمی در این نمودار مشاهده می شود.

همانطور که مشاهده می شود افزایش جفت شدگی اسپین-مدار باعث افزایش انرژی می گردد، اما جهت گیری طیف انرژی تغییری نمی کند.

در ادامه یک ابرساختار متشکل از ابرسانای نوع-s و یک مگنت کایرال مکعبی را در نظر میگیریم (شکل ۱)، این سیستم با هامیلتونی باگالیوف-دی جنس $H(\vec{k})$ (BdG) زیر تعریف می شود:

$$H(\vec{k}) = \begin{pmatrix} H_0(\vec{k}) & -i\Delta\sigma_y \\ i\Delta^*\sigma_y & -H_0(-\vec{k})^T \end{pmatrix}. \quad (4)$$

جفت شدگی ناشی از ابرسانایی را با Δ مشخص می کنیم. با اثر دادن یک ماتریس تبدیل یونیتاری $U(\vec{k})$ بر هامیلتونی BdG به فرم $U^\dagger(\vec{k})H(\vec{k})U(\vec{k})$ ، که بر هر دو فضای اسپینی و فضای حفره-ذره اثر می کند، و بسط هامیلتونی سیستم، نهایتاً به یک هامیلتونی موثر 2×2 برای توصیف این سیستم بدست می آید.

برای حالات حدی $\mu \sim -JM$ و $(JM, |\mu|) \gg (t, \alpha_{SO}, \Delta)$ هامیلتونی برای شبه ذرات با انرژی پایین به فرم زیر تبدیل می شود [۱۴]:

$$H_{eff}(\vec{k}) = \alpha_{SO} \vec{k} \cdot \vec{n} + \begin{pmatrix} \xi_{eff}(\vec{k}) & \Delta_{eff} \vec{\gamma} \cdot \vec{k} \\ \Delta_{eff} \vec{\gamma}^* \cdot \vec{k} & -\xi_{eff}(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad (5)$$

که

$$\Delta_{eff} = \frac{|\Delta| \alpha_{SO} (JM + |\mu|)}{2JM |\mu|}, k_{\perp}^2 = k^2 - (\vec{k} \cdot \vec{n})^2$$

$$\xi_{eff}(\vec{k}) = \varepsilon_k - JM - \mu - \frac{|\Delta|^2}{2\mu} + \frac{\alpha_{SO}^2}{2JM} k_{\perp}^2$$

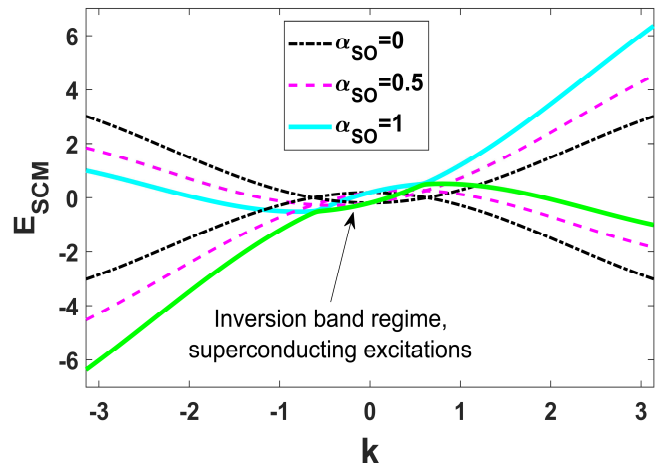
هامیلتونی برای شبه ذرات با انرژی پایین، در نظر گرفته شده است به طوریکه $|a| \ll 1, (a = 1)$ می باشد. از حل معادله ویژه مقادیری $H_{eff}(\vec{k})$ انرژی به فرم زیر بدست می آید:

$$E_{SCH} = \eta_1 \pm \sqrt{\eta_2 + \eta_3} \quad (6)$$

که پارامترهای η_1 و η_2 و η_3 بصورت زیر تعریف می شوند:

مرجع‌ها

- [۱] M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
 [۲] X. L. Qi and S. C. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
 [۳] G.E. Volovik, The Universe in a Helium Droplet (Oxford University Press, Oxford, 2003).
 [۴] S. Murakami, New J. Phys. **9**, 356 (2007).
 [۵] W. Witczak-Krempa and Y. B. Kim, Phys. Rev. B **85**, 045124 (2012).
 [۶] V. Aji, Phys. Rev. B **85**, 241101 (2012).
 [۷] C.-X. Liu, P. Ye, and X.-L. Qi, Phys. Rev. B **87**, 235306 (2013).
 [۸] U. K. Rössler, A. N. Bogdanov, and C. Pfleiderer, Nature (London) **442**, 797 (2006).
 [۹] N. Nagaosa and Y. Tokura, Nat. Nanotechnol. **8**, 899 (2013).
 [۱۰] W. Munzer, A. Neubauer, T. Adams, S. Mühlbauer, C. Franz, F. Jonietz, R. Georgii, P. Böni, B. Pedersen, M. Schmidt, A. Rosch, C. Pfleiderer, Phys. Rev. B **81**, 041203(R) (2010).
 [۱۱] M. Stone, Phys. Rev. B **53**, 16573 (1996).
 [۱۲] J. Slonczewski, J. Magn. Magn. Mater. **159**, L1 (1996).
 [۱۳] K.M.D.H. alsand A. Brataas, Phys. Rev. B **89**, 064426 (2014).
 [۱۴] R. Taka, S. Fujii, Phys. Rev. B **94** (2016) 235117.



نمودار ۳: اثر جفت شدگی اسپین-مدار بر روی انرژی ابرساختار متشکل از ابررسانای نوع-s و یک کایرال مگنت مکعبی برحسب k . نمودار برحسب پارامترهای $t = 0.1$, $\Delta = 0.2$, $JM = 2.0$, $\mu = -4.8$, $\alpha_{SO} = 0.6$ و $\theta_1 = \pi/4$, $\varphi_1 = 0$ و $\theta = \pi/4$, $\varphi = \pi/4$ رسم شده است.

در نمودار (۳) طیف انرژی سیستم برحسب k رسم شده است که در آن $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$ است. نمودار طیف انرژی این سیستم تحت تاثیر مقادیر مختلف جفت شدگی اسپین-مدار رسم شده است. مشاهده می شود که به ازای مقادیر مختلف α_{SO} نمودار طیف انرژی سیستم چرخش پیدا کرده است.

نتیجه گیری

در این مقاله هامیلتونی موثر ابرساختار متشکل از ابررسانای نوع-s و یک کایرال مگنت را برحسب مولفه های مختلف \vec{k} مورد بررسی قرار دادیم و بازه تغییرات ضریب جفت شدگی اسپین-مدار α_{SO} را از ۰ تا ۱ در نظر گرفتیم. از طریق حل تحلیلی، ساختار نواری و انرژی برانگیختگی الکترون-حفره را محاسبه کرده و نقاط ویل جدید در منطقه‌ی اول بریلوئن نمایش داده شده است. مشاهدات بدست آمده نشان می دهد که به ازای مقادیر مختلف α_{SO} نمودار طیف انرژی سیستم برحسب k جابجا می شود. همچنین وجود نقاط ویل را در باند انرژی شبه ذرات مشاهده کردیم و اینکه موقعیت این نقاط ویل می تواند با مغناطش تغییر کند. شیب مخروط های ویل نیز می تواند با شدت جفت شدگی اسپین-مدار تغییر کند.

بررسی اثر ناخالصی در مدل دیراک یک بعدی

پویان، سیامک؛ حسینی، میروحید

دانشکده فیزیک دانشگاه زنجان، زنجان

چکیده

در این مقاله اثرات پراکندگی ناخالصی/ بی‌نظمی روی ویژگی‌های طیفی مدل دیراک یک بعدی در تقریب خودسازگار بورن را بررسی کرده‌ایم. بی‌نظمی نقش اساسی را در سیستم‌های الکترونی ابعاد پایین ایفا می‌کند. ما بی‌نظمی القا شده در مدل دیراک یک بعدی را به دو روش تکراری و غیرتکراری و در حد مرتبه صفر تقریب بورن به صورت تحلیلی بررسی کرده و مشاهده کرده‌ایم که در مدل یک بعدی وجود شدت بی‌نظمی بحرانی به مقدار انرژی فرمی بستگی دارد و با افزایش شدت بی‌نظمی انرژی فرمی به آهستگی کاهش می‌یابد.

PACS No.(68)

Impurity effect on a one-dimensional Dirac model

Pooyan, Siamak; Hosseini, Mir Vahid

Department of Physics, University of Zanjan, Zanjan

Abstract

We investigate the effects of disorder/impurity scattering on the spectral properties of a one-dimensional Dirac model within the self-consistent Born approximation. Disorder plays a fundamental role in low-dimensional electronic systems. We investigated the induced disorder in the one-dimensional Dirac model with both iterative and non-iterative methods and also zero-order Born approximation analytically. We observed that in a one-dimensional model the existence of the critical disorder strength depends on the amount of Fermi energy, and with increasing disorder strength the Fermi energy decreases slowly.

مقدمه

مطالعه اثرات ناخالصی در مدل دیراک جرم‌دار پرداخته شده است [5,6]. بررسی اثرات ناخالصی در مدل دیراک جرم‌دار به ویژگی‌های جدیدی منجر می‌شود. که مهم‌ترین نمونه در این مورد تقریب بورن خودسازگار است. با اضافه کردن ناخالصی مغناطیسی انتظار می‌رود که گاف حالت‌های سطحی باز شود. در صورتی که گشتاورهای مغناطیسی در جهت عمود بر سطح اعمال شوند، طیف حاصل همانند طیف فرمیون‌های دیراک جرم‌دار بدست می‌آید [7]. بی‌نظمی همچنین زیربنای بسیاری از پدیده‌ها همچون اثر هال کوانتومی صحیح است [8]. پیشرفت‌های اخیر نشان می‌دهد که فزونی شیب به عایق

اثرات بس ذره‌ای (همانند برهمکنش الکترون-الکترون، الکترون-فونون و یا پراکندگی ناخالصی) به طور تعیین کننده‌ای با گرافن در ارتباط هستند [1,2]. از دیدگاه کلی مخروط‌های دیراک ذاتی بدون جرم (بدون اسپین) در گرافن برابر اختلال‌های تک‌ذره‌ای و بس‌ذره‌ای تا زمانی که برهمکنش منجر به شکست خودبه‌خودی تقارن نشود محافظت شده‌اند [3,4]. از میان منابع موجود، برهمکنش پراکندگی ناخالصی/ بی‌نظمی نشان دهنده یکی از ساده‌ترین موارد است. از این رو اثرات ناخالصی/ بی‌نظمی در گرافن و مدل دیراک بدون جرم مورد بررسی قرار گرفته و کمتر به

$$= \tilde{\epsilon}_f - \sum_{\mu} \Sigma_{\mu} \sigma_{\mu}, \quad (4)$$

در اینجا عبارت $\tilde{\epsilon}_f = \epsilon_f - \alpha k_x \sigma_x$ را تعریف کرده‌ایم،

$$\left[\epsilon_f - H_0(\vec{k}) - \Sigma(\vec{k}) \right]^{-1} = \frac{\tilde{\epsilon}_f + \sum_{\mu} \Sigma_{\mu} \sigma_{\mu}}{\tilde{\epsilon}_f^2 - \sum_{\mu} \Sigma_{\mu}^2}, \quad (5)$$

با جایگذاری رابطه‌ی بالا در معادله 2 داریم:

$$\Sigma(\vec{k}) = A \int_{BZ} dk \frac{\tilde{\epsilon}_f + \sum_{\mu} \Sigma_{\mu} \sigma_{\mu}}{\tilde{\epsilon}_f^2 - \sum_{\mu} \Sigma_{\mu}^2}, \quad (6)$$

که می‌توانیم آن را به دو معادله زیر تجزیه کنیم،

$$\Sigma_0 = A \int_{BZ} dk \frac{\epsilon_f - \alpha k_x + \Sigma_0}{D(\vec{k})}, \quad (7)$$

$$\Sigma_i = A \int_{BZ} dk \frac{\Sigma_i \sigma_i}{D(\vec{k})},$$

در اینجا ضریب $A = \frac{U_0^2}{12} \left(\frac{a}{2\pi} \right)$ و مخارج

$$D(\vec{k}) = \tilde{\epsilon}_f^2 - \sum_{\mu} \Sigma_{\mu}^2$$

نشان می‌دهد که انرژی فرمی توسط Σ_0 بازبهنجار شده است، به طوری که مقدار بازبهنجار شده بدین صورت است:

$$\bar{\epsilon}_f = \epsilon_f - \text{Re} \Sigma_0 = \epsilon_f - A \text{Re} \left[\int_{BZ} dk \frac{\epsilon_f - \alpha k_x}{D(\vec{k})} \right], \quad (8)$$

با بازنویسی مجدد مخرج داریم،

$$D(\vec{k}) = \tilde{\epsilon}_f^2 - \sum_{\mu} \Sigma_{\mu}^2 = \tilde{\epsilon}_f^2, \quad (9)$$

در سمت راست معادله بالا برای خود-انرژی و انرژی فرمی بازبهنجار شده در حد مرتبه صفر تقریب بزنیم $\Sigma_{\mu} \rightarrow 0$ و $\bar{\epsilon}_f \rightarrow \epsilon_f$ در این حد $\Sigma_i = \Sigma_0$ ، به این دلیل که ما یک انتگرال فرد روی حد زوج داریم [10]. انتگرال تنها به dk بستگی دارد و برای پیدا کردن جواب آن برش Λ را اعمال می‌کنیم

$$\bar{\epsilon}_f = \epsilon_f - A \int_0^{\Lambda} dk_x \frac{\epsilon_f - \alpha k_x}{(\epsilon_f - \alpha k_x \sigma_x)^2}, \quad (10)$$

در اینجا مقدار $\Lambda = \frac{\pi}{a}$ است،

توپولوژیک دو بعدی را می‌توان با اعمال بی‌نظمی غیرمغناطیسی درون فلز دو بعدی با جفت شدگی اسپین مدار قوی ایجاد کرد [9,10].

معادله دیراک نقش اساسی را در زمینه‌های مختلف فیزیک مدرن و ریاضیات ایفا می‌کند و برای توصیف برهمکنش ذرات مهم است [11].

در این مقاله القای بی‌نظمی را در مدل دیراک یک بعدی بررسی کرده‌ایم. ما برای این کار تقریب بزنیم خودسازگار که ساده‌ترین مدل برای پراکندگی ناخالصی / بی‌نظمی است را به کار گرفته‌ایم.

مدل

در این مقاله هامیلتونی مدل دیراک یک بعدی بدون گاف را نظر گرفته‌ایم،

$$H = \alpha k_x \sigma_x, \quad (1)$$

در اینجا پارامتر α به ماده بستگی دارد، σ_x ماتریس پائولی است و k_x بردار موج در یک بعد است.

معادله خود-انرژی با استفاده از تقریب بزنیم خودسازگار و همراه با ناخالصی شبه نقطه‌ای به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\Sigma(\vec{k}) = N u^2 \left(\frac{a}{2\pi} \right) \int dx [\epsilon_f - H_0(\vec{k}) - \Sigma(\vec{k}) + i 0^+]^{-1}, \quad (2)$$

H_0 به عنوان هامیلتونی تمیز (هامیلتونی بدون بی‌نظمی) معرفی شده است ($U=0$)، ϵ_f انرژی فرمی است و u^2 واریانس توزیع یکنواخت متغیر تصادفی در دامنه $[-u_0/2, u_0/2]$ است که به صورت زیر به دست می‌آید:

$$u^2 = \frac{1}{N U_0} \int_{-u_0/2}^{u_0/2} u^2 du = \frac{U_0^2}{12N}. \quad (3)$$

به منظور ایجاد انتگرال همگرا، به یک بخش موهومی بی‌نهایت کوچک نیاز داریم. هر زمان که ϵ_f درون انتگرال ظاهر می‌شود، در اینصورت انتگرال دارای یک بخش موهومی بسیار کوچک می‌باشد. برای سادگی خود-انرژی را به صورت $\Sigma = \sum_{\mu} \Sigma_{\mu} \sigma_{\mu}$ نوشته شده است، که با جایگذاری در رابطه (2) داریم:

$$\epsilon_f - H_0(\vec{k}) - \Sigma(\vec{k}) = \epsilon_f - \alpha k_x \sigma_x - \sum_{\mu} \Sigma_{\mu} \sigma_{\mu}$$

جست و جوی مرزهای فاز می‌باشیم کار با این عبارت مناسب‌تر است. اکنون دو انتگرال زیر را تعریف می‌کنیم،

$$I_1 = \int_{BZ} dk_x \frac{\varepsilon_f}{D(\vec{k})}, I_2 = \int_{BZ} dk_x \frac{\alpha k_x}{D(\vec{k})}, \quad (12)$$

با جایگذاری در معادله (8) برای $\bar{\varepsilon}_f = 0$ داریم:

$$\varepsilon_f = A \int_{BZ} dk_x \frac{\varepsilon_f - \alpha k_x}{D(\vec{k})} = A(I_1 - I_2). \quad (13)$$

بنابراین طیف انرژی را می‌توان به سادگی به دست آورد،

$$\hat{H}\psi(\vec{k}) = E\psi(\vec{k}) \Rightarrow E(\vec{k}) = \alpha k_x \sigma_x. \quad (14)$$

$$E_0(\vec{k}) - \alpha k_x \sigma_x = 0; D(\vec{k}) = 0$$

تقریب برون بدست آورده و آن را برابر با صفر قرار می‌دهیم،

$$D(\vec{k}) = \varepsilon_f - \alpha k_x \sigma_x = 0. \quad (15)$$

بررسی مرتبه صفر تقریب برون

به منظور مطالعه تحلیلی مرزهای فاز، مرتبه صفر تقریب برون را با قرار دادن $\Sigma = 0$ در سمت راست معادله (7) به دست آورده‌ایم. همانطور که در بالا توضیح داده شد $\Sigma_i = 0$ جواب خودسازگار معادله است، بنابراین ما دو معادله زیر را داریم،

$$\Sigma_0 = \int_{BZ} dk \frac{\varepsilon_f - \alpha k_x}{D(\vec{k})}, \quad (16)$$

$$\Sigma_i = \int_{BZ} dk \frac{\Sigma_i \sigma_i}{D(\vec{k})} = 0,$$

در اینجا مخرج برابر است با:

$$D(\vec{k})|_{\Sigma=0} = \tilde{\varepsilon}_f^2, \quad (17)$$

در حد مرتبه صفر تقریب برون $\Sigma_i = 0$. پس فقط Σ_0 باقی می‌ماند، بنابراین:

$$\Sigma_0 = A \int_0^\Lambda dk_x \frac{\varepsilon_f - \alpha k_x}{(\varepsilon_f - \alpha k_x \sigma_x)^2}, \quad (18)$$

$$\Sigma_0 = -\frac{U_0^2}{24\Lambda\alpha} \ln \left| \frac{\Lambda\alpha}{\varepsilon_f} - 1 \right|. \quad (19)$$

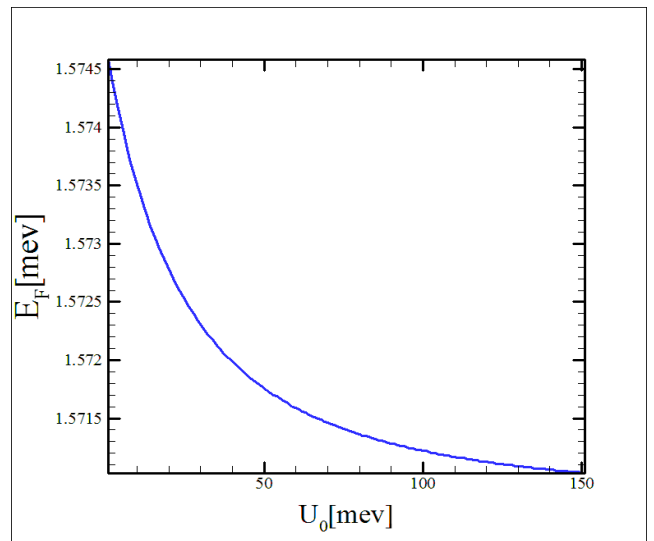
در اینصورت انرژی فرمی بازبهنجار شده در حد مرتبه صفر تقریب برون به این صورت است:

$$\bar{\varepsilon}_f = \varepsilon_f + \frac{U_0^2}{24\Lambda\alpha} \ln \left| \frac{\Lambda\alpha}{\varepsilon_f} - 1 \right|, \quad (20)$$

$$\bar{\varepsilon}_f = \varepsilon_f + \frac{U_0^2}{24\Lambda\alpha} \ln \left| \frac{\Lambda\alpha}{\varepsilon_f} - 1 \right|. \quad (11)$$

روش تکراری

معادله‌های خود-انرژی را می‌توان با تکرار خودسازگار به صورت عددی حل کرد. همانطور که در بالا توضیح داده شد $\Sigma_i = 0$ جواب خودسازگار برای دو معادله (7) می‌باشد، به طوری که تنها Σ_0 باقی می‌ماند. ما قصد داریم که تنها مرزهای فاز را جست‌وجو کنیم، جست‌وجوی تمام فضای فاز یک روش طولانی است. استفاده از یک مقدار اولیه موهومی و اضافه کردن بخش موهومی بسیار کوچک به ε_f ضروری است، در غیراینصورت معادله (11) همگرا نمی‌شود. در نتیجه روش تکراری سازگار است، با این حال برای پارامترهای خاص به اندازه کافی دقیق نیست. ما از تابع fsolve متلب برای برطرف کردن این مشکل استفاده کردیم.



شکل 1: انرژی فرمی E_F بر حسب شدت بی‌نظمی U_0 در مدل یک بعدی. با افزایش شدت بی‌نظمی انرژی فرمی به آهستگی کاهش می‌یابد.

روش غیر تکراری

قصد داریم که گذار فاز را به طور مستقیم جست‌وجو کنیم. برای این کار از عبارت (9) استفاده می‌کنیم. هنگامی که در

مرجع‌ها

- [1] S. Das Sarma, E. H. Hwang, and W.-K. Tse, *Phys. Rev. B* **75**, 121406(R) (2007).
- [2] A. Bostwick, F. Speck, T. Seyller, K. Horn, M. Polini, R. Asgari, A. H. MacDonald, and E. Rotenberg, *Science* **328**, 999 (2010).
- [3] T. Appelquist, D. Nash, and L. C. R. Wijewardhana, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2575 (1988).
- [4] E. Cappelluti, L. Benfatto, M. Papagno, D. Pacile, P. M. Sheverdyaeva, and P. Moras, *Ann. Phys. (Berlin)* **526**, 387 (2014).
- [5] V. M. Pereira, F. Guinea, J. M. B. Lopes dos Santos, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 036801 (2006).
- [6] B. Yu-Kuang Hu, E. H. Hwang, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **78**, 165411 (2008).
- [7] Andrew M. Essin, Joel E. Moore, and David Vanderbilt, *Phys. Rev. Lett.* **102**:146805, (2009).
- [8] Ferdinand Evers and Alexander D. Mirlin, *Rev. Mod. Phys.* **80**:1355–1417, (2008).
- [9] Jian Li, Rui-Lian Chu, J.K. Jain, Shen, Shun-Qing, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 136806 (2009).
- [10] Gilad Amir Rosenberg, *A Study of Topological Insulators in Three Dimensions*, The University of British Columbia (2012).
- [11] H. Wang, H. Z. Tang, *J. Comput. Phys.* **222**, 176 (2007).

در ابتدا تقریب بورن مرتبه صفر با $\Sigma = 0$ را در انتگرال در نظر گرفته‌ایم، سپس $\bar{\epsilon}_f \rightarrow \epsilon_f$ را در معادله (18) جایگزین کردیم و برش $\Lambda = \frac{\pi}{a}$ را اعمال کرده‌ایم و در نهایت در انرژی‌های پایین تقریب زده‌ایم. با این حال ما عبارت بورن کامل را در تقریب انرژی‌های پایین در نظر گرفته‌ایم، در نتیجه می‌توانیم دقیقاً همان نتایج را داشته باشیم. این نتایج نمی‌توانند تقریب بورن مرتبه صفر باشند، اما تقریباً می‌توانند تقریب انرژی‌های پایین باشند. باتعریف $\bar{\epsilon}_f = 0$ داریم:

$$U_0 = \sqrt{\frac{-24\Lambda\alpha\epsilon_f}{\ln\left|\frac{\Lambda\alpha}{\epsilon_f} - 1\right|}}, \quad (21)$$

در معادله بالا برای $\Lambda\alpha < 2\epsilon_f$ عبارت زیر رادیکال مثبت می‌شود و در اینصورت شدت بی‌نظمی بحرانی داریم و برای $\Lambda\alpha > 2\epsilon_f$ عبارت زیر رادیکال منفی می‌شود و در اینصورت شدت بی‌نظمی بحرانی نداریم.

نتیجه‌گیری

با استفاده از دو روش تکراری و غیرتکراری اثرات بی‌نظمی را در مدل دیراک یک بعدی بررسی نمودیم. در مدل دیراک یک بعدی شدت بی‌نظمی بحرانی برای مقادیر خاصی از انرژی فرمی وجود دارد. در این مدل انرژی فرمی ϵ_f با شدت بی‌نظمی U_0 رابطه عکس دارد و با افزایش شدت بی‌نظمی انرژی فرمی به آهستگی کاهش می‌یابد.

ابرسانای توپولوژیک در شبکه مثلثی

حسنعلی، روح انگیز؛ احمدخانی، سمیه؛ حسینی، میروحید

دانشکده فیزیک، دانشگاه زنجان، زنجان

چکیده

در این مقاله، حالت‌های نانو نوار شبکه مثلثی در حضور برهم‌کنش اسپین مدار راشبا و در مجاورت ابرسانای موج-S مورد مطالعه قرار گرفته است. با بررسی ویژه مقادیر، ویژه حالت‌ها و تقارن‌های موجود در سیستم، در بازه‌های محدودی از اندازه حرکت، تبهگنی‌هایی در انرژی سیستم مشاهده می‌شود. نتیجه‌ی بررسی حالت‌های مربوط به این ناحیه، وجود حالت‌های لبه‌ای در سیستم می‌باشد. این حالت‌ها نشان‌دهنده‌ی وجود فاز توپولوژیک در سیستم است. سپس با اعمال میدان زمین به سیستم، تغییرات حالت‌های لبه‌ای را بررسی می‌کنیم و مشاهده می‌کنیم که با اعمال میدان مغناطیسی، تبهگنی موجود در انرژی‌ها از بین می‌رود. در نهایت با محاسبه‌ی عدد چرن، فاز سیستم را به ازای مقادیر مشخصی از پارامتر نظم ابرسانایی و جفت‌شدگی اسپین مدار راشبا مشخص می‌کنیم.

Topological superconductivity in triangular lattice

Hassanali, Rouhangiz; Ahmadkhani, Somayeh; Hosseini, Mir Vahid;

Department of physics, University of Zanjan, Zanjan

Abstract

In this work, we investigated edge state existence in nanoribbons of triangular lattice in present of Rashba spin-orbit interaction and induced s-wave superconductivity by proximity effect. Therefore, after discussion about symmetries, eigenvalues and eigenstates, we saw some degeneracy in spectrum and edge states in related eigenvectors in finite energies of nanoribbon. Further we discussed about edge states by applying Zeeman field and saw that edge states are broken in nonzero magnetic fields. Finally, by calculating Chern number, we districted Topological and Normal phases in different superconducting order parameter and spin orbit coupling intensity.

PACS No. 74.00

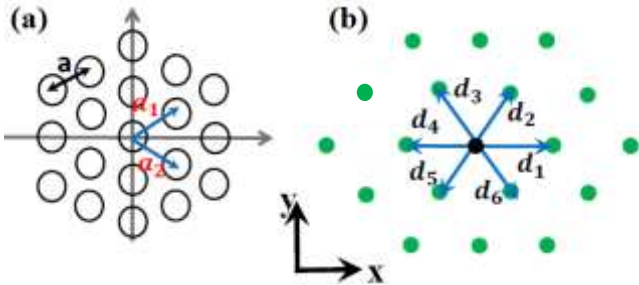
جدیدی از ابرسانایی کشف شد که با نظریه‌های شناخته شده، قابل توجیح نبودند. این نوع ابرسانایی با عنوان ابرسانای نامتعارف مورد بررسی قرار گرفت. با وابستگی فضایی حالت‌های ابرساناهای نامتعارف و بسته به تقارن‌های فضایی موجود، می‌توان آن‌ها را به صورت ابرسانای موج-S، موج-P و ... دسته بندی کرد [2].

نوع جدید دیگری از فاز مواد کشف شده در دهه‌های اخیر، فاز توپولوژی است که در طی تغییر شکل‌ها، ضربه خوردن‌ها و کشیده شدن اشیاء، به‌طور ثابت حفظ می‌شوند، از طبقه بندی‌های

مقدمه

امروزه مفهوم ابرسانایی و ابرسانای توپولوژیک توجه زیادی را به خود جلب کرده است. ابرسانایی ویژگی است که در دماهای بسیار پایین برای برخی از مواد رخ می‌دهد. این اثر در سال ۱۹۱۱ با پایین بردن دمای جیوه تا حدود ۴ کلوین کشف شد. در این نوع مواد، مقاومت الکتریکی صفر شده و ماده خاصیت دیامغناطیس پیدا می‌کند. در سال ۱۹۵۷ نظریه‌ای با عنوان BCS توسط سه دانشمند با نام‌های جان باردین، رابرت شریف و لئون کوپر برای توجیح ابرسانایی مطرح شد [1]. در سال ۱۹۸۶ نوع

بررسی می‌شود؛ به صورتی که در راستای X تقارن انتقالی داریم پس در این راستا می‌توان از سیستم تبدیل فوریه گرفت و در راستای Y تعداد محدودی سلول واحد در نظر می‌گیریم ($N=50$).



شکل 1: یک طرح کلی از شبکه مثلثی، (a) a_1 و a_2 بردارهای شبکه مثلثی هستند و a ثابت شبکه مثلثی را نشان می‌دهد. (b) d_i ($i=1-6$) جهش به همسایه اول را نشان می‌دهد.

هامیلتونی مربوط به شبکه مثلثی را در حضور جمله راشبا و در مجاورت ابررسانای موج S- بررسی می‌کنیم که جزئیات آن به صورت زیر است.

$$H = H_0 + H_R + H_z, \quad (1)$$

$$H_0 = -\mu \sum_{j,\alpha} c_{j,\alpha}^\dagger c_{j,\alpha} - t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} c_{j,\alpha}^\dagger c_{j+1,\alpha} + \Delta \sum_{\alpha} c_{j,\downarrow} c_{j,\uparrow} + h.c., \quad (2)$$

$$H_R = -i\lambda \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i,\alpha}^\dagger (d \times \sigma)_{\alpha\beta}^z c_{j,\beta}, \quad (3)$$

$$H_z = -g/2 \sum_j c_{j,\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta} c_{j,\beta} \cdot B, \quad (4)$$

که $c_{j,\alpha}^\dagger$ عملگر فنا(خلق) الکترون در جایگاه j و با اسپین α (B) است. هامیلتونی کل سیستم همان‌طور که در رابطه (1) مشاهده می‌شود، شامل چندین جمله است که عبارت اول H_0 شامل عبارت‌های پتانسیل شیمیایی (μ)، شدت جهش الکترون میان همسایه‌های اول (t) و ابررسانایی القا شده موج S- تحت اثر مجاورت می‌باشد. عبارت دوم H_R ، هامیلتونی مربوط به جمله اسپین مدار راشبا است که در آن λ شدت جفت‌شدگی، d بردارهای همسایه اول و σ مشخصه ماتریس‌های پائولی است و آخرین عبارت، هامیلتونی زمین تحت اعمال میدان مغناطیسی B در راستای محور Z به سیستم می‌باشد، ثابت بوهر (μ_B) حذف شده و مقدار $g=2$ در نظر گرفته شده است.

توپولوژیکی می‌توان ناوردهای سیستم را تشخیص داد، در این طبقه بندی‌ها هر سیستمی توسط تعدادی از تقارن‌ها حفظ می‌شود که هر کدام دارای ناوردهایی در ابعاد مختلف هستند.

ساختار نواری دو ماده به لحاظ توپولوژیک زمانی با یکدیگر برابر هستند که به واسطه یک تغییر بی دررو، گاف در ساختار نواری بسته نشود. به واسطه مشخص شدن ناوردایی سیستم می‌توان تشخیص داد که ماده در کدام طبقه بندی بر اساس تقارن و ناوردایی آن‌ها قرار دارد. از ترکیب این دو مفهوم به یک تعریف جدید به نام ابررسانای توپولوژیک می‌رسیم. ابررسانای توپولوژیک گونه‌ای از مواد در فاز ابررسانا می‌باشند که دارای فاز توپولوژیک است [3]. در ادامه به بررسی این ویژگی‌ها می‌پردازیم.

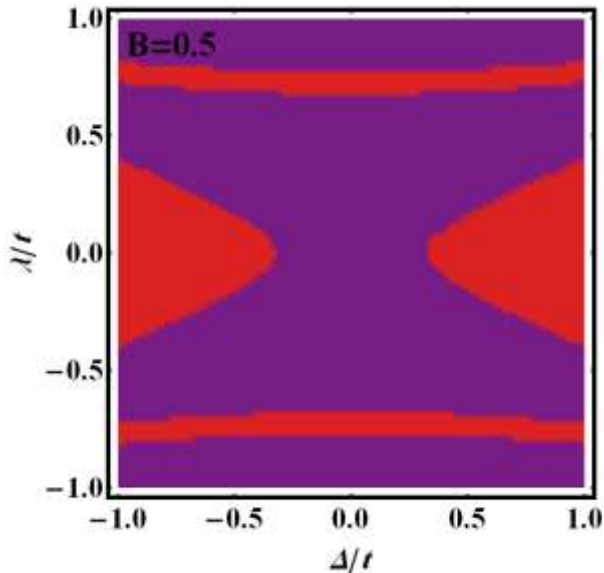
بنابر اصل مکانیک کوانتومی، هر مشاهده‌پذیر فیزیکی را باید توسط یک هامیلتونی هرمیتی در فضای هیلبرت توصیف کرد. با استفاده از هامیلتونی انتخابی در مدل هابارد که تعامل بین برهم‌کنش جنبشی و کولنی را نشان می‌دهد و به کمک تقریب میدان متوسط می‌توان یک هامیلتونی ابررسانای موج S- دو بعدی را در نظر گرفت، سپس با استفاده از تبدیل فوریه، هامیلتونی را در فضای وارون بازنویسی می‌کنیم [4].

در این کار با اضافه کردن جمله جفت شدگی اسپین مدار راشبا و میدان مغناطیسی زمین به هامیلتونی یاد شده، محاسبات را برای شبکه مثلثی انجام می‌دهیم. در این حالت چون درجه آزادی اسپین در نظر گرفته می‌شود، نتایجی که به دست می‌آید، متفاوت با زمانی است که جمله جفت شدگی اسپین مدار راشبا در سیستم حضور ندارد. سپس تغییرات ایجاد شده در سیستم را بررسی می‌کنیم و به مطالعه ویژگی‌های این شبکه، مانند تقارن‌ها و ناوردای توپولوژیکی می‌پردازیم. تحت تغییر مقادیر پارامترهای انرژی، حالت‌های لبه‌ای در انرژی‌های محدود در سیستم مشاهده می‌شود.

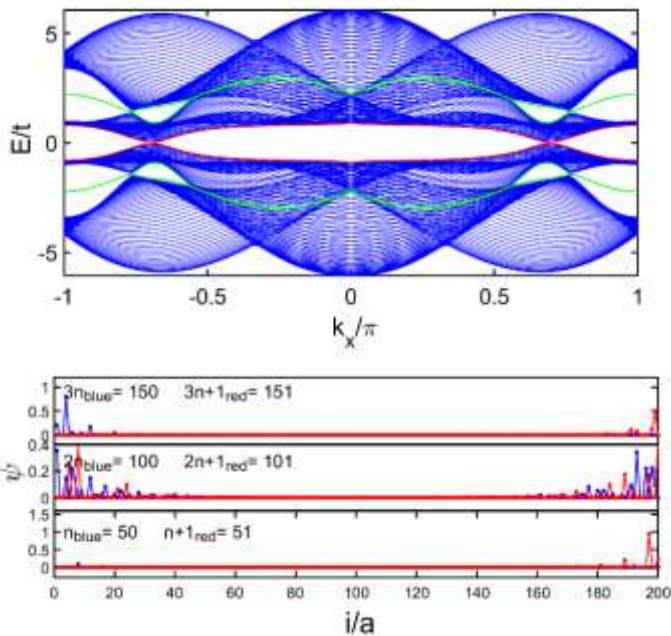
مدل

شبکه مورد نظر برای بررسی حالت‌های بیان شده به صورت یک نانو نواری از شبکه مثلثی می‌باشد که ساختار هندسی، بردارهای همسایه اول و ثابت شبکه در شکل ۱ نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل یک مشاهده می‌شود d_i بردار همسایه اول و d_i بردار شبکه مثلثی می‌باشد. در ادامه، نانو نواری از شبکه مثلثی

نواری سیستم را در پتانسیل شیمیایی صفر و تحت مقادیر $\lambda = 0.6, 0.9$ ، $\Delta = 0.9, 0.2$ و $B = 0.0, 0.5$ در نمودارهایی متفاوت، در تصاویر ۴ و ۵ رسم شده است.



شکل ۳: عدد چرن نوار دوم برحسب پارامتر نظم ابرسانایی و جفت‌شدگی اسپین مدار راشبا در حضور میدان زمین

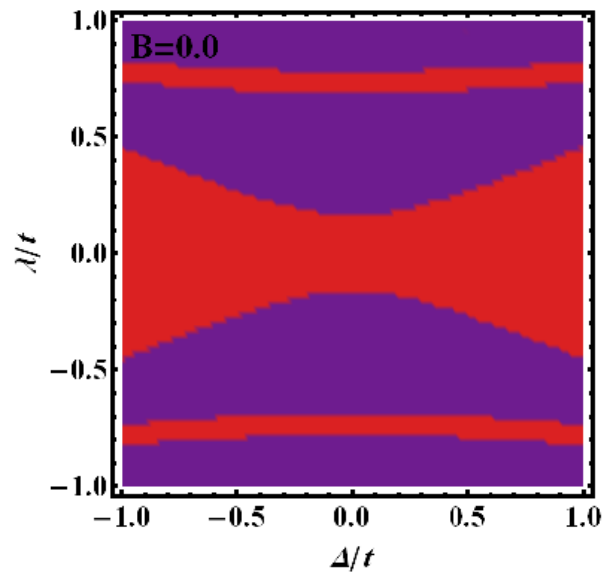


شکل ۴: طیف انرژی نانو نوار مثلثی برای حالتی که $N=50$ است. نوارهای سبز رنگ مشخصه ترازهای مرزی می‌باشد که در متن به آن اشاره شده است. تصاویر پایین حالت‌های لبه ای هر یک از آن ترازهای مشخص شده را نشان می‌دهد. مقادیر در نظر گرفته شده برای پارامترها در تصاویر به قرار زیر است.

$$\mu = 0, \Delta = 0.9, B = 0.5, \lambda = 0.6$$

با بررسی تقارن‌های سیستم مشاهده می‌کنیم که سیستم دارای تقارن‌های پاریته $(\sigma_x \otimes \sigma_z)$ ، وارون زمانی $(\sigma_0 \otimes \sigma_y)$ ، الکترون-حفره $(\sigma_x \otimes \sigma_y)$ و کایرال $(\sigma_x \otimes \sigma_0)$ است که در آن ماتریس یکانی ۲ در ۲ می‌باشد.

با توجه به تقارن‌هایی که وجود دارد، عدد چرن را می‌توان محاسبه کرد [5]. نتایج محاسبات مربوط به آن در نمودار فاز مربوط به نانو نوار شبکه مثلثی در مقدارهای مشخصی از پارامترها در شکل‌های ۲ و ۳ نشان داده شده است.



شکل ۲: عدد چرن نوار دوم برحسب پارامتر نظم ابرسانایی و جفت‌شدگی اسپین مدار راشبا در غیاب میدان زمین

در شکل ۲ نمودار فاز عدد چرن در غیاب میدان زمین بر حسب پارامتر نظم ابرسانایی و اسپین مدار راشبا برای نوار دوم رسم شده است. همانطور که مشاهده می‌کنید دو طیف رنگی مختلف در شکل وجود دارد که نواحی قرمز رنگ، مشخصه عدد چرن صفر و نواحی بنفش رنگ، نشان‌دهنده‌ی عدد چرن ۱ می‌باشند. این نمودار در غیاب و حضور میدان مغناطیسی زمین به ترتیب در شکل‌های ۲ و ۳ نمایش داده شده است. همانطور که در تصاویر مشاهده می‌شود در پارامتر نظم ابرسانایی و شدت جفت‌شدگی اسپین مدار کم، وجود عدد چرن غیر صفر حالت‌های توپولوژیک را تأیید می‌کند.

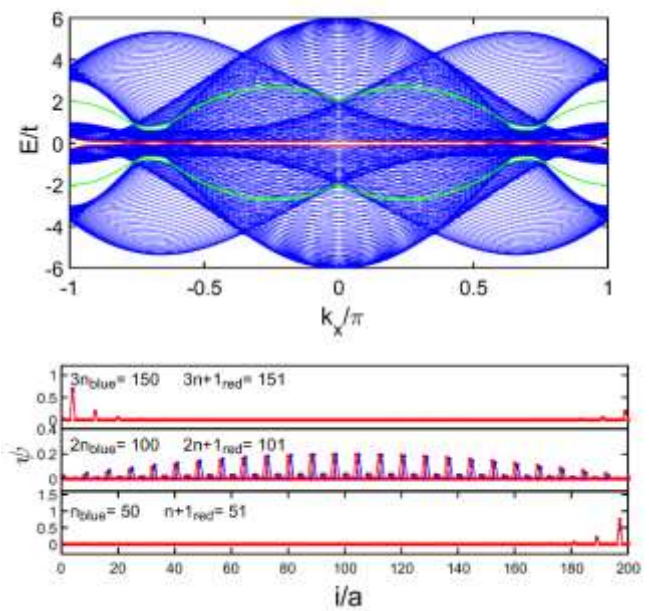
در حالتی که سلول‌های واحد در راستای X را دوره‌ای و تعداد سلول‌های واحد در راستای Y را محدود در نظر می‌گیریم ساختار

نتیجه گیری

با توجه به بررسی‌های انجام شده در نمودارهای مربوط به ویژه مقادیر و ویژه حالت‌ها می‌توان حالت‌های لبه‌ای را در انرژی‌های محدود مشاهده کرد. همانطور که در نمودارهای فاز در حضور و غیاب میدان زمین مشاهده کردیم، اعمال میدان مغناطیسی تأثیر به‌سزایی در گذار فاز توپولوژیکی سیستم دارد. از نتایج برجسته این کار، می‌توان به وجود حالت‌های لبه‌ای محدود در ساختار نواری نانو نوار شبکه مثلثی اشاره نمود که این حالت‌ها در تصاویر ۴ و ۵، نشان داده شده‌اند.

مرجع‌ها

- [1] M. Tinkham, "Introduction to Superconductivity", 2nd ed., Dover Books on Physics". ISBN: 0-486-43503-2(2004)
- [2] T. Yu and M. W. Wu, Phys. Rev. B **93**, 195308 (2016).
- [3] B. Zhou and Sh. Qi. Shen, Phys. Rev. B **84**, 054532(2011).
- [4] Sh. Qi. Shen, "Topological insulator", Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (2012).
- [5] T. Fukui, Y. Hatsugai and H. Suzuki, Physical Society of Japan, **74** (6), 1674–1677(2005).



شکل ۵: طیف انرژی نانو نوار مثلثی برای حالتی که $N=50$ است. نوارهای سبز رنگ مشخصه ترازهای مرزی می‌باشد که در متن به آن اشاره شده است. تصاویر پایین حالت‌های لبه‌ای هر یک از آن ترازهای مشخص شده را نشان می‌دهد. مقادیر در نظر گرفته شده برای پارامترها در تصاویر به قرار زیر است.

$$\mu = 0, \Delta = 0.9, B = 0.0, \lambda = 0.6$$

در شکل ۴ و ۵ نمودار طیف انرژی سیستم در پارامترهای متفاوت رسم شده است. در این شکل‌ها چهار نوار به رنگ‌های سبز و قرمز وجود دارد که هر کدام از این نوارها خود شامل n تراز است که به واسطه ترازهای این نوارها می‌توان گاف در نانو نوار را مشاهده کرد. به این صورت که بالاترین تراز نوار N و پایین‌ترین تراز نوار $2N$ و همچنین بالاترین تراز نوار $3N$ و پایین‌ترین تراز نوار $4N$ سبز رنگ می‌باشد و رنگ قرمز در نمودار طیف، نشان‌دهنده ترازهایی با کمترین مقدار انرژی است. در حضور میدان زمین در لبه‌ها شکافتگی در این ترازها وجود دارد و در بعضی از حالت‌ها نیز تبهگنی مشاهده می‌شود که نوارهای سبز یا قرمز در این صورت برهم منطبق هستند. در تصویر پایین شکل‌های ۴ و ۵ حالت‌های لبه‌ای برای هر یک از نوارها به ترتیب نوار سوم و دوم و اول از بالا به پایین رسم شده و حالت‌های لبه‌ای به ترتیب برای نوار دوم و سوم، مشخصه بسته شدن گاف در انرژی‌های محدود می‌باشد و حالت دوم مربوط به انرژی صفر است.

بررسی عددی ویژگی های انتقالی پیوندگاه جوزفسون پخشی ابرسانا-فرومغناطیس - ابرسانا

خالدی، پریناز^۱؛ عابدینی، یوسفعلی^{۲،۳}

^۱دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی ارومیه، جاده بند، ارومیه

^{۲،۳}گروه فیزیک دانشگاه زنجان و پژوهشکده تغییر اقلیم و گرمایش زمین، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

چکیده

در این مقاله ویژگی های انتقالی پیوندگاه جوزفسون پخشی ابرسانا-فرومغناطیس-ابرسانا را با دو نوع فرومغناطیس ناهمگن و به همراه فصل مشترک های فعال اسپین به طور عددی بررسی کردیم و نشان دادیم که تنها برای مورد فرومغناطیس ناهمگن جریان اسپینی وجود دارد که این جریان اسپینی پرش ناپیوسته ای در گذار $0-\pi$ جریان بحرانی بار از خود نشان می دهد. این تغییرات را برای دو نوع فرومغناطیس ناهمگن ساختار حوزه ای و ساختار مخروطی بررسی کردیم و به این نتیجه رسیدیم که برای مقادیر ویژه ای از d_F جریان بار بحرانی صفر می شود در حالی که جریان اسپین غیر صفر است و در نتیجه نشان دادیم که تنها یک جریان اسپینی خالص از دستگاه عبور خواهد کرد.

Numerical study of the transitional properties of superconducting superconducting superconductor superconductivity

Khaledi, Parinaz¹; Abedini, Yousefali^{2,3}

¹ Department of Physics, Urmia University of Technology

^{2,3} Physics Department, University of Zanjan and Center for Research in Climate Change and Global Warming (CRCC), Institute for Advanced Studies in Basic Sciences, Zanjan

Abstract

In this paper, we examine numerically the transitional characteristics of the superconducting superconducting superconducting superconductor superconductor junction with two heterogeneous ferromagnets with active spin interfaces, and we showed that there is only a spin-flow heterogeneous ferromagnet for this spin current A discontinuous jump in the passage of a critical flow of load. We examined these changes for two heterogeneous heterogeneous cone structure structures and cone structure, and we concluded that for special values of critical load flow zero is zero while the spin current is nonzero and therefore we showed that only one flow The pure spin will pass through the device.

مقدمه

به دلیل پدیده های جالبی که ساختار های ابرسانا - فرومغناطیس از خود نشان می دهند و همچنین کاربرد های بالقوه ی آن ها در زمینه های اسپینترونیک و مکانیک کوانتمی محاسبات کوانتمی آن ها به گونه ی وسیعی مورد توجه قرار گرفته اند [1-2]. وسیله های الکترونیکی معمولی بر اساس شارش الکترون ها در مدارها طراحی می شوند. در حالی که وسیله های اسپینترونیکی براساس جهت و تعداد اسپین های عبوری طراحی می شوند در اکثر وسایل اسپینترونیکی مثل پیوند های تونلی مغناطیسی، جریان قطبیده ی

ابرسانایی به حالتی از ماده اطلاق می شود که جریان الکتریسیته بدون مقاومت، از ماده عبور خواهد کرد ابرسانایی برای اولین بار در سال 1911 در جیوه توسط فیزیکدان هلندی، کمرلینگ اونز از دانشگاه لایدن مشاهده شد. او مشاهده نمود که با سرد کردن جیوه تا دمای هلیوم مایع 4K، مقاومت آن ناگهان حذف می شود. وی در سال 1913 جایزه فیزیک نوبل را بدلیل تحقیق در جهت مطالعه پدیده ی ابرسانایی از آن خود کرد.

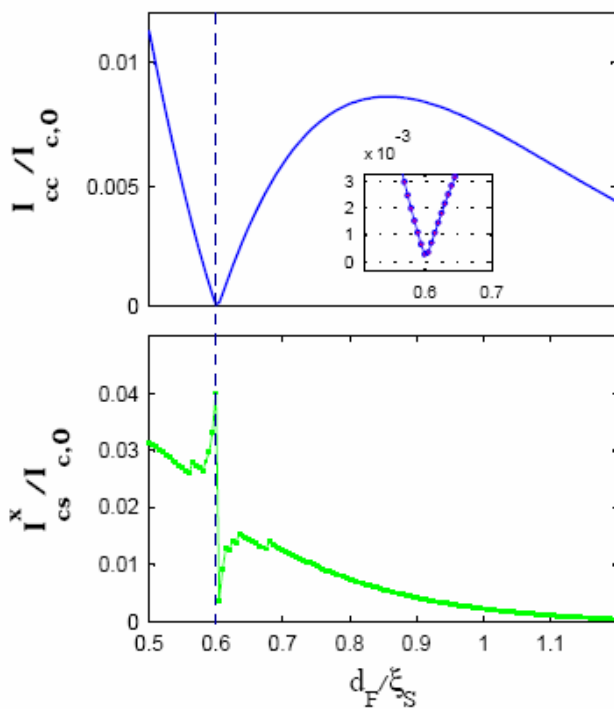
که در این جا D ضریب ثابت پخشی فرومغناطیس، h گشتاور مغناطیسی لایه ی فرومغناطیس، σ و ρ_3 به ترتیب ماتریس های 2×2 و 4×4 پائولی هستند.

ما در محاسبات خود از شرایط مرزی و متغیر های واقعی در مرزهای ابرسانا- فرومغناطیس استفاده می کنیم. شرایط مرزی در صورت زیر در نظر گرفته شده اند:

$$X = \frac{d_F}{2} \quad \text{و} \quad X = -\frac{d_F}{2} \quad (2)$$

$$2\xi d_F g \partial g = [g_{BCS}(\phi), g] + i \left(\frac{G_S}{G_T} \right) \times [diag(\tau_3, \tau_3), g]$$

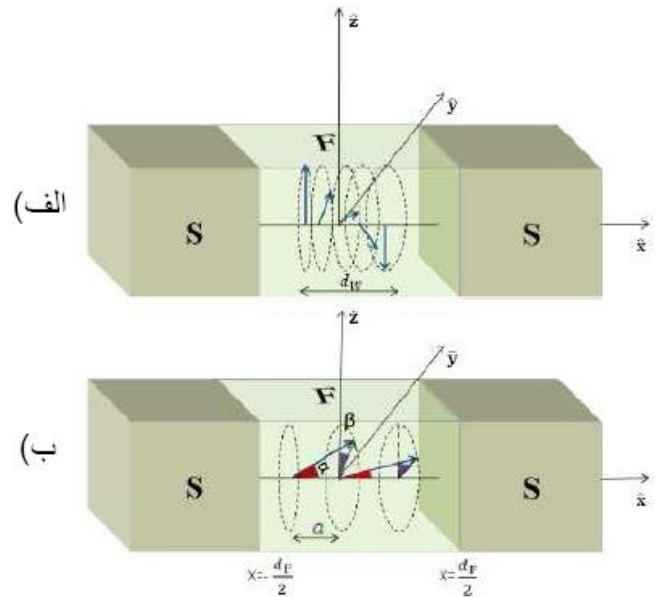
در این جا $\partial \equiv \frac{\partial}{\partial x}$ و نسبت مقاومت بین ناحیه ی سد و مقاومت ناحیه ی فرومغناطیس را به صورت $\xi = \frac{R_B}{R_F}$ تعریف می کنیم.



شکل ۲. تغییرات جریان بهنجار شده بحرانی بار و جریان اسپینی مربوط به آن بر حسب افزایش طول بهنجار شده لایه ξ قطبش فرومغناطیس با ساختار حوزه های بلاخ.

رسانش سد به وسیله ی G_S داده می شود، در حالی که انتقال فاز فصل مشترکی وابسته ی اسپینی را نشان می دهد که در طرف فرومغناطیس رخ می دهد. در محاسبات خود از مقادیر

اسپینی موقعی رخ می دهد که ناتوازی ای بین حاملین اسپین بالا و اسپین پایین به وجود بیاید این ناتوازی با به کار گیری ماده ی فرومغناطیسی یا اعمال میدان مغناطیسی می تواند تولید شود. امکان وجود حالت در دستگاههای ابرسانا- فرومغناطیس- ابرسانا - به طور نظری پیشگویی شد [3] و در نزدیکی چنین نقطه ی گذاری انرژی حالت پایه ی پیوند گاه دو کمینه بر حسب ϕ در $\phi = 0$ و $\phi = \pi$ دارد.

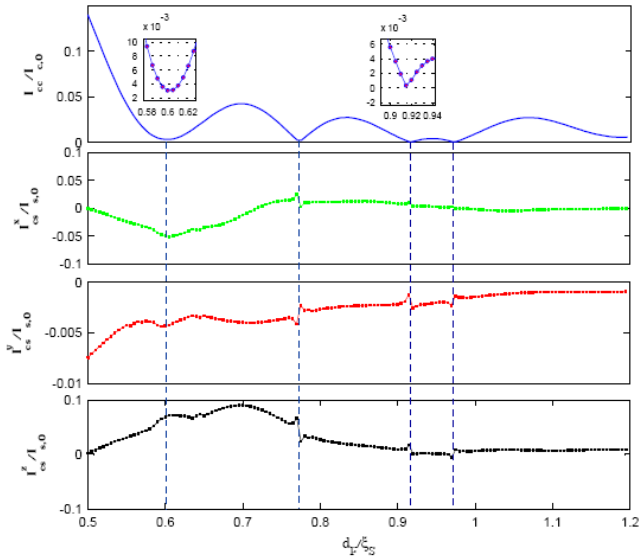


شکل ۱. الف) پیوندگاه ابرسانا - فرومغناطیس - ابرسانا برای فرومغناطیسی با ساختار حوزه ای بلاخ و ب) ساختار مخروطی . بردار آبی رنگ نشان دهنده گشتاور مغناطیسی لایه فرومغناطیس است.

برای بررسی رفتار پیوند جوزفسون فرومغناطیسی پخشی ابرسانا - فرومغناطیس- ابرسانا از حل عددی کامل معادلات شبه کلاسیکی ابرسانایی در حد Dirty [4] استفاده می کنیم، که دسترسی به محدوده ی اثر مجاورت کامل را برای ما فراهم می کند. همچنین انتقال های فاز وابسته ی اسپینی را در فصل مشترک ها به صورت میکروسکوپیکی در محاسبات خود در نظر گرفتیم به منظور پایداری بیش تر در محاسبات عددی، از پارامتری کردن ریکاتی برای پارامتری کردن تابع گرین استفاده می کنیم. در حد پخشی معادله ی تابع گرین به صورت زیر خواهد بود:

$$D\partial(gog) + i \left[E \rho_3 + diag[h, \sigma, (h, \sigma)^T], g \right] = 0 \quad (1)$$

می شود برای اینگونه از فرومغناطیس های ناهمگن تنها یک مولفه ی قطبش جریان اسپینی از دستگاه عبور می کند. چنانچه دیده می شود مولفه ی X قطبش اسپینی در نقطه ی گذار $0-\pi$ جریان بحرانی بار برحسب پهنای لایه ی فرومغناطیس تغییرات سریع و ناگهانی را از خود نشان می دهد.



شکل ۳. تغییرات جریان بهنجار شده بحرانی بار و جریان اسپین مربوط به آن بر حسب افزایش طول بهنجار z - و y و x قطبشهای شده لایه فرومغناطیس با ساختار مخروطی. هر سه مولفه قطبش اسپینی در تمام محدوده d_F بزرگی قابل ملاحظه‌ای دارند

در آخر مورد فرومغناطیس ناهمگن با ساختار مخروطی را بررسی می کنیم برای سادگی فرض می کنیم که در مرزها انتقال فاز وابسته ی اسپینی، برابر صفر باشد. فاصله ی بین صفحات اتمی را $a = 0.02 d_F$ و $\alpha = 4\pi/9$ و زاویه چرخش $\beta = \pi/6$ برای لایه ی بین اتمی در نظر می گیریم این مقادیر براساس مقادیر واقعی مربوط به H_0 انتخاب شده اند نتایج بررسی های ما برای چگونگی وابستگی جریان بحرانی بار و جریان اسپینی مربوطه به پهنای لایه ی فرومغناطیس در شکل 3 نشان داده شده اند جنبه ی جدیدی که برای جریان بحرانی بار دیده می شود نوسانات سریع $0-\pi$ آن به افزایش طول لایه ی فرومغناطیس است.

نزدیک به مقادیر واقعی یعنی مقادیر میکروسکوپیکی برای G_T و G_S استفاده میکنیم. برای ساختار حوزه ای فرض میکنیم که پس زمینه ی مغناطیسی در مرکز لایه ی فرومغناطیس قرار داشته باشد، در این صورت برای ساختار بلاخ خواهیم داشت: $\vec{h} = h(\cos\theta y + \sin\theta z)$ که ساختار آن در شکل 1 نشان داده

شده است. $\theta = -2 \text{Arc tan} \left(\frac{x}{d_w} \right)$ و d_w پهنای دیواره ی دامنه ای می باشد. [5]

برای مورد مخروطی میتوان ساختار شکل 1 را توسط فرمول

$$\vec{h} = h \left(\cos\alpha x + \sin\alpha \left[\sin\left(\frac{\beta x}{a}\right) y + \cos\left(\frac{\beta x}{a}\right) z \right] \right)$$

توصیف کرد که α زاویه راس و β زاویه ی چرخش گشتاور مغناطیسی و a زاویه ی بین لایه های اتمی را نشان می دهد [6]

در این مقاله چگونگی وابسته بودن جریان بحرانی بار و جریان اسپین وابسته به آن را بر حسب تغییر طول لایه ی فرومغناطیس d_F برای فرومغناطیس ناهمگن و همچنین چگونگی وابسته بودن گرمای ویژه ی الکترونی پیوند گاه به اختلاف فاز پایانه های ابررسانا را بررسی میکنیم. دما و میدان تبدلی را در $T = 0.2 T_c$ و $\frac{h}{\Delta_0} = 15 \text{meV}$ در سرتاسر محاسبات ثابت فرض

میکنیم. و از مقادیر میکروسکوپیکی برای انتقال فاز وابسته ی اسپینی در مرزها استفاده می کنیم. یافته های ما نشان می دهند که برای تمام شدت های میدان تبدلی و انتقال فاز وابسته ی اسپینی، در مورد فرومغناطیس یکنواخت، جریان اسپینی وجود ندارد. برای مورد فرومغناطیس ناهمگن با ساختار حوزه ای فرض میکنیم که

طول این ساختار حوزه ای d_w برابر $\frac{d_w}{d_F} = 0.5$ و در مرکز

لایه ی فرومغناطیس $x=0$ باشد. شکل 2 تغییرات جریان بحرانی بار و جریان اسپینی بهنجار شده ی وابسته به آن برحسب تغییرات طول فرومغناطیس ناهمگن با ساختار حوزه ای را نشان می دهد.

برای بررسی ساختار حوزه ای تنها لازم است که مولفه ی y یا مولفه ی z در فرومغناطیس جابجا شود. همانگونه که از شکل 2 دیده

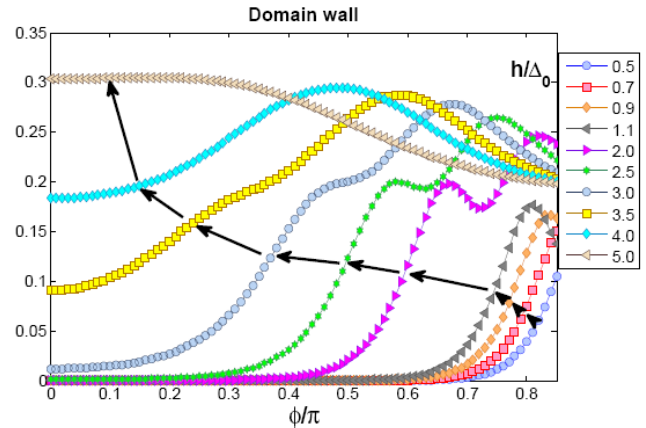
مورد بررسی قرار دادیم. یافته ها نشان می دهند که جریان اسپینی تنها در مورد فرومغناطیس ناهمگن از دستگاه ابرسانا - فرومغناطیس - ابرسانا با ابرساناهای یکتایی عبور خواهد کرد. در مورد فرومغناطیس با ساختار حوزه ای یافته های ما نشان می دهند که تنها یک مولفه از قطبش اسپینی از دستگاه عبور خواهد کرد در حالی که برای فرومغناطیس با ساختار مخروطی هر سه مولفه قطبش اسپینی از دستگاه عبور خواهند کرد و همچنین نشان دادیم که ظرفیت گرمای ویژه آن با تغییر اختلاف فاز بین دو ابرسانا می تواند افزایش بسیار زیادی از خود نشان دهد.

نتیجه گیری

برای مورد فرومغناطیس ناهمگن جریان اسپینی وجود دارد که این جریان اسپینی پرش ناپیوسته ای در گذار π - جریان بحرانی بار از خود نشان می دهد. برای مقادیر ویژه ای از d_F جریان بار بحرانی صفر می شود در حالی که جریان اسپین غیر صفر است و تنها یک جریان اسپینی خالص از دستگاه عبور خواهد کرد.

مرجع ها

- [1] Wolf, D D Awschalom, R A Buhrman, J M Daughton, S von Molnar, M L Roukes, A Y Chtchelkanova, D M Treger, "Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future", *Science* **294** (2001) 1488.
- [2]. I Zutic, J Fabian, and S D Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76** (2004) 323.
- [3]. A I Buzdin, L N Bulaevskii, and S V Panyukov, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **35** (1982) 147. *JETP*
- [4] K Usadel, *Phys. Rev. Lett.* **25** (1970) 507.
- [5] J Linder, T Yokoyama, and A Sudbø, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 054523
- [6] Alexander Konstandin, Juha Kopu, and Matthias Eschrig, *Phys. Rev. B* **72** (2005) 140501.



شکل ۴. ظرفیت گرمای ویژه الکترونی بهنجار شده بر حسب اختلاف فاز بین دو ابرسانای یکتایی در پیوندگاه جوزفسون ابرسانا-فرومغناطیس-ابرسانا در حد پخشی برای لایه فرومغناطیسی با ساختار حوزه ای بلاخ. بردارها، افزایش میدان تبدالی را دنبال میکنند.

یافته های ما برای این دو نوع لایه ناهمگن فرومغناطیس نشان می دهد که چگونگی وابسته بودن جریان بحرانی بار به طول لایه فرومغناطیس، بگونه ای شدید به ساختار فرومغناطیس ناهمگن بستگی دارد.

همان گونه که از شکل ۳ می تواند دیده شود، نمودار جریان بار بحرانی دارای پنج کمینه می باشد که تنها سه تای آن ها نقطه ی گذار π هستند.

شکل ۴ افزایش بسیار زیاد ظرفیت گرمای ویژه الکترونی بهنجار شده را با تغییر اختلاف فاز بین دو ابرسانا از ۰ تا نزدیکی π برای یک پیوندگاه جوزفسون پخشی ابرسانا - فرومغناطیس - ابرسانا نمایش میدهد. از شکل ۴ دیده میشود که ظرفیت گرمایی، برای میدان های تبدالی تا $\frac{h}{\Delta_0} \cong 3$ افزایش بسیار زیادی را از

خود نشان می دهد و برای مقادیر بزرگتر میدان تبدالی، ظرفیت گرمایی با افزایش اختلاف فاز بین دو ابرسانا به صورت یکنوا کاهش پیدا می کند. منشأ این افزایش بسیار زیاد را می توان به گونه ای روشن با استفاده از چگالی حالت ها توضیح داد. در پایان، ما در این مقاله، انتقال بار و انتقال اسپین را در پیوندگاه های نانو مقیاس جوزفسون ابرسانا - فرومغناطیس - ابرسانا با دو فرومغناطیس ناهمگن، به گونه ای ویژه ساختار حوزه ای (بلاخ) و ساختار مخروطی، همراه با انتقال فاز وابسته اسپینی در مرزها را

بررسی و مقایسه ابررسانای Y123 و Y358 تحت فشار هیدرواستاتیک

خرمشاهی، محیا^۱؛ محمدی زاده، محمدرضا^۱

^۱ازمایشگاه تحقیقاتی ابررسانایی، دانشکده فیزیک دانشگاه تهران، انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران

چکیده

بعد از ساخت ۲ نمونه ابررسانای $YBa_2Cu_3O_7$ و $Y_3Ba_5Cu_8O_{19}$ با روش حالت جامد (تحت شرایط یکسان)، رفتار دمای گذار و نمودار مقاومت بر حسب دمای آن‌ها تحت فشار هیدرواستاتیکی بررسی شد. آهنگ دمای گذار نسبت به فشار برای دو نمونه، به ترتیب 1.1 K/GPa و 1.4 K/GPa به دست آمد که با توجه به شباهت در ساختار این دو ترکیب، تفاوت این مقادیر نشان از تفاوت مقدار انتقال بار در این دو ترکیب است.

Analysis and Comparison of Superconductor Bulks Y123 and Y358 under hydrostatic pressure

Khoramshahi, Mahya¹; Mohammadizadeh, MohammadReza¹

¹Superconductivity Research Laboratory (SLR), Department of Physics, University of Tehran, Tehran

Abstract

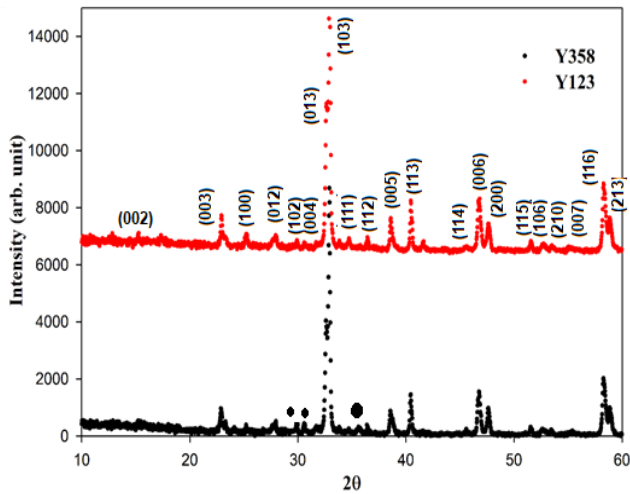
After fabrication of 2 superconducting compounds, $YBa_2Cu_3O_7$ and $Y_3Ba_5Cu_8O_{19}$, using solid state method (under similar conditions), the behavior of transition temperature and resistance under hydrostatic pressure were analyzed. Variation of transition temperature respect to pressure was derived as 1.1 and 1.4 K/GPa respectively. Regarding the similarity of the suggested structure in two samples, the small difference of these values is corresponding to different amounts of charge transport in two samples.

مقدمه

است [۳]. گزارش‌های بسیاری برای معرفی ویژگی‌هایی از جمله ساختار بلوری و خواص تراپدی برای ترکیب Y358 و به ویژه Y123 ارائه شده است، در کنار این مطالعات، رفتار دمای گذار و مقاومت نمونه‌های ترکیب Y123 تحت فشار بررسی و توسط گروه‌های مختلف گزارش شده است. این در حالی است که هیچ آزمایش تحت فشاری برای نمونه Y358 صورت نگرفته است. چنین اطلاعاتی ما را برآن داشت که با توجه به اهمیت مطالعه اثر استوکیومتری روی ویژگی‌های ابررسانایی، دو نمونه کپه این ترکیبات را در شرایط یکسانی ساخته و رفتار نمودار مقاومت بر حسب دمای هر دو را تحت فشار تا 0.94 GPa بررسی کرده و مقایسه کنیم.

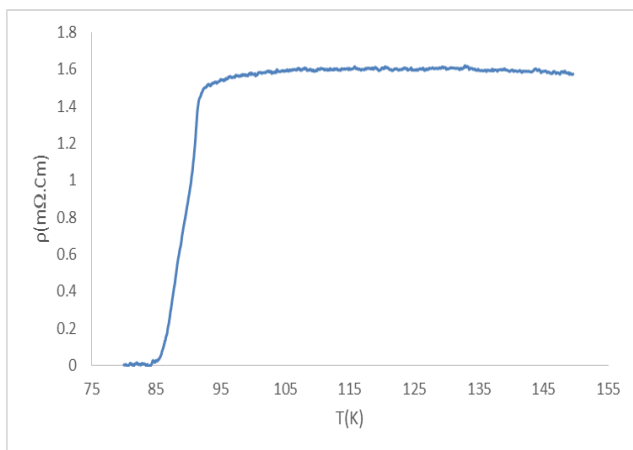
با توجه به نبود یک نظریه دقیق برای ابررساناهای دمای بالای کوپراتی [۱]، مطالعه‌ی ویژگی‌های فیزیکی این مواد، چه در حالت ابررسانایی و چه در حالت هنجار، با استفاده از آزمایش‌های تجربی بسیار با اهمیت است. در میان این روش‌های تجربی، اعمال فشار هیدرواستاتیک، بسیار پرکاربرد است [۲]، زیرا علاوه بر این که اطلاعات مفیدی جهت بررسی درستی مدل‌های ابررسانایی زیادی که ارائه شده است، می‌دهد، روشی برای افزایش دمای گذار این ترکیبات نیز هست. اعمال فشار موجب تغییراتی در چگالی حامل‌های حفره، فضاها داخل صفحه‌ای و بین صفحه‌ای و چگالی الکترون‌ها در سطح فرمی می‌شود که نتیجه کلی آن افزایش دمای گذار با اعمال فشار برای تمام ابررساناهای دمای بالای کوپراتی

جزئیات تجربی



شکل ۱: طیف XRD نمونه Y123 و Y358

همانطور که در شکل ۲ و ۳ مشاهده می‌کنیم، دمای گذار برای هر دو نمونه در بازه ۹۰ تا ۹۵ کلوین قرار دارد. در گزارش‌های منتشر شده برای نمونه Y358، دماهای گذار در محدوده ۸۰ تا ۱۲۵ کلوین وجود دارند. اکثر این گزارش‌ها (شامل نمونه تک کریستال) در بازه ۹۰ تا ۹۵ قرار دارند که با دمای گذار بدست آمده توسط ما هم‌خوانی دارد.



شکل ۲: نمودار مقاومت ویژه بر حسب دما برای نمونه Y123

دو نمونه کپه‌ای Y123 و Y358 با قطر یک سانتی‌متر، به روش متعارف واکنش حالت جامد ساخته شد. پودرهای BaCO_3 ، CuO و Y_2O_3 با درجه خلوص ۹۹/۹ درصد با نسبت استوکیومتری مناسب ترکیب و آسیاب شدند. عمل کلسینه ۲ بار و در دمای 850°C به مدت ۲۴ ساعت انجام گرفت. پودر سیاه حاصل، قرص شده و کلوخه‌سازی در حضور اکسیژن در دمای 930°C به مدت ۲۴ ساعت انجام شد.

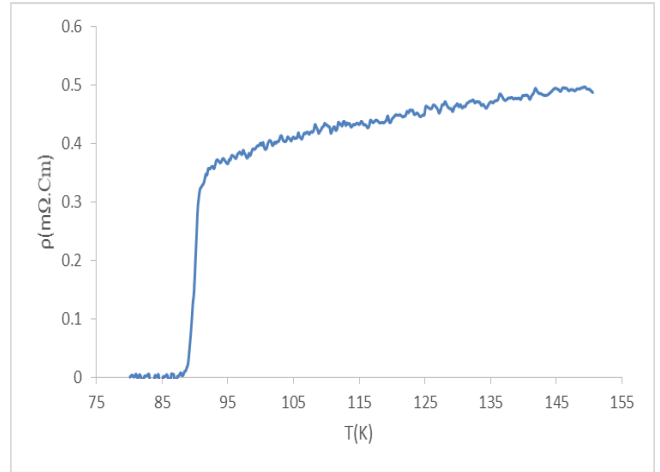
برای ایجاد اتصالات الکتریکی به روش استاندارد چهار نقطه‌ای، از لایه‌نشانی تیتانیوم و طلا روی محل اتصال نمونه به سیم مسی و از لحیم ایندیوم برای اتصال سیم‌های مسی استفاده شد. مقاومت اتصالات، کمتر از ۱ اهم بود و اندازه‌گیری مقاومت نمونه‌ها در جریان ثابت انجام گرفت. در تمامی تست‌های تحت فشار بازه دمایی بین ۸۰ تا ۱۵۰ کلوین قرار داشت و هنگام گرم شدن نمونه اندازه‌گیری انجام می‌شد. جهت اندازه‌گیری دما از حسگر دمای Pt1000 با دقت $\pm 0.1 \text{ mK}$ بهره گرفتیم.

نمونه در محفظه تفلونی و غوطه‌ور در روغن سیلیکون به عنوان مایع واسط فشار، قرار داشت و اعمال فشار توسط سلول قفل فشار سیلندر پیستونی از جنس مس-بریلیوم صورت گرفت. کالیبراسیون دستگاه با روشی که در مرجع [۴] ارائه شده است، انجام گرفت.

نتایج و بحث

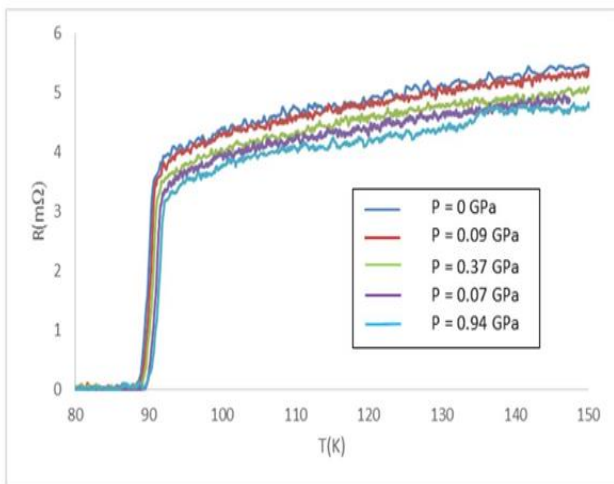
شکل ۱ طیف XRD هر دو نمونه را نشان می‌دهد که اکثر قله‌های طیف استاندارد Y123 در طیف به‌دست آمده از Y358 دیده می‌شود. قله‌های مشخص شده در طیف XRD برای Y358 مربوط به ناخالصی CuO و Y211 است. اختلاف دو طیف تنها در چند قله با ارتفاع اندک است که تنها در طیف Y358 مشاهده می‌شود. بنابراین تشخیص تمایز این نمونه‌ها از هم با استفاده از طیف XRD بسیار دشوار است بنابراین تصمیم گرفتیم به مقایسه این دو با آزمایش‌های تحت فشار بپردازیم.

برای ترکیب $1/1$ GPa/K و $4/1$ GPa/K به دست آمد که برای ترکیب Y123 در توافق خوبی با گزارش‌های قبلی است [۶]. از روش [۷] برای پیدا کردن T_c استفاده شد. همانطور که در شکل‌ها دیده می‌شود، تقعر در نمودار دمای گذار بر حسب فشار اعمالی برای ترکیب Y123 رو به پایین به دست آمده و در ترکیب Y358، این تقعر به سمت بالا است. همچنین نزدیک‌تر بودن نقاط تجربی به خط برازش، در نمودار مربوط به نمونه Y358، به خوبی مشهود است.

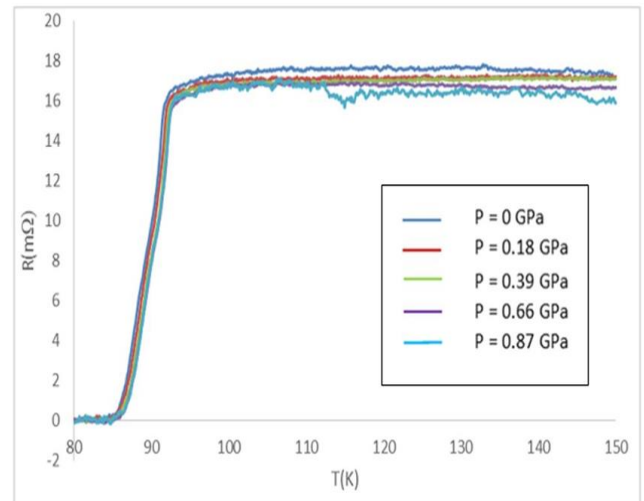


شکل ۳: نمودار مقاومت ویژه بر حسب دما برای نمونه Y358

همچنین شکل ۴ و ۵ نمودار مقاومت بر حسب دمای هر دو نمونه را تحت فشارهای مختلف نشان می‌دهد. در هر دو نمونه رفتار مقاومت در فاز هنجار، فلزگونه است و با افزایش فشار کاهش پیدا می‌کند. این افزایش در رسانندگی، ناشی از افزایش چگالی بار با اعمال فشار است [۵].

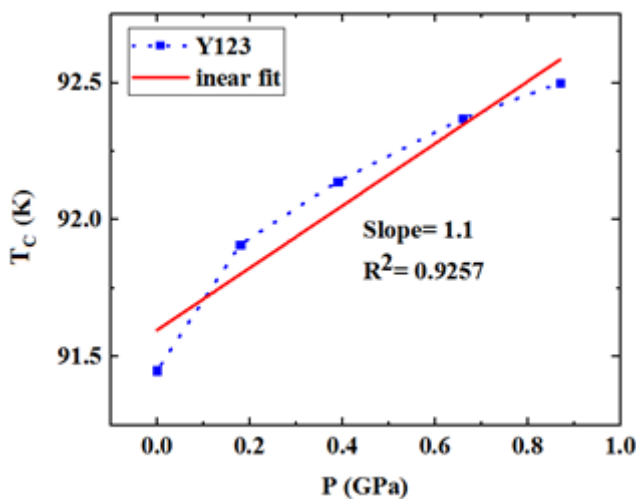


شکل ۵: نمودار مقاومت بر حسب دما برای نمونه Y358



شکل ۴: نمودار مقاومت بر حسب دما برای نمونه Y123

اعمال فشار همراه با کاهش مقاومت، موجب افزایش T_c نیز می‌شود، همان‌طور که در شکل ۶ و ۷ می‌بینیم، آهنگ افزایش دمای گذار نسبت به اعمال فشار برای نمونه Y123 و Y358 به ترتیب



شکل ۶: منحنی تغییرات دمای گذار بر حسب فشار برای نمونه Y123 (نقطه-چین جهت راهنمایی چشم است)

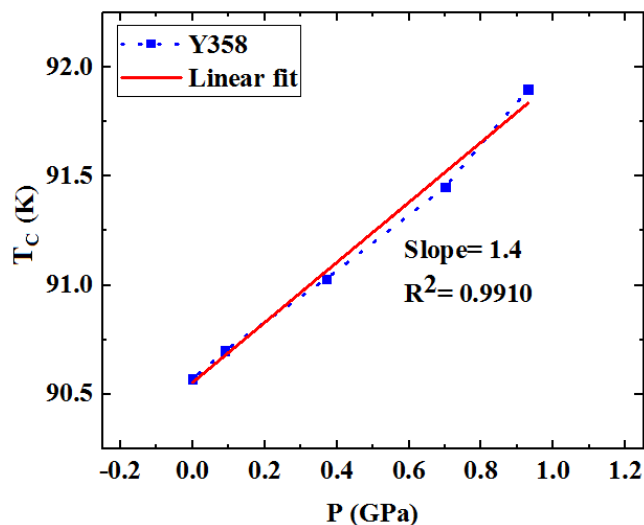
زنجیره‌های CuO و صفحه‌های CuO₂ تراکم بیشتری نسبت به ترکیب Y123 دارند، که علت می‌تواند تاثیر جزئی بیشتر اعمال فشار بر دمای گذار ترکیب Y358 معرفی شود. نتیجه حاصل با نتایج قبلی مبنی بر تاثیر افزایش تراکم حفره‌ها [۹] بر افزایش دمای گذار، هم خوانی دارد و تایید دیگری بر درستی این فرض محسوب می‌شود.

نتیجه‌گیری

۲ نمونه کپه Y123 و Y358، به روش حالت جامد ساخته شد. با اعمال فشارهای مختلف، نمودار مقاومت بر حسب دمای آن‌ها رسم شد. براساس مدل انتقال بار، با اعمال فشار، دمای گذار هر دو نمونه افزایش پیدا کرد. تاثیر جزئی اعمال فشار بر افزایش دمای گذار به تراکم بیشتر تعداد زنجیره‌های CuO و تعداد صفحات CuO₂ در ترکیب Y358 در مقایسه Y123 نسبت داده می‌شود. در آخر می‌توان نتیجه گرفت به علت تفاوت اندک در ساختار ۲ ترکیب، اعمال فشار برای بهبود خواص ابررسانایی برای ترکیب Y358 موثرتر از ترکیب Y123 است.

مرجع‌ها

- [۱] J. Ashkenazi, J. Supercond. Nov. Magnet. **24**(4) (2011) 1281-130 P.
 [۲] J. S. Schilling and S. Klotz, in Physical Properties of High Temperature Superconductors, edited by D. M. Ginsberg (World Scientific Singapore, 1992), Vol. 3, p. 59.
 [۳] H. Khosroabadi, M. R. Mohammadzadeh, and M. Akhavan, Physica C **370**, 85 (2002)
 [۴] A. Eiling and J. S. Schilling, J. Phys. F **11**, 623 ~1981!
 [۵] J. Bardeen, Phys. usp. **25** (1) (1941)19. (translation from J. Appl. Phys. **11** (1940)88).
 [۶] R. V. Vovk, et al., Journal of Alloys and Compounds. **453** (2008) 69-74
 [۷] H. Yoshida, H. Morita, K. Noto, T. Kaneko, and H. Fujimori, Jpn. J. Appl. Phys. **26**, L867 (1987).
 [۸] H. Khosroabadi., M. Rasti, M. Akhavan., Structural analysis of Y3Ba5Cu8O19-x high-Tc superconductor by ab initio density functional theory, Physica C: "Superconductivity" 2014, Vol. 497, s. 84-88.
 [۹] J. Neumeier, H. Zimmermann, Pressure dependence of the superconducting transition temperature of YBa2Cu3O7 as a function of carrier concentration: a test for a simple charge-transfer model, Phys. Rev. B **47** (1993) 8385.



شکل ۷: منحنی تغییرات دمای گذار بر حسب فشار برای نمونه Y123 (نقطه-چین جهت راهنمایی چشم است)

اعمال فشار هیدروستاتیک بر نمونه Y123، موجب تغییر در ساختار شبکه این ترکیب می‌شود. کاهش طول پیوندها در جهت محور c برای Cu(1) - O(1) و Cu(2) - O(1)، از جمله این تغییرات به حساب می‌آید [۳]. کم شدن طول این پیوندها، به نزدیک شدن صفحه CuO₂ و همچنین زنجیر CuO به صفحه BaO منجر می‌شود که نتیجه آن کم تر شدن فاصله بین صفحه CuO₂ و زنجیر CuO است.

در نتیجه اعمال فشار با کاهش در پارامترهای شبکه موجب افزایش در انتقال حفره از زنجیر CuO به صفحه CuO₂ و افزایش تراکم حفره می‌شود. افزایش چگالی حفره‌ها در صفحه CuO₂ برای هر دو ترکیب Y123 و Y358 رخ می‌دهد که این امر به افزایش دمای گذار و مثبت شدن مقدار (dT/dP) در اثر اعمال فشار می‌انجامد.

هر دو ساختار متقارن و نامتقارن معرفی شده برای نمونه Y358 [۸] با نتایج ما سازگاری دارد، ولی از آنجا که هم دمای گذار و هم نتایج آنالیز XRD به دست آمده به نمونه Y123 نزدیک است و ساختار متقارن معرفی شده به ساختار نمونه Y123 نزدیک‌تر است، می‌توان گفت، ارجحیت با ساختار متقارن است. علی‌رغم شباهت بسیار در ساختار دو ترکیب، در شبکه ساختار Y358

هدایت الکتریکی اضافی ناشی از افت‌وخیزهای ابررسانایی در MgB_2 آلاینده به مالیک اسید

خسروی، صبا^۱؛ قربانی، شهبان‌رضا^{۱*}؛ کیا فیروزکوهی، نرجس سادات^۱؛ عربی، هادی^۲

^۱آزمایشگاه مواد و الکتروسرامیک، گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم پایه، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد.

^۲آزمایشگاه انرژی‌های تجدید پذیر، مغناطیس و نانوتکنولوژی، گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم پایه، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد.

چکیده

افت‌وخیزهای ابررسانایی منبسط‌شده برای مالیک اسید برای میدان‌های مغناطیسی مختلف بررسی شد. دمای بحرانی از تغییرات مقاومت ویژه‌ی الکتریکی بر حسب دما و بعد رسانندگی اضافی از روی اختلاف مقدار مقاومت ویژه بعد از دمای گذار با مقدار آن در حالت عادی، برای این نمونه مورد بررسی قرار گرفت. همچنین دمای گذار از سه به یک بعد T_{3D-1D} و طول هم‌دوسی در جهت محور c ، $\xi(0)$ ، در میدان‌های مغناطیسی مختلف، چگالی جریان بحرانی در میدان مغناطیسی صفر محاسبه شد. این محاسبات نشان می‌دهد، که دمای گذار و طول هم‌دوسی با افزایش میدان مغناطیسی کاهش می‌یابند.

Fluctuation Excess conductivity in malic acid-doped MgB_2

Khosravi, Saba¹; Ghorbani, Shaban Reza^{1*}; KiaFiroozkoochi, Narjess Sadat¹; Arabi, Hadi²

¹Materials and Electroceramic Lab, Department of Physics, Faculty of Science, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad

²Renewable, Magnetic, and Nanotechnology Lab, Department of Physics, Faculty of Science, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad

Abstract

The Fluctuation excess conductivity of MgB_2 superconductor doped with malic acid has been investigated in different magnetic fields. The critical temperature and the conductivity dimension has been obtained from temperature dependence of electrical resistivity and the difference between the resistivity in superconducting and normal state, respectively. The temperature of transition from three to one dimension T_{3D-1D} and the coherence length in the c - direction $\xi(0)$ has been determined as a function of magnetic fields. Result shows that both the T_{3D-1D} and the $\xi(0)$ decrease by the field increasing. The critical current has been calculated in zero field.

PACS No. 74

مقدمه

همچنین نشان دادند که این افت‌وخیزها علاوه بر تاثیری که روی خواص ترمودینامیکی دارند بر خواص دینامیکی هم موثرند. معمولاً سیستم‌های فیزیکی در دمای معین دارای افت‌وخیزهایی هستند که می‌توانند سیستم را از حالت تعادل خارج سازند. اما این حالت نامتعادل نمی‌تواند به همان حال باقی بماند، بلکه فرآیندهایی به‌طور متوالی رخ می‌دهند که می‌توانند منجر به برگشت سیستم به حالت تعادل شوند. بنابراین می‌توان گفت که

اولین آزمایشی که اثر افت‌وخیزهای ابررسانایی بر روی رسانش را نشان داد، در سال 1967 توسط گلاور بر روی فیلم‌های بیسموت صورت گرفت [1]. در سال 1986 در مقاله‌هایی که توسط آسلامازو-لارکین و ماکی و کمی بعد تامسون ارائه شد. مقدمات نظری میکروسکوپی افت و خیزها در فاز عادی یک ابررسانا در مجاورت دمای بحرانی فرمول بندی شد [2-4]. آنها

آسلامازو-لارکین رابطه‌ای دیگر برای رسانش الکتریکی اضافی، مانند رابطه‌ی 2، ارائه دادند که در ناحیه میدان میانگین (MFR) یعنی جایی که افت‌وخیزها کوچکند معتبر می‌باشد [7،6].

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_{300}} = A\varepsilon^2 \quad (2)$$

که در رابطه فوق $\varepsilon = (T - T_{mf})/T_{mf}$ می‌باشد. T_{mf} دمای میدان میانگین است که از روی قله منحنی dp/dT برحسب T به دست می‌آید. A ضریبی مستقل از دماست که برای سه ناحیه‌ی مختلف ابرسانایی یعنی سه بعدی، دوبعدی و یک بعدی به صورت روابط 3-5 می‌باشد [8-10]. λ پارامتری است که به ترابرد الکتریکی در راستاهای مختلف بستگی دارد. وقتی ترابرد در سه بعد انجام گیرد، مقدار آن برابر با $(-0/5)$ ، در دو بعد برابر با (-1) و برای ترابرد یک بعدی $(-1/5)$ می‌باشد [11].

$$A(3D) = \frac{e^2}{32\pi^2 \xi(0) \sigma_{300}} \quad (3)$$

$$A(2D) = \frac{e^2}{16\pi^2 \xi(0) \sigma_{300}} \quad (4)$$

$$A(1D) = \frac{e^2 \xi(0)}{32\pi^2 \xi(0) \sigma_{300}} \quad (5)$$

که در آن‌ها $\xi(0)$ طول همدوسی در جهت محور c در دمای صفر، d ضخامت موثر لایه در سیستم دو بعدی، S مساحت سطح مقطع سیم در سیستم یک بعدی و σ_{300} رسانایی الکتریکی در دمای 300K می‌باشد.

چگالی جریان بحرانی، J_c ، طبق رابطه 6، محاسبه می‌شود: [12 و 13].

$$J_c = \frac{4\pi E_{F1}}{3\sqrt{2A(0)} \ln x} \quad (6)$$

نتایج و بحث‌ها

شیوه‌ی مناسب برای تعریف دمای بحرانی T_c ، دمایی مطابق با 50% افت مقاومت است. بنابراین دمای میدان میانگین، T_{mf}^c ، به عنوان دمای بحرانی در نظر گرفته می‌شود.

حول حالت تعادل افت‌وخیزهای پیوسته‌ای در جریانند. مطالعه‌ی افت و خیزها می‌تواند در حل بسیاری از خواص ابررسانش و درک ابرسانایی کمک شایانی داشته باشد.

در هر سیستم با دمای متناهی که اجزای آن دارای حرکت آماری کاتوره‌ای باشند، افت‌وخیزها قابل مشاهده هستند. در یک ابرسانا نیز افت‌وخیزهای ترمودینامیکی وجود دارند. انحرافات از حالت تعادل می‌توانند در دماهای بالاتر از T_c ، یعنی در حالت عادی رخ دهند، که حاصل آن ظهور حالت ابررسانشی در بعضی نواحی، یعنی به وجود آمدن جفت‌های کوپر است. این انحرافات از حالت تعادل، به طور طبیعی ناپایدارند و کم‌وبیش به سرعت ناپدید می‌شوند. بنابراین در بالای دمای T_c جفت‌های کوپر ناشی از افت-وخیزهای ترمودینامیکی تولید و نابود می‌شوند. هرچه دما بالاتر باشد، این پدیده به ندرت اتفاق می‌افتد. زیرا هرچه دما بالاتر رود حالت عادی در مقایسه با حالت ابررسانشی پایدارتر می‌شود و برای تشکیل حالت ابررسانشی انحراف بیشتری از تعادل لازم است. جفت‌های کوپر در ابرسانا بدون اتلاف می‌توانند حرکت کنند. در نتیجه در دمای بالای T_c ظهور جفت‌های کوپر باعث ایجاد رسانش اضافی در حالت عادی می‌گردد که مقدار آن با نزدیک شدن به T_c افزایش می‌یابد. بنابراین با استفاده از درک حالت ابررسانشی و با به حساب آوردن حضور افت‌وخیزهای ترمودینامیکی انتظار می‌رود که حتی در بالاتر از دمای T_c ، ابررسانایی برحسب کاهش اضافی در مقاومت (افزایش در رسانش) قابل مشاهده باشد.

رسانش اضافی ناشی از افت‌وخیزها را می‌توان از روی اندازه‌گیری مقاومت الکتریکی بر حسب دما تعیین کرد. انحراف مقاومت الکتریکی از حالت عادی و کاهش آن، طبق رابطه‌ی 1، منجر به ایجاد رسانندگی اضافی می‌شود [5]. مقاومت حالت عادی برای ابرسانای MgB_2 به صورت تابع درجه‌ی 2 می‌باشد.

$$\Delta\sigma = \sigma(T) - \sigma_n(T) \quad (1)$$

که $\sigma(T)$ رسانش الکتریکی اندازه‌گیری شده و $\sigma_n(T)$ رسانش الکتریکی حالت عادی در صورت عدم انحراف منحنی مقاومت است.

A _{1D}	1/75	2	4	7	10	15
-----------------	------	---	---	---	----	----

جدول 2، دمای میدان میانگین، T_{mf}^c ، و دمای گذار سه به یک بعدی، T_{3D-1D} ، را در میدان‌های مغناطیسی مختلف نشان می‌دهد. هردو دمای فوق با افزایش میدان مغناطیسی کاهش می‌یابند. چراکه میدان مغناطیسی مانند دما عامل کاهش ابررسانایی است.

جدول 2. تغییرات دمای میدان میانگین و دمای گذار سه به یک بعدی بر حسب میدان مغناطیسی.

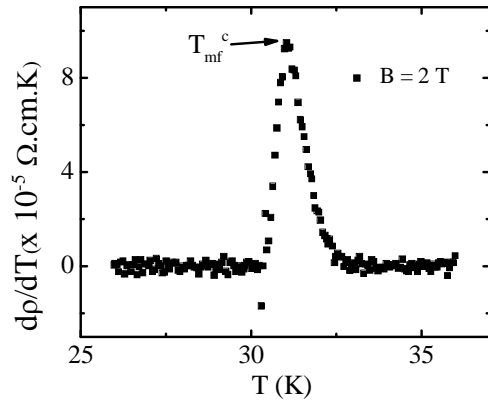
B (T)	0/25	0/5	1	2	4	6
T_{mf}^c (K)	34/58	33/99	32/88	31/03	28/3	25/91
T_{3D-1D} (K)	34/91	34/21	33/14	31/44	28/87	26/5

با استفاده از رابطه‌ی 3، $\xi(0) = \frac{e^2}{32\hbar A(3D)\sigma_{300}}$ ، طول همدوسی برای میدان‌های مغناطیسی مختلف مطابق جدول 3 محاسبه گردید. داده‌ها نشان می‌دهد، که با افزایش میدان مغناطیسی طول همدوسی کاهش یافته است. میدان مغناطیسی سبب کاهش طول مسیر آزاد میانگین الکترون‌ها در شبکه می‌شود. از طرفی به دلیل این‌که طول همدوسی ارتباط تنگاتنگی با مسیر آزاد میانگین دارد، شاهد کاهش آن با میدان مغناطیسی هستیم.

جدول 3. تغییرات طول همدوسی بر حسب میدان مغناطیسی.

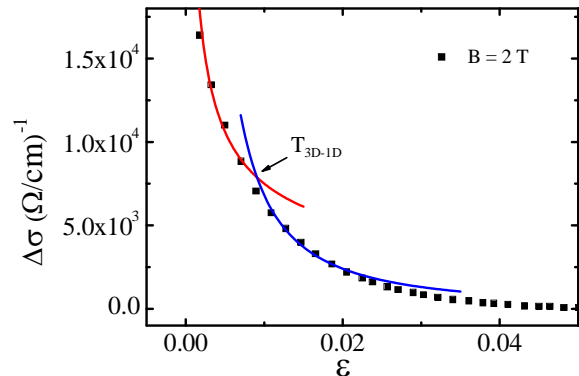
B (T)	0/25	0/5	1	2	4	6
ξ (nm)	3/6	3/4	2/6	2/18	2/14	1/6

با داشتن طول همدوسی پارامتر ابررسانایی چگالی جریان بحرانی طبق رابطه 6، محاسبه شده است. چگالی جریان بحرانی محاسبه شده 2×10^7 A/cm² می‌باشد، که بیشتر از چگالی جریانی است که برای نمونه‌های خالص گزارش شده است. این افزایش به دلیل



شکل 1. نمودار مشتق مقاومت ویژه الکتریکی بر حسب دما برای نمونه MgB_2 آلاینده به مالیک اسید در میدان مغناطیسی $B = 2T$.

شکل 2 نمودار $\Delta\sigma$ بر حسب ε را نشان می‌دهد، که در میدان 2 تسلا، با ثابت در نظر گرفتن ترابرد الکتریکی در سه بعد، دو بعد و یک بعد و با معادله 2 برازش داده شد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، رسانندگی از سه بعد به یک بعد انتقال می‌یابد و رسانندگی در دو بعد برای ابررسانای MgB_2 وجود ندارد. جدول 1، داده‌های محاسبه شده را نشان می‌دهد، که با افزایش میدان مغناطیسی ضریب $A(1D)$ و $A(3D)$ در محدوده میدان 0 تا 6 تسلا افزایش می‌یابد.



شکل 2. نمودار رسانندگی اضافی الکتریکی بر حسب ε برای نمونه‌ی MgB_2 آلاینده به مالیک اسید در میدان مغناطیسی $B = 2T$

جدول 1. داده‌های ضریب رسانندگی در سه و یک بعد در میدان‌های مغناطیسی مختلف.

B(T)	0/25	0/5	1	2	4	6
A _{3D}	330	350	450	550	560	750

افزودن مالیک اسید به ترکیب MgB_2 و در نتیجه افزایش مراکز میخکوبی می باشد.

نتیجه گیری

در نمونه MgB_2 آلاینده به مالیک اسید گذار از ناحیه ی سه بعدی به یک بعدی صورت می گیرد و ناحیه ی دو بعدی مشاهده نمی شود. با افزایش میدان مغناطیسی دمای گذار T_{3D-1D} کاهش می یابد. همچنین افزایش میدان مغناطیسی سبب افزایش ضریب $A(1D)$ و $A(3D)$ و کاهش طول همدموسی می شود.

مرجع ها

- [1] R. E. Glover, "Ideal resistive transition of a superconductor", Phys. Lett. A **25** (1967) 542
- [2] L.G. Aslamasov, A.I. Larkin, "The influence of fluctuation pairing of electrons on the conductivity of normal metal", Phys. Lett. A **26** (6) (1968) 238.
- [3] K. Maki, "The Critical fluctuation of the order parameter in Type II Superconductors" Prog. Theor. Phys. **39** (1968) 897.
- [4] R. S. Thompson, "Microwave, Flux Flow, and Fluctuation Resistance of Dirty Type-II Superconductors", Phys. Rev. B **1** (1970) 327.
- [5] S. A. Saleh, S. A. Ahmed, E. M. Elsheikh, "A Study on Thermoelectric Power and Electrical Properties of Bi-2223 Superconductors Sintered for Different Time Period", J. Supercond. Nov. Magn. **21** (2008) 187.
- [6] L. G. Aslamazov, A. L. Larkin, "Effect of Fluctuations on the Properties of a Superconductor Above the Critical Temperature" Sov. Phys. Solid State **10** (1968) 875.
- [7] M. P. Rojas Sarmiento, M. A. Uribe Laverde, E. Vera Lopez, D. A. Landinez Tellez, J. Roa-Rojas, "Conductivity fluctuation and superconducting parameters of the $YBa_2Cu_{3-x}(PO_4)_xO_{7-\delta}$ material" Physica B **398** (2007) 360.
- [8] A. L. Abou-Ali, Awad, I. H. Ibrahim, W. Abdeen, "Excess conductivity analysis for $Tl_{0.8}Hg_{0.2}Ba_2Ca_2Cu_3O_{9-\delta}$ substituted by Sm and Yb" Solid State Commun. **149** (2009) 281.
- [9] A. K. Pradhan, S. B. Roy, P. Chaddha, C. Chan, B. M. Wanklyn, "Anomalous magnetic behavior in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+y}$ single crystals near the superconducting-transition regime" Phys. Rev. B **52** (1995) 6215.
- [10] F. Sharifi, A. V. Herzog, R. C. Dynes, "Crossover from two to one dimension in in situ grown wires of Pb" Phys. Rev. Lett **71** (1993) 428.
- [11] S. H. Han, J. Axnas, B. R. Zhao, O. Rapp, "Fluctuation conductivity at high temperatures in polycrystalline Hg, $Tl-1223$ --Is there 1D fluctuation behavior?" Physica C, **408** (2004) 679.
- [12] A. Petrovie, Y. Fasano, R. Lortz, M. Pecrouc, M. Potel, R. Chevrel, O. Fischer, "Unconventional resistive transitions in the extreme type-II superconductor $Tl_2Mo_6Se_6$ " Physica C **460** (2007) 702.
- [13] P. Charles Poole Jr, A. H. Farach, J. R. Creswich, R. Przorov, "Superconductivity", second edition, Academic Press (2007).

بررسی خصوصیات ساختاری و ابررسانایی ترکیبات بر پایه آهن $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$

شهباز تهرانی، فاطمه؛ دادمهر، وحید

آزمایشگاه پژوهشی مغناطیس و ابررسانا، دانشکده فیزیک و شیمی، دانشگاه الزهراء، تهران، ایران

چکیده

ترکیبات $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ با مقدار آرایش $x=0, 0.01, 0.05$ به روش واکنش حالت جامد تک مرحله ای سنتز شده اند. الگوی پراش اشعه X نمونه ها، تشکیل ساختار بلوری تتراگونال با گروه فضایی $P4/nmm:2$ را در تمامی نمونه ها نشان داد. به منظور تحلیل دقیق ساختاری، الگوی پراش اشعه X نمونه ها با استفاده از نرم افزار MAUD بر پایه تحلیل ریتولد، ظریف سازی شد. براساس برازش داده ها، ثابت شبکه "a" با افزایش آرایش کلسیم ثابت می ماند، درحالی که ثابت شبکه "c" و حجم سلول واحد کاهش یافته است. در اندازه گیری خاصیت ابررسانایی نمونه ها، مشخص شد که دمای گذار ابررسانایی از دمای $55 K$ برای نمونه خالص ($x=0$) به دمای $48 K$ برای نمونه آلاینده با $x=0.01$ کاهش می یابد. همچنین ابررسانایی با افزایش آرایش کلسیم در نمونه $Nd_{0.95}Ca_{0.05}FeAsO_{0.8}F_{0.2}$ فرونشانده می شود.

The study of structural and superconductivity properties of $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ iron-based compounds

Shahbaz Tehrani, Fatemeh; Daadmehr, Vahid

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

Abstract

The $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ compounds with $x=0, 0.01, 0.05$ have been synthesized through the one step solid-state reaction method. The X-ray diffraction patterns of the samples have indicated the formation of tetragonal structure with the space group $P4/nmm:2$. In order to exact structural analysis, the X-ray diffraction patterns of samples have been refined using the MAUD software based on Rietveld's analysis. From the data refinement, the lattice parameter "a" remains constant by increasing the calcium content, while the lattice parameter "c" and the cell volume decreased. In superconductivity measurement of the samples, it was found that the superconductivity transition temperature has been reduced from $55 K$ for the pure sample ($x = 0$) to $48 K$ for the doped sample with $x = 0.01$. Also, the superconductivity has suppressed with the increase in calcium content in $Nd_{0.95}Ca_{0.05}FeAsO_{0.8}F_{0.2}$ sample ($x=0.05$).

PACS No. 74, 61

مقدمه

فلزات کمیاب خاکی مانند La، Nd و غیره می باشند) دارای بیشترین دمای گذار بین دیگر گروه های ابررساناهای بر پایه آهن هستند. در این ترکیبات، لایه FeAs به عنوان صفحه ابررسانایی و لایه Re(O/F) به عنوان مخازن بار عمل می کنند. تاکنون تحقیقات و پژوهش های فراوانی در زمینه سنتز و مشخصه یابی خصوصیات ابررسانایی و اثر آرایش های مختلف بر خصوصیات ترکیبات بر پایه آهن از جمله دمای گذار صورت گرفته است [3-5]. در این مقاله برای نخستین بار، اثر جانشینی Ca/Nd بر خصوصیات ساختاری و ابررسانایی ابررسانای بر پایه آهن $NdFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ بررسی شده است. علاوه براین، ما سعی داریم تاکید نماییم که رابطه ای بین

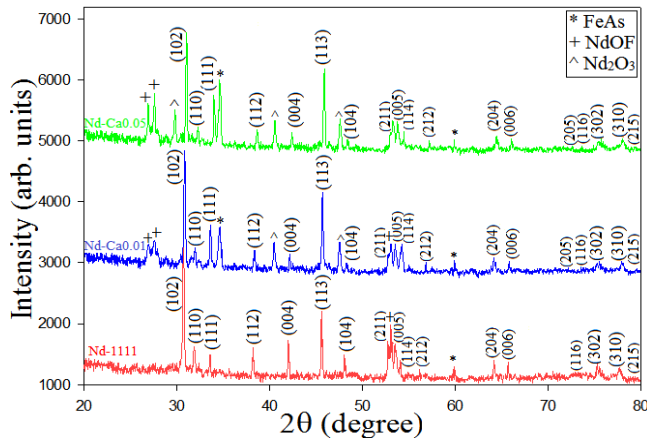
در سال ۲۰۰۶، پدیده ابررسانایی در ترکیبات حاوی آهن و به طور مشخص در ترکیب LaFePO، با دمای گذار حدود 3.5 کلوین گزارش شد [1]. دو سال بعد، پدیده ابررسانایی در ترکیب $LaFePF_xO_{1-x}$ با دمای گذار حدود 26 کلوین برای آرایش $x \sim 0.11$ مشاهده شد [2]. ابررساناهای بر پایه آهن به عنوان گروهی از ابررساناهای دمای بالا، به علت دارا بودن خصوصیات مغناطیسی و ابررسانایی، به طور همزمان، از اهمیت بسیار بالایی برخوردار می باشند. این نوع ابررساناها همانند ابررساناهای کوپراتی دارای ساختار لایه ای می باشند. در میان ابررساناهای بر پایه آهن، گروه-۱۱۱۱ با فرمول عمومی $ReFeAsO_{1-x}F_x$ (که در آن Re عناصر

خصوصیات ساختاری و ابررسانایی در ترکیبات برپایه آهن وجود دارد.

آزمایشات تجربی

ترکیبات پلی کریستال برپایه آهن $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$ با مقدار آرایش $x=0, 0.01, 0.05$ به روش واکنش حالت جامد تک مرحله ای سنتز شده اند. نمونه های سنتز شده $Nd_{0.95}Ca_{0.05}FeAsO_{0.8}F_{0.2}$ ، $Nd_{0.99}Ca_{0.01}FeAsO_{0.8}F_{0.2}$ و $Nd_{0.99}Ca_{0.01}FeAsO_{0.8}F_{0.2}$ ترتیب با نمادهای Nd-1111، Nd-Ca0.01 و Nd-Ca0.05 نامگذاری شده اند. برای ساخت یک گرم از نمونه مورد نظر، مقادیر محاسبه شده براساس علم وزن سنجی از پودرهای نئودیمیوم Nd، آهن Fe، اکسید آهن Fe_2O_3 ، آهن (III) فلوراید FeF_3 ، کلسیم فلوراید CaF_2 و تکه های آرسنیک As (تمامی مواد اولیه دارای خلوص % ۹۹.۹ هستند) توسط ترازویی با دقت 10^{-5} گرم توزین شدند. سپس این مواد به مدت ۲ ساعت با یکدیگر ساییده و مخلوط شدند. تمامی مراحل توزین و ساییدن درون گلاباکسی حاوی گاز نیتروژن انجام شد. پودر همگن بدست آمده توسط پرس و با فشار 50 Kg/cm^2 به شکل قرص درآمده و درون لوله کوارتز قرار گرفت. بعد از آن، لوله کوارتز توسط پمپ خلاء تا فشار 10^{-4} mbar ، تخلیه شده و سپس مهر و موم شد. لوله کوارتز مهر و موم شده درون کوره استوانه ای قرار گرفته و با آهنگ دمایی 10°C/min تا دمای 350°C حرارت داده شد و به مدت ۵ ساعت در این دما قرار گرفت. سپس با آهنگ دمایی ذکر شده تا دمای 640°C (و باقی ماندن در این دما به مدت ۱۴ ساعت) و بعد از آن تا دمای 880°C (و حرارت دادن در این دما به مدت ۲۰ ساعت) و در آخر تا دمای 1150°C (و باقی ماندن در این دما به مدت ۲۰ ساعت) حرارت داده شد. در این مرحله پودر حاصله، دوباره به مدت ۲ ساعت ساییده شده و به شکل قرص درمی آید. سپس قرص بدست آمده درون لوله کوارتز قرار گرفته و بار دیگر مهر و موم می شود. در آخر تمامی فرآیند حرارت دهی ذکر شده دوباره تکرار می شود.

برای بررسی مشخصات ساختاری نمونه ها از جمله ثابت شبکه ای، اندیس های میلر و فازهای غالب و ناخواسته، از دستگاه XRD مدل PW3050/60 متعلق به شرکت PANalytical® با تابش



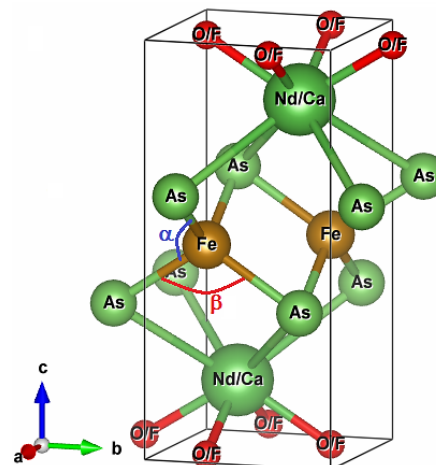
شکل ۱. الگوی XRD ترکیبات سنتز شده $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$

بحث و بررسی

شکل ۱ الگوی XRD ترکیبات سنتز شده را نشان می دهد. برای تعیین مشخصات و ساختار بلوری نمونه ها، با استفاده از نرم افزار MAUD و تحلیل ریتولد، طیف XRD نمونه ها را ظریف سازی نمودیم. براساس این تحلیل، ساختار بلوری تتراگونال با گروه تقارنی $P4/nmm:2$ در تمامی نمونه ها تشکیل شده است. صفحات میلر مربوط به این ساختار بلوری برای نمونه های سنتز شده Nd-1111، Nd-Ca0.01 و Nd-Ca0.05 در شکل ۱ مشخص شده است. جابه جایی صفحات به سمت زوایای بزرگتر، نشان دهنده کاهش ثابت شبکه با جانشینی کلسیم است. همچنین براساس تحلیل نرم افزار MAUD، حضور فازهای ناخالصی (که در شکل ۱ علامت گذاری شده است) در نمونه ها مشخص شد و درصد حجمی فاز خالص در نمونه های Nd-1111، Nd-Ca0.01 و Nd-Ca0.05 به ترتیب، % ۸۱، % ۷۷ و % ۷۳ بدست آمد. اغلب حضور فازهای ناخالصی در ترکیبات پلی کریستال برپایه آهن

همان طور که از جدول ۱ آشکار است، با افزایش جانشینی کلسیم، طول پیوندهای Fe-As و Nd-(O/F) کاهش یافته است. به علاوه، زوایای بین پیوندی As-Fe-As " α " و " β " به ترتیب، کاهش و افزایش می یابد. همان طور که در شکل ۲ نیز قابل مشاهده است، همراه با کاهش طول پیوند Fe-As و کاهش و افزایش یافتن زوایای " α " و " β " به ترتیب، ضخامت لایه Fe-As با جانشینی یون کلسیم، کاهش خواهد یافت. همچنانکه نتایج محاسبات ضخامت لایه Fe-As (جدول ۱) این مسئله را تایید می نماید. به علاوه با جانشینی یون کلسیم زاویه (O/F)-Nd-(O/F) افزایش می یابد. اثر کاهش طول پیوند Nd-(O/F) و افزایش زاویه بین پیوندی (O/F)-Nd-(O/F)، کاهش ضخامت لایه Nd-(O/F) خواهد بود که نتایج محاسبات ضخامت لایه Nd-(O/F) در جدول ۱، تایید کننده این موضوع است. بنابراین، با کاهش ضخامت لایه های Fe-As و Nd-(O/F) با افزایش آلایش کلسیم، ثابت شبکه c و حجم سلول واحد کاهش می یابد.

شکل ۳، مقاومت الکتریکی نرمال شده نمونه های سنتز شده Nd-1111، Nd-Ca0.01 و Nd-Ca0.05 را نشان می دهد. همان طور که در شکل ملاحظه می نمایید، مقاومت الکتریکی نمونه Nd-1111 با کاهش دما به صورت خطی کاهش می یابد و در دمای $T_c^{mid} = 55 \text{ K}$ گذار ابرسانایی رخ می دهد. برای نمونه Nd-Ca0.01 در محدوده دمای 125 K یک برآمدگی دیده می شود که به گذار ساختاری از ساختار تتراگونال به اورتورومبیک نسبت داده می شود. این گذار ساختاری در ترکیبات برپایه آهن معرف این نکته است که ابرسانایی در این ترکیبات در فاز اورتورومبیک رخ می دهد [9]. با کاهش بیشتر دما، مقاومت الکتریکی نمونه Nd-Ca0.01 کاهش یافته و گذار ابرسانایی در این نمونه در دمای $T_c^{mid} = 48 \text{ K}$ اتفاق می افتد. به علاوه، با افزایش بیشتر آلایش کلسیم، ابرسانایی در نمونه Nd-Ca0.05، از بین رفته و این نمونه به صورت یک ماده نیمرسانا رفتار می کند. بنابراین با افزایش آلایش کلسیم، دمای ابرسانایی در نمونه های سنتز شده کاهش می یابد. همان طور که در قبل بیان نمودیم، چهاروجهی های-FeAs4 در ترکیبات برپایه آهن، نقش مهمی را



شکل ۲. تصویر شماتیکی از ترکیبات سنتز شده $Nd_{1-x}Ca_xFeAsO_{0.8}F_{0.2}$

دیگر نیز، مشاهده و گزارش شده است [6-8]. همچنین، هیچ پیک ناخالصی مربوط به فازهای یون کلسیم مانند CaF_2 ، CaO و غیره در الگوی XRD نمونه های Nd-Ca0.01 و Nd-Ca0.05 مشاهده نمی شود که نشان دهنده جانشینی کامل یون های Ca^{2+} به جای یون های Nd^{3+} در ترکیبات مذکور بوده است. این جانشینی توسط نرم افزار MAUD نیز تایید شد.

پارامترهای ساختاری محاسبه شده با نرم افزار MAUD برای نمونه های سنتز شده در جدول ۱ آورده شده است. همان طور که در جدول ملاحظه می نمایید، ثابت شبکه "a" با افزایش آلایش کلسیم ثابت می ماند، درحالی که ثابت شبکه "c" و حجم سلول واحد کاهش می یابد. از آن جایی که شعاع یونی Ca^{2+} (1.12 Å) و Nd^{3+} (1.11 Å) تفاوت چندانی با یکدیگر ندارد، لذا برای بیان علت تغییر ثابت شبکه c، باید پارامترهای ساختاری دیگری چون طول باند و زوایای بین پیوندی را در ترکیبات سنتز شده محاسبه نماییم. در ترکیبات برپایه آهن در لایه ابرسانایی FeAs، هر یون آهن به صورت چهار وجهی توسط چهار یون آرسنیک احاطه شده اند، که این چهار وجهی های-FeAs4 به عنوان یک بلوک مهم و کلیدی در این مواد هستند. به علاوه، در لایه مخزن بار (O/F)-Nd، هر یون نئودیمیوم به شکل چهاروجهی توسط چهار یون اکسیژن/فلوئور احاطه شده است (شکل ۲) چهاروجهی های مذکور را نشان می دهد. پارامترهای محاسبه شده براساس برآزش داده های XRD، برای نمونه ها در جدول ۱ ذکر شده است.

جدول ۱. پارامترهای ساختاری محاسبه شده توسط نرم افزار MAUD

نمونه	ثابت شبکه		حجم سلول واحد (\AA^3)	طول باند (\AA)		زوایای بین پیوندی ($^\circ$)			ضخامت لایه Fe-As (\AA)	ضخامت لایه Nd-(O/F) (\AA)
	a(\AA)	c(\AA)		Fe-As	Nd-(O/F)	As-Fe-As		(O/F)-Nd-(O/F)		
	α	β								
Nd-1111	۳۹۶(۷)	۸,۵۹(۶)	۱۳۵,۲۷(۶)	۲,۴۰۱(۰)	۲,۳۱۳(۴)	۱۰۸,۵۱(۵)	۱۱۱,۴۰(۲)	۱۱۶,۹۵(۰)	۱,۳۵۳(۲)	۱,۲۰۹(۶)
Nd-Ca0.01	۳۹۶(۴)	۸,۵۵(۸)	۱۳۴,۴۷(۴)	۲,۳۹۶(۴)	۲,۳۰۹(۴)	۱۰۸,۴۲(۴)	۱۱۱,۶۰(۷)	۱۱۷,۱۳(۸)	۱,۳۴۷(۱)	۱,۲۰۴(۳)
Nd-Ca0.05	۳۹۶(۱)	۸,۵۱(۰)	۱۳۳,۵۱(۷)	۲,۳۹۰(۹)	۲,۳۰۴(۷)	۱۰۸,۲۹(۴)	۱۱۱,۸۶(۷)	۱۱۷,۳۸(۶)	۱,۳۳۹(۴)	۱,۱۹۷(۵)

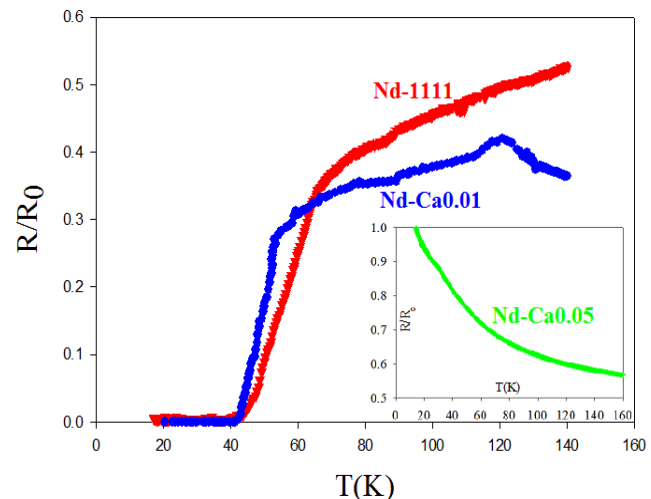
نتیجه گیری

در این تحقیق، اثر آلیش کلسیم بر خصوصیات ساختاری و ابررسانایی ترکیبات $\text{Nd}_{1-x}\text{Ca}_x\text{FeAsO}_{0.8}\text{F}_{0.2}$ با مقدار آلیش $x=0, 0.01, 0.05$ بررسی شد. براساس تحلیل الگوی XRD نمونه ها، ثابت شبکه "a" با افزایش آلیش کلسیم ثابت می ماند، درحالی که ثابت شبکه "c" و حجم سلول واحد کاهش می یابد. علت این مسئله کاهش ضخامت لایه های Fe-As و Nd-(O/F) با افزایش آلیش کلسیم است. دمای گذار ابررسانایی از دمای 55 K برای نمونه Nd-1111 به 48 K برای نمونه Nd-Ca0.01 کاهش می یابد. همچنین ابررسانایی با افزایش آلیش کلسیم در نمونه Nd-Ca0.05 از بین رفته است. علت این مسئله افزایش اعوجاج چهاروجهی های-FeAs4 از مقدار چهاروجهی منظم با افزایش آلیش کلسیم است.

مرجع ها

- [1] Y. Kamihara, H. Hirano, M. Hirano, R. Kawamura, H. Yanagi, T. Kamiya, H. Hosono, *J. Am. Chem. Soc.* **128**, No. 31(2006) 10012-10013.
- [2] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, H. Hosono, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, No. 11 (2008) 3296-3297.
- [3] S.V.Chong, G.V.M. Williams, S. Sambale, K. Kadowaki, *Physica C: Superconductivity and its Applications* **507**, (2014) 35-40.
- [4] Z.-A. Ren, J. Yang, W. Lu, W. Yi, X.-L. Shen, Z.-C. Li, G.-C. Che, X.-L. Dong, L.-L. Sun, F. Zhou, Z.-X. Zhao, *EPL (Europhysics Letters)* **82**, (2008) 570021-570022.
- [5] N.D. Zhigadlo, S. Weyneth, S. Katrych, P.J.W. Moll, K. Rogacki, S. Bosma, R. Puzniak, J. Karpinski, B. Batlogg., *Physical Review* **86**, (2012) 214509-1-214509-12.
- [6] P. M. Aswathy, J. B. Anooja, Neson Varghese, U. Syamaprasad, *Journal of Applied Physics* **115**, (2014) 053903-1-053903-6.
- [7] J.B. Anooja, P.M. Aswathy, N. Varghese, K. Vinod, A. Bharathi, U. Syamaprasad, *Journal of Alloys and Compounds* **566**, (2013) 43-49.
- [8] Poonam Rania, A.K. Hafiz, V.P.S. Awana, *Physica C: Superconductivity and its applications* **520**, (2016) 1-7.
- [9] T. Nomura, Y. Inoue, S. Matsuishi, M. Hirano, J. E. Kim, K. Kato, M. Takata, H. Hosono, *Supercond. Sci. Technol.* **22**, (2009) 055016-1-055016-7.
- [10] C.-H. Lee, A. Iyo, H. Eisaki, H. Kito, M. Teresa Fernandez-Diaz, T. Ito, K. Kihou, H. Matsuhashi, M. Braden, K. Yamada, *Journal of the Physical Society of Japan*, **77** (2008) 083704-083706.

ایفا می کنند. نوامرا و همکاران [9] اثر اعوجاج چهاروجهی های-FeAs4 را از چهاروجهی منظم ($\alpha=\beta=109.47^\circ$) روی دمای گذار در ترکیبات $\text{CaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ بررسی کردند. همچنین، لی و همکاران [10] نتیجه گرفتند که دمای گذار ترکیبات LnFeAsO_{1-y} با دور شدن از مقدار چهاروجهی منظم کاهش می یابد. در پژوهش حاضر، با مقایسه نتایج حاصل از محاسبات ساختاری و اندازه گیری مقاومت الکتریکی، درمی یابیم که با افزایش آلیش کلسیم، زوایای α و β نمونه های سنتز شده ما، از مقدار چهاروجهی منظم ($\alpha=\beta=109.4^\circ$) دورتر شده و بنابراین دمای گذار ابررسانایی کاهش می یابد. لذا، این پژوهش، موید نتایج پژوهش های مذکور درباره رابطه بین خصوصیات ساختاری و ابررسانایی در ابررساناهای برپایه آهن است.



شکل ۳. مقاومت الکتریکی نرمال شده نمونه ها برحسب دما

نظم‌یافتگی در محدوده‌های نسبتاً کوچک

صائب، فاطمه؛ تن‌سازان، شیمای؛ اعتصامی، محمد

دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، خیابان پژوهش، یزد

چکیده

ما در یک رویکرد پدیده شناسانه عام برای بررسی حالت‌ها و تغییرات حالت‌های دستگاه‌های فیزیکی مختلف به ویژه انواعی از چگاله‌های جدید میدان‌های نظم تانسوری مناسب در نظر می‌گیریم و روش کلی تعیین دستگاه معادله دیفرانسیل مرتبه‌های مختلف میدان نظم را به صورت تعمیمی از نظریه گینزبرگ-لانداو معرفی می‌کنیم و نشان می‌دهیم که آثار ذاتی نظم‌ها به خوبی در نمونه‌هایی از دستگاه که بزرگی ابعاد هندسی آنها از مرتبه طول‌های مشخصه فیزیکی باشد به خوبی قابل آشکار شدن می‌باشد.

Ordering in Relatively Small Extents

Saeb, Fatemeh; Tansazaan, Shima; Eatesami, Mohammad
Department of Physics, Yazd University, Pajohesh Street, Yazd

Abstract

In a general phenomenological approach, we consider appropriate order field tensors to survey states and changes of states for different physical systems especially for some kinds of novel condensates. We consider a generalization of the Ginzburg-Landau theory to obtain a system of differential equations for the fields and demonstrate effects of intrinsic orders are well appearable in the samples have geometrical dimensions of the same orders of magnitude of their characteristic lengths.

PACS No. 85.25.Dq, 74.50.+r, 85.25.Am, 85.25.Cp

گازی، مایع و جامد برای مواد مشاهده می‌شود. در این روند افزایش چگالی و چگالش، برهمکنش‌های بین ذرات ماده نقش مهمی دارند. ولی در چگاله‌ها و ابرشاره‌های جدید ماجرای چگالش یک ماجرای متفاوتی می‌باشد. به طور مشخص چگالش بوز-اینشتین یک گذار فاز کوانتومی است که در غیاب هر گونه برهمکنشی بین بوزون‌ها هم روی می‌دهد. در طی این چگالش یک کسری ماکروسکوپی از بوزون‌ها با همدیگر در یک حالت پایه انرژی قرار می‌گیرند. در چگاله‌های فرمیونی مانند ابررساناها، ابرشاره ^3He و چگاله‌های گازهای فرمیونی فوق سرد قلیایی، فرمیون‌ها به ترتیب با مبادله کوانتاهای برانگیختگی‌های جمعی، برهمکنش‌های مایع فرمی و برهمکنش تشدید فشاخی دو به دو با همدیگر جفت می‌شوند به گونه‌ای که رژیم طبقاتی فرمیونی ناپایدار و همراه با ایجاد یک گاف انرژی در طیف برانگیختگی‌های بنیادی، گذار به یک وضعیت پایدارتر برای حالت‌های مجاور سطح فرمی فراهم می‌شود. در هر صورت، چگالش معمولاً با افزایش نظم و کاهش انرژی دستگاه همراه می‌باشد ولی نظم و انرژی که شاید از قبل برای ما کاملاً شناخته شده نباشند و در نتیجه باید به صورت خودسازگار تعیین شوند. از این رو مدل‌ها و نظریه‌های پدیده شناسانه در بررسی چگاله‌ها و رونق بخشی به نظریه‌های

مقدمه

یک ابررسانا در حضور میدان مغناطیسی فازهای مختلفی مانند فازهای مایسنر، شبکه گردشار، شیشه گردشار و مایع گردشار ممکن است داشته باشد. گشتاورهای دوقطبی مغناطیسی در مواد مغناطیسی هم در آرایش‌های گوناگونی مانند فازهای پارا، فرو، فری، پادفرو و پادفرو ممکن است به حالت پایدار قرار گیرند. این در حالی است که ساختار بلوری یک ماده ابررسانا یا یک ماده مغناطیسی هم خود فازهای مختلفی می‌تواند داشته باشد.

پیشرفت‌های دو دهه اخیر در مشاهده چگاله‌های بوزونی و فرمیونی گوناگون و حتی مشاهده گذر بین چگاله‌های باردین-کوپر-شریفری و بوز-اینشتینی، به علاوه شناخته شدن چگاله‌های زیر سطح اتمی و در مقابل فرازمینی [۱]، یک نونگری به حالت چگالیده فارغ از نوع ماده و سازوکار میکروسکوپی چگالش را ضروری نمایانده است.

چگالی جرمی مواد، بین صفر (خلأ مطلق فرضی) یا به عبارت بهتر بین $10^{-21} \text{ kgm}^{-3}$ مربوط به فضای بین ستاره‌ها، تا 10^{17} kgm^{-3} (مربوط به هسته اورانیوم) یا شاید بیشتر می‌تواند باشد که در این بازه بسته به دما و فشار حالت‌های اصطلاحاً

تانسوری مرتبه صفر هستند که هر یک در (\mathbf{r}, t) با یک عدد با واحد مربوطه یا تابع نرده‌ای (که البته ممکن است مختلط باشد) مشخص می‌شوند و چرخش دستگاه مختصات هم روی این عدد یا تابع تاثیری ندارد.

سرعت بسته موج وابسته به الکترون، شیب توابع موج، شیب توابع پتانسیل نرده‌ای، مغناطش و پتانسیل برداری از جمله تانسوری‌های مرتبه یک می‌باشند که هر یک در (\mathbf{r}, t) با یک آرایه سه‌تایی از اعداد با توابع نرده‌ای مشخص می‌شوند که تحت چرخش دستگاه مختصات به گونه‌ای تغییر می‌کنند تا بزرگی و راست و جهت فیزیکی ناوردا باقی بمانند.

جرم حامل‌های بار در نظریه نواری جامدات و ویژگی‌های فیزیکی یک تک بلور مانند پاسخ دی‌الکتریکی، رسانندگی اپتیکی و پذیرفتاری مغناطیسی از جمله کمیت‌های تانسوری مرتبه دو هستند که هر یک در (\mathbf{r}, t) با یک آرایه نه تایی از اعداد یا توابع (ماتریس 3×3) مشخص می‌شوند که تحت چرخش دستگاه مختصات به گونه‌ای تغییر می‌کنند تا سرشت (جمع سه عنصر روی قطر ماتریس) تغییری نکند و در دستگاه مختصاتی که محورهای آن منطبق بر محورهای اصلی بلور است عناصری که روی قطر نیستند صفر شده و ماتریس قطری شود.

به عنوان فرض اول، ما در نظریه‌مان برای توصیف نظم، استفاده از مرتبه‌های تانسوری مذکور را لازم می‌دانیم. البته در اینجا برای سادگی، به مرتبه صفر و یک که یک میدان نظم نرده‌ای (سف $\Psi(\mathbf{r}, t)$ (scalar order field) و یک میدان نظم برداری (وف $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ (vector order field)، باشد اکتفا می‌کنیم.

در ترمودینامیک و مکانیک آماری وجود متغیرهای حالت ترمودینامیکی مهمی مانند دما، انرژی داخلی و انتروپی برای کلیه دستگاه‌های فیزیکی، به ترتیب بر اساس قانون صفرم، اول و دوم ترمودینامیک پذیرفته شده است. علاوه بر اینها، چندین تابع حالت که انرژی آزاد هم نامیده می‌شوند، به صورت تابعی از مختصات ترمودینامیکی دستگاه تعریف و به صورت رایج استفاده می‌شوند. یکی از معروف‌ترین اینها در عرصه گذارهای فاز، انرژی آزاد گیبس می‌باشد. به عنوان فرض دوم، ما هم طبق معمول فرض می‌کنیم که دستگاه فیزیکی از همه درجات آزادی یا عوامل نظم خود

میکروسکوپی مربوطه جایگاه بسیار مهمی تری را به عهده می‌گیرند. دو مجموعه از غنی‌ترین و جالب‌ترین نظریه‌های پدیده‌شناسانه و میکروسکوپی که تأثیرات مهمی در تکمیل و استحکام بخشی به همدیگر هم داشته‌اند، نظریه گینزبورگ-لانداو (GL) [۲] و تعمیم‌های آن و نظریه باردین-کوپر-شریفر (BCS) [۳] و تعمیم‌های آن می‌باشد. بررسی استاتیک و دینامیک ساختار شار مغناطیسی در ابرساناها [۴] که بخش مهمی از عرصه اشتراک ابرسانایی و مغناطیس می‌باشد با استفاده از نظریه‌های مستقل از زمان و وابسته به زمان GL صورت گرفته است. یک جستجوی ساده با کلید واژه گینزبورگ-لانداو به خوبی آشکار می‌کند که امروزه «مدل جهانی گینزبورگ-لانداو» تصور درستی است [۵] نه «نظریه گینزبورگ-لانداو ابرسانایی». به نظر ما این مدل ظرفیت قابل توجهی برای فرمول‌بندی افزایش نظم و کاهش انرژی به صورت خودسازگار دارد.

نظریه و فرمول‌بندی

در یک مدل پدیده‌شناسانه معمولاً دستگاه فیزیکی در فضا-زمان چهاربعدی (\mathbf{r}, t) مورد توجه قرار می‌گیرد. که t تانسور مرتبه صفر (نرده‌ای) و \mathbf{r} تانسور مرتبه یک (برداری) می‌باشد. باید توجه داشت که (\mathbf{r}, t) یک نقطه ریاضی بی‌بعد در فضای چهار بعدی مانند مرکز جرم یک الکترون یا یک فوتون را نشان‌گذاری می‌کند و با توجه به روابط اصول عدم قطعیت انرژی-زمان $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ و تکانه-مکان $\Delta p_i \Delta x_i \geq \hbar$ ، برخلاف توصیف‌های کلاسیکی ظرفی برای هیچ هویت فیزیکی نمی‌باشد. برای توصیف هر موجود فیزیکی حداقل به یک ناحیه از فضای چهاربعدی (\mathbf{r}, t) باید توجه کنیم.

یک طبق بندی اصولی و عام برای کمیت‌های فیزیکی و حتی بعضی از ابزارهای ریاضی غیرکلاسیکی مربوطه، طبقه‌بندی بر حسب سرشت تانسوری آنها می‌باشد که در واقع طبقه‌بندی بر حسب تعداد عوامل ریاضی ضروری برای مشخص کردن آنها و نحوه تغییر این عوامل در اثر چرخش دستگاه مختصات می‌باشد.

جرم الکترون در نظریه درود، همچنین در نظریه زومرفلد، تابع موج معادله شرودینگر، تابع موج ماکروسکوپی در معادله‌های GL و پتانسیل‌های نرده‌ای الکتریکی و مغناطیسی از جمله کمیت‌های

$$\Psi_{M_x, M_y, M_z, N_x, N_y, N_z}(x, y, z) = \Psi_{0, M_x, M_y, M_z, N_x, N_y, N_z} \times \left\{ \begin{array}{l} (-1)^{N_x} \cos((M_x + 1/2)\pi x / a_x) \\ (-1)^{N_x + 1} \sin(M_x \pi x / a_x) \end{array} \right\} \times \left\{ \begin{array}{l} (-1)^{N_y} \cos((M_y + 1/2)\pi y / a_y) \\ (-1)^{N_y + 1} \sin(M_y \pi y / a_y) \end{array} \right\} \times \left\{ \begin{array}{l} (-1)^{N_z} \cos((M_z + 1/2)\pi z / a_z) \\ (-1)^{N_z + 1} \sin(M_z \pi z / a_z) \end{array} \right\} \quad (1)$$

که در آن‌ها بردار موج K به جرم ذرات چگاله m و چگالی تعداد آنها $n^{\text{cond}}(T)$ بستگی دارد و نظیر به نظیر هشت رابطه بالا با هشت شرط $(2 \times 2 \times 2)$ زیر تعیین می‌شوند:

$$K^2 \equiv (2\pi/\Gamma)^2 = \frac{2\beta m n^{\text{cond}}(T)}{\hbar^2} = K_x^2 + K_y^2 + K_z^2 = \left\{ \begin{array}{l} ((M_x + 1/2)\pi/a_x)^2 \\ (M_x \pi/a_x)^2 \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} ((M_y + 1/2)\pi/a_y)^2 \\ (M_y \pi/a_y)^2 \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} ((M_z + 1/2)\pi/a_z)^2 \\ (M_z \pi/a_z)^2 \end{array} \right\} \quad (2)$$

$$M_x, M_y, M_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad N_x, N_y, N_z = 1, 2$$

عامل Γ طول موج میدان سف و β تقریباً مستقل از دماست و به خصوصیات ذاتی چگاله بستگی دارد. برای وف تحت شرایط مرزی $\hat{\mathbf{n}} \cdot (\nabla \times \mathbf{A})|_{\text{bound.}} = 0$ و $\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A}|_{\text{bound.}} = 0$ هشت مد سیملوله‌ای (منظور مدهایی که برای آنها $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ است که کروی و عرضی هم بسته به مورد نامیده می‌شوند) همراه با شرط فعال بودن مربوط به هر یک بدست می‌آوریم که از چهار سنخ می‌باشند و دو سنخ هر یک تنها شامل یک ویژه مد (\mathbf{A}_1 و \mathbf{A}_8 در زیر) و دو سنخ دیگر هر کدام سه ویژه مد دارند. ما از هر سنخ تنها یک ویژه مد همراه با شرط فعال بودن آن را در اینجا می‌آوریم. در روابط ویژه‌وف‌ها $n_x, n_y, n_z = 1, 2$ و $m_{xi}, m_{yi}, m_{zi} = 0, \pm 1, \dots$ می‌باشند و شرط پایا باقی ماندن هر ویژه وف از شکل کلی $k^2 \equiv (2\pi/\lambda)^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \text{const.}$ با استفاده از تعاریف $s_x = 2a_x/\lambda, s_y = 2a_y/\lambda, s_z = 2a_z/\lambda$ به شکل معادله بیضی‌گونی که در کنار هر ویژه وف نوشته شده، در آمده است:

بهره می‌گیرد تا به حالتی برود که در آن انرژی آزاد آن بهینه (یک کمینه، ترجیحاً کمینه مطلق) شود.

فرض سوم ما در مورد سهم‌های میدان‌های مذکور در چگالی انرژی آزاد دستگاه می‌باشد که ضمن رعایت ملاحظات ریاضی و فیزیکی، با الهام از نظریه گینزبورگ-لانداو [۲] این تابع حالت نرده‌ای حقیقی را به صورت بسطی از توان‌های مناسب میدان‌های نظم و مشتقات آنها در نظر می‌گیریم.

به تازگی ما امکان ترکیب نقش‌های همبستگی‌های بوزونی با وابستگی‌های جفت‌شدگی در ایجاد چگاله‌های جدید و نقش این ترکیب در رفتارهای رسانندگی اپتیکی با نگاه به ابرساناهای ویژه را مورد بررسی قرار داده‌ایم [۶]. با اتکاء به این نظریه، در یک مقاله دیگر [۷] ما امکان چگالش فوتون‌ها در مقیاس بزرگ در یک مخزن فوتونی دارای تقارن مرکزی و محوری را نشان داده‌ایم. دستگاه معادله‌های دیفرانسیل سف و وف در [۷] معرفی شده‌اند. در اینجا، بر اساس جواب‌هایی که ما برای سف و وف ذاتی (فارغ از آثار همبستگی‌ها و آثار ناخطی) در موارد: الف- یک نمونه مکعب مستطیلی شکل به ابعاد $2a_x \times 2a_y \times 2a_z$ در یک دستگاه دکارتی که مبداء آن در مرکز قرار دارد، ب- یک نمونه استوانه‌ای شکل به شعاع a و ارتفاع $2b$ در یک دستگاه استوانه‌ای که مبداء آن در وسط محور قرار دارد، و پ- یک نمونه دارای تقارن مرکزی و محوری در یک دستگاه کروی که مرکز آن در مرکز قرار دارد و هر یک از سطوح کروی آن در $r = R$ و دو سطح مخروطی آن در $\theta = \theta_0$ و $\theta = \pi - \theta_0$ بدست آورده‌ایم چند موضوع جالب و قابل پیگیری را مورد بحث قرار می‌دهیم. لب فیزیکی که ما به دنبال ارائه آن هستیم در هر سه مورد به طور مشابه ظاهر می‌شود. بنابراین در اینجا به دلیل محدودیت‌ها تنها تعدادی از روابط مربوط به نظم‌یافتگی در نمونه مکعب مستطیلی را عرضه می‌کنیم. برای نمونه دارای تقارن مرکزی و محوری مشروح این مباحث را در [۷] ارائه داده‌ایم.

در نمونه مکعب مستطیلی برای سف تحت شرایط مرزی بسیار محدود کننده $\mathbf{n} \cdot \nabla \Psi|_{\text{bound.}} = 0$ توام با $\Psi|_{\text{bound.}} = 0$ هشت مد $(2 \times 2 \times 2)$ به صورت زیر بدست می‌آوریم:

مورد توجه است. نسبت طول موج وف به سف λ/Γ که وابسته به ویژگی ها و شرایط چگاله است، را می توان یک پارامتر فرض کرد.

جمع بندی و نتیجه گیری

وف کل حجم نمونه را به صورت یک آرایه تنگ پیکیده منظم از بسته ها یا حوزه هایی که دارای تقارن هایی متناظر با تقارن های نمونه هستند شبکه بندی می کند به گونه ای که در هر نقطه هر وجه هر بسته در طول زمان شار وف $\mathbf{A}_j \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0$ همیشه صفر باقی می ماند.

این نظم یافتگی بلندبرد وفی با نظم یافتگی بلندبرد سفی که به صورت تشکیل خانواده های سطوح هم سف ظاهر می شود از جهات مختلف صوری و فیزیکی تعامل های بسیار جالب و سازنده ای می تواند داشته باشند. رفتارهای سهم های مختلف وفی و سفی در چگالی انرژی آزاد و قواعد جادویی توزیع انرژی آزاد در بسته ها بین درجات نظم مستقل همچنین در نظام توزیع انرژی آزاد بین بسته های مختلف واقعاً به بسته ها هویت یاخته های بسیط نظم را می بخشد. چنین نظم یافتگی ترکیبی بلند برد خود می تواند مرحله یا فاز اولیه از تغییر حالت یا تغییر فاز در حداقل بعضی از چگاله ها باشد. این پیش بینی به خوبی در نمونه هایی که ابعاد هندسی آنها از مرتبه طول های مشخصه چگاله باشند قابل رصد می باشد. به علاوه در حالت ترازمندی ترمودینامیکی معمولاً شرایط بسیار مناسبی در داخل بسته ها برای نظم یافتگی میکروسکوپی کوتاه برد مانند چگالش بوز- اینشتینی یا چگالش های همراه با جفت شدگی وجود دارد. با در نظر گرفتن این دو مرحله نظم- یافتگی به عنوان مدلی برای بعضی از گذارهای فاز، بحث های مشترک جالبی مربوط به بعضی از چگاله های جدید و ابررساناها؛ به ویژه در ابعاد پایین اهمیت پیدا می کند.

مرجع ها

- [۱] K. H. Bennemann and J. B. Ketterson (Eds.), *Novel Superfluids*, Vol 1&2 Oxford Science Publications (2013&2014).
 [۲] V. L. Ginzburg, L. D. Landau, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **20**, 1064 (1950).
 [۳] J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, Benjamin, New York (1964).
 [۴] G. Blatter, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin, V. M. Vinokur, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 1125-1388 (1994).
 [۵] I. S. Aranson and L. Kramer, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 99 (2002).
 [۶] F. Saeb, M. Eatesami, *Physica B* **550**, 263 (2018).
 [۷] F. Saeb, M. Eatesami, *Large Extent Condensation of Photons in a Centre-Axial Symmetric Photon Container*, under revision.

$$\mathbf{A}_1 = A_{01} (-1)^{n_x + n_y + n_z} \times \quad (۳)$$

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathbf{x}} \frac{a_x}{2m_x} \cos\left(\frac{m_x \pi x}{a_x}\right) \sin\left(\frac{m_y \pi y}{a_y}\right) \sin\left(\frac{m_z \pi z}{a_z}\right) \\ \hat{\mathbf{y}} \sin\left(\frac{m_x \pi x}{a_x}\right) \frac{a_y}{2m_y} \cos\left(\frac{m_y \pi y}{a_y}\right) \sin\left(\frac{m_z \pi z}{a_z}\right) \\ -\hat{\mathbf{z}} \sin\left(\frac{m_x \pi x}{a_x}\right) \sin\left(\frac{m_y \pi y}{a_y}\right) \left(\frac{2a_z}{2m_z}\right) \cos\left(\frac{m_z \pi z}{a_z}\right) \end{pmatrix}$$

$$A_{1,} \left(\frac{m_{x1}}{s_x}\right)^2 + \left(\frac{m_{y1}}{s_y}\right)^2 + \left(\frac{m_{z1}}{s_z}\right)^2 = 1$$

$$\mathbf{A}_2 = A_{02} (-1)^{n_x + n_y + n_z + 1} \times \quad (۴)$$

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathbf{x}} \frac{a_x}{2m_x} \cos\left(\frac{m_x \pi x}{a_x}\right) \sin\left(\frac{m_y \pi y}{a_y}\right) \cos\left(\frac{(m_z + 1/2)\pi z}{a_z}\right) \\ \hat{\mathbf{y}} \sin\left(\frac{m_x \pi x}{a_x}\right) \frac{a_y}{2m_y} \cos\left(\frac{m_y \pi y}{a_y}\right) \cos\left(\frac{(m_z + 1/2)\pi z}{a_z}\right) \\ \hat{\mathbf{z}} \sin\left(\frac{m_x \pi x}{a_x}\right) \sin\left(\frac{m_y \pi y}{a_y}\right) \left(\frac{2a_z}{2m_z + 1}\right) \sin\left(\frac{(m_z + 1/2)\pi z}{a_z}\right) \end{pmatrix}$$

$$A_{2,} \left(\frac{m_{x2}}{s_x}\right)^2 + \left(\frac{m_{y2}}{s_y}\right)^2 + \left(\frac{(m_{z2} + 1/2)}{s_z}\right)^2 = 1$$

$$\mathbf{A}_5 = A_{05} (-1)^{n_x + n_y + n_z} \times \quad (۵)$$

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathbf{x}} \frac{a_x}{2m_x} \cos\left(\frac{m_x \pi x}{a_x}\right) \cos\left(\frac{(m_y + 1/2)\pi y}{a_y}\right) \cos\left(\frac{(m_z + 1/2)\pi z}{a_z}\right) \\ -\hat{\mathbf{y}} \sin\left(\frac{m_x \pi x}{a_x}\right) \frac{a_y}{2m_y + 1} \sin\left(\frac{(m_y + 1/2)\pi y}{a_y}\right) \cos\left(\frac{(m_z + 1/2)\pi z}{a_z}\right) \\ \hat{\mathbf{z}} \sin\left(\frac{m_x \pi x}{a_x}\right) \cos\left(\frac{(m_y + 1/2)\pi y}{a_y}\right) \left(\frac{2a_z}{2m_z + 1}\right) \sin\left(\frac{(m_z + 1/2)\pi z}{a_z}\right) \end{pmatrix}$$

$$A_{5,} \left(\frac{m_{x5}}{s_x}\right)^2 + \left(\frac{(m_{y5} + 1/2)}{s_y}\right)^2 + \left(\frac{(m_{z5} + 1/2)}{s_z}\right)^2 = 1$$

$$\mathbf{A}_8 = A_{08} (-1)^{n_x + n_y + n_z} \times \quad (۶)$$

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathbf{x}} \frac{a_x}{2m_x + 1} \sin\left(\frac{(m_x + 1/2)\pi x}{a_x}\right) \cos\left(\frac{(m_y + 1/2)\pi y}{a_y}\right) \cos\left(\frac{(m_z + 1/2)\pi z}{a_z}\right) \\ \hat{\mathbf{y}} \cos\left(\frac{(m_x + 1/2)\pi x}{a_x}\right) \frac{a_y}{2m_y + 1} \sin\left(\frac{(m_y + 1/2)\pi y}{a_y}\right) \cos\left(\frac{(m_z + 1/2)\pi z}{a_z}\right) \\ -\hat{\mathbf{z}} \cos\left(\frac{(m_x + 1/2)\pi x}{a_x}\right) \cos\left(\frac{(m_y + 1/2)\pi y}{a_y}\right) \left(\frac{2a_z}{2m_z + 1}\right) \sin\left(\frac{(m_z + 1/2)\pi z}{a_z}\right) \end{pmatrix}$$

$$A_{8,} \left(\frac{(m_{x8} + 1/2)}{s_x}\right)^2 + \left(\frac{(m_{y8} + 1/2)}{s_y}\right)^2 + \left(\frac{(m_{z8} + 1/2)}{s_z}\right)^2 = 1$$

ابعاد نمونه نظم یافته را آزمایش گر انتخاب می کند. انتخاب هایی که در آنها هر سه بعد مضرب دقیقاً درستی از طول موج وف λ باشند،

برانگیختگی های الکترون-حفره در ساختار گرافن-TMDC ابررسانا

عبادزاده، سیده فاطمه^۱؛ گودرز، هادی^۱؛ خضرلو، مریم^۲

^۱گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ارومیه، ارومیه

^۲محقق پسا دکتری، بنیاد ملی نخبگان ایران

چکیده

القای نظم ابررسانایی از طریق اثر مجاورت در ساختار هیبریدی گرافن-فلز واسطه دوکالکوزن مطالعه می شود. در این کار، عملگر مناسب تقارن حفره-ذره معرفی می شود که تحت آن هامیلتونی موثر کم انرژی دیراک-باگالیووف-دوژن ناورادا می باشد. برانگیختگی های الکترون-حفره ابررسانا نشان می دهد که پارامترهای اساسی دینامیکی برهمکنش اسپین-اوربیت $\lambda_I^{A,B}$ و λ_R تاثیر به سزایی در انرژی پاشندگی و گاف موثر ابررسانایی دارد. با در نظر گرفتن تقارن جفت شدگی p -wave در مقایسه با تقارن s -wave شاهد افزایش گاف موثر ابررسانایی هستیم.

Electron-hole excitations in superconducting graphene-TMDC structure

Ebadzadeh¹, Seyydeh Fatemeh ; Goudarzi¹, Hadi ; Khezerlou^{1,2}, Maryam

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

²Post-doctoral researcher, National Elites foundation, Iran

Abstract

We study superconducting order induction by proximity-effect in the graphene-TMDC hybrid structure. We introduce a particle-hole symmetry operators, under which the 8×8 Dirac-Bogoliubov-de Gennes low-energy effective Hamiltonian is invariant. Resulting superconducting electron-hole excitations shows that, the essential dynamical parameters $\lambda_I^{A,B}$ and λ_R affect significantly superconducting excitations, and effective subgap as well. The signature of spin triplet p -wave pairing symmetry in the system is found to increase the subgap superconducting energy, in comparing to s -wave symmetry.

PACS No. 68, 74

ابررسانایی معمول با تقارن جفت شدگی s -wave می توان ابررسانایی با جفت شدگی های غیر معمول مانند تقارن اسپین تکتابی (d -wave) و اسپین سه تایی (p -wave) به ترتیب با عدد کوانتومی اندازه حرکت زاویه ای غیر صفر $l=1$ و $l=2$ القا کرد. القا ابررسانایی با تقارن جفت شدگی p -wave به طور آزمایشگاهی با قرار دادن الکتروود ابررسانا Sr_2RuO_4 در مجاورت این ساختارهای دوبعدی مشاهده شده است [۴].

گاف نواری صفر و جفت شدگی اسپین-مدار ناچیز در گرافن باعث می شود که امکان استفاده از تمام پتانسیل بالقوه آن در دستگاه های الکترونیکی و ترابرد اسپینی وجود نداشته باشد. یکی از ایده آل ترین راهها برای افزایش جفت شدگی اسپین-مدار و

مقدمه

القای خاصیت ابررسانایی از طریق اثر مجاورت در ساختارهای دوبعدی مانند گرافن و تک لایه مولیبدن دی سولفاید موجب ظهور حالت های الکترون-حفره برانگیخته کم انرژی می شود. در سال های اخیر القای ابررسانایی در گرافن و تک لایه مولیبدن دی سولفاید به صورت تئوری و آزمایشگاهی مورد بررسی قرار گرفته است [۳-۱]. با مشاهده پدیده ای القا ابررسانایی در ساختارهای دوبعدی کنار هم قرار گرفتن ابررسانایی و نسبیت به عنوان یک واقعیت فیزیکی اجتناب ناپذیر جلوه می نماید. طیف انرژی ابررسانایی در گرافن و تک لایه مولیبدن دی سولفاید مشابه کلاه مکزیکی می باشد. در این ساختارهای دوبعدی علاوه بر القا

در ساختار هیبریدی گرافن-TMDC همانند گرافن به آسانی می-توان فاز ابررسانایی را از طریق اثر مجاورت در آن القا کرد. این اتفاق زمانی می افتد که توابع موج جفت کوپر ابررسانا معمول به ورقه گرافن-TMDC تونل زنی می کنند و یک جفت کوپر مشابه در آن القا می کنند. الکترون حفره برانگیخته کم انرژی در ساختار ابررسانا گرافن-TMDC توسط معادله دیراک باگالیوباف دی جنیس^۴ به صورت زیر توصیف می شود:

$$H_{DBdG} = \begin{pmatrix} H_{eff}^{K(K')} - \mu_s & \Delta_S(k) \\ \Delta_S^*(k) & \mu_s - H_{eff}^{K(K')} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

μ_s پتانسیل شیمیایی، $\Delta_S(k)$ پتانسیل جفت شدگی ابررسانا است که الکترون و حفره برانگیخته را با هم جفت می کند. $\Delta_S(k)$ در اینجا یک ماتریس قطری می باشد. $H_{eff}^{K(K')}$ هامیلتونی موثر ساختار هیبریدی گرافن-TMDC است. با قطری کردن معادله (۱) می-توانیم انرژی برانگیختگی ناحیه ابررسانا را بدست بیاوریم. ما برای هامیلتونی 8×8 دیراک باگالیوباف دی جنیس (۱) اپراتور تقارن حفره-ذره $(p = (\sigma_x \otimes \sigma_z \otimes \sigma_z)C)$ را معرفی می کنیم که الزاماً هامیلتونی (۱) تحت تقارن حفره-ذره ناوردا است:

$$pH_{DBdG}p^{-1} = -H_{DBdG}^*(-k),$$

که C اپراتور همیوگ مختلط می باشد. اگر پتانسیل جفت شدگی ابررسانا را اسپین سه تایی $(p\text{-wave})$ در نظر بگیریم آنرا با استفاده از بردار $\vec{d}(k)$ به صورت زیر تعریف می کنیم:

$$\Delta_S(k) = [\vec{d}(k) \cdot \mathbf{s}] i s_y,$$

که s_x و s_y ماتریس پائولی هستند و اسپین را نشان می دهند. زمانیکه پتانسیل جفت شدگی $p\text{-wave}$ است $\Delta_S(k)$ یک ماتریس غیر قطری می باشد. در نظر گرفتن هیبریداسیون اوربیتال p گرافن و اوربیتال d فلز واسطه منجر به ظهور جملات جداشدگی زیر شبکه و جفت شدگی اسپین-مدار در هامیلتونی موثر می شود. هامیلتونی موثر ساختار هیبریدی گرافن-TMDC شامل دو بخش

$$\text{اوربیتالی و اسپین-مدار } H_{orb} + H_{SO} \text{ است [۵ و ۹].}$$

هامیلتونی اوربیتالی که در واقع گرافن گافدار را توصیف می کند به صورت زیر می باشد:

$$H_{orb} = v_F \hbar (\tau \sigma_x k_x + \sigma_y k_y) + \Delta \sigma_z, \quad (2)$$

ایجاد گاف نواری در گرافن استفاده از ترکیبات فلزات واسطه دوکالکوژن^۱ (TMDC) همانند (MoS_2) یا (WS_2) به عنوان زیر لایه است [۵]. این ساختارهای فلزات واسطه دوکالکوژن در فرم تک لایه دارای گاف نواری مستقیم و جفت شدگی اسپین-مدار قابل توجهی هستند. ساختار هیبریدی گرافن-TMDC به صورت تجربی و تئوری مورد بررسی قرار گرفته است به عنوان مثال مطالعاتی بر روی خواص دینامیکی و نیمه عمر اسپین در این ساختارها انجام شده است [۶-۷]. جفت شدگی اسپین-مدار در ساختار هیبریدی گرافن-مولیبدن دی سولفاید تک لایه در حدود 1meV است که در مقایسه با گرافن ذاتی بسیار بزرگ می-باشد [۵]. کاهش تقارنهای فضایی و افزایش جفت شدگی اسپین-مدار در اینجا منجر به ایجاد گاف نواری در نقاط دیراک همراه با جداشدگی اسپین در نوارهای ظرفیت و هدایت می شود. در ساختار گرافن-TMDC جفت شدگی اسپین-مدار راشبا^۲ و ذاتی وجود دارد که این جفت شدگیها روی رسانندگی آندریف تاثیر می گذارند به عنوان مثال در سال ۲۰۱۶ یانگ و همکارانش تاثیر جفت شدگی اسپین-مدار راشبا و درسلهاوس^۳ را بر روی رسانندگی آندریف در گرافن مورد بررسی قرار دادند. آنها نشان دادند که اگر تنها جفت شدگی اسپین مدار راشبا وجود داشته باشد رسانندگی آندریف ناشی از جداشدگی کایرالتی افزایش می یابد در حالیکه اگر تنها جفت شدگی اسپین-مدار درسلهاوس وجود داشته باشد رسانندگی آندریف متوقف می شود [۸]. در این مقاله انرژی برانگیخته ساختار هیبریدی گرافن-TMDC در حالتی که ابررسانایی در آن القا شده است را بدست می آوریم و تاثیر جفت شدگیهای اسپین-مدار را بر روی آن مشاهده می کنیم. همچنین تاثیر جفت شدگی ابررسانا اسپین تکتایی $(s\text{-wave})$ و اسپین سه تایی $(p\text{-wave})$ بر گاف موثر ابررسانایی را مورد مطالعه قرار می-دهیم.

فرمالیسم مسئله

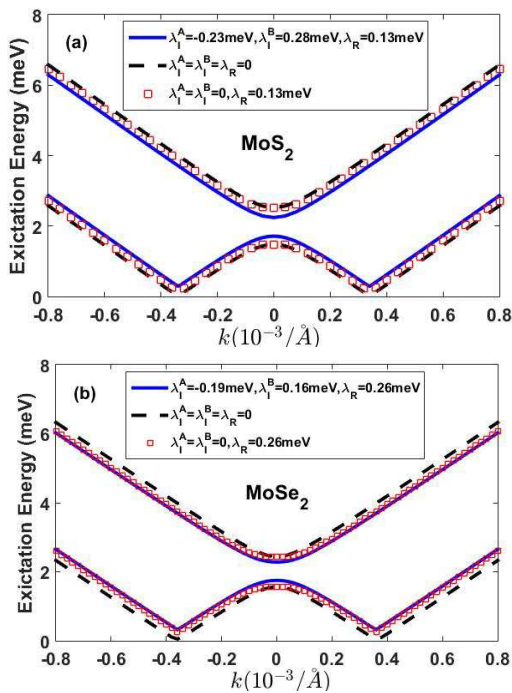
¹ Transition-metal dichalcogenides

² Rashba

³ Dresselhaus

⁴ Bogoliubov-de Gennes

اندازه گاف موثر ابررسانا ناچیز می‌شود. از این رو می‌توان انتظار داشت که در یک اتصال نرمال/ابررسانا بر پایه ساختار هیبریدی گرافن-TMDC انعکاس آندریف در غیاب جملات جفت شدگی اسپین-مدار متوقف شود. بر هم کنش اسپین-مدار راشبا اغلب هیچ تاثیری بر روی انرژی برانگیختگی ابررسانا نمی‌گذارد ولی زمانیکه $\lambda_I^{A,B} = 0$ افزایش گاف دیراک را مشاهده می‌کنیم.



نمودار(۱): قسمت (a) انرژی برانگیختگی حالت ابررسانا ساختار هیبریدی گرافن- MoS_2 و قسمت (b) انرژی برانگیختگی حالت ابررسانا در ساختار هیبریدی گرافن- MoSe_2 را نشان می‌دهد.

در نمودارهای (۲) انرژی برانگیختگی ابررسانا ساختار هیبریدی گرافن-فلز واسطه دو کالکوزن، برای اتم تنگستن W رسم شده است. به دلیل اینکه عدد اتمی W بیشتر از اتم Mo است، جفت شدگی اسپین-مدار افزایش می‌یابد. به همین دلیل در نمودارهای (۲) شاهد افزایش گاف موثر ابررسانایی در مقایسه با نمودارهای (۱) هستیم. در نمودار (۲-a) ساختار هیبریدی ابررسانا گرافن- WS_2 رسم شده است، مشاهده می‌کنیم که در غیاب برهم کنش-های اسپین-مدار گاف دیراک به شدت افزایش می‌یابد. البته اندازه گاف موثر ابررسانایی به صفر نزدیک می‌شود. در نمودار (۲-b) ساختار هیبریدی ابررسانا گرافن- WSe_2 شاهد شکل نوار انعکاسی یا به اصطلاح کلاه کابویی می‌باشیم. این ویژگی باعث می‌شود که

که v_F سرعت فرمی حاملهای بار است و گاف نواری با Δ نمایش داده می‌شود. ماتریس‌های پائولی شبه اسپین است که روی زیر شبکه A و B عمل می‌کنند. $\tau = +(-1)$ اندیس چاهک $K(K')$ است. هامیلتونی اسپین-مدار دارای سه مولفه ذاتی، راشبا و عدم تقارن انعکاسی شبه اسپین $H_{SO} = H_I + H_R + H_{PIA}$ هستند. به ترتیب هامیلتونی‌های جفت شدگی اسپین-مدار ذاتی، راشبا و عدم تقارن انعکاسی شبه اسپین (PIA) را به صورت زیر تعریف می‌کنند:

$$H_I = 1/2(\lambda_I^A(\sigma_z + \sigma_0) + \lambda_I^B(\sigma_z - \sigma_0))\tau\sigma_z, \quad (3)$$

$$H_R = \lambda_R(\tau\sigma_x s_y - \sigma_y s_x),$$

$$H_{PIA} = a/2(\lambda_{PIA}^A(\sigma_z + \sigma_0) + \lambda_{PIA}^B(\sigma_z - \sigma_0))(k_x s_y - k_y s_x).$$

پارامترهای اسپین-مدار ذاتی برای زیر شبکه‌های A و B، λ_R شدت جفت شدگی راشبا و λ_{PIA}^A و λ_{PIA}^B پارامترهای اسپین-مدار PIA هستند. $a = 2.46 \text{ \AA}$ ثابت شبکه گرافن است. هامیلتونی گرافن-TMDC در مقدار پارامترهای دینامیکی برای فلزات واسطه دوکالکوزن مختلف با هم فرق دارند که مقادیر این پارامترها در جدول (۱) آورده شده است.

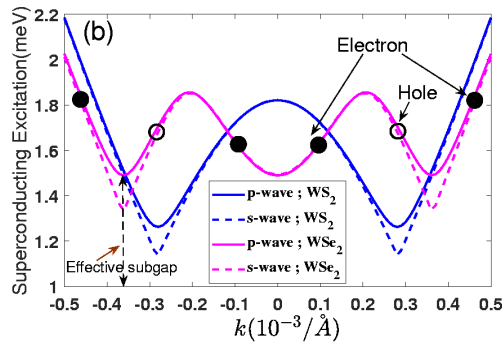
جدول ۱: پارامترهای دینامیکی هامیلتونی گرافن-TMDC [۹]. تمامی مقادیر در جدول بر حسب (meV) می‌باشد.

TMDC	Δ	λ_I^A	λ_I^B	λ_R
MoS_2	۰/۵۲	-۰/۲۳	۰/۲۸	۰/۱۳
MoSe_2	۰/۴۴	-۰/۱۹	۰/۱۶	۰/۲۶
WS_2	۱/۳۱	-۱/۰۲	۱/۲۱	۰/۳۶
WSe_2	۰/۵۴	-۱/۲۲	۱/۱۶	۰/۵۶

نتایج و بحث

با القای ابررسانایی در ساختار هیبریدی گرافن-TMDC از طریق اثر مجاورت، ما رفتار الکترون حفره برانگیخته را در حضور و عدم حضور جفت شدگی‌های اسپین-مدار به طور ویژه برای دو گروه متفاوت فلزات واسطه دوکالکوزن (MoS_2 , MoSe_2) و (WS_2 , WSe_2) مورد بررسی قرار می‌دهیم. در نمودارهای (۱) انرژی برانگیختگی ابررسانا بدست آمده که از هامیلتونی (۱) به ازای فلز واسطه اتم Mo بدست آمده رسم شده است. در غیاب برهم کنش اسپین-مدار راشبا و ذاتی گاف دیراک افزایش می‌یابد و اغلب

در این مقاله ما تاثیر برهم کنش‌های اسپین-مدار روی انرژی برانگیختگی ابررسانا ساختار هیبریدی گرافن-TMDC بررسی کردیم. به دلیل اینکه عدد اتمی فلز واسطه اتم W بیشتر از اتم MO است برهم کنش اسپین-مدار آن بزرگتر است و ما مشاهده می‌کنیم که گاف موثر ابررسانایی در ساختار هیبریدی گرافن-TMDC ابررسانا که فلز واسطه آن اتم W است بیشتر می‌باشد.

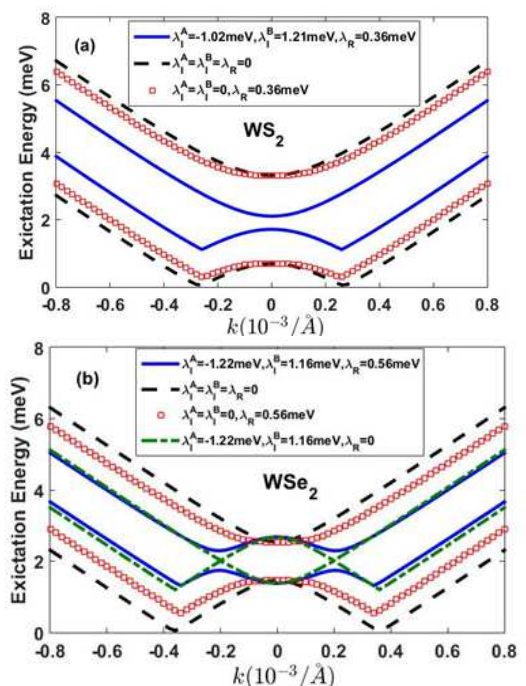


نمودار (۳): مقایسه گاف موثر ابررسانایی در جفت شدگی‌ها s -wave و p -wave در ساختار هیبریدی گرافن- WS_2 و گرافن- WSe_2 را نشان می‌دهد. اندازه گاف دیراک و گاف موثر ابررسانایی با اندازه جملات جفت شدگی اسپین-مدار تنظیم می‌شود. لازم به ذکر است که در ساختار هیبریدی گرافن- WS_2 زمانیکه تمام جملات جفت شدگی اسپین-مدار صفر است اندازه گاف دیراک خیلی افزایش می‌یابد. نکته جالب توجه در ساختار هیبریدی گرافن- WSe_2 ابررسانا ساختار نواری انعکاسی یا کلاه کابویی آن است که در اینجا نیز زمانیکه تمامی جملات جفت شدگی اسپین-مدار صفر باشند ساختار نواری انعکاسی آن از بین می‌رود ولی برخلاف گرافن- WS_2 گاف دیراک ثابت باقی می‌ماند. زمانیکه ابررسانایی با تقارن p -wave در این ساختار دوبعدی القا می‌شود گاف موثر ابررسانایی نسبت به زمان s -wave افزایش می‌یابد.

مرجع‌ها

[۱]. H. B. Heersche et al., Nature **446** (2007) 56; J.T. Ye et al., Science **338** (2012) 1193.
 [۲]. C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **97** (2006) 067007; L. Majidi, H. Rostami, and R. Asgari, Phys. Rev. B **89** (2014) 045413.
 [۳]. M. A. Rahimi, and A. G. Moghaddam, Phys. Rev. B. **95** (2017) 104515.
 [۴]. E. Di Grezia, S. Esposito, and G. Salesi, Phys. Lett. A **373** (2009) 2385.
 [۵]. M. Gmitra and J. Fabian, Phys. Rev. B. **92** (2015) 155403.
 [۶]. Z. Wang et al., Nat. Commun. **6** (2015) 8339; C.-P. Lu et al., Phys. Rev. Lett. **113** (2014) 156804.
 [۷]. A. W. Cummings, PRL. **119** (2017) 206601; L. A. Benitez, Nature Phys. **14** (2018) 303.
 [۸]. Y. Yang et al., Scientific Reports **6** (2016) 29279.
 [۹]. M. Gmitra et al., Phys. Rev. B **93** (2016) 155104.

جفت الکترون-حفره دوبار برای دو بردار موج فرمی متفاوت رخ دهند. بر خلاف ساختارهای هیبریدی گرافن- (WS_2, MoS_2) برانگیختگی حفره در مجاورت بردار موج صفر اتفاق می‌افتد ما در اینجا مشاهده می‌کنیم که برانگیختگی الکترون حول $k=0$ رخ می‌دهد. در ساختار هیبریدی ابررسانا گرافن- WSe_2 در زمانیکه جمله جفت شدگی اسپین-مدار را صفر است نوار ظرفیت و هدایت یکدیگر را در $|k| \cong 0.2$ به یکدیگر می‌رسند. گاف دیراک ساختار هیبریدی گرافن- WSe_2 در مجاورت با ابررسانایی زمانیکه تمامی جملات جفت شدگی اسپین-مدار صفر است ثابت باقی می‌ماند و فقط شکل نوار انعکاسی آن از بین می‌رود.



نمودار (۲): قسمت (a) انرژی برانگیختگی حالت ابررسانا ساختار هیبریدی گرافن- WS_2 و قسمت (b) انرژی برانگیختگی حالت ابررسانا در ساختار هیبریدی گرافن- WSe_2 را نشان می‌دهد.

نمودار (۳) رفتار برانگیختگی‌های ابررسانا با تقارن p -wave را نشان می‌دهد که مشابه رفتار برانگیختگی‌ها با تقارن s -wave است اما گاف موثر ابررسانایی در p -wave افزایش چشمگیر دارد. برهم کنش بین جفت شدگی اسپین-مدار تک لایه TMDC و عدد کوانتومی اوربیتالی غیر صفر ($l=1$) در تقارن p -wave منجر به افزایش گاف موثر ابررسانایی می‌شود.

نتیجه گیری

تأثیر روش ساخت بر خواص ابرسانایی نمونه‌های ابرسانای BSCCO

فخاری اسفریزی، محمد؛ سلامتی، هادی؛ شاکری پور، حمیده؛ شمس الدینی، محسن

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

نمونه‌های ابرسانای BSCCO با استفاده از روش سل ژل آماده‌سازی شدند. در مرحله ساخت، پس از اتمام مراحل تکلیس و آسیاب‌کاری، از دو روش متفاوت (CP) Cold Press و Spark Plasma Sintering (SPS) جهت فشردن نمونه‌ها استفاده شده است. نتایج اندازه‌گیری‌ها از بهتر بودن خواص ابرسانایی نمونه‌های Cold Press نسبت به SPS خبر می‌دهند.

واژه‌های کلیدی: ابرسانای BSCCO، Spark Plasma Sintering (SPS) و Cold Press (CP)

The Effect of fabrication process on the superconductivity of BSCCO superconductors

Fakhari Esferizi, Mohammad; Salamati, Hadi; Shakeripour, Hamideh; Shamsedini, Mohsen

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

The BSCCO superconductivity samples were prepared by sol-gel method. In fabrication process two different methods of Cold Press (CP) and Spark Plasma Sintering (SPS) were used to compress the samples after, the completion of their calcination and grinding. The results of the measurements indicate better superconducting properties in Cold Press samples with respect to the samples prepared by SPS method.

Keywords: BSCCO superconductor, Spark Plasma Sintering (SPS) and Cold Press (CP)

فشرده سازی نمونه‌ها استفاده شده است.

مقدمه

SPS یک روش غیر معمول برای چگالش پودرها است. این فرآیند با برقراری یک جریان الکتریکی مستقیم، از طریق قالب‌های گرافیتی و اعمال فشار بر روی نمونه، انجام می‌پذیرد [۳، ۴]. انگیزه اصلی ما از انجام فرآیند SPS بر روی نمونه‌ها، ذوب کردن فاز ۲۲۱۲ و جلوگیری از تبلور مجدد این فاز، در طی مرحله سردسازی بوده که این فاز به شکل‌گیری بهتر فاز ۲۲۲۳ در مرحله کلوخه‌سازی کمک خواهد کرد [۵].

ساخت و مشخصه‌یابی نمونه‌ها

نمونه‌های حجمی Pb-BSCCO با استفاده از روش سل ژل ساخته شدند. در مرحله‌ی فشرده‌سازی و تولید قرص، از دو روش

یکی از مهمترین پودرهای ابرسانا که در ساخت سیم و نوار ابرسانای نسل اول استفاده می‌گردد BSCCO فاز Bi_{2223} می‌باشد [۱]. در سیستم BSCCO فاز Bi_{2223} به دلیل داشتن دمای گذار بالا $T_c \sim 110 \text{ K}$ ، پایداری شیمیایی بیشتر در مقابل آلودگی‌های محیطی، وابستگی ضعیف ابرسانایی بر استوکیومتری اکسیژن و توانایی نورد شدن به سیم‌ها یا نوارهای طولانی، نسبت به سایر ترکیبات ابرسانای دمای بالا، بیشتر مورد توجه قرار گرفته است [۲]. در این مقاله، به منظور بررسی تأثیر فرآیند ساخت بر خواص ابرسانایی نمونه‌های حجمی BSCCO از دو روش متفاوت Cold Press (CP) و Spark Plasma Sintering (SPS) جهت

کوره برنامه ریزی شده در دماهای متفاوت برای مدت زمان ۴۰ ساعت تحت عملیات حرارتی کلوخه‌سازی قرار گرفتند. (در ساخت محلول سل ژل یک محلول پایه و یک محلول مواد مورد نیاز است. در مرحله ساخت، پودرها فقط با استفاده از محلول مواد که شامل پودرهای مواد اولیه و آب مقطر است آماده‌سازی شدند و میزان PH محلول روی ۶ تنظیم شد).

جدول ۱ روند نماد گذاری سل ژل را به ازای دو فرآیند Cold Press و SPS و همچنین دماهای کلوخه‌سازی متفاوت نشان می‌دهد. به طور مثال SG-CP ۸۲۵: می‌دهد. (SG) Sol Gel, (CP) Cold Press و (۸۲۵) دمای کلوخه‌سازی نمونه را بر حسب درجه سلسیوس نشان می‌دهد.

جدول ۱: نماد گذاری نمونه‌های ساخته شده به روش سل ژل با ترکیب $\text{Bi}_{1/8}\text{Pb}_{1/34}\text{Sr}_{1/91}\text{Ca}_{2/3}\text{Cu}_{3/6}\text{O}_{1+x}$.

نوع فرآیند	دمای کلوخه‌سازی (°C)	کد نمونه
نمونه‌های آماده شده با استفاده از پرس	۸۲۵	Sol Gel - Cold Press - ۸۲۵ (SG - CP ۸۲۵)
هیدرولیکی سرد	۸۳۰	Sol Gel - Cold Press - ۸۳۰ (SG - CP ۸۳۰)
	۸۳۵	Sol Gel - Cold Press - ۸۳۵ (SG - CP ۸۳۵)
نمونه‌های آماده شده با استفاده از فرآیند SPS	۸۲۵	Sol Gel - SPS - ۸۲۵ (SG - SPS ۸۲۵)
	۸۳۰	Sol Gel - SPS - ۸۳۰ (SG - SPS ۸۳۰)
	۸۳۵	Sol Gel - SPS - ۸۳۵ (SG - SPS ۸۳۵)

پذیرفتاری (T_c^{onset}) است که نشان‌دهنده‌ی گذار درون دانه‌ای می‌باشد. در دماهای پایین‌تر، گذار آهسته‌ی ثانویه‌ای در مؤلفه‌ی حقیقی ظاهر شده است که نشان‌دهنده‌ی گذار بین دانه‌ای (T_{cj}) می‌باشد. در همه‌ی این نمونه‌ها گذارهای دو مرحله‌ای، شامل گذار درون دانه‌ای (T_c) و بین دانه‌ای (T_{cj}) در قسمت حقیقی پذیرفتاری قابل مشاهده است. گذار در قسمت حقیقی پذیرفتاری برای نمونه‌های پرس سرد نسبت به نمونه‌های SPS شده تیزتر می‌باشد همچنین جابه‌جایی کمتر مؤلفه‌ی حقیقی پذیرفتاری به ازای میدان‌های بالاتر برای نمونه‌های پرس سرد، بیانگر قوی‌تر بودن اتصالات بین دانه‌ای در این نمونه‌ها می‌باشد. در قسمت برآمدگی یا موهومی پذیرفتاری و در دمای T_p ، قله‌ای در نمودار ظاهر شده که این نشان دهنده شروع نفوذ شار مغناطیسی به داخل ناحیه‌ی بین دانه‌ای است. در نوک قله و در دمای T_p شار کاملاً در نواحی بین دانه‌ای نفوذ کرده است. هر چه قله‌ی ظاهر شده در قسمت موهومی پهن‌تر باشد، نشان دهنده‌ی وجود اتصالات ضعیف بین دانه‌ای، اتلاف انرژی و کم بودن انرژی

متفاوت (Cold Press (CP) و Spark Plasma Sintering (SPS) استفاده شده است. برای ساخت نمونه‌ها از استوکیومتری مشخصه-ی $\text{Bi}_{1/8}\text{Pb}_{1/34}\text{Sr}_{1/91}\text{Ca}_{2/3}\text{Cu}_{3/6}\text{O}_{1+x}$ و مواد اولیه از نیترا‌تها ساخت شرکت مرک با درجه خلوص ۹۹ درصد استفاده شد. پودرها به میزان ۱۵ گرم آماده شدند. تکلیس نمونه‌ها در دمای 790°C برای سه مرتبه در مدت زمان ۶ ساعت انجام شد که در بین مراحل تکلیس، آسیاب‌کاری به صورت دستی برای مدت زمان ۴۵ min انجام شد پس از آن، پودرها به دو قسمت تقسیم شدند؛ یک قسمت برای تولید قرص SPS و بقیه برای تولید تیغه‌هایی با استفاده از دستگاه پرس هیدرولیکی سرد. در مرحله بعد، قرص SPS تولید شده برش داده شد و همراه با نمونه‌های پرس سرد در

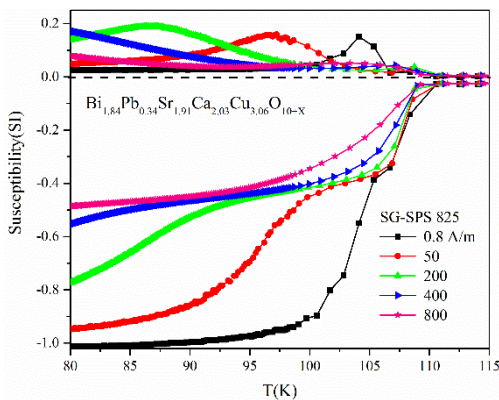
پس از ساخت نمونه‌ها، آنالیز پذیرفتاری مغناطیسی ac نمونه‌ها توسط دستگاه پذیرفتاری سنج ac، مدل ۷۰۰۰، ساخت شرکت Lake Shore اندازه‌گیری شد که در بخش بعدی به آن می‌پردازیم.

نتایج و بحث

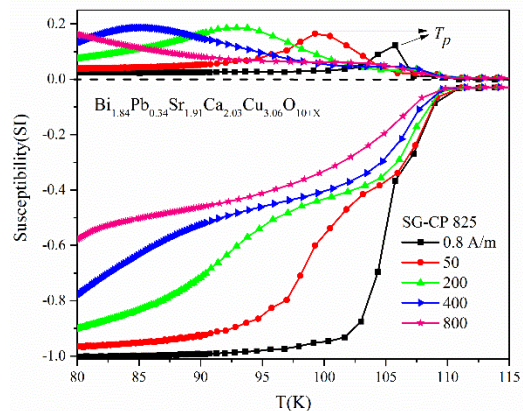
با اندازه‌گیری پذیرفتاری مغناطیسی ac نمونه‌ها در میدان‌های مختلف، می‌توان اطلاعات با ارزشی را در رابطه با خواص ابررسانندگی دانه‌ای و بین دانه‌ای نمونه‌ها به دست آورد. در شکل-های ۱ تا ۶، وابستگی دمایی مؤلفه‌ی حقیقی و موهومی پذیرفتاری مغناطیسی ac نمونه‌ها در فرکانس ۳۳۳ HZ و میدان‌های مختلف نشان داده شده است. از روی این منحنی‌ها پیداست که مؤلفه‌ی حقیقی پذیرفتاری بر حسب دما، شامل گذار دو مرحله‌ای است. مرحله‌ی اول گذار، مربوط به افت نسبتاً تیزی در قسمت حقیقی

میخکوبی شار در نمونه است. در این نمودارها مشاهده می‌کنیم که با افزایش میدان مغناطیسی اعمالی، نفوذ میدان در بین دانه‌های ابررسانا در دماهای پایین‌تری اتفاق می‌افتد و قله‌ی مربوط به قسمت موهومی به سمت دماهای پایین‌تر منتقل شده است. در همه‌ی نمونه‌ها با افزایش میدان، قله‌ی مربوط به اتلاف انرژی در مرزدانه‌ها به سمت دماهای پایین‌تر جابه‌جا می‌شود و میزان جابه‌جایی برای نمونه‌های مختلف متفاوت است. این جابه‌جایی معرف میزان نیروی میخکوبی شار در مرزدانه‌هاست که هر چه میزان این جابه‌جایی کمتر باشد نیروی میخکوبی شار در مرزدانه‌ها بزرگ‌تر خواهد بود با توجه به این مطالب می‌توان گفت که نیروی میخکوبی شار در نمونه‌ی ۸۳۵ SG-CP نسبت به دیگر نمونه‌ها بزرگ‌تر است شکل ۵. در این نمودارها مشاهده می‌کنیم که با افزایش میدان، پهنای منحنی موهومی افزایش می‌یابد که دلیل آن نفوذ شار مغناطیسی در قسمت بیشتری از ماده است. از آنجا که پهن شدن قله‌ی قسمت

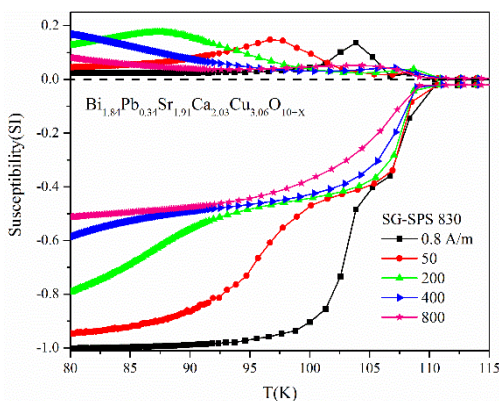
موهومی پذیرفتاری با افزایش دما یکی از نشانه‌های ضعیف بودن اتصالات بین دانه‌ای و نفوذ شار به داخل این نواحی می‌باشد، می‌توان گفت که در نمونه‌های SG-SPS پهن شدن قله‌ی قسمت موهومی بیشتر بوده و اتلاف بین دانه‌ای در این نمونه‌ها نسبت به نمونه‌های پرس سرد بیشتر شده است (قله‌های مربوط به میدان‌های بالاتر برای بعضی از نمونه‌ها جابه‌جایی زیادی داشته‌اند که در محدوده‌ی اندازه‌گیری دستگاه نمی‌باشد). شکل ۷ تغییرات دمایی قسمت موهومی پذیرفتاری مغناطیسی را برای نمونه‌های مختلف در میدان 200 A/m نشان می‌دهد با مقایسه‌ی سطح زیر قله‌ی مربوط به اتلاف بین دانه‌ای (T_p) برای این نمونه‌ها مشاهده می‌کنیم که میزان اتلاف بین دانه‌ای برای نمونه‌های پرس سرد نسبت به نمونه‌های SPS شده کمتر است که این نشان‌دهنده‌ی بیشتر بودن انرژی میخکوبی شار در نمونه‌های پرس سرد است.



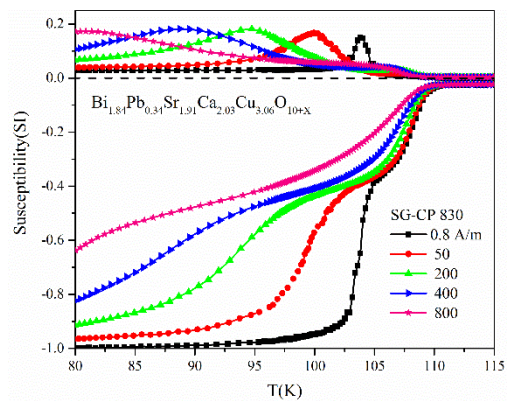
شکل ۲: تغییرات دمایی پذیرفتاری مغناطیسی نمونه ۸۲۵ SG-SPS در میدان‌های مختلف.



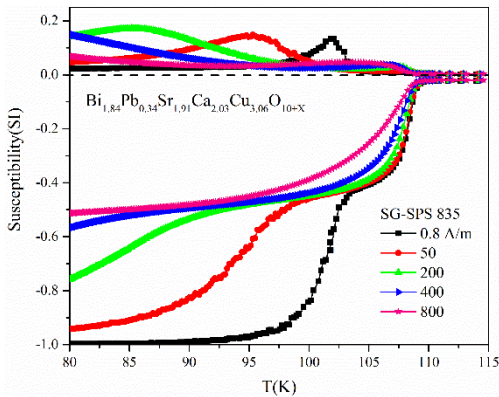
شکل ۱: تغییرات دمایی پذیرفتاری مغناطیسی نمونه ۸۲۵ SG-CP در میدان‌های مختلف.



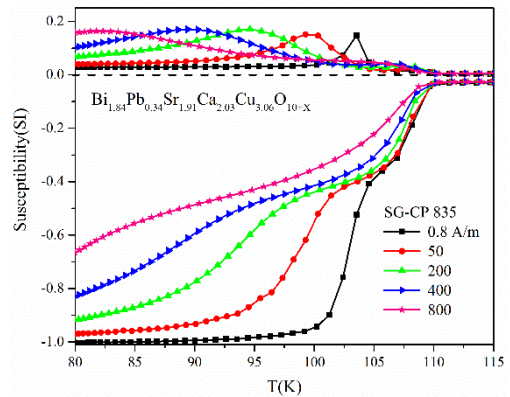
شکل ۴: تغییرات دمایی پذیرفتاری مغناطیسی نمونه ۸۳۰ SG-SPS در میدان‌های مختلف.



شکل ۳: تغییرات دمایی پذیرفتاری مغناطیسی نمونه ۸۳۰ SG-CP در میدان‌های مختلف.



شکل ۶: تغییرات دمایی پذیرفتاری مغناطیسی نمونه SG-SPS ۸۳۵ در میدان‌های مختلف.

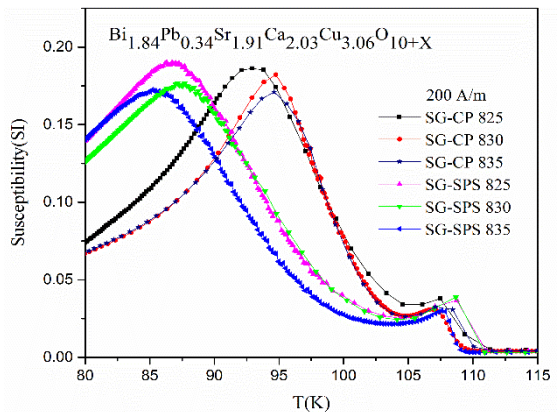


شکل ۵: تغییرات دمایی پذیرفتاری مغناطیسی نمونه SG-CP ۸۳۵ در میدان‌های مختلف.

نسبت به نمونه‌های SPS شده کمتر است. که این نشان‌دهنده‌ی بیشتر بودن انرژی میخکوبی شار در نمونه‌های پرس سرد است.

مراجع

- [۱] کوهانی، حسین؛ فلاح آرائی، حسام؛ سخایی، کمیل و جعفری ندوشن، ناصر "ستز پودر ابرسانای $BSCCO_{2223}$ در مقیاس نیمه صنعتی به دو روش حالت جامد و سل ژل و مقایسه دو روش " بیست و نهمین کنفرانس بین المللی برق، ۱۳۹۳.
- [۲] V. Rouessac, J. Wang, J. Provost, and G. Desgardin, "Rapid synthesis of the Bi (Pb)- 110 $2223K$ superconductor by the EDTA sol-gel method," *Journal of materials science*, vol. ۳۱, pp. ۳۳۸۷-۳۳۹۰, ۱۹۹۶.
- [۳] E. Govea-Alcaide, J. Pérez-Fernández, I. Machado, and R. Jardim, "The spatial distribution of temperature and oxygen deficiency in spark-plasma sintered superconducting Bi-based materials," *Physica B: Condensed Matter*, vol. ۴۵۵, pp. ۳۵-۳۸, ۲۰۱۴.
- [۴] R. Orru, R. Licheri, A. M. Locci, A. Cincotti, and G. Cao, "Consolidation/synthesis of materials by electric current activated/assisted sintering," *Materials Science and Engineering: R: Reports*, vol. ۶۳, pp. ۱۲۷-۲۸۷, ۲۰۰۹.
- [۵] G. R. Rao, U. Varadaraju, S. Venkadesan, and S. Mannan, "Synthesis of (BiPb) $2SrxCaxCu3Oy$ Superconductors by the Sol-Gel Process," *Journal of Solid State Chemistry*, vol. ۱۲۶, pp. ۵۵-۶۴, ۱۹۹۶.



شکل ۷: تغییرات دمایی قسمت موهومی پذیرفتاری مغناطیسی برای نمونه‌های مختلف در میدان ۲۰۰ A/m.

نتیجه‌گیری

در این مقاله تأثیر فرآیند ساخت بر روی خواص ابرسانایی نمونه‌های $BSCCO$ مورد بررسی قرار گرفته است. در مرحله فشرده‌سازی و تولید قرص، از دو روش متفاوت استفاده شده است. در نمودارهای پذیرفتاری مغناطیسی مشاهده شد که در نمونه‌های پرس سرد (CP)، گذار بین دانه‌ای (T_{cj}) گذار تیزتری داشته و گذار به حالت ابرسانایی سریع‌تر اتفاق افتاده است اما برای نمونه‌های SPS شده این گذار پهن‌تر شده است که این نشان دهنده‌ی قوی‌تر بودن اتصالات بین دانه‌ای در نمونه‌های پرس سرد است. در قسمت موهومی پذیرفتاری با مقایسه‌ی سطح زیر قله‌ی مربوط به اتلاف بین دانه‌ای (T_p), برای نمونه‌ها مشاهده شد که میزان اتلاف بین دانه‌ای برای نمونه‌های آماده شده توسط پرس سرد

مطالعه تاثیر پارامترهای ابررسانا بر انرژی کل محدود کننده جریان خطای ابررسانای مقاومتی

فرخیان، محمد؛ حسینی، سید مهدی

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز، بلوار مدرس، فارس

چکیده

برای جلوگیری از آسیب‌های اتصال کوتاه و جریان خطا در سیستم‌های قدرت، استفاده از محدود کننده جریان خطا در سیستم‌های قدرت، نامزد جدی برای قرار گرفتن در شبکه‌های برق هستند. در این مقاله ابتدا با توجه به مدل‌های مقاومتی شناخته شده و با در نظر گرفتن وابستگی زمانی مقاومت تغییرات انرژی نسبت به تغییرات مقاومت محاسبه شده است. سپس با توجه به وابستگی مقاومت به پارامترهایی که به نوع ابررسانا وابسته‌اند به مطالعه تغییرات انرژی نسبت به این پارامترها پرداخته شده است. نتایج نشان می‌دهد که با کاهش مقاومت ماکزیمم و افزایش زمان خاموشی انرژی اتلافی افزایش می‌یابد در حالی که زمان بازیابی تاثیر چندانی در میزان انرژی اتلافی ندارد.

Study of superconducting parameters effect on the total energy of resistance superconducting fault current limiter

Farokhiyan, Mohammad; Hosseini, Seyyed Mehdi

Department of Physics, Shiraz University of Technology, Fars

Abstract

To prevent short circuit and fault current damages in power system, the fault current limiters emerged as predominant candidates. In this paper, by considering the time dependence of the resistance, energy changes are calculated as a function of resistance changes. Then, due to the dependence of the resistance to the parameters that depend on the superconductor material, the energy changes respect to these parameters are studied. The results show that by decreasing the maximum resistance and increasing the quenching time, dissipative energy increases, while recovery time does not change the dissipative energy significantly.

PACS No. 74,80

بالا می‌رود و به همین دلیل محدود کننده‌ی جریان خطای ابررسانا به نوع غیر ابررسانا ترجیح داده می‌شود. بیشتر محدود کننده‌های جریان خطای ابررسانا با استفاده از سیم‌های ابررسانای نوع دوم ساخته می‌شوند و براساس ساختار و عملکرد آنها به دو نوع مستقیم و غیر مستقیم تقسیم می‌شوند. [۲] از انواع محدود کننده جریان خطای ابررسانای غیر مستقیم میتوان به انواع، القایی، ترکیبی و پوسته مغناطیسی اشاره کرد [۳] مهم‌ترین محدود کننده جریان خطای ابررسانای مستقیم را میتوان محدود کننده جریان خطای ابررسانای مقاومتی [۴] نام برد که در این مقاله به مطالعه انرژی اتلافی این نوع از محدود کننده جریان خطا می‌پردازیم.

مقدمه

از بزرگترین مشکلات سیستم‌های قدرت، جریان خطا و اتصال کوتاه هستند که سالانه هزینه‌های زیادی را بر سیستم‌های قدرت تحمیل میکنند. برای جلوگیری از این مشکل، ابزار و وسایل گوناگونی تولید شده‌اند. یکی از این وسایل محدود کننده‌ی جریان خطای ابررسانا نام دارد. با توجه به دو ویژگی مهم ابررساناها، مقاومت الکتریکی صفر و دیامغناطیس کامل بودن و از آنجاییکه گذار به حالت ابررسانایی یک گذار تیز است [۱]، زمانیکه جریان در ابررساناها از حد بحرانی بیشتر میشود، به سرعت به حالت با مقاومت

جزئیات محاسبات

که در رابطه ۲، R_{SFCL} مقاومت ابرسانا توسط رابطه ۱ در زمان‌های مختلف داده شده است و i_{SFCL} با حل معادله دیفرانسیل زیر بدست می‌آید:

$$V \sin(\omega t + \alpha) = i(t)R + L \frac{di(t)}{dt} \quad (۳)$$

که در آن L مولفه القایی اِمپدانس منبع ولتاژ است. با حل رابطه ۳ برای جریان بدست می‌آوریم:

$$i(t) = \frac{V}{Z} \left[\sin(\omega t + \alpha - \phi) - \sin(\alpha - \phi) e^{-\frac{Rt}{L}} \right] \quad (۴)$$

که در آن Z اِمپدانش کل سیستم است که از طریق رابطه ۵ بدست می‌آید:

$$Z = \sqrt{R^2 + L^2 \omega^2} \quad (۵)$$

$$R = R_{source} + R_{SFCL}$$

با جایگذاری رابطه ۴ در رابطه ۲ می‌توانیم انرژی کل را محاسبه کنیم

$$Q = \int \frac{V^2 R_{SFCL}}{Z^2} \left[\sin(\omega t + \alpha - \phi) - \sin(\alpha - \phi) e^{-\frac{Rt}{L}} \right]^2 dt \quad (۶)$$

اگر در رابطه ۵ از بخش میرای جریان صرف نظر کنیم، رابطه ۵ به صورت زیر در می‌آید:

$$Q = \int \frac{V^2 R_{SFCL}}{Z^2} [\sin(\omega t)]^2 dt \quad (۷)$$

مقاومت ابرسانا تا قبل از ورود جریان خطا به سیستم قدرت ثابت است و $R_{SFCL} = R_n$. انرژی کل در حالت عادی و قبل از وقوع خطا توسط رابطه ۷ محاسبه میشود:

$$Q = \int_0^{t_f} R_n \frac{V^2}{Z^2} (\sin(\omega t))^2 dt = R_n \frac{V^2}{Z^2} \left[\frac{t_f}{2} - \frac{\sin(2\omega t_f)}{4\omega} \right] \quad (۸)$$

محدود کننده جریان خطای ابرسانا را می‌توانیم به عنوان یک مقاومت متغیر با زمان در نظر بگیریم. مدل‌های ریاضی متفاوتی برای نشان دادن تغییرات مقاومت نسبت به زمان وجود دارد. رابطه ۱، یک مدل ریاضی برای محاسبه مقاومت در شرایط عادی و هنگام وقوع خطا و زمان بعد از رفع جریان خطا، نشان می‌دهد. در این مدل در شرایط عادی مقاومت کل برابر با مقاومت ابرسانا در حالت ابرسانایی است. هنگامی که جریان خطا وارد مدار می‌شود، مقاومت کل به صورت نمایی به بیشینه مقدار مقاومت ابرسانا در حالت عادی میل میکند و پس از پاکسازی خطا به صورت خطی به مقاومت ابرسانا در حالت ابرسانایی می‌رسد. [۵]

(۱)

$$R_{FCL}(t) = \begin{cases} R_n & t \leq t_f \\ R_{max} (1 - e^{-\frac{t_f - t}{T_Q}})^{0.5} + R_n & t_f \leq t \leq t_c \\ R_{max} (1 - \frac{t - t_c}{T_r}) + R_n & t > t_c \end{cases}$$

که در آن R_n مقاومت در حالت ابرسانایی است که تقریباً از مرتبه ۰/۰۱ اهم است. R_{max} مقاومت نهایی در حالت عادی است، T_Q ثابت زمانی **quench** که تقریباً بین ۱ تا ۲ میلی ثانیه است، t_c و t_f مدت زمان خطا و زمان بازیابی هستند.

در مقاله [۶] انرژی اتلافی محدود کننده جریان خطا با در نظر گرفتن مقاومت ثابت نسبت به زمان، محاسبه شده است. در این قسمت به بررسی تغییرات انرژی کل در بازه‌های زمانی مختلف و با در نظر گرفتن مقاومت متغیر نسبت به زمان می‌پردازیم. انرژی کل یک ابرسانا در مدار الکتریکی را می‌توانیم از طریق رابطه ۲ بدست:

$$Q = \int i_{SFCL}(t)^2 R_{SFCL} dt \quad (۲)$$

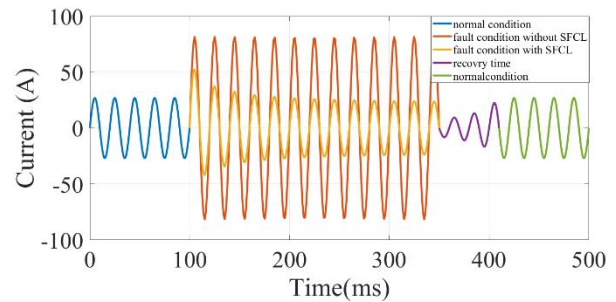
زمانی که جریان خطا وارد سیستم می‌شود، ابرسانا در مدت زمان کمتر از چند میلی ثانیه از حالت ابر رسانایی به حالت با مقاومت بالا می‌رود و به صورت نمایی به بیشینه مقدار مقاومت میل میکند و باعث میشود که جریان خطا محدود شود. برای محاسبه انرژی کل در هنگام ورود جریان خطا به سیستم از قسمت دوم رابطه ۱ و رابطه ۶ استفاده میکنیم:

$$Q = \int_{t_f}^{t_c} \frac{V^2}{Z^2} (\sin(\omega t))^2 \times (R_{\max} (1 - e^{-\frac{t_f-t}{T_Q}})^{0.5} + R_n) dt \quad (9)$$

که جواب معادله ۸ از تابع فوق هندسی ${}_2F_1(a,b;c;d)$ پیروی میکند [۸]. بعد از برطرف شدن خطا، مقاومت ابر رسانا طبق قسمت سوم رابطه ۱ به صورت خطی کاهش می‌یابد و بعد از گذشت زمان $T_r + t_c$ به کمینه مقدار خود می‌رسد.

نتایج و بحث

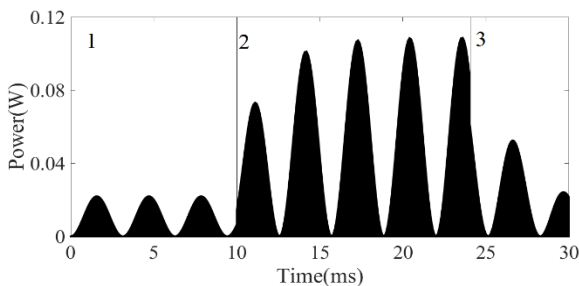
در شکل ۱ نمودار تغییرات جریان برای یک نمونه از این محدود کننده جریان خطا رسم شده است.



شکل ۱: تغییرات جریان نسبت به زمان در شرایط مختلف

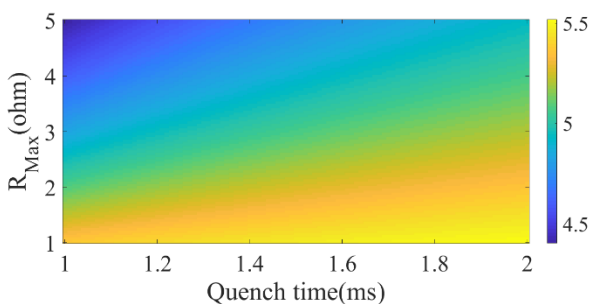
محدود کننده جریان خطایی مطلوب است که جریان محدود شده ای نزدیک به مقدار جریان اولیه داشته باشد.

با استفاده از روابط ۷ و ۸ و ۹، انرژی در شرایط مختلف محاسبه شد. با توجه به ثابت بودن مقاومت در شرایط عادی، انتظار داریم که تغییرات انرژی در بازه زمانی مختلف ثابت باشد. شکل ۲ نمودار توان اتلافی بر حسب زمان برای هر سه حالت شرایط عادی و شرایط



شکل ۲: تغییرات انرژی (ژول) در سه شرایط عادی و خطا و زمان بازایی

و در شکل ۳ تغییرات انرژی خطا نسبت به مقاومت کل ابرسانا و زمان خاموشی (T_Q) در بازه زمانی خطا نشان داده شده است. این شکل نشان می‌دهد که در آن هر چه مقاومت کل کمتر ولی زمان خاموشی بیشتر باشد، اتلاف انرژی بیشتر است. در هنگام خطا، انرژی اتلافی توسط ابرسانا، با مقاومت کل ابرسانا رابطه عکس دارد. پس با افزایش مقاومت کل، انرژی اتلافی کاهش می‌یابد. اما با افزایش زمان خاموشی ابرسانا، به علت اینکه ابرسانا دیرتر به بیشینه مقدار مقاومت خود می‌رسد، انرژی اتلافی افزایش می‌یابد.

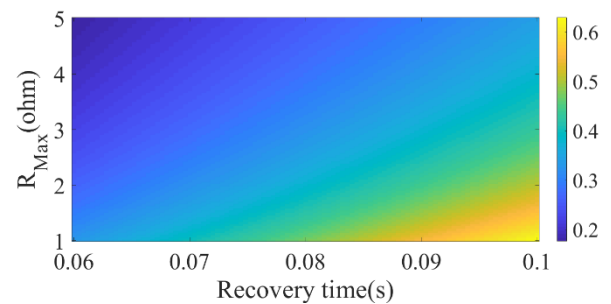


مراجع

- [1] K. Fossheim., and A. Sudbø.. "Superconductivity: physics and applications". John Wiley & Sons.(2005)
- [2] Y. Jiang., S. Dongyuan.,, D. Xianzhong.,, T. Yuejin., and C. Shijie.. "Comparison of superconducting fault current limiter in power system." In 2001 Power Engineering Society Summer Meeting. Conference Proceedings (Cat. No. 01CH37262). IEEE.(2001)
- [3] M. Alam., M. Abido, and I. El-Amin. (2018). "Fault current limiters in power systems: A Comprehensive Review." *Energies* **11**, No. 5 (2018): 1025.
- [4] B. C. Sung., D. K. Park., J. W. Park., and T. K. Ko.. "Study on a series resistive SFCL to improve power system transient stability: modeling, simulation, and experimental verification." *IEEE transactions on industrial electronics* **56**, No. 7 (2009): 2412-2419. (2009)
- [5] S. Alaraifi., M. S. El Moursi., and H. Zeineldin.. "Transient analysis on different types of super conducting fault current limiters." 2013 IEEE Grenoble Conference. *IEEE* .(2013)
- [6] S. M. Blair, C. D. Booth.,N. K. Singh., G. M. Burt., and C. G. Bright. (2011). "Analysis of energy dissipation in resistive superconducting fault-current limiters for optimal power system performance." *IEEE Transactions on Applied Superconductivity* **21**, No. 4 (2011): 3452-3457.
- [7] T. Hoshino., I. Muta.,T. Nakamura., K. M. Salim., and M. Yamada. (2005). "Non-inductive variable reactor design and computer simulation of rectifier type superconducting fault current limiter." *IEEE transactions on applied superconductivity* **15**, No. 2 (2005): 2063-2066.
- [8] F. Beukers., "Gauss" hypergeometric function. In Arithmetic and geometry around hypergeometric functions" 23-42. Birkhäuser Basel. (2007)

شکل ۳: تغییرات انرژی (ژول) نسبت به مقاومت کل و افزایش زمان خاموشی T_Q

بعد از رفع خطا و کاهش مقاومت، ابرسانا با گذشت زمان بازیابی T_R به حالت با مقاومت صفر برمی‌گردد و تغییرات انرژی اتلافی ابرسانا در این بازه زمانی نسبت به مقاومت کل ابرسانا و زمان بازیابی در شکل ۴ نشان داده شده است. از این شکل دیده می‌شود که با افزایش مقاومت کل همانند قسمت قبل باعث کاهش انرژی اتلافی می‌شود، اما با افزایش زمان بازیابی به علت اینکه ابرسانا دیرتر به حالت با مقاومت صفر می‌رسد و باعث اتلاف انرژی می‌شود.



شکل ۴: تغییرات انرژی (ژول) نسبت به مقاومت کل و زمان بازیابی

نتیجه گیری

تغییرات جریان نسبت به تغییرات مقاومت و تغییرات انرژی نسبت به تغییرات مقاومت و تغییرات پارامترهای ابرسانایی برای بازه زمانی خطا و بازه زمانی بازیابی بررسی و محاسبه شد. در هنگام خطا، اتلاف بهینه انرژی توسط ابرسانا، مساله مهمی است. اگر اتلاف انرژی کم باشد جریان خطا به میزان کم محدود می‌شود که باعث آسیب رسیدن به وسایل می‌شود و اگر اتلاف انرژی زیاد باشد با افت ولتاژ روبه رو هستیم که مشکلات خود را به دنبال دارد. با توجه به وابستگی انرژی به پارامترهای ابرسانایی و محاسبات انجام شده، می‌توانیم ابرسانای مناسب جهت بهینه اتلاف انرژی را انتخاب کنیم.

بررسی ساختار و خواص ابرسانایی $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ در اثر آرایش نانو ذرات غیر مغناطیسی دی

اکسید قلع

قائدشرفی ، نجمه ؛ شمس ، غلامعباس

گروه فیزیک، واحد شیراز، دانشگاه آزاد اسلامی، شیراز، ایران

چکیده

در این تحقیق، اثر آرایش نانو ذرات فلزی و غیر مغناطیسی SnO_2 بر ساختار کریستالی و خواص ابرسانایی سرامیک $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (Y-123) به طور سیستماتیکی انجام گرفته است. نمونه ها با استفاده از روش واکنش حالت جامد قراردادی ساخته و با مقادیر مختلف نانو ذرات دی اکسید قلع به ترتیب ۰/۰، ۰/۲، ۰/۶ درصد وزنی (wt %) ترکیب شدند. از پراش پرتوی X (XRD)، با تکنیک پالایش Rietveld و تجزیه و تحلیل SEM برای مشخص کردن ساختار کریستالی نمونه ها و توزیع نانو ذرات فوق در طول مرز دانه های Y-123 استفاده شده است. نتایج بیانگر این مطلب هستند که، پارامترهای شبکه کریستالی (a,b,c) نمونه ها که با استفاده از نرم افزار MAUD ظرفیت سازی شد، با افزایش میزان آرایش، تغییرات کاهشی قابل توجهی را نسبت به نمونه خالص از خود نشان نمی دهند. نمودارهای مقاومت ویژه بر حسب دما نیز نشان می دهند، که دمای گذار این نمونه ها با افزایش میزان ناخالصی SnO_2 نسبت به نمونه ی خالص (Y-123) کاهش داشته است، در حالی که در نمونه های آرایش یافته با افزایش ناخالصی ها دمای گذار آنها بهبود می یابد.

The Effect of Doping Nonmagnetic Nano Particles Tin Dioxide on The Structure and Superconducting Properties of $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$

Ghaedsharafi, Najme ; Shams, GholamAbbas

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

Abstract

In this research, the effect of Tin dioxide nano particles and either nonmagnetic SnO_2 doping on the crystal structure and superconducting properties of $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (Y-123) ceramics was systematically carried out. Samples were prepared using conventional solid state reaction method and combined with different amounts of SnO_2 nanoparticles 0.0, 0.2, 0.6 wt%. X-ray diffraction (XRD) with the Rietveld refinement technique and SEM analysis were used to characterize the samples crystal structure and distribution of SnO_2 nanoparticles along the Y-123 grain boundaries. The crystal lattice parameters (a,b,c) have no significant changes related to the pure Y-123. The temperature dependence of resistivity, is shown that by increasing of SnO_2 doping, the superconducting transition temperatures decreased compare to the pure sample, while the critical temperature for the higher doped sample with SnO_2 improved in comparison with the lower doped one.

PACS No()

تغییر در استوکیومتری در یک خانواده از ابرساناهای دمای بالا درصدد بهبود دمای گذار در همان خانواده می باشند. بنابراین در میان ابرساناهای کوپه ای، ابرسانای $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ به دلیل دمای بحرانی و چگالی جریان بحرانی بالایی که دارا می باشد، مناسبترین ماده جهت بکارگیری در دمای ۷۷ کلوین (دمای نیتروژن مایع) است، که دمای گذار این ترکیب شدیداً به ساختار بلوری آن بستگی

مقدمه

با توجه به اینکه دست یابی به ابرسانایی دمای اتاق و فهم و سازوکار ابرسانایی در حالت ابرسانش از مهمترین اهداف محققین در این زمینه است، دانشمندان با اعمال موارد مختلف همانند تغییر در استوکیومتری اکسیژن نمونه، آرایش های مختلف،

شد و در ادامه برای ۱۲ ساعت در دمای فوق قرار داشته و در ادامه با آهنگ ۱۵۰ درجه‌ی سانتیگراد بر ساعت تا دمای ۹۳۰ درجه‌ی سانتیگراد کوره گرم شد و به مدت ۲۴ ساعت قبل از رسیدن به دمای اتاق در این دما کشته‌سازی انجام گرفت و در آخر با آهنگ ۶۰ درجه‌ی سانتیگراد بر ساعت نمونه به دمای محیط رسید. برای افزایش همگنی پودرهای پخته شده، آنها مجدد در هاون دستی به مدت ۳۰ دقیقه سائیده شدند، تا اندازه‌ی ذرات پودر کمتر از ۱۰ میکرومتر شود. پودرهای به دست آمده در دستگاه پرس سرد دوباره به شکل قرص درآمدند. سپس قرص‌ها درون کوره در بوتله‌های مخصوص با روند مشخصی تحت عملیات سخت‌سازی قرار گرفتند. برای تعیین اکسیداسیون کامل نمونه‌ها، یک باز پخت اضافی در دمای ۵۲۵ درجه سانتیگراد تحت اکسیژن انجام گرفت و سپس آنها تا دمای اتاق آهسته سرد شدند. پس از ساخت نمونه‌ها ی ابررسانا، آزمایش اثر مایسنر در مورد آنها انجام شد و تمامی نمونه‌ها این اثر را نشان دادند.

۲- پراش پرتوی X متعلق به نمونه‌های $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ آلاییده با نانوذرات SnO_2 توسط دستگاه XRD (مدل Bruker D8 Advance) اندازه‌گیری شد، سپس برای تشخیص مورفولوژی نمونه‌ها از میکروسکوپ الکترونی روبشی (مدل EM 3200-KYKY) استفاده گردید.

نتایج و بحث

شکل (۱) پراش اشعه ایکس نمونه‌های Y-123 آلاییده با نانوذرات مختلف SnO_2 با اندیس‌های میلر صفحات مربوطه در نمونه خالص را نشان می‌دهد. تجزیه و تحلیل‌ها نمایانگر این است که به طور برجسته یک ساختار تک فاز پروسکایت از YBCO با تقارن P_{mmm} که دارای مقادیر کمی فازهای ثانویه است، وجود دارد. لازم به ذکر است که هیچ قله‌ای مربوط به SnO_2 با ترکیباتی بر پایه Sn در الگوهای پراش پرتوی X وجود ندارد. قله اصلی در زاویه‌ای در حدود ۳۳ درجه قرار دارد، که قله مذکور در نمونه آلایش یافته ۰/۶ نسبت به بقیه نمونه‌ها، تیزتر و بلندتر و دارای پهنای کمتری می‌باشد. همچنین شایان ذکر است که قله‌های نمونه‌های آلایش یافته نسبت به نمونه خالص به مقدار جزئی

درد. [۱]. حال با توجه به اینکه عوامل بسیاری در ترکیب‌های با پایه Y وجود دارد که خواص مختلفی را از خود نشان می‌دهند، از این رو محققین با افزودن ناخالصی‌هایی همانند Ag، Al_2O_3 ، CeO_2 ، [۲]، [۳]، [۴] و موارد دیگر، درصد بهبود خواص الکتریکی و حرارتی ابررساناهای دمای بالا هستند. در این مقاله ما ترکیب جدیدی از ابررسانای دمای بالا با پایه Y-123 را با افزودن نانوذرات فلزی دی‌اکسید قلع (SnO_2) با درصدهای وزنی ۰/۰، ۰/۲، ۰/۶، با روش استاندارد حالت جامد ساختیم، با توجه به اینکه نمونه مورد تحقیق با درصد وزنی ۰/۲ با روشهای ذوب، ۱- میکروموج و ۲- رشد بافت سریع مورد بررسی قرار گرفته است [۵ و ۶]، همچنین آلایش نانوذرات فلزی و غیر مغناطیسی SnO_2 در ابررسانای سرامیکی (Y-123) با درصدهای وزنی متفاوتی تا ۰/۵ (wt%) مجدد توسط آ.ا.ج. سالاما و همکارانش [۷ و ۸] آماده و مورد تحقیق انجام گرفت، اما در همه موارد تا به حال بهبودی در دمای گذار آن نمونه‌ها نسبت به نمونه خالص مشاهده نشده است. بنابراین در این پژوهش تلاش ما بر آن بود تا بتوانیم خواص ساختاری و الکتریکی SnO_2 آلاییده شده (با درصدهای وزنی ذکر شده) در Y-123 را مورد تحقیق و نیز نتایج بدست آمده را در مقایسه با کارهای انجام گرفته مورد بحث قرار دهیم، که در این رابطه نمودارهای مقاومت ویژه بر حسب دما و پراش پرتوی X و تجزیه و تحلیل SEM بسیار راه‌گشا بودند.

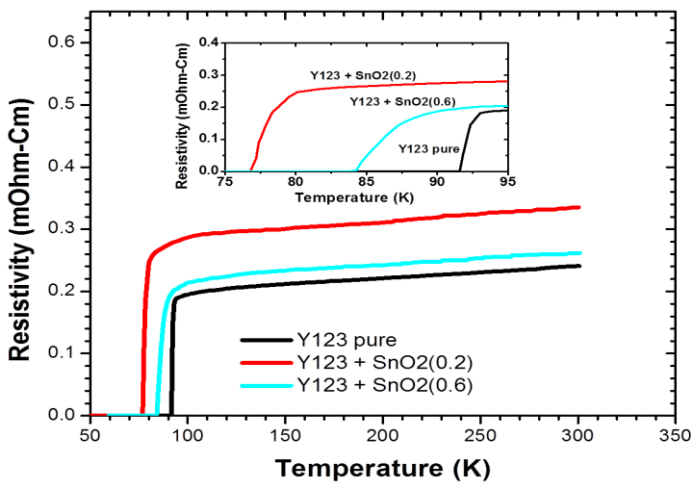
جزئیات آزمایش

۱- در ابتدا ترکیبات پایه از پودرهای اکسیدی Y_2O_3 ، $BaCO_3$ و CuO با خلوص (۹۹/۹ درصد) تهیه شدند، سپس با اضافه کردن پودر نانو ذرات دی‌اکسید قلع (اندازه ۳۵-۵۵ نانومتر) با درصدهای وزنی متفاوت به ترتیب ۰/۰، ۰/۲، ۰/۶، سه نمونه از Y-123 با روش واکنش حالت جامد با استوکیومتری مناسب ساخته شدند. بدین ترتیب که پودرهای آماده شده به وسیله هاون دستی آسیاب شدند و سپس در حضور مایع اتانول درون قالب‌هایی تحت فشار ۴۰۰ بار به صورت قرص‌هایی با قطر ۳۰ و ضخامت ۴ میلی‌متر درآمدند. در فرآیند تکلیس در نخستین مرحله برنامه کوره با آهنگ ۲۰۰ درجه‌ی سانتیگراد بر ساعت تا ۷۵۰ درجه‌ی سانتیگراد، گرم

جدول ۱: پارامترهای ساختاری شبکه نمونه های Y-123 با مقادیر مختلف آرایش نانو ذرات SnO₂

Y ₁₂₃ + x wt.% SnO ₂					
x	a (Å)	b (Å)	c (Å)	Volume of cell (Å ³)	$\delta = \frac{b-a}{b+a}$
۰/۰	۳/۸۲۸۱	۳/۸۹۲۸	۱۱/۶۸۸۰	۱۷۴/۱۷۴	۰/۰۰۸۳۸
۰/۲	۳/۸۲۳۷	۳/۸۸۷۸	۱۱/۶۷۹۸	۱۷۳/۶۳۵	۰/۰۰۸۳۰
۰/۶	۳/۸۲۵۷	۳/۸۸۷۱	۱۱/۶۷۹۸	۱۷۳/۶۹۷	۰/۰۰۷۹۵

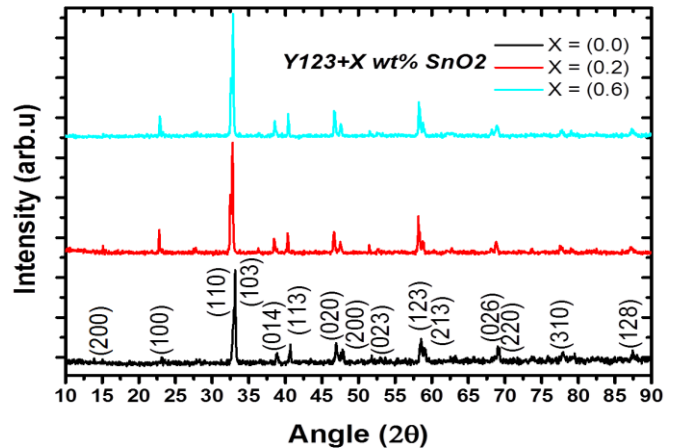
همان طوری که در شکل (۲) نمایان است با افزودن نانو ذرات دی اکسید قلع دمای گذار (T_c) این نمونه ها نسبت به نمونه ی ابررسانای (Y-123) کاهش داشته است. که می تواند بیانگر کسری از اشغال Sn در جایگاه Cu(+2) در صفحات CuO₂ نسبت به نمونه خالص Y-123 باشد [۸]. همچنین ممکن است ناشی از نزدیکی شعاع یونی Sn⁴⁺ به Cu³⁺ نیز باشد. قابل ذکر است در نمونه ی آرایش یافته ۰/۶ دمای گذار بالاتری نسبت به نمونه ی آرایش یافته ۰/۲ مشاهده می گردد (شکل ۲)، که مشابه کارهای آ.اچ.سالاما و همکارانش می باشد [۷].



شکل ۲: وابستگی مقاومت ویژه به دمای نمونه های Y-123 با آرایش مقادیر مختلف نانو ذرات SnO₂

پهنای گذار با افزایش غلظت آرایش ها نسبت به نمونه خالص مقداری افزایش می یابد (جدول (۲))، که ممکن است به دلیل وقوع تدریجی فاز اضافی غیر ابررسانایی و اثر ناهمگنی میکروسکوپی باشد. پهنای گذار نمونه ها در جدول (۲) نسبت به آزمایشهای آ.اچ.سالاما نتایج مطلوبتر با عرض کمتری را دارد، که نشان می دهد نمونه ها در این کار دارای کیفیت بالاتری بوده اند.

جابه جایی داشته اند که به نظر می رسد به دلیل ورود نانو ذرات SnO₂ به شبکه کریستال Y-123 باشد که سبب تغییرات ساختاری و همچنین ابعادی شده است.



شکل ۱: طیف کریستالی کل نمونه ها بر اساس میزان آلودگی (x)

مشخصات ساختار بلوری برای نمونه های آلوده با نانو ذرات دی اکسید قلع در جدول (۱) با نرم افزار ریتولد گردآوری شده است. بر اساس آن اگرچه پارامتر شبکه a نسبت به نمونه خالص تقریباً ثابت می ماند، اما پارامتر c شبکه با افزایش آرایش نانو ذرات SnO₂ به میزان اندکی به اندازه ۰/۰۰۸۲ کاهش می یابد، مقدار c کوچکتر می تواند مسئول تغییر تبادلی بین لایه ای باشد و در نتیجه می تواند خواص ابررسانایی را بهتر فراهم کند. همچنین در جدول (۱) ملاحظه می گردد، اختلاف بین ثابت های شبکه a و b با افزودن آرایش SnO₂ مقدار کمی کاهش می یابد و این باعث می شود که درجه اورترومبیسیتی نمونه های آرایش یافته با افزایش میزان ناخالصی کاهش داشته باشد و بیشترین مقدار اورترومبیسیتی مربوط به نمونه ی خالص است که می تواند نتیجه ی بیشترین مقدار اکسیژن در جایگاه O(1) در زنجیره ی CuO (در طول محور b) باشد، که با نتایج تحقیقات گروه آ.اچ.سالاما [۷] مطابقت دارد. در شکل (۲) وابستگی دمایی مقاومت ویژه نمونه های YBCO با آرایش مقادیر مختلف نانو ذرات SnO₂ نشان داده شده است. با توجه به اینکه ناحیه ی نرمال این منحنی ها عمدتاً نمایانگر رفتار فلزی هستند (بالای 2T_c) که از رابطه ای خطی در دمای اتاق پیروی می کنند. اما دومین منطقه به علت وجود جفت های کوپر سهمی از نوسانات رسانایی را دارا می باشد.

جدول ۲: دمای بحرانی و پهنای گذار $Y_{123} + x \text{ (wt.%) SnO}_2$

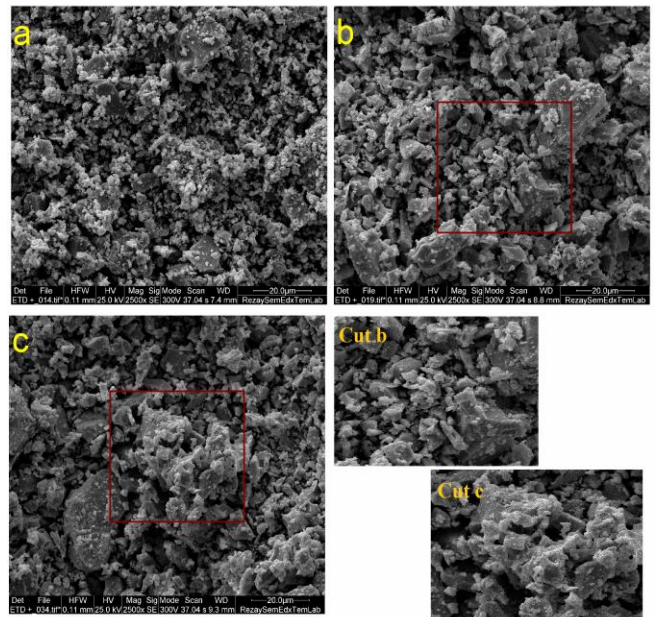
Samples	x	$T_{c(\rho=0)}$ (K)	$T_c(K)$	ΔT
$Y_{123} + x \text{ (wt.%) SnO}_2$	۰/۰	۹۱/۵۸	۹۱/۸۰	۰/۸۸
	۰/۲	۷۷/۲۱	۷۷/۳۳	۱/۲
	۰/۶	۸۴	۸۴/۱۳	۱/۱۲

میکروسکوپی در ترکیب باشد. در همین راستا پارامترهای شبکه کریستالی تغییرات کاهشی چشمگیری را نسبت به نمونه خالص از خود نشان نمی دهند. همچنین اورترومبیسیتی کاهش می یابد زیرا که اختلاف بین پارامترهای شبکه **a** و **b** کاهش می یابد و کاهش مقدار اکسیژن نیز ممکن است دلیل دیگری باشد. از طرفی دیگر احتمال دارد، با افزایش آلایش ها تغییرات محور **a** آهسته تر شود و تغییرات در حجم سلول واحد باعث شود که **Sn** با ساختار کریستالی ترکیب شود. از نمودارهای مقاومت ویژه بر حسب دما مشخص می شود که مقاومت ویژه در نمونه های آلایش یافته، نیز دارای شیب مثبت است و با افزایش ناخالصی کاهش می یابد. در حالی که دمای گذار آنها در نمونه ی با درصد وزنی بیشتر بهبود یافته است. قابل ذکر است تفاوت در کاهش دمای گذار برای نمونه های آلایش یافته در مقایسه با Y_{123} خالص ممکن است در نتیجه افزایش مقاومت اتصالات ضعیف جوزفسون یا تشکیل فازهای ثانویه ی جزئی در فرایند جامد سازی باشد. بنابراین اعتقاد ما بر این است که می توان با کار بر روی درصدهای وزنی دیگر SnO_2 یک حالت بهینه یافت که در آن T_c بهبود بیشتری نسبت به نمونه آلاییده با غلظت ۰/۶ داشته باشد.

مرجع ها

- [۱] اخوان، محمد، یمنی، زهرا سادات؛ «پیشرفتهای ابررسانایی دمای بالا» موسسه انتشارات علمی دانشگاه صنعتی شریف؛ صفحه ۱۴۱ تا ۲۲۷.
- [2] B. A. Malik, M. A. Malik, R. Meena, and K. Asokan, "Effect on critical current density of YBCO by the addition of Ag. Results and Discussion"; (2015).
- [3] X. Cui, G. Liu, J. Wang, Z. Huang, Y. Zhao, B. Tao, and Y. Li, "Enhancement of critical current density of $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ thin films by nanoscale ceo_2 pretreatment of substrate surfaces"; Physica C, Superconductivity, Vol. 466, No. 1-2 (2007) 1-4.
- [4] M. S. M. Suan and M. R. Johan, "Synthesis of Al_2O_3 nanoparticles highly distributed in $YBa_2Cu_3O_7$ superconductor by citrate-nitrate auto-combustion reaction"; Physica C, Superconductivity, Vol. 492, (Sep 2013) 49-54.
- [5] S. Msrinel, G. Desgardin, "Effect of nano-particles SnO and CeO addition on the Y_{123}/Y_{211} sample grown in a microwave furnace"; Journal of the European Ceramic Society, No. 21 (2001) 1919-1923.
- [6] Z. He, T. Habisreuther, G. Bruchlos, D. Litzkendorf, and W. Gawalek, "Investigation of microstructure of textured YBCO with addition of nanopowder SnO_2 "; Physica C, Superconductivity, Vol. 356, No. 4 (Aug 2001) 277-284.
- [7] A. H. Salama, M. El-Hofy, Y.S. Rammah and M. Elkhatib; "Pinning Behaviour of Nano Nonmagnetic CuO , SnO_2 and Magnetic Mn_3O_4 Substitutions in YBCO Bulk Superconductors"; InterCeram: International Ceramic Review. 65, (April 2016) 017-024.
- [8] A. H. Salama, M. El-Hofy, Y.S. Rammah and M. Elkhatib; "Effect of Magnetic and Nonmagnetic Nano Metal Oxides Doping on the Critical Temperature of a YBCO Superconductor"; Adv. Nat. Sci.; Nanosci. Nanotechnol. 6 (Dec 2015).

برای تشخیص مورفولوژی نمونه ها از میکروسکوپ روبشی استفاده گردید (شکل ۳)، که میکرو ساختار نمونه های ساخته شده با نانوذرات SnO_2 آلاییده شده را (با بزرگی $2.5kx$) به نمایش می گذارد و بیانگر این می باشد که نانوذرات دی اکسید قلع تمایل دارند با افزایش مقدار آلایش، در برخی نقاط بین دانه ها جمع شوند و باعث تشکیل منطقه ای غنی تر از **Sn** شوند (مربع قرمز رنگ در شکل (۳)) و به نظر می رسد همانند یک نقص بر پارامتر های کریستالی تاثیر می گذارند و منجر به کاهش دمای بحرانی نسبت به نمونه خالص می شوند.



شکل ۳: تصاویر SEM نمونه های Y_{123} در اثر آلایش نانوذرات دی اکسید قلع با مقادیر: (a) (۰/۰)، (b) (۰/۲)، (c) (۰/۶)، درصد وزنی

نتیجه گیری

در این پژوهش آلایش نانو ذرات غیر مغناطیسی دی اکسید قلع با غلظت های متفاوت به ابررسانای Y_{123} ، سبب تغییرات ساختاری و همچنین ابعادی در خواص تراپردی الکتریکی شده است که می تواند ناشی از ناهمگنی های مزوسکوپی و

تعیین دمای کاری بهینه برای مگنت ابررسانای دمای بالا

عبداللهی قهی، نیره^۱؛ عبداللهی درگاه، مهناز^۱

^۱پژوهشکده فیزیک پلاسما و گداخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی

چکیده

در این مقاله، برای بهینه‌سازی دمای کاری مگنت‌های ابررسانای دمای بالا (HTS) یک طرح حرارتی ارائه شده که نتیجه‌ی آن دست‌یابی هم‌زمان به مگنت‌هایی با ابعاد کوچک و مصرف توان پایین‌تر است. در دماهای پایین، به دلیل عملکرد ضعیف میرد توان سرماسازی افزایش می‌یابد. مدل‌سازی و تحلیل اثر ابعاد مگنت روی محاسبات اتلاف نشان می‌دهد که برای دمای کاری، مقدار بهینه‌ای وجود دارد که توان مصرفی را کمینه می‌سازد. این توان بهینه به شدت به دمای حایل حرارتی وابسته است.

Determination of Optimum Operating Temperature for HTS Magnet

Abdollahi Ghahi, Nayereh¹; Abdollahi Dargah, Mahnaz¹

¹Plasma Physics and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI Tehran – Iran: nayereh_abdollahi@yahoo.com

Abstract

In this paper, a thermal design is proposed to optimize the operating temperature of high temperature superconducting (HTS) magnets, which results in a simultaneous reduction in the magnets with small dimensions and lower power consumption. At low temperatures, cooling power increases due to poor cryocooler performance. The modeling and analyzing of the effect of magnets on loss calculations show that there is an optimal temperature that minimizes power consumption. This optimum power is strongly dependent on the temperature of the thermal shield.

PACS No. 70.74

محاسبه‌ی اتلاف حرارتی متناظر با ابعاد مگنت

در مگنت‌های ابررسانای DC، اتلاف در تجهیزات سرماسازی با سه سازوکار فیزیکی متفاوت ایجاد می‌شود؛ رسانش حرارتی از طریق نگره‌دارنده‌های مکانیکی، تابش حرارتی، انتقال گرما از طریق هادی-های جریان.

رسانش نگره‌دارنده: رسانش حرارتی از طریق نگره‌دارنده با سطح مقطع A_s از رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود:

$$Q_k(T_L) = \frac{A_s(T_L)}{L_s} \int_{T_L}^{T_H} k_s(T) dT \quad (1)$$

که در آن $k_s(T)$ رسانندگی حرارتی، L_s طول نگره‌دارنده، T_L دمای جسم سرد و T_H دمای اتاق است. سطح مقطع نگره‌دارنده متناسب با جرم مگنت، M ، است به طوری که:

مقدمه

پس از کشف ابررسانای دمای بالا، به دلیل سرماسازی آسان و مقرون به صرفه‌ی آن با نیتروژن مایع این نوع ابررسانا مورد توجه قرار گرفت، با وجود این به سرماسازی در دماهای کمتر از ۷K نیاز است تا به چگالی جریان بزرگ‌تر در ابررساناهای دمای بالا و در نتیجه به کاهش قابل ملاحظه در اندازه و وزن مگنت دست یابیم [۱]. میزان اتلاف حرارتی توسط دمای کاری و ابعاد مگنت تعیین می‌شود. برای رسیدن به سرماسازی زیر دمای ۷K می‌توان از چرخه‌ی بسته‌ی میرد استفاده کرد. در این مقاله، دمای سرماسازی بهینه را در شرایط پایا به منظور کمینه‌شدن توان مصرفی پیدا خواهیم کرد.

قانون Wiedemann-Franz فقط تابعی از جریان کاری و دو دمای انتهایی است.

$$Q_I(T_L) = I\sqrt{L_0(T_H^2 - T_L^2)} \quad (6)$$

که در آن L_0 ، ثابت لورنتز است [۴]، [۵].

محاسبه‌ی توان سردسازی

یک روش مؤثر برای صرفه‌جویی توان ورودی در سردسازی، استفاده از حایل حرارتی با دمای میانی T_I است. تخمین توان ورودی واقعی در مبرد دو مرحله‌ای نسبت به تک‌مرحله‌ای پیچیده‌تر است. فرض می‌کنیم که توان کل برابر با جمع توان حایل حرارتی، W_I ، و توان سردسازی مگنت، W_L ، است:

$$W(T_I, T_L) = W_L(T_I, T_L) + W_I(T_I, T_L) \quad (7)$$

اتلاف سردسازی در دمای T_L ناشی از رسانش نگه‌دارنده، تابش و هادی‌های جریان با جایگزین کردن T_H توسط T_I در معادلات (۱) و (۴) و (۶) به دست می‌آید. توان مورد نیاز برای اتلاف در دمای T_L عبارت است از:

$$W_L(T_I, T_L) = \frac{1}{FOM_L} \left(\frac{T_H}{T_L} - 1 \right) [Q_{k1}(T_I, T_L) + Q_{r1}(T_I, T_L) + Q_{l1}(T_I, T_L)] \quad (8)$$

که در آن اندیس ۱، نشان‌دهنده‌ی اتلاف‌های حرارتی از T_I به T_L است. در این جا بازدهی کارنوی مبرد را $FOM_L = 1$ در نظر می‌گیریم. سه جمله‌ی اول در معادله‌ی بالا کمتر از مقدار به دست آمده‌اش در سردسازی یک‌مرحله‌ای است، زیرا T_I کمتر از T_H می‌باشد. به‌طور مشابه، نشت حرارتی از دمای اتاق به حایل با جایگزین کردن T_I توسط T_I به ترتیب در معادله‌های (۱) و (۴) و (۶) به دست می‌آید. اتلاف در حایل حرارتی باید حاصل تفاضل بین Q_2 ها و Q_1 ها باشد:

$$W_I(T_I, T_L) = \frac{1}{FOM_I} \left(\frac{T_H}{T_I} - 1 \right) \{ [Q_{k2}(T_I) - Q_{k1}(T_I, T_L)] + [Q_{r2}(T_I) - Q_{r1}(T_I, T_L)] + Q_{l2}(T_I) \} \quad (9)$$

که در آن اندیس ۲، نشان‌دهنده‌ی اتلاف‌های حرارتی از T_H به T_I است. جمله‌ی آخر در معادله‌ی بالا انتقال گرمای هادی‌ها از دمای T_I به

$$A_s(T_L) = s \frac{M(T_L)g}{\sigma_y} \quad (2)$$

فاکتور ایمنی مکانیکی، s ، ثابت در نظر گرفته می‌شود و تاب ارتجاعی ماده‌ی نگه‌دارنده، σ_y ، در بازه‌ی دمایی به صورت قابل-توجهی تغییر نمی‌کند. جرم مگنت HTS به‌طور معکوس با چگالی جریان بحرانی $J_c(T_L)$ متناسب است. وابستگی دمایی جرم مگنت بر حسب دمای مرجع 77 K را به صورت زیر می‌توان نوشت:

$$M(T_L) = M(77\text{ K}) \frac{J_c(77\text{ K})}{J_c(T_L)} \quad (3)$$

با کاهش دمای T_L ، بازه‌ی دمایی در انتگرال معادله‌ی (۱) افزایش می‌یابد اما سطح مقطع به دلیل افزایش $J_c(T_L)$ ، کاهش می‌یابد [۲].

تابش: انتقال حرارتی تابشی برای یک جسم در دمای T_L از یک سطح بسته در دمای T_H ، به‌طور تقریبی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید [۳]:

$$Q_r(T_L) \approx \frac{\sigma(T_H^4 - T_L^4)}{\frac{1}{\varepsilon_L A_L(T_L)} + \frac{1 - \varepsilon_H}{\varepsilon_H A_H}} \quad (4)$$

A_H و A_L به ترتیب مساحت خارجی جسم سرد و مساحت سطح داخلی در دمای اتاق و ε و σ ضریب تابندگی و ثابت بولتزمن است. در محاسبه‌ی اتلاف‌ها در این مدل، فرض می‌شود که حجم جسم سرد متناسب با اندازه‌ی مگنت است و مساحت سطح خارجی جسم سرد سهم $2/3$ توان حجمی‌اش را از ملاحظات ابعادی برای شکل‌های مشابه داراست. بنابراین وابستگی دمایی A_L بر حسب دمای مرجع 77 K به صورت زیر به دست می‌آید:

$$A_L(T_L) = A_L(77\text{ K}) \left[\frac{J_c(77\text{ K})}{J_c(T_L)} \right]^{2/3} \quad (5)$$

با کاهش T_L ، صورت و مخرج در معادله‌ی (۴) افزایش می‌یابد و این به این معنی است که تابش در واحد سطح کاهش می‌یابد اما باید مساحت سطح خارجی مگنت نیز کاهش یابد [۲].

هادی‌های جریان: انتقال حرارت به انتهای سرد هادی‌ها، عامل اتلاف حرارتی است و میزان آن بسته به جنس مواد هادی و روش سردسازی متفاوت است. ابعاد هادی‌ها می‌تواند بهینه شود به-طوری‌که کمینه اتلاف سردسازی در واحد طول هادی، Q_1 ، طبق

T_L را شامل نمی‌شود، زیرا گرادیان دمای محوری در انتهای گرم برای همه هادی‌های فلزی بهینه شده باید صفر باشد [۴]، [۵].

نتایج و بحث

مشخصه‌های مگنت D-شکل در مقیاس آزمایشگاهی و سرمایه‌ای آن و نیز نتایج محاسبات اتلاف‌های مرحله‌ی اول و دوم در ۷۷ K و ۲۰ K در جدول ۱ و ۲ آمده‌است.

جدول ۱ مشخصات سرمایه‌ی پیچ‌های D-شکل در ۷۷ K

پیچ‌های D-شکل Bi-۲۲۲۳/AgMg	
جرم در ۷۷ کلونین (M)	۵ Kg
مساحت سطح خارجی در ۷۷ K (A_L)	۰/۰۱۶ m ^۲
تابندگی پوشش نقره (ϵ_L)	۰/۰۲
نگه‌دارنده مکانیکی (استیل ضدزنگ)	
طول (L_S)	۰/۴ m
تاب ارتجاعی (σ_y)	۲۰۷×۱۰ ^۳ Pa
ضریب ایمنی (S)	۲۰
حفاظ تابشی (آلومینیوم)	
قطر محفظه‌ی مرحله اول	۵۰ cm
ارتفاع محفظه‌ی مرحله اول	۶۰ cm
مساحت سطح در ۷۷ کلونین (A_R)	۰/۹۴ m ^۲
تابندگی (ϵ_L)	۰/۱
سرمایا	
قطر خارجی محفظه در دمای اتاق	۶۰ cm
ارتفاع محفظه در دمای اتاق	۷۰ cm
مساحت سطح (A_H)	۱/۳ m ^۲
تابندگی (ϵ_H)	۰/۸۸

جدول ۲ برآورد اتلاف‌ها در جریان کاری ۴۰ آمپر

پارامترها	اتلاف‌های مرحله‌ی اول در ۷۷ K	اتلاف‌های مرحله‌ی دوم در ۲۰ K
هادی‌های مسی جریان	۰/۹ W	۰/۸ W
پروب‌های اندازه‌گیری	۰/۱ W	۰/۰۴ W
تابش	۴۲/۵ W	۰/۰۰۹ W
نگه‌دارنده	۰/۰۰۱ W	۰/۰۰۷ W

ابررسانای HTS مورد استفاده، نوار Bi-۲۲۲۳/AgMg می‌باشد. چگالی جریان بحرانی، با دقت قابل قبولی به صورت تابعی از دما عبارت است از [۶]:

$$J_c(T_L) = J_{c0} \left(1 - \frac{T_L}{108}\right)^{1.4} \quad (10)$$

که J_{c0} چگالی جریان بحرانی در صفر کلونین است. نسبت $J_c(T)$ به $J_c(77K)$ به صورت زیر بیان شده‌است:

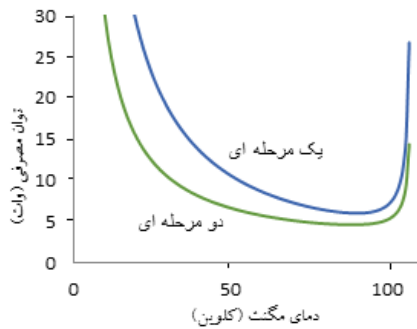
$$\frac{J_c(T_L)}{J_c(77K)} = \frac{\left(1 - \frac{T_L}{108}\right)^{1.4}}{\left(1 - \frac{77}{108}\right)^{1.4}} = 6.61 \left(1 - \frac{T_L}{108}\right)^{1.4} \quad (11)$$

رابطه‌ی (۱۰) برای محاسبه‌ی اتلاف برحسب اندازه مگنت در معادلات (۳) و (۵) مورد استفاده قرار می‌گیرد.

شکل ۱، توان مصرفی سه نوع اتلاف محاسبه شده را به صورت تابعی از دمای کاری برای سردسازی یک مرحله‌ای نشان می‌دهد. در طراحی موردنظر در شرایط DC، بالای محدوده‌ی وسیعی از دما، اتلاف ناشی از هادی‌های جریان و تابش سهم غالبی دارد. با کاهش T_L تا زیر ۵۰ K، توان مصرفی به صورت چشم‌گیری افزایش می‌یابد، زیرا هر دو کمیت اتلاف سردسازی و توان در واحد سردسازی افزایش می‌یابد. به عبارت دیگر، در شرایطی که T_L تا ۱۰۸ K افزایش می‌یابد (دمای بحرانی ابررسانای HTS)، $J_c(T)$ ابررسانای HTS کاهش می‌یابد و برای مقاصد کاربردی خاص به مگنت با ابعاد بزرگ‌تر نیاز می‌شود. با اتلاف سردسازی بیشتر ناشی از رسانش حرارتی و تابش، توان مصرفی کل در دماهایی نزدیک به ۱۰۸ K افزایش می‌یابد. یک مقدار بهینه‌ی یکتا برای دمای کاری به منظور کمینه کردن توان مصرفی وجود دارد.

توان ورودی کل حایل حرارتی یا سردسازی دو مرحله‌ای، نه فقط تابعی از دمای مگنت، T_L ، بلکه تابعی از دمای حایل حرارتی، T_I ، نیز می‌باشد.

شکل ۲ توان محاسبه شده در معادله‌ی (۷) را به صورت تابعی از T_I وقتی در دمای ۲۰ کلونین ثابت است، برای مگنت DC نشان می‌دهد. در نزدیکی دمای $T_I = 270 K$ کمینه توان ۱۵ وات است. چنانچه T_I به صورت مجانبی به T_H میل می‌کند، W_I به صفر میل می‌کند و همین‌طور وقتی T_I به T_L میل می‌کند می‌توان از W_L صرف‌نظر کرد. وقتی سردسازی دو مرحله‌ای در دو مورد آخر به سردسازی یک مرحله‌ای تبدیل شود، توان سردسازی کل باید مقدار کمینه‌ای را در دو دمای انتهایی داشته باشد. همچنین دمای حایل در یک مقدار بهینه طراحی می‌شود و توان کل برای سردسازی دو مرحله‌ای باید به صورت تابعی از T_L در نظر گرفته شود.

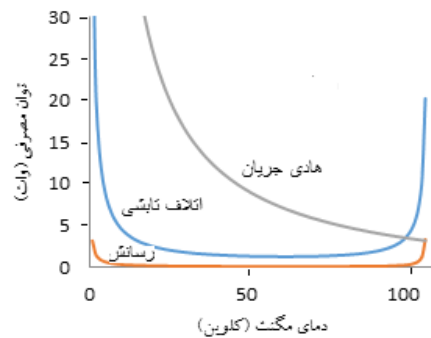


شکل ۳: توان مصرفی محاسبه شده برای مگنت DC (دمای میانی بهینه شده برای سردسازی دو مرحله‌ای).

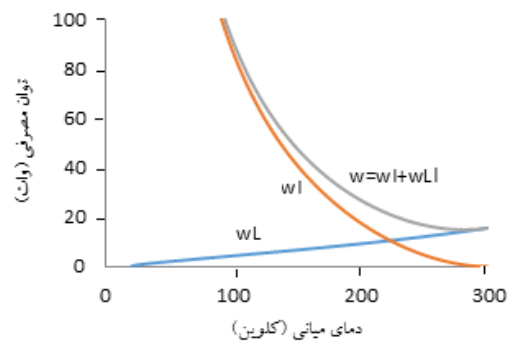
در شکل ۳، توان سردسازی دو مرحله‌ای با حایل در دمای بهینه با یک‌سرماساز یک مرحله‌ای مقایسه شده است. بهینه دمای T_L در سرماساز دو مرحله‌ای حدود 89 K است و توان کمینه تا $1/4W$ کاهش می‌یابد. یک مزیت آشکار سردسازی دو مرحله‌ای در دمای کمتر از 50 K ، ذخیره‌سازی قابل توجه در مصرف توان است.

مرجع‌ها

- [۱] M. P. Oomen, B. Haken, M. Leghissa and J. Rieger; "Optimum working temperature of power devices based on Bi-2223 superconductors" *Supercond. Sci. Technol.*, 13 (2000) 19–24.
- [۲] H. M. Chang, Y. SukChoi and S. W. V. Sciver, "Optimization of operating temperature in cryocooled HTS magnets for compactness and efficiency", *Cryogenics*, 42 (2002) 787–794.
- [۳] W. M. Rohsenow and H. Y. Choi, "Heat, Mass, and Momentum Transfer", New Jersey, Prentice-Hall (1961) 332–51.
- [۴] H. M. Chang and SW. Van Sciver, "Thermodynamic optimization of conduction-cooled HTS current leads" *Cryogenics*, 38 (1998) 729–36.
- [۵] N. Wilson, "Superconducting Magnets", Oxford University Press (1983).
- [۶] AM. Wolsky, "Cooling for future power sector equipment incorporating ceramic superconductors. The IEA Implementing Agreement for a Co-Operative Programme for Assessing the Impacts of High-Temperature Superconductivity on the Electric Power Sector", Argonne National Laboratory Report (2002).



شکل ۱: توان مصرفی اتلاف‌ها بر حسب T_L برای مبرد یک‌مرحله‌ای.



شکل ۲: توان مصرفی W ، W_I ، W_L بر حسب دمای میانی در $T_L = 20\text{ K}$ برای سردسازی دو مرحله‌ای.

در مگنت‌های DC که اتلاف AC در سردسازی وجود ندارد، همان‌طور که در شکل ۳ برای سردساز یک‌مرحله‌ای دیده می‌شود، توان سردسازی مورد نیاز در $T_L = 91\text{ K}$ تقریباً $6/07\text{ W}$ است. یکی از مهم‌ترین ویژگی‌ها در یک مگنت DC این است که انحنا برای توان مصرفی در بازه دمایی بین 80 K و 95 K حول دمای بهینه هموار می‌باشد. این اشاره به این موضوع دارد که یک دمای کاری خوب زیر دمای بهینه، افزایشی ناچیز در توان پایا دارد ولی کاهشی قابل توجه در ابعاد و قیمت مگنت خواهد داشت. در عمل FOM یک مبرد با T_L در یک بازه مشخص تغییر می‌کند، اما به‌طور خاص به چرخه‌ی ترمودینامیکی و ظرفیت سردسازی وابسته است. بیشتر مبردهای کنونی در بازه‌ی دمایی موردنظر، مقادیری بین $0/1$ تا $0/3$ را دارا می‌باشد، بنابراین انتظار می‌رود که به‌عنوان نمونه توان واقعی در شرایط بهینه در یک مبرد از 500 W تا $1/5\text{ KW}$ تغییر کند.

تأثیر گرافن اکساید بر میزان جذب امواج الکترومغناطیسی کامپوزیت های بر پایه (پلی آنیلین/ابر رسانای $YBa_2Cu_3O_7$)

قربانی بلوک آباد، مرتضی^۱؛ پاک نیاکان، سپیده^۲؛ صدقی گمیچی، حسن^۳؛ کشی پور، سجاد^۴

^۱ پژوهشکده نانو فناوری، دانشگاه ارومیه، ارومیه

^۲ پژوهشکده نانو فناوری، دانشگاه ارومیه، ارومیه

^۳ گروه فیزیک، دانشگاه ارومیه، ارومیه

^۴ پژوهشکده نانو فناوری، دانشگاه ارومیه، ارومیه

چکیده

گرافن ومشتقات آن به علت خواص فیزیکی فوق العاده وتوانایی های منحصر به فرد آن از جمله مواد پرکاربرد در ساخت کامپوزیت های جاذب امواج الکترومغناطیسی محسوب میشوند(۱). با این وجود دستیابی به تطبیق امپدانس مناسب این ماده در کنار مواد مغناطیسی وسایر مواد تقویت کننده از بزرگ ترین چالش های ساخت پوشش های کامپوزیتی محسوب میشود. در اینجا یک رویکرد جدید وتازه برای پردازش گرافن اکساید ونانو ذرت مغناطیسی در پلیمر ابر رسانای (پلی آنیلین/ابر رسانای $YBCO$) مورد بررسی قرار گرفت. ذرات $YBCO$ تحت یک فرایند حرارتی از فلزات کربنات دار در دمای ۱۰۰۰ تا ۱۳۰۰ درجه کلوین سنتز شد(۲). پلی آنیلین از طریق پلیمریزاسیون اکسایشی شیمیایی بدست آمد(۳) و طی یک فرایند خاص با $YBCO$ ترکیب شده وتشکیل پلیمر ابررسانای $PANI/YBa_2Cu_3O_7$ دادند(۴). در نهایت گرافن اکساید باروش هومر سنتز شد(۴) وبه پلیمر کوپل گردید. نانو کامپوزیت بدست آمده توسط آنالیز اسپکتروسکوپی مادون قرمز شناسایی شد. همچنین میزان جذب امواج ماکروویو در ناحیه بانده ایکس مورد بررسی قرار گرفت ونشان داده شد که وجود گرافن اکساید باعث بهبود عملکرد جذبی کامپوزیت ابررسانا میشود که عمدتاً به تطبیق امپدانس بهبود یافته، اثر هندسی نسبت داده میشود.

The effect of GO on the of electromagnetic wave absorption properties of PANI/Superconductor $YBa_2Cu_3O_7$ based composites

Ghorbani blook abad , Morteza¹; pakniakan, Sepideh²; Sedghi, hasan³; Keshipoor, Sajjad⁴

¹ Department of Nano technolog, Urmia University, Urmia,

² Department of Nano technology, Urmia University, Urmia,

³ Department of Physics, Urmia University, Urmia,

⁴ Department of Nano technology, Urmia University, Urmia,

Abstract

Graphene and its derivatives are considered to be the most important physical properties and unique properties of the materials used in the manufacture of electromagnetic absorbent composites (1). However, achieving the appropriate impedance of this material along with the magnetic materials and other reinforcing materials of the largest The challenge is to make composite coatings. In this regard, a new approach was developed for the processing of graphene oxide and nanoscale magnetic nano particles in superconducting polymer (poly aniline / superconductor YBCO). The YBCO particles undergo a thermal process of carbonate metal materials at 1000 to 1300 ° K was synthesized (2). Poly Aniline by The chemical oxidation polymerization was obtained by combining a particular process with YBCO and forming the superconductive polymer (PANI/ $YBa_2Cu_3O_7$) (3). Finally, the graphene oxide was synthesized by the Hoomers Method (4) and the coupling with superconductive polymer . The composite obtained was detected by infrared spectroscopy. Also, the absorption of microwave waves in the region The X band was studied and it was found that the presence of graphene oxide improves the absorption performance of superconductor composites, which is mainly attributed to the impedance matching and the geometric effects of graphene oxide).

مقدمه

با پیشرفت های جدید در فناوری و علوم نوین، پوشش های نانو جاذب امواج الکترومغناطیسی در محدوده باندهای $(۲,۸ تا ۱۲,۴)$ گیگا هرتز) از اهمیت ویژه ای برخوردار شدند.

علیرغم اینکه این پوشش ها که برای محافظت انسان ها و محیط زیست از آلودگی های امواج الکترومغناطیسی نیز کاربرد دارد، اصلی ترین کاربرد این پوشش ها مربوط به مقاصد نظامی و مخفی کردن مواد و ادوات از شناسایی رادارها مربوط می شوند.

اخیرا با پیشرفت هایی که در ساخت پلیمر هاصورت گرفته است، پلیمر هایی ابر رسانا نیز ساخته شده و به منظور جذب امواج الکترومغناطیسی مورد تحقیق و پژوهش توسط دانشمندان قرار گرفته اند. پلیمر $(YBa_2Cu_3O_7/PANI)$ از جمله پلیمر های ابر رسانای دمای پایین است که با استفاده از مواد تقویت کننده متفاوت به منظور جذب امواج الکترومغناطیسی مورد استفاده قرار گرفته اند.

در این طرح همانند اغلب پوشش های جاذب امواج الکترومغناطیسی از نانو ذرات (Fe_3O_4) استفاده میشود. تاثیر مکانیک کوانتوم باعث میشود که جهت گشتاور های مغناطیسی در حرکت منظم الکترونها در ساختار پوشش های جاذب بطور متناوب تغییر بکند و اندازه گشتاور مغناطیسی کل، غیر صفر شود. تغییر جهت گشتاور مغناطیسی در اثر برهم کنش با موج، منجر به جذب انرژی می شود.

اخیرا، نانو مواد کربنی نظیر کربن نانو تیوب ها، گرافن و مشتقات آن همچون گرافن کوانتوم دات و گرافن اکساید و... از جمله موادی هستند که بعلاوه ویژگی های فیزیکی و الکتریکی و حرارتی و اپتیکی مناسب، بیشترین توجه هارا به خود جلب کرده اند و برای بهبود عملکرد پوششهای جاذب مورد استفاده میتوانند قرار گیرند.

و نمونه هایی از پوشش های جاذب امواج با استفاده از کربن نانو تیوب ها، و پلیمر رسانا ساخته شده اند که جذب در حدود 30% دسی بل از خود نشان داده اند. نمونه ای از نانو کامپوزیت های جاذب امواج را با میزان جذب امواج الکترومغناطیسی آورده ایم که

در آنها از مواد گرافنی با پلیمر های مختلف آورده شده اند. که از میان آنها با جذب 44% دسی بل، ترکیب (پلی اترایمید/گرافن) دارای بیشترین میزان جذب میباشد (جدول ۱).

بهترین پوشش های جاذب، جاذب هایی هستند که علاوه بر استحکام بالای فیزیکی و شیمیایی و حرارتی، امپدانس تطبیق مناسبی هم داشته باشند.

هرچه توان جذب مولفه مغناطیسی و مولفه الکتریکی یک پوشش جاذب به یک نسبت باشد، پوشش جاذب امپدانس تطبیق مناسبی خواهد داشت و این عملکرد باعث بهبود عملکرد جذبی امواج خواهد شد.

در این طرح، برای ساخت کامپوزیت پایه ابر رسانا ابتدا، با استفاده از روش های حرارتی نانو ذرات $(YBCO)$ را سنتز میکنیم. سپس برای سنتز پلی آنیلین از روش پلیمریزاسیون اکسایشی شیمیایی مونومر های آنیلین بهره میبریم در نهایت طی یک روش خاص مخلوط پلی آنیلین و $(YBCO)$ را ترکیب میکنیم. سپس نانو ذرات (Fe_3O_4) را با استفاده از روش رسوب شیمیایی سنتز میکنیم. در نهایت نانو ذرات گرافن اکساید را با استفاده از گرافیت طبیعی و طبق روش هامر سنتز میکنیم.

سپس نانو کامپوزیت نهایی را با استفاده از ترکیب این مواد سنتز شده در محیط پارافنی که عاری از هر گونه خاصیت جذبی می باشد قالب گیری میکنیم.

به منظور مقایسه میزان تاثیر گرافن اکساید بر عملکرد پوشش های جاذب امواج از نانو مواد مختلف نظیر گرافن کوانتوم دات، گرافن اکساید کاهش یافته، اکسید روی، سولفید مس و اکسید مس در ساختار نانو کامپوزیت استفاده میکنیم و در نهایت مشاهده میکنیم که وجود گرافن اکساید باعث بهبود عملکرد مناسب در میزان جذب و باعث بهبود ناحیه جذبی در محدوده فرکانسی باندهای X میشود.

در نهایت این طرح منجر به ساخت یک نانو کامپوزیت جاذب امواج الکترومغناطیسی با یک روش ساده و کم هزینه با قابلیت جذبی بالا با ضخامت کم از پوشش جاذب و جذب در محدوده

فرکانسی گسترده تر از نمونه های مشابه می شود که عمدتاً به بهبود امیدانس تطبیق و اثر هندسی نسبت داده میشود.

بخش تجربی

برای سنتز پوشش های کامپوزیتی جاذب امواج الکترومغناطیسی بر پایه پلیمر ابررسانای (YBa₂Cu₃O₇) و مواد گرافنی ابتدا نانو ذرات (YBCO) را سنتز میکنیم. برای همین منظور، ابتدا ۱۱,۲۹ گرم باریم کربنات (BaCO₃) را با ۱۱,۲۹ گرم ایتريوم اکساید (Y₂O₃) و ۲۳,۸۶ گرم اکسید مس (CuO) مخلوط کرده و در دمای ۹۲۵- ۹۵۰ درجه سانتی گراد جهت تشکیل ساختار اولیه کریستال YBa₂Cu₃O₆ قرار میدهم.

سپس برای از بین بردن کربن از ترکیب، مخلوط حاصله را بمدت ۱۸ ساعت در دمای ۹۵۰-۹۷۵ درجه سانتی گراد حرارت میدهم. سپس دمای کوره را با سرعت ۱۰۰ درجه در ساعت کاهش میدهم (۲).

برای سنتز پلیمر پلی آنیلین از روش پلیمریزاسیون اکسایش شیمیایی استفاده میکنیم. به همین منظور در یک بشر مقدار ۲ میلی لیتر آنیلین (C₆H₅NH₂) را در ۲۰۰ میلی لیتر اسید کلرودیک (HCl) یک مولار میریزیم. در یک ظرف مشابه ۶,۲ گرم آمونیوم پر سولفات (NH₄)₂S₂O₈ را در ۲۰۰ میلی لیتر اسید کلرودیک یک مولار حل میکنیم. سپس دو ظرف را به مدت ۴۰ دقیقه با هم در دمای اتاق در همزن الکترونی هم میزنیم. بعد از رسوب گذاری و سانتریفیوژ کردن در آن خشک در دمای ۶۰ درجه سانتی گراد، میکنیم (۳).

برای تهیه پلیمر ابر رسانا، ۲۵ گرم YBCO با ۲۵ گرم پلی آنیلین مخلوط کرده و در کوره بمدت ۳ ساعت در دمای ۳۰۰ درجه سانتی گراد میگذاریم. سپس یک گرم پلی ونیل الکل (PVA) را در ۱۰ میلی لیتر آب مقطر حل کرده و ۲ تا ۴ قطره از آن محلول را به ترکیب حرارت داده شده مخلوط میکنیم و سپس به جهت تبخیر PVA مخلوط را تحت دمای ۱۵۰ درجه در کوره قرار میدهم. مخلوط حاصله پلیمر ابررسانای PANI/YBa₂Cu₃O₇ میباشد (۴).

برای سنتز گرافن اکساید از روش هامر ابتدا ۱۱۵ میلی لیتر از سولفریک اسید غلیظ را به بالونی که حاوی ۵ گرم پودر گرافیت

طبیعی و ۲,۵ گرم پتاسیم نترات بود، در یک حمام یخی که تحت همزن مغناطیسی قرار داشت اضافه میکنیم. پس از رسیدن دمای ماده به دمای صفر درجه سانتی گراد ۱۵ گرم پتاسیم پرمنگنات را به تدریج به محلول بالایی میافزاییم. بطوریکه دمای محلول از ۲۰ درجه افزایش پیدا نکند. سپس مخلوط را پس از اتمام افزودن پتاسیم پرمنگنات، بمدت ۷ ساعت در دمای ۳۵ درجه تحت همزن مغناطیسی قرار میدهم. سپس دوباره ۱۵ گرم پتاسیم پرمنگنات را به محلول اضافه میکنیم. و ۱۲ ساعت دیگر مخلوط در دمای ۳۵ درجه هم میخورد. سپس دمای مخلوط را به دمای اتاق رسانده و بصورت آهسته به درون بالنی از آب مقطر یخ زده به مقدار ۶۵۰ میلی لیتر میریزیم. رنگ مخلوط از سبز لجنی به قهوه ای تیره تغییر میکند.

بعد از گذشت نیم ساعت ۵ میلی لیتر آب اکسیژنه ۳۰٪ را بصورت قطره قطره به محلول اضافه میکنیم و نیم ساعت دیگر عمل هم زدن ادامه پیدا میکند. محلول حاصله را ۴ بار سانتریفیوژ کرده و با آب مقطر و یک بار با هیدروکلرودیک ۵ درصد. دو بار دیگر با آب مقطر شستشو میدهم و بمدت ۲۴ ساعت در دمای ۶۰ درجه در آن خشک میکنیم (۱) و با توجه به طیف IR وجود گروه های عاملی C=C در طول موج ۱۵۷۰ cm⁻¹ و O-H در ۳۱۸۹ cm⁻¹ و C-O در ۱۳۸۵ cm⁻¹ تایید شد (شکل ۳).

برای سنتز نانوذرات Fe₃O₄، ۲,۳۸۵ گرم از FeCl₂ را با ۳,۲۴۴ گرم از FeCl₃ را در ۱۰۰ میلی لیتر آب دیونیزه مخلوط میکنیم و در دمای ۵۵ درجه سانتی گراد بمدت ۱۵ دقیقه قرار میدهم. سپس ۷,۲ میلی لیتر از سودسوز آور (NaOH) ۳ مولار میافزاییم. سپس مخلوط به مدت ۴۰ دقیقه در دمای ۵۵ درجه تحت همزن مغناطیسی قرار میگیرد. سپس دما به میزان ۹۰ درجه افزایش می یابد و به مدت ۳۰ دقیقه عمل هم زدن ادامه می یابد پس از خنک سازی در دمای اتاق ماده سیاه رنگ جمع آوری شده و پس از ۴ بار شستشو با آب دیونیزه در دمای ۴۰ درجه در آن خشک میشود (۵).

حال به منظور تهیه کامپوزیت ابر رسانای سه تایی GO@Fe₃O₄@ همه مواد سنتز شده را به مقدار ۰,۳۹۰ گرم PANI/YBa₂Cu₃O₇: ۰,۲۰۰ گرم GO: ۰,۱۰۰ گرم Fe₃O₄ مخلوط

در دمای اتاق مخلوط کردیم، سپس با مقادیر (۵۰:۵۰) پارافن و نانو کامپوزیت را مخلوط میکنیم در نهایت، کامپوزیت ساخته شده داخل

قالب های بطول ۲۲٫۸۶ و عرض ۱۰٫۱۶ قالب گیری جهت انجام آنالیز جذب به بخش دستگاهی فرستاده شد.

نتایج آزمایشگاهی از جذب ۹۵ درصدی به میزان ۱۳-دسی بل در فرکانس ۱۰ گیگا هرتز در حضور گرافن اکساید را نشان میدهد. (شکل ۲).

وعدم وجود گرافن اکساید باعث کاهش جذب به میزان ۲٫۸-دسی بل میشود.

به منظور مطالعه میزان تاثیر نانو ذرات گرافن اکساید، نانوذرات دیگر مطابق روش های درج شده در مراجع سنتز شدند نظیر: گرافن کوانتوم دات، گرافن اکساید کاهش یافته، زینک اکساید، اکسید مس، و سولفید مس و مورد بررسی قرار گرفتند که نتایج در جدول شماره (۳) آورده شده است.

جدولها ، شکلها

جدول ۱: نمونه کامپوزیت های جاذب امواج با مواد گرافنی (۶ و ۷ و ۸)

درصد جذب	فرکانس	ضخامت	نام نانو کامپوزیت
۱۹٫۵ دسی بل	باند ایکس	۰٫۳ میلی متر	PVA@GO@GNR
۱۸ دسی بل	باند ایکس	۱٫۵ میلی متر	PMMA@GO
۴۴ دسی بل	باند ایکس	۲ میلی متر	PEI@G

جدول ۲: میزان جذب نمونه کامپوزیت های با مواد افزوده شده گوناگون

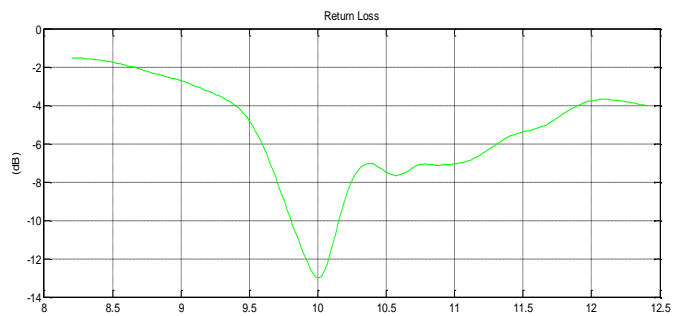
درصد جذب	تفاوت	نام نانو کامپوزیت
۹۵٪	خود نمونه	PANI/YBCO@GO@ZnO
۴۸٪	+CuS حذف GO	PANI/YBCO @ZnO @CuS
۶۰٪	+CuO	PANI/YBCO@GO@ZnO @CuO
۵۶٪	+RGO	PANI/YBCO@GO@ZnO @RGO
۴۰٪	+CuO +GQD	PANI/YBCO@GO@ZnO @CuO@GQD

نتیجه گیری

طبق نتایج آزمایشگاهی، وجود گرافن اکساید، نسبت سایر مواد سنتز شده، باعث بهبود عملکرد نانو کامپوزیت ابرسانای PANI/YBa₂Cu₃O₇ در جذب امواج الکترومغناطیسی به میزان ۱۳-دسی بل و به مقدار ۹۵ درصد، در فرکانس ۱۰ گیگا هرتز با نمونه هایی با ضخامت ۰٫۳ میلی متر شد.

مرجع ها

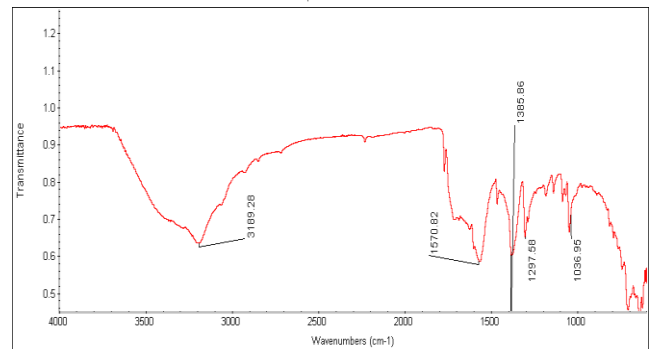
- [1] Zhu, Yanwu, et al. "Graphene and graphene oxide: synthesis, properties, and applications." *Advanced materials* 22.35 (2010): 3906-3924
- [2] Xu, X. L., et al. "Synthesis of nanoscale superconducting YBCO by a novel technique." *Physica C: Superconductivity* 371.2 (2002): 129-132.
- [3] Gospodinova, N., P. Mokreva, and L. Terlemezyan. "Chemical oxidative polymerization of aniline in aqueous medium without added acids." *Polymer* 34.11 (1993): 2438-2439.
- [4] Balamanigandan, B., et al. "Study of superconductive behavior on YBa₂Cu₃O₇/polyaniline composite." *Int. J. Sci. Eng. Appl. Sci* 1 (2015): 168-180.
- [5] Sun, Jing, et al. "Synthesis and characterization of biocompatible Fe₃O₄ nanoparticles." *Journal of biomedical materials research Part A* 80.2 (2007): 333-341.
- [6] Joshi, Anupama, et al. "Graphene nanoribbon-PVA composite as EMI shielding material in the X band." *Nanotechnology* 24.45 (2013): 455705.
- [7] Zhang, Hao-Bin, et al. "Tough graphene-polymer microcellular foams for electromagnetic interference shielding." *ACS applied materials & interfaces* 3.3 (2011): 918-924.
- [8] Ling, Jianqiang, et al. "Facile preparation of lightweight microcellular polyetherimide/graphene composite foams for electromagnetic interference shielding." *ACS applied materials & interfaces* 5.7 (2013): 2677-2684.



شکل ۱: میزان جذب نانو کامپوزیت GO@Fe₃O₄@ZnO@YBa₂Cu₃O₇



شکل ۲: میزان جذب نانو کامپوزیت در عدم حضور گرافن اکساید



شکل ۳: طیف IR نانو کامپوزیت GO

اثر آرایش نانو ذرات دی اکسید تیتانیوم بر پارامترهای شبکه و دمای بحرانی ابررسانایی



قهرمانی ، سیامک ؛ شمس، غلامعباس

گروه فیزیک، واحد شیراز، دانشگاه آزاد اسلامی، شیراز، ایران

چکیده

در این تحقیق، تحلیل ساختاری نمونه‌های ابررسانای پلی کریستال $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ که با نانو ذرات دی اکسید تیتانیوم آرایش یافته‌اند، گزارش شده است. از آزمایش مقاومت الکتریکی برای تشخیص حالت ابررسانایی استفاده شد. برای شناسایی فاز و ساختار شبکه نمونه‌ها از تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی و الگوهای پراش پرتو ایکس با روش پالایش ریتولد استفاده شده است. نتایج نشان می‌دهد پارامترهای ابررسانایی، اندازه میانگین دانه و ارتورومبیسیتی به واسطه‌ی اضافه کردن نانو ذرات دی اکسید تیتانیوم تحت تاثیر قرار می‌گیرند. با این حال، نتایج در ارتباط با مکانیزم و ساختار ابررسانای کپه‌ای $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ مورد بحث قرار گرفت.

The Effect of Nanoparticles Titanium dioxide doping on critical temperature and lattice parameters of $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ Superconductor

Ghahramani, Siamak ; Shams, Gholamabbas

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

Abstract

In this study, we report structural analyses on $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ (noted Y-123) polycrystalline samples superconductor doped with nano-sized Titanium dioxide particles. Electrical resistivity experiment was used to investigate the superconductivity state of the samples. Scanning Electron Microscopy (SEM), X-ray diffraction (XRD) with the Rietveld refinement technique were carried out to characterize phase identification and lattice structures of samples. Results reveal that the superconducting parameters, the average crystal size and orthorhombicity are affected by the addition of nano-sized Titanium dioxide particles. However, the results are discussed with relevance to the structural and mechanism of $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ bulk superconductors.

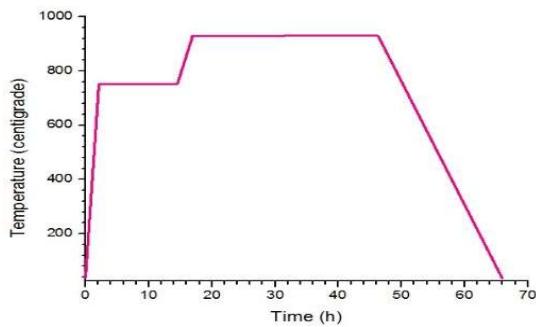
PACS No.

پیوندهای بین دانه‌ای در ابررساناهای سرامیکی به واسطه‌ی آرایش به دلیل ایجاد نقائص اضافی می‌تواند منجر به افزایش چگالی جریان بحرانی شود [۱]. از زمان کشف ترکیب $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ پژوهش‌های بسیاری با آرایش ترکیب فوق با موادی از جمله Al_2O_3 , Au, $CoFe_2O_4$ و $BaZrO_3$ انجام شده است [۴-۱]. در تحقیقی که توسط سالاما و همکاران وی انجام شده است ترکیب $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ با پنج ترکیب نانو ذرات اکسید فلزی در دو رده‌ی

مقدمه

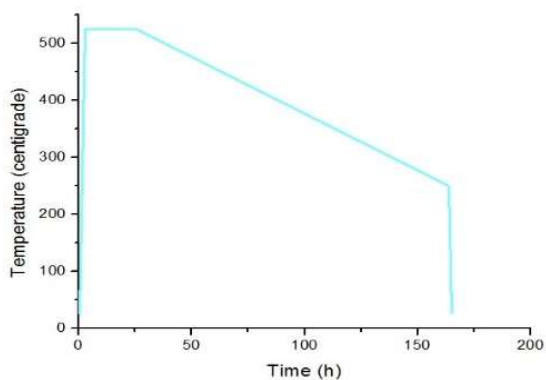
پیشرفت علم ابررسانایی در حوزه‌ی تجربی مستلزم ساخت نمونه‌های متعدد با روش‌های تولید مختلف و تحقیق جامع بر روی آنهاست. آرایش یا جایگزینی عنصر یا ماده مرکب در ساختارهای بلوری به منظور بهبود خواص ساختاری، الکتریکی و مغناطیسی ابررساناهای اکسید مورد توجه پژوهشگران بوده است. بهینه‌سازی

آمده در دستگاه پرس سرد (تحت فشار ۴۰۰ بار) به شکل قرص در آورده شد.



شکل ۱: برنامه‌ی گرمادهی نمونه‌ها در مرحله‌ی تکلیس

در این مرحله، قرص‌ها درون کوره در بوت‌های مخصوص تا دمای ۹۳۰ درجه سانتیگراد در معرض گرما قرار گرفت. عمل سخت‌سازی به مدت ۲۴ ساعت در این دما ادامه پیدا کرد. دمای کوره با آهنگ ۲۰ درجه‌ی سانتیگراد بر ساعت تا ۷۲۰ درجه سانتیگراد و سپس با آهنگ ۱۰ درجه‌ی سانتیگراد تا دمای اتاق سرد شد. در مرحله‌ی نهایی، شارش اکسیژن از روی قرص‌ها باعث می‌شود تا کمبود اکسیژن خارج شده در مرحله‌ی قبل را جبران کند. در شکل ۲ نمودار فرآیند اکسیژن‌دهی نمونه‌های ساخته شده نشان داده شده است. ثابت‌های شبکه و دمای گذار بحرانی در ابررساناهای اکسید به مقدار اکسیژن نمونه بستگی دارد [۷-۸].



شکل ۲: نمایش نموداری شارش اکسیژن

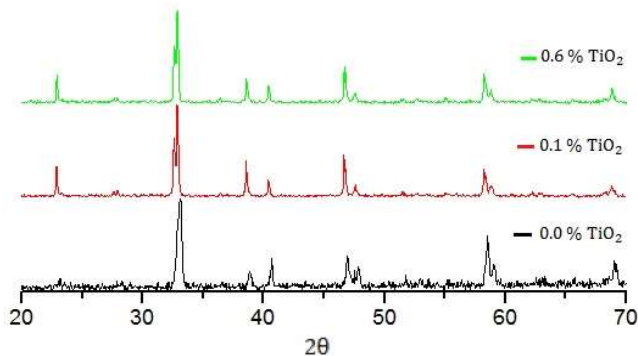
با آماده‌سازی نمونه‌ها، الگوهای پراش نمونه‌ی بدون آلاینش و نمونه‌های آلاینش یافته با نانوذرات دی اکسید تیتانیوم توسط آزمون پراش پرتو ایکس با اسپکترومتر پیشرفته بروکر با استفاده از فیلتر $\text{Cu-K}\alpha$ و تصاویر SEM توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی تهیه شد.

مغناطیسی و غیر مغناطیسی آلاینش یافته است، نتایج حاکی از بهبود خواص ابررسانایی برای ترکیب آلاینش یافته با نانوذرات مغناطیسی است [۵]. در پژوهشی که توسط حمید و همکاران انجام شده اثر دی اکسید تیتانیوم بر روی ابررسانای بر پایه بیسموت منجر به کاهش T_c و J_c شده و تغییری در ساختار بلوری BSCCO رخ نداده است [۶]. در پژوهش دیگر تاثیر دی اکسید تیتانیوم بر ابررسانای MgB_2 با ده درصد وزنی ماده اضافه شده باعث افزایش قابل توجهی در چگالی جریان بحرانی شده است [۷]. مقدار ماده‌ی ناخالصی باید به اندازه‌ای باشد که منجر به تخریب دمای گذار و اتصال دانه‌ها نشود، محدودیت ساختار شکننده ذاتی مواد سرامیکی و تحمل فشار مکانیکی حدی برای آلاینش و یا اضافه کردن ماده‌ای برای تولید ماده‌ی جدید می‌تواند خود چالشی برای پژوهش در این حوزه باشد. پژوهش حاضر بر تاثیر افزودن دی اکسید تیتانیوم روی ابررسانای $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ از نقطه نظر اثر مقادیر متفاوت آلاینش بر دمای بحرانی و ساختار نمونه‌ها متمرکز شده است.

شرح آزمایش

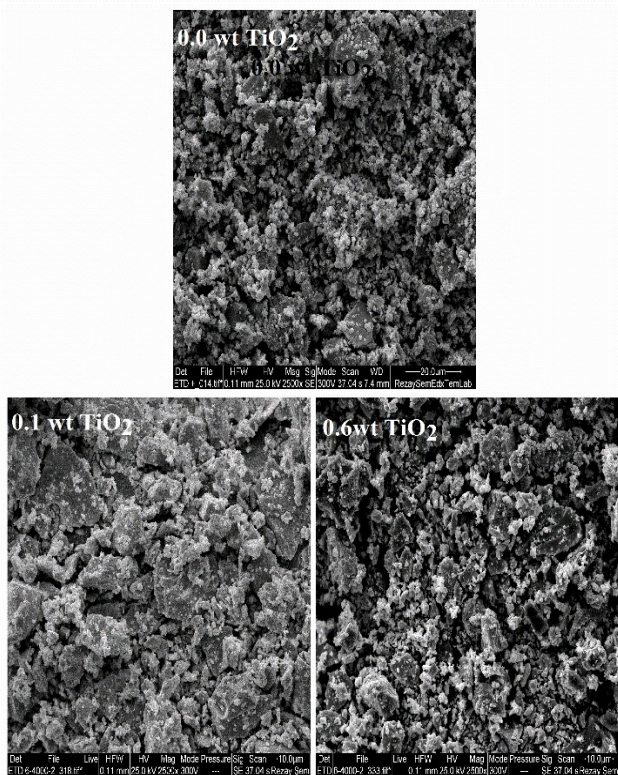
خواص الکتریکی، مغناطیسی و حرارتی ابررساناهای دمای بالا وابسته به خلوص و شرایط فرآیند تهیه‌ی نمونه‌ها است. ابررسانای کوپرات سرامیکی $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ آلاینده با نانوذرات دی اکسید تیتانیوم با روش کلوخه‌ای به شیوه‌ی واکنش حالت جامد تهیه گردید. در این روش از اکسید ایتریوم، باریم کربنات و اکسید مس با خلوص بالا (۹۹/۹٪) به عنوان مواد اولیه و از نانوذرات دی اکسید تیتانیوم با در صد های وزنی متفاوت ۰/۰، ۰/۱ و ۰/۶ استفاده شده است. با مخلوط کردن و سائیدن مواد پودر یکنواختی به رنگ سیاه حاصل شد. برای تهیه‌ی ماده‌ی همگن، از حلال اتانول به میزان مناسب به عنوان عامل بستگی ذرات پودر استفاده شد. پودرهای آماده شده درون قالب‌هایی تحت فشار ۴۰۰ بار به شکل قرص‌هایی به قطر و ضخامت به ترتیب ۳۰ و ۴ میلی‌متر در آمد. فرآیند ساخت محصول نهایی طی سه مرحله انجام شد که در بخش نخست، گرمادهی نمونه‌ها در مرحله تکلیس مطابق نمودار شکل ۱ نشان داده شده است. برای آماده‌سازی نمونه‌ها در مرحله‌ی کلوخه‌سازی ابتدا آن‌ها در هاون دستی به مدت سی دقیقه سائیده و سپس پودرهای به دست

آمد. کاسته شدن پهنای پیک در اثر ورود ناخالصی با افزایش تقریباً ۱/۵ برابری اندازه‌ی کریستالیت مطابقت دارد.



شکل ۳: الگوی پراش نمونه‌های $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ با آرایش دی اکسید تیتانیوم به میزان ۰/۰، ۰/۱ و ۰/۶ در صد وزنی ترکیب نخست

به منظور بررسی ریزساختار و ریخت‌شناسی نمونه‌های ساخته شده، تصاویر SEM در شکل ۴ نشان داده شده است.



شکل ۴: تصاویر میکروسکوپ الکترونی نمونه‌های $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ با آرایش دی اکسید تیتانیوم به میزان ۰/۰، ۰/۱ و ۰/۶ در صد وزنی ترکیب نخست

ویژگی‌های تراپردی نمونه‌ها به واسطه‌ی اندازه‌گیری‌های وابستگی مقاومت ویژه با دما با کاربرد سنجش چهار نقطه تعیین گردید.

نتایج و بحث

شکل ۳ الگوهای پراش ابررسانای $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ با میزان متفاوت آرایش را نشان می‌دهد. پالایش ساختار بلوری با استفاده از روش ریتولد انجام گرفت. تحلیل الگوی پراش نمایانگر ساختار ارتورومبیک با تقارن $Pmmm$ است و افزودن نانو ذرات دی اکسید تیتانیوم بر ساختار محصول تاثیر نداشته است. جدول ۱ مقادیر ثابت شبکه و ارتورومبیسیتی نمونه‌ها را نشان می‌دهد.

جدول ۱: پارامترهای شبکه و ارتورومبیسیتی نمونه‌ها

نمونه‌ها	z	a (Å)	b (Å)	c (Å)	$\delta = b - a / b + a$
Y123 +	۰/۰	۳/۸۲۸۲	۳/۸۹۲۸	۱۱/۶۸۸۱	۰/۰۰۸۳۶۶۷۹
z wt. TiO_2	۰/۱	۳/۸۲۴۵	۳/۸۸۹۹	۱۱/۶۸۲۵	۰/۰۰۸۴۷۷۷۶
	۰/۶	۳/۸۲۹۲	۳/۸۸۷۲	۱۱/۶۷۸۸	۰/۰۰۷۵۱۶۴۵

نتایج حاکی از آن است با افزودن ناخالصی به میزان ۰/۱ در صد وزنی، ارتورومبیسیتی نسبت به نمونه‌ی خالص افزایش و برای نمونه‌ی آرایش یافته‌ی با ۰/۶ در صد وزنی کاهش یافته است. تحقیق گروه سالاما و همکاران حاکی از بهبود خواص ابررسانایی با افزایش ارتورومبیسیتی نمونه‌ها است [۵]. با استفاده از تحلیل الگوی پراش و کاربرد رابطه‌ی دمای شرر، می‌توان اندازه‌ی میانگین بلورک (کریستالیت) در مواد کپه‌ای نانو بلوری به دست آورد [۹].

$$L = \frac{K\lambda}{\beta \cos \theta} \quad (1)$$

در رابطه‌ی شرر، L اندازه کریستالیت، λ طول موج آند دستگاه پراش پرتو ایکس، K فاکتور شکل، β پهنای پیک در نیمه‌ی ارتفاع بر حسب رادیان و θ مکان پیک روی محور افقی الگوی پراش است. بر این اساس اندازه‌ی بلورک در نمونه‌ی خالص حدود ۶۰ نانومتر و در نمونه‌های اضافه شده با ناخالصی حدود ۸۸ نانومتر به دست

فاز دیگری در نمونه‌ها وارد نشده است و ساختار ارتورومبیک نمونه را تغییر نداده است. در مقایسه با نمونه خالص، ارتورومبیسیتی نمونه با مقدار آلیش ۰/۱ در صد وزنی، افزایش و برای نمونه با مقدار ۰/۶ در صد وزنی کاهش نشان داد. دیگر تاثیر ورود ناخالصی به ترکیب Y-123 افزایش ۴۷ درصدی در میانگین اندازه بلورک را می‌توان برشمرد. مقایسه‌ی تصاویر SEM نمونه‌ها نشان از آن دارد که ساختار دانه‌ای ترکیب تغییر نکرده است. بررسی نمودارهای حاصل از اندازه‌گیری‌های ترابرد الکتریکی با روش سنجش چهار میله نشان از بهبود دمای بحرانی برای نمونه‌ی ابررسانای آلائیده با ۰/۱ در صد وزنی دارد.

مرجع‌ها

[۱] Y. Slimani, E. Hannachi, M.K. Ben Salem, A. Hamrita, A. Varilci, W. Dachraoui, M. Ben Salem and F. Ben Azzouz, Comparative study of nano-sized particles CoFe₂O₄ effects on superconducting properties of Y-123 and Y-358, *Phys. B: Condens. Matter* **450** (2014) 7–15.

[۲] S. Dadras and Z. Gharehgzaloo, "Effect of Au nano-particles doping on polycrystalline YBCO high temperature superconductor," *Phys. B Condens. Matter*, **492**, pp. 45–49, Jul. 2016.

[۳] A. Mellekh, M. Zouaoui, F. Ben Azzouz, M. Annabi, M. Ben Salem, Nano-Al₂O₃ particle addition effects on YBa₂Cu₃O_y superconducting properties, *Solid State Commun.* **140** (2006) 318.

[۴] N. M. Strickland, N. Long, E. Talantsev, P. Hoefakker, J. Xia, M. Rupich, T. Ko-denkandath, W. Zhang, X. Li, and Y. Huang, "Enhanced flux pinning by BaZrO₃ nanoparticles in metal-organic deposited YBCO second-generation HTS wire," *Phys. C Supercond.*, **468**, no. 3, pp. 183–189, Feb. 2008.

[۵] A.H. Salama, M.EL-Hofy, Y.S. Rammah and M. Elkhatib, Effect of magnetic and nonmagnetic nano metal oxides doping on the critical temperature of a YBCO superconductor, *Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol.* **6** (2015).

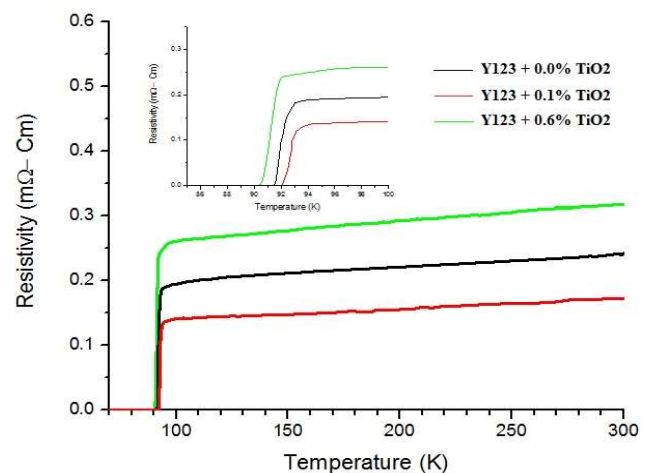
[۶] N.A. Hamid, R. Abd-Shukor, Effects of TiO₂ addition on the superconducting properties of Bi-Sr-Ca-Cu-O system, *J. Mater. Sci.* **35** (2000) 2325–2329.

[۷] Gaojie J. Xu, J.-C. Grivel, A.B. Abrahamsen and N.H. Andersen, Enhancement of the irreversibility field in bulk MgB₂ by TiO₂ nanoparticle addition, *Physica C* **406** (2004) 95–99.

[۸] T.G. Chen, S. Li, W. Gao, Z. Xianyu, H.K. Liu and S.X. Dou, The oxygenation kinetics of YBa₂Cu₃O_{7-δ} (0–30%)Ag superconductors, *Supercond. Sci. Technol.* **11** (1998) 1193–1199.

[۹] Scherrer P 1918 *Mathematisch-Physikalische Klasse* 1918 98.

ریزننگار نمونه‌های خالص و آلیش یافته با دی اکسید تیتانیوم حاکی از ساختار دانه‌ای بوده و افزودن ماده‌ی آلیشی بر مورفولوژی محصول نهایی تاثیری نگذاشته است. به نظر می‌رسد با افزایش مقدار آلیش، نانو ذرات دی اکسید تیتانیوم تمایل دارند به صورت تصادفی بر روی دانه‌های YBCO توزیع شوند. بهبود خواص ابررسانایی وابسته به مقدار ماده‌ی ناخالصی است که به عنوان پوشش روی دانه عمل می‌کند، از این رو خصوصیات ابررسانایی در نمونه‌های با مقادیر ناخالصی مختلف نیز متفاوت است. شکل ۵ نمودار تغییرات مقاومت ویژه بر حسب دما را نشان می‌دهد. تجزیه و تحلیل منحنی‌های فوق به سرشت فلزی در حالت معمولی اشاره دارد و پس از آن گویای گذار تند به فاز ابررسانایی در دمای T_{CO} است. در مقایسه با نمونه‌ی غیر افزایشی، نمونه‌ی با آلیش نانو ذرات به میزان ۰/۱ در صد وزنی با دمای گذار بالاتر و مقاومت ویژه پائین‌تر است. بر این اساس افزودن نانو ذرات دی اکسید تیتانیوم با ۰/۱ در صد وزنی سبب بهبود دمای گذار نسبت به نمونه‌ی خالص و نمونه‌ی آلائیده با ۰/۶ در صد وزنی می‌شود.



شکل ۵: نمودار مقاومت ویژه بر حسب دما

نتیجه گیری

نمونه‌های ابررسانای سرامیکی کپه‌ای YBa₂Cu₃O_{7-x} با روش واکنش حالت جامد ساخته شد. دو نمونه افزایشی با نانو ذرات دی اکسید تیتانیوم با مقادیر ۰/۱ و ۰/۶ در صد وزنی به نمونه‌ی غیرافزایشی آمیخته شد. تحلیل الگوهای پراش نشان از آن دارد که

اثر جرم مؤثر دو گونه اسپینی بر پتانسیل ترمودینامیکی ابرشاره های قلیایی

کیبری، زینب؛ ابراهیمیان، ندا

دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه شاهد، تهران، ۱۵۹-۱۸۱۵۵، ایران

چکیده

بسط نظریه گینزبرگ-لانداو (GL) و نیز معادلات بوگلیوبوف برای ابرشاره های قلیایی با دو گونه اسپینی را در نظر می گیریم. اثر جرم مؤثر دو گونه بر پتانسیل ترمودینامیکی این سیستم ها، با استفاده از محاسبات عددی و همچنین استفاده از مقادیر ثابت شدت برهم کنش در ناحیه BCS، را به دست می آوریم.

The effect of effective mass of two spin species on the thermodynamic Potential of Alkali superfluids

Kabiri, Zeinab; Ebrahimian, Neda

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences,
Shahed University, Tehran, 18155-159, Iran

Abstract

The extension of Ginsburg-Landau (GL) theory and also the Bogoliubov equations for Alkali superfluids with two spin species are considered. The effect of effective mass of two species on the thermodynamic potential of these systems, by using the numerical calculations and also by using the constant values for interaction strength in the BCS region, is obtained.

PACS No. 67,74

مقدمه

متداول متفاوت هستند. به طوری که تئوری BCS متداول (تئوری باردین، کوپر، شریف) که برای ابرشاره ها و ابررساناهای عادی به کار برده می شود در اینجا دیگر قابل استفاده نیست. به همین ترتیب هامیلتونی و انرژی سیستم نیز با فرم متداولی که در ابرشاره های معمولی به کار می رود متفاوت است. همچنین ساز و کار اتم گازهای

اتم های گازهای قلیایی، یک عرصه جدید در علم فیزیک می باشد که در آن به کشف برهم کنش کوانتومی سیستم پرداخته می شود. برای اولین بار در سال ۱۹۹۵ چگالش بوز انیشتین (BEC) در اتم گازهای قلیایی مشاهده شد. گازهای قلیایی با ابرشاره ها و ابررساناهای

برهم کنش دو گونه را با ثابت جفت‌شدگی، $\mathbf{V} = -\frac{\gamma \pi a}{m_R}$ نشان می‌دهیم که در آن $\hbar = 1$ و a به عنوان طول پراکندگی در نظر گرفته می‌شود و جرم مؤثر m_R را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$m_R = \frac{\gamma m_{\uparrow} m_{\downarrow}}{m_{\uparrow} + m_{\downarrow}} \quad (1)$$

هم چنین تعاریف زیر را برای پتانسیل شیمیایی میانگین غیرتعادلی داریم [۳]:

$$\mu_s = \frac{\mu_{\uparrow} + \mu_{\downarrow}}{2} \quad (2)$$

$$h_s = \frac{\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}}{2}$$

بدون این‌که کلیت مسئله از بین رود، فرض می‌کنیم $h_s > 0$ است. همچنین داریم:

$$m_{R'} = \frac{\gamma m_{\uparrow} m_{\downarrow}}{m_{\uparrow} - m_{\downarrow}} \quad (3)$$

با نوشتن هامیلتونی این سیستم به فرم زیر داریم:

$$\hat{H}_{eff} = \sum_a \int d^3r \{ \Psi^\dagger(\vec{r}; i) H(\vec{r}; i) \Psi(\vec{r}; i) + U(r) \Psi^\dagger(\vec{r}; i) \Psi(\vec{r}; i) + \Delta(\vec{r}) \Psi^\dagger(\vec{r}; \uparrow) \Psi^\dagger(\vec{r}; \downarrow) + \Delta^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}; \uparrow) \Psi(\vec{r}; \downarrow) \} \quad (4)$$

که در آن Δ تابع گاف سیستم و $U(r)$ پتانسیل هارتری فوک است. همچنین داریم:

$$H(\vec{r}; i) = \frac{1}{2m_i} (-i\vec{\nabla})^2 - \mu_i \quad i = \uparrow, \downarrow \quad (5)$$

با حل معادلات بوگلیوف انرژی بخش ابرشاره چنین سیستمی را به صورت زیر به دست می‌آوریم [۵]:

$$E_k = +h_s - \frac{\vec{k}^2}{\gamma m_{R'}} + \sqrt{\left(\frac{\vec{k}^2}{\gamma m_R} - \mu_s\right)^2 + \Delta^2} \quad (6)$$

قلیایی بدین صورت است که با در نظر گرفتن یک میدان مغناطیسی خارجی می‌توان برهم‌کنش‌ها را با استفاده از تشدید فضاخ کنترل کرده و امکان گذار سیستم از ناحیه BCS به BEC را فراهم ساخت [۱]. توانایی کنترل قدرتبرهم‌کنش بین اتم‌ها توسط میدان خارجی، امکان جالبی را برای مطالعه گذار بین دو حالت فراهم می‌کند. وقتی $a < 0$ و $|a| \gg 1/k_F$ ، دو گونه اتمی با یکدیگر به طور ضعیف برهم‌کنش می‌کنند و فاز ابرشاره از جفت‌های کوپر مقید ضعیف (و همپوشانی قوی) تشکیل می‌شود که اصطلاحاً می‌گوییم در ناحیه BCS قرار دارند. در مقابل وقتی $a > 0$ و $1/k_F a \ll 1$ باشد سیستم به حالت چگالش بوز-انیشتین، BEC، معمول قرار می‌گیرد (a طول پراکندگی است). در گذار از ناحیه BCS به BEC یک ناحیه میانی یا شبه گاف وجود دارد که وجه تمایز میان ابرشاره های قلیایی با ابرشاره های قدیمی تر است [۲]. گازهای قلیایی به عنوان عرصه جدیدی در ابرشارگی بسیار جالب توجه و از موضوعات مهم و بحث برانگیزی هستند که در سال‌های اخیر ذهن فیزیکدانان را به خود جلب کرده است. محدوده دمایی مورد بررسی برای این نوع ابرشاره ها دماهای پایین است که با استفاده از لیزرهای پیشرفته قابل دسترسی است [۴-۳]. از طرفی یکی از مسائل جالب توجه در زمینه ابرشاره های قلیایی بررسی پتانسیل ترمودینامیکی برای این سیستم‌ها می‌باشد که در این مقاله به آن خواهیم پرداخت.

محاسبات تحلیلی:

سیستم مورد بررسی یک گاز اتم قلیایی از نوع فرمیونی قطبیده در ناحیه BCS است. گاز فرمی قطبیده متشکل از دو گونه اسپینی a و b با اسپین‌های \uparrow و \downarrow ، جرم‌های نابرابر m_{\uparrow} و m_{\downarrow} و پتانسیل شیمیایی μ_{\uparrow} و μ_{\downarrow} می‌باشد.

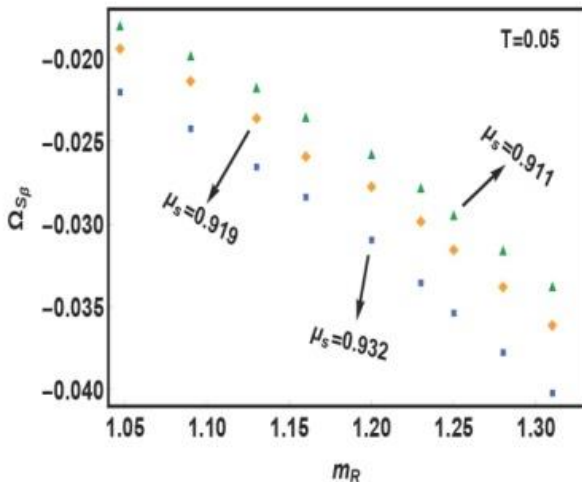
که در آن $\hbar = 1$ می باشد.

$$\frac{1}{m_R a^2} = -\frac{\mu_s}{\zeta} P_{1/2}^2(\zeta) \quad (8)$$

که در آن $P_{1/2}$ تابع لژاندر و $\zeta = -[1 + (\frac{\Delta}{\mu_s})^2]^{-1/2}$ است. با استفاده از این رابطه و با استفاده از مقادیر ثابت برای $\frac{1}{k_F a}$ (شدت برهم کنش ها)، در محدوده BCS، مقادیر مجاز برای ζ و سپس از آن جا مقادیر مجاز برای μ_s و Δ و m_R را پس از انجام محاسبات عددی طولانی، به دست می آوریم [۳].

رسم نمودار و نتیجه گیری

با استفاده از مقادیر عددی مجاز به دست آمده برای m_R نمودار تغییرات پتانسیل ترمودینامیکی را برحسب جرم مؤثر برای سه μ_s مختلف رسم می کنیم. لازم به ذکر است که محدوده مجاز دمایی برای چنین سیستمی را با استفاده از مقادیر عددی محاسبه نمودیم که در محدوده $0.09 T_F < T < 0.2 T_F$ می باشد. در رسم نمودار زیر به دلخواه یک دمای ثابت را در محدوده ذکر شده در نظر گرفتیم.



شکل ۱. نمودار Ω_s بر حسب m_R ، در دمای ثابت $T = 0.05 T_F$

از طرفی در چنین سیستم‌هایی تابع پارش توسط انتگرال مسیر $Z \propto \int D[\bar{\psi}, \psi] e^{-S}$ بر روی میدان‌های فرمیونی تعریف می‌شود که در آن $\bar{\psi}$ و ψ میدان‌های گراسمن و S تابع کنش است که با رابطه $S = S_0 + \int d\tau \int dr g \bar{\psi} \uparrow \bar{\psi} \downarrow \psi \downarrow \psi \uparrow$ داده می‌شود. $(\beta = 1/(k_B T))$ عبارت $g \bar{\psi} \uparrow \bar{\psi} \downarrow \psi \downarrow \psi \uparrow$ برهم کنش بین فرمیون‌ها را نشان می‌دهد. همچنین S تابع برهم کنش فرمیون آزاد است. با استفاده از رابطه $\Omega = -k_B T \ln Z$ ، پتانسیل ترمودینامیکی نقطه زینی برای گاز قلیایی فرمیونی به صورت زیر نوشته می‌شود [۶]:

$$\Omega_s = - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{\beta} \text{Ln}(\nu \cosh \beta E_k + \nu \cosh \beta \mu_s) \right] \quad (7)$$

$$- \xi_k \frac{m_R \Delta^2}{k^2} \Bigg] \frac{m_R \Delta^2}{4\pi a}$$

که در آن E_k ، انرژی شبه ذره است که از رابطه (۴) محاسبه می‌شود.

$$\xi_k = \left(\frac{\bar{k}^2}{2m_R} - \mu_s \right)$$

لازم به ذکر است که

از آن جایی که عدم تقارن در جرم دو گونه فرمیونی حل انتگرال بالا را به صورت تحلیلی بسیار پیچیده می‌کند، برای انجام محاسبات بعدی از محاسبات عددی استفاده می‌کنیم.

محاسبات عددی

معادلات بوگلیوبف در سیستم‌های بس ذره ای از جمله رویکردهای مفید و بسیار پرکاربرد هستند. با استفاده از حل معادلات بوگلیوبف برای سیستم فرمیونی با دو گونه اسپینی رابطه زیر را که رابطه میان طول پراکندگی، تابع گاف، پتانسیل شمیایی و جرم مؤثر را نشان می‌دهد، به دست خواهیم آورد [۷]:

این نمودار تأثیر جرم مؤثر دوگانه را بر پتانسیل ترمودینامیکی نشان می‌دهد.

با رسم نمودار مشاهده می‌شود در یک μ_s ثابت با افزایش جرم مؤثر دوگانه فرمیونی پتانسیل ترمودینامیکی سیستم کاهش می‌یابد. از طرفی در یک جرم مؤثر ثابت پتانسیل ترمودینامیکی با افزایش μ_s کاهش می‌یابد.

از آن جایی که پارامترهای اساسی و مهمی چون پتانسیل شیمیایی میانگین μ_s توسط میدان مغناطیسی فشیخ قابل کنترل است لذا می‌توان ادعا کرد که پتانسیل ترمودینامیکی نقطه زینی در ناحیه BCS ابرشاره توسط فرد آزمایشگر در آزمایشگاه قابل کنترل است.

مرجع‌ها:

- [1] H. Feshbach, *Ann. Phys.* **5**, 357 (1958).
- [2] A. J. Leggett. *In Modern Trends in the Theory of Condensed Matter* (Springer-Verlag, Germany, 1980).
- [3] G. B. Partridge, W. Li, R. I. Kamar, Y.A. Liao and R. G. Hulet, *Science*. **311**, 503 (2006).
- [4] M. W. Zwerlein, A. Schirotzek, C. H. Schunck, and W. Ketterle, *Science*. **311**, 492 (2006).
- [۵] N.Ebrahimian, Z.Safee, *Physica B* **۵۰۹**, ۲۴ (۲۰۱۷)
- [۶] S. N.Klimin, J.Tempere, J.Deverrrse, *PhysicaC*, **۵۰۳**. ۱۳۶(۲۰۱۴).
- [۷] N. Ebrahimian, M. Mehrafarin, R. Afzali, *Physica C* **۴۸۰**, ۴۹ (۲۰۱۲).

بهبود خواص ترموالکتریکی در پیوندگاه های پایه گرافینی فرومغناطیس-ابررسانا

کرباسچی، حسین؛ راشدی، غلامرضا

گروه فیزیک دانشگاه اصفهان، اصفهان

چکیده

در این پژوهش به صورت نظری به بررسی خواص ترموالکتریکی پیوندگاه های پایه گرافینی فرومغناطیس-ابررسانا پرداخته ایم. فرومغناطیس و ابررسانایی در گرافین بواسطه اثر مجاورت در گرافین القا شده است. با استفاده از فرمالیسم بلاندر-تینکهام-کلاپویچ و حل معادله دیراک-بوغولیوبوف-دژن، ضرایب عبور عادی و آندریو بدست آمده است. با انتخاب مقادیر مناسب برای پارامترهای مختلف سامانه می توان به حالتی دست پیدا کرده ایم که در آن رسانندگی گرمایی سامانه افت قابل توجهی دارد در حالی که رسانندگی بار افزایش یافته است. در همین راستا توان خروجی و بازده ترموالکتریکی چنین سامانه ای را در دمایی پایین محاسبه نموده ایم. نتایج بدست آمده نشانگر بهبود قابل توجه ویژگی های ترموالکتریکی این سامانه ها می باشد.

Enhanced thermoelectric properties of graphene-based ferromagnetic-superconductor junctions

Karbaschi, Hossein; Rashedi, Gholamreza

Physics group, University of Isfahan, Isfahan

Abstract

In this research we have theoretically studied the thermoelectric properties of graphene-based Ferromagnetic/Superconductor junction. Ferromagnetism and superconductivity in graphene are assumed to be induced via proximity effect. We calculate the normal and Andreev reflection probabilities using the Blonder-Tinkham-Klapwijk (BTK) formalism to solve the Dirac-Bogoliubov-de Gennes equation. By a special choice of system parameters it is possible to achieve a condition in which thermal conductance declines significantly while electrical conductance increases. We also calculate output power and thermoelectric power-conversion efficiency at low temperature based on such a structure. The obtained results show that the thermoelectric properties of such structures is strikingly enhanced.

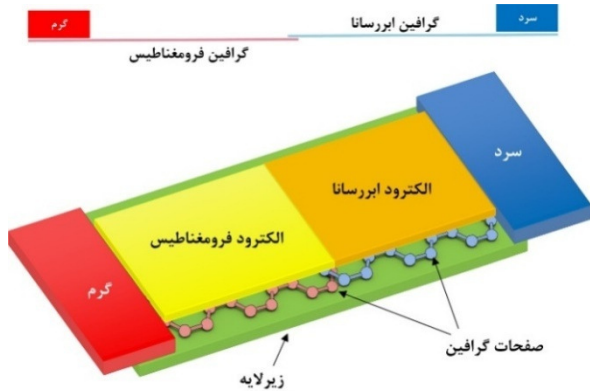
PACS No. 72.80.Vp, 74.25.fg, 73.23.Ad.

محدود کرده است. کارایی ادوات ترموالکتریک گاهی بر اساس ضریب بدون بعد $ZT = (S^2GT)/\kappa$ بیان می گردد که در آن G رسانندگی الکتریکی، S ضریب سی بک، T دما و κ رسانندگی گرمایی است. بر همین اساس طراحی ادوات ترموالکتریک با ضریب ZT بالا نیازمند راهکارهایی جهت افزایش G و کاهش κ است. در دهه اخیر جستجوی مواد و ساختارهایی با ضریب ZT بالا توجه زیادی را به خود جلب کرده است. بر همین اساس دو راهکار عمده پیشنهاد شده است. در راهکار اول تلاش می شود تا

مقدمه

ترموالکتریک پدیده ای است که منجر به تولید جریان الکتریکی بواسطه گرادیان دمایی (اثر سی بک) و یا ایجاد جریان گرمایی بواسطه اعمال میدان الکتریکی (اثر پلته) می گردد [1]. مولدهای جریان ترموالکتریک دارای مزایای متعددی نسبت به مولدهای جریان معمول هستند اما با وجود مزایای زیاد ادوات ترموالکتریک، پایین بودن توان خروجی و بازده، از لحاظ اقتصادی کاربرد آنها را

افزایش رسانندگی بار و کاهش رسانندگی گرمایی بواسطه افزایش در مقدار بازتاب آندریو است. بازتاب آندریو یک نوع از پراکندگی ذرات است که در فصل مشترک مواد عادی و ابرسانا رخ می دهد. در این پدیده یک الکترون (حفره) با انرژی کمتر از انرژی گاف ابرسانا و از سمت ناحیه عادی پس از برخورد به فصل مشترک با ناحیه ابرسانا تولید یک زوج کوپر در ناحیه ابرسانا و یک حفره (الکترون) بازگشتی در ناحیه عادی میکند [3].



شکل ۱: طرح ساختار پیوندگاه فرومغناطیس-ابرسانا پایخ گرافینی در نظر گرفته شده در این مقاله.

روش محاسبات

شکل ۱ طرح ساختار در نظر گرفته شده در این مقاله را نشان می دهد که فرومغناطیس و ابرسانایی بواسطه اثر مجاورت الکتروودهای فرومغناطیس و ابرسانا در گرافین القا شده است. این ساختار در دو طرف به دو اتصال با دمای سرد $T_c = 10 K$ و دمای گرم $T_h = 12 K$ متصل شده است. نقطه شروع محاسبات حل معادله دیراک-بوگولیوبوف-دژن به شکل زیر است:

$$\begin{pmatrix} H_0 - \sigma h & \Delta \\ \Delta^* & -(H_0 - \bar{\sigma} h) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\sigma \\ v_\sigma \end{pmatrix} = \epsilon_\sigma \begin{pmatrix} u_\sigma \\ v_\sigma \end{pmatrix} \quad (1)$$

که در آن $H_0 = -i\hbar V_F (\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) - E_F$ است و \hbar ثابت پلانک، v_F سرعت فرمی و σ_x و σ_y ماتریس های پاولی هستند. همچنین ϵ_σ انرژی نسبت به انرژی فرمی، h انرژی تبدالی ناحیه فرومغناطیس و Δ گاف انرژی ابرسانایی است. مقدار σ برای اسپین های بالا و پایین به ترتیب برابر ۱ و -۱ می باشد و $\sigma = -\bar{\sigma}$. با حل معادله فوق توابع موج در نواحی فرومغناطیس به شکل زیر بدست می آید:

موادی با ساختار کریستالی پیچیده یافت شوند که این ساختار پیچیده عمدتاً منجر به کاهش K و نهایتاً افزایش ZT میشود. راهکار دوم کاهش ابعاد سامانه به دو، یک و یا صفر بعد است. راهکار اخیر در این مقاله با بررسی ویژگی های ترموالکتریکی یک پیوندگاه پایه گرافینی دنبال خواهد شد.

گرافین به عنوان یک دگرشکل دو بعدی از اتم کربن، یک صفحه از اتمهای کربن است که بواسطه پیوند بین اربیتال های هیبریدی sp^2 و در یک شبکه لانه زنبوری در کنار یکدیگر قرار گرفته اند. ویژگی های خاص این ساختار ناشی از یک اربیتال P_z باقی مانده است که بواسطه آن الکترونها در صفحه گرافین با سرعت بسیار بالا حرکت می کنند. تقریب بستگی قوی نشان می دهد که گرافین یک نیمه رسانا با گاف انرژی صفر بین نوارهای رسانش و ظرفیت است. در انرژی های برانگیختگی کوچک رابطه پاشندگی حامل های بار در گرافین خطی است و این حامل ها شبیه به فرمیون های دیراک بدون جرم رفتار می کنند. ویژگی های جالب توجه گرافین، محققان زیادی را به بررسی خواص ترابردی الکترونی، گرمایی و اسپینی علاقه مند کرده است. رسانندگی الکترونی بالای گرافین این ماده را کاندید مناسبی برای استفاده در ادوات ترموالکتریک پیشنهاد می کند اما این ساختار به دلیل بالا بودن رسانندگی گرمایی دارای خواص ترموالکتریک ضعیفی است. در این مقاله ما به بررسی یک پیوندگاه فرومغناطیس-ابرسانا پایه گرافینی و در رژیم ترابرد پروازی می پردازیم و نشان خواهیم داد که رسانندگی گرمایی چنین ساختاری را می توان به شدت کاهش داد که این امر منجر به افزایش خواص ترموالکتریکی این ساختار خواهد شد. ساختاری که در این مقاله در نظر گرفته شده شامل دو صفحه گرافینی است که دارای یک همپوشانی کوچک روی هم هستند، شکل ۱. مطالعات پیشین نشان می دهد که در چنین ساختاری رسانش گرمایی شبکه به شدت کاهش خواهد یافت و این در حالی است که ویژگی های الکترونی آن تقریباً بدون تغییر باقی خواهد ماند [2]. از طرف دیگر به دلیل اینکه محاسبات ما به دمای پایین محدود شده است در ادامه تنها سهم الکترونی جریان بار و گرمایی را در نظر خواهیم گرفت و از سهم فونونی آن صرف نظر خواهیم کرد. ایده اصلی رهیافت این مقاله بر اساس

$$I = \frac{e}{\pi\hbar} \int d\epsilon \int \cos(\alpha) d\alpha T_{ch} M_{2D}^G \quad (13)$$

$$\times \left(f\left(\frac{\epsilon - \mu_h}{k_B T_h}\right) - f\left(\frac{\epsilon - \mu_c}{k_B T_c}\right) \right)$$

$$T_{ch} = \sum_{\sigma=\pm 1} 1 - |r_{N\sigma}|^2 + |r_{A\sigma}|^2 \quad (14)$$

و بخش الکترونی جریان گرمایی از روابط زیر بدست می آید:

$$Q = \frac{1}{\pi\hbar} \int d\epsilon (\epsilon - \mu) \int \cos(\alpha) d\alpha T_Q M_{2D}^G \quad (15)$$

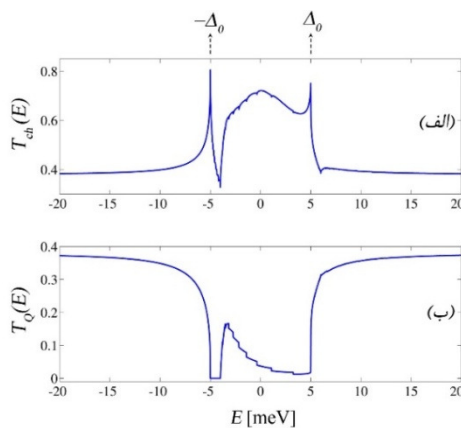
$$\times \left(f\left(\frac{\epsilon - \mu_h}{k_B T_h}\right) - f\left(\frac{\epsilon - \mu_c}{k_B T_c}\right) \right)$$

$$T_Q = \sum_{\sigma=\pm 1} 1 - |r_{N\sigma}|^2 - |r_{A\sigma}|^2 \quad (16)$$

در روابط فوق $M_{2D}^G = 2W|\epsilon|/\pi\hbar v_F$ تعداد مدهای رسانندگی در گرافین و f تابع توزیع فرمی دیراک است. همچنین T_Q و T_{ch} نمایانگر توابع عبور بار و گرمایی می باشند.

نتایج و بحث

شکل بهینه تابع عبور بار به منظور به حداکثر رساندن توان خروجی و بازده ترموالکتریک یک تابع مربعی شکل است که اجازه عبور به حامل های بار با انرژی هایی در یک محدوده خاص را بدهد [4]. از طرف دیگر بازده زمانی بیشینه خواهد شد که تابع عبور گرمایی در همین محدوده از انرژی بسیار کوچک باشد. با توجه به معادلات ۱۳-۱۶، بازتاب آندریو می تواند همزمان باعث بهبود در تابع عبور بار و کاهش تابع عبور گرمایی شود. از آنجایی که بازتاب آندریو در انرژی های کوچکتر از انرژی گاف ابررسانا قابل توجه است، با در نظر گرفتن این پدیده و با تغییر در پارامترهای مختلف سامانه، یک تابع عبور بار مربعی شکل و یک تابع عبور گرمایی به شکل چاه بدست خواهد آمد، شکل ۲.



شکل ۲: (الف) تابع عبور بار و (ب) تابع عبور گرمایی.

$$\psi_{F\sigma e}^{\pm} = \frac{e^{(\pm ik_F e_{\sigma} x + iqy)}}{\sqrt{\cos \alpha_{F\sigma}}} \begin{pmatrix} \pm e^{\pm i\alpha_{\sigma}} \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$\psi_{F\bar{\sigma} h}^{\pm} = \frac{e^{(\pm ik_F e_{\bar{\sigma}} x + iqy)}}{\sqrt{\cos \alpha_{F\bar{\sigma}}}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \pm e^{\pm i\alpha_{\bar{\sigma}}} \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$k_{F\sigma e} = \frac{\sqrt{(\epsilon + E_F + \sigma\hbar)^2 - (mv_F^2)^2}}{\hbar v_F} \cos \alpha_{\sigma} \quad (4)$$

$$k_{F\bar{\sigma} h} = \frac{\sqrt{(\epsilon - E_F + \bar{\sigma}\hbar)^2 - (mv_F^2)^2}}{\hbar v_F} \cos \alpha_{\bar{\sigma}} \quad (5)$$

و برای ناحیه ابررسانا:

$$\psi_{se}^{\pm} = e^{(iqy \pm i(k_0 + i\chi)x)} \begin{pmatrix} e^{i\beta} \\ \pm e^{i(\beta \pm \gamma)} \\ 1 \\ \pm e^{i\gamma} \end{pmatrix} \quad (6)$$

$$\psi_{sh}^{\pm} = e^{(iqy \mp i(k_0 - i\chi)x)} \begin{pmatrix} e^{-i\beta} \\ \mp e^{-i(\beta \mp \gamma)} \\ 1 \\ \mp e^{-i\gamma} \end{pmatrix} \quad (7)$$

$$\beta = \begin{cases} \cos^{-1}(\epsilon/\Delta_0), & \epsilon \leq \Delta_0 \\ -i \cos^{-1}(\epsilon/\Delta_0), & \epsilon > \Delta_0 \end{cases} \quad (8)$$

$$\gamma = \sin^{-1}\left(\frac{\hbar q v_F}{U_0 + E_F}\right) \quad (9)$$

$$k_0 = \sqrt{\left(\frac{U_0 + E_F}{\hbar v_F}\right)^2 - q^2} \quad (10)$$

$$\chi = \left(\frac{U_0 + E_F}{k_0(\hbar v_F)^2}\right) \sin \beta \quad (11)$$

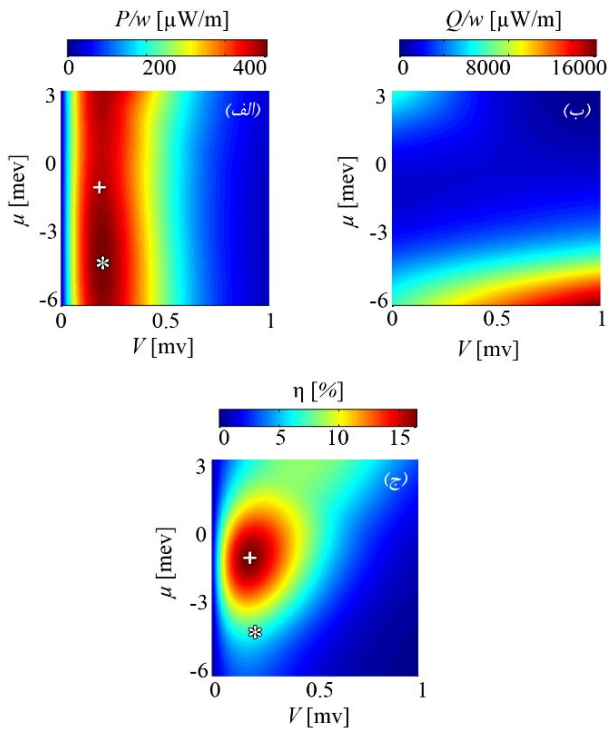
با اعمال شرایط مرزی به شکل زیر بر روی توابع موج می توان ضرایب عبور و بازتاب را محاسبه نمود:

$$\psi_{F\sigma e}^+ + r_{N\sigma} \psi_{F\sigma e}^- + r_{A\sigma} \psi_{F\bar{\sigma} h}^- = t_{e\sigma} \psi_{se}^+ + t_{h\bar{\sigma}} \psi_{sh}^- \quad (12)$$

که $t_{e(h)\sigma}$ به ترتیب ضرایب عبور الکترون (حفره) گونه، ضریب بازتاب عادی و ضریب بازتاب آندریو هستند. در رژیم پاسخگویی غیرخطی بازده ترموالکتریک مولد جریان به صورت کسر توان استخراجی بر روی گرمای از دست رفته از اتصال گرم سامانه تعریف می شود:

$$\eta = \frac{P}{Q_h} \quad (13)$$

توان خروجی از رابطه $P = VI$ بدست می آید که V ولتاژ بایاس است و جریان هم از رابطه زیر محاسبه می شود:



شکل ۴: (الف) توان خروجی، (ب) جریان گرمایی خروجی از اتصال گرم، (ج) بازده ترموالکتریک.

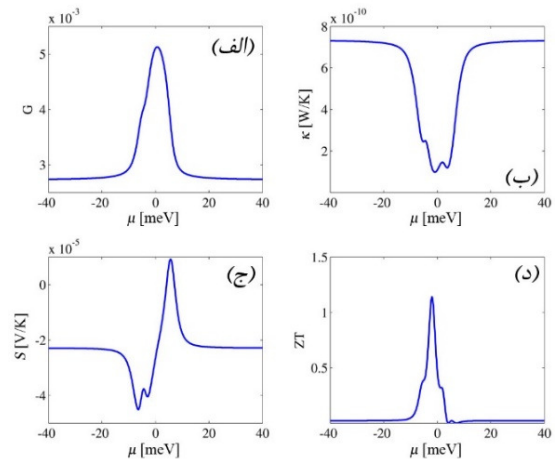
نتیجه گیری

در این مقاله خواص ترموالکتریکی یک پیوندگاه فرومغناطیس- ابرسانا پایه گرافینی در دمای پایین مورد بررسی قرار گرفته است. با در نظر گرفتن بازتاب آندریو و با تغییر پارامترهای مختلف سامانه به توابع عبور بار و گرمایی تقریباً بهینه ای دست یافتیم که منجر به بیشینه شدن توان خروجی و بازده ترموالکتریکی (و رسانش بار، ضریب سی بک و ضریب ZT در رژیم پاسخگویی خطی) شده است.

مرجع ها

- [1] D. M. Rowe, ed., *Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano*, CRC press, 2006.
- [2] V. Hung Nguyen ant etc., *Applied Physics Letters* **105**(13),133105 2014.
- [3] C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 067007, 2006.
- [4] H. Karbaschi and etc., *Phys. Rev. B* **94**, 115414, 2016.

محاسبات رژیم پاسخگویی خطی با استفاده از توابع عبور بدست آمده در شکل ۲ نشان می دهد که چنین توابع عبوری منجر به کاهش شدید رسانندگی گرمایی و افزایش چشمگیر رسانندگی بار می شود، شکل ۳.



شکل ۵: (الف) رسانش بار، (ب) رسانش گرمایی، (ج) ضریب سی بک و (د) ضریب ZT

در شکل ۴، توان خروجی، جریان گرمایی خروجی از اتصال گرم و بازده ترموالکتریک سامانه با استفاده از توابع عبور اشاره شده و بر حسب V و μ رسم شده اند. همانگونه که در قسمت (ب) این شکل مشخص است با در نظر گرفتن بازتاب آندریو و در یک بازه مشخص از V و μ گرمای خروجی از اتصال گرم بسیار کوچک خواهد بود و انتخاب نقطه کار در این بازه به شرط بالا بودن توان خروجی منجر به بهینه شدن بازده ترموالکتریک سامانه خواهد شد. در این شکل نقاط برجسته زده شده با ستاره نقطه بیشینه توان خروجی را نشان می دهد که در آن $P_{max}/w = 4.02 \times 10^{-4} W/m$ و بازده در این نقطه برابر با ۸ درصد است که چیزی در حدود نصف بازده کارنو در محدوده دمایی انتخاب شده است. همچنین نقاط برجسته زده شده بوسیله علامت "+" مکان بیشینه بازده را نشان می دهد که در آن بازده برابر با ۱۵ درصد است که در حدود ۰/۹ بازده کارنو است. با توجه به اینکه توان خروجی در مکان بیشینه بازده $P_{\eta max}/w = 3.8 \times 10^{-4} W/m$ می باشد و این توان نزدیک به توان خروجی بیشینه است انتخاب این نقطه به عنوان نقطه کار سامانه ترموالکتریک مناسبتر است.

بررسی گذار فاز کوپرات‌های LSCO و BSCCO با مدل الیاشبرگ

کریمی، فرید؛ صاحب‌سرا، پیمان

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

در این پژوهش سازوکار جفت‌شدگی الکترون‌های ابررسانایی، توسط هامیلتونی الیاشبرگ که برهم‌کنش‌های الکترون-الکترون و الکترون-فونون را مدل‌بندی می‌کند، بررسی می‌شود. مجموعه معادلات بدست آمده در مدل الیاشبرگ پارامترهای زیادی نظیر پارامتر نظم ϕ ، تابع بازهنجارسازی جرم Z ، و تابع جابه‌جایی انرژی χ را توضیح دهند. ابتدا به کمک معادلات الیاشبرگ برای تعدادی از ابررساناهای دمای بالا، پارامتر طیفی $\alpha^2 F(\omega)$ را بر مبنای دو روش مختلف تحلیلی محاسبه کرده و به کمک آن دمای گذار ابررسانایی را به دست می‌آوریم. این محاسبات در غیاب ناخالصی انجام شده و مواد مورد مطالعه دارای تقارن موج d هستند.

Study of phase transition in BSCCO and LSCO by Eliashberg model

Karimi, Farid ; Sahebsara, Peyman

Department of Physics, Isfahan University of technology, Isfahan

Abstract

The superconducting properties of a material can be described by Eliashberg model. As well as electron-phonon pairing, electron-electron coupling mechanism, is crucial for transition to superconductivity below critical temperature. Eliashberg equations drives many parameters such as order parameter ϕ , mass renormalization function Z , the energy shift χ . In this paper, by using these equations, we calculate Eliashberg spectral function $\alpha^2 F(\omega)$, using two different methods. Consequently, we calculate Transition temperature for cuprate high-temperature superconductors. These calculations are carried out in the absence of impurities and the materials studied have d -wave symmetry.

مقدمه

انرژی ابررسانایی یکی از چالش‌ها و کاستی‌های این نظریه است. باید توجه داشت که به دلیل استفاده از تقریب‌های متعدد در این نظریه تنها جفت‌شدگی‌های ضعیف در نظر گرفته می‌شوند. توسعه نظریه BCS به مدل الیاشبرگ می‌انجامد. نظریه الیاشبرگ به خوبی می‌تواند ویژگی‌های فیزیکی ابررساناهای کلاسیک فونون-واسطه را توجیه کند. همچنین این نظریه می‌تواند ویژگی‌های ترمودینامیکی ابررساناهای دمای بالا را نیز توجیه کند. علاوه بر این مدل الیاشبرگ توصیف خوبی برای ابررساناهای با جفت‌شدگی قوی خواهد بود. نقطه آغازین نظریه الیاشبرگ هامیلتونی الکترون-فونون فروهلش^۱ است، که جفت‌شدگی الکترون و فونون را توصیف می‌کند. عموماً

ساز و کار اصلی در ابررسانایی تشکیل حالت‌های همدوس بر اساس زوج الکترون‌های کوپر است. ابررساناهای دمای بالا در سال ۱۹۸۶ کشف شدند. تقریباً ۷۰ سال پس از کشف ابررساناهای دمای پایین که فیزیک آن‌ها توسط نظریه BCS^۲ قابل توضیح بود. نظریه BCS با ساده‌سازی برهم‌کنش‌ها موفق می‌شود که یک فرمولبندی بر مبنای جفت‌شدگی ایجاد کند. یکی از ویژگی‌های نظریه BCS جهان‌شمول بودن آن است بدین معنی که ابررساناهای متعارف و غیرمتعارف را از هم تمیز نمی‌دهد [۸]. به همین دلیل در ابررساناهای جدید پیش‌بینی ویژگی‌های ابررسانایی نظیر دمای گذار و یا گاف

^۱Fröhlich Hamiltonian

^۲Bardeen-Cooper-Schrieffer

$$\Sigma(k, i\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{k'm'l\lambda} \sigma_{\uparrow} G(k', i\omega_{n'}) \sigma_{\uparrow} [|g_{k,k',\lambda}|^2 D_{\lambda}(k - k', i\omega_n) - i\omega_{n'} + V_c(k - k')] \quad (5)$$

در این معادله $D_{\lambda}(q, i\omega_n) = \gamma \omega_{q\lambda} / [(i\omega_n)^2 - \omega_{q\lambda}^2]$ پوش انتشارگر فونونی نامیده می‌شود.

با قراردادن این خودانرژی در معادله تابع گرین و البته بر این اساس که هم خودانرژی و هم تابع گرین ماتریس‌های 2×2 ای هستند می‌توان آن‌ها را به کمک ماتریس‌های پاولی بازنویسی کرد تا نهایتاً به صورت معادلات الیاشبرگ نوشته شوند

$$[G(k, i\omega_n)]^{-1} = i\omega_n Z(k, i\omega_n) \sigma_z + [\epsilon_k + \chi(k, i\omega_n)] \sigma_x + \phi(k, i\omega_n) \sigma_y \quad (6)$$

با کمک این تابع گرین و البته معادله خودانرژی که ذکر شد به مجموعه‌ای از سه دسته معادله جفت‌شده برای ϕ ، Z و χ دست می‌یابیم.

در این معادلات به کمک ماتریس جفت‌شدگی الکترون-فونون تابعی تعریف می‌شود که تابع طیفی الکترون-فونون یا تابع طیفی الیاشبرگ^۵ نامیده می‌شود که به صورت زیر معرفی می‌شود [۱]

$$\alpha^2 F(\omega) = N_F \sum_{\lambda} |g_{k,k',\lambda}|^2 \delta(\omega - \omega_{k-k',\lambda}) \quad (7)$$

کوپرات‌ها به عنوان نخستین ابررساناهای دمای بالا شناخته می‌شوند. این مواد که ابررسانای شبه‌دوبعدی در نظر گرفته می‌شوند دارای لایه‌های جفت شده از کوپراکسید CuO_2 هستند که ابررسانایی در این لایه‌ها رخ می‌دهد و به همین دلیل است که آن‌ها را شبه‌دوبعدی در نظر می‌گیریم.

Bi2212 و LSCO دو نمونه از این مواد هستند. ساختار این دو ماده شبه پروسکایتی است. ساختار آن‌ها در شکل ۱ رسم شده‌است. در این دو نمونه با تقارن d موجی مواجه هستیم.

به‌دست آوردن (۶) ما را در محاسبه گاف ابررسانایی و دمای گذار ابررسانایی یاری می‌کند. ولی این محاسبه به صورت عمومی کمی پیچیده خواهد بود.

یکی از روش‌های محاسبه تابع الیاشبرگ توسط گروه امارینو و گونلی ارائه شده‌است [۲]. در این روش تابع الیاشبرگ براساس این حقیقت که ابررسانایی تنها در نزدیکی سطح فرمی مشاهده می‌شود بسط داده می‌شود. زوایای سمت‌الرأس^۶ در این بسط نقش مهمی دارند. و توابع $\psi_i(\phi)$ که ϕ زاویه سمت‌الرأس بردار k در صفحه

برای سهولت در محاسبات هامیلتونی فروهلیش در نمایش نمبو^۳ نوشته می‌شود.

به دست آمدن معادلات الیاشبرگ مستلزم حل تابع گرین و خود انرژی سیستم است که سه دسته معادله جفت‌شده در بردارهای موهمومی به ما می‌دهند. این معادلات ساختار بسیار پیچیده‌ای دارند که به شکل عمومی به دست آوردن نتایج دقیق آن غیرممکن خواهد بود. پس مجموعه‌ای از تقریب‌ها و روش‌ها برای حل این معادلات به کار می‌روند.

مدل

برای دستیابی به معادلات الیاشبرگ از هامیلتونی فروهلیش

$$H = \sum_k \epsilon_k \Psi_k^{\dagger} \sigma_{\uparrow} \Psi_k + \sum_{q\lambda} \Omega_{q\lambda} b_{q\lambda}^{\dagger} b_{q\lambda} + \sum_{kk'\lambda} g_{k,k',\lambda} \phi_{k-k',\lambda} \Psi_{k'}^{\dagger} \sigma_{\uparrow} \Psi_k + \frac{1}{\gamma} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \langle k_3 k_4 | V_c | k_1 k_2 \rangle (\Psi_{k_3}^{\dagger} \sigma_{\uparrow} \Psi_{k_1}) (\Psi_{k_2}^{\dagger} \sigma_{\uparrow} \Psi_{k_4}) \quad (1)$$

شروع کرده و آن را در نمایش نمبو می‌نویسیم. در نمایش نمبو عملگرهای خلق و فنا الکترونی به ترتیب در عملگرهای Ψ_k^{\dagger} و Ψ_k و عملگرهای خلق و فنا فونون را در عملگر ϕ_q می‌نویسد

$$\Psi_k^{\dagger} = \begin{pmatrix} c_{k\uparrow}^{\dagger} & c_{-k\downarrow} \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad \Psi_k = \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow} \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$\phi_q = b_q + b_{-q}^{\dagger}$$

در این رابطه ϵ انرژی تک الکترون‌ای است σ_3 ماتریس پاولی، Ω فرکانس فونونی و مهم‌ترین عنصر $g_{k,k',\lambda}$ ماتریس الکترون فونون نامیده می‌شود.

برمبنای این هامیلتونی ماتریس تابع گرین 2×2 نوشته می‌شود. این ماتریس از دو تابع گرین ماتسویارا بر روی قطر اصلی و دو تابع گرین گورکوف^۴ بر روی عناصر غیرقطری تشکیل شده‌است.

به کمک معادلات دایسون تابع گرین را به صورت زیر می‌توان نوشت

$$\hat{G}^{-1}(k, i\omega_n) = \hat{G}_0^{-1}(k, i\omega_n) - \hat{\Sigma}(k, i\omega_n) \quad (3)$$

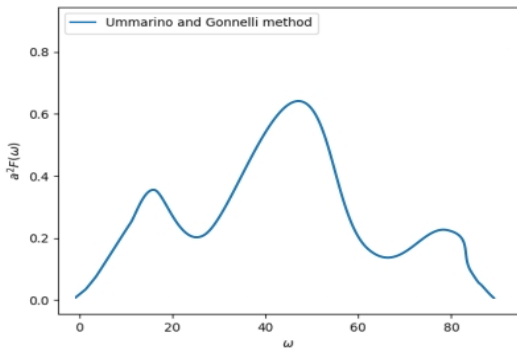
که $i\omega_n$ فرکانس ماتسویارا معرفی شده و به صورت $i\omega_n = i(2n + 1)\pi/\beta$ است.

به کمک نمودارهای فاینمن و هامیلتونی فروهلیش خودانرژی الکترونی که از دو بخش توزیع الکترون-فونونی و توزیع کولونی تشکیل شده‌است نوشته می‌شود

^۵ Eliashberg function

^۶ Azimuthal angle

^۳ Nambu representation
^۴ Gorkov Green's function



شکل ۱: تابع طیفی الکترون-فونون برحسب فرکانس رسم شده است [۲].

و $1 + \omega e^{-\omega/\delta} \times 2 \lambda$ است. χ آرایش و δ ثابت است و برای مواد مختلف مقدار متفاوتی دارد [۴]. راه کار دوم که توسط کرسین ارائه شده است به گونه زیر است [۶]

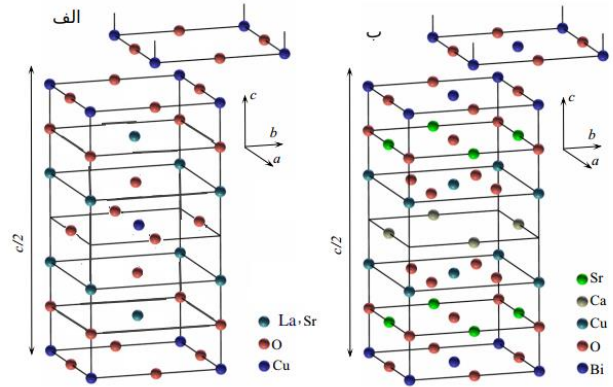
$$T_c = 0.72 \omega \exp\left(\frac{\gamma}{\lambda_{eff}} - 1\right)^{1/2} \quad (11)$$

در این عبارت $\omega = \left(\frac{\gamma}{\lambda} \int_0^\infty \omega \alpha'' F(\omega) d\omega\right)^2$ و $\lambda_{eff} = (\lambda - \mu^*)(1 + 2\mu^* + \frac{\gamma}{\lambda} \lambda \mu^* e^{\gamma/\lambda})$ است [۶].

نتایج

به کمک دو راه کار برای محاسبه تابع الیاشبرگ و دو راه کار برای محاسبه دمای گذار می توان دمای گذار را برای کوپرات ها محاسبه کرد. در شکل ۲ نمودار تابع طیفی الیاشبرگ برحسب فرکانس رسم شده است. شکل ۳ برای دمای گذار به عنوان تابعی از پارامتر جفت شدگی الیاشبرگ برای Bi۲۲۱۲ رسم شده است.

شکل ۴ دمای گذار LSCO را به عنوان تابعی از λ نشان می دهد. در تمامی این محاسبات شبه پتانسیل کولونی مقدار معمول خود را که $\mu^* = 0.13$ است برگزیده است [۵]. این محاسبات نشان می دهد که T_c به شدت به تقریب مورد استفاده وابسته است و در برخی موارد بستگی کمی هم به روش مورد استفاده در محاسبه تابع الیاشبرگ دارد. بهینه آلییده برای Bi۲۲۱۲ که $\chi = 0.16$ است در $\lambda = 1/23$ رخ می دهد که در محاسبات تجربی دمایی نزدیک به ۹۰ کلوین را حاصل می شود. در نزدیکی بهینه آلییده روش [۶] با دمایی نزدیک به ۸۰ کلوین تقریب خوبی با نتایج تجربی دارد حال آن که روش [۴] در بهینه آلییده دمایی به نسبت پایین تر را حاصل می شود. اما در حالت های کمینه آلییده و بیشینه آلییده در مقایسه این نمودارها با داده های تجربی برای Bi۲۲۱۲، در حالی که



شکل ۲: الف) ساختار بلوری LSCO نشان داده شده است. لایه های کوپراکسید در بالا و پایین ساختار نمایش داده شده اند. در این ساختار $a = b = 3.718$ و $c = 13.12$ است که منجر به ساختار تتراگونال می شود.

ب) ساختار بلوری BSCCO نشان داده شده است. در این ساختار $a = 0.7414$ و $b = 0.7418$ و $c = 3.0189$ که این موضوع منجر به ساختار هگزاگونال در این ماده می شود. ولی برای سادگی این ساختار تتراگونال یا دقیق تر شبه تتراگونال در نظر گرفته شده است.

ab است جانشین بردارهای موج می شوند. نتیجه به صورت زیر خواهد شد [۲]

$$\alpha''(\omega, \phi, \phi') F(\omega) = \alpha_s'' F(\omega) + \alpha_d'' F(\omega) \psi_s(\phi) \psi_s(\phi') \quad (7)$$

شاخص s به معنای تقارن موج- s و شاخص d به معنای تقارن موج- d است. از آنجایی که کار کردن با زوایای سمت الرأسی به پیچیدگی کار می افزاید پس به کمک روابطی که این زوایا با بردارهای موج دارند می توانیم عبارت را به صورت زیر بازنویسی کنیم

$$\alpha''(\omega, k, k') F(\omega) = \alpha_s'' F(\omega) + \alpha_d'' F(\omega) [\cos(k_x) - \cos(k_y)] [\cos(k'_x) - \cos(k'_y)] \quad (8)$$

برای سادگی به کمک تقریب میگدال $\alpha_d'' F(\omega) = g_d \alpha_s'' f(\omega)$ و در معادله (۸) می گذاریم.

دومین روش برای ساده سازی (۶) راه کار گروه اسلام است [۳]، در این روش جفت شدگی الکترون-فونون $\alpha''(\omega)$ را ساده می کنیم. این ساده سازی ها در نهایت منجر به عبارت زیر می شود

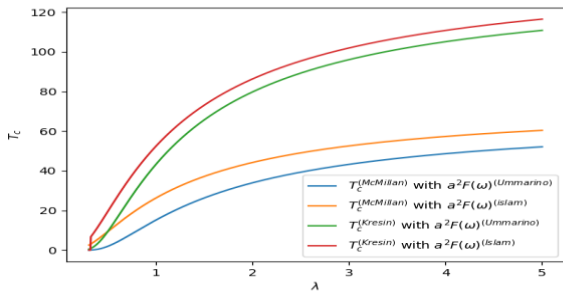
$$\alpha'' F(\omega) = [\omega \alpha_s'' + \omega_{eff} \delta(\omega - \omega_{eff})] F(\omega) \quad (9)$$

حال برای محاسبه دمای گذار از دو راه کار متفاوت که توسط کرسین و مک میلان ارائه شده است استفاده می کنیم [۶ و ۴].

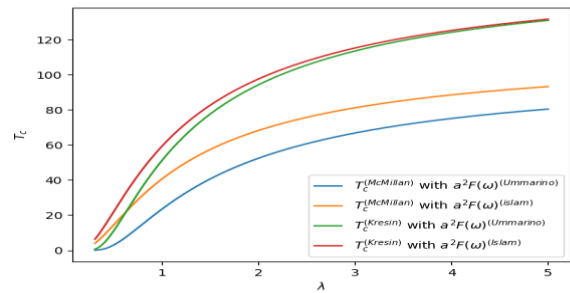
معادله مک میلان به صورت زیر خواهد بود [۴]

$$T_c = \frac{\omega_1}{1/2} \exp\left[-1/0.4 \frac{1+\lambda}{\lambda - \mu^*(1+0.162\lambda)}\right] \quad (10)$$

در این عبارت μ^* شبه پتانسیل کولونی. $\omega_1 = \frac{\gamma}{\lambda} \int_0^\infty \alpha'' f(\omega) d\omega$



شکل ۴: نمودار دمای بحرانی بر حسب پارامتر جفت شدگی الکترون-فونون برای LSCO رسم شده است. در این نمودار هم، همانند شکل ۳ از دو راه کار مختلف برای دمای بحرانی و دو راه کار مختلف برای تابع الیاشبرگ بهره برده ایم.



شکل ۳: نمودار دمای گذار بر حسب پارامتر جفت شدگی الکترون فونون برای Bi2212 رسم شده است. همان طور که در شکل مشخص است نمودارهای با رنگ های مختلف از دو روش متفاوت برای محاسبه دمای بحرانی مک میلان یا کرسین T_C^K ، و دو روش متفاوت برای محاسبه تابع الیاشبرگ بهره برده اند. مقایسه دماهای متمایز به دست آمده و همچنین مقایسه آن‌ها با نتایج تجربی جالب است.

مراجع

- [۱] E. R. Margine, and G. Feliciano, *Physical Review B* **87**, ۲ (۲۰۱۳) 024505.
- [۲] G. A. Gonnelli, R. S. Ummarino, and V. A. Stepanov, *Physica C: Superconductivity* **275**, 1-2 (۱۹۹۷) 162.
- [۳] A. T. M. N. Islam, and A. K. M. A. Islam, *Journal of Superconductivity* **13**, 4 (۲۰۰۰) 559.
- [۴] W. L. McMillan, *Phys. Rev.* **167** (۱۹۶۸) 331.
- [۵] P. B. Allen, and B. Mitrović, *Solid State Physics*, **37**, (۱۹۸۳) 1.
- [۶] V. Z. Kresin, *Physics Letters A* **122**, ۸ (۱۹۸۷) 434.
- [۷] A. A. Kordyuk et al., *Physical Review Letters* **97**, 1 (۲۰۰۶) 017002.
- [۸] I. Askerzad, "Unconventional Superconductors", Springer Series in Materials Science (۲۰۱۲).

محاسبات تجربی [۷] نشان می دهد $T_C^{\lambda=3/28} = 81/66 = 1.23$ می بینیم که نتایج روش [۴] از تقریب خوبی برخوردار است به خصوص زمانی که تابع الیاشبرگ توسط تقریب [۳] انجام گرفته است (به عدد با مطابقت خوب $T_C = 84/33$ می رسیم). آنچه از نمودار و نتایج تجربی مشخص است این است که روش [۴] در شرایط بهینه آلاینده نتایج خوبی را به ما نمی دهد در $x = 0.16$ این روش دمایی بین $45 < T_C < 35$ ارائه می دهد که مشخصاً با دمای تجربی نزدیک به ۹۰ کلوین متفاوت است. ولی تقریب خوبی که این روش در مقیاس کمینه آلاینده و بیشینه آلاینده دارد قابل توجه است.

این نتیجه در مورد LSCO نیز تا حدودی صدق می کند داده های تجربی به عنوان نمونه برای $\lambda = 2/25$ دمای بحرانی ۴۰ کلوین را نشان می دهد که در مقایسه با نتایج نمودار مشاهده می شود که در مواردی که از روش [۳] برای محاسبه تابع الیاشبرگ استفاده شده به $T_C^M = 46$ کلوین می رسیم در مقایسه روش [۲] به دمای $T_C^M = 37$ منجر می شود. تنها تفاوت اینجاست که راه کار [۶] تقریباً در تمام آرایش ها دمای بحرانی بسیار بالاتری از حد انتظار و مقادیر تجربی نمایش می دهد.

سنتز ابررسانای MgB_2 و بررسی خواص تراپردی آن

کیافیروزکوهی^۱، نرجس سادات^۱؛ کمیلی^۲، مجتبی^۲؛ قربانی^{۱*}، شعبانرضا^{۱*}؛ عربی^۲، هادی^۲

^۱آزمایشگاه مواد و الکتروسرامیک، گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم پایه، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

^۲آزمایشگاه انرژی‌های تجدیدپذیر، مغناطیس و نانوتکنولوژی، گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم پایه، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

چکیده

نمونه‌ی ابررسانای منیزیم دی‌براید به روش حالت جامد سنتز شد. بررسی الگوی پراش پرتوی ایکس نشان داد که ساختار منیزیم دی‌براید به‌خوبی شکل گرفته است. مقاومت ویژه‌ی الکتریکی نمونه بر حسب دما در میدان‌های مغناطیسی مختلف اندازه‌گیری شد. پهنای دمای گذار از حالت عادی به حالت ابررسانایی حدود ۰/۵ کلوین بود که نشان دهنده‌ی کیفیت بسیار خوب نمونه می‌باشد. با اندازه‌گیری مغناطش بر حسب میدان مغناطیسی، حلقه‌های هیستریزس و در نتیجه چگالی جریان بحرانی با استفاده از مدل بحرانی بین محاسبه شد. نتایج به دست آمده با داده‌های گزارش شده توافق خوبی را نشان می‌دهد.

The Synthesis and Transport Properties of MgB_2 Superconductor

Kia Firoozkoohi, Narjess Sadat¹; Komeili, Mojtaba²; Ghorbani, Shaban Reza^{1,*}; Arabi, Hadi²

¹Materials and Electroceramic Lab, Department of Physics, Faculty of Science, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad

²Renewable Energies, Magnetism and Nanotechnology Lab, Department of Physics, Faculty of Science, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad

Abstract

Superconducting sample of MgB_2 was prepared by the solid state method. The x-ray diffraction (XRD) patterns, which were recorded using Cu K α radiation shows that the MgB_2 sample was crystallized in the MgB_2 structure as the major phase. The resistivity of the sample has measured as a function of magnetic field at different temperatures. The transition width was roughly 0.5 K, which was shown high quality of the sample. The magnetic hysteresis loop has measured as a function of magnetic field. The critical current density has calculated by using the critical bean model. Results are well in agreement with the reported critical current density values.

PACS No. 74

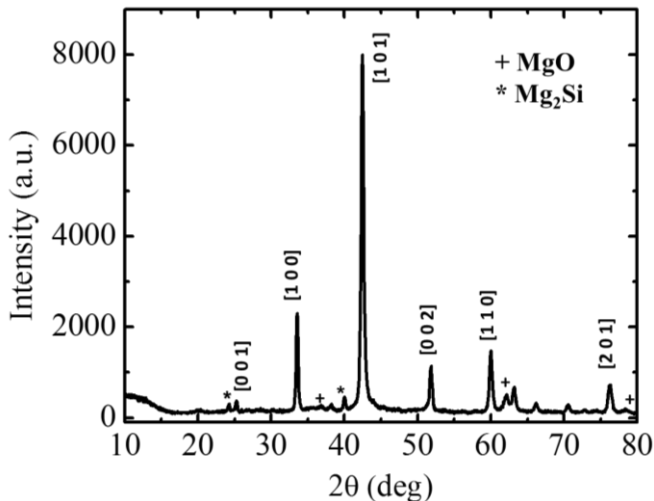
بحرانی نسبتاً زیاد (در مقایسه با ابررساناهای دمای پایین) از علل توجه به این ابررسانای فلزی است که می‌تواند برای استفاده‌های کاربردی، گزینه‌ی مناسبی باشد. ساخت ابررسانای MgB_2 همواره با مشکلاتی روبه‌رو بوده است. واکنش‌پذیری بالای منیزیم با بیشتر عناصر، به خصوص اکسیژن، از جمله‌ی این مشکلات می‌باشد، به‌طوری‌که اکسید منیزیم به عنوان

مقدمه

ترکیب فلزی منیزیم دی‌براید در سال ۲۰۰۱ توسط گروهی از محققان ژاپنی به عنوان ماده‌ی ابررسانا با دمای بحرانی، T_c ، ۳۹ کلوین کشف شد [۱]. این ماده‌ی ابررسانا از همان روزهای اول کشف، مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفت. ساختار ساده‌ی این ترکیب، ارزان و در دسترس بودن مواد اولیه، طول همدوسی و همسانگردی نسبتاً زیاد (در مقایسه با ابررساناهای دما بالا) و دمای

به عنوان اتوکلاو و واکنش منیزیم درون قرص با سیلیکون درون کوارتز است.

مغناطش نمونه بر حسب میدان مغناطیسی در دماهای مختلف با استفاده از سیستم اندازه‌گیری خواص مغناطیسی (Quantum PPMS^۱, Design) در دانشگاه ولانگونگ استرالیا اندازه‌گیری گردید.



شکل ۲. الگوی پراش پرتوی ایکس نمونه‌ی منیزیم دی‌براید. فازهای ثانویه با علائم نشان داده شده‌اند.

نتایج و بحث‌ها

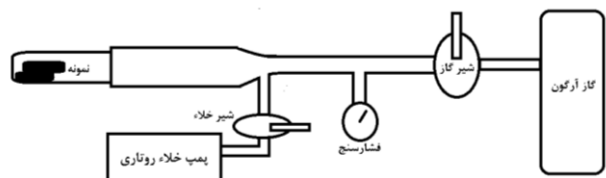
مقاومت ویژه‌ی الکتریکی نمونه به روش چهارمیله، در دماهای پایین و در میدان‌های مغناطیسی مختلف اندازه‌گیری شد. شکل ۳، تغییرات مقاومت ویژه را بر حسب دما نشان می‌دهد. گذار به حالت ابررسانایی به وضوح در شکل، برای تمام میدان‌ها مشاهده می‌شود. دمای گذار در میدان صفر تسلا، برابر ۳۷/۳۷ کلوین است. این دما به عنوان دمایی که در آن افت خطی مقاومت ویژه آغاز می‌شود، در نظر گرفته شده است. با افزایش میدان مغناطیسی، دمای گذار کاهش می‌یابد، به طوری‌که برای میدان ۱ تسلا، دمای بحرانی ۳۴/۷۱ کلوین و برای میدان ۶ تسلا، دمای بحرانی ۲۴/۲۷ کلوین به دست آمد. دمای گذار گزارش شده برای میدان صفر

فاز ثانویه در ساختار، میزان حجم ماده‌ی ابررسانا را در نمونه‌ها کاهش می‌دهد.

در این مقاله روش ساخت ابررسانای MgB_2 و برخی از اندازه‌گیری‌های خواص تراپردی بررسی خواهد شد.

مراحل ساخت نمونه

برای ساخت ابررسانای منیزیم دی‌براید به روش حالت جامد، ابتدا مقادیر استوکیومتری مواد اولیه، شامل پودر منیزیم ۹۹/۵٪ و پودر آمورف بورون $> ۹۵\%$ ، به مدت سه ساعت در هاون عقیق مخلوط شد، سپس با فشار ۴۰ bar به صورت قرص درآمد. تمام این مراحل درون گلاوباکس تحت گاز آرگون انجام شد. نمونه داخل لوله‌ی کوارتز گذاشته شده و برای حذف بیشتر اکسیژن و بخار آب در تمام مراحل (به خصوص در کوره و در دمای بالا، که منیزیم از نظر شیمیایی فعال‌تر است)، لوله‌ی کوارتز نیز، در سیستمی مطابق شکل ۱، تحت گاز آرگون قرار گرفت. بعد از انجام مراحل تزریق گاز آرگون، سر لوله‌ی کوارتز بسته شد. سپس نمونه‌ی درون اتوکلاو کوارتزی، درون کوره قرار گرفت و با برنامه‌ی دمایی ۱ ساعت در $۶۰۰\text{ }^\circ\text{C}$ ، ۱ ساعت در $۷۰۰\text{ }^\circ\text{C}$ و ۱ ساعت در $۸۰۰\text{ }^\circ\text{C}$ پخت شد.



شکل ۱. شمایی از روش ساخت ابررسانای منیزیم دی‌براید.

الگوی پراش اشعه‌ی ایکس نمونه - با فازهای ثانویه‌ی مشخص - در شکل ۲ نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، ساختار شش‌گوشه‌ی تنگ‌پکیده‌ی منیزیم دی‌براید به خوبی تشکیل شده است. فاز ناخالصی اکسید منیزیم، فاز ثانویه‌ی اجتناب‌ناپذیر در سنتز این نمونه است، چراکه حذف کامل گاز اکسیژن و بخار آب موجود در محیط، کار دشواری است. وجود منیزیم سیلیسید در ساختار نمونه، به دلیل استفاده از لوله‌ی کوارتز

جریان بحرانی نمونه با استفاده از مدل بحرانی بین^۲ از روی پهنای حلقه‌های هیستریزیس در میدان‌های مغناطیسی مختلف بر اساس روابط (۱) و (۲) محاسبه گردید.

$$J_c = \alpha \Delta M \quad (1)$$

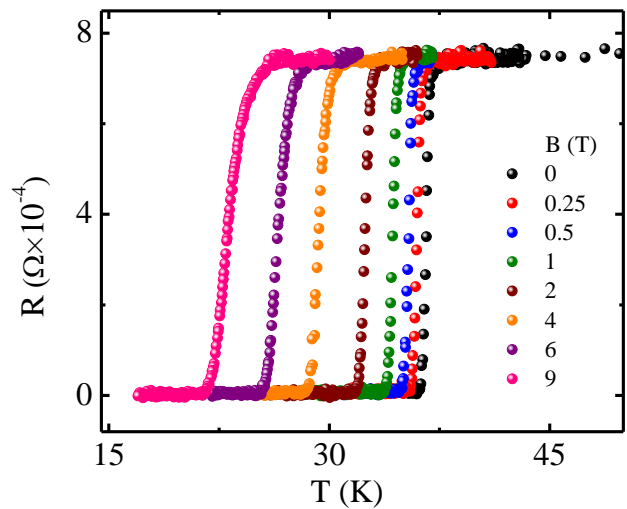
که در آن J_c جریان بحرانی، ΔM پهنای حلقه‌ی مغناطش نمونه است و α به شکل هندسی نمونه و نحوه‌ی اعمال میدان بستگی دارد. برای نمونه‌ی مورد بررسی داریم:

$$\alpha = 20 / [a(1 - a/3b)] \quad (2)$$

که در آن a و b ابعاد نمونه هستند.

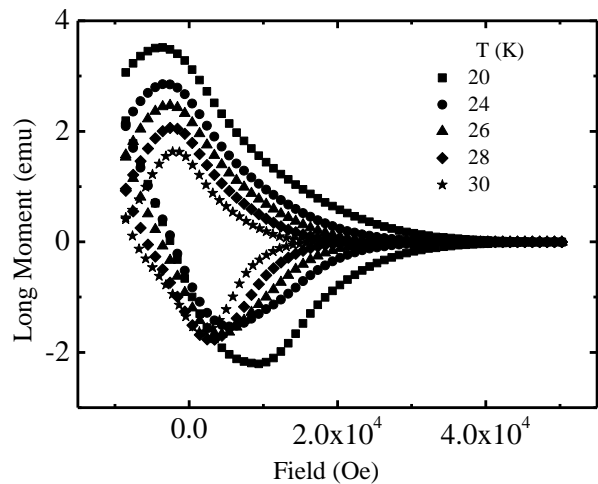
شکل ۵، چگالی جریان محاسبه شده را بر حسب میدان مغناطیسی اعمالی و در دماهای مختلف نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود با افزایش دما، چگالی جریان بحرانی نمونه در میدان‌های مغناطیسی کوچک و دماهای پایین ثابت است ولی با افزایش میدان کاهش می‌یابد. مقدار چگالی جریان بحرانی در میدان صفر برابر $2 \times 10^5 \text{ A/cm}^2$ است که در حدود مقادیر گزارش شده است [۲، ۸-۵]. وجود ناخالصی، چگالی جریان بحرانی را بهبود می‌بخشد، چراکه این ناخالصی‌ها باعث ایجاد مراکز میخکوبی و میخکوبش گردشاره‌ها و در نتیجه افزایش چگالی جریان بحرانی می‌شود [۹-۱۱]؛ بنابراین نیازی به حذف کامل ناخالصی برای ساخت نمونه‌های صنعتی نیست، چراکه با وجود ناخالصی‌ها کیفیت نمونه از نظر میزان جریان عبوری (کمیتی که در کاربرد ابررسانا بسیار مهم است) بهبود می‌یابد.

کلوین، اندکی کمتر از مقادیر گزارش شده است [۴-۲]. این تفاوت به دلیل ناخالصی اندک موجود در نمونه است.



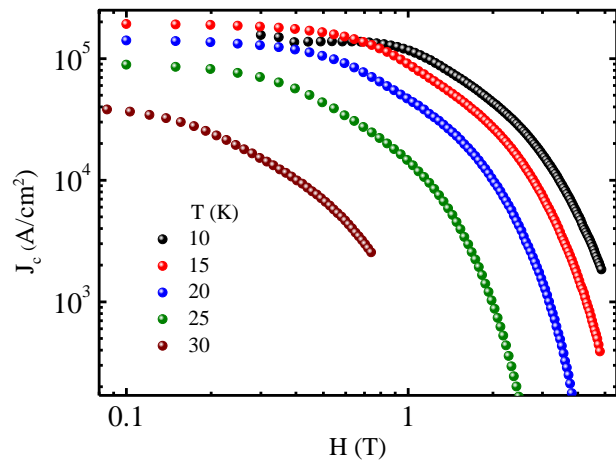
شکل ۳. تغییرات مقاومت ویژه الکتریکی به صورت تابعی از دما در میدان‌های مغناطیسی مختلف.

شکل ۴، حلقه‌های هیستریزیس M-H را در دماهای مختلف نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، سطح هر حلقه با افزایش دما کاهش می‌یابد که نشان از کاهش میزان مغناطش با افزایش دما دارد.



شکل ۴. تغییرات مغناطش بر حسب میدان مغناطیسی به صورت حلقه‌های هیستریزیس M-H در دماهای مختلف.

- [۵] V. P. S. Awana, A. Vajpayee, M. Mudgel, V. Ganesan, A. M. Awasthi, G. L. Bhalla, H. Kishan, *Physical property characterization of bulk MgB2 superconductor*, Eur. Phys. J. B **62** (2008) 281.
- [۶] K. Vinod, R. G. Abhilash Kumar, U. Syamaprasad, *Prospects for MgB2 superconductors for magnet application*, Supercond. Sci. Technol. **20** (2007) R1.
- [۷] M. Eisterer, *Magnetic properties and critical currents of MgB2*, Supercond. Sci. Technol. **20** (2007) R47.
- [۸] J. C. Wei., T. J. Yang, *Current Distribution and Vortex-Vortex Interaction in a Superconducting Film of Finite Thickness*, Jpn. J. Appl. Phys. **35** (1996) 5696.
- [۹] M. Eisterer, *Calculation of the volume pinning force in MgB2 superconductors*, Phys. Rev. B **77** (2008) 144524.
- [۱۰] S. R. Ghorbani, X. L. Wang, S. X. Dou, Sung-ik Lee, M.S.A. Hossain, *Flux-pinning mechanism in Silicon-oil-doped MgB2: Evidence for charge-carrier mean free path fluctuation pinning*, Phys. Rev. B **78** (2008) 184502.
- [۱۱] N. S. Kia, s. r. Ghorbani, H. Arabi, M.S.A. Hossain, *Effect of magnetic field on the flux pinning mechanism in Al and SiC co-doped MgB2 superconductor*, Solid State Communications **275** (2018) 48.



شکل ۵. چگالی جریان بحرانی بر حسب میدان مغناطیسی در دماهای مختلف.

نتیجه گیری

نمونه‌ی منیزیم دی‌براید به روش حالت جامد ساخته شد. مقاومت ویژه الکتریکی نمونه بر حسب دما و میدان مغناطیسی اندازه‌گیری و انتقال به حالت ابررسانایی برای نمونه در دمای بحرانی ۳۷/۳۷ کلوین دیده شد که کمتر از مقادیر گزارش شده برای نمونه‌های خالص یعنی حدود ۳۹ کلوین است. چگالی جریان بحرانی با استفاده از مدل بحرانی بین، از روی حلقه‌های مغناطش در دماهای مختلف، بر حسب میدان مغناطیسی محاسبه گردید. چگالی جریان بحرانی به دلیل وجود ناخالصی‌ها کاهش چندانی نسبت به مقادیر گزارش شده نداشت، چراکه این ناخالصی‌ها مانند مراکز میخکوبی عمل کرده و چگالی جریان بحرانی را افزایش می‌دهند.

مرجع‌ها

- [۱] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, J. Akimitsu, *Superconductivity at 39 K in magnesium boride*, Nature **410** (2001) 63.
- [۲] C. Buzea, T. Yamashita, *Review of superconducting properties of MgB2*, Sci. Technol. **14(11)** (2001) R115.
- [۳] H. J. Choi, D. Roundy, H. Sun, M. L. Cohen, S. G. Louie, *The Origin of the Anomalous Superconducting Properties of MgB2*, Nature **418** (2002) 758.
- [۴] D. K. Finnemore, J.E. Ostenson, S.L. Bud'ko, G. Lapertot, P.C. Canfield, *Thermodynamic and transport properties of superconducting MgB2*, Phys. Rev. Lett. **86** (2001) 2420.

اثر افزودنی نانوپودر اکسیدتیتانیوم بر دمای گذار ابرسانایی Bi-2223

مظفری، مرتضی^۱؛ شاتوتی، سارا^۱

^۱گروه فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان

چکیده

در این پژوهش ابرسانای بیسموتی (BSCCO-۲۲۲۳) با فرمول $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_{1.9}Ca_{2.1}Cu_3O_{10-\delta}$ با روش حالت جامد تهیه و اثر افزایش درصدهای گوناگون نانوپودر اکسیدتیتانیوم بر دمای گذار فاز (BSCCO-۲۲۲۳) بررسی شد. پراش پرتو ایکس نمونه‌ی بی‌افزودنی نشان می‌دهد که فاز (BSCCO-۲۲۲۳) تشکیل شده است. دمای گذار نمونه‌ها به حالت ابرسانایی، با رسم منحنی مقاومت-دما به دست آمد. نتایج اندازه‌گیریها نشان می‌دهد که با افزایش درصد نانوپودر اکسیدتیتانیوم گذار به مقاومت صفر نمونه‌ها نخست افزایش و سپس کاهش می‌یابد. همچنین برای درصدهای افزودنی بالاتر فازهای ابرسانایی با دمای گذار بالاتر دیده شد که مربوط به فازهای ابرسانایی است که در الگوی پراش پرتو ایکس قابل شناسایی نبود.

The Effect of Titanium Oxide Nanopowder as an Additive on Transition Temperature of Superconductor Bi-2223

Mozaffari, Morteza¹; Shatooti, Sarah¹

¹ Department of Physics, Isfahan University, Isfahan

Abstract

In this work, bismuth based superconductor with chemical formula of $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_{1.9}Ca_{2.1}Cu_3O_{10-\delta}$ (BSCCO-2223) were synthesized by solid state reaction and the effect of TiO_2 nanopowder percent, as an additive, on the transition temperature (T_c) of (BSCCO-2223) phase was studied. X-ray diffraction of additive-free sample showed that (BSCCO-2223) phase formed. Transition temperatures of the samples to superconducting state were obtained by plotting of resistance-temperature curves. The results show that by increasing of TiO_2 nanopowder, the transition temperature to zero resistance increased firstly and then decreased. Also for higher percent of additives, some superconducting phases with higher T_c observed that attributed to other superconductor phases, which were not identifying by x-ray diffraction.

PACS No. 74

Bi-۲۲۰۱، Bi-۲۲۱۲ و Bi-۲۲۲۳ برچسب زده می‌شوند [۲]. امیدبخش‌ترین ابرساناها برای ساخت سیم‌ها و نوارهای ابرسانایی با دماهای بالاتر از دمای نیتروژن مایع، فازهای Bi-۲۲۱۲ و Bi-۲۲۲۳ (BSCCO) هستند. دماهای گذار برای فازهای ابرسانایی $Bi_2Sr_2CuO_{6+\delta}$ ، $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ و $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$ به ترتیب پیرامون ۲۰، ۹۵ و ۱۱۰ K است [۳]. در این فازها، یون‌های بیسموت می‌توانند جایگاه‌های استرانسیوم را پرکنند و یون‌های کلسیم و

مقدمه

ابرساناهای سرامیکی پایه‌ی بیسموتی با دمای بحرانی پیرامون $T_c = 110\text{K}$ ، پتانسیل کاربرد در ابزارهای ابرسانایی با دمای کاری نیتروژن مایع را دارند. پس از کشف ابرسانایی در سامانه‌ی Bi-Sr-Ca-Cu-O (BSCCO)، تلاش‌های بسیاری برای بهبود ویژگی‌های ابرسانایی آن انجام شده است [۱]. سامانه‌ی BSCCO چند فازی است و هر فاز با فرمول کلی $Bi_2Sr_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+4+\delta}$ (n=1, 2, 3) نوشته و به ترتیب با

از آسیاب در یک هاون چینی و گذراندن از یک الک ۱۸۰ میکرونی، با ۱۰ درصد وزنی محلول ۵ درصد PVA مخلوط و با فشار 2 ton/cm^2 به صورت قرص‌هایی به قطر ۵۰ و بلندی ۵ میلی متر درآورده شد. این قرص در دمای 820°C به مدت ۱۲ ساعت برشته و سپس همان مراحل خردایش، شکل‌دهی و برشتن در دماهای ۸۳۰، ۸۳۵، ۸۴۰ و 845°C به مدت ۱۲ بر روی آن‌ها انجام شد. سرانجام قرص‌های برشته شده در دمای 845°C خرد و از الک ۱۸۰ میکرونی گذرانده و پس از افزودن صفر، ۱، ۳ و ۵ درصد وزنی نانوپودر اکسیدتیتانیوم از شرکت TECNAN از کشور اسپانیا به صورت میله شکل داده شدند. میله‌ها به طول ۱۵، عرض ۴ و بلندی ۳ تا ۴ میلی متر با فشار 1 ton/cm^2 پرس شدند. میله‌ها در یک کوره الکتریکی با آهنگ گرمایش 5°C/min تا دمای 850°C گرم و به مدت ۱۰۰۰ min تفجوشی شدند. این نمونه‌ها با آهنگ سرمایش 5°C/min تا دمای 300°C در کوره سرد و سپس با خاموش شدن کوره تا دمای اتاق همراه با کوره سرد شدند. نمونه‌های با صفر، ۱، ۳ و ۵ درصد افزودنی نانوپودر اکسید تیتانیوم و به ترتیب با Bi_0 ، Bi_1 ، Bi_3 و Bi_5 برچسب زده شدند. الگوهای پراش پرتو ایکس (XRD) نمونه‌ها با یک دستگاه پراش سنج پرتو ایکس ساخت شرکت بروکر مدل (D8 ADVANCED) و لامپ مسی $\text{Cu-K}\alpha$ ($\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$) گرفته و فازهای تشکیل شده با نرم افزار ایکسپرت (Expert) تعیین شد. دماهای گذار نمونه‌ها به روش چهار میله‌ای اندازه‌گیری شد.

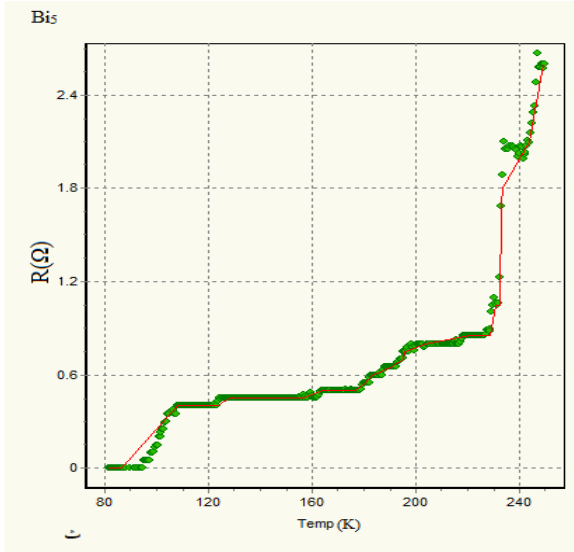
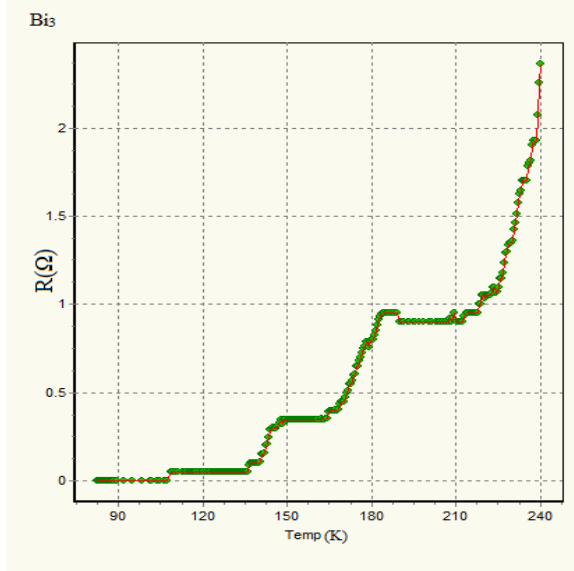
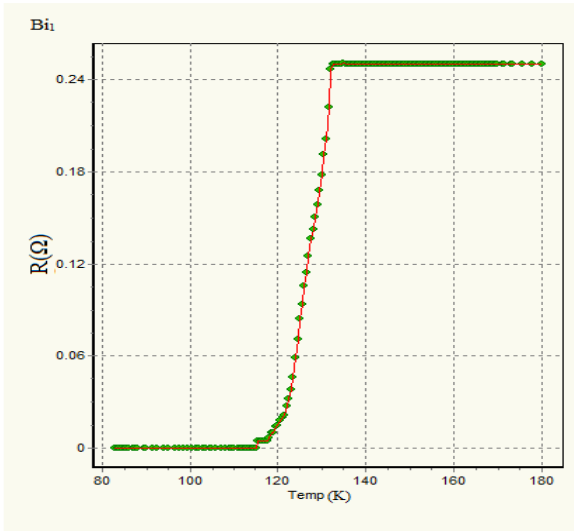
نتایج و بحث

شکل ۱ الگوی پراش پرتو ایکس نمونه Bi_0 را نشان می‌دهد. همان‌گونه که دیده می‌شود قله‌های اصلی با ترکیب ابررسانای بیسموتی فاز BSCCO-2223 هم‌خوان است. افزون بر آن قله‌های کم شدتی در الگو دیده می‌شود که قابل شناسایی نبود.

استرانسیوم می‌تواند با یکدیگر جایگزین شوند به گونه‌ای که جمع آن‌ها سه شود. در سامانه‌های بیسموتی، فاز Bi-2223 به دلیل دمای گذار ابررسانایی بالاتر بیشتر مورد توجه است [۴]. اما از کاستی‌های این فاز به دست آوردن نمونه‌ی تک فاز آن، پیوندهای ضعیف میان دانه‌ای و میخکوبی ضعیف شار است [۵]. پژوهشگران اثر جانمایی همانند Al ، La ، Sb و Pb را بر ویژگی‌های ابررساناهای پایه‌ی بیسموتی گزارش کرده‌اند. سرب (Pb) مهم‌ترین عنصر جانمایی است که بر ریزساختار و تشکیل فاز مورد نظر اثر مهمی می‌گذارد [۶]. در این فاز می‌توان کمی سرب را جانشین بیسموت کرد و روشن شده که این جانمایی برای دستیابی به نمونه‌ی تک فاز Bi-2223 ضروری است. وجود ناخالصی‌ها و ایجاد کاستی‌های بلورین به افزایش مرتبه‌ی طول همدوسی و نیز افزایش میخکوبی شار می‌انجامد [۵]. ابررساناهای سرامیکی به روش‌های گوناگون تهیه می‌شوند، روش حالت جامد یکی از روش‌های معمول ساخت این‌گونه از ابررساناها است که اکسیدهای فلزی و کربنات‌ها در آن به کار برده می‌شوند. در این پژوهش اثر افزودن نانوذرات اکسیدتیتانیوم بر ویژگی‌های ابررسانایی فاز BSCCO-2223 مورد بررسی قرار گرفته است.

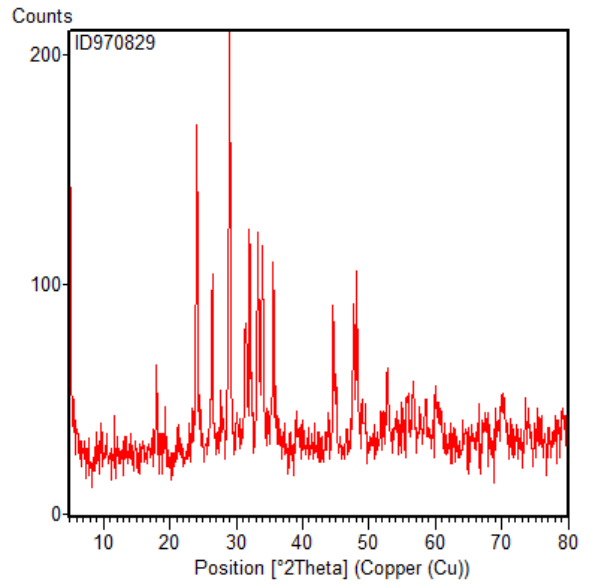
روش تجربی

در این پژوهش ابررسانای بیسموتی (BSCCO-2223) با فرمول $\text{Bi}_{1.6} \text{Pb}_{0.4} \text{Sr}_{1.9} \text{Ca}_{2.1} \text{Cu}_3 \text{O}_{10.6}$ با روش حالت جامد تهیه شد [۷]. بدین منظور اکسیدهای CuO ، Bi_2O_3 و PbO و کربنات‌های SrCO_3 و CaCO_3 از شرکت مرک آلمان و با کمینه خلوص ۹۹٪ به کار برده شد. مواد اولیه با نسبت‌های استوکیومتری همراه با اتانول و در یک ظرف عقیق با گلوله‌هایی از همین جنس به مدت سه ساعت در یک آسیاب سیاره‌ای فریتش مدل (Fritsch pulverisette 6) آسیاب‌کاری شدند تا پودر همگنی به دست آید. پس از خشک شدن پودر به دست آمده در یک بوتله آلومینایی و در یک کوره الکتریکی در دمای 820°C به مدت ۱۲ ساعت برشته شد و سپس تا دمای اتاق سرد شد. پودر برشته شده پس



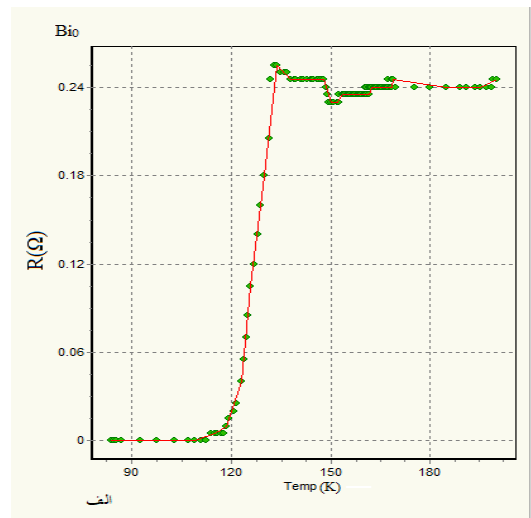
شکل ۲: نمودار مقاومت بر حسب دمای نمونه‌ها، الف) Bi_0 ، ب) Bi_1 ،

ت) Bi_3 و ث) Bi_5



شکل ۱: الگوی پراش پرتوی ایکس نمونه Bi_0

در شکل ۲ (الف، ب، پ و ت) نمودار تغییرات مقاومت-دما برای نمونه‌های گوناگون آمده است. پایین‌ترین دمای گذار ابررسانایی هر ترکیب (گذار به مقاومت صفر) تعیین و در جدول ۱ آمده است. همان‌گونه که دیده می‌شود دمای گذار نخست با افزودن نانوپودر اکسیدتیتانیوم افزایش و پس از آن کاهش می‌یابد. همان‌گونه که در شکل‌های ۲ (پ و ت) دیده می‌شود چند پله‌ی مشخص در نمودار مقاومت بر حسب دما وجود دارد که می‌تواند به فازهای ابررسانایی دیگر با دماهای گذار $164^\circ C$ و $215^\circ C$ برای نمونه Bi_3 و دماهای گذار $180^\circ C$ و $229^\circ C$ برای نمونه Bi_5 مربوط باشد.



جدول ۱: دمای گذار به مقاومت صفر نمونه‌ها

[۷] A. Aftabi, M. Mozaffari, "Intergranular Coupling, Critical Current Density, and Phase Formation Enhancement of Polycrystalline $\text{Bi}_{1.6}\text{Pb}_{0.4}\text{Sr}_{2}\text{Ca}_{2}\text{Cu}_{3}\text{O}_{10-y}$ Superconductors by $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ ", J. Superconduct. Novel Magn. **28** (2015) 2337-2343.

Sample	Bi ₀	Bi ₁	Bi ₃	Bi ₅
T _c (K) ± ۵	۱۱۴	۱۱۸	۱۰۴	۹۵

نتیجه گیری

ابرسانای بیسموتی با فرمول $\text{Bi}_{1.6}\text{Pb}_{0.4}\text{Sr}_{1.9}\text{Ca}_{2.1}\text{Cu}_3\text{O}_{10-\delta}$ با روش حالت جامد ساخته شد. افزایش درصد نانوپودر اکسیدتیتانیوم نخست باعث افزایش دمای گذار به مقاومت صفر و سپس کاهش آن شد، همچنین به افزایش شمار فاز ابرسانایی در نمونه‌ها انجامید.

مرجع‌ها

- [۱] Indu Verma, R. Kumar, V. Ganesan, A. Banerjee, B. Das, "Synthesis and Magnetic Properties of $\text{Bi}_{1.6}\text{Pb}_{0.4}\text{Sr}_{1.9}\text{Ca}_{2.1}\text{Cu}_3\text{O}_{10-\delta}$ superconductor", J Superconduct. Novel Magn. **25** (2012) 785-789.
- [۲] فلاح آرابی، حسام؛ صدقی، آرمان؛ باغشاهی، سعید؛ ریاحی‌نوری، نسترن؛ کوهانی، حسین؛ «بهینه‌سازی دمای سیتترینگ سیستم ابرسانایی بیسکو»؛ ۳۲مین کنفرانس بین‌المللی برق، تهران، ایران، سال ۱۳۹۶
- [۳] I.H.Gul, F.Amin, A.Z.Abbasi, M.Anis-ur-Rehman, A.Maqsood, "Effect of Ag_2CO_3 Addition on the Morphology and Physical Properties of Bi-based (2223) High-Tc Superconductors", Physica C:, **449** (2006) 139-147.
- [۴] R. Wesche, "High-Temperature Superconductors: Materials, Properties, and Applications", 1998 Springer Science+Business Media New York, pp. 230-231.
- [۵] آفتابی، علی؛ مظفری، مرتضی؛ کاملی، پرویز؛ «تأثیر نانوپودر آلومینا بر تشکیل فاز و ویژگیهای ابرسانایی $\text{Bi}_{1.6}\text{Pb}_{0.4}\text{Sr}_{1.9}\text{Ca}_{2.1}\text{Cu}_3\text{O}_{10-\delta}$ »؛ مجله پژوهش فیزیک ایران، جلد ۹، شماره ۱، بهار ۱۳
- [۶] Gul, I.H., Rehman, M.A., Ali, M., Maqsood, A "Temperature dependence of thermal and electrical conductivity of Bi-based high-Tc (2 2 2 3) superconductor", Physica C **432**, (2005) 71-80.

مدل SSH غیر هرمیتی با پتانسیل چشمه یا چاه روی نصف تمام زنجیره

ناصرپور آسیابری، ویدا؛ حسینی، میر وحید

دانشکده علوم، دانشگاه زنجان، زنجان

چکیده

در این پژوهش بصورت نظری مدل سو-شریفر-هگر (SSH) تعمیم یافته‌ی غیر هرمیتی دارای تقارن وارون فضا-زمان (PT) را بررسی کردیم. در این مدل اختلاف پتانسیل موهومی مثبت در سرتاسر سمت چپ زنجیره، به عنوان چاه و اختلاف پتانسیل موهومی منفی در سمت راست زنجیره غیر هرمیتی به عنوان چشمه اعمال شده است. اختلاف پتانسیل، عامل خارج شدن از حالت ایزوله می‌باشد. مدل SSH یکی از ساده‌ترین مدل‌های دو نواری شناخته شده برای توصیف پلی‌استیلن است که دارای فاز بدیهی و غیر بدیهی توپولوژیکی است. حالت‌های غیر بدیهی توپولوژیکی موجب شکست تقارن حالت‌های مقید می‌شود و این شکست منجر به گذار PT می‌گردد. در این پژوهش مشاهده شده است که با افزایش اختلاف پتانسیل، فاز غیر بدیهی توپولوژیکی به تدریج کاهش یافته و از بین می‌رود. در این مقاله طیف ویژه مقادیر حقیقی و موهومی، حالت‌های لبه ای و مقید، فازهای بدیهی و غیر بدیهی توپولوژیکی در مدل بیان شده، مورد مطالعه قرار گرفته است.

Non-Hermitian SSH model with Potential gain and lose on at least an entire half of the chain

Naserpour Asiabari, Vida; Hosseini, Mir Vahid

Department of Physics, University of Zanjan, Zanjan,

Abstract

In this work, we study non-Hermitian Su-Sherifer-Heeger (SSH) model in a system with the parity-time reversal (PT) symmetry. By applying positive imaginary potential difference to the left side and negative one to the right side of a chain, can consider a non-Hermitian Hamiltonian for investigating the system in SSH model. Applying this kind of potential, make system get out of isolation mode. The SSH model is known as one of the simplest two-band topological for describing polyacetylene which has trivial and non-trivial phases. Non-trivial topological states cause to break the bound state then lead to PT transition. Therefore, with increasing potential difference, non-trivial topological phase decay slowly until vanish. At last we study real and imaginary parts of energy spectrum, bound and edge states, topological trivial and non-trivial edge states.

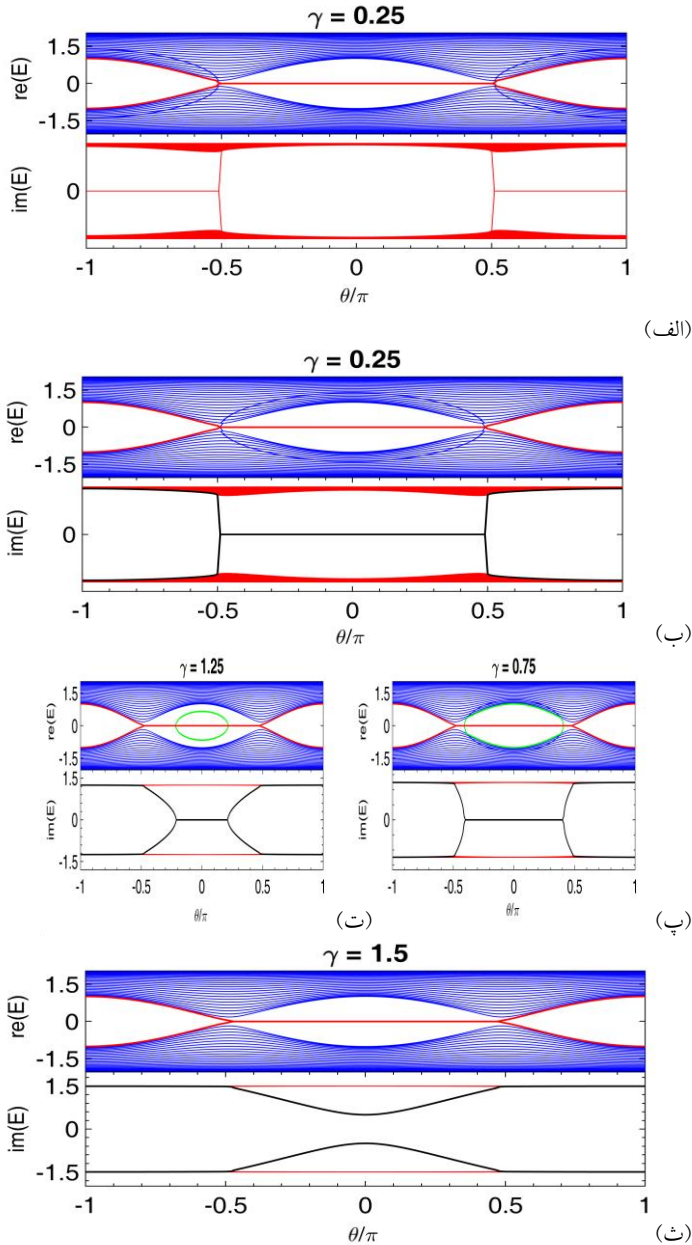
PACS No. 73.00

مورد استفاده قرار گیرند. عایق‌های توپولوژیکی یکی از مواردی هستند که می‌توانند میزبان فازهای توپولوژیکی باشند از این سیستم در کامپیوترهای کوانتومی که فضای هیلبرت بسیار بزرگ دارند مورد استفاده قرار می‌گیرد. این سیستم عاملی برای نوشتن و خواندن اطلاعات است.

بر اساس فرمولبندی دیراک-فون نویمن، برای اطمینان از یکانی بودن تحول زمانی و حقیقی بودن طیف انرژی همه‌ی مشاهده

مقدمه

پس از کشف اثر کوانتمی هال، مفهوم توپولوژیکی بسیار محبوبیت یافت [1]، اخیراً رشد قابل توجه علاقه به مطالعه سیستم‌های غیر هرمیتی ایجاد شده [2-3] پیدا کردن پدیده‌های غیر بدیهی توپولوژیکی یک موضوع مهم برای فیزیک دانان بوده است [4]. فازهای توپولوژیکی به دلیل پایداری در مقابل اختلال‌های محیطی، می‌توانند در محاسبات توپولوژیکی-کوانتومی



شکل ۲: طیف انرژی‌های حقیقی و موهومی بر حسب θ تحت شرایط مرزی محدود برای زنجیره ای با $N=100$ اتم و با شرایط $\Delta=1/2$, $t=1$, (الف) $\gamma=1/4$ (ب) $\gamma=3/4$ (پ) $\gamma=5/4$ (ت) $\gamma=3/2$.

هامیلتونی مرتبط با شکل ۱ بصورت معادله ۱ نوشته می‌شود.

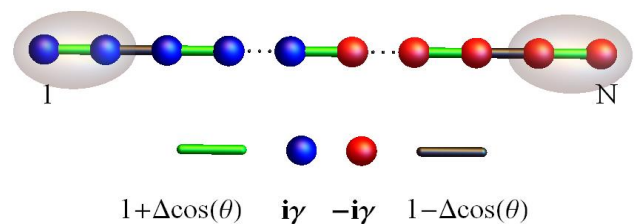
$$H = \sum_j^{N-1} t[1 + (-1)^j \Delta \cos \theta](c_j^{\dagger} c_{j+1} + c_{j+1}^{\dagger} c_j) + \sum_{m=1}^{N/2} i\gamma c_m^{\dagger} c_m - \sum_{L=N/2}^N i\gamma c_L^{\dagger} c_L \quad (1)$$

$c_j^{\dagger}(c_j)$ عملگرهای خلق و فنا در مکان j هستند. این سیستم بطور جداگانه دارای تقارن پارایته و معکوس زمان می‌باشد و به

پذیرهای فیزیکی باید توسط عملگر هریمیتی بیان شوند. اما در گستره وسیعی از هامیلتونی‌های غیرهریمیتی اگر تقارن PT داشته باشند، طیف ویژه مقادیر حقیقی کاملی از خود نشان می‌دهد [5-6]. سیستم ممکن است بطور جداگانه تقارن پارایته و الکترون حفره نداشته باشد اما دارای تقارن PT باشد. در سیستم‌های غیرهریمیتی، سامانه از حالت منزوی خارج می‌شود. حالت‌های موهومی ناشی از ارتباط سیستم با محیط به روش‌های گوناگون ایجاد می‌شود؛ بطور مثال اختلال از طریق اعمال لیزر یا میدان مغناطیسی و غیره می‌تواند وارد سیستم شود. در سیستم مورد بررسی در کار ما، اختلاف پتانسیل منفی و مثبت بصورت چشمه و چاه مشخص می‌شوند. در مقایسه با سیستم‌های هریمیتی، سیستم‌های غیرهریمیتی طیف تبهگنی خاصی ارائه می‌دهند که به عنوان نقاط استثنایی شناخته می‌شوند [3-7].

مدل

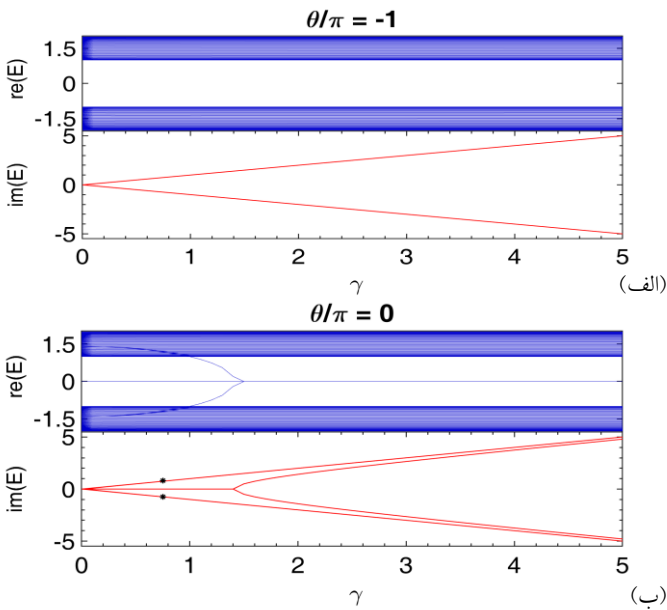
در سرتاسر یک زنجیره SSH یک بعدی دو پارشی N اتمی اختلاف پتانسیل موهومی اعمال کرده‌ایم بطوری که از ابتدای زنجیره تا اتم $N/2$ ، زنجیره دارای چشمه‌هایی با اختلاف پتانسیل $-i\gamma$ و از اتم $(N/2)+1$ تا انتهای زنجیره دارای چاههایی با اختلاف پتانسیل $+i\gamma$ می‌باشد، و تعداد سلول واحد در آن $n=N/2$ است، که در شکل ۱ بصورت شماتیک نمایش داده شده است.



شکل ۱: زنجیره یک بعدی SSH که بصورت یک در میان دارای هایپینگ های $t(1 \pm \Delta \cos \theta)$ است و اختلاف پتانسیل $+i\gamma$ و $-i\gamma$ بترتیب در سمت چپ و راست زنجیره اعمال شده است.

در همسایگی‌های اول به صورت یکی در میان هایپینگ‌های $t(1 \pm \Delta \cos \theta)$ قرار دارند که با رنگ سبز و مشکی نشان داده شده‌اند، و اختلاف پتانسیل‌ها با رنگ آبی و قرمز در هر اتم نمایش داده شده‌اند.

در شکل 3 طیف ویژه مقادیر موهومی و حقیقی را بر حسب تغییرات $\theta=0$ برای سیستم در نواحی متفاوت توپولوژیکی بدست آوردیم. در شکل 3 (الف) به ازای $\theta=-\pi$ هیچ گونه فاز غیربدهی توپولوژیکی مشاهده نمی‌شود، اما در $\theta=0$ به ازای کوچکترین مقدار γ گذار فاز توپولوژیکی در γ_{c1} بحرانی در حدود $\gamma=0$ رخ میدهد و با افزایش اختلاف پتانسیل در γ_{c2} ، $\gamma \approx 1.42$ فاز غیر بدهی توپولوژیکی کاملاً از بین می‌رود و سیستم کاملاً در فاز بدهی توپولوژیکی قرار می‌گیرد. دو ستاره روی شکل 3 (ب) نشان دهنده سیستم در $\gamma=0.75$ است.



شکل 3: (بالا) طیف ویژه مقادیر حقیقی و (پایین) طیف ویژه مقادیر موهومی را بر حسب تغییرات γ در نواحی متفاوت توپولوژیکی برای $t=1$, $N=100$ ، $\Delta=1/2$ و (الف) $\theta=-\pi$ (ب) $\theta=0$ نشان می‌دهد.

حالت‌های جایگزیده‌ی مقید و لبه ای را در شکل 4 بررسی میکنیم. شکل 4 با توجه به اختلاف پتانسیل‌های طیف‌های رسم شده در شکل 2 رسم شده است.

در این شکل دو حالت مقید برای $\theta=0$ در $0 < \gamma < 1.4$ وجود دارد و در $\theta=\pm\pi$ هیچ گونه حالت لبه‌ای مشاهده نمی‌شود لذا در شکل 4 هیچ حالت لبه‌ای یا مقیدی برای $\theta=\pm\pi$ بدست نیامده که کاملاً با نتایج بدست آمده در شکل‌های 2 و 3 مطابقت دارد.

ترتیب در روابط $Pc_j P^{-1} = c_{N+1-j}$ و $TiT^{-1} = -i$ صدق می‌کند و در نتیجه دارای تقارن معکوس فضا-زمان بشکل $TP(H)T^{-1}P^{-1} = H$ برای معادله 1 نیز است. این مدل فاقد تقارن انتقالی و انعکاسی است لذا قابلیت بررسی در شرط مرزی دوره‌ای در فضای وارون را ندارد و تنها در فضای مستقیم مورد مطالعه قرار می‌گیرد.

با قطری کردن $\gamma=1.25$ طیف ویژه مقادیر حقیقی و موهومی انرژی بر حسب پارامتر مدوله شده هاپینگ با استفاده از نرم افزار متلب، همانطور که در شکل 2 نشان داده شده، محاسبه و رسم شده است.

حالت‌های لبه‌ای توپولوژیکی در سیستم‌هایی که بطور کلی غیر هرمیتی هستند ناپدید می‌شوند اما، در سیستم‌هایی که بطور جایگزیده غیرهرمیتی هستند پایدار باقی می‌ماند. اگر احتمال حالت‌های لبه‌ای در مرز زنجیره جایگزیده باشند بنابراین حالت‌های لبه‌ای از اختلال‌های موجود در زنجیره SSH ایمن باقی می‌مانند و فاز غیربدهی توپولوژیکی سیستم حفظ می‌شود.

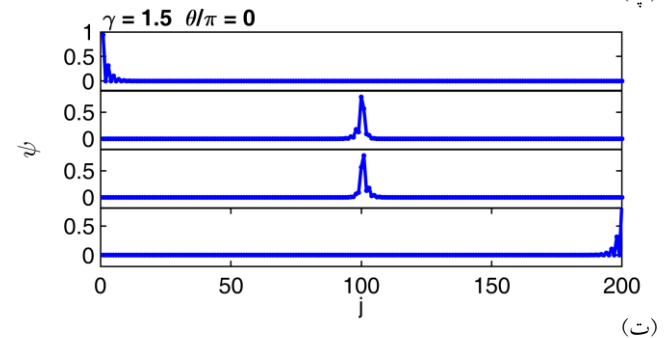
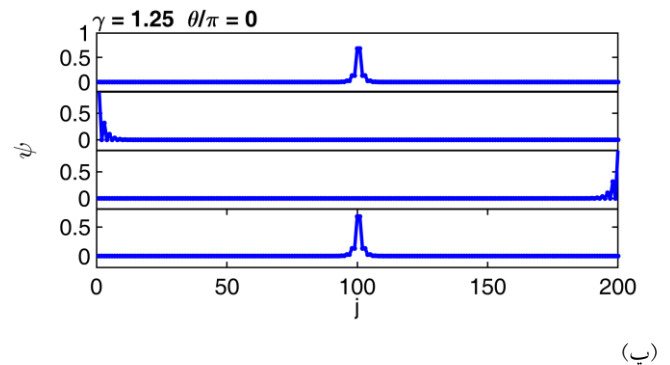
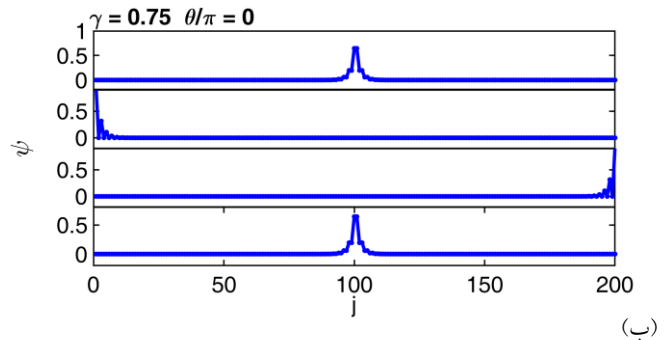
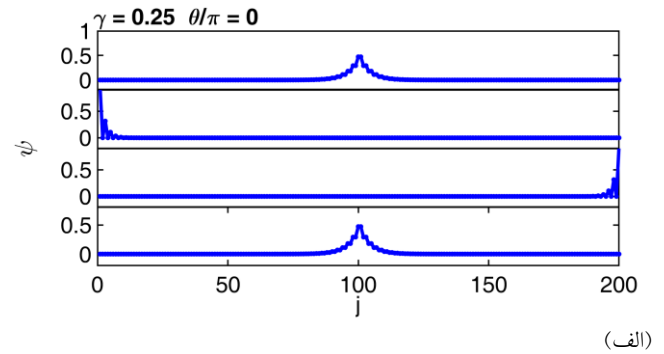
در شکل 2 (الف) سیستم را با تعداد سلول‌های واحد فرد به ازای $\gamma=0.25$ در نظر گرفتیم چنانچه در شکل قابل رویت است هیچ حالت لبه‌ای و جایگزیده‌ی برای تعداد سلول‌های فرد وجود ندارد اما در شکل 2 (ب) برای تعداد اتم‌های زوج و برای $\gamma=0.25$ در بازه‌ی $-\pi/2 < \theta < \pi/2$ دو حالت لبه ای تبهگن و دو جایگزیده در سیستم وجود دارد که شامل فاز غیربدهی توپولوژیک است. دو بازه $-\pi < \theta < -\pi/2$ و $\pi/2 < \theta < \pi$ فازهای بدهی توپولوژیک هستند. نقطه‌ی $\theta=\pm\pi/2$ که در آن گذار فاز توپولوژیکی رخ می‌دهد نقطه گذار PT نام دارد. وقتی γ را افزایش می‌دهیم فاز غیر بدهی توپولوژیکی کاهش می‌یابد چنانچه در شکل‌های 2 (پ) و (ت) با مقادیرگامای $\gamma=0.75$ و $\gamma=1.25$ مشاهده می‌شود که به ترتیب بازه‌های $-0.4\pi < \theta < 0.4\pi$ و $-0.2\pi < \theta < 0.2\pi$ فازهای غیر بدهی توپولوژیکی هستند. نهایتاً با افزایش مقدار اختلاف پتانسیل به مقدار $\gamma \approx 1.42$ فاز غیر بدهی توپولوژیک از بین میرود چنانکه در شکل 2 (ث) برای $\gamma=1.5$ مشاهده می‌شود که هیچ حالت لبه‌ای توپولوژیکی وجود ندارد.

نتیجه گیری

در این پژوهش مدل SSH غیرهرمیتی دارای تقارن PT دارای اختلاف پتانسیل $\pm i\gamma$ اعمال شده در سرتاسر زنجیره مطالعه شد، بطوری که سمت راست زنجیره دارای اختلاف پتانسیل منفی و سمت چپ دارای اختلاف پتانسیل مثبت است. پس از قطری کردن هامیلتونی، طیف حقیقی و موهومی انرژی برحسب تغییرات θ و γ بترتیب محاسبه و رسم شد سپس نمودار حالت‌های لبه‌ای و جایگزیده را رسم کردیم. گذار فاز توپولوژیکی ناشی از تغییر فاز سیستم است که از شکست تقارن PT حالت‌های مقید منجر می‌شود. در هر سه نمودار رسم شده در این مقاله متفقا مشاهده شد که حالت‌های لبه‌ای به طبع آن فاز غیربدیهی توپولوژیکی برای $\gamma = 0.25$ در بازه $-\pi/2 < \theta < \pi/2$ وجود دارد و حالت‌های مقید نیز در این بازه مشاهده شدند با افزایش γ بازه‌ی حالت‌های لبه‌ای و مقید کاهش یافت و نهایتا در $\gamma \approx 1.4$ فاز بدیهی توپولوژیکی کاملا ناپدید شد. این مدل دارای تقارن انتقالی نیست لذا تنها در فضای مستقیم مورد بررسی قرار گرفت.

مرجع‌ها

- [1] P. G. Debendetti and E. H. Stanley; "Supercooled and Glassy Water"; *Physics Today* **56**, No. 3 (2003) 40-46.
- [2] K. Klitzing and G. Dorda and M. Pepper; "New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance" *Physical Review Letters* **45**, Aug. 11 (1980) 494-497.
- [3] C. M. Bender; "Making Sense of Non-Hermitian Hamiltonians" *Reports on Progress in Physics* **70**, Mar. 9 (2007) 947-1018.
- [4] W. Hu and P. P. Shum and Y.D. Chong; "Exceptional Point in a Non-Hermitian Topological Pump" *Physical Review B* **95**, May. 25 (2017) 184306-184313.
- [5] D. J. Thouless and M. Kohmoto and M. P. Nightingale and M. D. Nijs; "Quantized Hall conductance in a two-Dimensional Periodic Potential" *Physical Review* **49**, Aug. 9 (1982) 405-408.
- [6] B. Zhu and R. Lü and Sh. Chen; "PT symmetry in the non-Hermitian Su-Schrieffer-Heeger model with complex boundary potentials" *Physical Review B* **89**, Jun. 3 (2014) 062102-1-062102-6.
- [7] C.M.Bender and D. C. Brody and H. F. Jones; "Must a Hamiltonian be Hermitian?" *American Journal of Physics* **95**, Oct. 13 (2003) 1095-1102.
- [8] C. Yin and H. Jiang and L. Li and R. Lü and Sh. Chen; "Geometrical meaning of winding number and its characterization of topological phases in one-dimensional chiral non-Hermitian systems" *Physical Review A* **97**, Feb. 13 (2018) 052115-1-052115-7.



شکل 4: حالت‌های جایگزیده‌ی لبه‌ای و مقید با شرایط $t = 1$, $N = 100$ در $\Delta = 1/2$ و در اختلاف پتانسیل‌های (الف) $0 < \gamma < 1.4$ (ب) $\gamma = 3/4$ (پ) $\gamma = 5/4$ (ت) $\gamma = 3/2$ دو حالت لبه‌ای و دو حالت مقید مشاهده می‌شود

انرژی برانگیختگی شبه ذرات با بررسی القای اثر مجاورت ابررسانایی با تقارن اسپینی تکتایی و تابع موج-s در شبه فلزهای وایل (WSM/SC)

نوروزی، میلاد؛ کارآمد، علیرضا؛ سیدیزدی، جمیله

گروه فیزیک، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان

چکیده

در این پژوهش به صورت نظری به بررسی القای اثر مجاورت ابررسانایی در شبه فلزهای وایل با شبه-میدان زیمان ذاتی می‌پردازیم. هامیلتونی دیراک-یوگولیووف-دوژن برای ساختارهای وایل با اثر مجاورت ابررسانایی تقارن اسپینی تکتایی موج-s (WSM/SC) از لحاظ تقارنهای کوانتومی و جفت شدگی اسکالر و شبه اسکالر تحت تبدیلات لورنتس بررسی می‌شود. در نهایت تأثیر جملات دیراک و شبه-میدان زیمان ذاتی را در انرژی برانگیختگی مربوط به شبه ذره-حفره را مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

Investigation of quasiparticle excitation energy with proximity effect of superconductor s-wave spin singlet symmetry in Weyl semimetals (WSM/SC)

Norouzi, Milad; Karamad, Alireza; Seyedyazdi, Jamileh

Department of Physics, Faculty of Science, Vali-e-Asr University of Rafsanjna, Iran.

Abstract

In this study, we investigate proximity-induced superconductivity in Weyl semimetals with intrinsic Zeeman field-like theoretically. Dirac-Bogoliubov-de Gennes Hamiltonian has been studied for Weyl structures with proximity effect of spin-singlet scalar and pseudo-scalar s-wave superconducting pairing based on quantum symmetries. Finally, the effect of Dirac terms and intrinsic Zeeman field-like on energy excitation for quasi-particle-hole has been investigated.

PACS No. (74.20)

مقدمه

دیگر یا مکان انرژی متفاوتی قرار دارند. ساده‌ترین هامیلتونی که فیزیک ساختارهای شبه فلزی وایل (WSM) سه بعدی را با سرعت فرمی همسانگرد v_f مربوط به حامل‌های بار را توصیف می‌کند، به صورت زیر می‌باشد:

$$H_0 = \hbar v_f \sigma \cdot k$$

که در این رابطه $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ ماتریس‌های پائولی در فضای اسپین است. اخیراً خواص مغناطیسی مربوط به گره شبه فلزهای

شبه فلزهای دیراک و وایل، سیستم‌هایی سه بعدی هستند که توپولوژی غیربدیهی دارند. اخیراً برخی از این مواد توسط تصویر برداری اسپکتروسکوپی و اسکن تونل‌زنی میکروسکوپی مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. به دلیل شکستن تقارن معکوس زمانی یا تقارن پاریته تبهگنی دوگانه، یک گره دیراک شکسته شده و دو گره وایل بدست می‌آید. این دو نقطه از یکدیگر جدا بوده و در یک تکانه‌ی

Weyl Semimetals

که در رابطه بالا $\Delta = \Delta_s \mathbb{I} \otimes i\sigma_y$ پارامتر نظم ابرسانای اسکالر تکتابی با موج-s است. در حد غیر نسبیتی ماتریس پائولی به فرم $i\sigma_y$ بیانگر ماتریس معکوس زمانی است. در فرمالیسم نسبیتی، اندیس اسپین σ با نشانه‌های چهار مولفه‌ای اسپینور دیراک جایگزین می‌شود. زیرا اسپینورهای دیراک عملگرهای میدان چهار مولفه‌ای هستند. در این صورت شانزده فرم برای جفت‌شدگی می‌توان ساخت که آن‌ها نیز مشابه حالت‌های غیر نسبیتی بر پایه یک مجموعه از ماتریس‌ها خواهند بود. ماتریس جفت‌شدگی مربوط به پارامتر نظم شبه اسکالر ابرسانایی تحت تبدیلات لورنتس را می‌توان با توجه به ماتریس‌های دیراک به صورت زیر نوشت [۸-۱۰].

$$\Delta = \Delta_{pseudo} \gamma^1 \gamma^3 \gamma^5$$
 که در آن $\gamma^0 = \sigma_3 \otimes I$ و $\gamma^j = i\sigma_2 \otimes \sigma_j$ که σ_j ها ماتریس-های پائولی هستند. تقارن حفره-ذره را می‌توان با عملگر زیر تعریف کرد.

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

همیلتونی رابطه (۱) تقارن حفره-ذره را به صورت زیر حفظ می‌کند.

$$\Gamma \mathcal{H}(\mathbf{k}) \Gamma = -\mathcal{H}^*(-\mathbf{k})$$

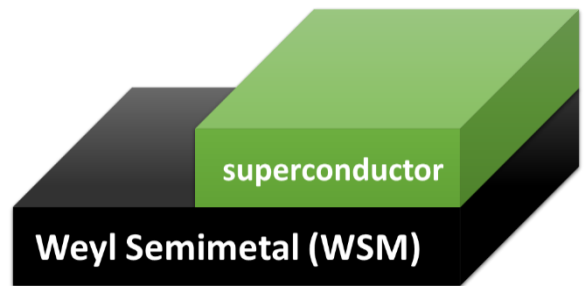
برای محاسبه انرژی برانگیختگی فرمیون‌ها (شبه الکترون‌ها و شبه حفره‌ها) از حل مسأله ویژه مقداری همیلتونی (۲) استفاده می‌کنیم. در نتیجه برانگیختگی فرمیون‌ها در حضور WSM/SC، با پارامتر نظم ابرسانای اسکالر تکتابی با موج-s، ویژه مقدار انرژی به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) &= \gamma \sqrt{2\beta b \sqrt{A} + B} \\ A &= (\hbar v_f k_z)^2 + \Delta_s^2 + m^2 \\ B &= (\hbar v_f k_z)^2 + b^2 + \Delta_s^2 \\ &+ m^2 + \hbar v_f (k_x + ik_y)(k_x - ik_y) \end{aligned} \quad (4)$$

همچنین انرژی برانگیختگی با توجه به جفت‌شدگی شبه اسکالر تحت تبدیلات لورنتس به صورت زیر محاسبه می‌شود.

وایل سه بعدی با سه مدل پارامتر که شامل پارامتر سرعت فرمی، پارامتر جرم دیراک، شبه-میدان زیمان ذاتی که از مغناطیسی بودن سیستم ناشی می‌شود، مور مطالعه قرار گرفته است. NbAs و TaAs نیم‌رسانای وایل با شکست تقارن پاریته و همچنین YbMnBi₂ نیم-رسانا با شکست تقارن معکوس زمانی می‌باشند [۵-۱]. در این مقاله با در نظر گرفتن اثر مجاورت ابرسانا با شبه فلز وایل با توجه به تقارن‌های فیزیکی همیلتونی و انرژی برانگیختگی حفره-ذره سیستم را مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

مدل و فرمالیسم



شکل ۱: شماتیک مربوط به اثر مجاورت شبه فلزهای وایل با ابرسانایی.

همیلتونی 4×4 انرژی‌های پایین برای شبه فلزهای وایل با سرعت فرمی همسانگرد و خاصیت ذاتی مغناطیسی به صورت زیر می‌باشد [۱].

$$H_0(\mathbf{k}) = \hbar v_f \tau_x \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} + m \tau_z + b \sigma_z \quad (1)$$

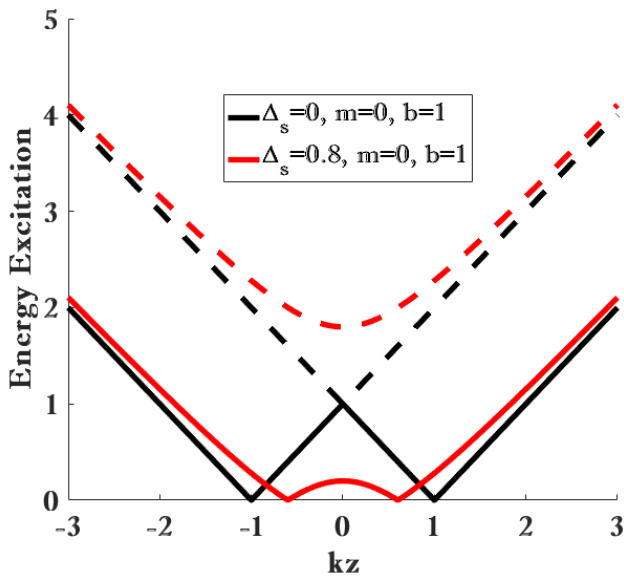
در اینجا $\boldsymbol{\sigma}$ و $\boldsymbol{\tau}$ دو بردار ماتریس‌های پائولی سه بعدی هستند. همچنین پارامتر v_f سرعت فرمی، m پارامتر جرم دیراک و b شبه-میدان زیمان ذاتی است.

سیستمی با اثر مجاورت شبه فلز وایل با مغناطیس ذاتی به همراه ابرسانای با تقارن اسپینی تکتابی و تابع موج-s (WSM/SC) را می‌توان با همیلتونی 8×8 دیراک-بوگولیوبوف-دوژن (DBdG) به صورت زیر توصیف می‌شود [۷، ۶].

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_0(\mathbf{k}) & \Delta \\ \Delta^\dagger & -H_0^*(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (1)$$

²Dirac-Bogoliubov-de Gennes

برانگیختگی حفره-ذره دارای گاف انرژی می‌باشد که این امر به دلیل جرم دار شدن نقاط دیراک به واسطه مغناطش ذاتی شبه فلز وایل در مجاورت ابررسانا می‌باشد. همچنین در شکل ۲ به ازای مقادیر $m=b$ رفتار ابررسانایی مشاهده نمی‌شود و رفتار سیستم مانند شبه فلزهای معمولی می‌باشد. در واقع توپولوژی سیستم با تغییر فاز در این حالت عوض نمی‌شود.



شکل ۳: انرژی برانگیختگی حفره-ذره ابررسانا پارامترهای مختلف با جفت‌شدگی اسکالر.

در شکل ۳ با توجه به بسته شدن گاف انرژی توپولوژی سیستم عوض می‌شود. نکته قابل توجه در این ساختار این است که خاصیت ذاتی مغناطیسی، مانند ابررسانای توپولوژیکی با همزیستی فرومغناطیس عمل می‌کند.

نتیجه گیری

در این پژوهش انرژی پاشندگی مربوط به اثر مجاورت شبه فلز وایل با مغناطیس ذاتی به همراه ابررسانای با تقارن اسپینی اسکالر و شبه اسکالر تکتابی و تابع موج-S (WSM/SC) مورد مطالعه قرار گرفت. خاصیت ذاتی مغناطیسی و جرم‌دار شدن نقاط دیراک باعث شکافتگی نمودار انرژی پاشندگی حفره-ذره می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که با توجه به جفت‌شدگی شبه اسکالر پارامتر نظم

$$E(\mathbf{k}) = \gamma \sqrt{2\beta b \sqrt{A} + B}$$

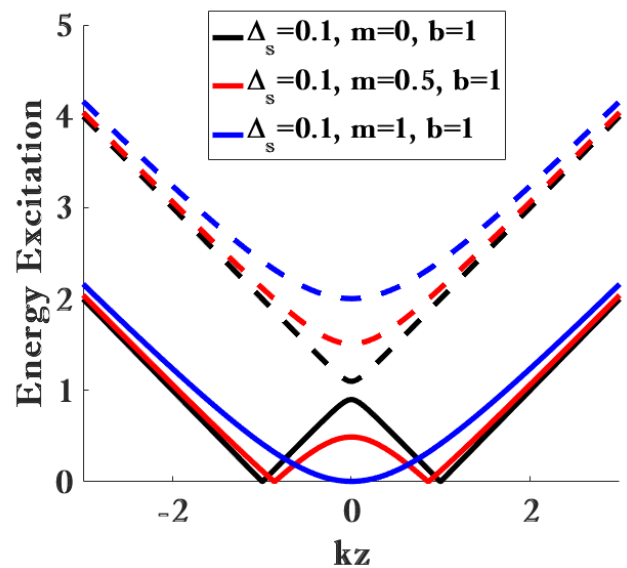
$$A = (\hbar v_f k_z)^2 + (\Delta_{Pseudo})^2 + m^2 + \gamma 2m \Delta_{Pseudo}$$

$$B = \gamma 2m \Delta_{Pseudo} + (\hbar v_f k_z)^2 + b^2 + (\Delta_{Pseudo})^2 + m^2 + \hbar v_f (k_x + i k_y)(k_x - i k_y) \quad (5)$$

رابطه بالا $\gamma = \pm$ مربوط به شبه ذرات و شبه حفره‌ها می‌باشد و همچنین $\beta = \pm$ مشخص کننده نوار رسانش و نوار ظرفیت می‌باشد.

بحث و نتایج

نمودار انرژی برانگیختگی مربوط به شبه ذره-حفره‌های ساختار WSM/SC با توجه به رابطه ۴ به صورت زیر بدست می‌آید.



شکل ۴: انرژی برانگیختگی حفره-ذره ابررسانا با جفت‌شدگی اسکالر مربوط به ساختار WSM/SC به ازای پارامتر جرم دیراک مختلف.

شکل ۲ انرژی برانگیختگی حفره-ذره برای نوار رسانش (خط تیره) و نوار ظرفیت (خط پر) مربوط اثر مجاورت شبه فلز وایل، با سرعت فرمی همسانگرد و به ازای مقادیر مختلف پارامتر جرم دیراک (m) و شبه-میدان زیمان ذاتی (b) نمایش داده شده است. به ازای $m < b$ و پارامتر نظم ابررسانای ۰/۱ حالت‌های برانگیختگی ذره-حفره نمایش داده می‌شود. در شکل ۲ نمودار انرژی

ابرسانایی، جمله $\gamma 2m\Delta_{pseudo}$ در انرژی پاشندگی ظاهر می‌شود.

مرجع‌ها

- [1] C. J. Tabert, and J. P. Carbotte. "Optical conductivity of Weyl semimetals and signatures of the gapped semimetal phase transition." *Phys. Rev. B* **93**(8) (2016) 085442.
- [2] T. Meng, and L. Balents. "Weyl superconductors." *Phys. Rev. B* **86**(5) (2012) 054504.
- [6] C. Ching-Kai, M. J. Gilbert, and T. L. Hughes, "Vortex lines in topological insulator-superconductor heterostructures." *Phys. Rev. B* **84**(14) (2011) 144507.
- [3] L. X. Yang, Z. K. Liu, Y. Sun, H. Peng, H. F. Yang, T. Zhang, B. Zhou et al. "Weyl semimetal phase in the non-centrosymmetric compound TaAs." *Nat. Phys.* **11**(9) (2015) 728.
- [4] H. Weng, Ch. Fang, Zh. Fang, B. A. Bernevig, X. Dai, "Weyl semimetal phase in noncentrosymmetric transition-metal monophosphides." *Phys. Rev. X* **5**(1) (2015) 011029.
- [5] S. Borisenko, Q. Gibson, D. Evtushinsky, V. Zabolotnyy, B. Büchner, and R. J. Cava, "Experimental realization of a three-dimensional Dirac semimetal." *Phys. Rev. Lett.* **113**(2) (2014) 027603.
- [7] C. Timm, "Theory of superconductivity." *Institute of theoretical Physics Dresden.* (2012).
- [8] M. Salehi, S. A. Jafari, "Sea of Majorana fermions from pseudo-scalar superconducting order in three dimensional Dirac materials." *Sci. Rep.* **7**(1) (2017) 8221.
- [9] Z. Faraei, S. A. Jafari, "Superconducting proximity in three-dimensional Dirac materials: Odd-frequency, pseudoscalar, pseudovector, and tensor-valued superconducting orders." *Phys. Rev. B* **96**(13) (2017) 134516.
- [10] K. Capelle, E. K. U. Gross, "Relativistic framework for microscopic theories of superconductivity. I. The Dirac equation for superconductors." *Phys. Rev. B* **59**(10) (1999) 7140.

سنتز و مشخصه‌یابی نانوکامپوزیت اکسید آهن/اکسید گرافن با نسبت‌های مختلف و بررسی خواص مغناطیسی آنها

ابراهیمی تزنگی، فاطمه؛ حکمت آرا، هدی؛ سیدی‌زدی، جمیله

گروه فیزیک دانشگاه ولی عصر رفسنجان (عج)

چکیده

در این پژوهش نانوذرات مگنتیت به روش هم‌رسوبی تهیه شد و سپس با استفاده از گروه‌های آمین عامل‌دار شده و در نهایت بر روی صفحات اکسید گرافن قرار گرفت. نانوکامپوزیت‌های $\text{GO/Fe}_3\text{O}_4\text{-NH}_2$ با سه ترکیب مختلف با نسبت‌های جرمی ۱:۱، ۲:۱، ۳:۱ به منظور مقایسه خواص مغناطیسی آنها تهیه شده است. کیفیت نمونه‌های سنتز شده با استفاده از مشخصه‌یابی‌های VSM، EDS، XRD، SEM و FTIR مورد تأیید واقع شد. نتایج نشان می‌دهد که نانوکامپوزیت‌های سنتز شده رفتار ابرپارامغناطیس نشان می‌دهند و اشباع مغناطیسی بیشینه به دست آمده در دمای اتاق در حدود 70.5 emu/g که در مقایسه با نانوذرات Fe_3O_4 با اشباع مغناطیس 73.4 emu/g قابل ملاحظه می‌باشد.

Synthesis and characterization of amine-functionalized Fe_3O_4 /graphene-oxide magnetic nanocomposite with different ratios and investigation of their magnetic properties

Ebrahimi Tazangi; Fatemeh, Hekmatara; Hoda, Seyedyazdi; Jamileh

Department of Physics, Faculty of Science, University of Vali-e Asr, Kerman,

Magnetite nanoparticles prepared by co-precipitation method and functionalized by amine groups prior hybridization with graphene oxide. The resulted $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-NH}_2/\text{GO}$ nanocomposites prepared with three different compositions with mass ratios of 1:1, 2:1, 3:1 in order to compare their magnetic properties. Different characterization techniques have been used to confirm the quality of the synthesized samples such as Fourier-transform infrared spectrum, X-ray diffraction pattern, scanning electron microscopy, VSM and EDS. The results show that the synthesized nanocomposites exhibited superparamagnetic behavior with the maximum value of saturation magnetization of about 70.5 emu/g at room temperature that is considerable in comparison with Fe_3O_4 nanoparticles with 73.4 emu/g .

PACS No. (75.20)

مقدمه

نموده است. نانوکامپوزیت‌های بر پایه گرافن با ویژگی‌های خاص، نویدبخش کاربردهای بسیاری در آینده است. بعنوان نمونه‌ای از این نانوکامپوزیت‌ها می‌توان به ترکیب گرافن با مواد پلیمری، ماتریس‌های سرامیکی و نانوذرات مغناطیسی اشاره کرد [۱-۳]. نانوذرات مغناطیسی کاربردهای زیادی در زمینه شاره‌های مغناطیسی، ذخیره داده‌ها، کاتالیست‌ها و تصویربرداری تشدید

گرافن و اکسید گرافن (GO) از مواد کربنی جدید و جالب با ویژگی‌های عالی هستند. گرافن، تک لایه‌ای دو بعدی از اتم‌های کربن، با ساختار شش‌گوشی و هیبرید sp^2 ، بدلیل ویژگی‌های جالب الکتریکی، گرمایی و مکانیکی که اخیراً توجه بسیاری از پژوهشگران در تمام زمینه‌ها و به‌ویژه نانو فناوری را به خود جلب

شستشو داده شده و جهت خشک شدن در آون تحت دمای 60°C قرار می‌گیرد.

سنتز اکسیدگرافن/اکسید آهن عاملدار

به طور خلاصه، 0.6 گرم $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ در آب دیونیزه با فرآیند اولتراسونیک به مدت 30 دقیقه حل و سپس با نسبت مولی $[\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}:\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}]$ [۲:۱] به محلول تحت گاز N_2 اضافه شد. سپس 3 میلی‌لیتر محلول آمونیاک با 20 میلی‌لیتر آب دیونیزه رقیق شده و به آب اضافه می‌شود. پس از آن، محلول به مدت 2 ساعت در دمای 80 درجه سلسیوس همزده شد. ذرات مگنتیت سیاه به دست آمده با اتانول چند بار شسته شده و با یک آهنربا جدا شده و سپس به مدت 5 ساعت در دمای 60 درجه سلسیوس خشک می‌شوند. سپس 0.7 گرم نانوذرات Fe_3O_4 و 0.3 میلی‌لیتر APTMS در 25 میلی‌لیتر تولوئن خشک حل شدند تا یک محلول (30 میلی‌لیتر) تهیه شود. این مخلوط به مدت 24 ساعت رفلاکس شد. ذرات حاصل توسط یک آهنربا جدا شده و سپس با تولوئن شسته شدند. سپس محصول به مدت 10 ساعت در دمای 60 درجه سلسیوس خشک شد تا ذرات Fe_3O_4 فعال شده توسط گروه آمینی بدست آیند. سپس 0.4 گرم $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-NH}_2$ در 60 میلی‌لیتر آب مقطر پراکنده شده و به محلول GO (با مقادیر مختلف جرم و $1:1$ ، $2:1$ و $3:1$) در محیط N_2 اضافه شد و سپس هم‌خوردن به مدت 30 دقیقه ادامه یافت و پس از آن 8 میلی‌لیتر NH_4OH و 20 میلی‌لیتر آب مقطر با مخلوط کردن به مدت 1 ساعت در دمای 80 درجه سلسیوس به آن اضافه شد. در نهایت، محصول با اتانول و آب دیونیزه شسته شد و به مدت 24 ساعت در دمای 60 درجه سلسیوس خشک می‌شود.

شکل ۱ قله‌های تیز و شدید اکسید آهن Fe_3O_4 را نشان می‌دهد

($2\theta = 18.1^{\circ}$ ، 30.7° ، 35.4° ، 43.3° ، 53.4° ، 57.1° و 62.7°) بترتیب منطبق با صفحات (۱۱۱)، (۲۲۰)، (۳۱۱)، (۴۰۰)، (۴۲۲)، (۵۱۱) و (۴۴۰)، نشان‌دهنده ساختار اسپینل معکوس نانوذرات Fe_3O_4 سنتز شده و

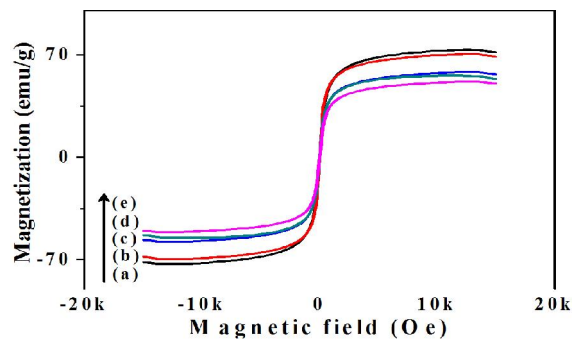
مغناطیسی دارند. در بین نانوذرات مغناطیسی، نانوذرات اکسید آهن Fe_3O_4 بدلیل وجود کاتیون‌های آهن در دو حالت ظرفیتی Fe^{3+} در ساختار اسپینل معکوس، بیشترین توجه را به خود جلب کرده‌اند. Fe_3O_4 باید از نظر شیمیایی پایدار، سازگار با محیط زیست، و همچنین دارای درجه پراکندگی بالا در محیط‌های مختلف مایع در مقادیر مختلف pH می‌باشد. همچنین به دلیل ماندگاری سریع و موثر، سمیت کم، تراکم ذاتی درونی، فراوانی زیاد و دمای کوری بالا، مزایای منحصر به فردی دارد. Fe_3O_4 با ساختار اسپینل معکوس مکعبی به طور گسترده‌ای در کاربردهای بیودارویی، تصویربرداری رزونانس مغناطیسی کاربردهای صنعتی و محیطی، جداسازی سلول و سایر اهداف بیولوژیکی مورد استفاده قرار گرفته است [۳-۶].

نشان دادن این نانوذرات مغناطیسی بر روی ورق‌های اکسیدگرافن و سنتز نانوکامپوزیت از آنها به روش‌های مختلف، بهبود قابل توجهی در خواص فیزیکی و شیمیایی هر دو ایجاد کرده و آنها را برای کاربردهای خاصی مناسب می‌سازد. نسبت گرافن به اکسید فلزی یک پارامتر کلیدی است که باید برای بهبود عملکرد کامپوزیت با عملکرد بالا و سریع تنظیم شود. لازم به ذکر است که RGO و GO مواد ایده‌آلی هستند که می‌توانند به عنوان زیرلایه برای نشان دادن نانوذرات استفاده شوند [۵-۶].

سنتز اکسیدگرافن

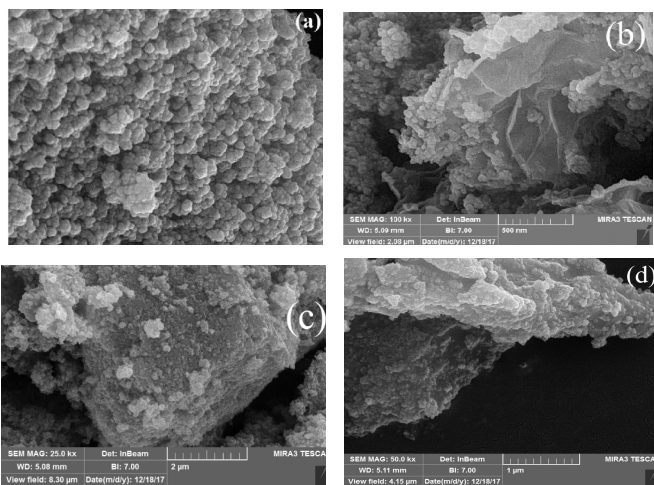
برای تهیه این ترکیب ابتدا 36 ml اسید سولفوریک به همراه 5.3 g پودر گرافیت در یک حمام یخ با دمای $5-0^{\circ}\text{C}$ گذاشته تا هم بخورد. سپس 15.2 g پرمنگنات پتاسیم به آرامی به آن اضافه می‌شود تا به مدت 2 ساعت در این دما هم بخورد. سپس مخلوط به حمام روغن با دمای 42°C منتقل می‌شود تا به مدت 2 ساعت توسط مگنت همزده شود. سپس طی 4 مرحله 46 ml آب به مخلوط اضافه شده تا $1/5$ ساعت تحت تکان شدید بهم بخورد. در نهایت مقدار 52 ml آب اکسیژنه را به آن اضافه کرده تا رنگ مخلوط خردلی روشن شود. محصول بدست آمده با آب و اتانول

می‌دهند. اشباع مغناطیسی با افزایش نسبت $Fe_3O_4-NH_2$ افزایش می‌یابد.



شکل ۲: منحنی هیستریزس نمونه‌ها. (a) $Fe_3O_4-NH_2$ (b) Fe_3O_4 (c) $GO:Fe_3O_4-NH_2(1:3)$ (d) $GO:Fe_3O_4-NH_2(1:1)$ (e) $GO:Fe_3O_4-NH_2(1:2)$

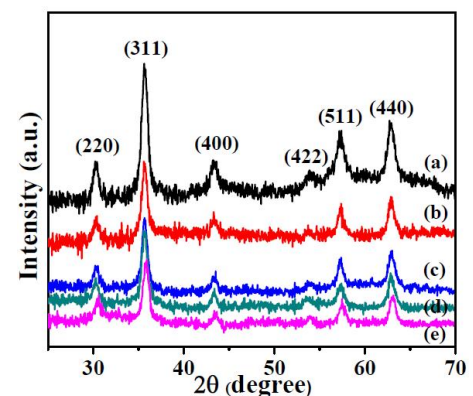
توزیع اندازه یکنواخت نانوذرات $Fe_3O_4-NH_2$ از FESEM یافت شد. شکل نشان می‌دهد که نانوذرات Fe_3O_4 به صورت کروی شکل با اندازه متوسط در حدود ۲۵ نانومتر بر روی صفحات GO قرار دارند. با افزایش نسبت $Fe_3O_4-NH_2$ به GO، صفحات GO کاملاً با $Fe_3O_4-NH_2$ پوشیده شده‌اند. اندازه متوسط بلورک‌ها که توسط XRD از طریق معادله شرر کمتر از ۱۳ نانومتر به دست آمد، نتایج حاصل از FESEM را تأیید می‌کند. در بزرگنمایی بالاتر، تجمع نانوذرات مغناطیسی به وضوح قابل مشاهده است. توزیع نانوذرات آگلومره بر روی صفحات GO همگن است. علاوه بر این، مناطق زیادی از صفحات GO بدون پوشش نانوذرات $Fe_3O_4-NH_2$ وجود ندارد.



شکل ۳: تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) نمونه (a) $Fe_3O_4-NH_2$ (b) Fe_3O_4 (c) $GO:Fe_3O_4-NH_2(1:2)$ (d) $GO:Fe_3O_4-NH_2(1:3)$

بلورینگی بالای آن‌هاست. پس از اصلاح Fe_3O_4 توسط ۳-آمینوپروپیل تری متوکسی سیلان (APTMS) با نسبت‌های مختلف GO، شدت قله‌ها در نانوکامپوزیت‌های حاصل تغییری نداشت و ساختار بلوری Fe_3O_4 حتی پس از عامل‌دار شدن حفظ شد (b,c). متوسط اندازه بلورک‌ها به ترتیب ۱۳/۳۰، ۱۳/۹۱، ۱۲/۱۳، ۱۲/۵۸ و ۱۱/۱۹۰ به دست آمد. اندازه ذرات در $Fe_3O_4-NH_2$ در مقایسه با Fe_3O_4 به دلیل وجود NH_2 افزایش یافته و همچنین هیچ‌گونه ناخالصی در نمونه‌ها دیده نمی‌شود. الگوی XRD نشان می‌دهد که شدت قله نانوکامپوزیت $GO-Fe_3O_4-NH_2$ نسبت به Fe_3O_4 کاهش می‌یابد که نشان دهنده کاهش اندازه بلورک می‌باشد (b-e). اندازه بلورک‌ها از معادله شرر محاسبه شده است:

$D = K\lambda/\beta\cos\theta$ که D اندازه متوسط ذرات، K ثابت است، λ طول موج پرتو ایکس (۰/۱۵۴۰ nm)، β عرض قله در نیم‌ارتفاع، و θ زاویه پراش است.



شکل ۴: پراش پرتوی ایکس نمونه‌های سنتز شده.

مغناطیس نمونه‌ها با استفاده از مغناطیس‌سنج نمونه ارتعاشی $Fe_3O_4-NH_2$ ، Fe_3O_4 و $Fe_3O_4-NH_2/GO$ در میدان مغناطیسی اعمالی ۲۰ تا ۲۰ کیلو اورستد، با استفاده از تحلیل نتایج VSM به دست می‌آید. دیده می‌شود که منحنی نشان‌دهنده پایداری صفر بوده و همه الگوها اساساً به صورت S شکل ظاهر می‌شوند. اشباع مغناطیسی نمونه‌ها به ترتیب ۵۱/۵۲، ۵۵/۸۵، ۵۸/۲۶، ۷۰/۵، ۷۳/۴۳ emu/g به ترتیب b، c، d و e، کمتر از مقدار مربوط به Fe_3O_4 خالص emu/g و نمونه‌ها رفتار معمولی ابرپارامغناطیس را نشان

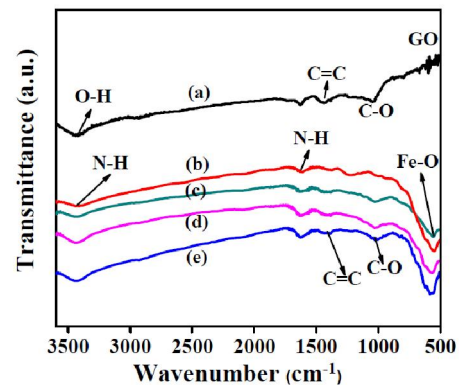
نتیجه گیری

نتایج ما نشان می‌دهد که نانوکامپوزیت‌های سنتز شده رفتار ابرپارامغناطیس با اشباع مغناطیسی نسبتاً بالا دارند. با افزایش نسبت اکسید آهن به اکسیدگرافن اشباع مغناطیسی افزایش پیدا می‌کند.

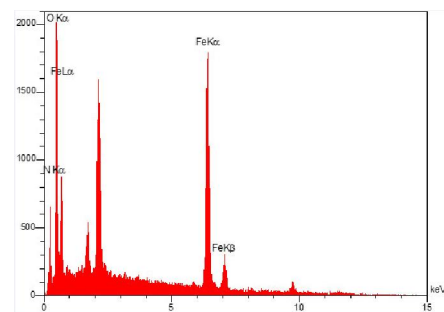
مرجع ها

- [1] X. Hu, Y. Zhao, H. Wang, X. Tan, Y. Yang and Y. Liu, "Efficient removal of tetracycline from aqueous media with a Fe_3O_4 nanoparticles@graphene oxide nano sheets assembly"; *Int. J. Environ. Res. Public Health* **14** (2017) 1495.
- [2] M. Tavakoli, M. Hajimahmoodi, F. Shemirani, A. Shiralizadeh Dezfuli, M. Khanavi, "Application of $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{RGO}$ nanocomposite as a sorbent of pesticide"; *Chromatographia* **80** (2017), 1423-1432.
- [3] R. Fu1, M. Zhu, "Synthesis and characterization of structure of Fe_3O_4 @graphene oxide nanocomposite"; *Adv. Compos. Lett.*, **25**, 6 (2016) 143-146.
- [4] F. Zhu1 Y. Wang1, Y. Zhang, W. Wang, "Synthesis of Fe_3O_4 Nanorings/amine-functionalized reduced graphene oxide composites as supercapacitor electrode materials in neutral electrolyte"; *Int. J. Electrochem. Sci.*, **12** (2017) 7197-7204.
- [5] R. Li, L. Liu and F. Yang., "Polyaniline/reduced graphene oxide/ Fe_3O_4 nano-composite for aqueous $\text{Hg}(\text{II})$ removal"; *Wat. Sci. Tech.* **72.11** (2015) 2062-2070.
- [6] M. A. Farghali, T. A. Salah El-Din, A. M. Al-Enizi, R. M. El Bahnasawy, "Graphene/magnetite nanocomposite for potential environmental application"; *Int. J. Electrochem. Sci.*, **10** (2015) 529 - 537

از شکل ۴ دیده می‌شود که دو باند گسترده در 1628 cm^{-1} و 3435 به نوسانات کششی N-H و حالت خمشی گروه آزاد NH_2 مربوط می‌شود که نشان دهنده اصلاح سطح موفقیت آمیز بوده است. برای قله‌های $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-NH}_2/\text{GO}$ در 1373 و 1028.9 به ترتیب به ارتعاش $\text{C-H} =$ و کشش C-O اختصاص یافته است. ارقام مربوط به ارتعاش کششی پیوند Fe-O از 562.73 سانتی متر به 585 سانتی متر افزایش یافت به دلیل افزایش $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-NH}_2$ در مراحل دیگر. برای GO، پیک‌های 1617 ، 1384 و 1055 برای H-O-H خمشی، ارتعاش C-H و کشش C-O و 573 به O-H اختصاص داده شده است.



شکل ۴: آنالیز FTIR ترکیبات سنتز شده.



شکل ۵: تصویر EDS از نمونه‌های سنتز شده.

همان طور که در شکل ۵ مشاهده می‌کنیم حضور مقدار ۸.۵۵٪ کربن، ۳۶.۹۰٪ اکسیژن، و ۲.۴۰٪ نیتروژن و ۵۳.۴۰٪ آهن نشان از سنتز موفقیت‌آمیز $\text{GO}/\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-NH}_2$ دارد.

مغناطومقاومت ناهمسانگرد در فیلم نازک چند لایه‌ی پرمالوی / پلاتین

احمدی گورجی، خدیجه^۱؛ سید ابراهیمی، سید علی^۱؛ محسنی، سید مجید^۲

^۱دانشکده مهندسی متالورژی و مواد، دانشگاه تهران، تهران

^۲دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی، تهران

چکیده

فیلم های بسیار نازک مغناطیسی چند لایه $10 \times$ [پرمالوی/ پلاتین (نانومتر)] توسط کندوپاش مگنترون در دمای محیط آماده شد. پاسخ مغناطومقاومت طولی تحت جاروب یک میدان مغناطیسی درون صفحه ای در زوایای مختلف نسبت به جریان برای سه نمونه گوناگون با تغییر ضخامت پرمالوی از ۱ تا ۳ نانومتر مورد ارزیابی قرار گرفت. مغناطومقاومت با افزایش ضخامت پرمالوی افزایش می یابد. در حالیکه تغییرات زاویه ای مغناطومقاومت برای نمونه ی پرمالوی با ضخامت ۲ نانومتر بیشتر است. نتایج بدست آمده متاثر از جفت شدگی قوی لایه پرمالوی با پلاتین در لایه های بسیار نازک می باشد.

Anisotropic Magnetoresistance in Thin Film Permalloy/Platinum Multilayer

Ahmadi Guraji, Khadijeh¹; Seyed Ebrahimi, Seyed Ali¹, Mohseni, Seyed Majid²

¹School of Metallurgy and Materials Engineering, University of Tehran, Tehran,

²Department of Physics, Shahid Beheshti University, Tehran

Abstract

Multilayer magnetic ultra-thin films of [permalloy/platinum (1 nm)] $\times 10$ were prepared by magnetron sputtering method at ambient temperature. The magnetoresistance response was investigated under an in-plane magnetic field sweep for three different samples with permalloy thickness changes between 1 and 3 nm, at different angles with respect to the current direction. We observe that the magnetoresistance changes with increasing permalloy thickness. However, variation of magnetoresistance is higher for multilayer with permalloy (2nm) layer. Results represent the role of strong coupling of permalloy and platinum layer in ultra-thin layers.

مقدمه

تغییر در مقاومت الکتریکی مواد مغناطیسی تحت میدان مغناطیسی خارجی اثر مغناطومقاومت نامیده می شود. مطالعات بر روی انواع مواد مغناطیسی منجر به کشف انواع مغناطومقاومت جهت استفاده در زمینه های کاربردی مختلف از قبیل حافظه های مغناطیسی، سنسور، ابزارهای اسپینترونیکی و پتاسیلی برای محاسبات کوانتومی شده است.

مغناطومقاومت ناهمسانگرد وابستگی مقاومت به جهت جریان الکتریکی نسبت به جهت گیری مغناطش در مواد است. بطور کلی، مقاومت در صورتیکه جریان و میدان مغناطیسی به موازات (عمود) هم باشند با افزایش میدان افزایش (کاهش) می یابد. [۱]. منشأ ذاتی مغناطومقاومت ناهمسانگرد، جفت شدگی اسپین مدار است که به موجب آن شکل ابرالکترونی الکترون تغییر کرده و یک ناهمسانگردی موضعی در هر حوزه مغناطیسی ایجاد می شود [۲].

ممان مغناطیسی القا شده پلاتین در فصل مشترک بدلیل اثر همجواری مغناطیسی (اثر جفت شدگی تبادلی در فصل مشترک) قابل توجیه نیست. بلکه می توان این افزایش مغناطومت را به ممان های مغناطیسی پلاتین در باند رسانش که توسط الکترون های رسانش پلاریزه اسپینی منتشر شده از لایه فرومغناطیس القا شده اند، نسبت داد. در حقیقت الکترون های رسانشی که از لایه پرمالوی وارد لایه پلاتین می شوند، بواسطه پراکندگی پلاریزه اسپینی از لایه پرمالوی، پلاریزه اسپینی می توانند باشند و یک فرومغناطیس ضعیف در لایه پلاتین ایجاد کنند و از این طریق اثر مغناطومت ناهمسانگرد اضافی القا می گردد. [۵].

در این مطالعه بر روی رفتار مغناطومت ناهمسانگرد فیلم نازک چند لایه پرمالوی/پلاتین در جهت گیری های مختلف جریان و مغناطش متمرکز می شویم.

روش تجربی

ساختار چند لایه تانتالوم (۵nm)/پلاتین (۶nm) [پرمالوی (x)/پلاتین (۱nm)]/طلا (۳nm) با ضخامت های مختلف پرمالوی ۳ و ۲ و ۱، x= نانومتر (به ترتیب بعنوان نمونه S1، S2 و S3) بر روی زیر لایه سیلیکون اکساید در دمای محیط توسط سیستم کندوپاش مگنترون DC تحت فشار 10^{-8} تور لایه نشانی گردید. در این ساختار، دولایه پرمالوی/پلاتین با ده مرتبه تکرار آماده شده است. از تانتالوم و طلا به ترتیب بعنوان لایه بافر و محافظ استفاده گردید. نمونه ها به شکل مستطیل در ابعاد 2×10 میلی متر مربع برش داده شدند.

اثر مغناطومت با اندازه گیری مقاومت طولی بصورت دوپروب در دمای اتاق با اعمال جریان مستقیم ۱۰ میلی آمپر در زوایای مختلف جریان و میدان مغناطیسی اعمالی ۶ میلی تسلا مورد بررسی قرار گرفت. نسبت مغناطومت طبق رابطه $\Delta R/R$ $[(R_{max}-R_{min})/R_{min}]$ = محاسبه گردید. R_{min} و R_{max} به ترتیب متناظر با مقاومت اشباع برای مغناطومت مثبت و منفی است.

بحث و نتایج

پاسخ مغناطومت، تحت جاروب یک میدان مغناطیسی درون

مغناطومت در سیستم های دانه ای و همچنین ساختارهای چندلایه شامل لایه های فرومغناطیس جدا شده توسط لایه غیرمغناطیسی، مغناطومت عظیم نامیده می شود. منشأ این نوع مغناطومت، پراکندگی وابسته به اسپین الکترون های در حال عبور از لایه غیرمغناطیسی می باشد. پراکندگی زمانیکه مغناطش لایه های فرومغناطیسی جهت گیری موازی (پادموازی) دارند مینیمم (ماکزیمم) است. وجه تمایز مغناطومت عظیم و مغناطومت ناهمسانگرد بزرگی دامنه اش نیست بلکه، در تمامی جهت گیری های میدان طولی، عرضی و عمود با افزایش میدان کاهش می یابد [۳].

از لحاظ پدیده شناختی، مغناطومت ناهمسانگرد با رابطه (۱) بیان می شود:

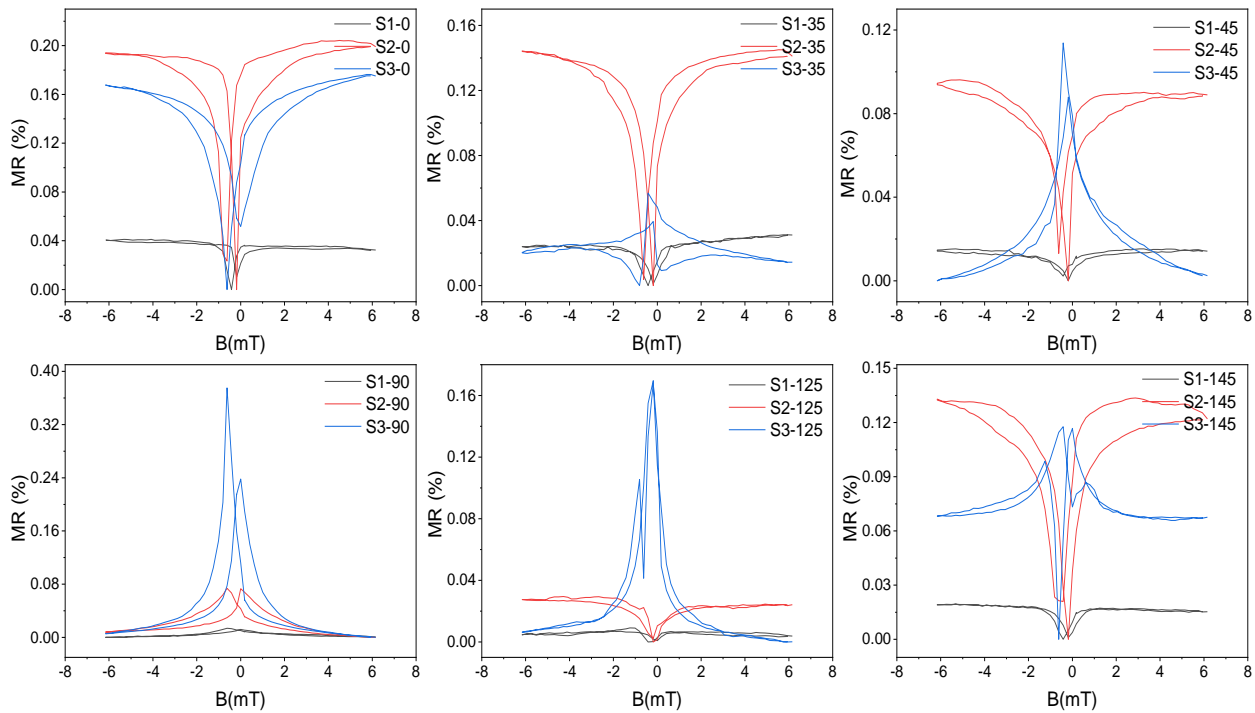
$$\rho_{long} = \rho_{\parallel} + (\rho_{\parallel} - \rho_{\perp}) \cos^2 \theta \quad (1)$$

که در این رابطه θ زاویه بین جریان و مغناطش، ρ_{\parallel} و ρ_{\perp} به ترتیب مقاومت های طولی و عرضی برای مغناطش موازی و عمود بر جریان هستند. نسبت مغناطومت ناهمسانگرد بصورت $\Delta \rho / \rho = (\rho_{\parallel} - \rho_{\perp}) / \rho_{avg}$ تعریف می گردد که در آن ρ_{avg} بصورت $\rho_{\parallel} + 2\rho_{\perp} / 3$ بیان می شود [۱].

فیلم های پرمالوی (آلیاژ آهن - نیکل) بدلیل داشتن ویژگی هایی همچون فرو مغناطیس نرم بودن، هیستریزیس کم، میدان اشباع پایین و ضریب مگنتواستریکشن کوچک نقش مهمی در مواد مغناطومت بازی می کنند.

لایه پرمالوی/تانتالوم که بطور ویژه در سنسور مغناطومت ناهمسانگرد استفاده می شود، کاهش شدید درصد مغناطومت در ضخامت های کم پرمالوی و افت محسوس ممان مغناطیسی مخصوصاً پس از آنیل از خود نشان می دهد. با افزودن لایه نازک پلاتین در فصل مشترک، بدلیل پراکندگی قوی اسپین مدار در فصل مشترک و همچنین جلوگیری از تشکیل لایه غیرمغناطیسی بدلیل نفوذ تانتالوم در لایه پرمالوی در فصل مشترک، میزان مغناطومت ناهمسانگرد برای فیلم نازک پرمالوی بطور قابل توجهی افزایش می یابد [۴].

بهبود میزان مغناطومت ناهمسانگرد در دولایه پلاتین/فلز فرومغناطیس با استفاده از تئوری مغناطومت اسپین هال و



شکل ۱: نمودار مغناطوسمقاومت برای میدان مغناطیسی در حال جاروب به موازات صفحه در زوایای مختلف نسبت به جریان

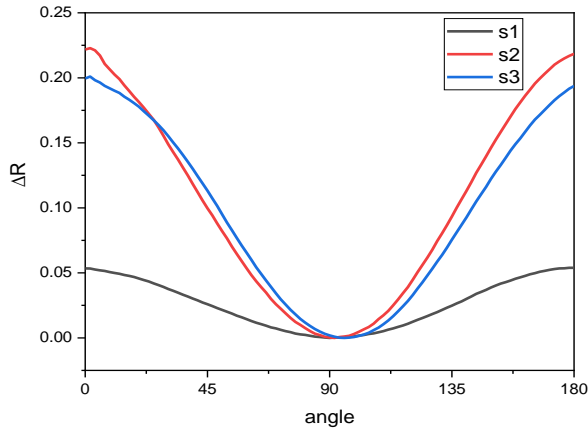
و نمونه چند لایه، رفتاری همچون ماده بالک و توده ای از خود نشان می دهد. از اینرو در این نمونه صرفاً رفتار مغناطوسمقاومت ناهمسانگرد ظاهر شده است.

مغناطوسمقاومت نیز در نمونه S^3 در برخی زوایا همچون 35° ، 125° و 145° رفتار پیچیده تری مانند جهش ناگهانی مقاومت نشان داده است که این پدیده به تغییر پیکربندی حوزه های مغناطیسی نسبت داده می شود [۷]. چون ممانها ترجیح می دهند در وضعیتی قرار گیرند که مجموع انرژی مگنتواستاتیک، آیزوتروپی، انرژی تبدیلی و همچنین انرژی زیمان مینیمم شده و در حالت پایدار و تعادل قرار گیرند [۸].

وجود عدم تقارن، به توزیع حوزه های مغناطیسی متفاوت در هر لایه از این ساختار نسبت داده می شود بعبارتی همبستگی خوبی بین حوزه های مغناطیسی متناظر در لایه های همجوار وجود نخواهد داشت. نمودار نامتقارن بیانگر جفت شدگی ضعیف تر و در نتیجه چرخش مغناطیسی مستقل برای هر لایه است. در مقابل وجود تقارن بهتر در نمودار مربوط به چرخش همدوس لایه

صفحه ای برای سه نمونه با ضخامت مختلف لایه پرمالوی در زوایای مختلف نسبت به جهت جریان در شکل ۱ نشان داده شده است. با توجه به رفتار گوناگون مغناطوسمقاومت در زوایای مختلف، رفتار ناهمسانگرد قابل مشاهده می باشد.

تمامی نمونه ها با ضخامت ثابت پلاتین (۱ نانومتر) و ضخامت متغیر پرمالوی از ۱ تا ۳ نانومتر در زاویه صفر و نود درجه به ترتیب مغناطوسمقاومت مثبت و منفی از خود نشان دادند. بعبارتی در تمامی نمونه ها یک رفتار معمول مغناطوسمقاومت ناهمسانگرد مشاهده گردید. ویژگی فیزیکی فیلم پرمالوی به شرایط لایه نشانی بسیار حساس است. این مقادیر می تواند با توجه به میکروساختار فیلم همچون توزیع اندازه دانه، مورفولوژی پلی کریستالی و بافت ترجیحی تغییر کند [۶]. از آنجاییکه در حین لایه نشانی، با توجه به اینکه لایه های مورد نظر بسیار نازک هستند و در روش کندوپاش معمولاً لایه بصورت کلاستر روی زیرلایه می نشیند، احتمال شکل گیری حفره در لایه وجود دارد بطوریکه از این طریق، ارتباطی بین لایه های همجوار فرومغناطیس ایجاد می گردد. با این شرایط جفت شدگی تبدیلی بین لایه ها بصورت فرومغناطیس خواهد بود



شکل ۳: وابستگی زاویه ای تغییرات مقاومت چند لایه پرمالوی/پلاتین

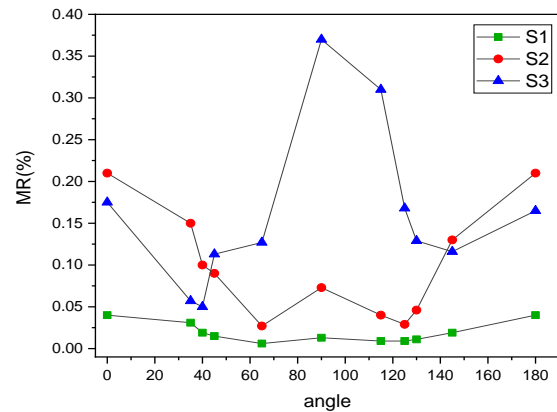
نتیجه گیری

وابستگی مغناطومقاومت به زاویه بین میدان اعمالی و جریان بررسی شد. نتایج نشان داد رفتار مغناطومقاومت تحت تأثیر ضخامت لایه قرار می گیرد. با افزایش ضخامت لایه فرومغناطیس، درصد مغناطومقاومت نیز افزایش یافت. همچنین وابستگی زاویه ای تغییرات مقاومت برای نمونه ۲ نانومتری بیشتر بود که بیانگر وجود جفت شدگی قویتر پرمالوی و پلاتین در لایه های نازک بود.

مرجع ها

- [1] G. Sung, C. Park, K. Shin, G. Sung, C. Park, and K. Shin, "Transition of the anisotropic magnetoresistance of permalloy films from the negative to the positive along with thickness Transition of the anisotropic magnetoresistance of permalloy films from the negative to the positive along with thickness," *J. Appl. Phys.*, vol. **85**, no. 1999, pp. 10–13, 1999.
- [2] F. Lesmes, A. Salcedo, J. J. Freijo, D. Garcia, A. Hernando, and C. Prados, "Influence of the interfaces on the anisotropic magnetoresistance of Ni / Co multilayers," *Appl. Phys. Lett.* **69**, vol. 69, no. October, pp. 2596–2598, 1996.
- [3] C. L. Chien, J. Q. Xiao, and J. S. Jiang, "Giant negative magnetoresistance in granular ferromagnetic systems," *J. Appl. Phys.* **73**, vol. 5309, no. 1993, 2012.
- [4] Y. F. Liu, J. W. Cai, and L. Sun, "Large enhancement of anisotropic magnetoresistance and thermal stability in Ta / NiFe / Ta trilayers with interfacial Pt addition," *Appl. Phys. Lett.* **96**, pp. 9–11, 2010.
- [5] J. X. Li, M. W. Jia, Z. Ding, J. H. Liang, Y. M. Luo, and Y. Z. Wu, "Pt-enhanced anisotropic magnetoresistance in Pt / Fe bilayers," *Phys. Rev. B* **90**, vol. 214415, pp. 1–5, 2014.
- [6] S. Stavroyiannis, "Planar Hall effect and magnetoresistance in Ni₈₁Fe₁₉ and Co square shaped thin films," *Solid State Commun.*, vol. **125**, no. 6, pp. 333–336, 2003.
- [7] Y. K. Kim, "Magnetoresistance of Thin-Film NiFe Devices Exhibiting Single-Domain Behavior - Magnetics, IEEE Transactions on," *IEEE Trans. Magn.*, vol. **31**, no. 6, pp. 3358–3360, 1995.
- [8] A. O. Adeyeye and R. L. White, "Magnetoresistance behavior of single castellated Ni₈₀Fe₂₀nanowires," *J. Appl. Phys.*, vol. **95**, no. 4, pp. 2025–2028, 2004.
- [9] S. C. Lima and M. N. Baibich, "Influence of sample width on the magnetoresistance and planar Hall effect of Co/Cu multilayers," *J. Appl. Phys.*, vol. **119**, no. 3, 2016.

های مغناطیسی بدلیل وجود جفت شدگی بین لایه ای قویتر می باشد [۹].



شکل ۲: تغییرات مغناطومقاومت حاصل در زوایای مختلف برای سه نمونه

نتایج حاصل از اندازه گیری مغناطومقاومت در زوایای مختلف در شکل ۲ ترسیم شده است. بالاترین درصد مغناطومقاومت ۰/۳۷ درصد برای نمونه S_۳ در زاویه نود درجه، ۰/۲۱ و ۰/۱۵ به ترتیب برای S_۱ و S_۲ در زاویه صفر درجه حاصل گشت. طبق نمودار زیر روند تغییرات مغناطومقاومت بر حسب زاویه برای نمونه S_۳ نسبت به S_۱ و S_۲ متفاوت است.

نسبت مغناطومقاومت ناهمسانگرد نیز طبق رابطه تجربی $\Delta p/p$ برای نمونه S_۱، S_۲ و S_۳ به ترتیب ۰/۰۸، ۰/۴۲ و ۰/۶۳ درصد محاسبه گردید. نتایج نشان داد که این نسبت با افزایش ضخامت پرمالوی افزایش می یابد. همچنین وابستگی زاویه ای تغییرات مقاومت (شکل ۳) مورد بررسی قرار گرفت.

طبق این شکل وابستگی زاویه ای ΔR برای نمونه S_۲ بیشتر از S_۳ می باشد. در S_۱ با توجه به ضخامت بسیار کم، تغییرات مقاومت ناچیز بوده و قابل صرف نظر کردن است. در نمونه S_۲ جفت شدگی بین لایه های پرمالوی و پلاتین بیشتر بوده و ممانها در لایه تحت اعمال میدان می توانند بطور همدوس با یکدیگر چرخیده و همراه با هم قرار گیرند. در نمونه S_۳ نیز این جفت شدگی ضعیفتر بوده و با توجه به ضخامت بیشتر پرمالوی ممانهای مرکزی مستقل عمل کرده و صرفاً جفت شدگی در ممانهای نزدیک در فصل مشترک پلاتین وجود دارد. بعبارتی نتایج حاصله نشان می دهد در لایه نازکتر جفت شدگی بین پرمالوی و پلاتین در فصل مشترک بیشتر است.

سنتز و مشخصه‌یابی نانوکامپوزیت مغناطیسی $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$

ایران‌نژاد، فاطمه؛ حکمت‌آرا، هدی؛ سیدیزدی، جمیله

گروه فیزیک دانشگاه ولی‌عصر (عج)

چکیده

در این پژوهش ساختار هسته-پوسته $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ با استفاده از روش سلووترمال سنتز گردیده و ویژگی فوتوکاتالیستی این کامپوزیت مورد بررسی قرار گرفت. نمونه‌ی آماده شده جهت بررسی تشکیل پیوندها و ویژگی‌های ریخت‌شناسی و ساختاری توسط پراش‌سنجی پرتو X (XRD)، طیف‌سنجی تبدیل فوریه فروسرخ (FTIR)، مغناطیس‌سنج نمونه ارتعاشی (VSM)، میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM)، طیف‌سنجی پراش انرژی پرتو ایکس (EDX) و طیف‌سنج مرئی-فرابنفش (UV-vis) مشخصه‌یابی شد. آنالیز VSM اشباع مغناطیسی کامپوزیت $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ را 50.22 emu/g و میدان وادارندگی آن را 12.22 Oe نشان می‌دهد. بررسی عملکرد فوتوکاتالیستی نمونه، تخریب ۶۳٪ رنگ متیلن‌آبی را در مدت زمان ۱۰۰ دقیقه در حضور کاتالیزور مغناطیسی گزارش می‌کند.

Synthesis and Characterization of $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ Magnetic Nanocomposites

Irannezhad, Fatemeh; Hekmatara Hoda; Seyedyazdi, Jamileh

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

Abstract

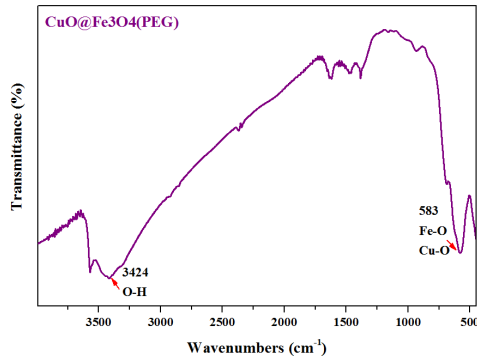
In the present study, core-shell structure of $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ has been synthesized by solvothermal method and its photocatalytic activity have been investigated. Prepared sample have been characterized by X-ray diffraction pattern (XRD), Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR), vibrating sample magnetometer (VSM), transmission electron microscope (TEM), Energy dispersive X ray (EDS) and UV-vis to prove purity of the sample. The measured saturation magnetization of the sample is about 50.22 emu/g with 12.22 Oe coercivity. The photocatalytic activity of magnetic nanocomposite as a photocatalyst shows 63% degradation of methylene blue during 100 min time interval.

PACS No. (75.20)

مقدمه

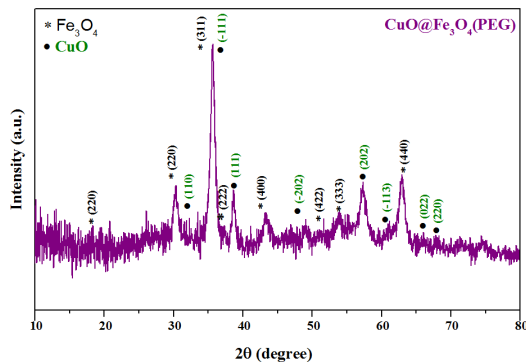
سازگاری بالا با محیط زیست در زمینه‌های بیومغناطیس به طور گسترده‌ای مورد استفاده قرار گرفته‌اند [۳]. در سال‌های اخیر اکسیدمس (CuO) نیم‌رسانای نوع p با گاف نواری 1.2 eV توجه بسیاری از پژوهشگران را به خود جلب کرده است. CuO را می‌توان به طور بالقوه در حسگرهای گازی، سلول‌های خورشیدی، مواد کاتدی الکترونیکی و کاتالیزورها استفاده کرد [۴]. متیلن بلو رایج‌ترین ترکیب رنگی مورد استفاده به منظور رنگ آمیزی پنبه،

اکسیدهای فلزی نقش بسیار مهمی در بسیاری از زمینه‌های شیمی، فیزیک و علم مواد بازی می‌کنند. عنصرهای فلزی می‌توانند تنوع زیادی از ترکیبات اکسید را تشکیل دهند. آن‌ها می‌توانند سه ساختار متفاوت، رسانا، نیم‌رسانا و عایق داشته باشند [۱ و ۲]. نانوذرات مغناطیسی اکسید آهن (Fe_3O_4) به علت ویژگی‌های مغناطیسی، ایجاد مقدار کمی مسمومیت، توانایی جذب بالا و



شکل ۱: آنالیز FTIR نانوکامپوزیت $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ ، که پیوندهای فلزی Fe-O و Cu-O در موقعیت 583 cm^{-1} و پیوندهای O-H در 3424 cm^{-1} مشاهده می‌شوند.

شکل ۲ آنالیز XRD نانوکامپوزیت $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ را نشان می‌دهد که در آن قله‌های موجود در 37.1° ، 35.6° ، 30.3° ، 43.4° ، 51.1° ، 53.5° و 63° به ترتیب بیانگر صفحات بلوری (220) ، (311) ، (222) ، (400) ، (420) ، (440) و (110) می‌باشند. همچنین پیک‌های موجود در 32° ، 35.6° ، 38.7° ، 46.1° ، 57.2° ، 61° ، 65.5° و 68.2° به ترتیب نشانگر صفحات بلوری (110) ، (-111) ، (111) ، (-202) ، (202) ، (-113) ، (022) ، (220) اکسید مس (CuO) می‌باشند.



شکل ۲: آنالیز XRD نانوکامپوزیت $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ ، حضور اکسید آهن و اکسید مس را در ساختار تأیید می‌کند.

شکل ۳ اشباع مغناطیسی نانوکامپوزیت $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ را در 50.22 emu/g نشان می‌دهد. شکل (۴) مقدار وادارندگی مغناطیسی نمونه، (H_c) ، را در حدود $12/22 \text{ Oe}$ نشان می‌دهد. به دلیل حضور نانوذرات مغناطیسی اکسید آهن (Fe_3O_4) با خاصیت

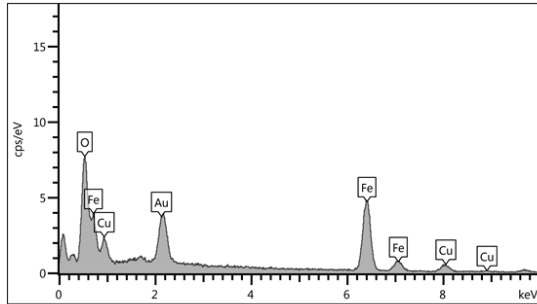
پشم و ابریشم است. استنشاق این ترکیب می‌تواند سبب اختلال در تنفس شده همچنین تماس مستقیم با آن می‌تواند باعث بروز آسیب‌های دائمی به چشم‌های انسان و حیوانات، سوختگی‌های موضعی، تهوع و استفراغ، افزایش تعریق و اختلالات ذهنی شود [۶ و ۵]. هدف از انجام این پژوهش سنتز نانوکامپوزیت مغناطیسی دوتایی هسته-پوسته $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ و بررسی ویژگی فوتوکاتالیستی آن با توجه به تأثیر آن بر تخریب رنگ متیلن‌آبی می‌باشد.

روش آزمایش

در این آزمایش، نانوکامپوزیت مغناطیسی $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ با استفاده از روش سلووترمال سنتز شده است. روش کار به این شرح بود که ابتدا اکسید آهن توسط پلی‌اتیلن‌گلیکول (PEG) عامل‌دار شد و پس از آن 1.5 gr نیترات مس سه‌آبه ($\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$) در مقدار کمی آب پراکنده و پس از آن مقدار 2.3 gr از $\text{Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ به سوسپانسیون بدست آمده اضافه و توسط یک همزن مکانیکی بیش از ۱۲ ساعت تحت همزن قرار گرفت. سپس با اضافه کردن مقداری 1 NaOH مولار، pH محلول به ۱۳ رسانده و پس از مدت کوتاهی به دلیل خاصیت مغناطیسی، کامپوزیت هسته-پوسته‌ای تشکیل شده توسط آهن‌زبا جمع‌آوری و با آب شستشو داده شد [۷]. جهت بررسی ویژگی فوتوکاتالیستی، 0.01 gr از متیلن‌آبی در 30 ml آب حل شد و مقدار 0.1 gr از نمونه‌ی سنتز شده در 30 ml آب نیز پراکنده شد، سپس با یکدیگر مخلوط گشته و در فاصله‌ی 15 cm از لامپ فرابنفش تحت همزن قرار داده شد.

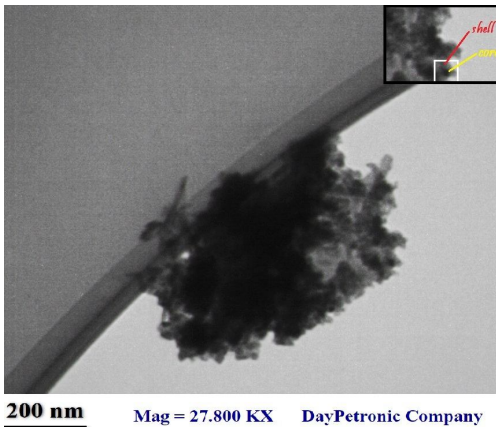
نتایج و بحث

شکل ۱ آنالیز FTIR نانوکامپوزیت $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ می‌باشد که پیوند O-H و پیوندهای فلزی (Fe-O و Cu-O) به ترتیب در محدوده‌ی 3424 cm^{-1} و 583 cm^{-1} مشاهده می‌شوند.



شکل ۵: آنالیز EDS نانوکامپوزیت $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$. حضور عناصر آهن، مس و اکسیژن را در ساختار را تأیید می‌کند.

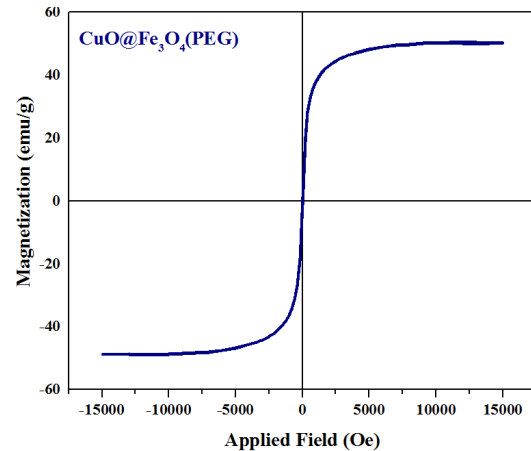
شکل ۶ تصویر TEM نانوکامپوزیت $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ نمایانگر هسته-پوسته بودن ساختار نمونه است. در این تصویر تجمع نانوذرات به دلیل ویژگی مغناطیسی نسبتاً بالای نانوکامپوزیت تشکیل شده است.



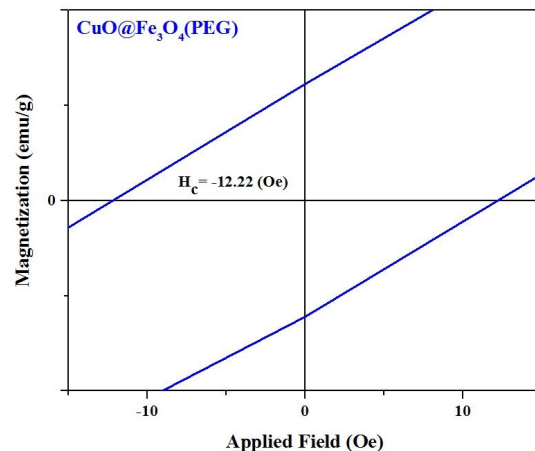
شکل ۶: تصویر TEM نانوکامپوزیت $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$. در تصویر کوچک بالای سمت راست ساختار هسته-پوسته اکسید آهن-اکسید مس دیده می‌شود.

در این آزمایش جهت بررسی عملکرد فوتوکاتالیستی نمونه $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ در مدت زمان ۱۰۰ دقیقه، درصد تخریب رنگ متیلن آبی تحت لامپ فرابنفش مورد بررسی قرار گرفت (شکل ۶) که ۶۳٪ تخریب گزارش می‌شود. مشخصه جذب و آهنگ تخریب از رابطه‌های ۱ و ۲ محاسبه می‌شود. در شکل ۷ می‌توان نمودار تغییرات C/C_0 و $\ln(C_0/C)$ و همچنین شکل ۸ نمودار مشخصه جذب بر حسب زمان را نشان می‌دهد.

ابریارامغناطیسی در موقعیت پوسته، رسیدن به اشباع مغناطیسی و کوچک بودن پسماند در نمودار بدیهی می‌باشد. ویژگی ابریارامغناطیسی نمونه از آنالیز VSM مشاهده می‌شود.



شکل ۳: آنالیز VSM نانوکامپوزیت $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$. اشباع مغناطیسی نمونه ۵۰٫۲۲ emu/g و ویژگی ابریارامغناطیسی اکسید آهن موجود در ساختار دیده می‌شود.



شکل ۴: آنالیز VSM نانوکامپوزیت $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ در محدوده میدان‌های کوچک جهت تعیین وادارندگی مغناطیسی.

شکل ۵ آنالیز EDS کامپوزیت $\text{CuO@Fe}_3\text{O}_4(\text{PEG})$ می‌باشد. در این تصویر پیک‌های مربوط به حضور آهن و مس دیده می‌شود که نشان دهنده سنتز موفقیت‌آمیز نمونه‌ی مورد نظر می‌باشد.

نتیجه گیری

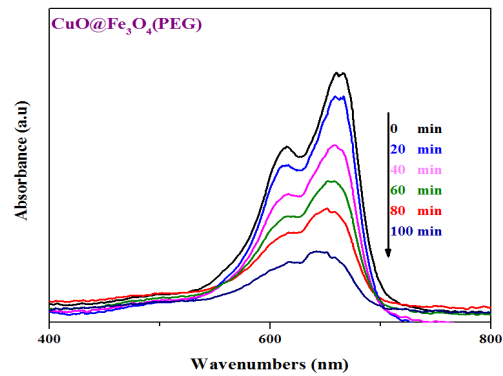
در این پژوهش، نانوکامپوزیت مغناطیسی هسته-پوسته‌ی $\text{CuO}@Fe_3O_4(\text{PEG})$ به روش سلووترمال سنتز شد. تصویر میکروسکوپ الکترونی عبوری ساختار هسته-پوسته این کامپوزیت و همچنین آنالیز پراش پرتو ایکس حضور اکسید آهن (Fe_3O_4) و اکسید مس (CuO) را در ساختار تأیید می‌کنند. آنالیز VSM ابرپارامغناطیس بودن نمونه (با میدان وادارندگی 12.22 Oe) و اشباع مغناطیسی کامپوزیت $\text{CuO}@Fe_3O_4(\text{PEG})$ را در emu/g 50.22 نشان می‌دهد. همچنین آنالیز EDS نانوکامپوزیت $\text{CuO}@Fe_3O_4(\text{PEG})$ حضور عناصر آهن، مس و اکسیژن و عدم حضور هیچگونه ناخالصی در ماده را تأیید می‌کند. بررسی عملکرد فوتوکاتالیستی نمونه، تخریب 63% رنگ متیلن‌آبی را در مدت زمان 100 دقیقه در حضور کاتالیزور مغناطیسی گزارش می‌کند. نانوکامپوزیت سنتز شده خاصیت ابرپارامغناطیس دارد.

مرجع ها

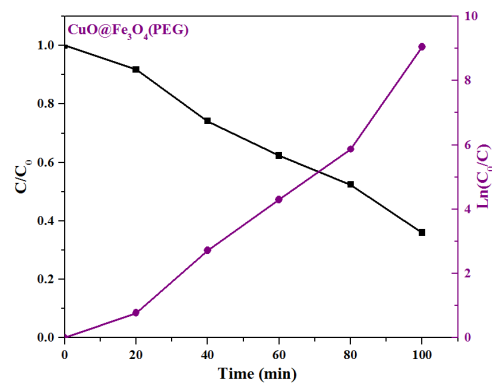
- [1] N. A. Spaldin, "Magnetic Materials: Fundamentals and Applications"; Cambridge University Press (2010)
- [2] B. D. Cullity, C. D. Graham, "Introduction to Magnetic Materials"; John Wiley & Sons (2011).
- [3] L. Yu, H. Wu, B. Wu, Z. Wang, H. Cao, C. Fu and N. Jia, "Magnetic Fe_3O_4 -Reduced Graphene Oxide Nanocomposites-Based Electrochemical Biosensing", *Nano-Micro Letters* **6**(3) (2014) 258-267.
- [4] V. Scuderi, G. Amiard, S. Boninelli, S. Scalese, M. Miritello, P. M. Sberna and V. Privitera, "Photocatalytic activity of CuO and Cu_2O nanowires", *Materials Science in Semiconductor Processing* **42** (2016) 89-93.
- [5] V. Ponnusami, R. Madhuram, V. Krithika, S. N. Srivastava, "Effects of Process Variables on Kinetics of Methylene Blue Sorption onto Untreated Guava (*Psidium guajava*) Leaf Powder: Statistical Analysis", *Chemical Engineering Journal* **140** 2008 609.
- [6] M. Rafatullah, O. Sulaiman, R. Hashim, A. Ahmad, "Adsorption of Methylene Blue on Low-cost Adsorbents A Review", *Journal of Hazardous Materials* **177** 2010 70-78.
- [7] C. Sun, et al. "Magnetic $CuO@Fe_3O_4$ nanocomposite as a highly active heterogeneous catalyst of persulfate for 2, 4-dichlorophenol degradation in aqueous solution", *RSC Advances* **5**(70) (2015) 57058-57066.

$$\frac{C_0 - C}{C_0} \times 100 \quad (1)$$

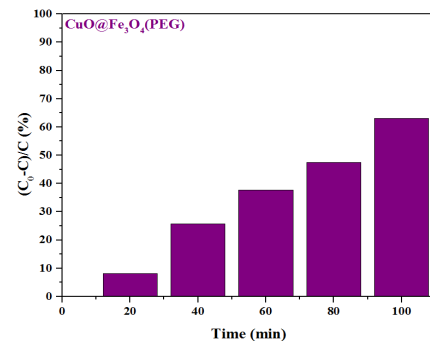
$$\ln \frac{C_0}{C} = kt \quad (2)$$



شکل ۷: نمودار طیف جذبی از تخریب متیلن‌آبی در حضور نانوکامپوزیت مغناطیسی $\text{CuO}@Fe_3O_4(\text{PEG})$.



شکل ۸: نمودار تغییرات C/C_0 و $\ln(C_0/C)$ متیلن‌آبی بر حسب زمان در حضور فوتوکاتالیست $\text{CuO}@Fe_3O_4(\text{PEG})$.



شکل ۹: نمودار مشخصه‌ی جذب و تخریب متیلن‌آبی بر حسب زمان در حضور فوتوکاتالیست $\text{CuO}@Fe_3O_4(\text{PEG})$.

بررسی خواص مغناطیسی انبوهه اکسید روی آلاینده شده با مس

ایرندگانی، عصمت؛ عباس نژاد، محدثه

دانشگاه فیزیک دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان

چکیده

در کار حاضر، محاسبات تئوری بر پایه نظریه تابعی چگالی و تقریب شیب تعمیم یافته به همراه پارامتر هابارد به منظور مطالعه خواص مغناطیسی اکسید روی آلاینده شده با مس انجام شده است. نتایج مغناطیسی نشان دهنده آن است که آرایش ساختار با مس، باعث ایجاد خاصیت مغناطیسی در ماده می شود و در آن اسپین بالا رفتار نیم رسانا و اسپین پایین رفتار فلزی نشان می دهند. ایجاد تپه جایی اکسیژن در اطراف مس خاصیت مغناطیسی را کاهش داد. همچنین آرایش، ثابت شبکه را به میزان اندکی افزایش داد و باعث کاهش قابل ملاحظه در گاف نواری شد.

Investigation of magnetic properties of Cu doped ZnO

Irandegani, Esmat; Abbasnejad, Mohaddeseh

Faculty of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman,

Abstract

In the present work, the theoretical calculations based on density functional theory (DFT) and generalized gradient approximation (GGA) within Hubbard parameter have been carried out to study the magnetic properties of Cu doped ZnO bulk. Based on the results, doping Cu leads to magnetic properties in structure such that spin up states show semiconductor behavior and spin down shows metal behavior. Oxygen vacancy induced the magnetic property, too. Moreover, doping Cu leads to the increase of lattice constants slightly and decrease of band gap significantly.

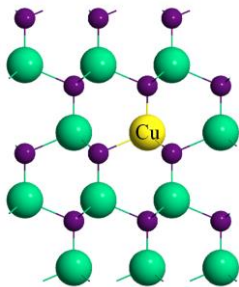
PACS No ۷۰

مقدمه

کویت های اسپینی برای کامپیوترهای کوانتومی شده است. نیاز اصلی بیشتر دستگاه های مبتنی بر اسپین، دستیابی به فرومغناطیس بالای دمای اتاق در ماده میزبان است [۲]. اولین بار امکان وجود فرومغناطیس دمای اتاق در نیم رساناهای رقیق شده توسط دیتل و همکاران بررسی شد. با استفاده از مدل فرومغناطیس زئر، بسیاری از مواد خاصیت فرومغناطیس را در دمای اتاق نشان می دهند. در بین این مواد اکسید روی به دلیل اینکه توسط آرایش با اکثر فلزات واسطه خاصیت فرومغناطیس را نشان می دهد، بسیار مورد توجه است. هنوز هم منشاء ذاتی و یا غیر ذاتی بودن وجود فرومغناطیس در این مواد بحث برانگیز است اما اغلب به طور نظری می توان دریافت که ممکن است این فرومغناطیس از توزیع غیر یکنواخت ناخالصی ها نشأت گرفته باشد [۳]. آزمایش های تجربی و محاسبات تئوری متعددی

امکان استفاده هم زمان از درجات آزادی بار و اسپین، شاخه جدیدی از الکترونیک به نام "اسپینترونیک" را به وجود آورده است. وجود حامل های قطبی که اطلاعات را از طریق اسپین حمل می کنند، نیاز به نیم رسانای مغناطیسی را در کاربردهای اسپینترونیک بسیار بالا برده است. دستیابی به فرومغناطیس قوی در مواد نیم رسانا بسیار دشوار است. این درحالی است که رشد نیم رساناهای رقیق شده (DMS) نسبتاً راحت تر می باشد. در نیم رسانای مغناطیسی رقیق شده، تعداد کمی از کاتیون های ماده توسط فلزات واسطه جایگزین می شود و می تواند فرومغناطیس را در نیم رسانا به وجود آورد [۱]. کنترل وابستگی اسپینی در نیم رساناها باعث ایجاد دستگاه هایی از قبیل دیودهای نور افشان اسپینی، ترانزیستورهای اثر میدان اسپینی و

در نیم‌رساناهای مغناطیسی یکی از عواملی که خواص ماده را به شدت تغییر می‌دهد، جایگزینی اتم‌های ناخالصی در محل‌های مناسب است. در آلیاژ ساختار اکسید روی با مس که منجر به نیم‌رسانای نوع p می‌شود، جایگذاری اتم مس با روی، پایدارتر از سایر پیکربندی‌ها گزارش شده و در توافق با مشاهدات تجربی می‌باشد [۱۰]. در ادامه محاسبات، اتم مس جایگزین اتم روی شده است.



شکل ۱: انبوهه اکسید روی آلیاژ شده با مس. گوی‌های بزرگ و کوچک به ترتیب معرف اتم‌های روی و اکسیژن هستند.

به منظور بررسی قابلیت آلیاژ اکسید روی با مس، انرژی تشکیل سیستم طبق فرمول

$$E_{form} = E(\text{ZnO:Cu}) - E(\text{ZnO}) + \mu(\text{Zn}) - \mu(\text{Cu})$$

محاسبه شد که در آن $E(\text{ZnO:Cu})$ انرژی کل ساختار آلیاژ شده، $E(\text{ZnO})$ انرژی کل ساختار خالص و $\mu(\text{Cu})$ و $\mu(\text{Zn})$ به ترتیب پتانسیل‌های شیمیایی مس و روی هستند. مقدار انرژی تشکیل 4.7 eV به دست آمد. مطابق گزارش انجام شده [۱]، استفاده از پارامتر هابارد بیش از 3 eV برای مس باعث کاهش قابل ملاحظه در پایداری ساختار آلیاژ شده با مس شده است. به دلیل اینکه Cu دهنده بار کمتری نسبت به Zn است، جایگذاری آن با Zn باعث کاهش قدرت پیوندهای اطراف مس می‌شود و به دنبال آن پارامتر شبکه به میزان اندکی افزایش می‌یابد.

مطابق شکل (۲)، محاسبات ساختار الکترونی نشان می‌دهند که ساختار نواری اکسید روی آلیاژ شده با مس، رفتار نیم‌فلزی نشان می‌دهد و میزان گاف نیم‌فلزی 2.5 eV به دست آمد که در مقایسه با حالت خالص با گاف نواری 3.44 eV ، کاهش قابل ملاحظه‌ای داشته است. اسپین بالا رفتار نیم‌رسانا و اسپین پایین رفتار فلزی دارد. به

وجود فرومغناطیس را در نیم‌رساناهای آلیاژ شده با مس نشان داده‌اند [۴، ۵]. در میان این آلیاژها، اکسید روی علاوه بر اینکه یکی از مواد امیدوار کننده برای فرومغناطیس دمای اتاق است، خواص متنوعی در زمینه‌های نیم‌رسانایی، پیزوالکتریک و اپتیک دارد [۶]. در کار حاضر خواص مغناطیسی انبوهه اکسید روی آلیاژ شده با مس بررسی شده است.

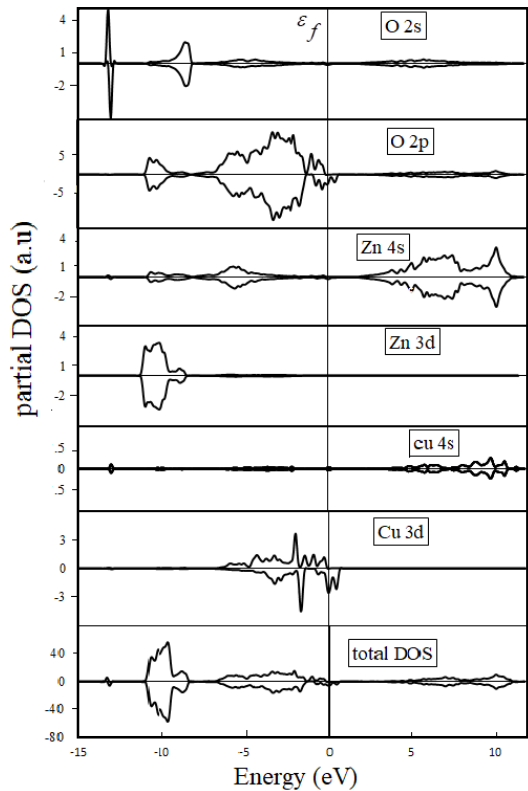
روش محاسباتی

محاسبات ابتدا به ساکن در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو (Quantum ESPRESSO) که بر پایه امواج تخت و شبه‌پتانسیل است، صورت گرفت. در محاسبات، شبه‌پتانسیل فوق نرم برای توصیف برهم‌کنش الکترون‌ها با یون انتخاب گردید. برای توصیف انرژی تبادل همبستگی از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) با تابعی پر دو-برک-ارنزهوف (PBE) استفاده شد. به منظور تصحیح جفت‌شدگی غیر فیزیکی برای اوربیتال‌های $3d$ اتم Zn و $2sp$ اتم O، از پارامتر هابارد 12 eV برای اوربیتال $3d$ اتم Zn و 6.5 eV برای اوربیتال $2p$ اتم O استفاده شد [۷]. همچنین با توجه به وجود ترازهای d جایگزیده در اتم Cu به عنوان ناخالصی، مقدار 5.2 eV برای آن انتخاب شد [۸]. مقادیر بهینه انرژی قطع تابع موج و چگالی بار به ترتیب 30 Ry و 300 Ry و همچنین شبکه‌بندی نقاط k $8 \times 8 \times 8$ محاسبه شدند. در این محاسبات از ابریاخته $2 \times 2 \times 2$ شامل 32 اتم (16 اتم روی و 16 اتم اکسیژن) استفاده شد. آلیاژ به ازای $x = 0.0625$ $(\text{Zn}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O})$ یعنی معادل یک اتم Cu در ابریاخته بررسی شد (شکل ۱).

نتیجه و بحث

خواص ساختاری و الکترونی

انبوهه اکسید روی در شرایط محیطی در ساختار ورتسایت با گروه فضایی $p63mc$ متبلور می‌شود. پارامترهای شبکه یاخته واحد بهینه شده به ازای a و c به ترتیب 3.241 و 5.188 آنگستروم محاسبه شد. همچنین مدول کپه‌ای و مشتق آن از برازش به معادله حالت مورناگان، به ترتیب 149.8 GPa و 4.48 به دست آمدند که در توافق با نتایج تجربی (142.4 GPa و 3.6) هستند [۹].

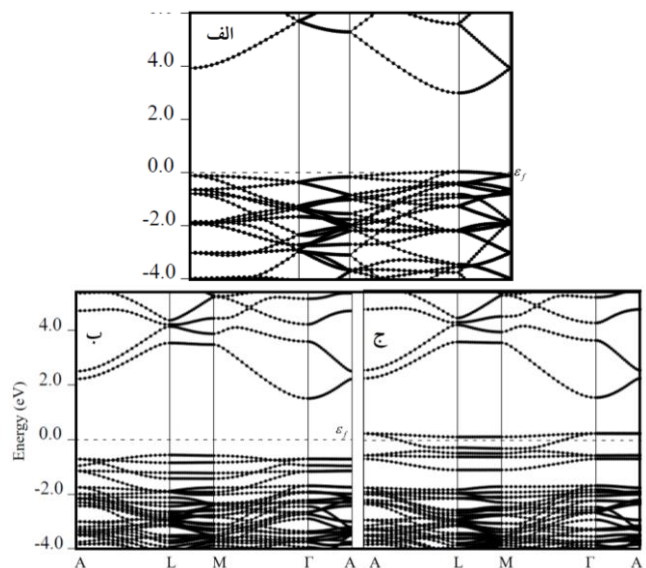


شکل ۳: چگالی حالات کلی و جزئی اکسید روی آلاینده شده با مس برای اسپین بالا و پایین.

خواص مغناطیسی

همان‌گونه که بیان شد، ساختار نواری حالت فرم مغناطیس، رفتار نیم‌فلزی با گاف نواری $2/5$ الکترون-ولت را نشان می‌دهد. اسپین بالا رفتار کاملاً نیم‌رسانا و اسپین پایین رفتار فلزی دارد. بنابراین حامل‌ها 100% قطبیده هستند. با افزودن Cu، گشتاور مغناطیسی معادل $1 \mu_B$ به دلیل نیم‌فلز شدن ساختار یافت شد. اتم Cu با گشتاور مغناطیسی $0.47 \mu_B$ قطبیده شده است. همچنین از چهار اتم اکسیژن اطراف اتم Cu که در چهار جهی CuO_4 قرار دارند، سه اتمی که در صفحه اتم مس قرار دارند با گشتاور مغناطیسی $0.1436 \mu_B$ و اتم اکسیژنی که در بالای اتم مس قرار دارد با گشتاور $0.1169 \mu_B$ قطبیده شده‌اند. کوچک‌تر بودن گشتاور مغناطیسی در اتم اکسیژن بالای مس ناشی از توزیع چهار جهی است و دلیل آن، بلندتر بودن پیوند Cu-O در اتم اکسیژن بالایی است. سایر اتم‌های اکسیژن دور از اتم مس و همچنین اتم‌های Zn با گشتاوری کمتر از $0.03 \mu_B$ قطبیده شدند.

دلیل این رفتار متفاوت، در حضور میدان مغناطیسی یک جریان اسپینی به وجود خواهد آمد و ساختار کاملاً قطبی خواهد بود. نوار تخت مشاهده شده در نزدیکی تراز فرمی در ساختار نواری اسپین پایین مربوط به اوربیتال $3d$ مس و اوربیتال‌های $2p$ چهار اکسیژن اطراف مس هستند که منشاء مغناطش در ساختار می‌باشند. حالات نزدیک سطح فرمی اغلب اوربیتال‌های $3d$ اتم مس هستند که با اوربیتال $2p$ اتم اکسیژن به شدت برهم‌کنش دارند. همچنین انتقال ساختار نواری مربوط به اسپین پایین به سمت انرژی‌های پایین‌تر، بیانگر این است که ساختار آلاینده شده نیم‌رسانای نوع p است.



شکل ۴: ساختار نواری اکسید روی برای حالت الف-خالص و آلاینده شده با مس در حالت ب-اسپین بالا و ج-اسپین پایین.

همانطور که اشاره شد و مطابق شکل (۳)، اوربیتال‌های $3d$ اتم مس و $2p$ اکسیژن باعث ایجاد خاصیت نیم‌فلزی در ساختار آلاینده شده می‌شوند. برهم‌کنش بین اوربیتال‌های $2p$ اتم‌های اکسیژن اطراف مس و اوربیتال $3d$ اتم مس باعث کاهش گاف نواری و همچنین ایجاد خاصیت مغناطیسی در ساختار می‌شود. علاوه بر این، همانطور که در شکل (۳) نشان داده شده است، پیوند Cu-O به طور عمده از نوع کووالانسی است. به همین دلیل، خاصیت یونی ساختار آلاینده شده در مقایسه با ساختار خالص کمتر است و باعث پایداری بیشتر ساختار آلاینده شده نسبت به نمونه خالص می‌شود.

- [۳] Verma, A., S.J.J.o.M. Tripathi, and M. Materials, *Magnetic Annealing temperature Modulated Room Temperature Ferromagnetism in Zn Doped ZnO Thin Film*. 2019.
- [۴] Ando, K., et al., *Magneto-optical properties of ZnO-based diluted magnetic semiconductors*. 2001. **89**(11): p. 7284-7286.
- [۵] Park, M.S. and B.J.P.R.B. Min, *Ferromagnetism in ZnO codoped with transition metals: Zn 1-x (FeCo) x O and Zn 1-x (FeCu) x O*. 2003. **68**(22): p. 224436.
- [۶] Huang, D., et al., *Magnetism and clustering in Cu doped ZnO*. 2008. **92**(18): p. 182509.
- [۷] Calzolari, A., A. Ruini, and A.J.J.o.t.A.C.S. Catellani, *Anchor group versus conjugation: toward the gap-state engineering of functionalized ZnO (1010) surface for optoelectronic applications*. 2011. **133**(15): p. 5893-5899.
- [۸] Scanlon, D.O., et al., *Effect of Cr substitution on the electronic structure of CuAl 1-x Cr x O 2*. 2009. **79**(3): p. 035101.
- [۹] Desgreniers, S.J.P.R.B., S. Desgreniers, *Phys. Rev. B 58, 14102 (1998)*. 1998. **58**: p. 14102.
- [۱۰] Wahl, U., et al., *Lattice location and stability of implanted Cu in ZnO*. 2004. **69** (1): p. 012102.

با وجود اینکه بیشتر گشتاور مغناطیسی در داخل چهارگوشه CuO_4 محدود شده است، جفت شدگی بین اتم Cu با چهار اتم O اطراف آن، ممکن است برهم کنش فرومغناطیس را به اتم‌های دورتر گسترش دهد و بنابراین فرومغناطیس را در ساختار افزایش دهد. ایجاد تهی جایی اکسیژن در چهارگوشه CuO_4 باعث شکسته شدن یکی از پیوندهای Cu-O که تأثیر بسزایی در خاصیت مغناطیسی دارند، می‌شود و در نتیجه فرومغناطیس به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد. ایجاد تهی جایی اکسیژن به عنوان یک نقص نوع n ، الکترون‌های ناخالصی که می‌توانند حامل‌های نوع p را خنثی کنند، فراهم می‌کند و سبب از بین رفتن رسانندگی ناشی از آرایش Cu می‌شود.

نتیجه‌گیری

در کار حاضر خاصیت مغناطیسی ساختار اکسید روی آلیاژ شده با مس با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن بررسی شد. محاسبات نشان دادند که افزودن مس به ساختار باعث القای خاصیت مغناطیسی می‌شود. بیشترین گشتاور مغناطیسی در Cu و سپس در چهار اتم اکسیژن اطراف آن، مشاهده شد. پیوند بین اتم‌های اکسیژن و مس غالباً از نوع کوالانی می‌باشند و در نتیجه سیستم آلیاژ شده پایدارتر از نمونه خالص می‌باشد. برهم کنش بین اوربیتال $3d$ اتم مس و اوربیتال‌های $2p$ اکسیژن باعث ایجاد خاصیت مغناطیسی و همچنین کاهش گاف نواری می‌شوند. به دلیل رفتار متفاوت اسپین بالا و پایین، هنگامی که این ساختار در میدان مغناطیسی قرار می‌گیرد، حامل‌ها کاملاً قطبیده می‌شوند و در نتیجه می‌تواند گزینه مناسبی در کاربردهای تزریق اسپین باشد.

سپاسگزاری

بخشی از هزینه‌های این پژوهش توسط معاونت پژوهشی دانشگاه شهید باهنر کرمان تأمین شده است.

مرجع‌ها

- [۱] Huang, L., A. Rosa, and R.J.P.R.B. Ahuja, *Ferromagnetism in Cu-doped ZnO from first-principles theory*. 2006. **74**(7): p. 075206.
- [۲] Pearton, S., et al., *ZnO spintronics and nanowire devices*. 2006. **35**(5): p. 862-868.

مطالعه خواص مغناطیسی و الکترونی ترکیب $PbFeO_3$ در حالت انبوهه و سطوح (۱۰۰)، (۱۱۰) و (۱۱۱) با استفاده از محاسبات اصول اولیه

پاکیزه، اسماعیل^{۱*}

^۱دانشکده نفت و گاز گچساران، دانشگاه یاسوج، گچساران ۷۵۸۱۳-۵۶۰۰۱، ایران

*e.pakizheh@yu.ac.ir; esmaeil_pakizheh@yahoo.com

چکیده

ماده ی مولتی فریبیک $PbFeO_3$ دارای دو خاصیت فروالکتريکی و مغناطیسی است و در زمینه های ذخیره اطلاعات، سنسورها و حافظه های مگنتوالکتريک دارای کاربرد فراوان می باشد. در این مقاله با استفاده از نظریه ی تابعی چگالی و کد کوانتوم اسپرسو خواص مغناطیسی و الکترونی این ترکیب در فازهای تریگونال، تریکلینیک، مونوکلونیک و هگزاگونال مورد بررسی قرار گرفت. محاسبه ها با استفاده از روش امواج تخت با شبه پتانسیل فوق نرم انجام شده است. در این روش برای انرژی همبستگی - تبادل از تقریب شیب تعمیم یافته $GGA-PBE$ استفاده شده است. آنالیز ساختار نواری الکترونی نشان داد که این ترکیب در حالت انبوهه رسانا و در راستای سطح (۱۰۰) نیمه رسانا با گاف نواری $0.5 eV$ می باشد. بررسی خواص مغناطیسی نشان می دهد، که گشتاور مغناطیسی کل ماده در راستای سطوح (۱۰۰)، (۱۱۰) و (۱۱۱) نسبت به حالت انبوهه بیشتر می شود. همچنین در حالت انبوهه با افزایش ثابت شبکه گشتاور مغناطیسی کل افزایش می یابد.

کلیدواژه: خواص مغناطیسی، گشتاور مغناطیسی کل، خواص الکترونی، نظریه تابعی چگالی

Study of magnetic and electronic properties of $PbFeO_3$ compound in bulk phase and (100), (110) and (111) surfaces by using first principle study

Pakizheh, Esmaeil^{1,*}

¹Faculty of Petroleum and Gas, Yasouj University, Gachsaran 75813-56001, Iran

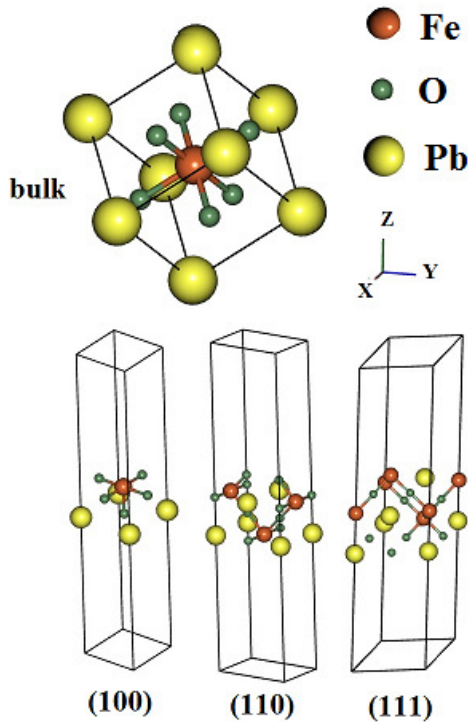
*Corresponding author: e.pakizheh@yu.ac.ir; esmaeil_pakizheh@yahoo.com

Abstract

The Multiferroic material of $PbFeO_3$ has two ferroelectric and magnetic properties, and in the field of information storage, sensors and magnetoelectric memory is widely used. In this paper, by using the density functional theory and quantum espresso code, the magnetic and electronic properties of this compound were investigated in trigonal, triclinic, monoclinic and hexagonal phases. The calculations have been performed using plane wave sets with ultrasoft pseudopotential. In this method, for the exchange- correlation energy the generalized gradient approximation $GGA-PBE$ is used. An analysis of the electronic band structure showed that this compound is conductive in bulk state and in (100) surface is semiconductor with a band gap of $0.5 eV$. The investigation of magnetic properties shows that the total magnetic moment of the material increases along the surfaces of (100), (110) and (111) relative to the bulk state. Also in the bulk mode, the total magnetic moment increase with increasing lattice constant.

Keywords: Magnetic properties, Total magnetic moment, Electronic properties, Density functional theory
PACS No. 70, 71, 73, 75.

مقدمه



شکل ۱: ساختار بلوری ترکیب $PbFeO_3$ در حالت انبوه و سطوح بلوری مختلف.

محاسبات در چارچوب نظریه ی تابعی چگالی و روش شبه پتانسیل امواج تخت و با استفاده از کد محاسباتی Quantum-ESPRESSO انجام گرفت [۸]. از تقریب شیب تعمیم یافته به عنوان پتانسیل تبادلی همبستگی و شبه پتانسیل های فوق نرم برای محاسبات اولیه استفاده شد. انرژی قطع برای بسط ویژه مقادیر توابع موج را ۲۵ ریدبرگ انتخاب نمودیم. انتگرال گیری در منطقه ی اول بریلوین با سلول بندی بردارهای شبکه وارون (k-points) برای حالت انبوه از مرتبه $8 \times 8 \times 8$ و برای سطوح (۱۰۰)، (۱۱۰) و (۱۱۱) به ترتیب از مرتبه $8 \times 8 \times 1$ ، $8 \times 4 \times 1$ و $6 \times 6 \times 1$ انجام گرفت. حد همگرایی انرژی برای محاسبات خودسازگار را از مرتبه 10^{-6} ریدبرگ قرار دادیم. برای انتگرال گیری بالای سطح فرمی از روش smearing با میزان پهن شدگی 0.01 ریدبرگ استفاده نمودیم. میزان مغناطش اولیه برای اتم های آهن مقدار 0.7 انتخاب گردید. برای یافتن ثابت شبکه بهینه (تعادلی) نمودار انرژی کل بر حسب ثابت شبکه را در حالت انبوه مطابق شکل ۲ ترسیم نموده و میزان ثابت تعادلی 3.91 \AA بدست آمد.

مواد مولتی فروبیک به خاطر وجود هم زمان نظم های مغناطیسی و فروالکتریکی دارای قابلیت صنعتی بسیار بالایی می باشند. در این مواد قطبش الکتریکی توسط میدان مغناطیسی القا می شود [۳-۱]. این مواد در رادارهای مغناطیسی، محرک ها، حسگرها و صنایع اسپین ترونیک کاربرد فراوانی دارند [۴،۵]. در میان مواد مولتی فروالکتریک، اکسید های فلزات واسطه با ساختار پروسکایت مانند $AlFeO_3$ ، $FeAlO_3$ ، $FeVO_3$ ، $BiFeO_3$ ، $PbFeO_3$ اغلب دارای خواص فروالکتریکی و مغناطیسی بسیار جالبی می باشند [۶]. ساختار پروسکایت به صورت ABO_3 می باشد که در آن A در گوشه ها، B در مرکز و O در مراکز وجوه مکعب قرار میگیرد. در این مقاله با استفاده از نظریه تابعی چگالی به بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی ترکیب $PbFeO_3$ در حالت انبوه و سطوح (۱۰۰)، (۱۱۰) و (۱۱۱) پرداختیم. در این ترکیب سرب در گوشه ها، آهن در مرکز و اکسیژن در مراکز وجوه مکعب قرار میگیرند. این ماده به دلیل وجود جفت شدگی الکترون یونی Pb-O دارای خاصیت فروالکتریکی، و به خاطر اتم های آهن دارای خاصیت مغناطیسی می باشد [۷].

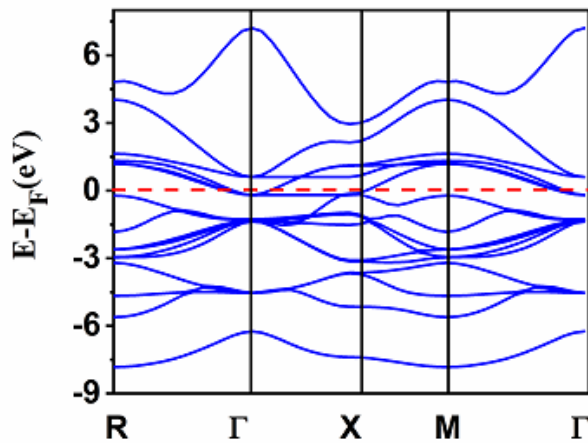
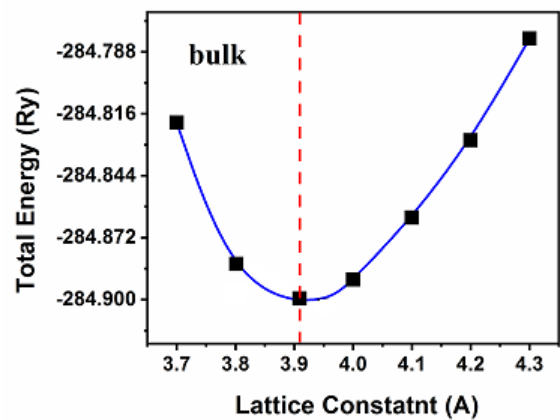
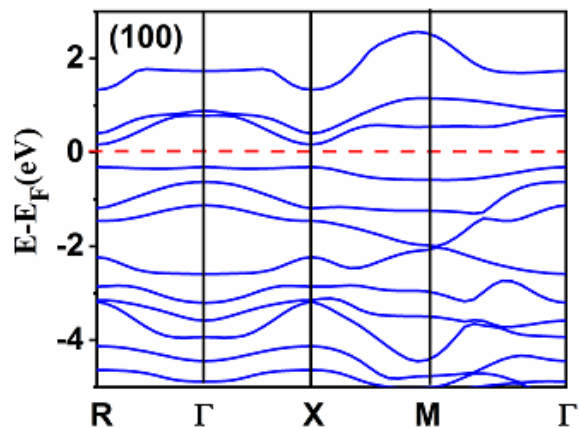
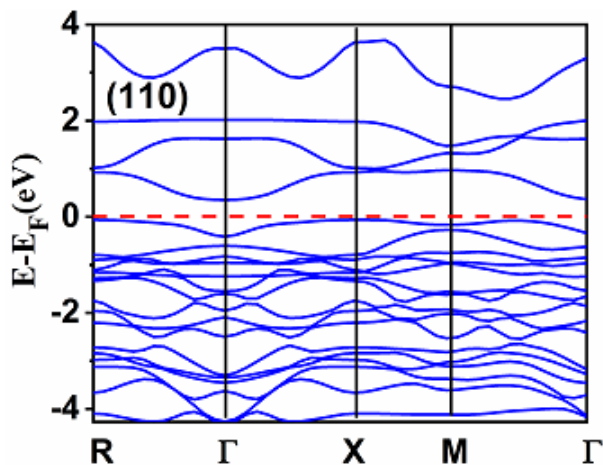
۱- ساختار بلوری و جزئیات محاسباتی

ترکیب $PbFeO_3$ در حالت انبوه دارای ساختار بلوری پروسکایت و گروه فضایی R-3m با شماره ۱۶۶ می باشد. شکل ۱ ساختار بلوری این ترکیب را در حالت انبوه و سطوح (۱۰۰)، (۱۱۰) و (۱۱۱) نشان میدهد. در حالت انبوه اتم های سرب، آهن و اکسیژن مطابق جدول ۱ در ساختار بلوری دارای فاز تریگونال قرار می گیرند.

جدول ۱: موقعیت های اتمی بلور $PbFeO_3$ در حالت انبوه

atom	X	Y	Z
Fe	0.5	0.5	0.5
O	0.0	0.5	0.5
O	0.5	0.0	0.5
O	0.5	0.5	0.0
Pb	0.0	0.0	0.0

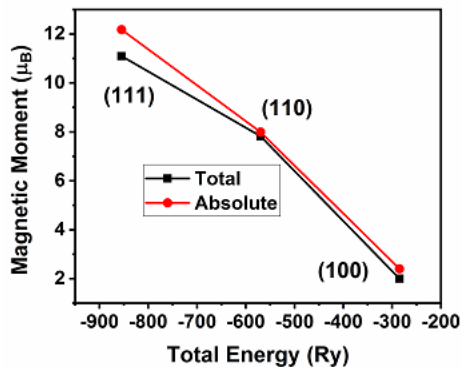
ترکیب $PbFeO_3$ در راستای سطوح (۱۰۰)، (۱۱۰) و (۱۱۱) مطابق شکل ۱ به ترتیب دارای ساختار، تریکلینیک، مونوکلینیک و هگزاگونال می باشد.

شکل ۳. نمودار ساختار نواری الکترونی PbFeO₃ در حالت انبوه.شکل ۴. ثابت شبکه تعادلی بلور PbFeO₃ در حالت انبوه.شکل ۵. نمودار ساختار نواری الکترونی PbFeO₃ در راستای سطح (۱۰۰).
انبوه.شکل ۶. نمودار ساختار نواری الکترونی PbFeO₃ در راستای سطح (۱۱۰).

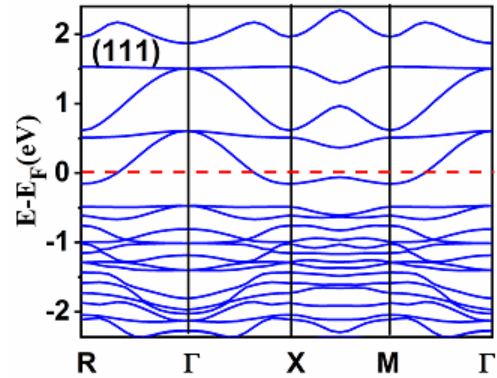
۲- نتایج و مباحث

۲-۱: ساختار نواری الکترونی

برای مشخصه یابی الکترونی ترکیب PbFeO₃ ساختار نواری الکترونی این ماده را در منطقه اول بریلوین و مسیر پرتقارن R-Γ-X-M-Γ برای همه حالات ترسیم نمودیم (شکل‌های ۳-۶). مقیاس انرژی بر حسب الکترون ولت و انرژی نوارها نسبت به انرژی فرمی سنجیده شده است. مطابق شکل انرژی صفر بیانگر موقعیت تراز فرمی می باشد (خط چین قرمز). مقدار انرژی تراز فرمی در حالت انبوه 9.64 eV می باشد. مطابق شکل ۳ نوارهای انرژی پایین ترین لایه رسانش و بالاترین لایه ی ظرفیت، تراز انرژی فرمی را قطع کرده اند. نتایج حاصله نشان می دهد که ترکیب PbFeO₃ در حالت انبوه رسانا می باشد. شکل ۴ نمودار ساختار نواری الکترونی ماده در راستای سطح (۱۰۰) را نشان می دهد. در این حالت ماده دارای گاف انرژی از مرتبه ی 0.5 eV و نیمه رسانا می باشد. تعداد نوارهای انرژی در شکل ۶ و راستای سطح (۱۱۰) به خاطر افزایش تعداد اتم ها در یاخته اولیه افزایش می یابد. در این حالت هم چنان ماده خاصیت نیمه رسانایی خود را حفظ کرده و به حالت فلزی تمایل پیدا می کند. مطابق شکل ۶ در راستای سطح (۱۱۱) نوارهای لایه رسانش تراز فرمی را قطع کرده و ماده خاصیت رسانایی پیدا میکند. علت این امر افزایش اتم های آهن در یاخته اولیه سطح (۱۱۱) می باشد.



شکل ۸. نمودار مغناطش کل و مطلق برحسب ثابت شبکه برای ترکیب $PbFeO_3$ در راستای سطوح مختلف.



شکل ۶. نمودار ساختار نواری الکترونی $PbFeO_3$ در راستای سطح (۱۱۱).

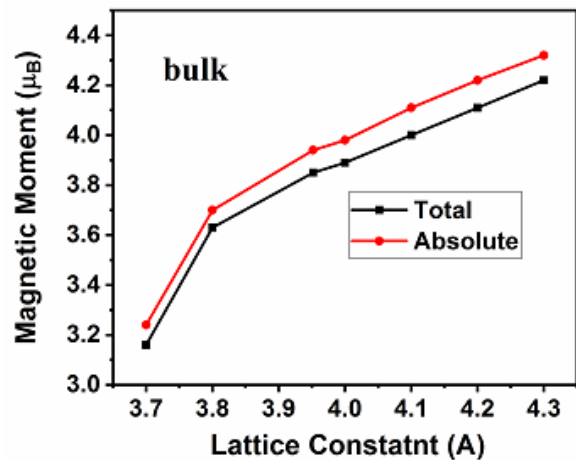
۲-۲: خواص مغناطیسی

نتیجه گیری
در این تحقیق خواص الکترونی و مغناطیسی ترکیب $PbFeO_3$ در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسباتی Quantum ESPRESSO بررسی گردید. ساختار نواری الکترونی نشان داد که این ترکیب در حالت انبوه رسانا و در راستای سطح (۱۱۰) نیمه رسانا با گاف نواری 0.5 eV می باشد. بیشترین میزان مغناطش کل مربوط به سطح (۱۱۱) می باشد. با افزایش ثابت شبکه خاصیت مغناطیسی ماده در حالت انبوه افزایش پیدا می کند.

مرجع ها

- [1] Makarova, L.A., et al., Elastically coupled ferromagnetic and ferroelectric microparticles: New multiferroic materials based on polymer, NdFeB and PZT particles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2019. **470**: p. 89-92.
- [2] Ramam, K., et al., Magnetic properties of nano-multiferroic materials. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2017. **442**: p. 453-459.
- [3] Hou, X., X. Wang, and W. Mi, Progress in Fe₃O₄-based multiferroic heterostructures. *Journal of Alloys and Compounds*, 2018. **765**: p. 1127-1138.
- [4] Kundu, A.K., M.M. Seikh, and P. Nautiyal, Bismuth centred magnetic perovskite: A projected multiferroic. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2015. **378**: p. 506-528.
- [5] Vopson, M.M., Fundamentals of multiferroic materials and their possible applications. *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, 2015. **40**(4): p. 223-250.
- [6] da Silveira Lacerda, L.H., R. Augusto Pontes Ribeiro, and S.R. de Lazaro, Magnetic, Electronic, Ferroelectric, Structural and Topological Analysis of AlFeO₃, FeAlO₃, FeVO₃, BiFeO₃ and PbFeO₃ materials: theoretical evidences of magnetoelectric coupling. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2019 **480**: p. 199-208.
- [7] Erkişi, A., E.K. Yıldırım, and G. Gökoğlu, Electronic structure and magnetic properties of PbMO₃ (M= Fe, Co, Ni) magnetic perovskites: An ab initio study. *International Journal of Modern Physics B*, 2014. **28**(29): p. 1450205.
- [8] Giannozzi, P., et al., QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of physics: Condensed matter*, 2009. **21**(39): p. 395502.

شکل ۷ مقدار مغناطش کل و مغناطش مطلق ترکیب $PbFeO_3$ را در حالت انبوه بر حسب ثابت شبکه نشان می دهد. مطابق شکل با افزایش ثابت شبکه خاصیت مغناطیسی ماده بیشتر می شود. این مغناطش ناشی از انتقال الکترون های پوسته ظرفیت $4s^2$ اتم های Fe به پوسته ظرفیت $2p^4$ اتمهای اکسیژن می باشد. در نتیجه این انتقال الکترونی، گشتاور کل مغناطیسی μ_B بدست می آید که بر روی اتم Fe جایگزیده است. در نتیجه خاصیت مغناطیسی این ماده ناشی از اتم های Fe می باشد. مطابق شکل ۸ بیشترین میزان مغناطش کل مربوط به سطح (۱۱۱) و کمترین مقدار آن برای سطح (۱۰۰) می باشد. نتایج حاصله نشان می دهد که خواص مغناطیسی ترکیب $PbFeO_3$ در راستای سطوح نسبت به حالت انبوه بهبود می یابد.



شکل ۷. نمودار مغناطش کل و مطلق برحسب ثابت شبکه برای ترکیب $PbFeO_3$ در حالت انبوه.

بررسی اثرات ناخالصی آهن، نیکل و کبالت بر خواص الکترونی و مغناطیسی نانوریبون های گالیم نیتريد

پاکیزه، اسماعیل^{۱*}

^۱دانشکده نفت و گاز گچساران، دانشگاه یاسوج، گچساران ۷۵۸۱۳-۵۶۰۰۱، ایران

*e.pakizeh@yu.ac.ir; esmaeil_pakizeh@yahoo.com

چکیده

گالیم نیتريد یکی از مواد نیمه رسانای غیرمغناطیسی بسیار معروف است. اگر مقداری عناصر مغناطیسی به صورت ناخالصی به آن اضافه کنیم به ماده مغناطیسی تبدیل می شود. در این مقاله خواص الکترونی و مغناطیسی نانوریبون های $Ga_xM_{1-x}N$ ($M=Fe, Co$ and Ni) بررسی شده است. محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی و روش امواج تخت به همراه شبه پتانسیل با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انجام گرفته است. همچنین شبه پتانسیل مورد استفاده برای انرژی تبادل-همبستگی به روش فوق نرم تولید شده است. آنالیز ساختار نواری الکترونی با توجه به قطع شدن تراز انرژی فرمی توسط لایه رسانش نشان می دهد که ماده ی $Ga_xM_{1-x}N$ رسانا می باشد. برای بررسی خاصیت مغناطیسی، گشتاور مغناطیسی کل ماده را در حالات مختلف محاسبه نمودیم. نتایج حاصله نشان داد که نانوریبون های $GaFeN$ دارای خواص مغناطیسی بهتری هستند. همچنین اثر اندازه سلول اولیه نانوریبون ها بر خواص مغناطیسی این ماده مورد بررسی قرار گرفت.

کلیدواژه: گالیم نیتريد، خواص مغناطیسی، خواص الکترونی، نظریه تابعی چگالی

Investigation of the effects of Iron, Nickel and Cobalt impurities on the electronic and magnetic properties of Gallium Nitride nanoribbons

Pakizeh, Esmaeil^{1*}

¹ Faculty of Petroleum and Gas, Yasouj University, Gachsaran 75813-56001, Iran

*Corresponding author: e.pakizeh@yu.ac.ir; esmaeil_pakizeh@yahoo.com

Abstract

Gallium nitride is a well-known non-magnetic semiconductor material. However it can be transformed into magnetic material by adding magnetic elements as impurities. In this study, we investigated the electronic, and magnetic properties of $Ga_xM_{1-x}N$ ($M=Fe, Co$ and Ni) nanoribbons. The calculations have been performed using plane wave sets with pseudopotential in framework of Density Functional Theory and Generalized Gradient Approximation (GGA). Also the pseudopotential for the exchange- correlation energy generated with ultrasoft method. An analysis of the electronic band structure with respect to the cutoff of the Fermi energy level by the conduction layer shows that the $Ga_xM_{1-x}N$ material is conductive. To investigate of the magnetic property, we calculated the total magnetic momentum in different states. The results showed that $GaFeN$ nanoribbons had better magnetic properties. Also, the effect of the size of the unit cell of nanoribbons on the magnetic properties of this material was investigated.

Keywords: Gallium nitride, Magnetic properties, Electronic properties, Density functional theory
PACS No. 70, 71, 73, 75.

مقدمه

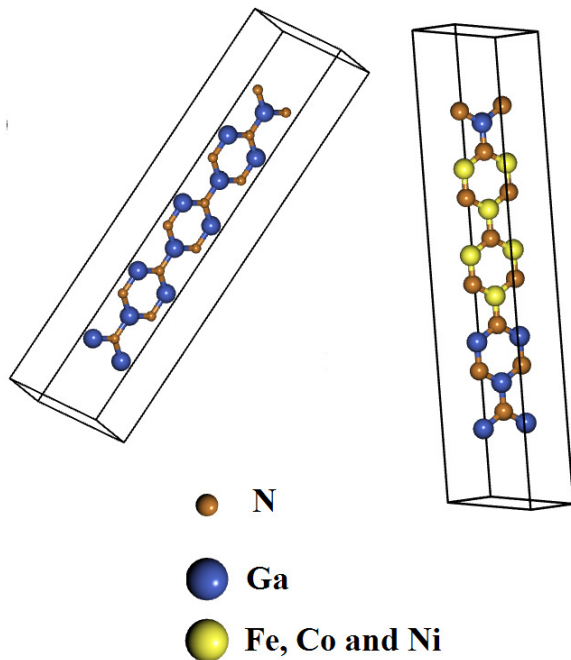
امروزه مواد نیمه رسانای مغناطیسی به خاطر پتانسیل بالا در صنایع اسپین ترونیک مورد توجه بسیاری از محققین قرار گرفته اند. جدای از مزایای این مواد در حالت انبوه، به خاطر اثرات سطح و محدودیت های کوانتومی، نیمه رساناهای مغناطیسی در اندازه نانو دارای خواص فیزیکی منحصر بفردی می باشند. نیمه هادی گالیم نیتريد در حالت انبوه با ساختار بلوری ورتزیت و دارای گاف نواری مستقیم می باشد. این ماده اولین بار در سال ۱۹۹۰ سنتز و در دیودهای نور گسیل (LED) مود استفاده قرار گرفت. به دلیل ساختار فیزیکی سخت، ظرفیت گرمایی و رسانندگی حرارتی بالا و گاف نواری پهن این ماده [۱]، از آن در تجهیزات اپتوالکترونیک و دستگاه های با فرکانس و قدرت بالا استفاده می شود [۵-۲]. در دهه اخیر بسیاری از محققین به بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی این ماده در ساختارهای نانو پرداختند [۱۲-۶]. در این تحقیق در چارچوب نظریه ی تابعی چگالی و با استفاده از کد کوانتوم اسپرسو [۱۳] به مطالعه خواص الکترونی و مغناطیسی نانوریون های گالیم نیتريد آلائیده با اتم های آهن، کبالت و نیکل پرداختیم.

۱- ساختار بلوری و جزئیات محاسباتی

ترکیب GaN در حالت انبوه دارای ساختار ورتزیت و گروه فضایی P63mc می باشد. مطابق شکل ۱ ساختار بلوری نانوریون های این ماده دارای ساختار اورترومبیک با ثابت های شبکه $a=10$ $b=17.1$ $c=2.4$ Å می باشد. بردار کایرال برای شبیه سازی ساختاری این ترکیب را از مرتبه ۲×۲ در نظر گرفتیم.

محاسبات در چارچوب نظریه ی تابعی چگالی (DFT) و روش شبه پتانسیل امواج تخت و با استفاده از کد محاسباتی Quantum-ESPRESSO انجام گرفت [۱۳]. همچنین از تقریب گرادیان شیب تعمیم یافته GGA برای جمله انرژی تبدیلی همبستگی و شبه پتانسیل های فوق نرم (ultrasoft) استفاده شده است. انرژی قطع برای بسط ویژه مقادیر توابع موج را ۲۵ ریدبرگ انتخاب نمودیم. انتگرال گیری در منطقه ی اول بریلوین با سلول بندی بردارهای

شبکه وارون (k-points) از مرتبه $1 \times 1 \times 8$ انجام گرفت. حد همگرایی انرژی برای محاسبات خودسازگار را از مرتبه 10^{-6} ریدبرگ قرار دادیم. با توجه به رسانا بودن بودن ماده $Ga_xM_{1-x}N$ (M=Fe, Co and Ni) برای انتگرال گیری بالای سطح فرمی از روش smearing با میزان پهن شدگی 0.02 ریدبرگ استفاده نمودیم.

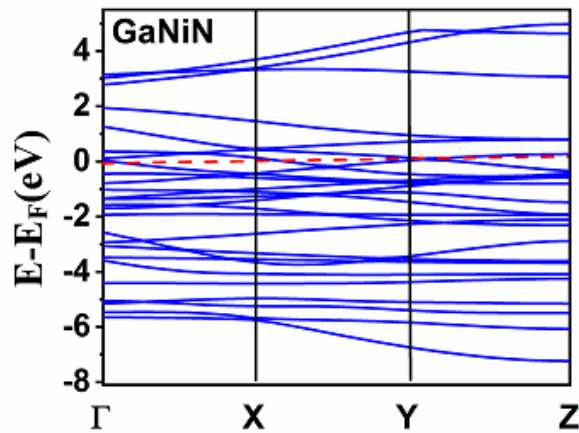


شکل ۱: ساختار بلوری نانوریون های ترکیب گالیم نیتريد.

۲- نتایج و مباحث

۲-۱: ساختار نواری الکترونی

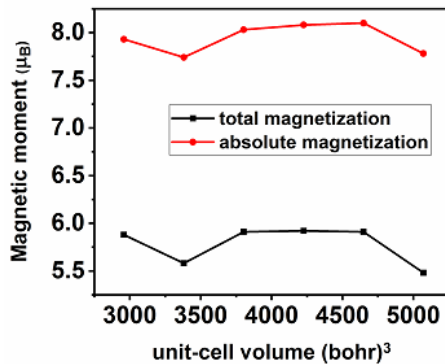
برای مشخصه یابی الکترونی نانوریون های گالیم نیتريد آلائیده شده با عناصر آهن، کبالت و نیکل، ساختار نواری الکترونی این ماده را در منطقه اول بریلوین و مسیر پرتقارن $\Gamma-X-Y-Z$ برای همه حالات ترسیم نمودیم (شکل های ۴-۲). مقیاس انرژی بر حسب الکترون ولت و انرژی نوارها نسبت به انرژی فرمی سنجیده شده است. مطابق شکل انرژی صفر بیانگر موقعیت تراز فرمی می باشد



شکل ۴. نمودار ساختار نواری الکترونی نانوریون های GaNiN.

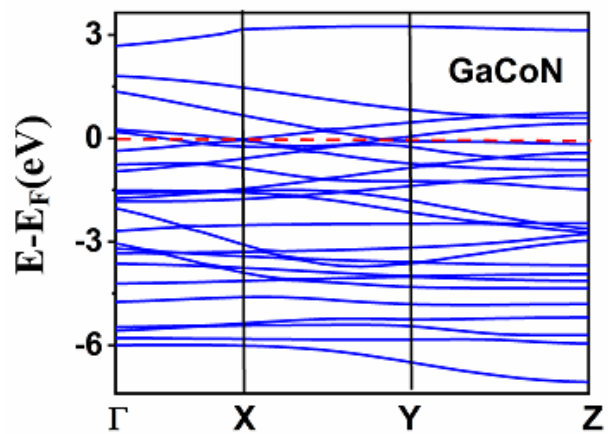
۲-۲: خواص مغناطیسی

شکل ۵ مقدار مغناطش کل و مغناطش مطلق نانوریون های GaFeN را بر حسب حجم سلول اولیه نشان می دهد. مطابق شکل با افزایش حجم شبکه خاصیت مغناطیسی ماده به حالت اشباع می رسد. این مغناطش ناشی از انتقال الکترون های پوسته ظرفیت $4s^2$ اتم های Fe به پوسته ظرفیت $2p^3$ اتمهای نیتروژن می باشد. در نتیجه این انتقال الکترونی، گشتاور کل مغناطیسی μ_B بدست می آید که بر روی اتم Fe جایگزیده است. در نتیجه خاصیت مغناطیسی این ماده ناشی از اتم های Fe می باشد. همین اتفاق را برای عناصر کبالت و نیکل نیز داریم. مطابق شکل ۹ بیشترین میزان مغناطش کل مربوط به نانوریون های GaFeN و کمترین مقدار آن برای نانوریون های GaNiN می باشد.

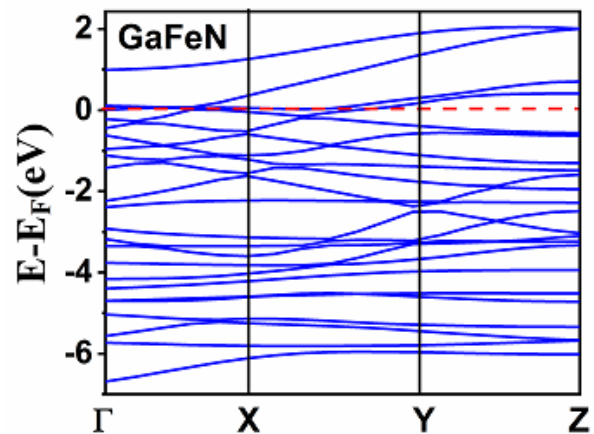


شکل ۵: نمودار مغناطش کل و مطلق برحسب حجم شبکه برای نانوریون های GaFeN.

(خط چین قرمز). مقدار انرژی تراز فرمی برای ترکیب GaCoN مقدار -3.15 eV ، برای ترکیب GaNiN مقدار -3.27 eV و برای ترکیب GaFeN مقدار -3.13 eV محاسبه شده است. همچنین طول پیوند M-N (M=Fe, Co and Ni) را مقدار 1.869 آنگستروم در نظر گرفته ایم. مطابق این شکل ها نوارهای انرژی پایین ترین لایه رسانش و بالاترین لایه ظرفیت، تراز انرژی فرمی را قطع کرده اند. نتایج حاصله نشان می دهد که نانوریون های $Ga_xM_{1-x}N$ (M=Fe, Co and Ni) رسانا می باشند.

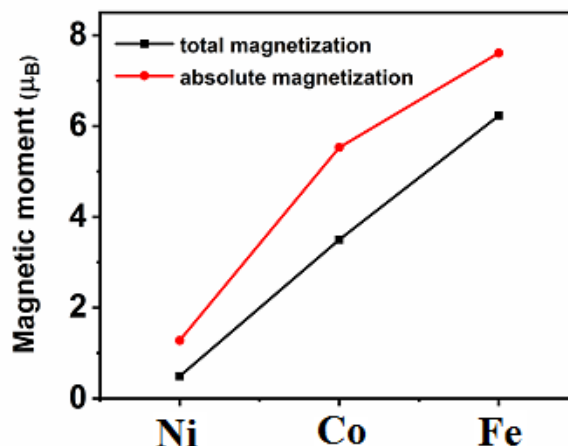


شکل ۲. نمودار ساختار نواری الکترونی نانوریون های GaCoN.



شکل ۳. نمودار ساختار نواری الکترونی نانوریون های GaFeN.

- [4] A. Aissat et al., "Modeling and optimization of core (p-GaN)-multishell (i-InxGa1-xN/i-GaN/n-Al0.1Ga0.9N /n-GaN) nanowire for photovoltaic applications"; Superlattices and Microstructures, **120** (2018) 209-216.
- [5] Zhao, C., et al., III-nitride nanowires on unconventional substrates: From materials to optoelectronic device applications. Progress in Quantum Electronics, 2018. **61**: p. 1-31.
- [6] Jiang, H., et al., Piezoelectric and pyroelectric properties of intrinsic GaN nanowires and nanotubes: Size and shape effects. Nano Energy, 2018. **45**: p. 359-367.
- [7] Sanders, N., et al., Electronic and Optical Properties of Two-Dimensional GaN from First-Principles. Nano Letters, 2017. **17**(12): p. 7345-7349.
- [8] Li, H., et al., Electronic Structures and Magnetic Properties of GaN Sheets and Nanoribbons. The Journal of Physical Chemistry C, 2010. **114**(26): p. 11390-11394.
- [9] Shi, C., et al., Magnetic properties of transition metal doped AlN nanosheet: First-principle studies. Journal of Applied Physics, 2014. **115**(5): p. 053907.
- [10] Ghorbanzadeh Ahangari, M., A. Fereidoon, and A. Hamed Mashhadzadeh, Interlayer interaction and mechanical properties in multi-layer graphene, Boron-Nitride, Aluminum-Nitride and Gallium-Nitride graphene-like structure: A quantum-mechanical DFT study. Superlattices and Microstructures, 2017. **112**: p. 30-45.
- [11] Salimifard, M., A.S. Rad, and K. Mahanpoor, Surface interaction of H₂S, SO₂, and SO₃ on fullerene-like gallium nitride (GaN) nanostructure semiconductor. Solid State Communications, 2017. **265**: p. 6-11.
- [12] Zhang, H., F.-S. Meng, and Y.-B. Wu, Two single-layer porous gallium nitride nanosheets: A first-principles study. Solid State Communications, 2017. **250**: p. 18-22.
- [13] P. Giannozzi, et al., "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials"; J. Phys. Cond. Mat. **21**, (2009) 395502.



شکل ۶: نمودار مغناطش کل و مطلق برحسب حجم شبکه برای نانوریون های GaFeN, GaNiN GaCoN.

نتیجه گیری

در این تحقیق خواص الکترونی و مغناطیسی نانوریون های گالیم نیتريد آلايیده شده با اتم های آهن، کبالت و نیکل در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسباتی Quantum ESPRESSO بررسی گردید. ساختار نواری الکترونی نشان داد که این ترکیب در همه حالت رسانا می باشد. بیشترین میزان مغناطش کل مربوط به نانوریون GaFeN می باشد. با افزایش حجم شبکه خاصیت مغناطیسی ماده به حالت اشباع می رسد.

مرجع ها

- [1] I. Akasaki, H. Amano "Crystal Growth and Conductivity Control of Group III Nitride Semiconductors and Their Application to Short Wavelength Light Emitters"; Japanese Journal of Applied Physics. **36**, (1997) 5393.
- [2] L. Q. Zhang et al., "Degradation mechanisms of optoelectric properties of GaN via highly-charged 209Bi³³⁺ ions irradiation"; Applied Surface Science, **440**, 2018, 814-820.
- [3] M. Kumar et al., "GaN nanophosphors for white-light applications"; Optical Materials, **75** (2018) 61-67.

تأثیر فشار بر خواص الکتریکی و مغناطیسی ابرشبکه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$

پیروند، فاطمه^۱؛ اعظمی، آزاده^{۱*}

^۱ گروه فیزیک، واحد اهواز، دانشگاه آزاد اسلامی، اهواز، ایران

چکیده

در این پژوهش ویژگی های الکتریکی و مغناطیسی ابرشبکه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن بر پایه نظریه ی تابعی چگالی و با استفاده از کدمحاسباتی کوانتوم اسپرسو بررسی شده است. نتایج حاصل از محاسبات انرژی برهمکنش تبادل نزدیکترین همسایه ها در ابرشبکه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ نشان می دهد، علی رغم اینکه ترکیب بلوری LaTiO_3 و SrTiO_3 از نظر مغناطیسی به ترتیب آنتی فرومغناطیس نوع G و پارامغناطیس هستند، اما ابرشبکه ساخته شده از این دو ترکیب دارای پیکربندی فرومغناطیس می باشد و از نظر الکتریکی نیم فلز است. اعمال فشار انبساطی و انقباضی به نسبت ۲۰٪ پارامتر شبکه در جهت محور z سبب تغییر پیکربندی مغناطیسی ابرشبکه از فرومغناطیس به آنتی فرومغناطیس می شود. نتایج محاسبات چگالی حالت نشان می دهد که با اعمال فشار انقباضی، فقط اندازه و پهنای قله ها تغییر کرده و از لحاظ الکتریکی ابرشبکه همچنان نیم فلز است ولی با وارد کردن فشار انبساطی، گذار فاز به عایق رخ می دهد.

Effect of pressure on the electrical and magnetic properties of $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$

Pirvand, Fatemeh¹; Aezami, Azadeh^{1*}

¹Department of Physics, Ahvaz Branch, Islamic Azad University, Ahvaz, Iran

Abstract

In this work, the electrical and magnetic properties of the $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ superlattice have been investigated. Calculations were performed using density functional theory framework by Quantum-Espresso code. We have calculated exchange interaction energies of the nearest neighbors for $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ superlattice. The results of the exchange interaction energy calculations show the ferromagnetic configuration & half-metal, while the calculation relevant to the density of states shows G-type antiferromagnetic configuration (insulator) for LaTiO_3 and paramagnetic (insulator) for SrTiO_3 . The tensile and compressive pressure ($\pm 20\%$ in the z axis) applied to the $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ superlattice caused a magnetic configuration change from ferromagnetic to antiferromagnetic. The size and width of peaks have only been changed by applying the compressive pressure. However, metal-insulator transition has been occurred in the tensile pressure.

مقدمه

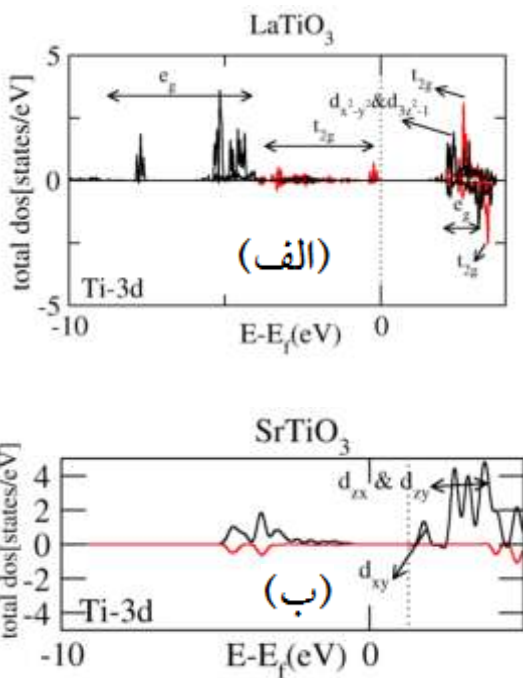
تشکیل دهنده آنها است که سبب رسانش و خلق حالت های الکترونی جدید می گردد [۲ و ۳]. مطالعات تجربی نشان می دهد که یکی از عوامل تأثیرگذار بر خواص مغناطیسی و الکتریکی ابرشبکه ها انتخاب زیر لایه است. به عنوان مثال رشد ابرشبکه $(\text{LaMnO}_3)_3/(\text{SrTiO}_3)_2$ بر روی زیرلایه SrTiO_3 سبب می شود که پارامتر شبکه در صفحه xy بزرگتر از پارامتر شبکه در راستای محور z شده و تحت تأثیر نظم مغناطیسی اتمهای منگنز سبب ایجاد پیکربندی فرومغناطیس برای ابرشبکه می شود، در حالیکه

ابرشبکه، ساختاری متشکل از لایه های متناوب از دو یا چند ساختار مختلف است. یکی از زمینه های تحقیقاتی جدید در لایه های اکسید پروسکایت، بررسی خواص این ترکیبات بصورت ساختارهای چندگانه و ترکیبات لایه ای بصورت "ابرشبکه" است که خواص فیزیکی بسیار جالبی را در فصل مشترک لایه ها نشان می دهند [۱]. یک خصوصیت مهم ابرشبکه ها توزیع بار در فصل مشترک لایه ها به واسطه اختلاف پتانسیل الکتروشیمیایی بین مواد

از بهینه سازی پارامترهای اولیه ی ابرشبکه، انرژی قطع مربوط به ابرشبکه 30 Ry ، تعداد نقاط ویژه k برابر 108 و تابع پهن شدگی را mp با مقدار 0.15 در نظر گرفتیم. ابرشبکه بدست آمده با پارامترهای بهینه شده را تحت واهلش ساختاری قرار دادیم، نتایج حاصل نشان می دهد که فشار از مرتبه 0.2 کیلوبار و نیروی وارد بر هر یون از مرتبه 10^{-4} Ry/a-u است.

بحث و نتایج

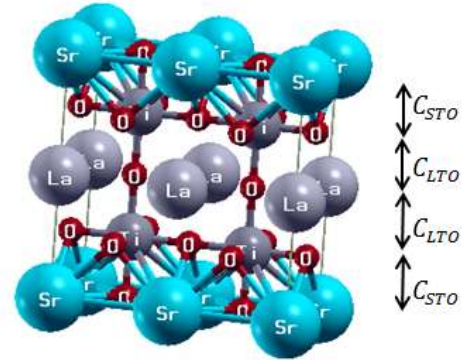
برای بررسی اثر فشار خارجی بر روی ساختار مغناطیسی ابرشبکه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ ابتدا ساختار مغناطیسی و الکتریکی ابرشبکه را بدون اعمال فشار بررسی می کنیم. شکل ۲ چگالی حالت کل ترکیب بلوری LaTiO_3 و SrTiO_3 را نشان می دهد. همانگونه که نتایج نشان می دهد، ترکیب بلوری LaTiO_3 یک آنتی فرومغناطیس نوع G و ترکیب SrTiO_3 پارامغناطیس و هر دو ترکیب عایق هستند.



شکل ۲: (الف) چگالی حالت اتم Ti در حالت بلوری ترکیب LaTiO_3 ، (ب) چگالی حالت اتم Ti در حالت بلوری ترکیب SrTiO_3 را نشان می دهد.

با توجه به اینکه لایه های تشکیل دهنده ابرشبکه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ نسبت به حالت های بلوری LaTiO_3 و SrTiO_3 متفاوت می باشند برای پیش بینی پیکربندی مغناطیسی ابرشبکه، انرژی برهمکنش تبدیلی بین اتم های همسایه در ابرشبکه را محاسبه

اگر همان ابرشبکه بر روی زیر لایه LaAlO_3 رشد داده شود، پارامتر شبکه در صفحه xy کوچکتر از پارامتر شبکه در راستای محور z خواهد شد و پیکربندی مغناطیسی ابرشبکه $(\text{LaMnO}_3)_3/(\text{SrTiO}_3)_2$ آنتی فرومغناطیس خواهد شد [۵ و ۴].



شکل ۱: بطور شماتیک لایه های ابرشبکه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ را نشان می دهد.

روش انجام محاسبات

در این تحقیق محاسبات با استفاده از روش امواج تخت با شبه پتانسیل فوق نرم در چارچوب نظریه ی تابعی چگالی با نرم افزار کوانتوم اسپرسو [۶] و تقریب LDA+U انجام شده است. برای محاسبه پتانسیل تبدیلی-همبستگی در تقریب چگالی موضعی هابارد (LDA+U) از روش پاسخ خطی، پارامتر هابارد برای اتم Ti را 5 الکترون ولت بدست آوردیم که تطابق خوبی با سایر نتایج گزارش شده دارد [۷]. برای ساخت ابرشبکه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ از ترکیب بلوری LaTiO_3 با نظم آنتی فرومغناطیس نوع G و ترکیب بلوری SrTiO_3 با پیکربندی پارامغناطیس استفاده شده است. با فرض اینکه زیر لایه استفاده شده در ساخت ابرشبکه SrTiO_3 باشد، در ابرشبکه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ ثابت های شبکه درون صفحه ای $a=b$ را برابر ثابت شبکه زیر لایه (3.911 \AA) در نظر گرفتیم و c پارامتر شبکه در جهت محور z را طوری محاسبه کردیم که حجم محاسبه شده در هر بلور ثابت باقی بماند [۸].

پس از انجام محاسبات $C_{\text{STO}}=3.905 \text{ \AA}$ و $C_{\text{LTO}}=4.103 \text{ \AA}$ بدست آمد. شکل ۱ بطور شماتیک ساختار بلوری ابرشبکه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ را به ترتیب لایه های مختلف نشان می دهد. پس

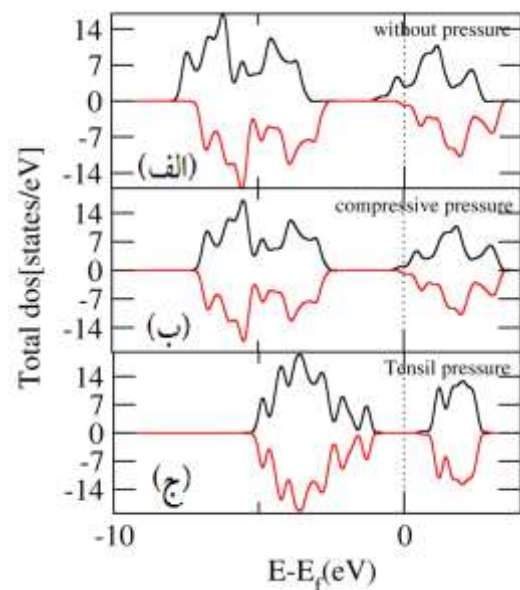
مشارکت ابرشبکه تبدیل شود و سبب رسانش در فصل مشترک می گردد. برای بررسی تأثیر فشار خارجی بر خواص الکتریکی و مغناطیسی ابرشبکه به نسبت ۲۰٪ پارامتر شبکه در راستای محور Z به ابرشبکه ساخته شده، فشار وارد کردیم. در این تحقیق فشار مثبت (۲۰٪+) را فشار انبساطی^۱ و فشار منفی (۲۰٪-) را فشار انقباضی^۲ می نامیم. نتایج محاسبات در جدول ۱ نشان می دهد که در ابرشبکه مذکور با اعمال فشار خارجی (انبساطی و انقباضی) در راستای محور Z پیکربندی مغناطیسی در ابرشبکه از فرومغناطیس به آنتی فرومغناطیس جهت گیری می کند. لازم به توضیح است که انرژی کل محاسبه شده در نظم مغناطیسی آنتی فرومغناطیس نوع A، C و G به انرژی کل نظم فرومغناطیس بهنجار شده است. چگالی حالت کل در شکل ۳ برای ابرشبکه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ در هر سه حالت قبل و بعد از اعمال فشار انبساطی و انقباضی را نشان می دهد که با اعمال فشار انقباضی (شکل ۳ب) فقط اندازه و پهنای قله ها تغییر کرده، ولی از لحاظ الکتریکی ترکیب همچنان نیم فلز است. درحالیکه با وارد کردن فشار انبساطی گاف نواری ایجاد شده و خط فرمی چگالی حالات را در هر دو کانال اسپینی قطع می کند و گذار فاز عایق مشاهده می شود (شکل ۳ج).

جدول ۱. انرژیهای مربوط به ابرشبکه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ را در نظم های مغناطیسی مختلف و تحت تأثیر فشار انبساطی و انقباضی که نسبت به انرژی حالت فرومغناطیس بهنجار شده است را نشان می دهد.

$\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$	E_{FM} (eV)	$E_{\text{A-AFM}}$ (eV)	$E_{\text{C-AFM}}$ (eV)	$E_{\text{G-AFM}}$ (eV)
بدون اعمال فشار	0	۰/۴۵۲	۰/۳۲۱	۰/۲۸۶
فشار به نسبت ۲۰٪	0	۰/۱۸۶	۰/۲۳۲	-۰/۱۴۲
فشار به نسبت -۲۰٪	0	-۰/۴۳۱	۰/۱۴۸	۰/۲۹۸

از آنجائیکه رسانندگی در ابرشبکه به زنجیره Ti-O-Ti وابسته است، طول پیوند Ti-O با استفاده از نرم افزار xcrysden و واهلش سیستم محاسبه گردید. نتایج محاسبات که مربوط به هشت

کردیم. انرژی برهمکنش تبدلی، اختلاف انرژی فرومغناطیس و پادفرومغناطیس هر دو اتم همسایه ($E_{\uparrow\uparrow}-E_{\uparrow\downarrow}$) است که از روی انرژی برهمکنش تبدلی می توان نوع پیکربندی مغناطیسی ابرشبکه را پیش بینی نمود. نتایج محاسبات نشان می دهد که در ابرشبکه مذکور انرژی برهمکنش تبدلی بین اتمهای Ti-Ti در راستای محور Z ($-۰/۸۲ \text{ meV}$) و در راستای محور xy ($-۱/۲۳ \text{ meV}$) منفی است. بنابراین می توان نتیجه گرفت که جهتگیری اسپینی بین لایه ها در ابرشبکه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ در همه راستاها موازی و پیکربندی مغناطیسی، فرومغناطیس است.



شکل ۳: چگالی حالت کل ابرشبکه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ بدون اعمال فشار (الف)، با اعمال فشار انقباضی (ب) و با اعمال فشار انبساطی (ج) را نشان می دهد.

بیشترین واهلش ساختاری در لایه TiO_2 در فصل مشترک ابرشبکه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ اتفاق می افتد که یون Ti در لایه بالایی در فصل مشترک بصورت $\text{Ti}^{0.5}$ و در لایه پایینی بصورت Ti^1 است و ابرشبکه گرفتار یک آشفتهگی شبه فروالکترونیک در بار منفی یون O و بار مثبت یون Ti می شود. این آشفتهگی سبب ایجاد یک گشتاور دوقطبی می گردد و یک میدان کولنی توسط جانشانی Sr^{2+} و La^{3+} خلق می شود. به عبارت دیگر انتقال الکترون از LaTiO_3 به SrTiO_3 باعث می شود تا Ti^{4+} در حالت بلوری به Ti^{3+} در فصل

¹ Tensile Pressure

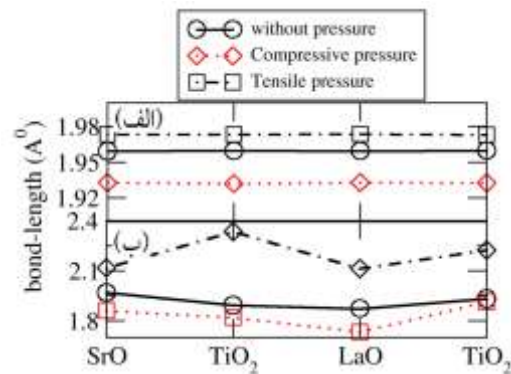
² Compressive Pressure

اینکه در ترکیب LaTiO_3 ، نظم پادفرومغناطیس نوع G، پایدارترین حالت مغناطیسی است و ترکیب SrTiO_3 پارامغناطیس است اما ابرشبهه حاصل از لایه های این دو ترکیب دارای پیکربندی فرومغناطیس و از نظر الکتریکی نیم فلز است. با اعمال فشار انبساطی و انقباضی به نسبت ۲۰٪ پارامتر شبکه در امتداد محور Z تغییرات حجم در ابرشبهه ایجاد می گردد و نوارهای انرژی شیفت پیدا می کنند. با اعمال فشار انقباضی به دلیل همپوشانی بیشتر توابع موج، هیبریدشدگی پیوندها بیشتر شده اندازه و پهناي قله ها تغییر کرده و از لحاظ الکتریکی ترکیب همچنان نیم فلز است ولی با وارد کردن فشار انبساطی، گذار فاز به عایق رخ می دهد.

مرجع ها

- [1] S. Piskunov, et al., "Bulk properties and electronic structure of SrTiO_3 , BaTiO_3 , PbTiO_3 perovskites: an ab initio HF/DFT study"; *Computational Materials Science* 29 (2004) 165-178.
- [2] H. M. Liu, et al., "Magnetic orders and electronic structure in $\text{LaMnO}_3/\text{SrTiO}_3$ superlattices"; *Journal of Applied Physics* 113 (2013) 17D902.
- [3] F. Cossu, et al., "High mobility half-metallicity in the $(\text{LaMnO}_3)_2/(\text{SrTiO}_3)_8$ superlattice"; *Applied Physics Letters* 102 (2013) 042401.
- [4] S. Okamoto, et al., "Lattice Relaxation in Oxide Heterostructures: $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ Superlattices"; *Physical Review Letters* 97 (2006) 056802.
- [5] B. R. K. Nanda, S. Satpathy., "Effects of strain on orbital ordering and magnetism at perovskite oxide interfaces: $\text{LaMnO}_3/\text{SrMnO}_3$ "; *Physical Review B* 78 (2008) 054427.
- [6] P. Giannozzi, S. Baroni, et al., "QUANTUM ESPRESSO: a Modular and OpenSource Software Project for Quantum Simulations of Materials"; *Journal of Physical Condens. Matter* 21 (2009).
- [7] A. Aezami, et al., "Effect of electron correlations application to Ti atoms on physical properties of $(\text{LaMnO}_3)_m/(\text{SrTiO}_3)_n$ superlattices"; *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 406 (2016) 72-75.
- [8] B. R. K. Nanda, S. Satpathy., "Electronic and magnetic structure of the $(\text{LaMnO}_3)_2n/(\text{SrMnO}_3)_n$ superlattices"; *Physical Review B* 79 (2009) 054428.
- [9] K. Shibuya, et al., "Metallic $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ superlattice Films on the SrTiO_3 (100) surface"; *Japanese Journal of Applied Physics* 43 (2004) L1179-L1180.

وجهی های TiO_6 در ابرشبهه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ است در شکل ۴ آمده است. نتایج محاسبات در شکل ۴ نشان می دهد که در امتداد محور X با اعمال فشارهای انبساطی و انقباضی طول پیوند تقریباً ثابت است اما در راستای محور Z تغییرات طول پیوند برای فشارهای خارجی متفاوت خواهد بود.



شکل ۴: طول پیوند Ti-O در ابرشبهه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ برای هر سه حالت بدون اعمال فشار، با اعمال فشار انبساطی و فشار انقباضی در راستای صفحه xy (الف) و در راستای محور Z (ب) را نشان می دهد.

از آنجائیکه در محاسبات مربوط به ثابتهای شبکه در راستای محورهای X و Y ثابت های شبکه را برابر ثابت شبکه مربوط به زیرلایه در نظر می گیریم و ثابت شبکه هر لایه در راستای محور Z را طوری محاسبه می کنیم که حجم شبکه ثابت بماند، بنابراین تغییر در ثابت شبکه در راستای محور Z به معنی تغییر در حجم شبکه های تشکیل دهنده ابرشبهه و معادل با تغییر زیرلایه است. نتایج محاسبات نشان می دهد که تغییر زیر لایه بر نوع پیکربندی مغناطیسی و خواص الکتریکی ابرشبهه تأثیر گذار است [۹و۴].

نتیجه گیری

در این تحقیق بدلیل وجود Ti از محاسبات با تقریب LDA+U استفاده کردیم و با استفاده از روش پاسخ خطی مقدار پارامتر هابارد را برای اتم Ti، ۵ eV بدست آوردیم که در توافق خوبی با سایر نتایج گزارش شده است. خواص الکتریکی و مغناطیسی ابرشبهه $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ با استفاده از کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو و بر پایه نظریه ی تابعی چگالی مورد بررسی قرار دادیم. از نتایج محاسبات انجام شده می توان نتیجه گرفت که با وجود

بررسی و کالیبراسیون خطای سمت قطب‌نمای مغناطیسی در مجاورت اشیا مغناطیسی

تارقلی زاده، امیر؛ بابایی، بهار؛ همدرسی، الناز؛ غیبی، پارسا؛ سررشته داری، فرخ

تهران، خیابان کارگر شمالی، دانشگاه تهران، دانشکده فیزیک، آزمایشگاه تحقیقاتی تشدید مغناطیسی

چکیده

با ساخت و بکارگیری از یک سیستم هلمهلتز سه محوره، نتایج کالیبراسیون یک قطب‌نمای مغناطیسی مبتنی بر حسگر *anisotropic magnetoresistive* در مجاورت جسم مغناطیسی مورد بررسی قرار گرفته است. در این راستا یک دیسک مغناطیسی با مشخصات مغناطیسی معین مورد استفاده قرار گرفته و تاثیر آن در میزان خطای سمت و توانایی سیستم کالیبراسیون در جبران سازی اثر آن بصورت تجربی و شبیه سازی مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج حاصل شده نشان می‌دهند که جهت نسبی قرارگیری جسم نسبت به مگنتومتر، تعیین کننده میزان خطای سمت می‌باشد بطوری که وقتی موقعیت نسبی آنها حداکثر تقارن را دارد، حداقل خطای سمت ایجاد شده و الگوریتم کالیبراسیون با دقت بیشتری تصحیح را انجام می‌دهد. همچنین پروسه تجربی کالیبراسیون که توسط چرخش سه بعدی میدان مغناطیسی درون سیستم هلمهلتز صورت می‌گیرد، توسط نرم افزار کامسول شبیه سازی شده است که نتایج آن تطابق بسیار خوبی با نتایج عملی دارند.

Investigation and calibration of the navigation heading error in a 3-axis magnetometer caused by magnetic objects

Amir Targholizadeh, Bahar Babaei, Elnaz Hamdarsi, Parsa Gheybi, Farrokh Sarreshtedari

Magnetic Resonance Research Laboratory, Department of Physics, College of Science, University of Tehran, Tehran, Iran.

Abstract

By implementing a 3D Helmholtz coil system and using a three axis AMR magnetometer, we have compensated the effect of nearby magnetic objects for decreasing the magnetic navigation heading error. In this regard, the effect of a magnetic disc with specified size and permeability on the heading of the magnetic compass is experimentally investigated and the effectiveness of the magnetic calibration on decreasing of the error is discussed. The obtained results show the dependence of the heading error to the relative geometry of the compass and the magnetic object. The heading error and the calibration effectiveness substantially increase when the object is in a symmetric position with respect to the magnetometer. The magnetic calibration method, which is experimentally accomplished using a rotating field in the Helmholtz system, has been also numerically simulated in COMSOL Multiphysics. It is shown that the simulated results have a very good agreement with the obtained experimental results.

مقدمه

بنابراین واجب است که سنسور ها را در مقابل اثرات سخت و نرم فلزات کالیبره کنیم. در اینجا میدان مغناطیسی مزاحم به دو دسته ثابت (فلز سخت) و آن هایی که توسط میدان مغناطیسی زمین بوجود آورده شده اند (فلز نرم) تقسیم میشوند. در این پروژه با استفاده از راهکارهای تجربی و شبیه سازی، کالیبراسیون سنسور های مغناطیسی را در مقابل اجسام مغناطیسی مزاحم بررسی کرده ایم. به همین دلیل یک کویل هلمهلتز سه محوره و همچنین درایور لازم برای چرخاندن میدان مغناطیسی اعمالی که برای

امروزه بیشتر سیستم های ناوبری از انواع مختلف قطب‌نما هایی که بر اساس سنسورهای مغناطیسی ساخته شده اند استفاده میشود. در این راستا برای تعیین کردن مسیر در صفحه با استفاده از میدان مغناطیسی زمین، سنسور های *magnetoresistive* میتوانند حدود ۰.۱ درجه چرخش را تفکیک دهند [1,2]. قطب نمای مغناطیسی، مولفه های میدان مغناطیسی زمین را اندازه گیری میکند که میتواند بوسیله اجسام الکترومغناطیسی دچار اختلال شود

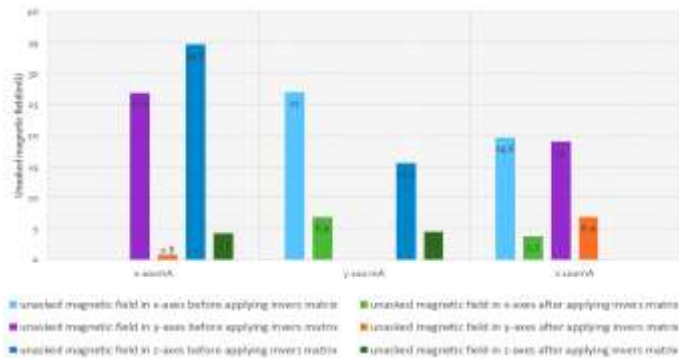
که در اینجا A ماتریس خطا، I جریان اعمالی و I' جریان منتسب به میدان ناخواسته ایجاد شده است. میدان مغناطیسی ایجاد شده توسط I' قبل از حذف خطا به وسیله معادله ۳ نشان داده شده است.

$$\begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} I'x \\ I'y \\ I'z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B'x \\ B'y \\ B'z \end{pmatrix} \quad (۳)$$

که در اینجا α, β, γ ضرایب تبدیل جریان به میدان در کویل هلمهولتز است. با استفاده از معادله های ۱ و ۳ ماتریس خطا قابل محاسبه است.

$$\begin{pmatrix} a1 & a2 & a3 \\ b1 & b2 & b3 \\ c1 & c2 & c3 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} Ix \\ Iy \\ Iz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B'x/\alpha \\ B'y/\beta \\ B'z/\gamma \end{pmatrix} \quad (۴)$$

در این روش برای یافتن درایه های ماتریس باید جریان های متفاوت به کویل ها اعمال و میدان مغناطیسی را اندازه گیری کنیم و یک دستگاه ۹ معادله ۹ مجهول تشکیل دهیم. در این راستا برای بررسی میزان خطا جریان 100mA را به یک جفت کویل اعمال و سپس میدان مغناطیسی ای که در جهت های دیگر ایجاد می شود را اندازه گیری کرده ایم. شکل ۲ نتیجه این روش کالیبراسیون را قبل و بعد از اعمال ماتریس وارون نشان می دهد، به عنوان مثال با اعمال جریان 100mA به کویل در جهت x قبل از اعمال این روش به ترتیب 26.9mG و 34.6mG در جهت های y و z ایجاد می شود که این مقدار بعد از اعمال ماتریس وارون به مقادیر 0.8mG و 4.2mG تقلیل می یابد.



شکل ۲: میدان مغناطیسی ناخواسته برای هر جفت کویل (قبل و بعد اعمال

وارون ماتریس خطا)

رابط کاربری سیستم هلمهولتز، با استفاده از ماتریس کالیبراسیون اشاره شده و با گرفتن پارامترهای شدت میدان و همچنین سرعت و دقت جاروب، با اعمال جریان های مناسب، میدان مغناطیسی درون هلمهولتز را به صورت کروی جاروب میکند.

الگوریتم کالیبره کردن نیاز است طراحی و ساخته ایم. همچنین خطای سمت (heading) سنسور قبل و بعد از کالیبراسیون به منظور بررسی کیفیت کالیبراسیون بررسی می شود. در اینجا سمت بصورت $\text{Heading} = \tan^{-1}\left(\frac{B_y}{B_x}\right)$ تعریف می شود. که B_y و B_x مولفه های x و y میدان مغناطیسی هستند. همچنین منظور از خطای سمت در این مقاله، اختلاف بین درجه سمت قطب نمای مختل نشده و درجه سمت قطب نمای مختل شده بعد از کالیبراسیون است.

چیدمان آزمایشگاهی

برای کالیبره کردن سنسور های مغناطیسی لازم است سنسور در یک میدان ثابت در همه ی جهات چرخانده شود به طوری که میدان اندازه گیری شده، یک کره را جاروب کند. در این پروژه سنسور ثابت نگه داشته شده و میدان مغناطیسی روی سطح یک پوسته کروی چرخانده میشود. به این منظور یک کویل هلمهولتز ۳ محوره و درایور مربوطه طراحی و ساخته شده است که در شکل ۱ نشان داده شده است.



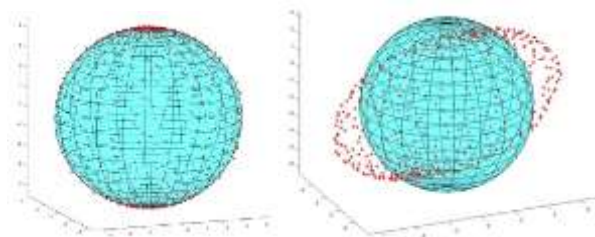
شکل ۱: کویل هلمهولتز ساخته شده برای چرخاندن میدان ثابت و درایور آن چندین دلیل برای ایجاد خطای دستگاهی در این سیستم وجود دارد که از جمله آن ها میتوان به متعامد نبودن محور جفت کویل ها اشاره کرد که باعث ایجاد میدان ناخواسته در جهت های مختلف می شود. لذا ابتدا برای از بین بردن این میدان، طی یک پروسه کالیبراسیون برای هلم هلنز، جریان کویل ها را تصحیح می کنیم. اساس این روش در نظر گرفتن منبع خطای سیستمی به عنوان یک ماتریس است، که با ضرب ماتریس وارونش در جریان اعمالی، خطای دستگاهی از بین می رود.

$$\begin{pmatrix} a1 & a2 & a3 \\ b1 & b2 & b3 \\ c1 & c2 & c3 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} Ix \\ Iy \\ Iz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I'x \\ I'y \\ I'z \end{pmatrix} \quad (۱)$$

$$A*(A^{-1}*I) = I \quad (۲)$$

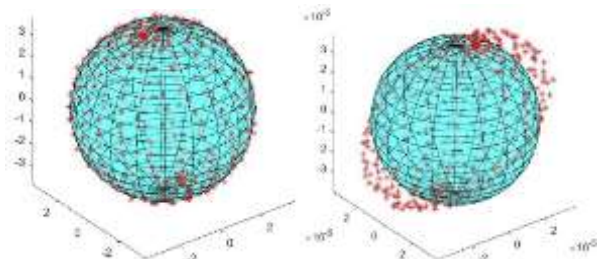
نتایج و تحلیل داده ها

هنگامی که هیچ نمونه مغناطیسی اطراف مغناطیس سنج قرار ندارد، داده بدست آمده از چرخش کروی میدان مغناطیسی اعمالی در تمام جهات کاملاً کره است. این در حالیست که با قرار دادن نمونه های ذکر شده در نزدیکی سنسور، نتیجه ی میدان مغناطیسی اندازه گیری شده به سطح بیضی گون تبدیل میشود که از مرکز نیز جابجا شده است. علت تغییر مکان، اثر فلز سخت و علت بیضوی شکل شدن آن اثر فلز نرم نمونه میباشد [3]. در اینجا شکل 4a داده های بدست آمده از اندازه گیری تجربی چرخش (طی کردن) سه بعدی میدان مغناطیسی اعمالی در مجاورت نمونه مغناطیسی را نشان میدهد. پس از اعمال الگوریتم کالیبراسیون بر روی داده های اندازه گیری شده ی اختلال یافته شکل 4a، داده های کالیبره شده در شکل 4b آورده شده اند. در فرایند کالیبراسیون پوسته ی بیضوی به پوسته کروی تغییر می یابد و مرکز کره نیز به مبدأ مختصات سیستم سه بعدی تغییر مکان میدهد.



شکل ۴: میدان مغناطیسی اندازه گیری شده توسط قطب نمای اختلال یافته و نتیجه کالیبره شده آن

همانگونه که قبلاً بیان شد، برای تغییرات واضح پوسته کروی به بیضی گون به دلیل اختلال بوجود آمده توسط اثر فلز نرم، نمونه ای نسبتاً بزرگ انتخاب شده است. با شبیه سازی تست مذکور، دقیقاً همین نتیجه برای شبیه سازی نیز بدست می آید. شکل 5a و 5b به ترتیب نتیجه شبیه سازی برای اندازه گیری مختل شده و کالیبره شده را نشان میدهد.



شکل ۵: شبیه سازی میدان مغناطیسی قطب نمای اختلال یافته و کالیبره شده

جهت بررسی تاثیر اجسام مغناطیسی را بر روی اندازه گیری سنسور مغناطیسی، یک استوانه از جنس استیل به عنوان جسم مغناطیسی اختلالی استفاده کرده ایم که اطلاعات آن ها در جدول ۱ آمده است.

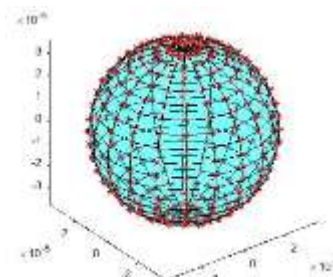
جدول ۱: مشخصات قطعه مغناطیسی استفاده شده

	Steel grade	μ_r	Size (height, diameter) cm
1	Type 420(Martensitic)	950	h=2.8, d=10

لازم به ذکر است که برای بیشتر شدن تاثیر اختلال، قطعه ای بزرگ با ضریب گذردهی های نسبتاً زیاد انتخاب شده است. در اینجا ما خطای سمت را با تغییر فاصله جسم تا سنسور و همچنین زاویه نسبی آنها بررسی کردیم. سنسور مغناطیسی مورد استفاده نیز یک سنسور ۳ محوره *magneto-resistive* با دقت 0.1mG میباشد.

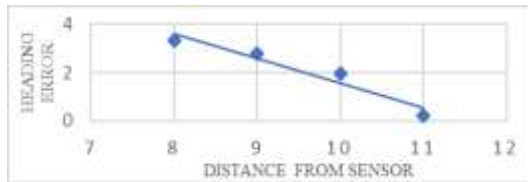
شبیه سازی

برای مقایسه با اندازه گیری های داده های تجربی، در شبیه سازی با کامسول دقیقاً وضعیت چیدمان آزمایشگاهی را در نظر گرفتیم. به دلیل نیاز به چرخش در مکانیسم کالیبراسیون مغناطیسی در شبیه سازی کامسول، ما یک میدان اعمالی چرخان ایجاد کردیم در حالی که موقعیت و جهت سنسور مغناطیسی ثابت است. در اینجا ما پتانسیل های اسکالر مختلفی به وجه های مخالف یک مکعب با جنس هوا اعمال کردیم که یک میدان مغناطیسی یکنواخت با اندازه $B = -\mu_0 \nabla V$ ایجاد میکند. اندازه میدان مغناطیسی نیز به اندازه میدان زمین (0.4 G) در نظر گرفته شده است. در این روش، پتانسیل صفر به یک وجه مکعب و پتانسیل اسکالر $V = B * \frac{L}{\mu_0}$ به وجه مخالف اعمال شده است که در آن L طول یال مکعب است. با چرخاندن مکعب در همه جهات، یک میدان مغناطیسی دوار به صورت شکل ۳ بدست می آید.

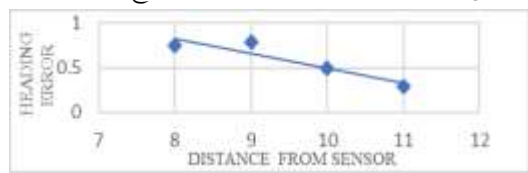


شکل ۳: میدان مغناطیسی شبیه سازی شده

مغناطیسی را در فواصل مختلف از سنسور در راستای محور X قرار دادیم. شکل ۹ و ۱۰ نشان می‌دهد که با افزایش فاصله، تاثیر استیل به روی سنسور و خطای سمت کاهش می‌یابد. لازم به ذکر است که با توجه نتایج حاصل شده، دریافت می‌شود که هرچقدر تاثیر جسم کمتر باشد الگوریتم کالیبراسیون نیز عملکرد بهتری دارد.



شکل ۹: خطای سمت بر حسب فاصله در نتایج اندازه گیری



شکل ۱۰: خطای سمت بر حسب فاصله در شبیه سازی کامسول

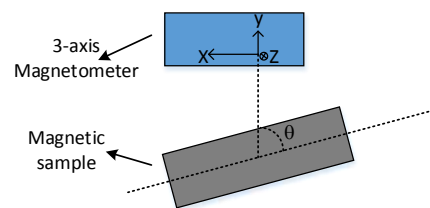
نتیجه گیری

در این کار ما یک سیستم کوئل هلمهولتز سه بعدی به همراه درایور آن برای کالیبراسیون مغناطیسی قطب نماهای مغناطیسی طراحی و ساخته ایم. ابتدا سیستم هلمهولتز کالیبره شده و سپس از سیستم کوئل جبران شده برای اعمال میدان مغناطیسی چرخان برای کالیبراسیون مغناطیس سنسور در مجاورت اجسام مغناطیسی استفاده شده است. این در حالیست که از شبیه ساز COMSOL نیز برای شبیه سازی سیستم مذکور بهره برده بردیم. با تغییر موقعیت نسبی نمونه مغناطیسی و سنسور، میزان خطای سمت بررسی شده است و مشاهده گردید که با تغییر زاویه نمونه دیسک مغناطیسی با فاصله ثابت از سنسور، خطای سمت در زاویه ۴۵ درجه کمینه است.

مرجع ها

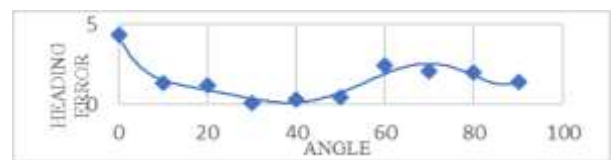
- [1] Michael J. Caruso, "Applications of Magnetoresistive Sensors in Navigation Systems," SAE Technical Paper 970602, 1997.
- [2] Michael J. Caruso, "Applications of magnetic sensors for low cost compass systems", Position Location and Navigation Symposium, IEEE 2000.
- [3] T.Ozyagcilar, "Layout recommendations for PCBs using a magnetometer sensor," Doc.No.AN4247, vol. A247, Re. 3, March 2012.
- [4] J M G Merayo, P Brauer, F Primdahl, J R Petersen and O V Nielsen, "Scalar calibration of vector magnetometers", Meas. Sci. Technol. 11, 120-132, 2000.

بر اساس روش اشاره شده، ما بوسیله اندازه گیری تجربی و همچنین شبیه سازی خطای سمت قبل و بعد از کالیبراسیون مغناطیسی را برای موقعیتهای نسبی مختلف نمونه نسبت به حسگر بررسی کردیم. در شکل ۶ وضعیت نسبی نمونه و حسگر برای بررسی تاثیر زاویه در بازه کالیبراسیون نشان داده شده است. در این تست نمونه در فاصله ۸ سانتیمتری از مغناطیس سنسور قرار گرفته و زاویه آن تغییر داده شده است. لازم به ذکر است که در شبیه سازی نیز دقیقاً همین سیستم طراحی و مورد شبیه سازی قرار گرفته است.

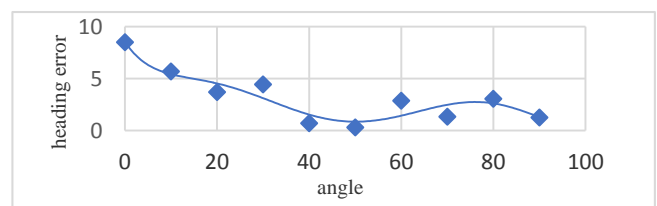


شکل ۶: شماتیک هندسی اندازه گیری

در هر زاویه میدان مغناطیسی را اندازه گرفتیم و خطای سمت را محاسبه کردیم. شکل های ۷ و ۸ خطای سمت را برای اندازه گیری تجربی و شبیه سازی نشان می‌دهد.



شکل ۷: خطای سمت بر حسب زاویه در اندازه گیری تجربی



شکل ۸: خطای سمت بر حسب زاویه در شبیه سازی کامسول

با توجه به این شکل ها مشخص است که خطای سمت مشاهده شده برای تست تجربی و شبیه سازی رفتار یکسانی دارد. و همچنین قابل توجه است که کمترین خطای سمت در حدود زاویه ۴۵ درجه رخ می‌دهد. با بررسی نتایج تجربی و شبیه سازی مشاهده می‌گردد که هرچقدر مسئله متقارن تر میشود خطای سمت و خطای کالیبراسیون کمتر میشود. به عنوان مشاهده دوم ما این جسم

تزویدگر پلاسمونیک تراهرتز مبتنی بر گرافن

حاج حسینی، علیرضا^۱؛ پور محی آبادی، مریم^۲

^۱ آزمایشگاه الکترونیک نوری، دانشکده فنی - بخش مهندسی برق، دانشگاه شهید باهنر کرمان

چکیده

در این مقاله یک تزویدگر پلاسمونیک مبتنی بر گرافن با نرخ انتقال بالا که در فرکانس تراهرتز عمل می‌کند، پیشنهاد شده است. طرح پیشنهادی، یک طرح پلکانی شامل لایه‌های گرافن، سیلیکا و نقره می‌باشد. دلیل استفاده از گرافن در ساختار، برخورداری از پلاسمون پلاریتون‌های سطحی جهت افزایش سرعت و کاهش تلفات است. میزان انتقال در لایه گرافن خروجی با توجه به تغییر پتانسیل شیمیایی گرافن و همچنین ابعاد ساختار قابل کنترل می‌باشد. نتایج تحلیل عددی نشان می‌دهد که نرخ انتقال در خروجی نسبت به ساختارهای مشابه به میزان بیش از ۲۰ درصد بهبود یافته است. این ساختار دارای بازدهی تزوید حدود ۷۰ درصد است. ساختار پیشنهادی پتانسیل کاربرد در فیلترها، مالتی‌پلکسرها، سوئیچ‌های پلاسمونیک و مدارهای مجتمع نوری را داراست.

کلیدواژه - تزویدگر نوری، تزویدگر پلاسمونیک، فیلتر، گرافن

Graphene-Based Terahertz Plasmonic Coupler

Hajhosseini, Alireza¹; Pourmahyabadi, Maraym²

^{1,2} Optoelectronic Laboratory, Electrical Engineering Department, Shahid Bahonar University of kerman

Abstract

In this paper, a graphene based coupler, operating at terahertz frequency range with a high transition rate has been proposed. The proposed design is a step shape structure consisting of graphene, silica and silver layers. The significant property of graphene is creating the surface plasmon polaritons, which give rises to increase the operating speed and to decrease the loss. The transmission rate is controllable by changing the graphene chemical potential and the structure dimensions. The numerical results revealed that the transition rate of this structure has been improved by more than 20% compared to other structures. The proposed structure has a coupling efficiency of about 70%. In addition, it has the potential applications for filters, multiplexers, switches and photonic integrated circuits.

Keywords-Filter, Graphene, Optical Coupler, Plasmonic Coupler

PACS NO.85

مقدمه

مدولاتورها و سوئیچ‌های نوری مبتنی بر پلاسمون پلاریتون‌های سطحی طراحی شده‌اند [۲]. تزویدگرهای پلاسمونیک تقریباً از سال ۲۰۰۵ میلادی مورد مطالعه قرار گرفتند [۳]. استفاده از گرافن به عنوان فلز در ساختارهای پلاسمونیک باعث بهبود و پیشرفت این نوع تزویدگرها شد. در سال‌های اخیر گرافن به دلیل تلفات

پیشرفت و توسعه در زمینه محاسبات و مدارات مجتمع نوری، مستلزم سرعت بالا، تلفات کم، کوچک کردن و مجتمع‌سازی ادوات نوری می‌باشد. استفاده از پلاسمون پلاریتون‌های سطحی در مدارات مجتمع نوری، راهکاری جدید برای موارد ذکر شده است [۱]. ادوات نوری مختلفی نظیر تزویدگرها، مقسم‌های نوری،

عدم عبور پلاسمون پلاریتون‌های سطحی، در برخی طول موج‌های ورودی، عدم تطابق امیدانس بین پلاسمون‌های سطحی و لایه بستر (سیلیکا) می‌باشد.

بنابراین تنها طول موج‌هایی بین لایه های گرافن ساختار پیشنهادی تزویج خواهند شد که شرط رزونانس لایه‌های دوم و سوم را تامین کنند. با توجه به ابعاد ساختار و همچنین پتانسیل شیمیایی گرافن برخی از طول موج‌ها در بازه‌های مشخص حذف و باقی طول موج‌ها با نرخ خوب انتقال پیدا خواهند کرد. میزان رسانایی گرافن توسط فرمول کوبو^۱ به صورت زیر تعریف می‌شود [۶]:

$$\sigma(\omega, \mu_c, \Gamma, T) = \frac{je^2}{\pi\hbar^2(\omega - j2\Gamma)} \int_0^\infty \varepsilon \left(\frac{\partial f_d(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} - \frac{\partial f_d(-\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon \quad (۱)$$

$$- \frac{je^2(\omega - j2\Gamma)}{\pi\hbar^2} \int_0^\infty \frac{f_d(-\varepsilon) - f_d(\varepsilon)}{(\omega - j2\Gamma)^2 - 4(\varepsilon/\hbar)^2} d\varepsilon$$

ω فرکانس زاویه‌ای، μ_c پتانسیل شیمیایی، \hbar ثابت پلانک کاهش‌یافته و T دما می‌باشد. e میزان بار الکتریکی الکترون است.

توزیع فرمی-دیراک^۲ به صورت زیر تعریف خواهد شد:

$$f_d(\varepsilon) = (e^{(\varepsilon - \mu_c)/k_B T} + 1)^{-1} \quad (۲)$$

رسانایی موضعی گرافن، همگن و میدان مغناطیسی خارجی ناچیز در نظر گرفته شده است. بخش‌های اول و دوم رابطه ۱ مربوط به رسانایی درون‌باند و میان‌باند می‌باشند که به صورت زیر تعریف خواهند شد:

$$\sigma_{\text{intra}} = -j \frac{e^2 k_B T}{\pi\hbar^2(\omega - j2\Gamma)} \left[\frac{\mu_c}{k_B T} + 2 \ln \left(e^{(-\mu_c/k_B T)} + 1 \right) \right] \quad (۳)$$

$$\sigma_{\text{inter}} \approx \frac{-je^2}{4\pi\hbar} \ln \left(\frac{2|\mu_c| - (\omega - j2\Gamma)\hbar}{2|\mu_c| + (\omega - j2\Gamma)\hbar} \right) \quad (۴)$$

در ناحیه $k_B T \ll |\mu_c|$ و $\hbar\omega \ll 2\mu_c$ بخش حقیقی رسانایی گرافن مقداری کوچک و بخش موهومی آن مثبت است. گرافن به عنوان دی‌الکترون با ضریب نفوذپذیری ε_{eq} شناخته می‌شود [۷]:

$$\varepsilon_{eq} = 2.5 + i \frac{\sigma_g}{\omega \varepsilon_0 \Delta} \quad (۵)$$

^۱ Kubo
^۲ Fermi-Dirac

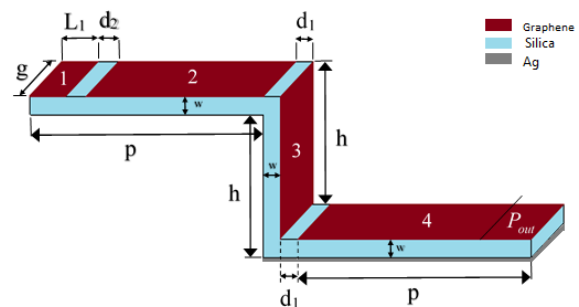
کم، طول انتشار زیاد، قابلیت تنظیم‌پذیر بودن و ابعاد کمتر در مقابل سایر فلزات به شدت مورد توجه قرار گرفته است [۴].

تغییر پتانسیل شیمیایی گرافن، باعث کنترل پراکندگی و افزایش یا کاهش ثابت انتشار پلاسمون های سطحی موضعی می‌شود. همچنین ویژگی‌های گرافن اثر بسزایی در تنظیم نرخ انتقال، حذف اعوجاج ناشی از عدم تطبیق ثابت شبکه ساختار کلی دارد، علاوه بر این گرافن دارای عملکرد مناسب در بازه تراهنتری است.

در این مقاله تزویج گر پلاسمونیک مبتنی بر گرافن ارائه و مورد تحلیل قرار گرفته است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که میزان انتقال در لایه گرافن خروجی، قابل تنظیم توسط پارامتر d_1 ، h و همچنین پتانسیل شیمیایی لایه گرافن است. پتانسیل شیمیایی گرافن توسط اعمال ولتاژ خروجی تنظیم خواهد شد.

ساختار پیشنهادی و تئوری

ساختار پیشنهادی (شکل ۱) از چهار لایه گرافن، یک لایه بستر از جنس سیلیکا و یک لایه بسیار باریک نقره (زیر بستر لایه گرافن چهارم) جهت برقراری ولتاژ مورد نظر به گرافن تشکیل شده است. لایه‌های گرافن اول و دوم در فاصله d_2 و به صورت متوالی قرار گرفته‌اند. لایه‌ی دوم و چهارم در فاصله d_1 از لایه گرافن عمودی قرار دارند.

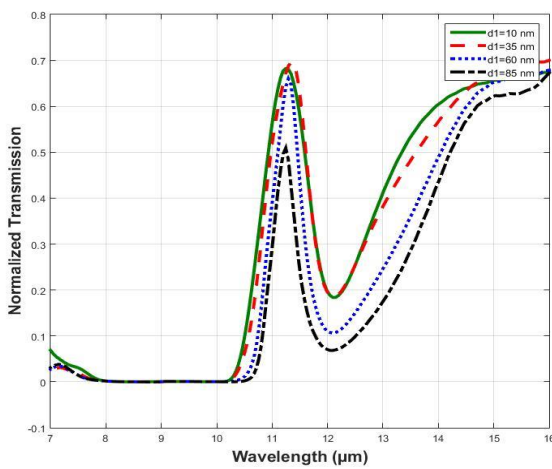


شکل ۱: طرح ساختار پیشنهادی

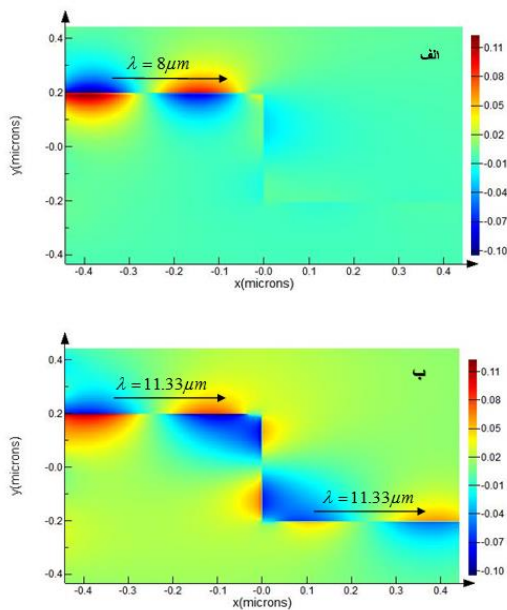
لایه‌های گرافن موجود در ساختار ارائه شده، پلاسمون پلاریتون‌های سطحی را در موارد زیر منتشر خواهند کرد:

۱- مدهای لبه ۲- مدهای متقارن و نامتقارن، که به دلیل عدم تقارن توزیع میدان الکترومغناطیسی در سراسر فاصله بین دو لایه گرافن مورد نظر ایجاد شده است [۵]. به دلیل فواصل کم تزویج برخی از پلاسمون پلاریتون‌های سطحی منتشر شده در انتهای لایه‌های گرافن اول، دوم و سوم، بازتاب خواهند شد. یکی از دلایل

شکل ۲ میزان انتقال خروجی را برحسب طول موج و با تغییر فاصله d_1 نشان می‌دهد. با افزایش میزان d_1 نرخ انتقال هم کاهش یافته است اما این کاهش انتقال در طول های تزویج 60nm و 85nm به خوبی قابل مشاهده است. با تغییر فاصله تزویج d_1 شرط تشدید لایه گرافن دوم تغییر می‌کند و برخی طول موج‌ها بدلیل عدم نزدیکی به طول موج تشدید لایه های دوم و سوم، حذف خواهند شد. در این طیف (شکل ۲) فاصله تزویج d_2 ثابت و برابر 10nm در نظر گرفته شده است. شکل ۳ توزیع میدان مغناطیسی H_z را نشان می‌دهد.



شکل ۲: طیف انتقال خروجی بر حسب فواصل مختلف d_1



شکل ۳: توزیع میدان H_z الف: طول موج $\lambda=8\mu\text{m}$ ، ب: طول موج $\lambda=11.33\mu\text{m}$

Δ ضخامت لایه گرافن است. در ساختار پیشنهادی ضخامت تمامی لایه‌های گرافن 1nm در نظر گرفته شده است. مقدار ضخامت لایه گرافن در میزان نفوذپذیری الکتریکی آن بسیار تاثیرگذار می‌باشد. در ناحیه $k_B T \ll |\mu_c|, \hbar\omega \ll 2\mu_c$ رسانایی میان‌باند گرافن تقریباً برابر صفر شده و رسانایی کلی برابر با رسانایی درون‌باند می‌باشد:

$$\sigma \approx \sigma_{\text{intraband}} \approx \frac{ie^2\mu_c}{\pi\hbar^2(\omega + i\tau^{-1})} \quad (6)$$

همچنین درون این ناحیه ϵ_{eq} دارای مقداری منفی و قسمت موهومی کوچک و به دنبال آن گرافن را می‌توان به عنوان ماده با خاصیت پلاسمونیک نیز در نظر گرفت. ابعاد ساختار به صورت $d_2=10\text{nm}$, $d_1=10\text{nm}$, $L_1=100\text{nm}$, $p=1\mu\text{m}$, $h=400\text{nm}$, $g=100\text{nm}$ و $w=10\text{nm}$ تعریف شده‌اند. ضخامت لایه نقره (زیر بستر لایه گرافن چهارم) نیز 1nm می‌باشد. همانطور که بیان شد میزان رسانایی لایه گرافن ارتباط مستقیمی با غلظت حامل‌های آن دارد. تغییر غلظت حامل‌ها از طریق اعمال ولتاژ خارجی انجام خواهد گرفت. غلظت حامل‌ها به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$n_s = \frac{2}{\pi\hbar^2 v_F^2} \int_0^\infty \epsilon(f_d(\epsilon) - f_d(\epsilon + 2\mu_c)) d\epsilon \quad (7)$$

$$\text{در } \mu_c = 0.45 \text{ eV و } \mu = 10000 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s}), v_F = 10^6 \text{ m/s}$$

نظر گرفته شده است. با اعمال ولتاژهای مختلف به لایه‌های گرافن میزان پتانسیل شیمیایی کنترل خواهد شد. با توجه به متغیر بودن پتانسیل شیمیایی، میزان رسانایی گرافن نیز متغیر بوده و انتشار پلاسمون پلاریتون‌های سطحی کنترل پذیر است.

شبیه سازی و نتایج

تحلیل ساختار با استفاده از نرم‌افزار FDTD^3 انجام شده‌است. شکل ۲ طیف انتقال $T=(P_{\text{out}}/P_{\text{in}})$ را برای فواصل مختلف d_1 و در بازه‌ی طول موج $7\mu\text{m}$ الی $16\mu\text{m}$ نشان می‌دهد. طول L_1 ثابت و با تغییر طول لایه گرافن دوم و چهارم، فاصله d_1 تنظیم خواهد شد. لایه گرافن ۱ به عنوان ورودی و لایه ۴ خروجی ساختار در نظر گرفته شده‌اند.

³ Finite Difference Time Domain

نتایج نشان می‌دهد که در ابعاد $d_1=10\text{nm}$ و $h=400\text{nm}$ طیف انتقال در طول موج $\lambda=11.33\mu\text{m}$ یک قله تشدید از خود نشان خواهد داد. همچنین طول موج‌های $8\mu\text{m}$ الی $10\mu\text{m}$ به دلیل عدم تطبیق امپدانس حذف خواهند شد. طول موج‌های ورودی در این بازه همچنین بدلیل عدم نزدیکی به طول موج تشدید لایه‌های ۲ و ۳ اجازه عبور پیدا نخواهند کرد. در نتیجه تزویج گر پیشنهادی در بازه طول موج $8\mu\text{m}$ الی $14\mu\text{m}$ مشابه یک فیلتر نوری عمل می‌کند.

نتیجه گیری

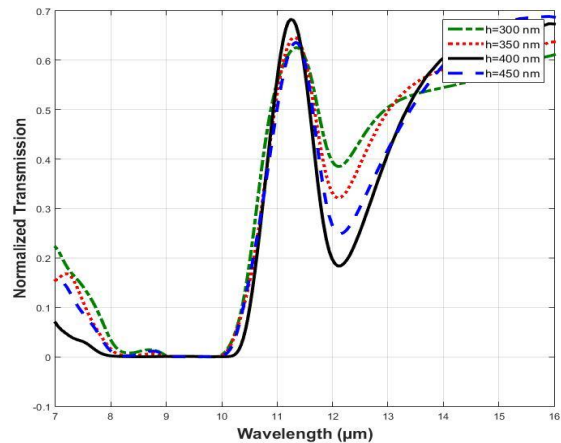
در این مقاله ساختار یک تزویج گر پلاسمونیک مبتنی بر گرافن ارائه و تحلیل شده است. طیف انتقال برحسب تغییر پارامترهای (h, d_1) و هم چنین تغییر پتانسیل شیمیایی بررسی شد. همانطور که نتایج نشان می‌دهد، می‌توان با تغییر پتانسیل شیمیایی لایه گرافن از طریق اعمال ولتاژ خروجی به آن، توان خروجی را به خوبی کنترل کرد.

بیشترین نرخ انتقال ساختار فوق برای ساختاری با ابعاد $d_1=20\text{nm}$ و $h=400\text{nm}$ در حدود ۷۰ درصد بدست آمد. نتایج نشان می‌دهد که ساختار فوق در قیاس با ساختارهای متناظر آن دارای بهبود بیش از ۱۹ الی ۲۰ درصد می‌باشد [۸].

مراجع

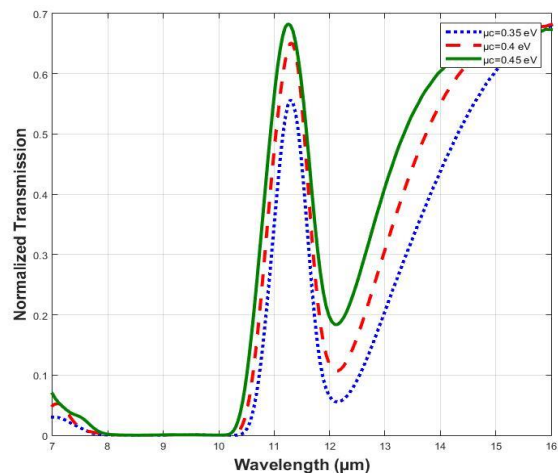
- [1] Wu, Wenjun, Junbo Yang, and Dingbo Chen. "Plasmonic Beam Deflector and Optical Coupler." *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 29, No. 18, pp. 1592-1595, 2017.
- [2] He, Meng-Dong, Kai-Jun Wang, Lei Wang, Jian-Bo Li, Jian-Qiang Liu, Zhen-Rong Huang, Lingling Wang, Lin Wang, Wei-Da Hu, and Xiaoshuang Chen. "Graphene-based terahertz tunable plasmonic directional coupler," *Applied Physics Letters*, vol. 105, No. 8, pp. 081903, 2014.
- [3] Shalae, Vladimir M. "Coupling light to nanostructures via plasmons," In *2005 IEEE LEOS Annual Meeting Conference Proceedings*, pp. 280-281, 2005.
- [4] Chamanara, Nima, Dimitrios Sounas, and Christophe Caloz. "Non-reciprocal magnetoplasmon graphene coupler," *Optics express*, vol. 21, No. 9, pp. 11248-11256, 2013.
- [5] Wang, Bing, Xiang Zhang, Xiacong Yuan, and Jinghua Teng. "Optical coupling of surface plasmons between graphene sheets," *Applied Physics Letters*, vol. 100, No. 13, pp. 131111, 2012.
- [6] Hanson, George W. "Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene," *Journal of Applied Physics*, vol. 103, No. 6, pp. 064302, 2008.
- [7] Xiao, Binggang, Runliang Sun, Jinlong He, Kang Qin, Sheng Kong, Jing Chen, and Wang Xiumin. "A terahertz modulator based on graphene plasmonic waveguide," *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 27, No. 20, pp. 2190-2192, 2015.
- [8] Li, Hong-Ju, Ling-Ling Wang, Zhen-Rong Huang, Bin Sun, and Xiang Zhai. "Tunable mid-infrared plasmonic anti-symmetric coupling resonator based on the parallel interlaced graphene pair," *Plasmonics*, vol. 10, No. 1, pp. 39-44, 2015.

شکل ۴ منحنی انتقال ساختار را با تغییر پارامتر h در حالی که سایر پارامترها به صورت $L_1=100\text{nm}$, $w=10\text{nm}$, $p=1\mu\text{m}$, $d_2=10\text{nm}$, $d_1=10\text{nm}$ تنظیم شده‌اند را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود بهترین خروجی در $h=400\text{nm}$ بدست خواهد آمد و هر چه طول لایه گرافن عمودی افزایش یابد خاصیت فیلترینگ مدار، مخصوصاً در بازه $8\mu\text{m}$ الی $14\mu\text{m}$ بهبود پیدا می‌کند.



شکل ۴: طیف انتقال ساختار برحسب تغییرات طول لایه گرافن سوم

شکل ۵ مشخصه انتقالی ساختار را برحسب طول موج و براساس تغییر پتانسیل شیمیایی لایه‌های گرافن نشان می‌دهد. مشاهده می‌کنیم که با کاهش پتانسیل شیمیایی لایه‌های گرافن، پیک انتقال در بازه طول موج مورد نظر و همچنین ثابت انتشار پلاسمون‌های سطحی کاهش یافته است.



شکل ۵: طیف انتقال ساختار برحسب تغییرات پتانسیل شیمیایی

ناهمسانگردی مغناطیسی در ساختارهای نامتجانس یک و دو لایه کبالت / فسفرین

حسینی^۱، سیدحمیدرضا^۱؛ حمدی^۲، محمد^۲؛ حدادی^۲، فاطمه^۲؛ رحیمی^۱، کورش^۱؛ برکاتی^۱، بهراد^۱؛ صادقی^۱، علی^۲؛ محسنی^۱، سید مجید^۲

^۱ دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

^۲ دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی، تهران

چکیده

افزایش ناهمسانگردی مغناطیسی عمودی در ساخت ابزارهای جدید اسپینترونیک مانند اتصالات تونلی مغناطیسی اهمیت فراوانی دارد. در این پژوهش ناهمسانگردی مغناطیسی یک ساختار دو لایه‌ای متشکل از یک و دو لایه کبالت / فسفرین را با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار داده‌ایم. نتایج نشان می‌دهد که با وجود برهم کنش اسپین-مدار ضعیف فسفرین در ساختارهای نامتجانس مورد بررسی، ناهمسانگردی مغناطیسی کبالت به دلیل هیبریدشدگی اوربیتال‌ها در فصل مشترک به میزان قابل توجهی افزایش می‌یابد. این ناهمسانگردی در ساختار تک لایه کبالت / فسفرین در جهت موازی با صفحه و در ساختار دو لایه کبالت / فسفرین عمود به صفحه ساختار است.

Magnetic anisotropy in single and bilayer Cobalt / Phosphorene heterostructures
Hoseiny, Seyyed Hamidreza¹; Hamdi, Mohammad²; Haddadi, Fatemeh²; Rahimi, Kourosh¹; Barakati, Behrad¹ ;
Sadeghi, Ali²; Mohseni, Seyyed Majid²

¹ Faculty of basic science, University of Tarbiat modares, Tehran,

² Department of Physics, Shahid Beheshti University, Tehran

Abstract

Perpendicular magnetic anisotropy enhancement in fabrication of new spintronic devices such as magnetic tunnel junctions are of great importance. In this research magnetic anisotropy in a bilayer system consisted of single- and bi-layer Cobalt/Phosphorene is considered using density functional theory (DFT). Results show that in spite of weak spin-orbit interaction of Phosphorene, in this heterostructures magnetic anisotropy of cobalt atoms significantly increases because of orbital hybridization. This anisotropy is in plane in the monolayer Cobalt/ Phosphorene and perpendicular in the double layer Cobalt /Phosphorene heterostructures.

PACS No.

گردیده است که این ناهمسانگردی می‌تواند حتی در حضور مواد با برهم کنش اسپین-مدار کاملاً ضعیف نیز در این نوع ساختارهای نامتجانس به وجود آید. علت این امر که با محاسبات دست اولی هم تایید گردیده است هیبریدشدگی اوربیتال‌ها بین اکسیژن و فلز مغناطیسی در فصل مشترک است [۲]. از طرفی مشخص گردیده که برای تغییر مغناطش یک ماده فرومغناطیس با استفاده از جریان قطبشی بر روی صفحه در فصل مشترک‌ها بیشترین سهم مربوط به گشتاورهای شبه میدان ناشی از برهمکنش تبادل $s-d$ است و این گشتاور به ضخامت دو لایه بستگی ندارد [۳]. به همین لحاظ مطالعه

مقدمه

یکی از اهداف مهم در پژوهش‌های اسپینترونیک، طراحی ساختارهای چند لایه‌ای مغناطیسی در ابعاد نانو با ناهمسانگردی مغناطیسی عمود به صفحه (PMA) به منظور ساخت ابزارهای مبتنی بر گشتاورهای اسپین-مداری (SOT) و یا گشتاورهای انتقالی اسپینی (STT) است [۱]. ناهمسانگردی مغناطیسی معمولاً در موادی مشاهده می‌شود که برهم کنش اسپین-مدار بزرگی داشته باشند. اما با مشاهده PMA در اتصالات تونلی مغناطیسی متشکل از فصل مشترک‌های مواد مغناطیسی / اکسیدهای فلزی مشخص

و ۲۸ اتم برای ساختار دولایه کبالت/فسفرین به دست می‌آید. جهت کمینه کردن نیرو و تشکیل ساختار پهنه از شبه پتانسیل‌های فوق نرم با گرید بندی $12 \times 6 \times 1$ در راستای x, y, z استفاده شده است. استرین وارد بر لایه فسفرین در حدود ۱,۵ درصد و فاصله به دست آمده بین دو لایه در ساختار ریلکس شده ۲,۳ آنگستروم می‌باشد. برای انجام محاسبات خود سازگار با در نظر گرفتن برهم کنش اسپین-مدار از پتانسیل‌های نسبی و روش موج افزایش یافته تصویری PAW استفاده شده است. مغناطش ساختار به صورت غیر هم ردیف در نظر گرفته شده و برای جمله تبدیلی-همبستگی در معادله کوهن-شم از تقریب شیب تعمیم یافته GGA بهره گرفته شده است. به منظور به دست آوردن حالت پایه سیستم و بنابراین جهت مرجع مغناطش در ساختار، محاسبات یک بار با مغناطش عمود به صفحه و یک بار با مغناطش روی صفحه انجام و اختلاف انرژی در دو حالت محاسبه گردیده است.

نتایج

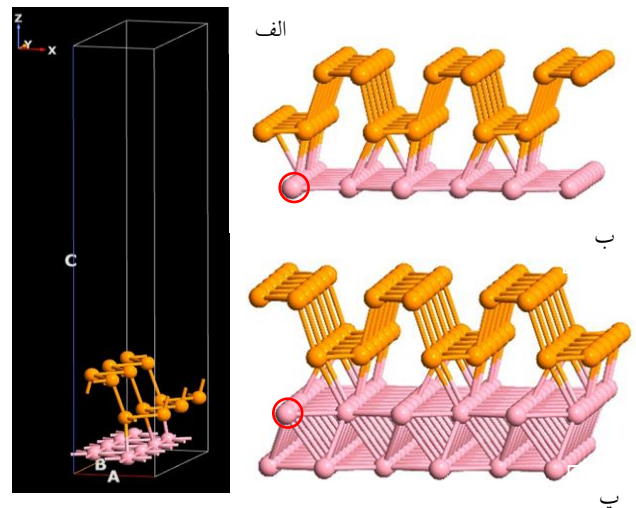
در محاسبات انجام شده بر مبنای شبه پتانسیل مورد استفاده مقدار انرژی قطع برای تابع موج برابر 60 Ry و برای انرژی جنبشی الکترونی برابر 250 Ry در نظر گرفته شد. محاسبات در سه جهتگیری مختلف مغناطیسی عمود به صفحه، بر روی صفحه با زاویه سمتی صفر و بر روی صفحه با زاویه سمتی 90° اجرا گردید. نتایج به دست آمده برای ساختار تک لایه کبالت/فسفرین در جدول یک نشان داده شده است. همچنین در این جدول نتایج مربوط به یک تک لایه کبالت به منظور مقایسه آورده شده است.

جدول ۱: انرژی کل در زوایای مختلف مغناطش در ساختار تک لایه کبالت/فسفرین و انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی به دست آمده.

جهت مغناطش	$\Delta E(\theta(90)-\theta(0))$	انرژی کل (Ry)	زاویه مغناطش
		-3680.21876200	$\theta=0$
بر صفحه	$\sim -1.71 \text{ meV}$	-3680.21888767	$\theta=90$; $\varphi=0$
بر صفحه	$\sim -1.19 \text{ meV}$	-3680.21884972	$\theta=90$; $\varphi=90$
بر صفحه	$\sim -0.5 \text{ meV}$	تک لایه کبالت	

بر روی ساختارهای دولایه‌ای متشکل از مواد فرومغناطیس و مواد دوبعدی از اهمیت به سزایی برخوردار است. در این بین فسفرین به دلیل داشتن گاف نواری مناسب و همچنین تحرک الکترونی نسبتاً بالا می‌تواند گزینه مناسبی جهت ساخت ابزارهای اسپینترونیکی باشد [۴].

در این پژوهش ما ناهمسانگردی مغناطیسی را در دو ساختار دولایه‌ای متشکل از یک لایه کبالت/فسفرین شکل ۱ (الف و ب) و دولایه کبالت/فسفرین شکل ۱ (پ)، مورد بررسی قرار داده‌ایم. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد با وجود برهم کنش اسپین-مدار ضعیف فسفرین، هیبریدشدگی اوربیتالی در فصل مشترک کبالت/فسفرین به دلیل ایجاد برهم کنش اسپین-مدار راشبا باعث تقویت قابل ملاحظه ناهمسانگردی مغناطیسی کبالت شده اما جهت مغناطش لایه کبالت را تغییر نمی‌دهد.



شکل ۱: سوپرسل (الف) و ساختار تک لایه کبالت فسفرین (ب)، ساختار دولایه کبالت/فسفرین (پ). در سوپرسل ساخته شده در راستای محور Z به اندازه 15 آنگستروم فاصله گذاشته شده تا از برهم کنش با لایه های دیگر جلوگیری شود.

روش‌های محاسباتی

محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) و روش شبه پتانسیل و با استفاده از بسته نرم افزار کوانتوم اسپرسو اجرا شده است. به دلیل ناهمگونی ساختار هندسی شبکه کبالت (شش ضلعی) و فسفرین (اورترومبیک) سوپرسل تشکیل شده به صورت اورترومبیک با تعداد 20 اتم برای ساختار تک لایه کبالت/فسفرین

برای این منظور چگالی حالات تصویر شده اوربیتال ۳d یک عنصر کبالت در ساختار دولایه کبالت/فسفرین را که در شکل ۱ (پ) با دایره قرمز مشخص شده، مورد بررسی قرار می‌دهیم. با در نظر گرفتن برهم کنش اسپین-مدار در هامیلتونی سیستم، اوربیتال ۳d به دو اوربیتال با اندازه حرکت‌های زاویه‌ای کل $J=5/2$ و $J=3/2$ شکافته می‌شود. هامیلتونی اسپین-مدار را می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم:

$$H = -\alpha \langle L.S \rangle \quad (1)$$

$$\langle L \rangle = \langle L_{//} \rangle + \langle L_{\perp} \rangle \quad (2)$$

با توجه به این هامیلتونی، اگر تکانه زاویه‌ای مداری در سیستم را با دو مولفه عمود به صفحه و موازی با صفحه xy در نظر بگیریم چنانچه هر کدام از این دو مولفه بزرگتر باشد جمله $L.S$ در آن جهت بزرگتر بوده و می‌توان پیش بینی کرد که اسپین‌ها و در نتیجه مغناطش سیستم در آن راستا قرار می‌گیرد. اندازه حرکت زاویه‌ای مداری در سیستم با رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\langle L_{x,y,z} \rangle = \sum_{N_i} \sum_{j,m_j} \int D(\epsilon) \langle L_{x,y,z}^{j,m_j} \rangle d\epsilon \quad (3)$$

که در آن مقدار چشمداشتی اندازه حرکت زاویه‌ای در هر راستا بصورت انتگرال حاصلضرب چگالی حالات انرژی $D(\epsilon)$ در مقدار چشمداشتی اندازه حرکت زاویه‌ای اتمی و سپس جمع بر روی همه حالات کوانتومی و در نهایت جمع بر روی تمام اتم‌ها N_i به دست می‌آید.

در شکل ۲، PDOS مربوط به اوربیتال ۳d را برای $J=3/2$ در دو زاویه مختلف مغناطش بر روی صفحه $(\theta=90, \phi=0)$ و عمود به صفحه $(\theta=0)$ رسم کرده‌ایم.

مشاهده می‌شود که میزان جداسازی نمودارهای PDOS برای $m_j = \pm 1/2$ و $m_j = \pm 3/2$ در حالت مغناطش عمود به صفحه بیشتر از حالت مغناطش بر روی صفحه است. این موضوع به معنی بزرگتر بودن ضریب چگالی حالات در اندازه‌گیری مقدار اندازه حرکت زاویه‌ای عمود به صفحه در رابطه (۳) و در نتیجه نشان

ملاحظه می‌شود که حالت پایه انرژی مربوط به مغناطش بر روی صفحه با زاویه سمتی صفر است. از نتایج به دست آمده می‌توان مشاهده کرد که در اثر هیبریدشدگی اوربیتال‌ها در فصل مشترک ساختار جهت مغناطش تغییری نکرده ولی مقدار آن از 0.5 meV به 1.71 meV در حالت پایه انرژی رسیده است.

به دلیل ساختار نامتقارن فسفرین محاسبات را برای یک سمتگیری دیگر مغناطش با زاویه سمتی ۹۰ درجه نیز انجام داده‌ایم. مقدار انرژی به دست آمده کمتر از حالت با مغناطش عمود به صفحه است ولی مقدار آن از حالت پایه بیشتر است.

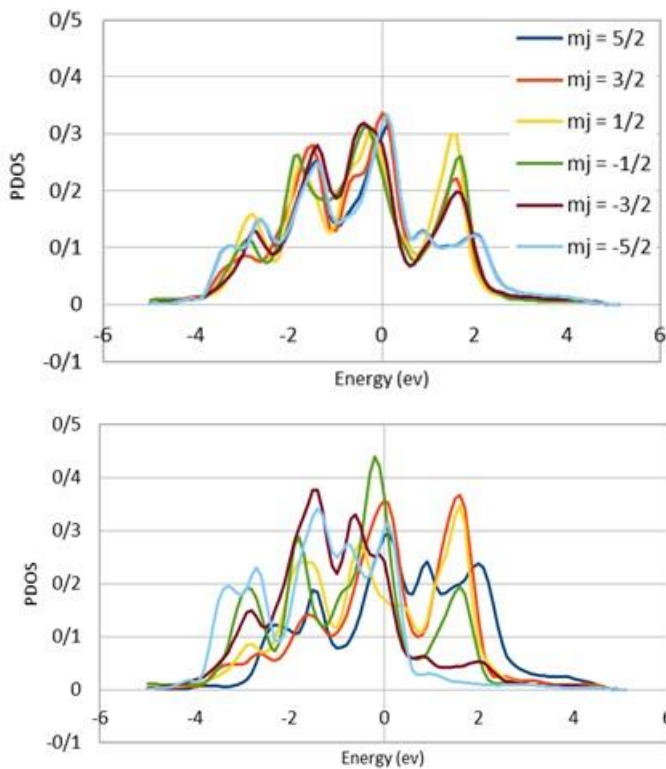
نتایج مربوط به ساختار دولایه کبالت/فسفرین در جدول ۲ نشان داده شده است. در مورد یک دولایه‌ای کبالت، جهت مغناطش به دست آمده عمود به صفحه است. باز هم مشاهده می‌شود که با اضافه شدن لایه فسفرین و هیبرید شدگی در فصل مشترک این ناهمسانگردی در مغناطش کبالت همچنان عمود به صفحه است ولی مقدار آن افزایش می‌یابد.

ناهمسانگردی مغناطیسی عمود به صفحه به دست آمده در این ساختار قابل مقایسه با ناهمسانگردی ساختارهای متشکل از عناصر سنگین مانند Co/Pt است در صورتی که اتم فسفر در مقایسه با پلاتین دارای برهم کنش اسپین-مدار بسیار کوچک‌تری است. در واقع در اینجا به دلیل شکل گیری یک ساختار نامتقارن برهم کنش اسپین-مدار راشبا نقش مهمی ایفا می‌کند. به منظور توجیه تغییرات ناهمسانگردی در ساختارهای مورد مطالعه می‌توان از چگالی حالات تصویر شده (PDOS) اتم‌های کبالت در ساختار بهره گرفت.

جدول ۲: انرژی کل در زوایای مختلف مغناطش در ساختار دو لایه کبالت فسفرین و انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی به دست آمده.

زاویه مغناطش	انرژی کل (Ry)	$\Delta E(\theta(90)-\theta(0))$	جهت مغناطش
$\theta=0$	-6694.39476381		
$\theta=90$; $\phi=0$	-6694.39468147	~ 1.48 meV	عمود به صفحه
$\theta=90$; $\phi=90$	-6694.39465530	~ 1.12 meV	عمود به صفحه
دو لایه کبالت		~ 0.96 meV	عمود به صفحه

لایه فرومغناطیس می‌شود که این ناهمسانگردی در مورد ساختار تک لایه کبالت/ فسفرین موازی با صفحه ساختار بوده و در مورد ساختار دولایه کبالت/ فسفرین عمود به صفحه می‌باشد. این نتایج می‌توانند در طراحی ابزارهای تونلی مغناطیسی (MTJs) مورد توجه قرار گیرند.



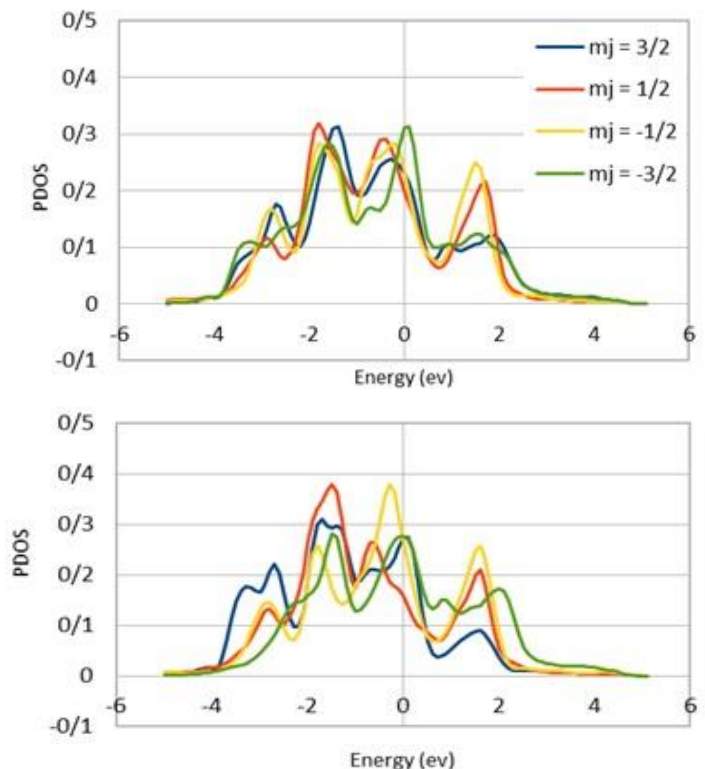
شکل ۳: چگالی حالات تصویر شده انرژی برای اوربیتال ۳d با اندازه حرکت زاویه‌ای کل $J=5/2$ برای دو جهتگیری مغناطش (الف) بر روی صفحه $\theta=90$ و (ب) عمود به صفحه $\theta=0$

مرجع‌ها

- [۱] B. Dieny and M. Chshiev; "Perpendicular magnetic anisotropy at transition metal/oxide interfaces and applications" *REVIEWS OF MODERN PHYSICS*, V 89; 2017
- [۲] Monso, S. et al; "Crossover from in-plane to perpendicular anisotropy in Pt/CoFe/AlOx as a function of the Al degree of oxidation"; *Appl. Phys. Lett.* 80, 4157-4159 (2002)
- [۳] V. P. Amin and M. D. Stiles; "Spin transport at interfaces with spin-orbit coupling: Formalism"; *PRB* 94, 104419 (2016)
- [۴] Z. S. Popović et al; "Electronic structure and anisotropic Rashba spin-orbit coupling in monolayer black phosphorus"; *PRB* 92, 035135 (2015)

دهنده افزایش میزان ناهمسانگردی مغناطیسی عمود به صفحه در این ساختار است.

در شکل (۳) چگالی حالات تصویری مربوط به اوربیتال $J=5/2$ را برای دو جهت‌گیری مغناطیسی بر روی صفحه و عمود به صفحه نشان داده‌ایم. باز هم جدا شدگی مقادیر مربوط به m_j یکسان با علامت مخالف در حالت مغناطش عمود به صفحه بسیار چشمگیرتر است. در واقع برای مغناطش بر روی صفحه مقادیر مختلف m_j در جمع رابطه (۳) یکدیگر را خنثی می‌کنند که این مسئله باعث به وجود آمدن مغناطش عمود بر صفحه می‌گردد.



شکل ۴: چگالی حالات تصویر شده انرژی برای اوربیتال ۳d با اندازه حرکت زاویه‌ای کل $J=3/2$ برای دو جهتگیری مغناطش (الف) بر روی صفحه $\theta=90$ و (ب) عمود به صفحه $\theta=0$

نتیجه‌گیری

در این پژوهش ناهمسانگردی مغناطیسی را در یک ساختار دولایه‌ای متشکل از یک و دولایه کبالت/فسفرین مورد مطالعه قرار دادیم. مشاهده شد که هیبریدشدگی اوربیتال‌ها در فصل مشترک این ساختارهای نامتقارن به دلیل بروز برهم کنش اسپین-مدار راشبا باعث افزایش قابل ملاحظه‌ای در ناهمسانگردی مغناطیسی

بهبود جذب مایکروویو با استفاده از نانوپوشش های نیکل بر روی پارچه های پلی استر

حقوقی فرد، صدیقه

بخش فیزیک، مرکز آموزش عالی اقلید، اقلید.

چکیده

پارچه های پلی استر توسط لایه نازکی از نانوساختار فلز نیکل با ضخامت ۲۰۰ نانومتر به روش الکترولس پوشش دهی شده اند. در این پژوهش تاثیر افزودنی ساخارین را در حمام الکترولس بر مورفولوژی، اندازه دانه بندی، خاصیت بلوری، مقاومت سطحی و خواص مغناطیسی که همگی حفاظ سازی مایکروویو را تحت تاثیر قرار می دهند، بررسی خواهیم کرد.

Improving the microwave absorption with Ni nano covers on the polyester fabrics

Hoghoghifard, Sedigheh

Department of Physics, Higher Education Center of Eghlid, Eghlid

Abstract

Polyester fabrics are coated uniformly by Nickel thin film nanostructure with 200 nm thickness by electroless plating method. This study investigates the effect of saccharin as an additive in plating solution, on the morphology, grain size, crystallinity, surface resistivity and magnetic properties of the coated fabrics which influences the microwave shielding strongly.

PACS No. 61, 68.

نیکل و کبالت از جمله عناصر فرومغناطیس می باشند [۱]. لایه نشانی لایه نازکی از این فلزات بر روی بسترهای مختلف، می تواند سطحی با خاصیت جذب امواج الکترومغناطیسی را ایجاد کند. بسترهای پارچه ای از جنس پلی استر با توجه به سبک، انعطاف پذیر و مقاوم بودن در محیط واکنش های شیمیایی، می توانند گزینه مناسبی به این منظور باشد. لایه نشانی به روش الکترولس در حمام های شیمیایی از جمله ساده ترین روش های لایه نشانی به صورت کاملاً یکنواخت بر روی سطوح نارسانا می باشد [۲ و ۳]. در اینجا نیکل به عنوان یک فلز فرومغناطیس به جهت لایه نشانی بر روی بسترهای پارچه ای پلی استر مورد استفاده قرار گرفته است.

روش کار

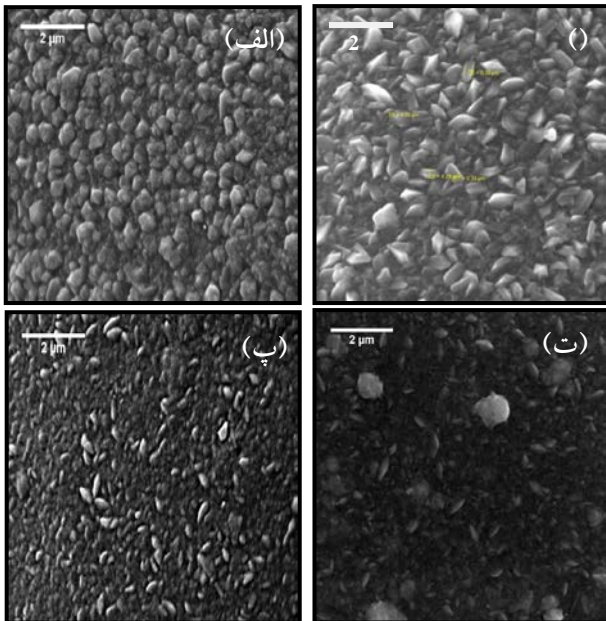
مقدمه

در میان انواع مواد مغناطیسی، فرومغناطیس ها و فری مغناطیس ها زمانی که در معرض یک میدان مغناطیسی خارجی قرار گیرند، به دلیل هم راستایی گشتاورهای دوقطبی مغناطیسی اتم های تشکیل دهنده و در نهایت وجود برآیند گشتاور مغناطیسی غیر صفر گزینه های مناسبی به منظور استفاده به عنوان جاذب امواج الکترومغناطیسی مطرح می شوند. گشتاور مغناطیسی در هر یک از حوزه های تشکیل دهنده یک ماده فرومغناطیس در حضور میدان با یکدیگر هم راستا و با افزایش شدت میدان فرودی، به تدریج گشتاور کلیه حوزه ها با یکدیگر هم جهت و در جهت میدان قرار گرفته و کل ماده تبدیل به یک تک حوزه مغناطیسی می گردد. با حذف میدان فرودی، پس از مدت زمان کوتاهی ماده خاصیت مغناطیسی خود را از دست داده و به حالت اولیه باز می گردد. آهن،

الکترومغناطیسی پوشش های ایجاد شده مورد بررسی قرار گرفته است.

نتایج

مواد افزودنی از طریق جذب بر روی سطح کاتد، بر نحوه تشکیل بلورها و فرایند ایجاد پوشش تاثیر می گذارند. این مواد پس از جذب بر روی سطح زیر لایه، با تغییر پارامترهایی مانند غلظت مکان های رشد بر روی سطح، انرژی جذب سطحی و ضریب نفوذ ماده موجب تغییر فرایند رشد می گردند. جذب سطحی این مواد به دو صورت جذب فیزیکی و شیمیایی صورت می گیرد [۵، ۶ و ۸]. تصاویر گرفته شده از سطح پارچه های پوشش دهی شده نشان دهنده تغییر مورفولوژی ساختار از کروی شکل به سمت تیغه ای و همچنین کاهش اندازه ذرات می باشد. افزودنی با غلظت ۵ گرم در لیتر منجر به ایجاد لایه ای یکنواخت و پیوسته بر روی سطح با میانگین اندازه دانه بندی برابر با 10 ± 85 نانومتر و ضخامتی در حدود ۲۰۰ نانومتر گردیده است.

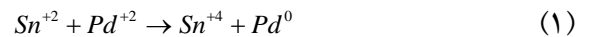


شکل ۱: تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از سطح الیاف پوشش دهی شده در حضور افزودنی ساخارین با غلظت های مختلف، الف) بدون افزودنی، ب) غلظت ۲، پ) غلظت ۵ و ت) غلظت ۱۰ گرم بر لیتر.

همچنین اندازه گیری ها بیانگر کاهش مقاومت سطحی نمونه ها با افزایش غلظت افزودنی تا ۵ گرم بر لیتر می باشد. این پدیده در نتیجه تغییر مورفولوژی ساختار، یکنواختی و پیوستگی

در این پژوهش، لایه نشانی لایه ای نازک و یکنواخت از فلز نیکل بر روی بستر پارچه ای پلی استر عایق با ضخامت ۲۰۰ نانومتر با استفاده از روش نشست الکتروشیمیایی صورت گرفته است. این فرایند از سه مرحله اصلی شامل سونش شیمیایی سطح، فعال سازی و لایه نشانی نیکل تشکیل می گردد.

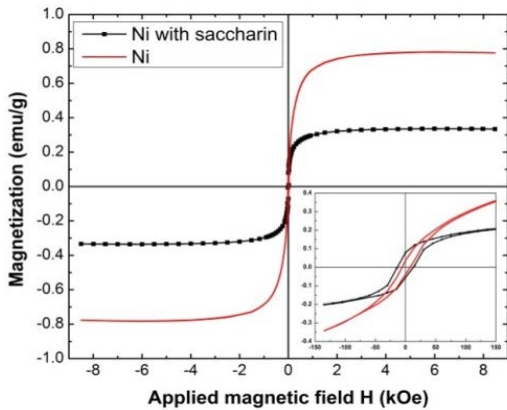
سونش شیمیایی سطح به منظور ایجاد حفره هایی بر روی سطح که از نظر شیمیایی فعال بوده و نقاط مناسبی برای جذب فعال کننده و رسوبات شیمیایی فلزات از طریق افزایش چسبندگی مکانیکی باشند، صورت می گیرد. در اینجا بسترها به مدت ۳۰ ثانیه در محلولی شامل سولفوریک اسید، کلریدریک اسید و آب اکسیژنه در دمای ۴۵ درجه سانتیگراد قرار گرفته و پس از شستشو با آب مقطر، جهت از بین بردن یون های موجود بر روی نمونه، بستر به مدت ۳۰ ثانیه در محلول ۲۰٪ سولفوریک اسید در دمای ۶۰ درجه سانتیگراد قرار می گیرد. در مرحله بعد، فعال سازی سطوح با استفاده از محلول پالادیوم کلراید و قلع کلراید در کلریدریک اسید صورت گرفته و به این منظور، بسترها را در حدود ۲ دقیقه در محلول ۴۰ درجه سانتیگراد قرار داده و در پی احیای یون های پالادیوم، نهایتاً اتم های فلزی پالادیوم بر روی بستر نشست خواهند کرد.



محلول نیکل الکترولس جهت لایه نشانی لایه نازک نیکل شامل نیکل سولفات و سدیم هیپوفسفات هر یک با غلظت $(\frac{g}{Lit})$ ۵ بوده و به منظور تنظیم pH محیط در حدود ۸-۷/۵ به هر لیتر از محلول ۴۰ میلی لیتر آمونیوم هیدراکسید اضافه می کنیم. لایه نشانی در دمای اتاق و با غوطه وری بستر به مدت ۳-۲ دقیقه انجام می شود. هر ذره پالادیوم، مرکز تجمع ذرات فلز نیکل به دور خود گردیده و نهایتاً فلز نیکل در سطح قطعه احیا می گردد.

در مرحله ای دیگر ساخارین به عنوان یک افزودنی آلی با فرمول شیمیایی $C_7H_5NO_3S$ با غلظت های $\frac{g}{Lit}$ ۱۰، ۵ و ۲ به حمام نیکل الکترولس افزوده و تاثیر آن در ساختار و خواص

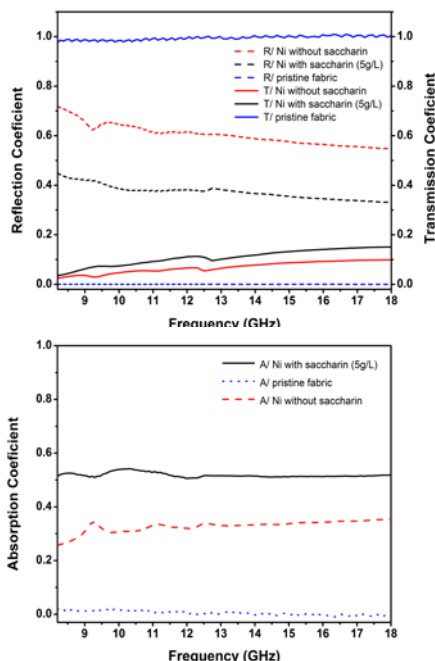
گردد. همچنین میدان وادارندگی و مغناطش مانده در حضور افزودنی مقدار بیشتری دارد. از آنجا که میدان وادارندگی در اثر تغییر در ناهمسانگردی بلوری و ناهمسانگردی شکلی در ساختار



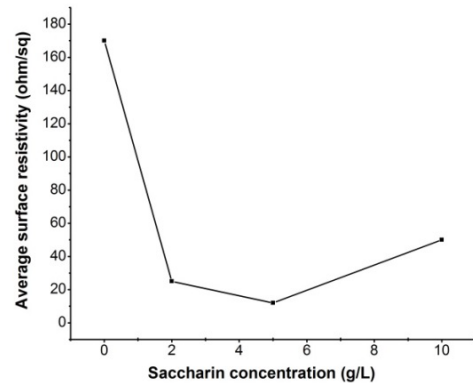
شکل ۴: نمودار مغناطش بر حسب میدان اعمالی و حلقه پسماند نمونه های لایه نشانی شده توسط لایه نازک نیکل.

به وجود می آید و با توجه به یکسان بودن ساختار بلوری هر دو نمونه، افزایش میدان وادارندگی در حضور افزودنی در نتیجه ناهمسانگردی شکلی ایجاد شده در ساختار می باشد.

با توجه به مطالب مطرح شده و مقایسه ویژگی های فیزیکی دو نمونه ها از جهات مختلف، بدیهی است که تفاوت های ایجاد شده در خواص الکتریکی و مغناطیسی می تواند بر رفتار پوشش ها در حضور امواج و میزان حفاظ سازی امواج توسط آنها تاثیرگذار باشد. نتایج حاصل از اندازه گیری های میکروویو نمونه ها در بازه فرکانسی ۱۸-۸/۲ گیگاهرتز در شکل ۵ نشان داده شده است.

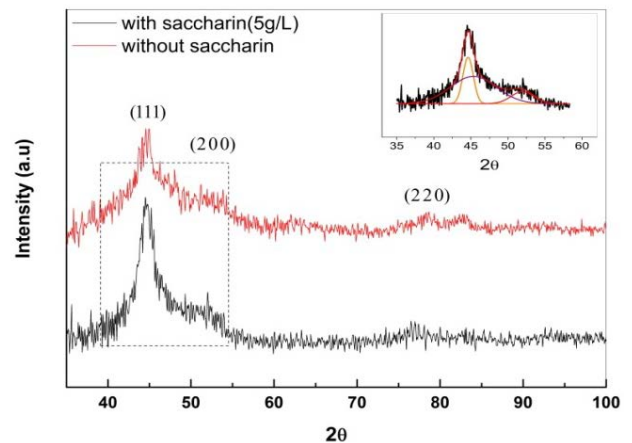


نانوساختار ایجاد شده بر روی سطح در حضور افزودنی می باشد که منجر به بهبود حرکت و انتقال الکترون های آزاد و رسانندگی الکتریکی ساختار می گردد.



شکل ۶: مقاومت سطحی میانگین در حضور افزودنی با غلظت های مختلف.

نتایج حاصل از پراش پرتو ایکس از سطح نمونه ها (شکل ۳) نشان دهنده بلوری تر و ریزتر شدن ساختار در حضور افزودنی می باشد که این مسئله در پی سرعت رشد پایین تر و نرخ جوانه زنی بالاتر در حضور افزودنی می باشد که اتم های نیکل زمان کافی برای تشکیل یک شبکه بلوری را در اختیار دارند.



شکل ۳: طیف پراش پرتو ایکس از سطح پارچه های لایه نشانی شده.

منحنی مغناطش بر حسب میدان مغناطیسی در دمای اتاق (شکل ۴) نشان دهنده خاصیت فرومغناطیسی نانوساختار ایجاد شده بر روی سطح می باشد. در حضور افزودنی، نمونه رفتار نرم تری پیدا کرده و در میدان کوچکتری به حالت اشباع رسیده است. همچنین اگرچه نمونه ها حلقه پسماند کوچکی دارند ولی بر طبق محاسبات، مساحت حلقه پسماند در حضور افزودنی بزرگتر می

در نتیجه ساختارین به عنوان یک افزودنی موثر موجب تغییر برخی از خواص لایه نازک ایجاد شده بر روی سطح گردیده و جذب امواج را تقویت کرده است.

در نهایت در حضور افزودنی ۸۵-۹۶٪ و در عدم حضور افزودنی ۹۰-۹۸٪ از میکروویو فرودی توسط پوشش ایجاد شده از طریق دو فرایند بازتاب و جذب، تضعیف و حفاظ سازی می گردند.

نتیجه گیری

در این پژوهش لایه نازک و یکنواختی از نانوساختار نیکل با ضخامت ۲۰۰ نانومتر بر روی سطح پارچه پلی استر به روش الکترولس قرار گرفته است. بررسی تاثیر افزودنی ساختارین بر خواص الکترومغناطیسی پوشش ها نشان دهنده کاهش مقاومت سطحی با افزایش غلظت افزودنی تا ۵ گرم در لیتر بوده که اتلاف از طریق جریان اضافی را در پی خواهد داشت. همچنین تغییر مورفولوژی و در نتیجه آن بروز ناهمسانگردی شکلی، تغییر مغناطش نانوساختار نیکل از طریق رشد در جهت آسان مغناطیسی، بالاتر رفتن مقدار وادارندگی و سطح حلقه پسماند همگی در تضعیف موج فرودی نقش بسزایی دارند. نکته قابل توجه تقویت سازوکار جذب امواج فرودی در مقایسه با بازتاب در حضور افزودنی می باشد که در نهایت منجر به تقویت حفاظ سازی از ۹۰-۹۸٪ به ۸۵-۹۶٪ گردیده است.

مرجع ها

- [1] T. Hyeon. "Chemical synthesis of magnetic nanoparticles", *Chem. Commun.* (2003) 927-934.
- [2] Hu. Bonian, S. Ruixue, Yu. Gang, L. Lingsong, Xi. Zhihui, H. Xiaomei, Z. Xueyuan. "Effect of bath pH and stabilizer on electroless nickel plating of magnesium alloys", *Surf. Coatings Technol.* **228**, (2013) 84-91.
- [3] E. Moti, M.H. Shariat, M.E. Bahrololoom. "Electrodeposition of nanocrystalline nickel by using rotating cylindrical electrodes", *Mater. Chem. Phys.* **111**, (2008) 469-474.
- [4] Y.W. Li, X.X. Huang, J.H. Yao, X.S. Deng. "Effect of Saccharin Addition on the Electrodeposition of Nickel from a Watts-Type Electrolyte", *Adv. Mater. Res.* **189**, (2011) 911-914.
- [5] A.M. Rashidi, A. Amadeh. "Effect of Electroplating Parameters on Microstructure of Nanocrystalline Nickel Coatings", *J. Mater. Sci.* **26**, (2010) 82-86.
- [6] Sh. Xin, W. Yuxin, Lu. Xin, Li. Chuming, G. Wei. "Parameter Optimization for Electroless Ni-W-P Coating", *Surf. Coatings Technol.* **276**, (2015) 195-201.
- [7] D. Ghodgaonkar, V. Varadan, and V. Varadan, "Microwave absorption in X and Ku band frequency of cotton fabric coated with Ni-Zn ferrite and carbon formulation in polyurethane matrix", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **362**, (2014) 216-225.
- [8] S. Hoghoghifard, H. Mokhtari. "Improving the microwave absorption in Ni-coated fabrics by saccharin addition in plating bath", *Journal of Industrial Textiles*, (2018) doi:10.1177/1528083718787525.

شکل ۵: حفاظ سازی توسط لایه نازک نیکل بر روی بستر پارچه ای در حضور افزودنی و بدون افزودنی.

با توجه به نتایج اندازه گیری های انجام شده، در عدم حضور افزودنی بازتاب (۷۲-۵۵٪) به عنوان فرایند غالب در حفاظ سازی امواج فرودی عمل می کند. در حالی که ۲۶-۳۵٪ از امواج فرودی توسط این نمونه جذب می گردد. نمونه ی لایه نشانی شده در حضور افزودنی، در حدود ۵۲٪ از امواج فرودی را جذب و ۳۳-۴۵ آن را بازتاب می کند که در این مورد جذب به عنوان فرایند غالب در حفاظ سازی مورد توجه می باشد.

نکته قابل توجه در نتایج، افزایش جذب پارچه های پوشش دهی شده به وسیله لایه نازکی از فلز نیکل در حضور افزودنی ساختارین می باشد که این امر می تواند به دلیل عوامل زیر رخ دهد:

۱- همزمان با افزایش رسانندگی ساختار در حضور افزودنی، عمق پوسته کاهش و جریان اضافی ایجاد شده در اثر قانون القای فارادی افزایش یافته و این امر در زمینه افزایش جذب و اتلاف امواج فرودی از طریق اتلاف جریان اضافی تاثیرگذار می باشد.

۲- به دنبال افزایش سطح حلقه پسماند در حضور افزودنی، اتلاف پسماند مغناطیسی با شدت بیشتری اتفاق می افتد.

۳- رفتار مغناطیسی نرم تر در برابر میدان مغناطیسی اعمالی در حضور افزودنی سبب می شود گشتاورهای دوقطبی در ماده مورد نظر با اعمال میدان کوچکتری همراستا گردیده و در نتیجه قادر خواهند بود میدان فرودی را هر چند با شدت پایین به راحتی جذب کنند.

۴- وجود ناهمسانگردی شکلی در ساختار تشکیل یافته موجب تقویت و افزایش میدان وادارندگی از ۶/۰ اورستد به ۱۳/۷ اورستد گردیده و این قضیه موجب افزایش جذب در بازه مورد نظر می گردد.

۵- ناهمسانگردی شکلی در نتیجه ساختار تیغه ای شکل رشد یافته در جهت های مختلف نیز می تواند در بهبود جذب ساختار تاثیرگذار باشد.

مطالعه برهم کنش مغناطیسی اتم کبالت با تهی جای کاتیونی در اکسید روی

دارابی، عادلہ؛ افشار، مهدی

آزمایشگاه شبیه سازی مواد، دانشکده فیزیک دانشگاه علم و صنعت ایران، نارمک، تهران

چکیده

با استفاده از روش پتانسیل کامل اربیتال موضعی در چارچوب نظریه تابعی چگالی، برهم کنش مغناطیسی بین دو نوع جفت همسایه نزدیک تهی جای کاتیونی و اتم کبالت در نیمرسانای اکسید روی مورد بررسی قرار گرفت. بر اساس یافته های ما تهی جای کاتیونی حالت مغناطیسی دارد و با ناخالصی کبالت به صورت فرومغناطیس جفت می شود. همچنین برای بهبود محاسبات در اربیتال های ۳d با برهم کنش های کولنی همبسته قوی از تقریب $GGA+U$ استفاده شد.

A DFT study of magnetic interaction of Co with cation vacancy in ZnO

Darabi, Adeleh; Afshar, Mahdi

Materials Simulation Laboratory, Department of Physics, Iran University of Science and Technology, Narmak, Tehran

Abstract

The magnetic interactions between two types of nearest neighbor cation vacancy and cobalt pair in zinc oxide semiconductor were investigated by a full potential local orbital method in the framework of density functional theory. We found that cation vacancy was in a magnetic state and coupled ferromagnetically with cobalt. The $GGA+U$ method was also applied to accurately include strong Coulomb interactions in 3d orbital of cobalt impurity.

PACS No. (11 Times New Roman, italic)

گرفت [۸-۲]. اگرچه برخی مشاهدات فرومغناطیس گزارش شده است [۵-۳]، نتایج بسیاری نیز مبنی بر رفتار آنتی فرومغناطیس [۸-۶] یا حتی عدم وجود نظم مغناطیسی [۲] وجود دارد. در چنین شرایطی مطالعات نظری بر پایه نظریه تابعی چگالی در تلاش است تا به درک درستی از مکانیسم و فیزیک رفتار مغناطیسی این ترکیبات دست یابد. بررسی جفت شدگی تبادلی همسایه نزدیک یون های مغناطیسی در ZnO با در نظر گرفتن همبستگی الکترون ها در اربیتال ۳d نشان داده است جفت های همسایه نزدیک منگنز و کبالت به صورت آنتی فرومغناطیس با یکدیگر جفت می شوند [۹]. بر این اساس در صورتی که اکسید روی تنها حاوی ناخالصی مغناطیسی باشد و نقص دیگری در شبکه موجود نباشد، نمی توان رفتار فرومغناطیس را انتظار داشت. بررسی محاسبات اصول اولیه

مقدمه

منبع اسپینی یک عنصر اساسی در قطعات اسپینترونیک است. نسل اول اسپینترونیک برای تزریق اسپین شامل اتصالات فلز فرومغناطیس/ نیمرسانا است. در نسل بعدی توجه به نیمرساناهای فرومغناطیس است. نیمرساناهایی که با میزان کمی یون مغناطیسی آلاینده شده (نیمرسانای مغناطیسی رقیق، DMS^1) و یک منبع اسپینی سازگار با فناوری کنونی نیمرسانا هستند. پس از پیش بینی دیتل مبنی بر فرومغناطیس دمای بالا در اکسید روی، ZnO [۱]، مطالعات تجربی و نظری بسیاری روی نیمرساناهای مغناطیسی رقیق بر پایه اکسید روی به ویژه ZnO:Co و ZnO:Mn انجام

¹ Diluted Magnetic Semiconductor

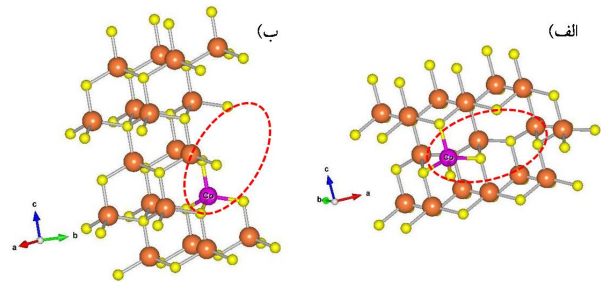
جفت تهی-جا- اتم مغناطیسی می‌توان در نظر گرفت؛ یکی به- صورت جفت در صفحه^۳ در سوپرسل A و دیگری جفت خارج از صفحه^۴ در سوپرسل B (شکل ۱). در وارد کردن تهی-جا و آلاینده مغناطیسی کبالت، نقص‌های جایگزینی خالص در نظر گرفته شده و از اثرات واهلش^۵ شبکه صرف نظر شده است.

محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی، DFT و با استفاده از نسخه نسبیتی اسکالر روش ساختار نواری اربیتال موضعی پتانسیل کامل، بسته FPLO [۱۴] انجام گرفته است. در این کد بسط توابع موج بر پایه توابع موج اربیتال‌های اتمی است، که در ساختارهای شامل عناصری با اربیتال‌های جایگزیده مانند اربیتال ۳d موجب افزایش سرعت همگرایی محاسبات می‌شود. مجموعه اربیتال‌های پایه برای روی (کبالت) و اکسیژن به ترتیب (۳s, ۳p, ۳d, ۴s, ۴p, ۴d, ۴f) و (۱s, ۲s, ۲p, ۳s, ۳p, ۳d) می‌باشند. برای تابعی تبدلی- همبستگی از تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) استفاده شده است. این تقریب در توصیف برهم‌کنش‌های کولنی در اربیتال‌های جایگزیده کاستی‌هایی دارد؛ در نتیجه برای بهبود محاسبات و تصحیح ترازهای انرژی ۳d از روش GGA+U در حد اتمی استفاده شده است [۱۵، ۱۶]. انتگرال‌های اسلیر (Fⁱ, i) (F², 0, 2, 4) به صورت F⁰ = U که پارامتر هابارد است و F⁴/F² = 0.625 و F⁴/14 = J + (F⁴)/14 = J شده‌اند [۱۷]. مقدار J بر اساس مرجع [۹] انتخاب شده است. بررسی همگرایی انرژی کل نسبت به مش‌بندی فضای k برای هر دو نوع سوپرسل نشان داد که تعداد ۵۱۲ = ۸×۸×۸ نقطه k برای انجام محاسبات کافی است.

نتایج و بحث و بررسی

ساختار سوپرسل‌های A و B به همراه جفت تهی-جا- کبالت، (Co-vacancy) در شکل ۱ نشان داده شده است. در سوپرسل A جفت (Co-vacancy) در صفحه عمود بر محور c ساختار

نشان داده است که تهی‌جای کاتیونی در ZnO حالت مغناطیسی اسپینی سه‌گانه (S = ۱) دارد و این حالت به‌خوبی از حالت غیر مغناطیسی جدا شده است [۱۰]. در نتیجه نقص‌های شبکه می-توانند نقش مهمی در ایجاد حالت مغناطیسی داشته باشند. جانوتی^۲ و همکارانش با بررسی جامع نقص‌های نقطه‌ای ذاتی در اکسید روی نشان داده‌اند که تهی‌جای کاتیونی یا تهی‌جای Zn محتمل-ترین نقص نقطه‌ای است [۱۱]. نتایج تجربی نیز وجود تهی‌جای روی در اکسید روی نوع n را تایید کرده‌است [۱۲]. ما نیز با توجه به نتایج مطالعات پیشین، اثر تهی‌جای کاتیونی بر رفتار مغناطیسی ZnO حاوی یون مغناطیسی کبالت را در قالب جفت همسایه نزدیک تهی-جا- کبالت مورد بررسی قرار دادیم. به‌منظور توصیف درست‌تر و دقیق‌تر سیستم به دلیل وجود اربیتال‌های جایگزیده ۳d، همبستگی قوی الکترونی در اربیتال ۳d با اعمال پتانسیل هابارد U در نظر گرفته شد.



شکل ۱: طرحواره سوپرسل‌های (الف) A با جفت همسایه نزدیک در صفحه و (ب) B با جفت همسایه نزدیک خارج از صفحه. جفت‌های تهی-جا- کبالت با خط‌چین نشان داده شده‌اند.

روش محاسباتی

به‌منظور بررسی اثر جفت تهی-جا- کبالت، (Co-vacancy) محاسبات ساختار الکترونی و مغناطیسی در دو سوپرسل اکسید روی، ZnO با ساختار ورتسایت به صورت سوپرسل A (۳×۲×۱) و سوپرسل B (۲×۲×۲) انجام شد. ساختار سلول واحد اکسید روی گروه تقارنی P63mc با ثابت‌های شبکه a = b = ۳,۲۴۲۷ Å و c = ۵,۱۹۴۸ Å را داراست [۱۳]. در ساختار ورتسایت دو نوع

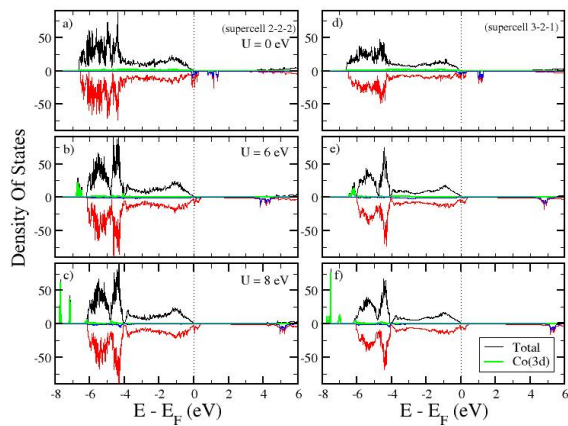
^۳ In-plane

^۴ Out-of-plane

^۵ relaxation

^۲ Janotti

نوار رسانش از اربیتال‌های s و p روی تشکیل شده است. همان‌طور که در تمامی نمودارها مشخص است، حالت‌هایی در بالای نوار ظرفیت و نزدیک خط فرمی وجود دارند. این حالت‌ها به دلیل وجود تهی‌جا در گاف نواری ZnO ایجاد شده‌اند و به دلیل نیمه‌پر بودن و نزدیکی به نوار ظرفیت می‌توانند پذیرای الکترون باشند. در نتیجه تهی‌جا کاتیونی (بدون وجود دیگر ناخالصی و نقص‌ها) اکسید روی را به یک نیمرسانای نوع p تبدیل می‌کند. اثر اعمال U بر تغییر موقعیت اربیتال‌های $3d$ اتم کبالت کاملاً واضح است. در تقریب GGA حالت‌های $3d$ درون گاف نواری قرار دارند. با اعمال U حالت‌های $3d$ به داخل نوار ظرفیت کشیده می‌شوند. با افزایش مقدار U میزان این شیفت انرژی بیشتر می‌شود. به‌علاوه شکافتگی اربیتال $3d$ تحت اثر میدان بلور واضح‌تر می‌شود. همان‌طور که از شکل ۱ مشخص است به دلیل متفاوت بودن پیکربندی جفت Co-vacancy در سوپرسل‌های A و B، نوع شکافتگی و میزان شکافتگی اربیتال‌های $3d$ در آن‌ها نیز متفاوت است.



شکل ۲: نمودار چگالی حالت‌ها بر حسب انرژی برای سوپرسل A (سمت راست) و سوپرسل B (سمت چپ) در تقریب GGA و GGA+U. چگالی کل با رنگ سیاه (حالت اسپینی اکثریت) و قرمز (حالت اسپینی اقلیت) و چگالی حالت‌های اربیتال $3d$ اتم کبالت با رنگ سبز (حالت اسپینی اکثریت) و آبی (حالت اسپینی اقلیت) نشان داده شده‌اند.

ورسایت و در سوپرسل B در جهت محور c واقع شده‌اند. در ساختار ورتسایت هر اتم، ۴ همسایه نزدیک از اتم نوع دیگر دارد. مقادیر محاسبه شده ممان مغناطیسی اسپینی کل و اتم مغناطیسی کبالت در جدول ۱ فهرست شده‌اند. ممان اسپینی اتم کبالت در حدود $3 \mu_B$ و متناظر با $S = 3/2$ است. اختلاف مقدار ممان اسپینی کل و ممان اسپینی اتم کبالت در حدود $2 \mu_B$ است. به‌جز اتم مغناطیسی کبالت تنها چهار اتم اکسیژن همسایه نزدیک تهی‌جا ممان غیر صفر دارند. ممان مغناطیسی دیگر اتم‌ها بسیار کوچک و قابل صرف نظر کردن است. در نتیجه اکسیژن‌های همسایه نزدیک تهی‌جا سهم عمده را در اختلاف ممان کل و اتم کبالت دارند. بنابر مطالعات قبلی نقص نقطه‌ای تهی‌جا در ساختار ZnO بدون نقص و یا ناخالصی در حالت اسپینی سه‌گانه، $S = 1$ است [۱۰]. نتایج به‌دست آمده از محاسبات ما نیز نشان می‌دهد تهی‌جا در حضور ناخالصی مغناطیسی کبالت همان حالت اسپینی سه‌گانه، $S = 1$ با ممان مغناطیسی در حدود $2 \mu_B$ را دارد. علاوه بر آن ممان اسپینی تهی‌جا و ناخالصی مغناطیسی در هر دو تقریب GGA و GGA+U به صورت فرومغناطیس با یکدیگر جفت شده‌اند. همان‌طور که از داده‌های جدول ۱ مشخص است اعمال تصحیح U هابارد تأثیر چندانی در مقدار ممان اسپینی و همچنین خواص مغناطیسی ساختار ندارد.

جدول ۱: ممان مغناطیسی کل و ممان مغناطیسی اتم کبالت در رژیم نسبی

اسکالر

$M_{Co} (\mu_B)$	$M_{Total} (\mu_B)$	$U (eV)$	سوپرسل
۲/۹۰	۵/۰۰	۰	۲×۲×۲
۳/۰۱	۴/۹۹	۶	
۳/۰۴	۴/۹۸	۸	
۲/۹۰	۵/۰۰	۰	۳×۲×۱
۳/۰۰	۴/۸۴	۶	
۳/۰۴	۴/۹۳	۸	

برای بررسی بیشتر اثر همبستگی الکترونی در ساختار الکترونی، نمودار چگالی حالت‌ها (DOS) بر حسب انرژی به ازای $U = 0$ و ۶ و ۸ eV برای هر دو سوپرسل A و B در شکل ۲ رسم شده است. نوار ظرفیت عمدتاً از اربیتال‌های $2p$ اکسیژن و

نتیجه گیری

محاسبات اسکالر نسبیتی در ZnO با حضور جفت همسایه نزدیک تهی جای کاتیونی و یون مغناطیسی کبالت در دو پیکربندی در صفحه و خارج از صفحه نسبت به محور c بلور انجام گرفت. حضور اتم مغناطیسی کبالت تاثیری در حالت مغناطیسی سه گانه تهی جای کاتیونی که در حالت عدم حضور ناخالصی گزارش شده بود، نداشت. همچنین جفت شدگی ممان مغناطیسی اسپینی تهی جا و اتم ناخالصی در هر دو نوع پیکربندی به صورت فرومغناطیس به دست آمد. اعمال پتانسیل هابارد U با دو مقدار ۸ eV و ۶ در روش GGA+U اگرچه موقعیت انرژی حالت های اربیتال ۳d اتم کبالت را اصلاح کرد، تاثیری در مقدار ممان های اسپینی و خواص مغناطیسی سیستم نداشت.

سپاسگزاری

از حمایت مالی دانشگاه علم و صنعت ایران صمیمانه تشکر می کنیم.

مرجع ها

- nearest-neighbor exchange coupling in Co- and Mn-doped ZnO"; *Phys. Rev. B*, **73**, (2006) 134418
- [۱۰] T. Chanier, I. Opahle, M. Sargolzaei, R. Hayn, and M. Lannoo; "Magnetic State around Cation Vacancies in II-VI Semiconductors"; *Phys. Rev. Lett.* **100**, (2008) 026405
- [۱۱] A. Janotti, and C. G. Van de Walle; "Native point defects in ZnO"; *Phys. Rev. B*, **76**, (2007) 165202
- [۱۲] F. Tuomisto, K. Saarinen, D. C. Look, and G. C. Farlow; "Introduction and recovery of point defects in electron-irradiated ZnO"; *Phys. Rev. B*, **72**, (2005) 085206
- [۱۳] T. M. Sabine, and S. Hogg; "The Wurtzite Z Parameter for Beryllium Oxide and Zinc Oxide"; *Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Crystallogr. Cryst. Chem.* **25**, (1969) 2254-2256
- [۱۴] K. Koepernik, and H. Eschrig; "Full-potential nonorthogonal local-orbital minimum-basis band-structure scheme"; *Phys. Rev. B*, **59**, (1999) 1743, see <http://www.FPLO.de>
- [۱۵] H. Eschrig, K. Koepernik, and I. Chaplygin; "Density functional application to strongly correlated electron systems"; *J. Solid state Chem.* **176**, (2003) 482-495
- [۱۶] V. I. Anisimov, J. Zaanen, and O. K. Andersen; "Band theory and Mott insulators: Hubbard U instead of Stoner I"; *Phys. Rev. B*, **44**, (1991) 943
- [۱۷] V. I. Anisimov, I. V. Solovyev, M. A. Korotin, M. T. Czyzyk, and G. A. Sawatzky; "Density-functional theory and NiO photoemission spectra"; *Phys. Rev. B*, **48**, (1993) 16929
- [۱] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, and D. Ferrand; "Zener model description of ferromagnetism in zinc-blende magnetic semiconductors"; *Science* **287**, (2000) 1019-1022
- [۲] K. Ueda, H. Tabata, and T. Kawai; "Magnetic and electric properties of transition-metal-doped ZnO films"; *Appl. Phys. Lett.* **79**, (2001) 988
- [۳] H. J. Lee, S. Y. Jeong, C. R. Cho, and C. H. Park; "Study of diluted magnetic semiconductor: Co-doped ZnO"; *Appl. Phys. Lett.* **81**, (2002) 4020
- [۴] W. Prellier, A. Fouchet, B. Mercey, C. Simon, and B. Raveau; "Laser ablation of Co:ZnO films deposited from Zn and Co metal targets on (0001) Al₂O₃ substrates"; *Appl. Phys. Lett.* **82**, (2003) 3490
- [۵] P. sharma, A. Gupta, K. V. Rao, F. J. Owens, R. Sharma, R. Ahuja, J. M. O. Guillen, B. Johansson, and G. A. Gehring; "Ferromagnetism above room temperature in bulk and transparent thin films of Mn-doped ZnO"; *Nat. Mater.* **2**, (2003) 673-677
- [۶] G. Lawes, A. S. Risbud, A. P. Ramirez, and R. Seshadri; "Absence of ferromagnetism in Co and Mn substituted polycrystalline ZnO"; *Phys. Rev. B*, **71**, (2005) 045201
- [۷] P. Sati, R. Hayn, R. Kuzian, S. Regnier, S. Schafer, A. Stepanov, C. Morhian, C. Deparis, M. Laugt, M. Goiran, and Z. Golacki; "Magnetic Anisotropy of Co²⁺ as Signature of Intrinsic Ferromagnetism in ZnO:Co"; *Phys. Rev. Lett.* **96**, (2006) 017203
- [۸] S. W. Yoon, S. -B. Cho, S. C. We, S. Yoon, B. W. Suh, H. K. Song, and J. J. Shin; "Magnetic properties of ZnO-based diluted magnetic semiconductors"; *J. Appl. Phys.* **93**, (2003) 7879
- [۹] T. Chanier, M. Sargolzaei, I. Opahle, R. Hayn, and K. Koepernik; "LSDA+U versus LSDA: Toward a better description of the magnetic

تاثیر افزودنی نانو آلومینا بر ویژگی های مغناطیسی فریت نیکل - روی

داودی ، محمد^۱؛ مظفری ، مرتضی^۱

گروه فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان

چکیده :

در این پژوهش نخست پودر فریت نیکل - روی ($Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4$) به روش متداول سرامیکی ساخته و سپس اثر افزودنی نانو پودر فاز آلفای آلومینا ($\alpha-Al_2O_3$) بر ویژگی های مغناطیسی آن بررسی شد. پراش سنجی پرتوی ایکس تشکیل فریت نیکل روی را تایید می کند. پس از ۱۰ ساعت آسیاب کاری پودر تک فاز فریت نیکل - روی ، افزودنی نانو آلومینا با مقادیر گوناگون (از صفر تا ۵ درصد وزنی) به فریت افزوده و پس از شکل دهی، در دماهای گوناگون از ۱۰۵۰ تا ۱۳۶۰ °C تفجوشی شد. تراوایی مغناطیسی اولیه در بازه ی بسامدی ۱ kHz تا ۱ MHz اندازه گیری و اثر افزودنی بر آن بررسی شد. گفتنی ست که نانو آلومینای به کار رفته به عنوان افزودنی، به روش سل ژل ساخته شد و پراش سنجی پرتوی ایکس تشکیل فاز آلومینا را تایید کرد.

کلید واژه : فریت نیکل روی ، اثر افزودنی ، نانو آلومینا ، ویژگی های مغناطیسی

The effect of nano Alumina powder addition on the magnetic properties of Nickel-Zinc ferrite

Davoodi , Mohammad¹; mozaffari, morteza¹

¹Department of Physics, University of Isfahan, Isfahan

Abstract

In this study, first the conventional ceramic technique was used to prepare nickel-zinc ferrite powders with a nominal formula of $Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4$ and then the effect of nanoalumina ($\alpha-Al_2O_3$) addition on the magnetic properties of the ferrite has been investigated. X-RAY diffraction (XRD) confirms ferrite phase formation. After 10 h milling of the single phase nickel-zinc ferrite, different amounts of nanoalumina (from 0 to 5 wt.%), were added to ferrite and after shaping, they sintered at various temperatures from 1050 to 1360 °C. The initial permeability was measured in the frequency range of 1 kHz to 1 MHz and the effect of the additive on it was studied. It should be mentioned that the nanoalumina was made by sol-gel method and X-ray diffractometry confirmed the formation of the alumina phase.

شود. ویژگی های فیزیکی ، به ویژه ویژگی های مغناطیسی فریت ها به شدت به چگونگی پخش یون ها در این دو جایگاه بستگی دارد [۱]. از میان فریت های اسپینلی ، فریت نیکل - روی با فرمول عمومی $Zn_x-Ni_{1-x}Fe_2O_4$ از پرکاربردترین ها است [۲]. از ویژگی های این ماده می توان به مقاومت ویژه الکتریکی بزرگ ، مقاومت در برابر خوردگی بالا، هزینه ی تولید پایین، تلفات دی الکتریک کم، سختی مکانیکی زیاد، دمای کوری بالا، پایداری شیمیایی، ثابت دی الکتریک بالا و

۱. مقدمه

فرمول عمومی فریت های اسپینلی به صورت AFe_2O_4 است که در آن A معمولا یک یا ترکیبی از چند کاتیون دو ظرفیتی است. در اسپینل ها دو زیر شبکه وجود دارد، که یکی چهاروجهی یا جایگاه A است که با ۴ یون اکسیژن دوره و دیگری جایگاه هشت وجهی یا جایگاه B است که با ۶ یون اکسیژن دوره می

نفوذپذیری مغناطیسی بالا اشاره کرد. به دلیل این ویژگی‌ها فریت‌های نیکل-روی کاربردهای بسیاری در دستگاه‌های الکتریکی و الکترونیکی مانند ترانسفورماتورها و القاگرها دارند [۳]. به علت مغناطش اشباع نسبتاً پایین فریت‌ها در مقایسه با فرومغناطیس‌های فلزی، کاربرد فریت‌ها محدودیت‌هایی دارد. بنابراین بایستی به دنبال راهی برای بهبود این ویژگی‌ها بود. جانسانی یون‌های دیا-مغناطیس در فریت‌های ساده راهی برای افزایش مغناطش است که مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفته است [۴-۶]. مقدار افزودنی‌ها می‌تواند اثر چشم‌گیری بر ویژگی‌های فریت‌ها داشته باشد. پژوهش‌هایی که پیرامون بررسی اثرهای مواد افزودنی بر روی فریت نیکل - روی انجام شده است نشان می‌دهند که در بیشتر موارد، افزودنی‌ها ویژگی‌های مغناطیسی فریت نیکل - روی مانند تراوایی مغناطیسی، تلفات جریان گردابی، تلفات پسماند و دیگر ویژگی‌های مغناطیسی را بهبود می‌بخشند [۵]. این پژوهش‌ها تا کنون بیشتر بر روی اثر افزودنی‌های با اندازه ی میکرونی انجام شده است [۷-۹]. در این پژوهش تأثیر افزودن درصد‌های گوناگون (از صفر تا ۵ درصد وزنی) نانوپودر فاز آلفای آلومینا بر ویژگی‌های مغناطیسی فریت نیکل - روی مورد بررسی قرار گرفته است.

۲. روش‌ها و دستگاه‌ها

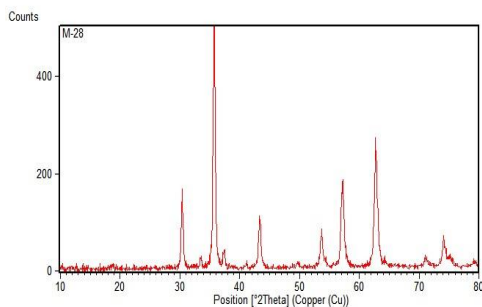
در این پژوهش فریت نیکل - روی $Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4$ به روش سرامیکی [۱۰] با مواد اولیه ی اکسید آهن اصلاح شده ی مجتمع فولاد مبارکه با خلوص ۹۹/۸٪ و اکسیدهای نیکل و روی شرکت مرک آلمان با کمینه خلوص ۹۹ درصد ساخته شد. مواد اولیه با نسبت‌های استوکیومتری توزین و پس از مخلوط کردن در دمای $1250^{\circ}C$ به مدت ۵ ساعت برشته شد. شناسایی فاز نمونه با روش پراش سنجی پرتو ایکس (XRD) انجام شد. پراش سنجی با یک دستگاه XRD فیلیپس مدل

X/PERT PRO در دانشگاه کاشان انجام شد. سپس پودرهای برشته شده با یک دستگاه آسیاب سیاره ای و با نسبت گلوله به مواد ۱۰ به ۱، به مدت ۱۰ ساعت به روش تر آسیاب گردید. پس از انجام آسیاب کاری تر مواد در آون خشک و در دمای ۶۰۰ به مدت ۵ ساعت بازپخت شدند. پودرهای به دست آمده با افزودنی نانوالومینا که به روش سل ژل ساخته شد [۱۱]، با درصد‌های گوناگون-وزنی (صفر تا پنج درصد) مخلوط گردیده و با یک دستگاه پرس هیدرولیک دستی در قالب‌هایی به شکل قرص و چنبره، با فشار ۶۰۰۰ bar شکل داده شدند. سپس نمونه‌ها در دماهای گوناگون $1050^{\circ}C$ تا $1360^{\circ}C$ به مدت ۳ ساعت تفجوشی شدند. پس از سیم پیچی نمونه‌های تفجوشی شده با یک دستگاه LCR متر با اندازه گیری خودالقایی سری (L_s) و مقاومت سری (R_s) نمونه‌ها، به ترتیب تراوایی و اتلاف مغناطیسی محاسبه شد. با تصویربرداری از نمونه‌های سنتز شده با دستگاه میکروسکوپ اپتیکی در دانشگاه اصفهان، میانگین اندازه ی دانه‌ها اندازه گیری شد.

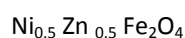
۳. نتایج و بحث

۱.۳ فازبندی

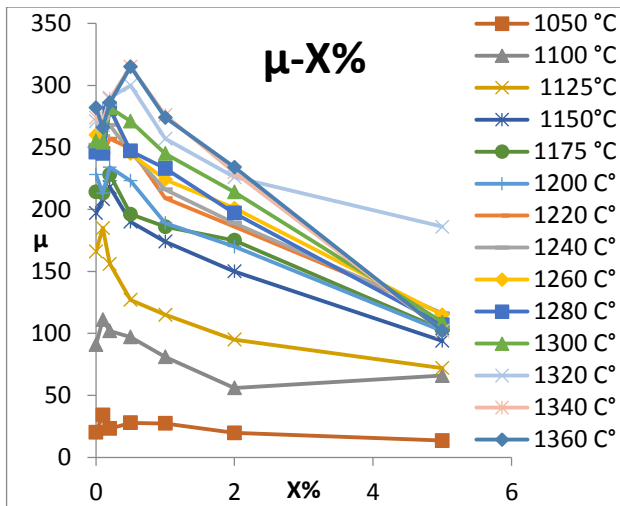
شکل ۱ الگوهای پراش پرتوی X فریت نیکل روی است که تشکیل آن را تایید می‌کند.



شکل ۱. الگوی پراش پرتوی X فریت نیکل روی



فازبندی نمونه‌ها با نرم افزار Xpert HighScore انجام شد. شکل ۲ الگوی پراش پرتوی X نانو آلومینا ی برشته



شکل ۳. تراوایی مغناطیسی نمونه ها بر حسب درصد نانوآلومینا در دماهای تفجوشی گوناگون

درصد افزودنی	تراوایی مغناطیسی	میانگین اندازه دانه ها
۰	۲۸۲	۲۷.۱۳
۰.۲	۲۸۶	۳۳.۱۰
۰.۵	۳۱۵	۴۴.۱۵
۱	۲۷۴	۳۰.۳۱
۲	۲۳۴	۳۶.۹۵

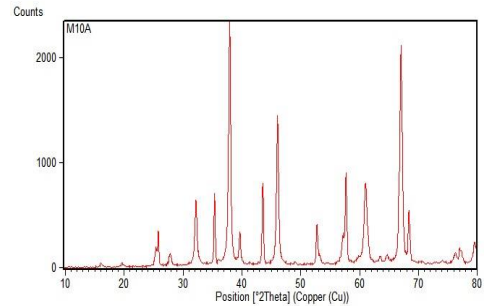
جدول ۱. تراوایی مغناطیسی و میانگین اندازه‌ی دانه‌ها با درصد افزودنی‌های گوناگون نمونه‌ی تفجوشی شده در دمای 1360°C

۳.۳ ریخت شناسی

شکل ۴ ریخت نمونه های سنتز شده با درصد افزودنی گوناگون را نشان می دهد. همان گونه که در جدول ۱ نیز دیده می شود با افزایش درصد افزودنی از صفر درصد (شکل الف) تا نیم درصد (شکل ب) اندازه ی دانه ها افزایش می یابد. با افزایش مرزدانه ها (کاهش اندازه دانه ها)، مغناطش کاهش یافته و تراوایی کوچک تر می شود. به همین دلیل با افزایش اندازه دانه ها تراوایی افزایش می یابد [۱۳، ۱۴].

پژوهش های دیگری در زمینه ی بهینه سازی اثر افزودنی بر ویژگی های مغناطیسی فریت نیکل روی در حال انجام است.

شده در دمای 1100°C را نشان می دهد. میانگین اندازه بلورک های نانو پودر آلومینا با فرمول شرر برآورد شد که برابر با 21nm به دست آمد.



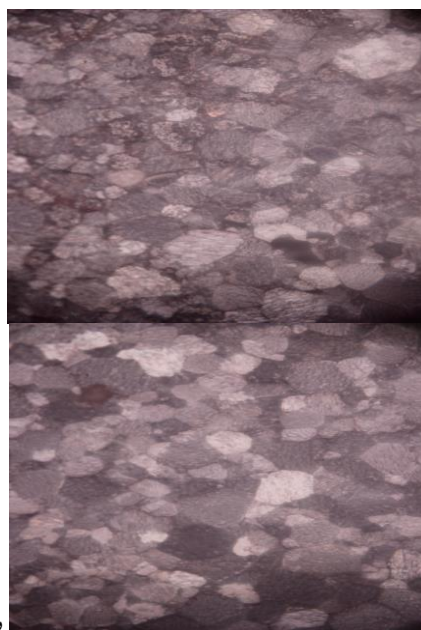
شکل ۲. الگوی پراش پرتوی X نانو آلومینا

۲.۳ ویژگی های مغناطیسی

شکل ۳ نتایج مربوط به اندازه گیری تراوایی مغناطیسی نمونه های تفجوشی شده در دماهای گوناگون را نشان می دهد. همان گونه که دیده می شود، افزودن نانو پودر آلومینا تا نیم درصد وزنی، تراوایی را افزایش می دهد و پس از آن با افزایش میزان افزودنی تا ۵ درصد وزنی مقدار تراوایی کاهش می یابد. با توجه به عکس های میکروسکوپ الکترونی تهیه شده از نمونه ها، که دو نمونه از آن ها در شکل ۴ آمده است، اندازه ی متوسط دانه ها به روش آماری محاسبه گردید [۱۲]. همان گونه که در جدول ۱ مشاهده می شود با افزایش درصد افزودنی تا نیم درصد اندازه متوسط دانه ها و تراوایی مغناطیسی افزایش می یابد و سپس با افزایش درصد افزودنی از نیم درصد تراوایی و اندازه ی متوسط دانه ها کاهش می یابد. تغییرات تراوایی مغناطیسی بر حسب تراوایی می تواند برآمده از رشد دانه ها و کاهش مرز دانه ها و کاهش آن نیز با افزایش افزودنی از نیم درصد وزنی می تواند به دلیل افزایش حفره های درون دانه ای باشد. همچنین به دلیل اینکه وجود مرزدانه ها از حرکت آزاد دیواره ی حوزه ها جلوگیری می کند با افزایش مرزدانه ها مغناطش و تراوایی کم می شود و به این دلیل با افزایش اندازه ی دانه ها تراوایی مغناطیسی بیشتر می شود [۱۲، ۱۳].

- .4 Y. Dasan, B. Guan, M. Zahari, and L. Chuan, "Influence of La³⁺ Substitution on Structure, Morphology and Magnetic Properties of Nanocrystalline Ni-Zn Ferrite," PloS one **12**, e0170075.(2017)
- .5 M. Ali, M. Uddin, M. Khan, F.-U.-Z. Chowdhury, and S. Haque, "Structural, morphological and electrical properties of Sn-substituted Ni-Zn ferrites synthesized by double sintering technique," Journal of Magnetism and Magnetic Materials **424**, 148-154.(2017)
- .6 F. Meng, X. Shang, W. Zhang, and Y. Zhang, "Effect of In³⁺ substitution on structural and magnetic properties of Ni ferrite nanoparticles," Physica B: Condensed Matter **504**, 69-73 (2017)
- .7 K. Sun, Z. Lan, Z. Yu, L. Li, J. Huang, and X. Zhao, "Effects of SnO₂ addition on the microstructure and magnetic properties of NiZn ferrites," Journal of Magnetism and Magnetic Materials **320**, 3352-3355 (2008)
- .8 O. Mirzaee, "Influence of PbO and TiO₂ additives on the microstructure development and magnetic properties of Ni-Zn soft ferrites," Journal of King Saud University-Engineering Sciences **26**, 152-158 (2014)
- .9 N. Rezlescu, L. Rezlescu, P. Popa, and E. Rezlescu, "Influence of additives on the properties of a Ni-Zn ferrite with low Curie point," Journal of magnetism and magnetic materials **215**, 194-196 (2000)
- .10 A. J. Moulson, and J. M. Herbert, *Electroceramics: materials, properties, applications* (John Wiley & Sons, 2003.)
- .11 W. Zeng, L. Gao, and J. Guo, "A new sol-gel route using inorganic salt for synthesizing Al₂O₃ nanopowders," Nanostructured Materials **10**, 543-550 (1998).
- .12 T. Inui, and N. Ogasawara, "Grain-size effects on microwave ferrite magnetic properties," IEEE Transactions on Magnetics **13**, 1729-1744 (1977)
- .13 F. G. Brockman, "Method of manufacturing a magnetic ferrite core," (Google Patents, 1956)
- .14 B. D. Cullity, "Elements of X-ray diffraction, Addison," Wesley Mass (1978)

الف



ب

شکل ۴ - ریخت نمونه های سنتز شده در دمای $1360^{\circ}C$ با درصد افزودنی مختلف (الف) صفر درصد (ب) نیم درصد

۴. نتیجه گیری

در این پژوهش اثر افزودنی نانو آلومینا بر فریت نیکل-روی بررسی شد. پس از بررسی اثر افزودنی تراوایی مغناطیسی اولیه نمونه ها، مشاهده شد که نانو آلومینای به کار رفته به عنوان افزودنی تا ۰/۵ درصد وزنی سبب افزایش تراوایی و سپس با افزایش افزودنی تا ۵ درصد سبب کاهش تراوایی مغناطیسی نمونه ها می شود.

۵. مراجع

- .1 A. H. Morrish, "The physical principles of magnetism," The Physical Principles of Magnetism, by Allan H. Morrish, pp. 696. ISBN 0-7803-6029-X. Wiley-VCH, January 2001., 696 (2001).
- .2 N. Chen, and M. Gu, "Microstructure and microwave absorption properties of Y-substituted Ni-Zn ferrites," Open Journal of Metal **2**, 37 (2012).
- .3 M. Shima, K. Oguri, Y. Ohya, M. Gomi, Y. H. Ikuhara, Y. Sasaki, Y. Hishikawa, and K. Kawabe, "Synthesis and Magnetic Behavior of Nickel Zinc Ferrite Nanoparticles Coated Onto Carbon Microcoils," IEEE Transactions on Magnetics **49**, 4824-4826 (2013)

اثر میدان مغناطیسی بر خواص نانوکامپوزیت مغناطیسی CMC/Fe₃O₄

دهقانی، نیلوفر^۱؛ بابامرادی، محسن^۱؛ ملکی، علی^۲

^۱دانشکده فیزیک دانشگاه علم و صنعت، تهران

^۲آزمایشگاه تحقیقاتی کاتالیزورها و سنتز آلی، دانشکده شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

چکیده

در این مقاله نانوکامپوزیت مغناطیسی اکسید آهن و کریوکسی متیل سلولز (CMC) در دو حالت بدون حضور میدان مغناطیسی و در حضور میدان مغناطیسی ساخته شد. خواص مغناطیسی نانوکامپوزیت توسط دستگاه مغناطیس سنجی نمونه ارتعاشی (VSM) برای بررسی ویژگی‌های سوپر پارامغناطیسی ذرات و تاثیر حضور میدان بر خواص مغناطیسی کامپوزیت، مورد بررسی قرار گرفت. نتایج این آنالیز نشان داد که حضور میدان مغناطیسی در هنگام ساخت باعث افزایش 51 درصدی مغناطش اشباع می‌شود. نتایج الگوی پراش اشعه ایکس (XRD) بلورینگی نانوذرات مغناطیسی را در هر دو حالت ساخته شده نشان می‌دهد. افزایش مغناطش اشباع و بلورینگی را می‌توان به اثر میدان مغناطیسی در جهت دهی دو قطبی‌های مغناطیسی در هنگام ساخت نسبت داد.

Effect of magnetic field on the properties of magnetic nanocomposite CMC/Fe₃O₄

Dehghani, Niloofar¹; Babamoradi, Mohsen¹; Maleki, Ali²

¹Department of Physics, University of Science and Technology, Tehran,

²Catalysts and Organic Synthesis Research Laboratory, Department of Chemistry, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

Abstract

In this paper, iron oxide nanoparticles and carboxymethyl cellulose (CMC) composition as magnetic nanocomposite were synthesized in presence and absence of magnetic field. The magnetic properties of the nanocomposite were studied by Vibrational Sampling Magnetometer (VSM) to investigate the paramagnetic properties of the particles and the effect of the magnetic field on the magnetic properties of the nanocomposite. The results showed that the presence of magnetic field during the synthesizing increases the saturation magnetization about 51% in compare of synthesized sample in absence of magnetic field. X-ray diffraction (XRD) results confirmed the crystallinity of the magnetic nanoparticles in the two samples. The increase in saturation magnetization value can be attributed to the magnetic dipole alignment to the magnetic field direction during the synthesizing process.

PACS No. 75, 81

مقدمه

اکسید آهن را می‌توان به عنوان رایج‌ترین و پرکاربردترین این دسته نام برد. از جمله کاربردهای نانوذرات مغناطیسی اکسید آهن می‌توان به کاربرد در زیست پزشکی به عنوان عامل ضد سرطانی و حفاظت در مقابل خوردگی در رنگها و پوششها اشاره کرد [4_7]. خواص نانوذرات اکسید آهن به سایز و ساختار ذرات بستگی دارد

امروزه، نانوذرات اکسید فلزی به عنوان یکی از شاخه‌های مهم فن‌آوری نانو در گستره وسیعی از صنایع به دلیل خواص اپتیکی، مغناطیسی و الکتریکی آنها، به شدت مورد توجه قرار گرفته‌اند [1_3]. از میان انواع نانوذرات مغناطیسی، نانوذرات مغناطیسی

تهیه نانو کامپوزیت مغناطیسی Fe_3O_4 با CMC :

کربوکسی متیل سلولز (CMC) از شرکت سیگما آلدریچ انگلستان خریداری شد. همچنین $FeCl_3$ ، $FeCl_2 \cdot 4H_2O$ و NH_4OH از محصولات شرکت Merck مورد استفاده قرار گرفتند.

ابتدا نانو ذرات اکسید آهن به روش هم‌رسوبی ساخته شد و سپس با CMC ترکیب گردید [8].

ابتدا، 4/7 g از $FeCl_3$ 0/2 مولار و 2/7 g از $FeCl_2 \cdot 4H_2O$ 0/1 مولار به صورت جداگانه تهیه شد. سپس این دو پودر درون بشر با 100 cc آب مقطر ریخته شد و در دمای $80^\circ C$ به مدت 1 ساعت به وسیله همزن مکانیکی، محلول همزده شد تا کاملاً محلول یکسانی تشکیل شود. بعد از گذشت 1 ساعت محلول شفاف زرد رنگی بوجود آمد. با استفاده از محلول 25٪ بازی هیدروکسید آمونیوم pH محلول به 11 رسانده شد؛ به اینصورت که 10 cc آمونیاک را با 10 cc آب مقطر رقیق کرده و بصورت قطره قطره به محلول به مدت 10 دقیقه اضافه شد. بعد از گذشت 10 دقیقه و اضافه کردن کل مقدار هیدروکسید آمونیوم رنگ محلول به رنگ سیاه در آمد و نانوذرات Fe_3O_4 تشکیل گردید. برای تشکیل بهتر نانو ذرات، عمل بهم زدن محلول به مدت 30 دقیقه ادامه یافت. بعد از گذشت 30 دقیقه عمل همزدن را متوقف کردیم و اجازه دادیم رسوب ته نشین شود. مجدداً برای رساندن pH محلول به 7، محلول با استفاده از آب مقطر چندین مرتبه شست و شو داده شد. سپس رسوب حاصل به کمک یک آهنربای معمولی از محلول جدا شده و حرارت دهی به مدت یک شب در آون در دمای $80^\circ C$ برای به دست آوردن پودر نانو ذرات اکسید آهن انجام شد.

در مرحله بعد به نسبت 1:2 پودرهای CMC و Fe_3O_4 برای ساخت نانوکامپوزیت مورد استفاده قرار گرفت. 1g از CMC و 2g از Fe_3O_4 را در 20 cc آب مقطر حل کرده و به مدت 30 دقیقه در دمای $80^\circ C$ همزده شد. بعد از گذشت این زمان محلول به حالت ژله ای تبدیل شد. نیمی از محلول را در بشر دیگری ریخته و در میدان مغناطیسی 0/4 T در همان دما و تحت عمل همزدن قرار دادیم و نیمی دیگر از محلول را برای مقایسه در

و تحقیقات گسترده‌ای برای بهبود خواص مغناطیسی نانوذرات اکسید آهن انجام شده است. به دلیل جاذبه بین نانوذرات مغناطیسی، نانوذرات مغناطیسی به یکدیگر چسبیده، کلوخه‌ای شده و کارایی نانوذرات مغناطیسی کاهش می‌یابد. یکی از راهکارها برای حل این مشکل و همچنین به دست آوردن خاصیت جدیدی علاوه بر خاصیت مغناطیسی نانوذرات، استفاده از کامپوزیت می‌باشد.

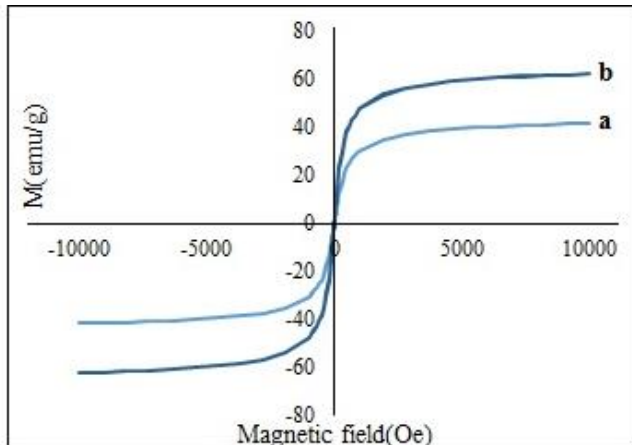
کربوکسی متیل سلولز (CMC) ماده‌ای سفید رنگ، بی‌بو و قابل حل در آب، یکی از مشتقات سلولز است که به طور گسترده‌ای به دلیل زیست سازگاری و قیمت پایین مورد توجه قرار گرفته است [8]. کاربردهای گسترده این ماده، از مصارف خوراکی و دارویی تا مصارف نساجی، رنگ و شوینده‌ها را در بر گرفته است [9_12].

نانوکامپوزیت‌های مغناطیسی اکسید آهن با کربوکسی متیل سلولز (CMC)، بعلت توانایی خاص CMC در تغییر سطح نانوذرات مغناطیسی در مورد از بین بردن سلول های سرطانی و تشخیص سرطان کبد با تصویربرداری تشدید مغناطیسی (MRI) با کنتراست بسیار بالا و همچنین برای سیستم دارورسانی هدفمند در پزشکی و نیز برای حذف آلاینده های آلی و غیر آلی از آب در محیط زیست، توجهات بسیاری را به سمت خود جلب کرده است [13_16]. ذرات مغناطیسی می‌توانند به مولکول‌های دارو، پروتئین و آنزیم متصل شده و با استفاده از یک میدان خارجی به بافت هدف برسند.

به دلیل اهمیت نانوکامپوزیت ها سالما و همکاران نانوکامپوزیت اکسید آهن و CMC را ساختند [17].

در این پژوهش از CMC به عنوان بستری برای قرار دادن نانو ذرات مغناطیسی اکسید آهن استفاده شد که هم عاملی برای جلوگیری از به هم چسبیدن نانوذرات مغناطیسی می‌باشد و هم اینکه خواص کامپوزیت زیست سازگار مغناطیسی مورد بررسی قرار گیرد. در این پژوهش، تاثیر میدان مغناطیسی خارجی در هنگام ساخت نانوکامپوزیت برای اولین بار مورد بررسی قرار گرفته است.

پسماند مغناطیسی نمونه ساخته شده در شرایط معمولی رسم شده است. منحنی مغناطش از مبدا عبور می‌کند و میدان وادارندگی و مغناطش پسماند نیز مشاهده نمی‌شود، بنابراین می‌توان گفت که ذرات ساخته شده در دمای اتاق ابرپارامغناطیس هستند [18].



شکل 2: منحنی پسماند مغناطیسی نانوکامپوزیت Fe_3O_4 پوشش داده شده ساخته شده در شرایط معمولی و بدون حضور میدان (a) ساخته شده در حضور میدان مغناطیسی (b)

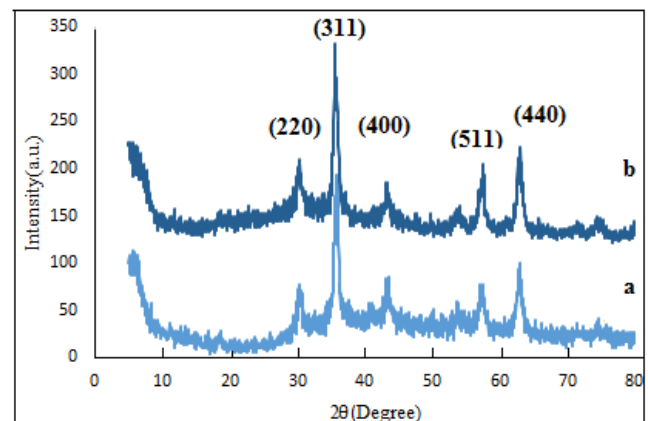
نمودار b در شکل 2 مربوط به نانو کامپوزیت مغناطیسی ساخته شده در حضور میدان مغناطیسی می‌باشد. مغناطش اشباع M_s نانوکامپوزیت از مقدار 41 emu/g (در شرایط ساخت عادی) به مقدار 62 emu/g برای نمونه ساخته شده در حضور میدان مغناطیسی افزایش یافته است. اثر میدان مغناطیسی در هم‌جهت ساختن بخشی از دوقطبی‌های مغناطیسی در جهت میدان مغناطیسی خارجی عامل ایجاد نواحی مغناطیسی قوی در نمونه و افزایش مغناطش اشباع می‌باشد.

شکل 3 تصاویر SEM (Scanning Electron Microscopy) نانوکامپوزیت را نشان می‌دهد. برای این منظور از دستگاه میکروسکوپ الکترونی روبشی مدل Vega2 ساخت شرکت TESCAN استفاده شد. همانطور که در شکل دیده می‌شود گستره اندازه ذرات در حالت حضور میدان مغناطیسی در حین ساخت، نسبت به حالت ساخت در شرایط معمولی باریکتر شده و شکل ذرات یکنواخت‌تر و همگن‌تر شده است و به طور کلی ذرات با ابعاد کوچک‌تری تولید شده است. همچنین ذرات از حالت کلوخه

شرایط معمول قرار دادیم. بعد از گذشت 1 ساعت از هر دو محلول، یکی تحت اعمال میدان مغناطیسی و دیگری در شرایط معمولی، خشک شدند.

نتایج و بحث:

آنالیز XRD (X-ray Diffraction) برای شناسایی ساختار بلوری محصولات و همچنین تأیید تشکیل فاز و عدم حضور ناخالصی، استفاده شد. دستگاه پراش اشعه ایکس مدل DRON-8 ساخت شرکت Bouvestni مورد استفاده قرار گرفت. نتایج XRD برای نمونه‌های ساخته شده در شرایط عادی و در حضور میدان مغناطیسی در شکل 1 آورده شده است. برای مقایسه، از الگوی پراش اشعه ایکس یک نمونه مرجع استفاده شد؛ (JCPDS (19-0629) که نشان داد نمونه عادی با الگوی پراش اشعه ایکس ماده مغناطیسی اکسید آهن (Fe_3O_4) کاملاً تطابق دارد و ساختار مکعبی نانوذرات اکسید آهن حفظ شده است.



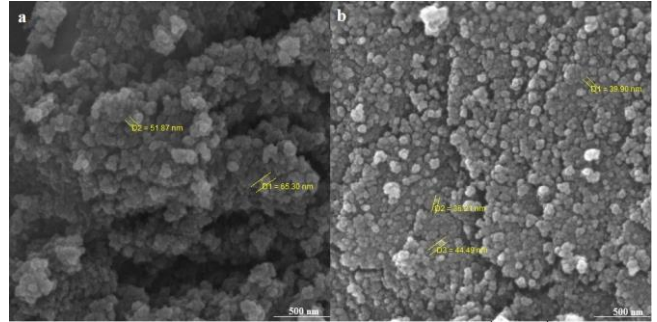
شکل 1: الگوی XRD نانوذرات مغناطیسی اکسید آهن اصلاح شده بدون حضور میدان (a) با حضور میدان (b)

از مقایسه دو شکل الگوی پراش شکل 1 می‌توان دریافت که حضور میدان مغناطیسی خارجی در هنگام ساخت نانوذرات بلورینگی نانوذرات را تغییر نداده است و هر دو نمونه ساختار بلورینگی یکسانی دارند.

خواص مغناطیسی نانو ذرات مغناطیسی اکسید آهن بوسیله دستگاه VSM (vibrating sample magnetometer) مورد بررسی قرار گرفت. دستگاه مغناطیس سنج ارتعاشی مدل MDK ساخت شرکت مغناطیس دانش پژوهش بود. در شکل 2 نمودار a منحنی

- [2] Y. Wei, B. Han, X. Hu, Y. Lin, X. Wang, X. Deng; "Synthesis of Fe₃O₄ nanoparticles and their magnetic properties"; *Chinese Materials Conference* (2011).
- [3] D. Lisjaka and A. Mertelj; "Anisotropic magnetic nano: A review of their properties, syntheses and potential application"; *Progress in Materials Science* (2018).
- [4] J. C. Miller, R. Serrato, J. M. Cardenas, G. Kundahl; "Hand book of Nano technology"; *wiley Inter science*, (2005).
- [5] G. Sharma, A. Kumar, S. Sharma, Mu. Naushad, R. P. Dwivedi, Z.A. ALothman, G.T. Mola; "Novel development of nanoparticles to bimetallic nanoparticles and their composites: A Review"; *Journal of King Saud University - Science* (2017).
- [6] A. Rios, M. Zougagh; "Recent advances in magnetic nanomaterials for improving analytical Processes"; *Journal of Trends in Analytical Chemistry* (2016).
- [7] G. Simonsen, M. Strand, G. Øye; "Potential applications of magnetic nanoparticles within separation in the petroleum industry"; *Journal of Petroleum Science and Engineering* (2018).
- [8] N. Habibi; "Preparation of biocompatible magnetite-carboxymethyl cellulose nanocomposite"; *Molecular and Biomolecular Spectroscopy* **131** (2014) 55–58.
- [9] O. Veisoh, J.W. Gunn, M. Zhang, *Adv. Drug Delivery Rev* **62** (2010) 284.
- [10] L. Gang, W. Zhiyong, L. Jian, X. Chunchao, G. Fabao, G. Qiyong, S. Bin, Z. Xuna, S. Xintao, C. Xiaoyuan, A. Hua, G. Zhongwei, *Biomater* **32** (2011) 528.
- [11] M. Uva, M. Tambasco, G. Grassi, I. Corsi, G. Protano, A. Atrei; "Carboxymethyl cellulose hydrogels cross-linked with magnetite nanoparticles for the removal of organic and inorganic pollutants from water"; *Journal of Environmental Chemical Engineering* **5** (2017) 3632–3639.
- [12] C. Pilapong, Y. Keereeta, S. Munkhetkorn, S. Thongtem, T. Thongtem; "Enhanced doxorubicin delivery and cytotoxicity in multidrug resistant cancer cells using multifunctional magnetic nanoparticles"; *Colloids Surf. B. Biointerfaces* **113** (2014) 249–253.
- [13] J. Gallo, N. Genicio, S. Penadés; "Uptake and intracellular fate of Fluorescent -magnetic glyco-nanoparticles"; *Adv. Healthc. Mater.* **1** (2012) 302–307.
- [14] D. R. Biswal, R. P. Singh; "Characterisation of carboxymethyl cellulose and polyacrylamide graft copolymer"; *Carbohydr. Polym.* **57** (2004) 379–387.
- [15] M. M. Miller, G. A. Prinz, S. F. Cheng, S. Bounnak, *Appl. Phys. Lett* **81** (2002) 2211.
- [16] S. Sitthichai, C. Pilapong, T. Thongtem, S. Thongtem; "CMC-coated Fe₃O₄ nanoparticles as new MRI probes for hepatocellular carcinoma"; *Applied Surface Science* **356** (2015) 972–977.
- [17] A. Salama, S. M. Etri, A. A. Salah, M. El-Sakhawy, "Carboxymethyl cellulose prepared from Mesquite tree: New source for promising nanocomposite materials"; *Carbohydrate Polymers* (2018).
- [18] D. Maity, D. C. Agrawal; "Synthesis of iron oxide nanoparticles under oxidizing environment and their stabilization in aqueous and non-aqueous media"; *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **308** (2007) pp 46–55.

ای خارج شده و شکل کروی و همگن تری به خود گرفته اند که به علت وجود بستر کامپوزیت از بهم چسبیده شدن نانوذرات مغناطیسی جلوگیری به عمل آمده است.



شکل 3: نمای SEM ذرات ساخته شده Fe₃O₄ اصلاح شده بدون حضور

میدان مغناطیسی (a) و با حضور میدان مغناطیسی (b)

نتیجه گیری

نانو ذرات اکسید آهن به روش هم‌رسوبی شیمیایی تهیه شدند. نتایج پراش پرتو ایکس نشان داد که در حضور میدان مغناطیسی شدت صفحات ساختار بلوری کاهش یافته ولی همچنان ساختار بلورینگی نانوذرات حفظ شده است. از تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی می‌توان دریافت که ذرات به دلیل جهت‌گیری در راستای میدان مغناطیسی اعمالی کمتر به یکدیگر چسبیده و کلوخه‌های کوچکتری تشکیل شده است. همچنین نتایج تحلیل دستگاه VSM نشان داد که ساخت نانوذرات در حضور میدان مغناطیسی، موجب افزایش 51 درصدی مقدار مغناطش اشباع می‌شود. این نتایج که برای اولین بار انجام شده است و می‌تواند در هدایت پارامترهای مطلوب و مورد نیاز محققان برای نانوذرات مغناطیسی و کاربردهای نانوکامپوزیت‌های مغناطیسی راهگشا باشد.

مرجع‌ها

- [1] A. V. B. Reddy, Z. Yusop, J. Jaafar, Y. V. M. Reddy, A. B. Arisa, Z. A. Majid, J. Talib, G. Madhavi; "Recent progress on Fe-based nanoparticles: Synthesis, properties, characterization and environmental applications"; *Journal of Environmental Chemical Engineering* **4**, (2016) 3537–3553.

اصلاح سطحی نانوکامپوزیت مغناطیسی $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO/GO$ با استفاده از پلیمر رسانای پلی آنیلین و ارزیابی عملکرد فوتوکاتالیزوری آن

دهقانی دشتابی، مهدیه؛ حکمت آراء، هدی؛ سیدیزدی، جمیله

گروه فیزیک دانشگاه ولی عصر رفسنجان (عج)

چکیده

در این پژوهش نانوکامپوزیت مغناطیسی $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO-GO/polyaniline$ با استفاده از پلیمریزاسیون درجای مونومرهای آنیلین در حضور نانوکامپوزیت $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO-GO$ تهیه شد. از نانوذرات مغناطیسی Fe_3O_4 به علت پایداری شیمیایی زیاد و سمیت کم به عنوان هسته مغناطیسی استفاده شد. انرژی سطحی بالای این نانوذرات منجر به کلوخه شدن و از بین رفتن ابعاد نانو شده و بنابراین فعالیت فوتوکاتالیزوری را بشدت کاهش می‌دهد. برای رفع این مشکل اصلاح سطح نانوذرات با استفاده از پوشش اکسیدروی به دلیل توانایی اکسیداسیون قوی مورد استفاده قرار گرفت. از اکسیدگرافن که دارای گروه‌های عاملی اکسیژن‌دار می‌باشد، به عنوان سومین ماده استفاده شد. از آنجاییکه مواد معدنی اصلاح شده با GO فعالیت فوتوکاتالیزوری را افزایش می‌دهند، اصلاح سطح این نانوکامپوزیت با استفاده از پلی آنیلین رسانا که دارای پایداری زیست‌محیطی و اندرکنش الکترونیکی قوی با نانوذرات است، انجام شد. نتایج نشان داد که نانوکامپوزیت سنتز شده $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO-GO/polyaniline$ فعالیت فوتوکاتالیزوری بهتری را نسبت به عدم حضور پلیمر دارد. بالاترین بازده تخریب رنگ به دست آمده ۹۱/۶۶ درصد است که پس از گذشت زمان ۴۰ دقیقه در شرایط غلظت اولیه رنگ و نانوکامپوزیت مغناطیسی بدست آمد.

Surface modification of $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO/GO$ magnetic nanocomposite using polyaniline as a conductive polymer and evaluation of its photocatalytic performance

Dehghani Dashtabi, Mahdiah; Hekmatara, Hoda; Seyedyazdi, Jamileh

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

Abstract

In this study, $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO-GO/polyaniline$ magnetic nanocomposite has been synthesized via in-situ polymerization of aniline monomers in presence of $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO/GO$ nanocomposite. Fe_3O_4 magnetic nanoparticles were used as a magnetic core due to their high chemical stability and low toxicity. The high surface energy of these nanoparticles results in agglomeration and nano-dimensional loss of the nanoparticles, and therefore the photocatalysis activity is greatly reduced. To solve the problem, surface modification using an oxidation coating applied due to its strong oxidation ability. Graphene oxide, which contains oxygen species, was used as the third agent. Since modified GO-based minerals increase photocatalytic activity surface modification performed using conductive poly-aniline, which has a stable environmental and strong electronic interaction with nanoparticles. The results showed that the synthesized nanocomposite $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO-GO/polyaniline$ has a better photocatalytic activity than in the absence of polymer. The highest removal efficiency of the obtained paint was obtained as 91.66%, which was obtained after 40 minutes at initial concentration of dye and magnetic nanocomposite.

PACS No (75.20)

مقدمه

چشم انسان‌ها و حیوانات، سوختگی‌های موضعی شود. از این رو تخلیه بیش از حد آن در پساب‌های نسابی برای سلامت انسان و محیط زیست خطرناک می‌باشد. در این زمینه نانوذرات و نانوکامپوزیت‌های مغناطیسی می‌توانند نقش مهمی در احیای آب-های آلوده داشته باشند [۵].

روش انجام آزمایش:

سنتز نانوکامپوزیت $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ZnO}/\text{GO}$

برای سنتز نانوذرات هسته/پوسته ابتدا 1 g 0.1 نانوذره Fe_3O_4 را در 25 میلی‌لیتر اتانول حل کرده و تحت حمام فراصوت قرار می‌دهیم تا نانوذرات به طور کامل پراکنده شوند. سپس به کمک استیرر هم زده شده و به مدت 1 ساعت تحت دمای 60°C قرار گرفت. پس از آن آمونیاک به قدری اضافه شد که pH محلول به 10 رسید. بعد از آن 0.05 گرم استات روی در 10 میلی‌لیتر اتانول به طور جداگانه حل و قطره قطره به محلول اضافه شد و سپس به مدت 3 ساعت تحت دمای 80°C قرار گرفت. در آخر محلول با آب دیونیزه شستشو داده شد و تحت دمای 60°C خشک گردید. سپس مقدار 0.1 گرم از نانوصفحات اکسید گرافن را همراه با آب دیونیزه در حمام آلتراسونیک قرار گرفت تا به طور یکنواخت پراکنده شود. سپس به مدت 30 دقیقه در دمای 50°C با کمک همزن مغناطیسی همزده شد. پس از آن مقدار 0.2 گرم از نانوذرات هسته/پوسته بصورت جداگانه با 10 میلی‌لیتر آب دیونیزه مخلوط شده و تحت حمام فراصوت قرار گرفت تا بصورت یکنواخت پراکنده شود. این محلول را به صورت قطره قطره به محلول اکسیدگرافن اضافه شد و به مدت 4 ساعت تحت رفلاکس با دمای 80°C قرار گرفت. در نهایت محلول شستشو داده شد و تحت دمای 50°C خشک گردید.

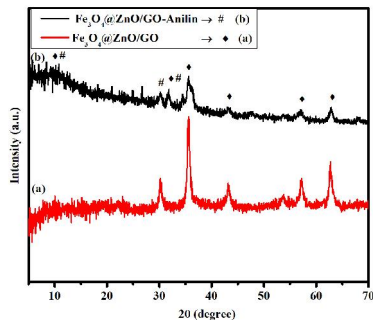
سنتز و بررسی نانوکامپوزیت مغناطیسی چهارتایی

 $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ZnO}-\text{GO}-\text{PolyAniline}$

مقدار مشخصی از نانوذرات $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ZnO}/\text{GO}$ به 30 میلی لیتر از محلول 1 مولار هیدروکلریک اسید که حاوی 0.4 میلی‌لیتر آنیلین بود اضافه شد و تحت حمام آلتراسونیک قرار گرفته سپس به کمک استیرر به شدت هم زده شد. محلول آمونیوم پرسولفات

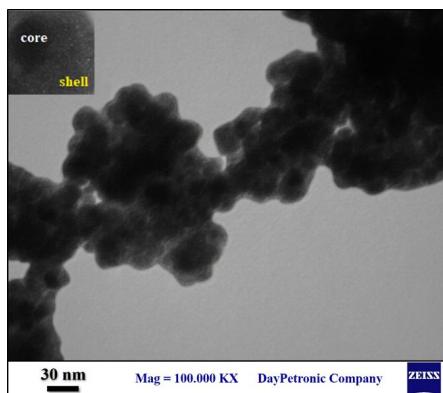
با افزایش رشد جمعیت و توسعه صنعت، مواد خطرناک و آلاینده دفع شده از کارخانه‌ها و خانه‌ها افزایش یافته است. بنابراین حذف و یا تخریب آنها یک چالش جهانی قابل توجه است، و از این رو روش‌های متنوعی برای حذف آلاینده‌ها گزارش شده است، از قبیل اکسیداسیون فیزیکی، شیمیایی، تجزیه فوتوکاتالیستی و تکنولوژی غشایی، که از این میان روش فوتوکاتالیستی برای تخریب مواد زائد آلی و معدنی با توجه به هزینه کم و عملکرد بالا و آسان بسیار مورد توجه قرار گرفته است [۱]. نانوذرات اکسید آهن (مگنتیت)، در مقیاس نانو دارای خاصیت ابرپارامغناطیس می‌باشند که منجر به ظرفیت جذب بالا، آسان و سریع در عملکرد فوتوکاتالیستی می‌شوند. نیم‌رساناها می‌توانند خواص ورقه‌های گرافن را تغییر دهند. ترکیب گرافن با نیم‌رساناها برای بهبود عملکرد فوتوکاتالیستی در تصفیه فاضلاب‌ها مورد توجه قرار گرفته است. از آنجایی که گرافن به عنوان نیم‌رسانایی با گاف نواری صفر، دارای گروه‌های عاملی اکسیژن‌دار می‌باشد، به همین دلیل قابلیت انحلال عالی در آب داشته و سازگار با محیط زیست بوده و همچنین دارای خواص عالی الکترونیکی در ذخیره و حمل الکترون می‌باشد که ترکیب آن با ZnO و Fe_3O_4 منجر به بهبود فعالیت فوتوکاتالیستی آنها شده است و حضور نانوذرات در سطح گرافن مانع تجمع لایه‌های گرافن می‌شود و از این رو سطح مؤثر برای حذف آلاینده‌ها از محلول‌های آبی افزایش می‌یابد [۲-۳]. استفاده از پلیمرهای رسانا روشی مناسب برای اصلاح سطح نیم-رساناهاست. پلیمرهای هادی شاخه‌ای از پلیمرها هستند که خاصیت الکتریکی در بازه‌ای شامل عایق تا رسانا از خود نشان می‌دهند. در میان آنها پلی‌انیلین بدلیل پایداری زیست محیطی، مونومر ارزان، آسانی سنتز، هدایت قابل تنظیم و ویژگی‌های کاتالیزوری، توجه زیادی را به خود جلب کرده است [۴].

متیلن‌بلو نوعی رنگ شیمیایی آروماتیک کاتیونی پُرکاربرد و بسیار مهم در صنایع نسابی است. این ترکیب رنگی، به منظور رنگ‌آمیزی پنبه، پشم و ابریشم مورد استفاده قرار می‌گیرد. استنشاق این ترکیب می‌تواند سبب اختلال در تنفس شده و همچنین مواجهه مستقیم با آن می‌تواند باعث بروز آسیب‌های دائمی به

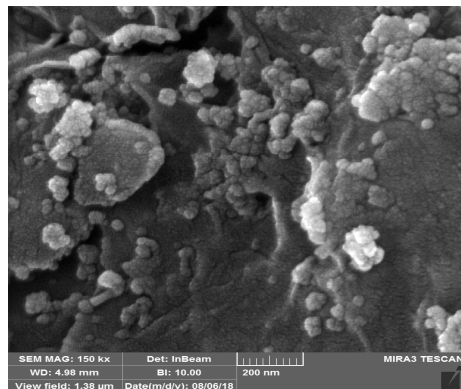


شکل ۱: الگوی XRD از (a) نانوکامپوزیت $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO-GO$ و (b) نانوکامپوزیت $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO-GO/Polyaniline$.

شکل ۲ به وضوح ساختار هسته/پوسته نانوذرات $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO$ را نشان می‌دهد. تصاویر TEM نشان می‌دهند که ساختار هسته/پوسته تقریباً کروی است، پراکندگی نانوذرات کم بوده و این را می‌توان به خاصیت مغناطیسی ذرات نسبت داد که تمایل زیادی برای اتصال به هم و تشکیل خوشه را دارند. اکثر ذرات دارای شکل تقریباً کروی بوده با توجه به چگالی الکترونی بالای اکسید آهن نسبت به اکسیدروی، در تصاویر هسته تیره‌تر از پوسته دیده می‌شود.



شکل ۲: تصاویر TEM از نانوذرات $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO$.



شکل ۳: تصاویر FESEM مربوط به نانوکامپوزیت مغناطیسی $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO-GO/Polyaniline$.

حل شده در هیدروکلریک اسید به صورت قطره قطره به آن اضافه شد و واکنش پلیمریزاسیون به مدت ۷ ساعت در حمام یخ در دمای 2°C انجام شد و رسوب سبز رنگ به دست آمده پس از شستشو در دمای 60°C درجه خشک گردید.

آزمایش‌های فوتوکاتالیزوری:

از متیلن‌آبی به عنوان نمونهی آلاینده برای بررسی رفتار فوتوکاتالیزوری نانوکامپوزیت $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO-GO$ و اصلاح شده با پلی‌انیلین استفاده شد. به این صورت که ابتدا محلول 3 mM از رنگ متیلن‌آبی تهیه و پس از آن مقادیر 6 mL میلی‌گرم از نانوذرات $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO-GO$ اصلاح شده با آنیلین در آن حل شد و به مدت 30 min در محیط تاریک قرار داده شد تا جذب سطحی توسط نانوذرات انجام شود. جذب ماده واکنش دهنده روی سطح کاتالیست از مهمترین گام‌های افزایش عملکرد فوتوکاتالیزوری می‌باشد. پس از آن در زمان‌های مختلف تحت لامپ UV، با توان 250 W قرار گرفت و تغییر در شدت قله جذب مشخصه متیلن-آبی در 660 nm نانومتر در طول زمان مشاهده گردید. میزان تخریب برای تمامی نمونه‌ها در زمان‌های مختلف با استفاده از دستگاه UV-vis اندازه‌گیری شد.

نتایج و بحث:

نتایج الگوی پراش پرتوی X (شکل ۱a) نشان دهنده قله‌های مشخصه در زوایای 10.35° ، 30.22° ، 35.66° ، 43.05° ، 53.83° ، 57.10° و 62.80° درجه، به ترتیب مربوط به صفحات (001) ، (311) ، (101) ، (102) و (103) از فازهای اسپینل معکوس مکعبی از اکسید آهن و هگزائونال اکسیدروی از نانوکامپوزیت $\text{Fe}_3\text{O}_4@ZnO-GO$ می‌باشند. از شکل ۱b حضور قله‌های مشخصه‌ی پلی‌انیلین در زوایای 9.70° ، 30.03° و 32.03° دیده می‌شود که نشان دهنده سنتز موفقیت‌آمیز پلی‌انیلین بر روی نانوکامپوزیت مغناطیسی می‌باشد. اندازه متوسط نانوبلورک‌ها با استفاده از معادله دبی-شرر $D=0.9\lambda/(\beta\cos\theta)$ با توجه به شدیدترین قله بترتیب 2.9 و 17 نانومتر بدست آمد.

از شکل ۵ میزان تخریب نانوکامپوزیت $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ZnO-GO}$ و $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ZnO-GO}/\text{Polyaniline}$ با غلظت ۶ میلی‌گرم در محلول متیلن‌آبی پس از گذشت ۴۰ دقیقه به ترتیب ۶۷/۵۸ و ۹۱/۶۶ درصد بدست آمد که با حضور پلی‌آنیلین به مراتب افزایش یافته است. بازده تخریب نوری متیلن‌آبی توسط نانوذرات کاتالیست بصورت زیر محاسبه می‌شود:

میزان جذب محلول رنگ قبل و بعد از تابش می‌باشد.

$$\text{درصد تخریب} = [(C_0 - C) / C_0] \times 100$$
 که در آن C_0 و C به ترتیب

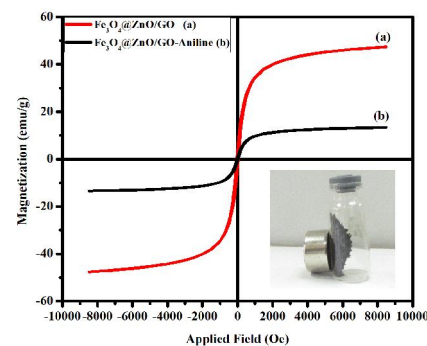
نتیجه‌گیری:

در این پژوهش سنتز موفقیت‌آمیز نانوکامپوزیت مغناطیسی $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ZnO}/\text{GO}$ با روش هیدروترمال از نتایج آنالیز XRD و تصاویر TEM تأیید شد. اصلاح سطحی این نانوکامپوزیت با استفاده از پلی‌آنیلین رسانا با روش پلیمریزاسیون درجا انجام گرفت. متوسط اندازه نانوذرات به ترتیب ۲/۹ و ۱۷ نانومتر محاسبه شد که با حضور پلی‌آنیلین اندازه نانوذرات افزایش یافت. نانوکامپوزیت $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ZnO-GO}/\text{Polyaniline}$ دارای رسانایی و خاصیت ابرپارامغناطیس می‌باشد، تخریب فوتوکاتالیزوری رنگ متیلن‌بلو با استفاده از نانوجاذب $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ZnO-GO}$ و اصلاح شده با پلی‌آنیلین مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که نانوجاذب با حضور پلی‌آنیلین به دلیل افزایش سطح تماس رفتار شگفت‌انگیزی از خود نشان می‌دهد و به عنوان یک فوتوکاتالیست قابل بازیافت در زمان ۴۰ دقیقه میزان تخریب رنگ بالای ۹۱/۶۶ درصد را نتیجه داد.

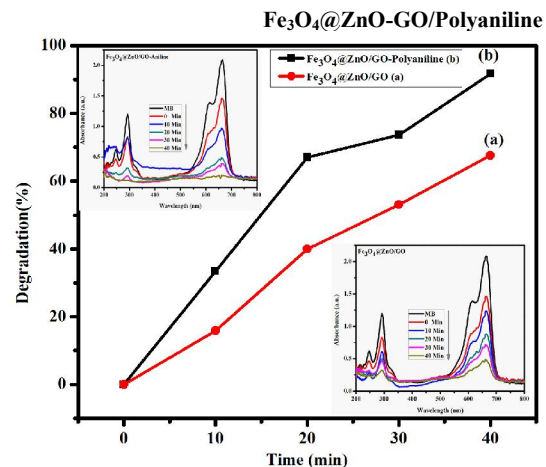
مرجع‌ها:

- [1] M. N. Chong, B. Jin, C. W. Chow, and C. Saint, "Recent developments in photocatalytic water treatment technology: A review", *Water Res.* 44 (2010) 2997-3027.
- [2] S. Ghanbarnezhad, S. Baghshahi, A. Nemati, and M. Mahmoodi, "Preparation, magnetic properties, and photocatalytic performance under natural daylight irradiation of Fe_3O_4 -ZnO core/shell nanoparticles designed on reduced GO platelet" *Mat. Sci. Semicon. Proc.* 72 (2017) 85-92
- [3] Q. Feng, S. Li, W. Ma, H. J. Fan, X. Wan, Y. Lei, Z. Chen, J. Yang, and B. Qin, "Synthesis and characterization of $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{ZnO-GO}$ nanocomposites with improved photocatalytic degradation methyl orange under visible light irradiation" *J. Alloys Compd.* 737 (2018) 197-206
- [4] Xiaoyuan Zhang, Jianning Wu, Guihua Meng, Xuhong Guo, Chang Liu and Zhiyong Liu, "One-step synthesis of novel PANI- Fe_3O_4 @ZnO core-shell microspheres: an efficient photocatalyst under visible light irradiation", *Appl. surf. Sci.*, 366 (2016) 486-493
- [5] H. Chenn, N. Chen, Y. Gao and C. Feng, "Photocatalytic degradation of methylene blue by magnetically recoverable $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Ag}_6\text{Si}_2\text{O}_7$ under simulated visible light", *J. Powder Technology.*, 326 (2018) 247-257.

همچنین شکل (۳)، تصویر FESEM نانوکامپوزیت $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ZnO-GO}/\text{Polyaniline}$ به وضوح نشان می‌دهد که نانوذرات هسته/پوسته کروی به شکل همگن بر روی صفحات گرافن همراه با پوشش دهی پلی‌آنیلین قرار گرفته‌اند. بررسی رفتار مغناطیسی نمونه‌ها با مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی در دمای اتاق و در میدان ۱۰ تا ۱۰- kOe انجام شد، منحنی پسماند مغناطیسی بدست آمده (شکل ۴)، طبیعت ابرپارامغناطیس بودن سیستم در مقیاس نانو را نشان می‌دهد و مقدار مغناطیس اشباع برای نانوکامپوزیت $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ZnO-GO}$ ۴۸ emu/g و با حضور پلی‌آنیلین، ۱۳/۸۲ emu/g بدست آمد. کاهش اشباع مغناطیسی بدلیل حضور پلیمر غیرمغناطیسی آنیلین روی سطوح نانوذرات می‌باشد. همچنین خواص مغناطیسی ذرات به اندازه و شکل آنها بستگی دارد.



شکل ۴: آنالیز VSM نانوکامپوزیت‌های $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ZnO-GO}$ و



شکل ۵: نمودار درصد تخریب رنگ با استفاده از نانوکامپوزیت $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ZnO-GO}/\text{Polyaniline}$ و $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{ZnO-GO}$

مطالعه ساختاری و بررسی ویژگی های مغناطیسی و رنگ زدایی نانوکامپوزیت های

 $Zn_{0.5}Co_xMg_{0.5-x}Fe_2O_4/MWCNT$

شهیدی شهیدانی، حسین؛ سیفی، مجید

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه گیلان، رشت

چکیده

نانوکامپوزیت های مغناطیسی بر پایه نانولوله های کربنی و نانوفریت های مغناطیسی با موفقیت از روش هیدروترمال سنتز شدند. هدف از این کار پژوهشی، در ابتدا مطالعه تغییرات ساختاری نانوکامپوزیت ساخته شده اولیه حاوی نانولوله های کربنی چند دیواره و اکسید فلزات آهن، روی و منیزیم بود که پس از افزودن تدریجی کبالت، فرمولاسیون نهایی این کامپوزیت ها به صورت $Zn_{0.5}Co_xMg_{0.5-x}Fe_2O_4/MWCNT$ درمی آید ($x=0, 0.2$ and 0.4). الگوهای پراش پرتو ایکس (XRD) حاکی از ساختار بلوری اسپینلی نانوذرات مغناطیسی بوده که محاسبات دبی-شیر نشان داد که اندازه این ذرات سوپرپارامغناطیس کمتر از ۲۰ نانومتر می باشد. طیف سنجی تبدیل فوریه فروسرخ ($FTIR$) نشان داد که گروه های عاملی آروماتیک کربنی و نیز پیوندهای اکسید فلزی در نانوکامپوزیت ها وجود دارند. ساختارهایی منظم و همگن در تصاویر میکروسکوپ الکترونی گسیل میدانی ($FESEM$) دیده شدند. با استفاده از نتایج مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی (VSM) مشاهده شد که با افزایش مقدار کبالت در نمونه ها، اندیس های مغناطیسی و ویژگی های سوپرپارامغناطیسی این نانوکامپوزیت ها افزایش چشمگیری می یابد. ضمناً آزمون های جذب رنگدانه های متیلن بلو با استفاده از دستگاه فرابنفش-مرئی ($UV-vis$) نشان دادند که در وهله اول این نانوکامپوزیت ها قدرت بر جذب بالایی را داشته و ضمناً افزایش کبالت در ساختارها، بهبود چشمگیری را در قابلیت بر جذب ایجاد می نماید.

Structural Study and Investigation of Magnetic and Removal Characteristics of $Zn_{0.5}Co_xMg_{0.5-x}Fe_2O_4/MWCNT$ Nanocomposites

Shahidi Shahidani, Hossein; Seifi, Majid

Department of Physics, Faculty of Science, University of Guilan, Rasht

Abstract

Magnetic nanocomposites including carbon nanotubes and magnetic nanoferrites were successfully synthesized by using a hydrothermal route. The aim of this work was first to study of the structural change in the initially-synthesized nanocomposites including multiwalled carbon nanotubes and metal (iron, zinc, and magnesium) oxides, which the resulting samples' formulae was in the form of $Zn_{0.5}Co_xMg_{0.5-x}Fe_2O_4/MWCNT$ ($x= 0, 0.2$ and 0.4). The XRD patterns indicated the spinel crystalline structure of the magnetic nanoparticles. The FTIR spectroscopy showed that the aromatic carbonaceous functional groups as well as the metal-oxide bondings exist into nanocomposites structures. Regular and homogenous structures were observed in the field emission electron microscopy (FESEM) micrographs. It was found that increasing the cobalt value has a great influence on the magnetic indices and superparamagnetic characteristics of these nanocomposites. Besides that, methylene blue dye removal tests by using a UV-vis machine suggested that in one hand, all the nanocomposites benefit from a powerful dye removal capability, and on the other hand, the increase in cobalt value in the structures could enhance outstandingly the removal ability.

PACS No. 75.75.-c; 61.46.+w; 87.64.Gb; 95.75.Fg; 68.37.Hk.

دارای اهمیت بالای فناورانه از نظر خواص الکتریکی و مغناطیسی می باشند. نانولوله های کربنی به علت ویژگی های جذاب فیزیکی و کاربردهای فراوان خود در شاخه های مختلف تکنولوژی، به صورت گسترده ای مورد مطالعه قرار گرفته اند [۱-۳]. یکی از این زمینه های مورد علاقه مربوط به مغناطیسی کردن نانولوله های

مقدمه

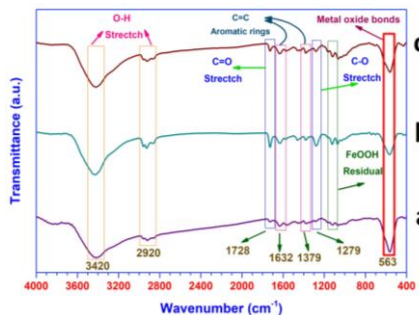
مواد مغناطیسی که دارای ویژگی های الکتریکی و مغناطیسی منحصر به فردی هستند به عنوان فریت ها شناخته می شوند. اکسید آهن و اکسیدهای فلزی سازندگان اصلی فریت ها هستند. فریت ها مواد اکسید مغناطیسی با طبیعت نیمه رسانا هستند که

محلول حاصل را با استفاده از روش هیدروترمال به داخل اتوکلاو ریخته و به مدت ۲۰ ساعت در دمای ۱۸۰ درجه سانتیگراد گرم می دهیم. رسوب به دست آمده را با آب دیونیزه شستشو داده تا مقدار pH به عدد ۷ برسد. در انتهای کار، نمونه مغناطیسی ساخته شده ($Zn_{0.5}Mg_{0.5}Fe_2O_4/MWCNT$) را به صورت شبانه ساعت در دمای ۵۰ درجه سانتیگراد خشک کردیم. نمونه دوم همانند نمونه اول ساخته شد، با این تفاوت که مقدار نیترات منیزیم ۶ آبه ۰/۱۱۲ گرم و نیترات کبالت ۶ آبه ۰/۰۸۴۵ گرم بوده و سایر مقادیر ثابت بود. به همین ترتیب برای نمونه سوم مقادیر به این شرح انتخاب شدند: نیترات کبالت: ۰/۱۶۹ گرم و نیترات منیزیم: ۰/۰۳۷ گرم. فرمولاسیون نمونه های نهایی عبارتند از:

$Zn_{0.5}Co_xMg_{0.5-x}Fe_2O_4/MWCNT$ که مقادیر X به ازای نمونه های اول تا سوم به ترتیب ۰، ۰/۲ و ۰/۴ می باشند.

طیف سنجی تبدیل فوریه فروسرخ

نتایج طیف سنجی FTIR نانوکامپوزیت های سنتز شده در شکل ۱ آمده اند که گویای موفقیت سنتزهای انجام شده و حضور اکسیدهای فلزی در ماتریس کامپوزیت ها می باشند. گروه های عاملی مهم از قبیل O-H کششی مربوط به رطوبت موجود در نمونه ها و نیز پیوندهای اکسیژنی تشکیل شده به دلیل وجود هیدروژن در بعضی از مکان های فرعی ساختارهای اسپینلی و یا آروماتیک، C=O کششی منسوب به گروه های کربوکسیل ایجاد شده به دلیل عاملدارسازی نانولوله های کربنی، C=C مربوط به حلقه های آروماتیک نانولوله های کربنی، FeOOH باقیمانده از فرایند هیدروترمال سازنده ساختارهای اسپینلی بر روی سطوح نانولوله های کربنی، و همچنین پیوندهای اکسید فلزی مربوط به فریت های مغناطیسی موجود در نانوکامپوزیت ها در شکل دیده می شوند.



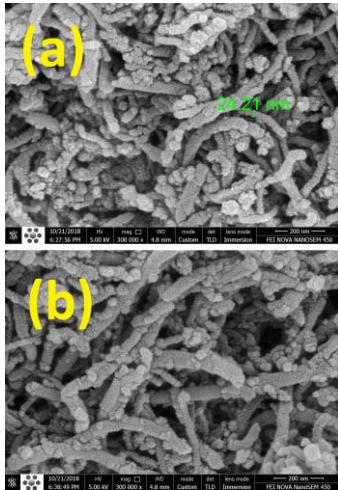
کربنی و استفاده از این نانولوله های مغناطیسی در اهداف مغناطیسی حوزه نانو از قبیل نانوسیم های مغناطیسی، فرولویدها، آهنرباهای مولکولی و مواد فعال NMR می باشند [۴]. اهداف مورد نظر که در این کار پژوهشی دنبال خواهند شد عبارتند از: ۱- عاملدار کردن نانولوله های کربنی چند دیواره به منظور افزایش جذب نانوذرات مغناطیسی و بهبود دیسپرس شدن نانومواد سنتز شده حاوی نانولوله های کربنی، ۲- ساخت نانوکامپوزیت های $Zn_{0.5}Mg_{0.5}Fe_2O_4/MWCNT$ ۳- افزودن تدریجی کبالت به فرمولاسیون بالا توسط کاهش درصد منیزیم و سنتز دو نانوکامپوزیت جدید از این طریق، ۴- بررسی ویژگی های ساختاری و فیزیکی تمامی نمونه های کامپوزیتی سنتز شده، و ۵- بررسی ویژگی های برجذب سه نمونه مغناطیسی ساخته شده و نیز بررسی نقش کبالت در بهبود توانایی جذب رنگدانه های صنعتی.

شرح آزمایش

عاملدار کردن نانولوله های کربنی چند دیواره به این صورت انجام گرفت: مقدار ۱ گرم از نانولوله های کربنی را در محلول ۳ به ۱ اسید سولفوریک (۳۰ میلی لیتر) و اسید نیتریک (۱۰ میلی لیتر) قرار داده و ترکیب حاصله را به مدت ۴ ساعت در اولتراسونیک با دمای ۶۰ درجه هم زدیم. سپس با استفاده از کاغذ صافی، قیف، ارلن مایر و پمپ خلا نانولوله های کربنی را شسته و استخراج کردیم. شستشوی نانولوله های کربنی تا جایی ادامه یافت که pH محلول به حدود ۶ تا ۷ (مقدار خنثی) برسد. در نهایت رسوب سیاه رنگ به دست آمده را در آن با دمای ۵۰ درجه سانتیگراد به صورت شبانه خشک کردیم. سنتز نانولوله های مغناطیسی: ابتدا مقدار ۱۵۰ میلی گرم از نانولوله های کربنی عاملدار را در ۵۰ میلی لیتر آب دیونیزه به مدت ۱ ساعت تحت امواج اولتراسونیک قرار دادیم. سپس ۱/۱۷۳ گرم نیترات آهن ۶ آبه، ۲۱۶،۰ گرم نیترات روی ۶ آبه و ۰/۱۸۶ گرم نیترات منیزیم ۶ آبه را به همراه ۲۰ میلی لیتر آب دیونیزه به مدت ۳۰ دقیقه بر روی مگنتیک استیر هم زدیم. در ادامه، محلول نانولوله های کربنی را به محلول بالا اضافه کرده و به مدت ۱ ساعت به صورت مغناطیسی هم زدیم. بعد از گذشت این زمان، محلول هیدروکسید سدیم ۶ مولار را قطره قطره به ترکیب اضافه کرده تا pH محلول به عدد ۱۲ برسد. سپس

تصاویر میکروسکوپ الکترونی عبوری

شکل ۳ مربوط به تصاویر FESEM دو نمونه انتخابی از نانوکامپوزیت های مغناطیسی سنتز شده است که به ترتیب دارای مقدار مول های کبالت ۰ و ۰/۴ در نانوکامپوزیت های سنتز شده هستند. در این شکل، پخش منظم و همگن نانوذرات مغناطیسی فریت در شبکه منظم نانولوله های کربنی مشاهده می شود. همانطور که از تصاویر پیداست، این نانوذرات مغناطیسی اندازه هایی در بازه کوچکتر از ۲۰ نانومتر دارند، که اولاً، موید محاسبات دبی-شرر بوده، و ثانیاً، تاییدی بر خاصیت سوپرپارامغناطیسی نانوکامپوزیت های ساخته شده هستند.



شکل ۳: تصاویر FESEM نانوکامپوزیت های منتخب در مقیاس ۲۰۰ نانومتر:

$Zn_{0.5}Mg_{0.5}Fe_2O_4/MWCNT$: (a)

$Zn_{0.5}Co_{0.4}Mg_{0.1}Fe_2O_4/MWCNT$: (b)

مشخصه یابی مغناطیسی نانوکامپوزیت ها

فریت ها به دلیل تنوع بالا، قیمت پایین و عملکرد بالای الکترومغناطیسی، مواد مفید و پرکاربردی محسوب می شوند. استفاده همزمان از ویژگی های منحصر به فرد نانولوله های کربنی و نانوذرات مغناطیسی مختلف می تواند به بهره وری از مواد هوشمند جدید جهت کاربرد در حوزه های بالاسطحی تکنولوژی کمک نماید [۵]. شکل ۴ نتایج VSM سه نانوکامپوزیت سنتز شده مغناطیسی را نشان می دهد. همانطور که از نمودارها مشخص است، مقادیر مغناطش اشباع بسیار بالا و مقادیر وادارندگی ناچیز است، که دلیلی بر سوپرپارامغناطیس بودن نمونه هاست. بالاترین مقدار مغناطش اشباع مربوط به نمونه حاوی کبالت با ضریب ۰/۴

شکل ۲: نتایج طیف سنجی FTIR نانوکامپوزیت های سنتز شده:

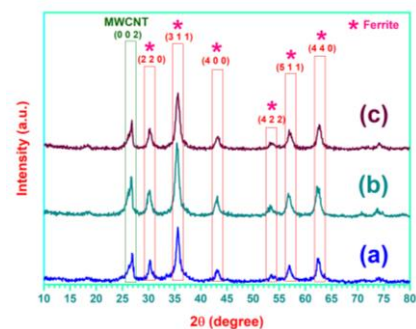
$Zn_{0.5}Mg_{0.5}Fe_2O_4/MWCNT$: (a)

$Zn_{0.5}Co_{0.2}Mg_{0.3}Fe_2O_4/MWCNT$: (b)

$Zn_{0.5}Co_{0.4}Mg_{0.1}Fe_2O_4/MWCNT$ (c)

الگوهای پراش پرتو ایکس

الگوهای XRD نمونه های ساخته شده، حاکی از موفقیت تمام سنتزها هستند. به این شرح که بر اساس شکل ۲، یک پیک قوی و بلند در حوالی ۲۶ درجه نشان دهنده وجود صفحات هگزاگونال کربنی (۰۰۲) موجود در نانولوله های کربنی می باشد. نتیجه گرفته می شود که در فرایند هیدروترمال، ساختار نانولوله های کربنی بر اثر گرما و فشار به هم نمی ریزد. در تمامی منحنی ها، پیک های مربوط به ساختار های اسپینلی فریت ها در اطراف زوایه های ۳۱، ۳۵، ۴۳، ۵۳، ۵۷، ۶۳ دیده می شوند که به ترتیب مربوط به صفحات بلوری (۲۰۲)، (۳۱۱)، (۴۰۰)، (۴۲۲)، (۵۱۱) و (۴۴۰) می باشند. باید خاطر نشان شود که عدم وجود صفحات بازتابی (۲۱۰)، (۲۱۱) و (۳۰۰) دلیل محکمی مبنی بر این است که نانوذرات غیرمغناطیسی $\gamma-A_2O_3$ به عنوان محصول نهایی فرایند هیدروترمال تشکیل نشده اند که A نشان دهنده فلزات آهن، روی، منیزیم، و کبالت است. اندازه بلوری نانوذرات مغناطیسی موجود در نانوکامپوزیت ها با استفاده از رابطه دبی-شرر به دست آمد که نشان داد تمامی نانوذرات سنتز شده دارای اندازه هایی کمتر از ۲۰ نانومتر می باشند که این یکی از مشخصه های ذرات سوپرپارامغناطیس ساخته شده از فریت ها می باشد.



شکل ۲: الگوهای XRD نمونه های پودری نانوکامپوزیت ها:

$Zn_{0.5}Mg_{0.5}Fe_2O_4/MWCNT$: (a)

$Zn_{0.5}Co_{0.2}Mg_{0.3}Fe_2O_4/MWCNT$: (b)

$Zn_{0.5}Co_{0.4}Mg_{0.1}Fe_2O_4/MWCNT$ (c)

$Zn_{0.5}Mg_{0.5}Fe_2O_4/MWCNT$: (a)

$Zn_{0.5}Co_{0.2}Mg_{0.3}Fe_2O_4/MWCNT$: (b)

$Zn_{0.5}Co_{0.4}Mg_{0.1}Fe_2O_4/MWCNT$ (c)

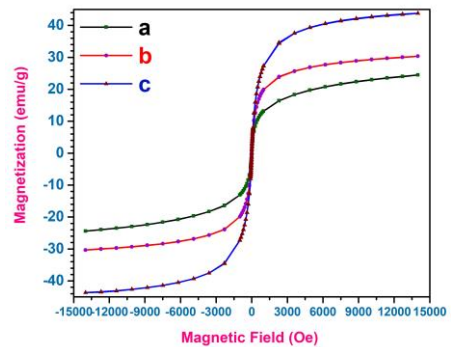
نتیجه گیری

نانوکامپوزیت های مغناطیسی فریت/نانولوله کربنی چند دیواره از روش هیدروترمال و با افزودن تدریجی کبالت برای سنتز هر نمونه جدید ساخته شدند. در این پژوهش، اولین نوآوری، ورود همزمان روی، منیزیم، و کبالت به درون ساختار اسپینلی با مقادیر مختلف کبالت بود. نوآوری بعدی، مطالعه اثر این کامپوزیت ها در برجذب رنگ های صنعتی و مهم تر از آن بررسی اثر افزایش کبالت بر میزان برجذب این رنگدانه ها بود. نتیجه گرفته شد که از میان نمونه های سنتز شده، نمونه حاوی کبالت با مقدار مول ۰/۴ دارای قوی ترین خاصیت مغناطیسی و بالاترین بازده برجذب رنگدانه متیلن بلو می باشد.

مرجع ها

- [1] Omidi, M. H., Azghandi, M. H. A., & Ghalami-Chooabar, B. (2018). Sonochemistry: a good, fast and clean method to promote the removal of Cu (ii) and Cr (vi) by MWCNT/CoFe 2 O 4@ PEI nanocomposites: optimization study. *New Journal of Chemistry*, **42**(19), 16307-16328.
- [2] Ramesh, C., Prasanna, S. C., & Maridurai, T. (2018). MICROWAVE SHIELDING, DIELECTRIC AND MAGNETIC BEHAVIOUR OF MWCNT/Fe₃O₄ PRO-HYBRID NANO OXIDES REINFORCED NATURAL RUBBER COMPOSITE IN E, F, I & J BAND FREQUENCIES. *DIGEST JOURNAL OF NANOMATERIALS AND BIOSTRUCTURES*, **13**(4), 1103-1110.
- [3] Ikram, S., Arshad, M. I., Mahmood, K., Ali, A., Amin, N., & Ali, N. (2018). Structural, magnetic and dielectric study of La³⁺ substituted Cu_{0.8}Cd_{0.2}Fe₂O₄ ferrite nanoparticles synthesized by the co-precipitation method. *Journal of Alloys and Compounds*, **769**, 1019-1025.
- [4] Gangaswamy, D. R. S., Bharadwaj, S., Varma, M. C., Choudary, G. S. V. R. K., & Rao, K. H. (2018). Unusual increase in permeability in cobalt substituted Ni-Zn-Mg ferrites. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **468**, 73-78.
- [5] Bayat, M., Javanbakht, V., & Esmaili, J. (2018). Synthesis of zeolite/nickel ferrite/sodium alginate bionanocomposite via a co-precipitation technique for efficient removal of water-soluble methylene blue dye. *International journal of biological macromolecules*, **116**, 607-619.

مول است (۴۴emu/g)، و کمترین مقدار آن به نمونه اولیه فاقد کبالت (۲۵emu/g) می باشد. مقدار مغناطش باقیمانده نمونه ها بسیار ناچیز است، به طوری که تقریباً هیستریزس وجود ندارد.



شکل ۴: نمودارهای VSM نانوکامپوزیت های پودری سنتز شده:

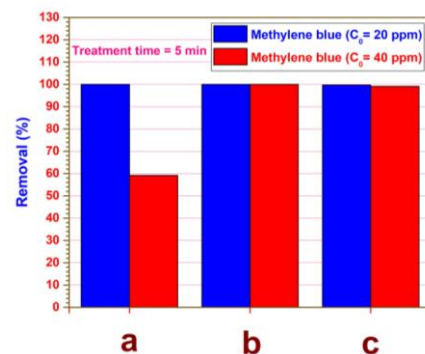
$Zn_{0.5}Mg_{0.5}Fe_2O_4/MWCNT$: (a)

$Zn_{0.5}Co_{0.2}Mg_{0.3}Fe_2O_4/MWCNT$: (b)

$Zn_{0.5}Co_{0.4}Mg_{0.1}Fe_2O_4/MWCNT$ (c)

قابلیت برجذب رنگدانه متیلن بلو

شکل ۵ مربوط به قدرت برجذب ذرات متیلن بلو حل شده در آب، توسط نانوکامپوزیت های سنتز شده مختلف می باشد. مستطیل های آبی متعلق به غلظت های ۲۰ ppm و مستطیل های قرمز هم مربوط به غلظت های ۴۰ ppm محلول های متیلن بلو هستند. مشاهده می شود که تمامی نمونه ها در غلظت ۲۰ ppm قدرت بالایی در برجذب رنگدانه های صنعتی متیلن بلو را دارند. پس موفقیت اول یعنی قابلیت چشمگیر برجذب رنگدانه حاصل شده است. نتیجه بسیار مهم و مورد علاقه دیگر این است که با افزایش کبالت، قابلیت برجذب این رنگدانه افزایش چشمگیری یافته است.



شکل ۵: نمودارهای ستونی برجذب رنگدانه های متیلن بلو حل شده در آب با غلظت های ۲۰ (آبی) و ۴۰ (قرمز) پی پی ام (ppm):

سنتز ساختارهای گرافن/فلزی مغناطیسی مورد استفاده در ادوات مگنتوالکترونیکی

شیخی فرد، زهرا^۱؛ محسنی، سید مجید^۱

^۱دانشکده فیزیک دانشگاه شهید بهشتی، اوین، تهران

چکیده

ساخت ادوات مدرن مگنتوالکترونیکی به منظور رقابت با گسترش بازار، نیازمند یک سری الزامات ویژه نظیر عملکرد خوب، تولید ساده، قابلیت اطمینان و هزینه کم می‌باشد. استفاده از مواد دوبعدی-مغناطیسی ساخته شده با روش الکترونهشت، یک نوع تکنولوژی ساده و مقرون به صرفه می‌باشد که توانایی عبور از روش‌های سنتی و پر هزینه تولید ادوات مگنتوالکترونیکی را به خوبی دارد و اخیراً توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است. در این پژوهش ساختارهایی بر پایه گرافن/ترکیبات فلزی با روش الکترونهشت به منظور استفاده در ساخت ادوات کاربردی مگنتوالکترونیکی تولید شده اند. فازهای تشکیل شده در این نانو ساختارها با استفاده از تحلیل *XRD* مورد مطالعه قرار گرفته است. مورفولوژی سطح نمونه نیز با تحلیل *AFM* بررسی شده است. همچنین مشخصه‌یابی پاسخ مغناطیسی نانو ساختارها با کمک آنالیز *GMR* در حالت‌های میدان موازی و عمود بر جریان صورت گرفته است.

Synthesis of Graphene/Metallic Magnetic Nanostructures Used in Magneto-electronic Devices

Zahra, Sheykhifard¹; S.Majid, Mohseni¹

¹ Department of Physics, University of Shahid Beheshti, Tehran,

Abstract

Development of modern magneto-electronic devices requires a number of special requirements, such as good performance, simple production, reliability and low cost to compete in the expansion of the market. Electrodeposition of 2D-magnetic materials is a simple and cost-effective methods which does not have the challenges of the costly and traditional methods of generating magneto-electronic devices, and has recently attracted the attention of many researchers. In this study, nanostructures based on 2D-magnetic materials by the use of electrodeposition method were developed for use in the manufacturing of the magnetelectronic devices. XRD analysis was used to investigate various crystal phases. In addition, sample surface morphology was examined by AFM analysis. The magnetic response of nanostructures is also characterized by GMR analysis in parallel and perpendicular magnetic fields to the electrical current.

PACS No. 70,75

مقدمه

حسگرهای میدان مغناطیسی، زمانی که با انواع جدیدی از قطعات الکترونیکی ادغام می‌شود و امکان حس کردن و پاسخ دادن به میدان مغناطیسی خارجی را فراهم می‌کند، مورد استفاده قرار گرفته است. وجود محدودیت‌هایی در انتخاب مواد، مدیریت گرما و انطباق سریع در وسایل الکترونیکی انعطاف‌پذیر و شفاف باعث

آماده‌سازی بهینه بسته‌هایی از قطعات الکترونیکی و حساس به مغناطیس در مقیاس میکرو/نانو در چند سال اخیر به یک مساله جدی تبدیل شده و توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است. تا کنون تکنولوژی‌های گوناگونی برای ساخت

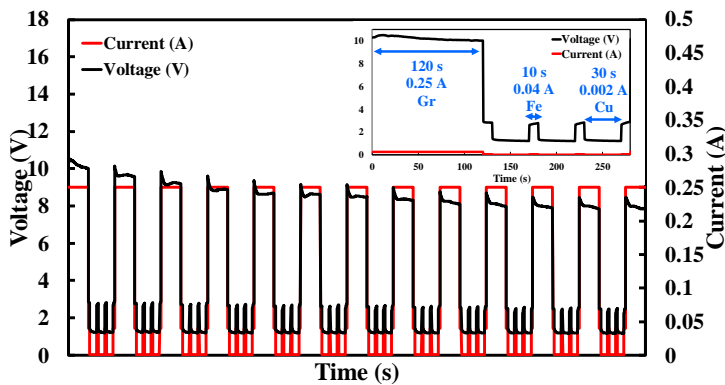
پژوهش‌های اخیر نشان می‌دهد فعالیت‌های قوی وجود دارد که به سمت تولید حسگرهای انعطاف‌پذیر حساس به میدان مغناطیسی می‌رود. مگنتوالکترونیک‌های مربوط به زمینه‌های اسپینترونیک و به ویژه اثر مقاومت مغناطیسی خیلی بزرگ (GMR)، اثر امپدانس مغناطیسی خیلی بزرگ (GMI) و اثر هال باعث جذابیت‌های تحقیقاتی بسیار زیادی شده است. به عنوان مثال در آن دسته از حسگرهای بر پایه GMR متشکل از لایه‌های متناوب فرومغناطس و رسانای غیرمغناطیسی، نشان داده می‌شود که جهت‌گیری اسپین وابسته به پراکندگی الکترون می‌باشد. پاد-فرومغناطیسی که بین لایه‌های فرومغناطیس همسایه جفت شده، می‌تواند با میدان مغناطیسی خارجی تنظیم شود و در نتیجه مقاومت به صورت تابعی از میدان خارجی تغییر می‌کند⁴⁻⁶. در این پژوهش امکان تولید آرایه‌های مگنتو حسگری بر پایه کریستال-های دو بعدی گرافن/آهن/مس با روش الکترونهشت، به راحتی فراهم شده است. نانوساختارهای دو بعدی-مغناطیسی به دست آمده به کمک آنالیزهای الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) (دستگاه STOE-STADI)، میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) (دستگاه Nanosurf) و مقاومت مغناطیسی بزرگ (GMR) مشخصه‌یابی شده‌اند.

روش آزمایش

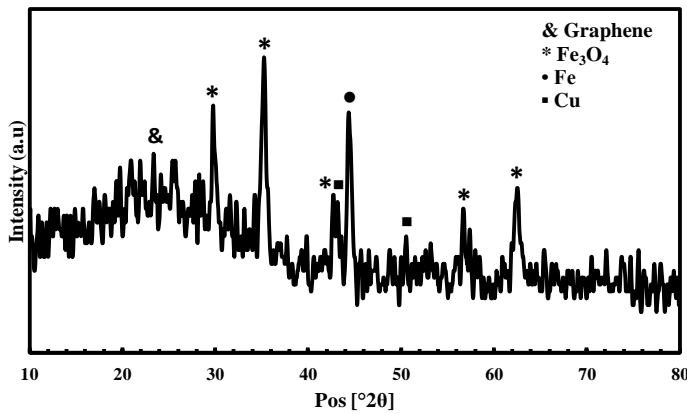
برای ساخت نانوساختارهای دو بعدی-مغناطیسی گرافن-آهن-مس (Gr/Fe/Cu) به روش الکترونهشت، در محلول یونی شامل سولفید آهن با غلظت 0.1 M و سولفید مس با غلظت 0.02 M ، از یک پلاتین به عنوان کاتد و یک میله گرافیتی به عنوان آند استفاده شده است. با اعمال جریان به الکترودها انرژی لازم جهت فرایند سایش تامین می‌شود. ابتدا به مدت ۲ دقیقه جریانی به اندازه 0.25 A اعمال شده تا صفحات کریستالی گرافن روی سطح الکترودها رسوب کند. در مرحله بعد به منظور اضافه کردن نانوذرات فلزی و مغناطیسی، ابتدا جریانی به اندازه 0.04 A به مدت ۱۰ ثانیه اعمال شده تا نانوذرات آهن روی سطح الکترودها کاتد که پوشیده از صفحات گرافن است، رسوب کرده و بلافاصله بعد از آن جریانی به اندازه 0.02 A به مدت ۴۰ ثانیه اعمال می‌شود تا نانوذرات مس روی لایه قبلی رسوب کند و به این صورت

شده تا روش‌های تولید سنتی با چالش‌هایی روبه‌رو شوند. امکان استفاده از تکنیک‌های کم‌هزینه، چند منظوره و ساده نظیر تکنولوژی لایه‌نشانی الکتريکی باعث کاهش ضایعات، کاهش هزینه‌های تجهیزات، کاهش تعداد مراحل کار، پردازش هم‌زمان چند ماده و ساده‌سازی بخش فرایند ساخت ادوات الکتريکی و مغناطیسی می‌شود. استفاده از طیف وسیعی از مواد و آلیاژها و همچنین اجازه بازیابی ترکیبات داخل محلول الکتروشیمیایی، عدم نیاز به تجهیزات گران قیمت و شرایط محیطی خاص نیز مهمترین مزیت این روش می‌باشد. با این روش می‌توان مواد کاربردی مورد نظر را در شرایط محیطی، بدون آسیب گرمایی و با هزینه کم تولید کرد¹. تولید نانوساختارهایی بر پایه مواد دوبعدی یا نانوذرات فلزی و مغناطیسی با این روش می‌تواند به راحتی مقیاس پذیر بوده و برای تولید یک سیستم چند موادی و چند منظوره به کار رود. رسیدن به چنین ادواتی قابلیت ادغام مدارات الکترونیکی قدرت مانند اجزای مقاومتی و هسته‌های مغناطیسی را دارد². این ویژگی-های منحصر به فرد به محققان اجازه می‌دهد تا راه‌های جدیدی را برای پردازش مواد و گسترش حسگرها و سیستم‌ها ایجاد کنند^{2,3}. مشکلات مربوط به عدم پایداری مناسب، اکسیداسیون سریع، نیاز به حلال‌های ویژه، دمای بالا و کیفیت پایین قطعات الکترونیکی تولیدی باعث شده تا با عرضه مواد مغناطیسی ترکیب با مواد دوبعدی، یک تحول اساسی در ساخت ادوات الکترونیکی به وجود آید. این گروه جدید مواد، نظیر نانوساختارهای دو بعدی بر پایه گرافن برای استفاده در ابزارهای الکترونیک انعطاف‌پذیر بسیار امیدوار کننده به حساب می‌آید. به دلیل ضخامت اتمی این مواد، امکان کنترل الکترواستاتیک، شفافیت نور، انعطاف پذیری مکانیکی و حساسیت به حداکثر می‌رسد. از آنجا که کریستال‌های دو بعدی دارای برهمکنش‌های واندروالس هستند می‌توانند به راحتی در یک توده چند لایه ترکیب شوند و امکان تولید ساختارهای پیچیده‌تر را فراهم کنند.

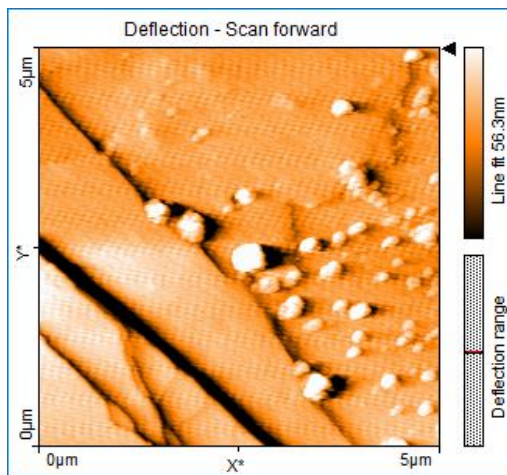
در این نمونه متفاوت بوده و بسته به جنس آن بین ۳۰-۵۰۰ nm تغییر می‌کند.



شکل ۱: نمودار تغییرات ولتاژ و جریان بر حسب زمان



شکل ۲: الگوی پراش پرتو ایکس نانوساختارهای دوبعدی-مغناطیسی



شکل ۳: مورفولوژی سطح با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی نانوساختارهای دوبعدی-مغناطیسی

GMR

ساختارهای چند لایه‌ای از نانوساختارهای مغناطیسی ایجاد می‌شود. این چرخه ۱۲ بار تکرار شده و کل فرایند آزمایش حدود یک ساعت طول می‌کشد. در نهایت پودر محصول با آب شست- و شو داده شده و در دمای 80°C به مدت ۲۰ ساعت خشک می‌شود. در شکل ۱ نمودار تغییرات ولتاژ و جریان بر حسب زمان را برای تولید نانوساختارهای کریستالی Gr/Fe/Cu می‌توان مشاهده کرد. توضیحات مربوط به هر چرخه در پنجره داخل این شکل نشان داده شده است.

نتایج و بحث

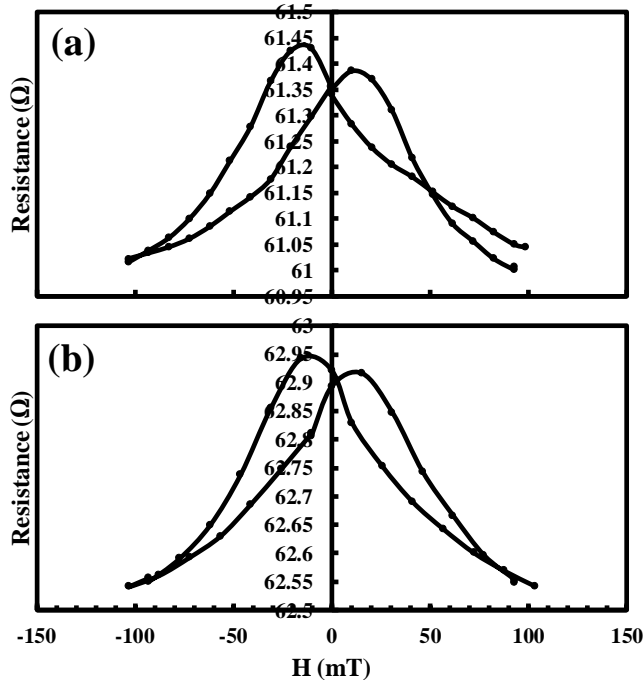
XRD

به منظور مشخصه‌یابی ساختار بلوری و فازهای کریستالی تشکیل شده، از نانوساختارهای Gr/Fe/Cu، الگوی پراش پرتو ایکس گرفته شده است (شکل ۲). طبق این الگو ساختار کریستالی مکعبی ساده مربوط به صفحه کریستالی (110) فاز آهن فلزی در این نمونه به خوبی قابل مشاهده است (JCPDS No: 01-085-1410). همچنین مقدار زیادی Fe_3O_4 در نمونه به دست آمده وجود دارد (JCPDS No: 01-077-1545). به ازای زاویای $2\theta = 50/52^{\circ}$ و 43° ساختار کریستالی مکعبی ساده مربوط به فاز مس فلزی مشاهده می‌شود (JCPDS No: 01-085-1326). همچنین یک قله پهن حدود زاویای $2\theta = 23^{\circ}$ وجود دارد که مربوط به گرافن می‌باشد.

AFM

به منظور بررسی مورفولوژی سطح و چگونگی قرار گرفتن نانوذرات فلزی و مغناطیسی نسبت به صفحات گرافن، ابتدا مقداری از پودر محصول به دست آمده را در آب حل کرده و سپس روی یک زیرلایه از جنس سیلیکون خشک نموده تا قسمت‌های مختلف آن با کمک میکروسکوپ نیروی اتمی مورد مطالعه و بررسی قرار گیرد. طبق شکل ۳ مشاهده می‌شود ذرات فلزی به صورت پراکنده بر روی صفحات گرافن و بین آن‌ها قرار گرفته است. این تصاویر به خوبی نشان می‌دهند، شکل‌گیری ساختارهای لایه‌ای از نانوصفحات دوبعدی-مغناطیسی با استفاده از این روش کاملاً موفقیت آمیز بوده است. اندازه صفحات گرافنی در حد چند میکرومتر می‌باشد در حالی که اندازه ذرات فلزی مختلف

آهن، مس و گرافن را تایید می‌کند. نتایج حاصل از GMR نیز نوید بخش تولید محصولی کاربردی برای استفاده در ساخت ادوات مگنتوالکترونیکی می‌باشد.



شکل ۲: نمودار میزان MR بر حسب میدان مغناطیسی (a): میدان مغناطیسی موازی با جریان و (b): میدان مغناطیسی عمود بر جریان

مرجع‌ها

- [۱] Chen, X., Liu, X., Childs, P., Brandon, N. and Wu, B; "A Low Cost Desktop Electrochemical Metal 3D Printer"; *Adv. Mater. Technol.* **2**, (2017).
- [۲] Yan, Y., Chao Ding, Ngo, K. D. T., Mei, Y. and Lu, G.-Q; "Additive manufacturing of planar inductor for Power Electronics applications"; in *2016 International Symposium on 3D Power Electronics Integration and Manufacturing (3D-PEIM)* **1**, (2016) 1-6.
- [۳] Cummins, G. & Desmulliez, M. P. Y; "Inkjet printing of conductive materials: a review"; *Circuit World* **38**, (2012) 193-213.
- [۴] Karnaushenko, D. et al; "High-performance magnetic sensorics for printable and flexible electronics"; *Adv. Mater.* **27**, (2015) 880-885.
- [۵] Wang, Z. et al; "Highly Sensitive Flexible Magnetic Sensor Based on Anisotropic Magnetoresistance Effect"; *Adv. Mater.* **28**, (2016) 9370-9377.
- [۶] Ben Gur, L., Tirosh, E., Segal, A., Markovich, G. & Gerber; "A. Extraordinary Hall-effect in colloidal magnetic nanoparticle films"; *J. Magn. Magn. Mater.* **426**, (2017) 178-182.

به منظور مطالعه پاسخ مغناطیسی نانوساختارهای دوبعدی-مغناطیسی از آن‌ها آنالیز GMR در دمای اتاق و میدان‌های ضعیف تا ۱۰۰ mT در هر دو حالت میدان مغناطیسی عمود و موازی با جریان گرفته شده است. برای این کار از پودر به دست آمده بعد از خشک کردن یک قرص با قطر ۶ mm و ضخامت ۰/۳ mm ساخته شده و تغییرات مقاومت آن با یک مدار دو پروبه اندازه‌گیری شده است. نتایج حاصل از این آنالیز نشان می‌دهد با اعمال میدان مغناطیسی و تغییر آن، مقاومت الکتریکی نمونه نیز در حال تغییر می‌باشد. نسبت GMR در چنین سیستمی مطابق با معادله زیر محاسبه می‌شود^{۱۲}.

$$\left(\frac{\Delta R}{R}\right) = \frac{R(H) - R_{max}}{R_{max}} \quad (1) \text{ معادله}$$

در این معادله، $R(H)$ مقاومت نمونه در میدانی با شدت H و R_{max} بیشترین ضریب مقاومت نمونه می‌باشد. برای نانوساختارهای دوبعدی-مغناطیسی میزان درصد MR گرفته شده در حالت‌های موازی و عمود بر جریان به ترتیب برابر با ۰/۷٪ و ۰/۶۳٪ به دست آمده است.

با توجه به رفتار مشاهده شده در شکل ۴ می‌توان گفت، ترکیب مواد دوبعدی با نانوذرات فلزی و مغناطیسی می‌تواند پراکندگی‌ها را افزایش داده و در نتیجه باعث مشاهده پاسخ مغناطیسی به صورت تغییر مقاومت در برابر تغییر میدان مغناطیسی خارجی در دمای اتاق شود. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت تولید این دسته از نانوساختارهای دوبعدی-مغناطیسی با روش الکترونهشت، یک روش تک مرحله‌ای ساده، مقرون به صرفه و کاربردی برای استفاده در ساخت ادوات مگنتوالکترونیکی به شمار می‌رود.

نتیجه گیری

در این پژوهش ما توانستیم با استفاده از یک روش تک مرحله‌ای و ساده با صرف هزینه و زمان کم، نانوساختارهای دوبعدی-مغناطیسی تولید کنیم که می‌تواند در ساخت ادوات کاربردی مگنتوالکترونیکی مورد استفاده قرار گیرد. مورفولوژی سطح با کمک AFM مورد مطالعه قرار گرفته است. طبق این تصاویر وجود نانوساختارهای لایه‌ای از مواد دوبعدی-مغناطیسی تایید شده است. الگوی XRD وجود فازهای آهن فلزی، اکسید

بررسی اثر جاننشانی همزمان کاتیون های نیکل و مس بر خواص ساختاری و الکترومغناطیسی

هگزافریت Co_2Y

صمدپور، الهام^۱؛ شمس، محمدحسین^۱؛ کیانی، اسماعیل^۲

^۱مجتمع دانشگاهی علوم کاربردی، مرکز تحقیقات علوم و فناوری نانوفیزیک، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، اصفهان، شاهین شهر

^۲دانشکده الکتروسرام و مهندسی برق، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، اصفهان، شاهین شهر

چکیده

هگزافریت باریوم نوع Y با ترکیب شیمیایی $\text{Ba}_2\text{Co}_{2-x}(\text{NiCu})_x\text{Fe}_{12}\text{O}_{22}$ با مقادیر ۰، ۰/۵، ۱، ۱/۵ و ۲ به روش سل-ژل تهیه شد. تاثیر جاننشانی همزمان کاتیون های نیکل و مس بر ویژگی های ساختاری و مغناطیسی و الکترومغناطیسی نمونه ها توسط آنالیزهای پراش پرتو ایکس XRD، میکروسکوپ الکترونی روبشی SEM، دستگاه مغناطش سنج ارتعاشی VSM و تحلیلگر شبکه برداری VNA مورد بررسی قرار گرفت. الگوهای پراش پرتو ایکس تشکیل ساختار هگزگونال نوع Y را به ازای تمامی مقادیر x تایید کرد. تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی تشکیل ذرات ورقه ای شکل شش گوشه را با محدوده اندازه ۱-۵ میکرومتر و ضخامت ۵۰-۱۵۰ نانومتر نشان داد. مغناطش اشباع و نیروی وادارندگی نمونه ها با افزایش مقدار جاننشانی، به ترتیب از 35.13 emu/gr به 19.86 emu/gr و از 651 Oe به 84 Oe کاهش یافت. مقادیر نفوذپذیری مغناطیسی کاهش می یابد و قله تشدید فرومغناطیسی به سمت فرکانس های بالاتر جابجا شد.

Investigation the effect of Cu and Ni substitution on the structural and electromagnetic properties of Co_2Y hexaferrite

Samadpour, Elham^{1,2}; shams, Mohammad Hosein^{1,2}; Kiani, Esmail^{1,2}

¹ Faculty of Applied Sciences, Research Center of Nano-Physics, University of Malek Ashtar, Shahin Shahr, Isfahan, Iran

² Faculty of Electroceramic and Electrical Engineering, University of Malek Ashtar, Shahin Shahr, Isfahan, Iran

Abstract

Y-type barium hexaferrites with chemical composition of $\text{Ba}_2\text{Co}_{2-x}\text{Ni}_{x/2}\text{Cu}_{x/2}\text{Fe}_{12}\text{O}_{22}$ ($x=0,0.5,1,1.5,2$) were prepared by sol-gel method. The effect of Ni^{2+} and Cu^{2+} substituting on structural and electromagnetic properties of samples were investigated by X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM), vibrating sample magnetometer (VSM) and vector network analyzer (VNA). The X-ray diffraction patterns confirmed single phase Y-type hexaferrites. All samples showed hexagonal platelet-like shape with particles size 1-2 μm and thickness of 50-150 nm. Saturation magnetization (M_s) and coercivity (H_c) of samples were reduced from 35.13 emu/g and 651 Oe to 19.86 emu/g and 84 Oe respectively, as the Ni^{2+} and Cu^{2+} contents increased. Magnetic permeability decreased and the peak of ferromagnetic resonance moved towards higher frequency.

PACS No. 75

و همچنین خواص مغناطیسی نرم بسیار خوب، دارای کاربرد گسترده در محدوده فرکانس های گیگاهرتز هستند.

در این پژوهش هگزافریت باریوم Co_2Y با فرمول شیمیایی $\text{Ba}_2\text{Co}_{2-x}\text{Ni}_{x/2}\text{Cu}_{x/2}\text{Fe}_{12}\text{O}_{22}$ به ازای ۰، ۰/۵، ۱، ۱/۵ و ۲ به روش سل-ژل تهیه شد. وجه تمایز این پژوهش با سایر تحقیقات انجام شده، تاثیر جاننشانی همزمان کاتیونهای Ni^{2+} و Cu^{2+} به جای

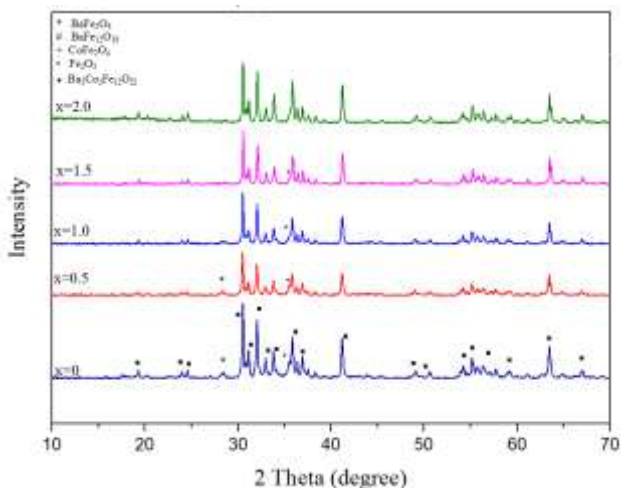
مقدمه

هگزافریت های نوع Y دسته ای از مواد فری مغناطیس هستند که می توانند ترکیب مفیدی از خواص فری مغناطیس و عایق را فراهم کنند و به دلیل دارا بودن نفوذپذیری مغناطیسی اولیه و مقاومت ویژه بزرگ، ناهمسانگردی صفحه ای و فرکانس قطع بالا

نمونه های مربوط به $x=1, 1/5, 2$ با الگوی استاندارد با کد ۰۴۷۲-۰۸۲-۰۱ تطابق کامل دارند و هیچ پیک مربوط به فازهای ناخالصی که شامل ترکیبات عناصر نیکل و مس باشد مشاهده نمی شود. می توان استنباط کرد که افزایش مقدار جانشانی کاتیون های Ni^{2+} و Cu^{2+} به جای Co^{2+} دمای تشکیل فاز فریت هگزائگونال نوع Y را کاهش می دهد. میانگین اندازه بلورکها از داده های الگوی پراش ایکس و با استفاده از رابطه ویلیامسون-هال محاسبه شد.

$$\beta = \frac{k\lambda}{D\cos\theta} + 2\epsilon\tan\theta \quad (1)$$

در این رابطه D اندازه بلورک بر حسب آنگستروم، λ طول موج پرتو ایکس بر حسب آنگستروم، β پهنای پیک فاز مورد نظر در نصف ارتفاع بیشینه ی آن بر حسب رادیان، θ زاویه ای که پیک در آن ظاهر شده و k ضریب شکل است که برای ساختار هگزائگونال برابر با ۰/۸۹ در نظر گرفته می شود.



شکل ۱: الگوی پراش پرتو ایکس نمونه های کلسینه شده در دمای $950^{\circ}C$ به مدت سه ساعت به ازای مقادیر مختلف x

پارامترهای شبکه a و c و حجم سلول واحد V نیز با استفاده از روابط زیر محاسبه شد. این مقادیر در جدول ۱ آمده است.

$$d = \left(\frac{4h^2 + hk + k^2}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (2)$$

$$V = a^2c \sin 120 \quad (3)$$

تغییرات ثابتهای شبکه به علت اختلاف شعاع یونی کاتیونهای (A°) Ni^{2+} ($0/69 A^{\circ}$) و Cu^{2+} ($0/73 A^{\circ}$) به جای Co^{2+} ($0/72 A^{\circ}$) است. روند نامنظم این تغییرات، مربوط به محل قرارگیری کاتیونهای جانشانی شده در مکانهای هشت وجهی و چهار وجهی در ساختار

Co^{2+} بر خواص ساختاری، مغناطیسی و الکترومغناطیسی آن است. نمونه های جانشانی شده با کاتیونهای مورد نظر، در دما و زمان مناسب کلسینه شدند و خواص ساختاری و مغناطیسی آنها مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است.

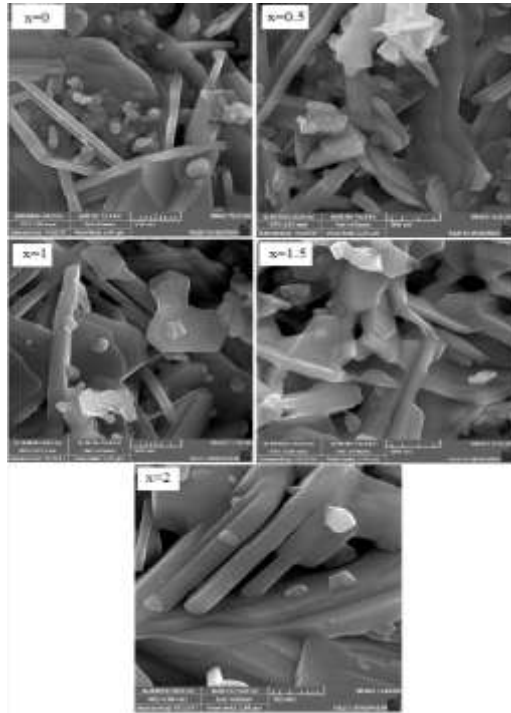
روش نمونه سازی

برای تهیه ذرات هگزافریت باریوم نوع Y با فرمول شیمیایی $Ba_2Co_{2-x}Ni_{x/2}Cu_{x/2}Fe_{12}O_{22}$ به روش سل-ژل، ابتدا محلولهای با مولاریته برابر از نیترات باریوم $Ba(NO_3)_2$ ، نیترات کبالت $Co(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ ، نیترات آهن $Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$ ، نیترات نیکل $Ni(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ با حل کردن مقدار استوکیومتری آنها در آب مقطر تهیه شد. محلولها روی گرمکن الکتریکی در دمای $40^{\circ}C$ با یکدیگر مخلوط شدند. دمای محلول به $60^{\circ}C$ رسانده شد و سیتریک اسید به عنوان عامل سوخت به محلول اضافه شد. از آمونیاک به منظور کنترل pH محلول در حالت خنثی استفاده شد. با کنترل دمای سل و pH در $60^{\circ}C$ و pH=7، بعد از حدود ۱۵ ساعت آب اضافی محلول تبخیر و ژل غلیظ با ویسکوزیته ی بالا تشکیل شد و به مدت ۴۸ ساعت در دمای $80^{\circ}C$ در خشک کن قرار گرفت. پودر ژل خشک شده به مدت سه ساعت در دمای $950^{\circ}C$ کلسینه شد و محصول پودری بسیار نرم و متخلخل به دست آمد. به منظور مشخصه یابی ساختاری، از آنالیز پراش پرتو ایکس XRD استفاده شد. مورفولوژی ذرات توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی SEM و ویژگیهای مغناطیسی و الکترومغناطیسی آن به ترتیب توسط دستگاه های مغناطش سنج ارتعاشی VSM و تحلیلگر شبکه برداری VNA مورد بررسی قرار گرفت.

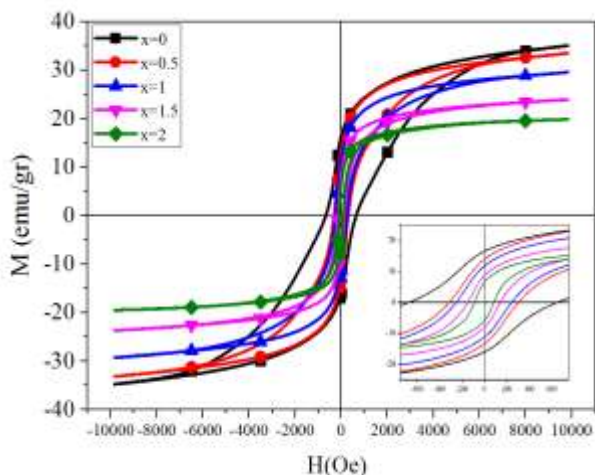
تحلیل نتایج

شکل ۱ الگوهای پراش پرتو ایکس نمونه های کلسینه شده در دمای $950^{\circ}C$ به مدت سه ساعت را به ازای مقادیر ۰، ۱/۵، ۱، ۰/۵، x نشان می دهد. نتایج حاکی از تشکیل فاز هگزائگونال نوع Y به همراه مقادیر بسیار کمی از فازهای میانی $CoFe_2O_4$ و $BaFe_2O_4$ در مقادیر جانشانی ۰/۵ و x=۰ است. با افزایش مقدار x، فازهای میانی به تدریج کاملاً حذف شده اند و الگوهای پراش

اندازه گیری شد. منحنی های پسماند مغناطیسی نمونه ها در شکل ۳ نشان داده شده است. با افزایش مقدار جانمایی نمونه ها در میدان اعمالی کمتری به اشباع می رسند. پارامترهای مغناطیسی شامل مغناطش اشباع، مغناطش باقیمانده، نیروی وادارندگی در جدول ۲ آمده است.



شکل ۲: مقایسه تصاویر میکروسکوپ الکترونی رویشی نمونه های کلسینه شده



شکل ۳: مقایسه حلقه های پسماند نمونه های کلسینه شده

هگزا فریت نوع Y، دارای هشت مکان هشت وجهی با اسپین بالا، دو مکان هشت وجهی و چهار مکان چهار وجهی با اسپین پایین است [۵]. با توجه به توضیحاتی که در مورد محل قرارگیری کاتیون ها داده شد، جانمایی ($3/88 \mu_B$) با کاتیونهای (μ_B)

بلوری است. مشخص شده است که یون های کبالت در هگزا فریت نوع Y، مکان های هشت وجهی را پر می کنند [۱]. کاتیونهای نیکل به عنوان کاتیون دو ظرفیتی در ساختار هگزا فریت نوع Y، دارای یک توزیع آماری در جایگاههای چهار وجهی و هشت وجهی است، اما اغلب مکان هشت وجهی را ترجیح می دهد و جایگزینی Co^{2+} با Ni^{2+} در مکانهای هشت وجهی اتفاق می افتد [۲]. در همین زمان ممکن است یونهای Fe^{3+} از مکان های چهار وجهی به هشت وجهی مهاجرت کنند و یونهای Ni^{2+} در مکان های چهار وجهی باقی بمانند [۲]. از طرفی نزدیک بودن شعاع یونی کاتیون Cu^{2+} به Co^{2+} باعث می شود یونهای Cu^{2+} جانمایی شده، مکانهای هشت وجهی Co^{2+} را پر کنند [۳].

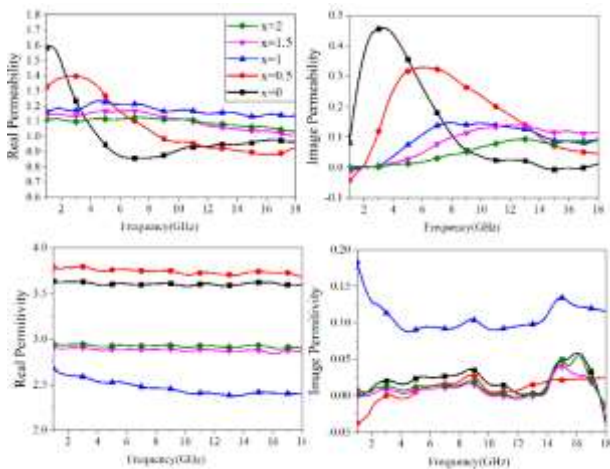
جدول ۱: پارامترهای ساختاری برای نمونه ها با مقادیر مختلف جانمایی

x	D(nm)	a(nm)	c(nm)	c/a	V(nm ³)
x=0	۳۵/۱۴	۵/۸۵	۴۳/۴۸	۷/۴۲	۱۲۹۰/۸۸
x=۰/۵	۴۲/۸۳	۵/۸۶	۴۳/۴۵	۷/۴۱	۱۲۹۲/۶۷
x=1	۵۹/۵۶	۵/۸۵	۴۳/۴۴	۷/۴۲	۱۲۸۹/۳۸
x=۱/۵	۶۵/۲۶	۵/۸۴	۴۳/۴۶	۷/۴۴	۱۲۸۴/۴۷
x=2	۶۵/۲۶	۵/۸۶	۴۳/۳۱	۷/۴۰	۱۲۸۷/۷۹

تصاویر میکروسکوپ الکترونی رویشی نمونه های کلسینه شده در شکل ۲ ذراتی با اشکال صفحه ای شش گوش را برای تمام نمونه ها نشان می دهد. شکلهای ورقه مانند یا به اصطلاح پولکی شکل هگزا فریتها، دارای نفوذپذیری مغناطیسی بالایی هستند و می توانند به عنوان پوشش جاذب امواج میکروویو مورد استفاده قرار گیرند. مشاهده می شود با افزایش مقدار جانمایی ذرات رشد کرده اند. اندازه ذرات در محدوده $1-2 \mu m$ و ضخامت آنها در حدود $50-150 \text{ nm}$ است. هنگامی که کاتیون مس به جای کبالت جانمایی می شود، در حین فرآیند کلسیناسیون، مس ذوب می شود و یک فاز مایع به وجود می آورد [۴]. از آنجا که انرژی مورد نیاز برای ورود کاتیونهای جانمایی شده به مرزدانه ها، از خود دانه ها کمتر است، فاز مایع مس با سرعت بیشتری به مرزدانه ها نسبت به مناطق درون ماده نفوذ می کند. بنابراین مس افزوده شده، به سمت مرزدانه ها حرکت کرده و با ایجاد فاز مایع باعث چسبیدن دانه ها به یکدیگر و رشد ذرات می شود.

ویژگیهای مغناطیسی نمونه های تهیه شده با دستگاه مغناطش سنج ارتعاشی با بیشینه میدان اعمالی 10 KOe و در دمای اتاق

موهومی در طیف گذردهی الکتریکی است و بیشترین تلفات دی الکتریکی را نسبت به نمونه های دیگر دارد.



شکل ۴: طیف فرکانسی تراوایی مغناطیسی و گذردهی الکتریکی

نتیجه گیری

هگزا فريت باريوم $Ba_2Co_{2-x}Ni_{x/2}Cu_{x/2}Fe_{12}O_{22}$ به روش سل-ژل تهیه و در دمای $950^\circ C$ به مدت سه ساعت کلسینه شد. با افزایش مقدار جانشانی مس و نیکل، دمای تشکیل فاز کاهش یافت و ذرات به شکل صفحات شش گوشه با اندازه $1-2 \mu m$ تولید شد. مغناطش اشباع از $35/14 \text{ emu/g}$ به $19/87 \text{ emu/g}$ و نیروی وادارندگی از 651 Oe به 84 Oe کاهش یافت و فرکانس تشدید فرومغناطیس به سمت فرکانسهای بالاتر جابجا شد.

مراجع

- [۱] S. H. Mahmooda, F. S. Jaradatb and A. F. Lehloobh; "Structural properties and hyperfine interactions in Co-Zn Y-type hexaferrites prepared by sol-gel method"; *Ceramics International* **40** (2014) 5231-5236
- [۲] Y. Alizad Farzin, O. Mirzaee, A. Ghasemi; "Influence of Mg and Ni substitution on structural, microstructural and magnetic properties of $Sr_2Co_{2-x}Mg_{x/2}Ni_{x/2}Fe_{12}O_{22}$ (Co₂Y) hexaferrite"; *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **371** (2014) 14-19.
- [۳] Y. Bai, J. Zhou, Zh. Gui, Zh. Yue, L. Li; "Preparation and magnetic characterization of Y-type hexaferrites containing zinc, cobalt and copper"; *Materials Science and Engineering B* **99** (2003) 266-269.
- [۴] احمدپور، قادر؛ قاسمی، علی؛ پایمزد، ابراهیم؛ «تأثیر دمای تقجوشی و افزودنی مس بر خواص ساختاری و مغناطیسی فريت نیکل-روی»؛ *مجله مواد پیشرفته در مهندسی*، سال ۳۲، شماره ۲، پاییز ۱
- [۵] R. C. Pullar; "Hexagonal ferrites: A review of the synthesis, properties and applications of hexaferrite ceramics"; *Progress in Materials Science* **57** (2012) 1191-1334

$Ni^{2+}(2/83)$ و $Cu^{2+}(1/3 \mu_B)$ ، علاوه بر تضعیف برهم کنشهای ابرتبادلی میان یونهای مغناطیسی، سهم اسپین های بالا را با احتمال بیشتری کاهش می دهد. بنابراین مغناطش خالص نمونه ها با افزایش مقدار جانشانی کاهش می یابد. در ذرات چند حوزه ای، افزایش اندازه ذرات باعث کاهش موانع مرزانه ای می شود و هنگام اعمال میدان مغناطیسی، چرخش بردار مغناطش و حرکت دیواره حوزه ها آسانتر صورت می گیرد. در نتیجه با افزایش مقدار نیکل و مس ذرات رشد کرده و نیروی پسماندزدا کاهش می یابد.

جدول ۲: پارامترهای مغناطیسی برای نمونه ها با مقادیر مختلف جانشانی

x	$M_s(\text{emu/g})$	$M_r(\text{emu/g})$	$H_c(\text{Oe})$	$f_r(\text{GHz})$
x=0	35/14	16/42	651	3/16
x=0/5	33/57	13/84	299	6/06
x=1	29/65	11/69	243	7/82
x=1/5	23/92	8/58	142	12/09
x=2	19/87	6/40	84	12/88

شکل ۴ طیف فرکانسی گذردهی الکتریکی و نفوذپذیری مغناطیسی را برای کامپوزیت فريت-پارافین (۸۰ درصد وزنی فريت) از نمونه ها در محدوده فرکانسی ۱-۱۸ GHz نشان می دهد. منشأ قله های مشاهده شده در طیف نفوذپذیری مغناطیسی، پدیده تشدید فرومغناطیس است. رابطه بین فرکانس تشدید فرومغناطیس با میدان ناهمسانگردی H_a توسط رابطه زیر بیان می شود [۵]:

$$f_r = \frac{\gamma}{2\pi} H_a \quad (4)$$

میدان ناهمسانگردی با مغناطش اشباع رابطه عکس دارد. با افزایش مقدار جانشانی و کاهش مغناطش اشباع، میدان ناهمسانگردی مطابق رابطه (۴) افزایش یافته و فرکانس تشدید از $3/16 \text{ GHz}$ برای نمونه $x=0$ به $12/88 \text{ GHz}$ برای نمونه $x=2$ جابجا شده است. مقادیر فرکانس تشدید برای هر نمونه در جدول ۲ آمده است. همچنین نفوذپذیری مغناطیسی در فرکانس ۱ GHz از مقدار $1/6$ به $1/1$ کاهش یافته است. در محدوده فرکانسی 18 GHz ، نمونه با مقدار جانشانی $x=1$ بیشترین مقدار نفوذپذیری مغناطیسی را دارد. مقادیر حقیقی گذردهی الکتریکی برای هر نمونه در محدوده ی فرکانس $1-18 \text{ GHz}$ تقریباً ثابت مانده است. نمونه با مقدار جانشانی $x=1$ دارای کمترین مقدار حقیقی و بیشترین مقدار

خواص ساختاری و الکترونی بلور پروسکایت NaTaO_3 در فاز اورتورمبیک در گروه‌های فضایی مختلف

علیدوستی ، خلیل ؛ مختاری ، علی ؛ سلیمانیان ، ویشتاسب

گروه فیزیک، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

چکیده

در کار حاضر به بررسی و مطالعه بین فازهای مختلف اورتورمبیک ترکیب پروسکایت NaTaO_3 می‌پردازیم. در این کار با روش‌های محاسباتی در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) و با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) به محاسبه پارامترهای ساختارهای بهینه شده، انرژی بهینه شبکه، مدول حجمی و مشتق مدول حجمی و انرژی هم‌دوسی و همچنین رفتار خواص الکترونی مثل نوارهای انرژی، چگالی حالت‌ها و همچنین گاف انرژی می‌پردازیم. نتایج کار به درستی فاز پایدار این ترکیب با گروه فضایی $Pnma$ که با تجربه سازگار می‌باشد را نشان می‌دهد. گاف نواری مستقیم به اندازه 2.86 eV بدست می‌آید.

The structural and electronic properties of the NaTaO_3 perovskite compound in different space groups of the orthorhombic phase

Alidusti, khalil ; mokhtari, ali ; soleimanian, vishtasb

Department of Physics, Shahrekord University, Shahrekord

Abstract

In the present work, we have studied the NaTaO_3 perovskite compound in different orthorhombic phases. The calculations are performed using density functional theory (DFT) and generalized gradient approximation (GGA) to obtain the optimized structural parameters, minimum of the energy, bulk modulus and its pressure derivative, cohesive energy and behavior of the band structure and density of states. Our results are in good agreement with the experimental data. The direct band gap about 2.86 eV are obtained for the $pnma$ phase.

مقدمه

خواص الکترونی، مغناطیسی، اپتیکی و کاتالیستی را موجب شده است. از دیگر خواص جالب پروسکایت‌ها امکان گذار فازی می‌باشد که در اثر اختلالاتی مثل گرما روی می‌دهد که باعث علاقه پژوهشگران به این دسته از بلورها شده است. تانتالات سدیم یا NaTaO_3 یکی از بهترین کاتالیست‌ها می‌باشد. این ماده در سه فاز مکعبی، تتراگونال و اورتورمبیک در چند گروه فضایی خاص متبلور می‌شود. در دمای اتاق در فاز اورتورمبیک با گروه فضایی $Pnma$ قرار دارد و با افزایش دما به گروه فضایی $Cmcm$ و در ادامه با افزایش دما به فاز تتراگونال و سپس به فاز

پروسکایت‌ها دسته‌ای از بلورها با فرمول شیمیایی ABX_3 هستند که در آن A کاتیون بزرگتر و این جایگاه میزبان فلزات قلیایی و قلیایی خاکی از جدول تناوبی می‌باشد، B کاتیون کوچکتر و این جایگاه میزبان عناصر واسطه از جدول تناوبی است و X آنیون متصل به کاتیون‌ها می‌باشد. این جایگاه معمولاً توسط اکسیژن، کربن و نیتروژن اشغال می‌شود. کاتیون A عامل پایداری حرارتی و کاتیون B عامل فعالیت کاتالیستی می‌باشد [۱-۲]. تنوع زیاد این پروسکایت‌ها، تنوع خواص شیمیایی و فیزیکی، مثل

روش اجرا

ترکیب NaTaO_3 در فاز اورتورمبیک در گروه‌های فضایی Cmcm ، Pnma ، $\text{Pc2}_1\text{n}$ ، Amm2 و Cmcm متبلور می‌شود. گروه‌های Pnma و $\text{Pc2}_1\text{n}$ شبکه ساده و دو گروه Amm2 و Cmcm شبکه مرکز سطحی می‌باشد. برای شروع محاسبات از پارامترهای داخلی، ثابت‌های شبکه و موقعیت‌های اتمی تجربی در دسترس استفاده می‌کنیم. گروه فضایی Amm2 شامل دو مولکول با ۱۰ اتم در سلول بسط و گروه‌های فضایی $\text{Pc2}_1\text{n}$ و Pnma و Cmcm شامل چهار مولکول با ۲۰ اتم در سلول بسط با موقعیت‌های اتمی که براساس جدول ۱ و همچنین در کتاب وایکوف [۶] و یا سایت‌های اینترنتی مرسوم که برای بلورشناسی وجود دارد وارد می‌شود. سپس کد اسپرسو اجرا می‌شود و نتایج بدست آمده را با نتایج تجربی مقایسه می‌کنیم. این نتایج در جدول ۲ آورده شده است.

جدول ۱: موقعیت اتم‌ها در پروسکایت اورتورمبیک

مکان	جایگاه‌های وایکوف	مختصات
کاتیون A	(4c)	$\pm \left[\left(u, v, \frac{1}{4} \right), \left(\frac{1}{2} - u, v + \frac{1}{2}, \frac{1}{4} \right) \right]$
آنیون A	(4b)	$\pm \left[\left(\frac{1}{2}, 0, 0 \right), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0 \right), \left(0, 0, \frac{1}{2} \right), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \right]$
آنیون O(1)	(4c)	$\pm \left[\left(m, n, \frac{1}{4} \right), \left(\frac{1}{2} - m, n + \frac{1}{2}, \frac{1}{4} \right) \right]$
آنیون O(2)	(8d)	$\pm \left[\left(x, y, z \right), \left(\frac{1}{2} - x, y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - z \right), \right. \\ \left. \left(-x, -y, z + \frac{1}{2} \right), \left(x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - y, -z \right) \right]$

u, v, m, n به ساختار خاص مطرح شده بستگی دارند.

برای فاز Pnma مقادیر تجربی u, v, m, n به ترتیب $0.9971, 0.98, 0.4376$ و 0.112 می‌باشد. در جدول بالا اتمهای اکسیژن از لحاظ تقارنی و همسایه‌های پیرامونی خود به دو دسته تقسیم می‌شوند به همین دلیل دو نوع اکسیژن با مختصات ذکر شده در جدول بالا را داریم.

نتایج محاسبات خواص ساختاری

نتایج محاسبات خواص ساختاری در جدول ۲ آورده شده است که با تجربه سازگار است. منحنی انرژی بر حسب حجم که برآزش آن با معادله مورناگون انجام گرفته در شکل ۱ ترسیم شده است که فاز پایدار Pnma با توجه به انرژی کمینه در آن مشخص است.

مکعبی گذار انجام می‌دهد. در کار حاضر به فاز اورتورمبیک این بلور که خود در چند گروه فضایی مثل Amm2 و $\text{Pc2}_1\text{n}$ و Pnma و Cmcm متبلور می‌شود متمرکز شده‌ایم و محاسبات خود را در این چهار گروه فضایی مربوط به فاز اورتورمبیک انجام داده‌ایم. پارامترهای شبکه‌ای بهینه شده هر چهار گروه، مدول حجمی و مشتق مدول حجمی و انرژی هم‌دوسی آن‌ها را بدست آورده‌ایم. نوارهای انرژی را برای حالت پایدار Pnma و چگالی حالت‌های هر چهار گروه فضایی را در ادامه در شکل‌های مربوطه ترسیم شده است.

روش محاسباتی

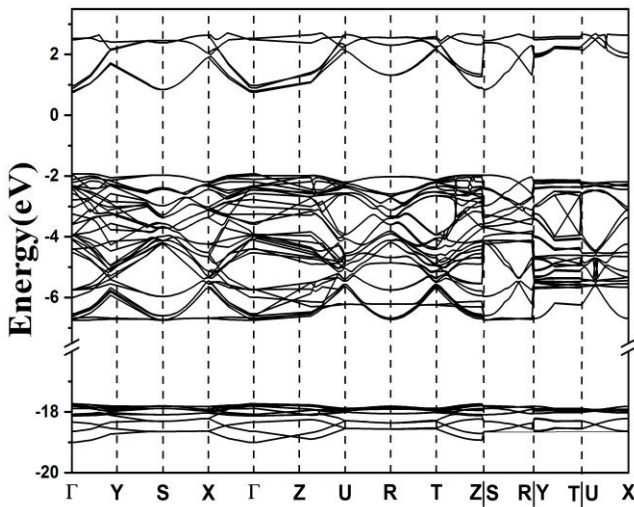
مطالعه و بررسی این بلور با نظریه تابعی چگالی (DFT) [۴-۳] و با استفاده از کد محاسباتی اسپرسو [۵] و با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انجام شد و نتایجی که بدست آمد با نتایج تجربی سازگاری است. اصول کار به این صورت می‌باشد که ما با استفاده از تقریب بورن اوپنهایمر، سامانه بس‌ذره ای را به دو سامانه بس‌یونی و بس‌الکترونی جداسازی می‌کنیم و با تقریب تک‌الکترون برای حل سامانه بس‌الکترونی به معادله شرودینگر تک‌الکترونی می‌رسیم. با حل این دسته معادلات خود سازگار به روش کوهن-شم با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) به انرژی‌های سامانه، توابع موج، چگالی الکترونی و پتانسیل خارجی می‌رسیم، سپس می‌توانیم از روی انرژی‌ها به نیروهای بین ذرات یا یونها دست یافته و موقعیت‌های جدید یونی را به دست آوریم، با داشتن موقعیت جدید، سامانه‌ی جدیدی داریم که مجدداً این محاسبات را تکرار می‌کنیم. این چرخه را تا زمانی ادامه می‌دهیم که نیروها تقریباً به صفر همگرا شوند. به این نوع معادلات، معادلات خود سازگار می‌گویند. در واقع روش خود سازگار برای معادلات تک‌ذره کوهن-شم استفاده می‌شود تا ویژه توابع و ویژه مقادیر همگرا شده را بدست آورد.

در این حالت موقعیت‌های اتمی در حالت بهینه قرار می‌گیرند و ثابت‌های شبکه‌ی بهینه به دست می‌آیند و انرژی شبکه در حالت کمینه خود قرار می‌گیرد. می‌توان مدول حجمی و مشتق مدول حجمی و انرژی هم‌دوسی را بدست آورد.

جدول ۳: مقایسه گاف انرژی محاسبه شده بر حسب الکترون ولت در فازهای مختلف ترکیب پروسکایت NaTaO_3 در تقریب (GGA) با گاف تجربی

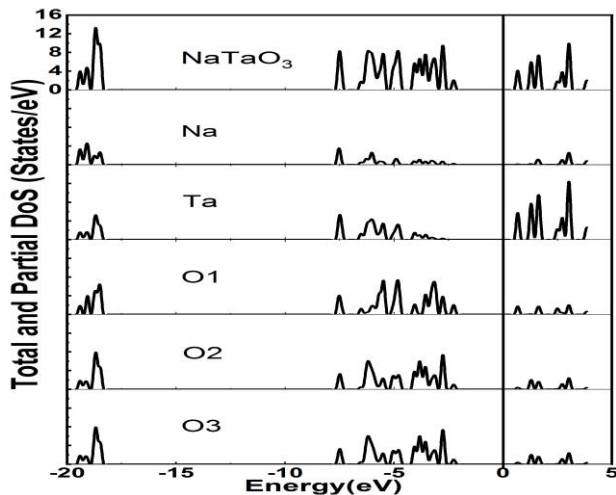
گاف تجربی (eV) [۸-۱۰]	Cmcm GGA	Pnma GGA	Pc2in GGA	Amm2 GGA	فاز
۴٫۲۷	۲٫۱۲	۲٫۸۶	۲٫۸۶	۲٫۶۲	گاف انرژی کار حاضر

نوارهای انرژی در فاز پایدار Pnma در مسیرهای تقارنی در شکل ۲ ترسیم شده است. تانتالات سدیم یک نیم‌رسانا می‌باشد و مقدار گاف انرژی مستقیم آن در کار حاضر 2.86 eV بدست آمده است.



شکل ۲: نمودار نوارهای انرژی برای نقاط تقارنی خاص برای فاز Pnma

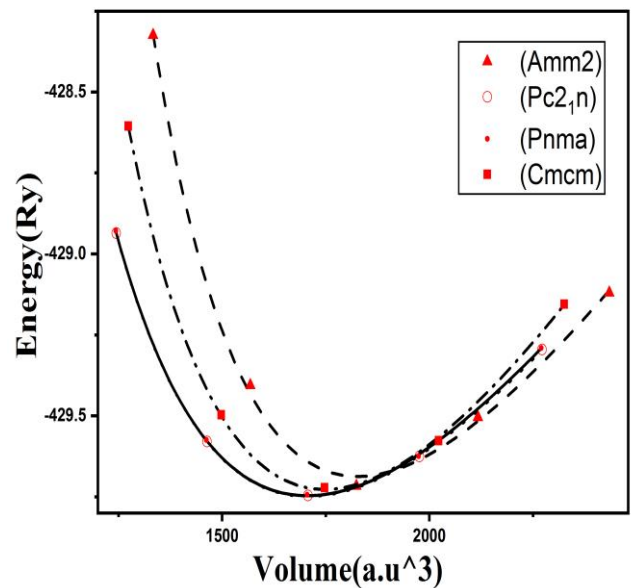
چگالی حالت‌های ترکیب NaTaO_3 در فازهای مختلف و چگالی حالت جزئی به طور مجزا برای هر اتم در شکل های ۳ تا ۶ ترسیم شده است.



شکل ۳: نمودار منحنی چگالی حالت‌ها برای فاز Amm2 و چگالی حالت‌های جزئی هر اتم به تفکیک

جدول ۲: پارامترهای شبکه مدول حجمی و مشتق آن برحسب فشار و انرژی همدوسی به ازای واحد مولکول برای چهار فاز اورتورمبیک

گروه فضایی	پارامترها	نتایج کار حاضر	نتایج تجربی [۷-۶]
Amm2	a,b,c (Å)	۴/۰۷۸ و ۵/۷۷ و ۵/۷۶	۳/۸۸ و ۵/۴۸ و ۵/۵۲
	B(Gpa)	۱۴۶/۴	-
	B E _{coh} (Ry)	۵/۳۱ ۲/۶۰	- -
Pc2in	a,b,c (Å)	۷/۹۸ و ۵/۶۸ و ۵/۵۸۲ و ۱۱۱/۱	۵/۴۹ و ۷/۸ و ۵/۵۱
	B(Gpa)	۱۱۱/۱	-
	B E _{coh} (Ry)	۳/۸۶ ۲/۶۱	- -
Pnma	a,b,c (Å)	۵/۶۷۵ و ۵/۵۸ و ۷/۹۸	۵/۵۶ و ۵/۶۳ و ۷/۸۴
	B(Gpa)	۱۱۷/۶	-
	B E _{coh} (Ry)	۳/۴۹ ۲/۶۱	- -
Cmcm	a,b,c (Å)	۵/۶۲۵ و ۵/۶۴ و ۵/۷۷	۵/۵۴ و ۵/۵۵ و ۵/۵۶
	B(Gpa)	۱۴۱/۷	-
	B E _{coh} (Ry)	۴/۳۰ ۲/۶۱	- -



شکل ۱: برازش انرژی کل برحسب حجم مربوط به یک مولکول، توسط معادله مورناگون برای فازهای مختلف اورتورمبیک ترکیب پروسکایت NaTaO_3 .

نتایج خواص الکترونی

در نظریه تابعی انرژی نوارهای انرژی از حل خودسازگار معادلات کوهن-شم و با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) در مسیرها یا نقاط تقارنی مرسوم (k_{point}) در فضای وارون بدست می‌آید. گاف انرژی در این کار برای هر فازی در جدول ۳ آورده شده است. مقدار گاف بدست آمده از مقدار تجربی آن کمتر می‌باشد که علت آن تقریب‌هایی است که استفاده می‌کنیم.

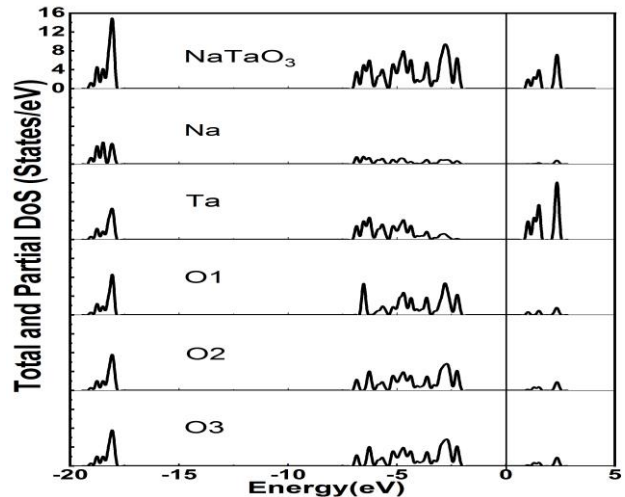
در هر چهار فاز چگالی حالت‌ها به دو قسمت تقسیم شده است که در انرژی‌های دورتر از سطح فرمی هیبرید همه اتم‌ها صورت گرفته است. اما در نواحی نزدیک سطح فرمی سهم اتم‌های Ta و O غالب‌تر از سهم اتم‌های Na است. بالاترین نوار پر را نیز ناشی از اربیتال‌های اتم‌های اکسیژن بدست آورده‌ایم.

نتیجه گیری

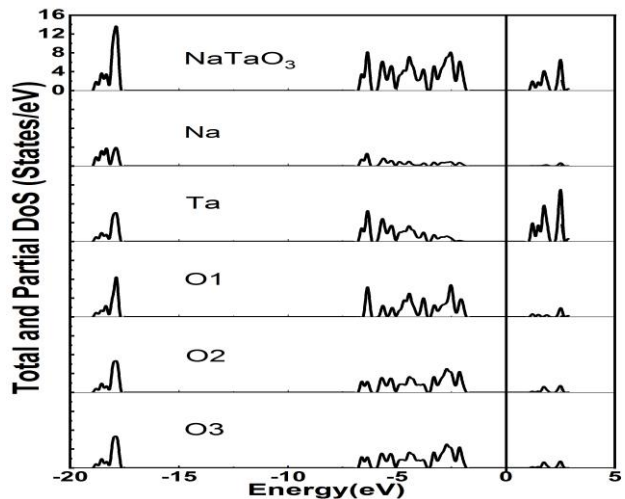
با توجه به پژوهش انجام گرفته ثابت‌های شبکه بدست آمده با مقادیر تجربی سازگار است. فاز پایدار این ترکیب فاز Pnma بدست آمده که این نتیجه هم با تجربه سازگار است. بلور پروسکایت NaTaO_3 یک نیم‌رسانا است که به خوبی در شکل نوار انرژی و چگالی حالت‌ها مشاهده می‌شود. این نتیجه با خاصیت فوتوکاتالیستی این ماده سازگار است. گاف انرژی در حالت پایدار Pnma گاف مستقیم می‌باشد که مقدار آن را از مقدار تجربی کمتر بدست آورده‌ایم. دلیل آن هم استفاده از تقریب‌هایی است که در حل معادلات کوهن-شم به کار برده شده است.

مرجع‌ها

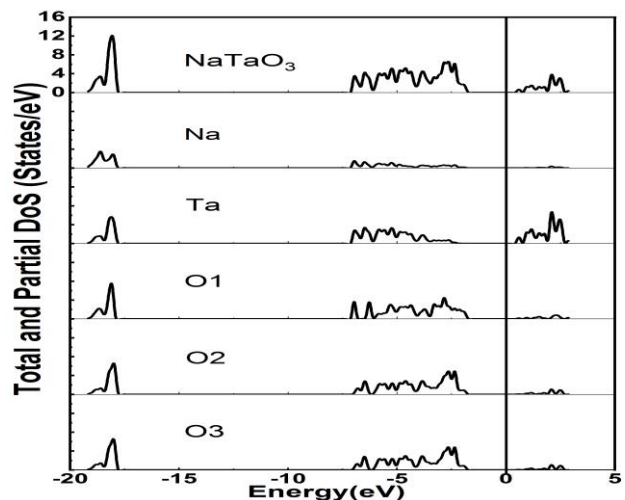
- [۱] T. Nitadori, et al.; "Catalytic Properties of Provkite-Type Mixed Oxides (ABO_3) Consisting of Rare Earth and 3d Transition metals. The role of the A- and B-site Iones"; Bull. Chem. Soc. Jpn **61**, (1988) 621-626
- [۲] A. kudo, et al.; "Strategies for the Development of Visible-Light-driven photocatalysts for Water Splitting"; chemistry letters **33**, (2004) 1534-1539
- [۳] P. Hohenberg and W. kohn; "Inhomogeneous Electron Gas"; Phys. Rev. **136**, (1964) B864-871
- [۴] W. Kohn and L. Sham; "Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects"; Phys. Rev. **140**, (1965) A1133-1138
- [۵] P. Giannozzi et al.; "Quantum Espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials"; Journal of Physics **21**, (2009) 395502 1-19
- [۶] R. W. Wyckoff; "Crystal Structures"; 2th edition, Inc. (1963)
- [۷] Y. Shiozaki et al.; "Perovskite-type Oxides and LiNbO_3 Family"; Springer-Verlag Berlin Heidelberg **36**, No. 1A-4 (2001) 1-14
- [۸] H. Langhuan, et al.; "preparation of sodium tantalite with different structures and its photocatalytic activity for H_2 Evolution from water splitting"; Chinese journal of Catalysis **32**, (2011) 1822-1830
- [۹] B. Modak, et al.; "Band gap engineering of NaTaO_3 using density functional theory: a charge compensated codoping strategy"; Phys. Chem. Chem. Phys **16**, (2014) 17116-17124
- [۱۰] E. Ece Eyi, and S. Cabuk; "Ab initio study of the structural, electronic and optical properties of NaTaO_3 "; Philosophical magazine **90**, (2010) 2965-2976



شکل ۴: نمودار منحنی چگالی حالت‌ها برای فاز Pc21n و چگالی حالت‌های جزئی هر اتم به تفکیک



شکل ۵: نمودار منحنی چگالی حالت‌ها برای فاز Pnma و چگالی حالت‌های جزئی هر اتم به تفکیک



شکل ۶: نمودار منحنی چگالی حالت‌ها برای فاز Cmcm و چگالی حالت‌های جزئی هر اتم به تفکیک

تاثیر نوع گاز و فشار بر زمان پینچ شدگی در دستگاه پلاسما کانونی

عنایتی، پروین؛ مومنی، مهدی

دانشکده فیزیک و مهندسی هسته ای دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود

چکیده

برای دستیابی به انرژی ناشی از واکنش های هم جوشی هسته ای و ایجاد شرایط مناسب برای این واکنش ها نیاز به ساخته شدن دستگاه های پلاسما کانونی ایجاد شد که تولید اشعه ایکس و نوترون در این دستگاه مستلزم وقوع پینچ در سیستم است. در این پژوهش، تاثیر نوع گاز و فشار بر زمان تشکیل پینچ در دستگاه پلاسما کانونی شاهرود (SHUPF) مورد بررسی قرار گرفته است. آزمایش ها برای دو گاز آرگون و نیتروژن در فشارهای مختلف انجام گرفت. نتایج آزمایش ها نشان داد که زمان تشکیل پینچ برای گاز نیتروژن کمتر از گاز آرگون است و همچنین افزایش فشار کانونی شدن پلاسما را به تاخیر می اندازد.

Investigation of the effect of pressure and type gas on pinching time in plasma focus device

Parvin, Enayati ;Mahdi, momeni

Faculty of Physics and Nuclear Engineering, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran

Abstract

The plasma focus device used in this research is Mather type with 1, 10 kJ energy which a source for producing x-rays, neutrons, and charged particles. Optimum conditions depend on Pinch synchronization with maximum current and symmetry of the plasma front.

The main purpose of this paper is investigation the effect of pressure and type gas on the pinch time. The results show that increasing the pressure will increase the pinch time, and also the type of gas has a significant effect on the pinch time.

Keywords: Plasma Focus, Pinch time, Type gas

هندسی سیستم به گونه ای است که میدان مغناطیسی تولید شده لایه ذرات یونیزه شده را محاصره کرده و آن را به سمت یک نقطه (نوک آند) میراند. به عبارت دیگر پلاسما محاصره شده و به شدت تحت فشار قرار می گیرد. فشار وارده به حدی است که منجر به تولید پلاسما داغ و چگال 10^{26}cm^{-3} با طول عمر بسیار کوتاه 50-200ns می شود [۱].

پلاسما فشرده شده می تواند باعث تولید پرتوهای ایکس، یونی، الکترونی و نیز انجام گداخت هسته ای و به دنبال آن آزاد شدن نوترون های پرانرژی شود. دستگاه پلاسما کانونی در لیتوگرافی پرتو الکترونی [۳] رادیوگرافی نمونه های بیولوژیک [۴]

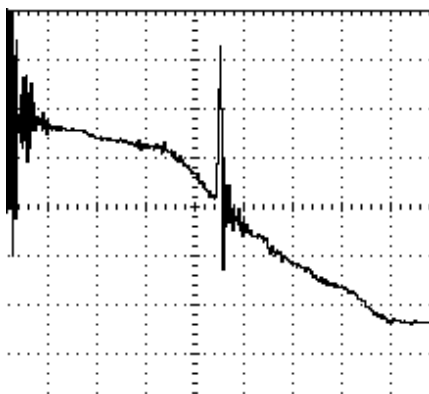
مقدمه

یکی از راههای فشرده سازی پلاسما ایجاد میدان مغناطیسی در اطراف پلاسما است که فشار مغناطیسی ناشی از میدان سبب فشرده شدن آن می شود. دستگاه پلاسما کانونی اولین بار به طور مستقل و با هندسه ای متفاوت در سال ۱۹۶۵ در ایالات متحده آمریکا توسط مدر [۱] و در اتحاد جماهیر شوروی سابق توسط فیلیپوف [۲] ساخته شد. در هر دو مدل دستگاه پلاسما کانونی، یک تپ ولتاژ قوی از بانک خازنی به گاز خشی موجود در محفظه که بین دو الکتروود هم محور قرار گرفته است اعمال می شود، جریان الکتریکی باعث تولید یک میدان مغناطیسی می شود. ساختار

چیدمان آزمایش

در این آزمایش از گازهای آرگون و نیتروژن در فشارهای ۰٫۸ تا 10^{-2} torr استفاده شده است برای بررسی تاثیر فشار بر روی زمان پینچ تمامی پارامترهای تاثیر گذار بر روی زمان از قبیل جنس و طول عایق، طول آند و کاتد، ولتاژ کاری و شکل انتهای آند ثابت هستند. برای شروع فرآیند ابتدا با استفاده از پمپ روتای مدل VE۲۸۰N درون چمبر را خلاء می کنیم سپس گاز مورد نظر توسط سیستم تزریق به درون محفظه هدایت می شود. برای ثابت نگه داشتن فشار گاز درون محفظه سیستم، شار گاز ورودی از طریق شیر سوزنی به درون محفظه با شار گاز خروجی توسط پمپ با هم برابر است. با توجه به ولتاژ کار دستگاه که بین ۹ تا ۱۱ کیلو ولت است ولتاژ کاری در این آزمایش ۱۰ کیلو ولت در نظر گرفته شده است و تخلیه به صورت تک شات انجام پذیرفته. برای جلوگیری از ایجاد خطا در آزمایش ها به ازای هر فشاری از گاز خاص بیش از ۱۵ شات زده شده است.

ابزار تشخیصی استفاده شده شامل پیچه روگوفسکی و پروب ولتاژ است. پروب ولتاژ مقدار اختلاف پتانسیل میان دو قسمت ولتاژ بالای سیستم پلاسما کانونی را اندازه گیری می کند که به صورت تقسیم کننده ولتاژ از نوع مقاومتی می باشد که قادر است مقدار ولتاژ را تا ۱۰۰ برابر کاهش می دهد، این تقسیم کننده ولتاژ با یک لوله مسی پوشیده شده است که نقش کاهنده نویز را ایفا می کند؛ یکی از منحنی های خیلی مهم در تحلیل داده ها سیگنال مربوط به ولتاژ الکتریکی است که توسط اسیلوسکوپ مدل GPS_۱۲۰۴C ثبت شده است. شکل ۲ نمونه ای از منحنی ولتاژ برحسب زمان ثبت شده توسط اسیلوسکوپ را نشان می دهد.



شکل ۲: منحنی ولتاژ برحسب زمان در دستگاه پلاسما کانونی

پوشش فلز با اسپری شدن یون [۵] استفاده شده است. در صورتی که از گاز کاری دوتریم استفاده شود دستگاه به عنوان چشمه نوترون کار می کند، که از آن می توان در فعال سازی نوترونی، آنالیز مواد و تولید رادیوایزوتوپ ها استفاده نمود؛ همچنین ابزار مناسبی برای مطالعه فرآیندهای پلاسما [۶] و درک مفاهیم بنیادی در زمینه های مختلف به ویژه پلاسما، اسپکتروسکوپی، فیزیک اتمی، ترمودینامیک، الکترومغناطیس، و فیزیک هسته ای می باشد.

دستگاه پلاسما کانونی شاهرود (SHUPF)

دستگاه پلاسما کانونی شاهرود نوع مدر است و با انرژی $1.15kJ$ ساخته شده است که مشخصات کامل آن در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱: مشخصات دستگاه پلاسما کانونی شاهرود

مقادیر	پارامترها
$C_0 = 16\mu f$	ظرفیت خازن
$V_0 = 12kv$	ماکزیم ولتاژ
$L_0 = 200nH$	اندوکتانس
$z_0 = 0.111$	امپدانس سیستم
6	تعداد کاتد
6cm	طول کاتد

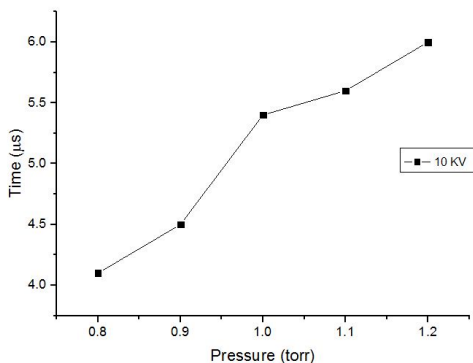
آند از جنس مس به طول ۶cm با سطح مقطع دایره به قطر ۱۹mm است، در اطراف آند عایقی از جنس پیرکس به طول ۴cm قرار گرفته است که قابلیت تعویض دارد. کاتد از جنس برنج است که بر روی صفحه دایروی برنجی ثابت شده است و در اطراف آند روی صفحه پایه قرار می گیرد. در شکل ۱ تصویری از دستگاه پلاسما کانونی شاهرود نشان داده شده است.



شکل ۱: تصویری از پلاسما کانونی شاهرود

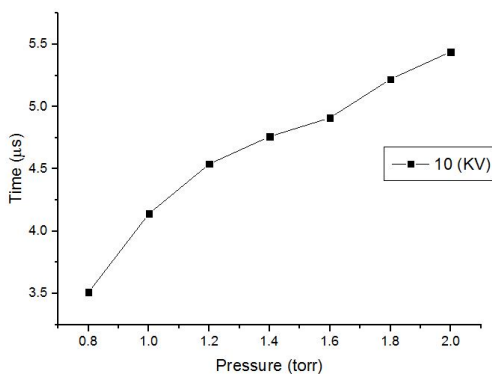
۱. درب بالایی دستگاه، ۲. محفظه خلاء، ۳. پنجره برای مشاهده و نسب ابزار تشخیصی، ۴. واحد کنترل، ۵. سیستم تزریق گاز و خلاء

افزایش فشار هیچ پینچ توسط دستگاه اسپیلوسکوپ ثبت نشده است.



شکل ۳: تغییرات زمان پینچ برحسب فشار در ولتاژ ۱۰ کیلو ولت برای گاز کاری آرگون

اما برای گاز کاری نیتروژن بازه فشار اعمالی به سیستم از ۰.۸ تا ۲ تور بوده است و به ازای تمامی فشارها پلاسما موجود در دستگاه تنگیده شده است.



شکل ۴: تغییرات زمان پینچ برحسب فشار در ولتاژ ۱۰ کیلو ولت برای گاز کاری نیتروژن

با توجه به شکل های ۳ و ۴ مشاهده می شود فارغ از نوع گاز هرچه میزان گاز تزریقی به درون سیستم افزایش یابد زمان پینچ پلاسما در دستگاه افزایش می یابد که روند این تغییرات با استفاده از روابط دینامیکی دستگاه قابل توجیه است.

افزایش فشار باعث تأخیر در زمان وقوع فاز شعاعی می شود یعنی فاز محوری افزایش یافته است. افزایش فشار باعث افزایش چگالی گاز موجود در سیستم می شود که این اتفاق باعث کاهش سرعت

از دیگر وسایل اندازه گیری مورد استفاده پیچه روگوفسکی است که قادر به اندازه گیری جریان و مشتق جریان می باشد و بر مبنای قانون آمپر کار می کند.

پیچه استفاده شده در دستگاه پلاسما کانونی شاهرود شامل ۲۸۰ دور سیم با قطر ۱.۵mm است که برای آشکار سازی و اندازه گیری جریان استفاده می شود. فاصله زمانی بین دو پیک نشانگر مدت زمانی است که لایه جریان در فازهای شعاعی و محوری سپری کرده است تا پلاسما تنگیده شود، به عبارتی زمان پینچ را نشان می دهد.

دینامیک پلاسما در فاز شعاعی توسط روابط ۱ و ۲ بیان می شوند.

$$\frac{dr_s}{dt} = \frac{-1}{4\pi} \sqrt{\frac{\mu(\gamma+1)}{f_{mr} n_0 m_i}} \left[\frac{I_p}{r_p} \right] \quad (1)$$

$$\frac{dr_p}{dt} = \frac{\frac{2}{\gamma+1} \frac{r_s}{r_p} \frac{dr_s}{dt} - \frac{r_p}{\gamma} (1 - \frac{r_s^2}{r_p^2}) \frac{dI}{dt} - \frac{1}{(\gamma+1)} \frac{r_p}{Z_f} (1 - \frac{r_s^2}{r_p^2}) \frac{dZ_f}{dt}}{\frac{\gamma-1}{\gamma} + \frac{1}{\gamma} \frac{r_s^2}{r_p^2}} \quad (2)$$

در این روابط $\frac{dr_p}{dt}$ و $\frac{dr_s}{dt}$ به ترتیب سرعت موج ضربه و سرعت پیستون مغناطیسی (لایه جریان)، f_{mr} فاکتور جرم γ ظرفیت گرمایی ویژه n_0 چگالی تعداد اتم ها m_i جرم اتمی گاز را نشان می دهد؛ پلاسما را به صورت لوحه ای با شعاع بیرونی (موقعیت پیستون مغناطیسی) r_p و شعاع درونی (جبهه ضربه) r_s و طول Z_f در نظر گرفته می شود و I_p مقدار جریانی که از پلاسما شارش می کند را نشان می دهد.

به کمک منحنی های خروجی از دستگاه اسپیلوسکوپ و اندازه گیری دقیق زمان پینچ می توانیم نمودار تغییرات زمان پینچ برحسب فشار در نرم افزار Origin رسم کنیم و روند تغییر زمان را برای گازهای آرگون و نیتروژن بررسی کنیم و که به کمک روابط ۱ و ۲ می توان رفتار پلاسما ایجاد شده توسط دو گاز را تحلیل کرد.

نتایج آزمایش

در این اندازه گیری ها برای بررسی فشار گاز روی زمان کانونی شدن پلاسما برای گاز آرگون در ولتاژ ۱۰ کیلو ولت در فشارهای ۰.۸ تا ۱.۲، تور شاهد کانونی شدن پلاسما در سیستم بودیم اما با

روابط ۲ او ۱ سرعت در فاز شعاعی بیشتر شده و پیستون مغناطیسی سریع تر پلاسما را متمرکز می کند و در نهایت زمان فاز شعاعی کاهش می یابد و زمان پینچ کاهش می یابد.

نتیجه گیری

براساس نتایج بدست آمده در اثر افزایش فشار گاز درون SHUPF سیستم، زمان پینچ افزایش می یابد و این روند افزایشی زمان در اثر افزایش فشار برای هر دو گاز آرگون و نیتروژن رخ می دهد.

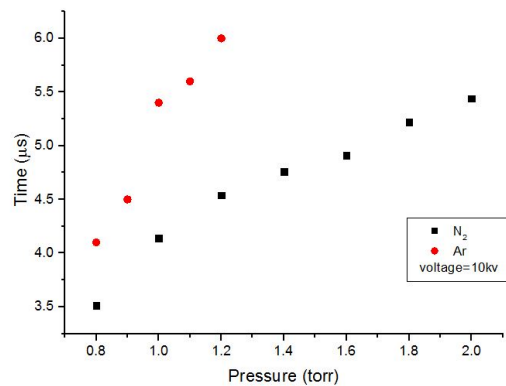
نیتروژن گازی مولکولی و دارای انرژی اولین یونش و چگالی جرمی کمتری نسبت به گاز نجیب آرگون است. تمایل شرکت در واکنش نیتروژن نسبت به آرگون بیشتر است و انرژی اولین یونش نیتروژن کمتر از آرگون است پس در نتیجه دما نیتروژن پایین تر خواهد بود. با توجه به رابطه ۲ سرعت پیستون مغناطیسی با دما رابطه عکس دارد زمانی که گاز کاری نیتروژن است سرعت پیستون مغناطیسی بیشتر می شود نهایتاً سرعت در فاز شعاعی افزایش و زمان پینچ برای گاز نیتروژن نسبت به آرگون کاهش می یابد.

مرجع ها

- [۱] J. W. Mather; "Investigation of the High-Energy Acceleration Mode in the Coaxial Gun"; *The Physics of Fluids*, (۱۹۶۴) ۲۸-۳۴.
- [۲] N. V. Filippov, T.I. Filippova, A. N. Filippov, M. A. Karakin, E. Y. Khautiev, V. I. Krauz and V. P. Vinogradov; "Experimental simulation of the collisionless shock wave by plasma focus"; *Czechoslovak Journal of Physics*, (۲۰۰۰) ۱۲۷-۱۳۵.
- [۳] Y. Kato and S.H. Be; "Generation of soft x rays using a rare gas hydrogen plasma focus and its application to x-ray lithography"; *Applied physics letters*, ۴۸,۱۱, (۱۹۸۶) ۶۸۶-۶۸۸.
- [۴] F. Castillo-Mejía, M. M. Milanese, R. L. Moroso, J. O. Pouzo and M. A. Santiago; "Small plasma focus studied as a source of hard X-ray" *IEEE transactions on plasma science*, ۲۹,۶, (۲۰۰۱) ۹۲۱-۹۲۶.
- [۵] H. Kelly, A. Lepone, A. Marque, D. Lamas and C. Oviedo; "Coating on metallic samples produced by a small energy plasma focus"; *Plasma Sources Science and Technology*, ۵,۴, (۱۹۹۶) ۷۰۴.
- [۶] T. Zhang, X. Lin, K. A. Chandra, T. L. Tan., S. V. Springham, A. Patran and R. S. Rawat; "Current sheath curvature correlation with the neon soft x-ray emission from plasma focus device"; *Plasma Sources Science and Technology*, ۱۴,۲, (۲۰۰۵) ۳۶۸.

لایه جریان شده و نهایتاً زمان های فاز محوری و شعاعی افزایش می یابد و پلاسما دیرتر تنگیده می شود.

شکل ۵ تغییرات زمان پینچ برحسب فشار را بطور همزمان برای هر دو گاز آرگون و نیتروژن را نشان می دهد که مشاهده می شود زمان پینچ در گاز نیتروژن در تمامی فشارها کمتر از گاز آرگون است.



شکل ۵: تغییرات زمان پینچ برحسب فشار برای گازهای آرگون و نیتروژن

این روند تغییر زمان پینچ برحسب فشار را با کمک دینامیک پلاسما که وابسته پارامترهای مثل نسبت گرمایی ویژه و چگالی جرمی دو گاز در فاز شعاعی است می توان توجیه کرد. جدول ۲ مشخصات گازها را نشان می دهد.

جدول ۲: مشخصات گاز کاری مورد آزمایش

نوع گاز	چگالی جرمی	انرژی یونش	ظرفیت گرمایی ویژه
آرگون	۱,۷۸۴	۱۵۲۰,۶	۱,۶۶۶
نیتروژن	۱,۲۵۱	۱۴۰۲,۳	۱,۴

برای توجیه رفتار گازها لازم است به این نکته توجه کرد که تفاوت در چگالی جرمی گازها در یک فشار معین مثلاً ۰,۸ تور، میزان جرم ورودی گاز نیتروژن کمتر از آرگون است و باعث می شود فاز محوری سریعتر طی شود و زمان پینچ کاهش یابد. فرآیند یونیزاسیون موجب اتلاف انرژی و کاهش دما می شود که برای گازهای مختلف متفاوت است یونیزاسیون با ظرفیت گرمایی ویژه نسبت عکس دارد، زمانی که یونیزاسیون در گاز افزایش می یابد میزان انرژی لازم برای افزایش دما کاهش می یابد. با توجه به

رفتار نیم فلزی در ترکیب Ni-Pr-Bi بر اساس اصول اولیه

فتیحی، مهسا^۱؛ میکائیلزاده، لیلا^۲؛ توانا، علی^۱

^۱گروه فیزیک، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل

^۲دانشکده فیزیک، دانشگاه زنجان، زنجان

چکیده

خواص ساختاری و الکترونی و مغناطیسی در ترکیب های نیمه هویسلر Ni-Pr-Bi بر اساس نظریه ی تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفته اند. پارامترهای شبکه بهینه، چگالی حالت ها، نوارهای انرژی و گشتاور های مغناطیسی محاسبه شده اند. نتایج نشان می دهند که یک گشتاور مغناطیسی صحیح برای این ترکیب در فاز β وجود دارد که باعث قطبش اسپینی صد در صد در سطح فرمی و در نتیجه منجر به خاصیت نیم فلزی می شود.

Half metallic behavior in Ni-Pr-Bi system based on first principles

Fathi, Mahsa¹; Mikaeilzadeh, Leila²; Tavana, Ali¹

¹Department of Physics, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil

²Department of Physics, University of Zanjan, Zanjan

Abstract

Structural, electronic and magnetic properties of the Ni-Pr-Bi half-Heusler systems are investigated by the means of the density functional theory. Optimized lattice parameters, density of states, band structures and magnetic moments are calculated. Results show that there is an integer magnetic moment in the β phase of this compound, which results in half-metallic behaviour.

PACS NO. 61.00, 71.00, 75.00

مقدمه

در کاربردهای اسپینترونیکی مورد استفاده قرار گیرد [5]. در این قبیل کاربردها وجود یک جریان قطبیده ی اسپینی نقش بنیادی دارد که برای دستیابی به آن نیاز است تا ترکیبی نیم فلزی داشته باشیم. برای ترکیبات نیمه هویسلر با توجه به ترتیب قرار گرفتن اتم ها سه پیکربندی متفاوت وجود دارد که فازهای α و β و γ نامیده می شوند [6-7]. در این پژوهش خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی ترکیبات نیمه هویسلر Ni-Pr-Bi در دوفاز α و β مورد بررسی قرار می گیرد.

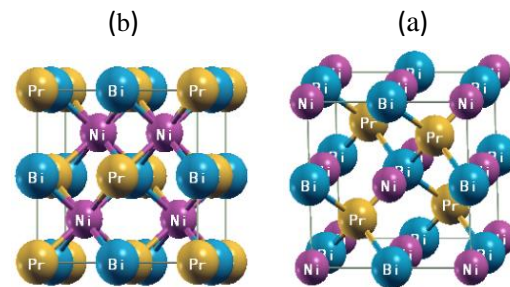
ترکیبات هویسلر نخستین بار در سال 1903 توسط هویسلر کشف شدند [1-2]. این ترکیبات با توجه به خواص منحصر بفردشان از جمله رفتار نیمه فلزی، اثر حافظه شکلی مغناطیسی و ترموالکترونیک توجه زیادی را به خود جلب کرده اند [3-4]. در مواد نیمه فلز نوارهای انرژی در دو کانال اسپینی رفتار متفاوتی دارند به طوری که در کانال اسپین اکثریت رفتار فلزی و در کانال اسپین اقلیت رفتار نیمه هادی باگاف در سطح فرمی دیده می شود. وجود این گاف در سطح فرمی منجر به قطبش اسپینی صد درصد می شود که می تواند

روش های محاسباتی

بسته ی شبیه سازی Wien2k برای مطالعه ی خواص ساختاری الکترونی و مغناطیسی ترکیب Ni-Pr-Bi استفاده شده است. محاسبات ساختار الکترونی بر پایه ی نظریه ی تابعی چگالی به روش موج تخت بهبود یافته ی پتانسیل کامل (FP-LAPW) و تقریب شیب تعمیم یافته در پارامتر بندی PBE96 برای پتانسیل همبستگی- تبادل، انجام شده اند [8]. شعاع های مافین-تین برای نیکل، پروسدیم و بیسموت به ترتیب برابر 2.5، 2.55 و 2.6 بوهر انتخاب شده اند. در این محاسبات انتگرال گیری منطقه ی بریلوئن با استفاده از 2000 نقطه ی k انجام گرفته اند که به ازای آن یک شبکه k به صورت $12 \times 12 \times 12$ ایجاد شده است. معیار همگرایی برای انرژی کل 0.0001 Ry و همگرایی بار 0.01e است.

ساختار بلوری

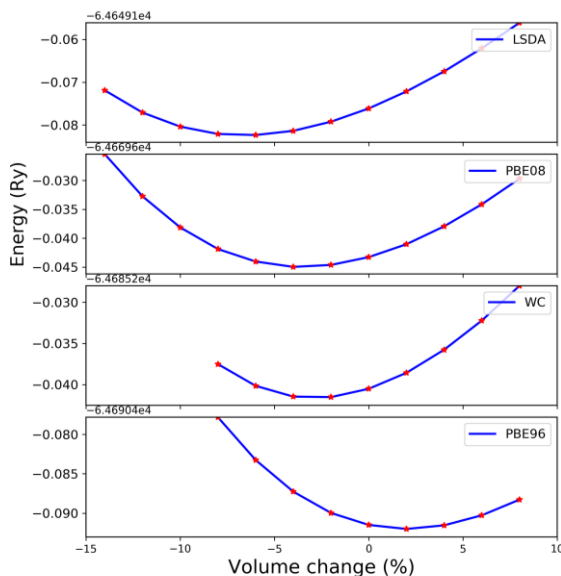
به طور کلی یک آلیاژ نیمه هویسلر ساختار XYZ، $C1_b$ دارد که مشابه ساختار هویسلر کامل X_2YZ ، $L2_1$ است که یکی از اتم های X آن حذف شده است. عناصر X و Y فلز واسطه هستند در حالی که اتم Z یکی از عناصر گروه اصلی در جدول تناوبی است [9]. شکل 1 ساختارهای بلوری دو فاز α و β را نشان می دهد. در فاز اول اتم نیکل و در فاز دوم اتم پروسدیم در مکان های X قرار دارند.



شکل 1: ساختار بلوری Ni-Pr-Bi در (a) فاز α و (b) فاز β .

خواص ساختاری

شکل 2 انرژی کل نسبت به تغییرات حجم برای فاز β ترکیب NiPrBi را نشان می دهد. ثابت های شبکه بهینه به ترتیب 7.05 \AA و 6.64 \AA برای فازهای α و β به دست آمده اند. ثابت های شبکه بهینه، انرژی کل و گشتاورهای مغناطیسی کل و تک تک اتم ها در جدول 1 خلاصه شده است. ترکیب نیمه هویسلر Ni-Pr-Bi، 20 الکترون ظرفیت دارد که با استفاده از قانون اسلیتر-پائولی برای آلیاژهای نیمه هویسلر، $M_t = Z_t - 18$ مقدار $2 \mu_B$ برای گشتاور مغناطیسی کل در فاز دوم به دست می آید که منطبق بر منحنی اسلیتر-پائولی است. این موضوع منجر به نیم فلز شدن این فاز می شود. در حالی که گشتاور مغناطیسی کل در فاز α برابر $1.5 \mu_B$ است و از قانون اسلیتر-پائولی تبعیت نمی کند و بنابراین رفتار نیم فلزی در فاز α این ترکیب مشاهده نمی شود. با توجه به جدول گشتاور مغناطیسی اتم های پروسدیم و نیکل تمایل



شکل 2: نمودار انرژی بر حسب تغییرات حجم برای ترکیب PrNiBi با استفاده از تقریب های مختلف.

جدول 1: ثابت های شبکه، انرژی کل و گشتاورهای مغناطیسی کل و تک تک اتم ها برای دو فاز α و β آلیاژ نیمه هویسلر NiPrBi.

	فاز	ثابت شبکه (\AA)	انرژی کل (Ry)	گشتاورمغناطیسی کل (μ_B)	گشتاورمغناطیسی Pr (μ_B)	گشتاورمغناطیسی Ni (μ_B)
NiPrBi	α	7.06	-64690.31	1.5	1.99	-0.5
PrNiBi	β	6.64	-64690.49	2	2.02	-0.11

سهم های غالب مربوط به اوربیتال های f اتم پروسدیمیوم و d اتم نیکل اند. اوربیتال های s و p اتم بیسموت در چگالی حالت های بلور سهم بسیار ناچیزی دارند. منشاء گاف در آلیاژ نیمه هویسلر PrNiBi را می توان به این صورت توضیح داد که اوربیتال d اتم نیکل به دو اوربیتال e_g و t_{2g} شکافته می شود، اوربیتال های e_g اتم نیکل با اوربیتال های f اتم پروسدیمیوم هیبرید شده و تشکیل اوربیتال های پیوندی و پاد پیوندی می دهند که منشاء اصلی گاف جدایی بین حالت های پیوندی و پاد پیوندی تشکیل شده است.

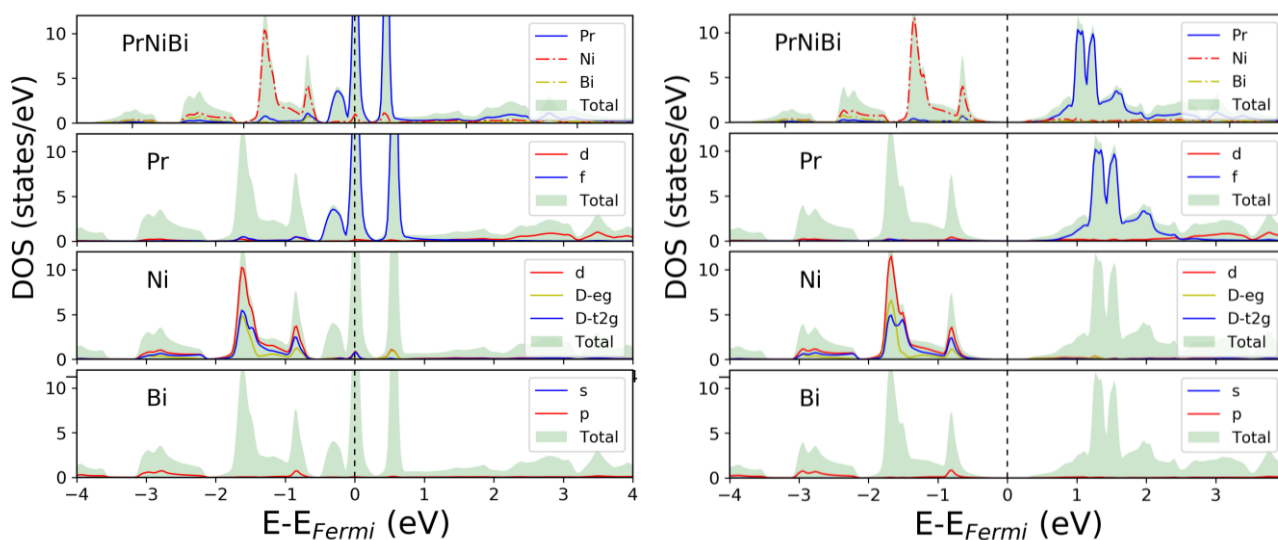
ساختار نواری

همانطور که از شکل 4 مشخص است، در کانال اسپین اکثریت نوار ظرفیت سطح فرمی را قطع کرده است بنابراین

دارند که نظم پاد فرومغناطیس نسبت به هم داشته باشند که این نظم پاد فرومغناطیس در فاز اول بیشتر است. به دلیل این که حالت پایدار سیستم فاز PrNiBi است فرو مغناطیس در این سیستم از یون Pr نشات می گیرد اما فاصله ی اتم های Pr از هم زیاد است و در نتیجه برهمکنش تبدالی بین گشتاورهای مغناطیسی به صورت غیر مستقیم است.

چگالی حالت ها

شکل 3 نمودارهای چگالی های حالت های کل و تک تک اتم ها را برای ترکیب PrNiBi نشان می دهد. با توجه به شکل چگالی حالت های کل در کانال اسپین اکثریت سطح فرمی را قطع کرده است که نشان دهنده ی رفتار فلزی است اما در کانال اسپین اقلیت یک گاف انرژی مشاهده می شود.



شکل 3: نمودار چگالی حالت های کل و تک تک اتم ها برای آلیاژ نیمه هویسلر PrNiBi. شکل سمت چپ کانال اسپین اکثریت و شکل سمت راست کانال اسپین اقلیت را نشان می دهد.

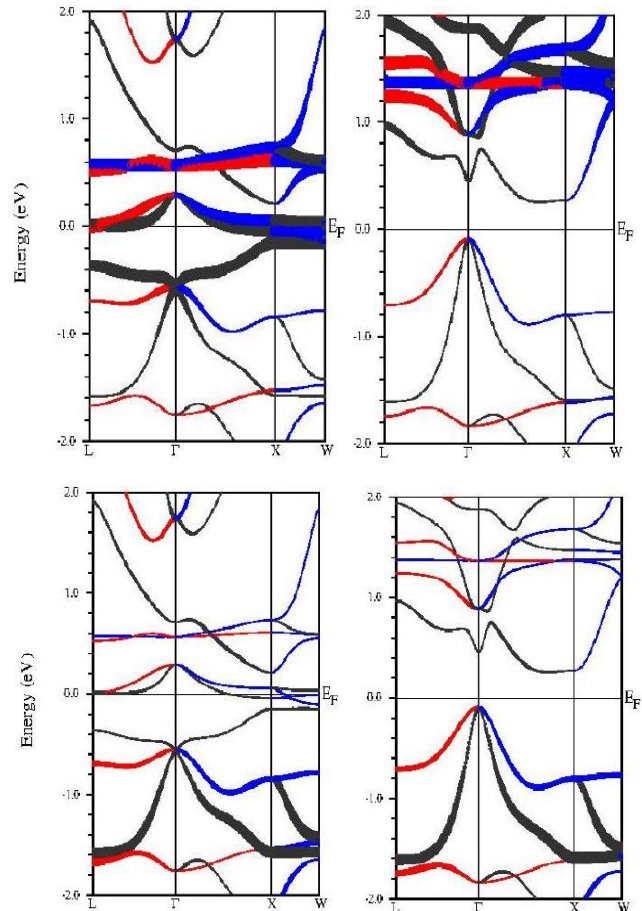
این نشان دهنده ی این است که نیکل گشتاور مغناطیسی بسیار کمی دارد.

نتیجه گیری

نتایج محاسبات با استفاده از تقریب GGA برای آلیاژ نیمه هویسلر NiPrBi خاصیت نیم فلزی در فاز دوم این ترکیب را پیش بینی می کنند و فاز اول این سیستم رفتار فلزی از خود نشان می دهد. لذا بررسی تجربی خواص ترابرد این سیستم حساس به فاز تشکیل شده است و مطالعات تجربی نیاز به بررسی دقیق تری دارند. به دلیل اینکه برای سامانه-های حاوی الکترون های با همبستگی قوی در اوربیتال های f و d تقریب GGA ممکن است منجر به نتایج غیر دقیق شود برای بررسی دقیق تر خواص این ترکیب، تقریب GGA+U می بایست مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع ها

- [1] Heusler F., Starck W., Haupt E., *Verh. D. P. G.*, **5** (1903) 220.
- [2] Heusler F., *Verh. D. P. G.*, **5** (1903) 219.
- [3] de Groot R. A., Mueller F. M., van Engen P. G., Buschow K. H. J., *Phys. Rev. Lett.*, **50** (1983) 2024.
- [4] Krishnaveni, S., Sundareswari, M., Deshmukh, P. C., Valluri, S. R., & Roberts, K., Band structure and transport studies of half Heusler compound DyPdBi: An efficient thermoelectric material. *Journal of Materials Research*, 31(9) (2016) 1306–1315.
- [5] Casper, F., Graf, T., Chadov, S., Balke, B., & Felser, C., Half-Heusler compounds: Novel materials for energy and spintronic applications. *Semiconductor Science and Technology*, 27(6) (2012).
- [6] Huang, W., Wang, X., Chen, X., Lu, W., Damewood, L., & Fong, C. Y., Structural and electronic properties of half-Heusler alloy PdMnBi calculated from first principles. *Materials Chemistry and Physics*, 148 (2014), 32–38.
- [7] Huang, W., Wang, X., Chen, X., Lu, W., Damewood, L., & Fong, C. Y., Structural and electronic properties of half-Heusler alloys PtXBi (with X=Mn, Fe, Co and Ni) calculated from first principles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 377 (2015) 252–258.
- [8] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties (Karlheinz Schwarz, Techn. Universit at Wien, Austria), 2001. ISBN 3-9501031-1-2.
- [9] Graf T., Felser C., Stuart S., *Progress in Solid State Chemistry*, **39** (2011) 1.



شکل 4: نمودار ساختار نواری برای ترکیب PrNiBi در کانال اسپینی اکثریت (سمت چپ) و اسپین اقلیت (سمت راست) مشخصه یابی شده برای حالت های Pr_f (بالا) و Ni_{d-t2g} (پایین).

در این کانال رفتار فلزی را مشاهده می کنیم. در حالی که در کانال اسپین اقلیت رفتار نیمه هادی با یک گاف در سطح فرمی مشاهده می شود که این گاف یک گاف غیر مستقیم است. انرژی فرمی کمی بالاتر از بیشینه نوار ظرفیت قرار دارد. ضخامت های خطوط نشان دهنده ی میزان سهم نوارها از اوربیتال های f اتم پروسدیموم اند. در نتیجه در یک کانال اوربیتال های f خیلی بالاتر از سطح فرمی تشکیل شده اند ولی در کانال دیگر این اوربیتال ها نزدیک به سطح فرمی تشکیل شده اند و جایگزیده هستند. اوربیتال های t_{2g} اتم نیکل به سطح فرمی نزدیک تر شده اند و کاملاً پر هستند و

مقایسه‌ی میان بایاس‌های تبدلی در سامانه‌های نانو ساختار Co-CoO-Co و Co-CoO

قشنی، مارال^۱؛ مظفری، مرتضی^۱، خوزه انخل دی تورو^۲

^۱گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم، دانشگاه اصفهان، دروازه شیراز، اصفهان

^۲گروه فیزیک کاربردی، دانشگاه کاستیلا لامانچا، اسپانیا

چکیده

در این پژوهش برای ساخت نانو ساختارهای دو مغناطیسی Co-CoO و Co-CoO-Co، نخست هیدروکسید کبالت به روش هم‌رسوبی تهیه و سپس در هیدروژن و اکسیژن به ترتیب احیا و اکسید شدند. بدین منظور نخست نانوذرات Co سنتز شده به روش احیای مستقیم در هیدروژن، در زمان و دمای معین در اکسیژن اکسید شدند و سپس در یک کوره‌ی لوله‌ای در دو زمان گوناگون، برای تشکیل پوسته دوم با ضخامت‌های گوناگون، در هیدروژن باز احیا شدند. آنالیز XRD تغییر درصد فازهای کبالت و اکسید کبالت را با زمان باز احیا نشان می‌دهد. میانگین اندازه بلورک‌ها در این نانو ساختارها پیرامون ۱۵۰ nm است. بررسی ویژگی‌های مغناطیسی نشان داد که افزودن لایه‌ی دوم کبالت به یک جابجایی افقی اندک در منحنی پسماند می‌انجامد و مقدار این جابجایی به درصد فاز Co در بیرونی‌ترین لایه بستگی دارد.

A comparison between exchange biases in Co-CoO and Co-CoO-Co nanostructures

Ghoshani, Maral¹; Mozaffari, Morteza¹, Jose A, De Toro²

¹ Department of Physics, Faculty of science, University of Isfahan, Isfahan

² Departamento de Física Aplicada, Universidad de Castilla-La Mancha, 13071 Ciudad Real, Spain

Abstract

In this research, to synthesize bimagnetic nanostructures of Co-CoO and Co-CoO-Co, cobalt hydroxide was prepared by the precipitation method and is then reduced and oxidized in hydrogen and oxygen atmospheres, respectively. To obtain the bimagnetic nanostructures, first synthesized Co nanoparticles, were oxidized in oxygen at a specific time and temperature, and then reduced in hydrogen in a tube furnace in two different times to form a second shell with various thicknesses. XRD analysis shows that cobalt and cobalt oxide changed by final reduction time. The mean crystallite sizes of these nanostructures are around 150 nm. Magnetic properties investigations show that addition of the second cobalt layer cause to small shift in hysteresis loop and value of this shift depends on the Co phase percentage.

PACS No. 75

هسته/پوسته^۱ با شکل و اندازه‌ی دلخواه ساخت. در چنین ساختارهایی برهم‌کنش میان لایه‌ها و نانوذرات نقش مهمی در تعیین ویژگی آن‌ها بازی می‌کند. یکی از این برهم‌کنش‌ها که در مواد مغناطیسی خود را نشان می‌دهد، برهم‌کنش تبدلی^۲ است که می‌تواند درجه یا درجه‌های آزادی و درپی آن ناهمسان‌گردی

مقدمه

امروزه نانو ساختارهای مغناطیسی به دلیل کاربردهای گسترده در قلمروهای گوناگون صنعت بسیار مورد توجه و مطالعه قرار گرفته‌اند [۱]. در چنین اندازه‌هایی نانو مواد ویژگی‌های تازه‌ای از خود بروز می‌دهند که برآمده از نسبت سطح به حجم بزرگ و/یا اثر اندازه است [۱]. امروزه با گسترش و پیشرفت روش‌های شیمیایی ساخت نانوذرات، می‌توان با کنترل دقیق عامل‌های رشد، ساختارهای چندلایه‌ای و چندفازی، مانند ساختارهای

¹ Core/Shell

² Exchange interaction

به گونه‌ای چیده می‌شوند که براساس نظم پادفرومغناطیس، مغناطش کل پادفرومغناطیس صفر شود. هنگامی که جهت میدان کاربرتی وارون می‌شود، گشتاورهای فرومغناطیس برای هم‌سوس شدن با میدان، می‌خواهند شروع به چرخش کنند، اما برهم‌کنش تبدالی در مرز دو فاز میان گشتاورهای فرومغناطیس و پادفرومغناطیس با این چرخش مخالفت می‌کند. بدین ترتیب برای چرخاندن کامل گشتاورهای فرومغناطیس و هم‌راستا شدن کامل آنها با میدان یا به عبارتی برای اشباع نمونه در جهت منفی H ، نیاز به میدان بزرگتری (در مقایسه با همان فرومغناطیس بی‌جفت‌شدگی با پادفرومغناطیس) برای چیرگی برگشتاور میکروسکوپی است. این باعث جابه‌جا شدن حلقه‌ی پسماند در جهت H های منفی می‌شود [۴]. با به‌کاربردن این مقادارها می‌توان بایاس تبدالی He و میدان وادارنده‌ی بزرگ شده‌ی H_C را تعریف کرد [۵]، که در این تعریف H_{C1} و H_{C2} نقاطی است که مغناطش صفر است و چرخه پسماند محور X (میدان مغناطیسی) را قطع می‌کند:

$$H_C = \frac{|H_{C1}| + |H_{C2}|}{2} \quad (1)$$

$$H_{ex} = \left| \frac{|H_{C1}| - |H_{C2}|}{2} \right| \quad (2)$$

با توجه به این که در نانوذرات اثرهای سطحی اثر چشم‌گیری بر ویژگی‌های مغناطیسی دارند، در این پژوهش نانوساختارهای $Co/CoO/Co$ با پوسته‌هایی به ضخامت‌های گوناگون برای افزایش مساحت سطح مشترک و بررسی تغییرات ویژگی‌های مغناطیسی، سنتز شده است. در این راستا نخست نانوذرات هیدرواکسید کبالت را به روش شیمیایی ساخته و با کنترل پارامترهای موثر در روند ساخت، نانوذرات با اندازه‌ی دلخواه و توزیع نسبتاً یکنواخت ساخته شد. سپس با احیا در هیدروژن و اکسایش در اکسیژن در زمان و دمای مشخص، پوسته‌ی CoO را روی هسته رشد داده و سرانجام با بازاحیای پوسته اکسیدشده، لایه‌ی Co بر روی CoO ایجاد شد. با رسم چرخه‌ی پسماند نمونه‌ها در دمای $5 K$ بایاس تبدالی اندازه‌گیری و مقایسه شدند. نتایج نشان می‌دهند که تغییرات درصد فازهای گوناگون باعث تغییر در مقدار بایاس تبدالی در نمونه‌ها شد.

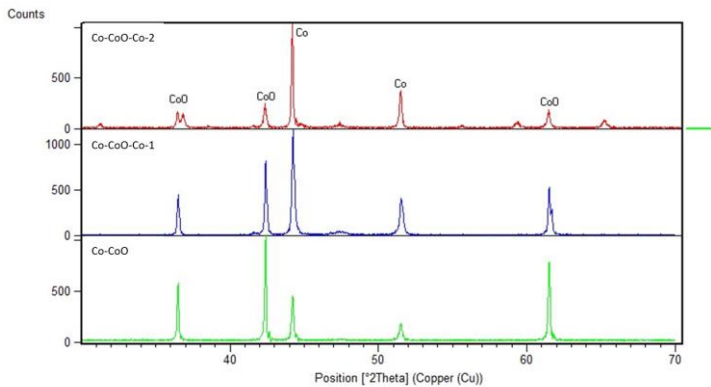
آزمایشگاهی

مغناطیسی^۳ تازه‌ای به ساختار بیافزاید. بیشتر ویژگی‌های نانوذرات هسته/پوسته مغناطیسی با ویژگی‌های تک تک فازهای سازنده‌ی آن، متفاوت است. بدین ترتیب می‌توان با کنار هم قراردادن فازهای گوناگون، ساختارهای مغناطیسی تازه‌ای را با ویژگی‌های مغناطیسی بهبودیافته و با کاربردهای تازه‌ای ساخت [۱]. رفتار فراگیر چنین نانوساختارهایی را می‌توان برپایه‌ی شناخت ویژگی‌های ذاتی هر یک از فازهای مغناطیسی و نیز شناخت برهم‌کنش‌های میان آنها پیش‌بینی کرد [۱]. در این ساختارها بسیاری از پدیده‌هایی که آشکار می‌شود برآمده از اثرهای سطحی مرز مشترک دو فاز مغناطیسی است. بنابراین برای بهبود ویژگی‌های آن‌ها تلاش می‌کنند برهم‌کنش میان فازهای همسایه در مرز مشترک را افزایش دهند [۱، ۲]. یکی دیگر از ویژگی‌های سامانه‌های چندلایه‌ای چندفازی، جابجایی چرخه‌ی پسماند یا بایاس تبدالی^۴ است. سامانه‌های بایاس تبدالی، سامانه‌هایی هستند که از کنار هم قرارگرفتن دست‌کم دو فاز مغناطیسی به‌وجود می‌آید. بارزترین ویژگی این سامانه‌های بایاس تبدالی جابجایی چرخه پسماندش در راستای افقی است که اولین بار در سال ۱۹۵۶ در ذرات بسیار ریز کبالت بصورت سامانه‌ی Co/CoO دیده شد [۳]. پدیده‌ی بایاس تبدالی برآمده از برهم‌کنش گشتاورهای دو فاز پادفرومغناطیس و فرومغناطیس است که از دمای بالاتر از دمای گذار فاز پادفرومغناطیس (T_N) به دماهای زیر آن در یک میدان مغناطیسی (FC) سرد شده‌اند. هنگامی که یک میدان مغناطیسی به اندازه‌ی کافی بزرگ روی نمونه در گستره‌ی دمایی $T_N < T < T_C$ به کار بسته می‌شود، گشتاورهای فاز فرومغناطیس با میدان هم‌سو می‌شوند، در صورتی که گشتاورهای فاز پادفرومغناطیس (که در واقع در این بازه‌ی دمایی پارامغناطیس است.) جهت‌گیری کاتوره‌ای دارند. هنگامی که در بود میدان، دما به زیر T_N کاهش یابد، به سبب برهم‌کنش گشتاورهای فرومغناطیس و پادفرومغناطیس در مرز مشترک-شان، اولین سری از گشتاورهای پادفرومغناطیس هم‌سو با گشتاور-های فرومغناطیس می‌شوند و گشتاورهای دیگر در پادفرومغناطیس

³ Magnetocrystalline anisotropy

⁴ Exchange bias

سه نمونه وجود دارد که شدت قله‌های آن‌ها گوناگون است. از مقایسه شدت قله‌ها می‌توانیم بپذیریم که در نمونه‌های Co-CoO-CoO شدت قله کبالت افزایش پیدا کرده است که ناشی از بازاحیای نمونه‌هاست. میانگین اندازه‌ی بلورک‌ها با از نرم افزار Maud برآورد و در بازه‌ی ۱۵۰nm به دست آمد.



شکل ۱. الگوهای پراش نانوساختارهای کبالت/ اکسید کبالت و کبالت/ اکسیدکبالت/ کبالت (۱ و ۲)، قله‌های هر فاز جداگانه برجسته شده‌اند. منحنی‌های پسماند نمونه‌ها در دمای ۵K رسم و پارامترهای وادارندگی و بایاس تبدلی به دست آمد. این پارامترها در جدول ۱ آمده است. بایاس تبدلی در نمونه‌ی Co-CoO بایاس تبدلی در حد دقت اندازه‌گیری دستگاه است، ولی نمونه‌های Co-CoO-CoO بایاس تبدلی کوچکی دارند. این بایاس را می‌توان به ضخامت نازکی از کبالت که در اثر بازاحیای نمونه‌ها روی سطح تشکیل شده است نسبت داد.

جدول ۱: بایاس تبدلی و وادارندگی برای نمونه‌ها

نام نمونه	زمان بازاحیا	میدان بایاس تبدلی (H _{ex})	میدان وادارندگی (H _c)
Co/CoO	۰	۱،۵۲	۲۷۲
Co/CoO/Co-1	۹۰	۱۳،۵	۳۳۷
Co/CoO/Co-2	۳۶۰	۹،۶۶	۳۷۶

نکته جالب توجه این است که در نمونه‌ای که به مدت ۹۰ ثانیه احیا شده است در مقایسه با نمونه‌ای که ۳۶۰ ثانیه احیا شده، بایاس بزرگتری داریم. پس می‌توان نتیجه گرفت که اگر ضخامت لایه کبالت بیرونی از حد معینی بیشتر شود، بایاس کاهش می‌یابد. البته با توجه به آن‌که این لایه فرومغناطیس است، این نتیجه با داده‌هایی که در پژوهش‌های دیگر در مورد فاز فرومغناطیس در سیستم‌های لایه نازک گزارش کرده‌اند هم‌خوانی دارد [۱]. در این

نخست با روش شیمیایی رسوب‌گیری، رسوب Co(OH)₂ ساخته شد. بدین منظور پیش‌سازهای Co(NO₃)₂.6H₂O با خلوص ۹۹٪ از شرکت مرک و سدیم هیدروکسید صنعتی برای رسوب‌گیری به کار رفت. سپس این رسوب در یک کوره‌ی الکتریکی در دمای ۴۵۰°C اکسید و اکسید کبالت Co₃O₄ با میانگین اندازه‌ی بلورک‌های ۷۰nm به دست آمد. برای به دست آوردن نانوذرات کبالت روش احیای مستقیم در هیدروژن به کار گرفته شد. برای جلوگیری از کلوخه‌ای شدن نانوذرات، شرایط ساخت باید کاملاً پایش شود. پارامترهایی مانند دما و زمان احیا و نوع گاز احیاکننده می‌تواند بر آن ویژگی‌ها تاثیر بگذارند. بدین منظور یک دستگاه شارسنج جرمی به کارگرفته شد که میزان حجم گاز ورودی را کنترل می‌کرد. با توجه به نتایج این گام، زمان مورد نیاز برای احیای کامل نانوذرات اکسید کبالت و تبدیل آن به نانوذرات کبالت، به دست آمد. برای ساخت نانوساختارهای کبالت/اکسید کبالت، روش اکسایش مستقیم به کارگرفته شد. در این گام نیز باید پارامترهای دما، زمان و شار اکسیژن مورد نیاز برای دستیابی به پوسته‌ی اکسیدکبالت با ضخامت‌های مورد نظر تعیین می‌شد. با توجه به این پارامترها محاسبات انجام و نانوذرات کبالت در دمای ثابت ۴۵۰°C اکسید شد. سپس برای ساخت نانوساختارهای کبالت/اکسیدکبالت/کبالت، همان نمونه در بازه‌های زمانی معین احیا شد. در این پژوهش برای بررسی اثر درصد فاز کبالت در بیرونی‌ترین لایه، نمونه‌ی Co/CoO را در دو زمان ۹۰ ثانیه و ۳۶۰ ثانیه بازاحیا کرده و آن‌ها را Co-CoO-Co-1 و Co-CoO-Co-2 نامگذاری کردیم.

فازیابی نمونه‌های ساخته شده با روش پراش سنجی پرتو ایکس و پراش سنج بروکر با لامپ مس (CuK α ; $\lambda=1.5406\text{\AA}$) انجام شد. فازیابی با نرم افزارهای X^{pert} و Maud انجام شد. پارامترهای مغناطیسی در نمونه‌ها با یک دستگاه اسکویید (MPMS Evercool SQUID) اندازه‌گیری شد.

بحث و بررسی

در شکل ۱، الگوهای پراش پرتو ایکس نمونه‌های Co-CoO و Co-CoO-Co-1 و Co-CoO-Co-2 نشان داده شده است. همان‌گونه که دیده می‌شود فازهای کبالت و اکسید کبالت در هر

برای احیای نمونه‌ها، این ذرات کلوخه‌ای شده و روند اکسایش در مرحله دوم بسیار کندتر از پیش‌بینی‌هاست. بنابراین در این روش کنترل کمی در روند رشد لایه‌ها داریم که به شدت بر روی رفتار مغناطیسی نمونه‌ها، به ویژه بایاس تبادلی تأثیر دارد.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش نانوذرات کبات اکسید به روش هم‌رسوبی ساخته و سپس با اکسایش و کاهش، به ترتیب ساختارهای Co-CoO و Co-CoO-Co با دو ضخامت گوناگون کبات سنتز شد. بررسی ویژگی‌های مغناطیسی نشان داد که به دلیل برهم‌کنش تبادلی میان پوسته نازک کبات و فاز کبات اکسید منحنی پسماند در نمونه‌های Co-CoO-Co اندکی جابجا شده است. با افزایش ضخامت پوسته بایاس تبادلی کاهش می‌یابد.

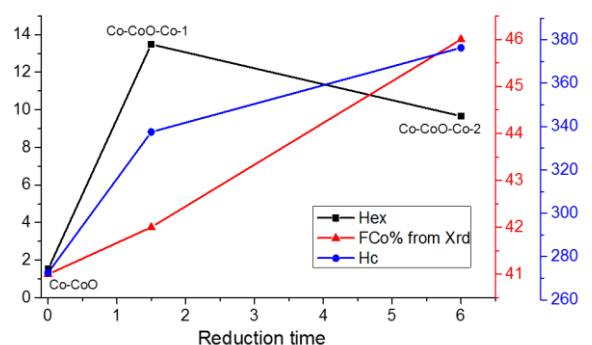
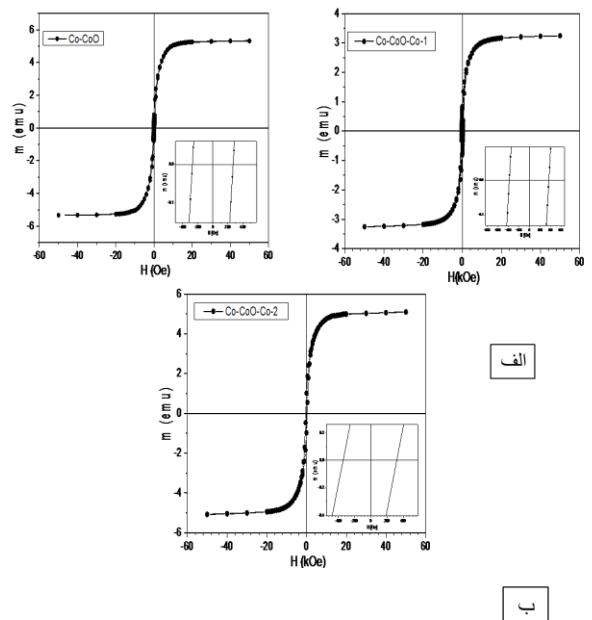
مرجع‌ها

- [۱] A. Lopez-Ortega, M. Estrader, G. Salazar-Alvarez, A. G. Roca, and J. Nogues, "Applications of exchange coupled bi-magnetic hard/soft and soft/hard magnetic core/shell nanoparticles," *Physics Reports* 553, 1-32 (2015).
- [۲] J. A. De Toro, D. P. Marques, P. Muñiz, V. Skumryev, J. Sort, D. Givord, and J. Nogues, "High temperature magnetic stabilization of cobalt nanoparticles by an antiferromagnetic proximity effect," *Physical review letters* 115, 057201 (2015).
- [۳] W. H. Meiklejohn, and C. P. Bean, "New magnetic anisotropy," *Physical review* 102, 1413 (1956).
- [۴] J. Nogues, J. Sort, V. Langlais, V. Skumryev, S. Surinach, J. Munoz, and M. Baró, "Exchange bias in nanostructures," *Physics Reports* 422, 65-117 (2005).
- [۵] A. Biternas, "Study of the training effect in exchange bias using the domain state model," (University of York, 2009).
- [۶] J. Nogues, and I. K. Schuller, "Exchange bias," *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 192, 203-232 (1999).
- [۷] J. Nogues, and I. K. Schuller, "Exchange bias," *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 192, 203-232 (1999).
- [۸] O. Iglesias, A. Labarta, and X. Batlle, "Exchange bias phenomenology and models of core/shell nanoparticles," *Journal of nanoscience and nanotechnology* 8, 2761-2780 (2008).

پژوهش‌ها با کمیته کردن مقدار انرژی بر یکای سطح در یک سامانه لایه نازک رابطه‌ای بدست می‌آید که مقدار بایاس با ضخامت لایه فرو نسبت عکس دارد [۷]:

$$H_E = -J_{INT} / \mu_0 M_{FM} t_{FM} \quad (3)$$

با توجه به این‌که بر پایه‌ی آنالیز الگوهای پراش نمونه‌ها، میانگین اندازه‌ی بلورک‌ها بزرگ است و با توجه به این‌که در هسته‌های فرومغناطیس بایاس تبادلی با افزایش قطر هسته کاهش می‌یابد [۸]، یکی از دلایل کوچک بودن بایاس تبادلی در این سیستم وجود مقدار چشم‌گیری فاز فرومغناطیس است. در واقع بایاس اندکی که در این نمونه‌ها می‌بینیم برآمده از برهم‌کنش تبادلی در مرز مشترک میان لایه‌ی نازک کبات بیرونی و فاز کبات اکسید است.



شکل ۲. الف) چرخه پسماند نمونه‌ها (ب) تغییرات بایاس تبادلی، وادارندگی و درصد فاز کبات در نمونه‌ها بر حسب زمان احیا برپایه‌ی نتایج بدست آمده از ساختار و مغناطش نمونه‌ها، به نظر می‌رسد که برای ذرات درشت Co_3O_4 به دلیل نیاز به دمای بالا

شبیه‌سازی تابع همبستگی اسپینی بین لایه‌ای در $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ به دو روش مونت کارلوی

کلاسیکی و مبادله‌ی پیکربندی‌ها

کریمی، هما؛ رضایی، نفیسه؛ اعلائی، مجتبی

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

$\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ با نام اختصاری *BMNO* یک ساختار دو لایه‌ی لانه‌زنبوری پادفرمغناطیس است، که علی‌رغم دمای کوری-وایس نسبتاً بزرگی که دارد، هیچ نظم مغناطیسی بلند بردی را نشان نمی‌دهد. علت بی‌نظمی در این ترکیب، حضور آن در مرز بینابینی دو پیکربندی اسپینی خطی (ساختارهای N_1 و N_2) گزارش شده است. در هر دو حالت، در صفحه‌های لانه‌زنبوری نظم نل برقرار است اما جهت‌گیری گشتاورهای مغناطیسی بین لایه‌ای در یک پیکربندی موازی (N_2) و در دیگری پادموازی (N_1) است. در این مقاله به منظور بررسی حالت پایه‌ی هامیلتونی، تابع همبستگی اسپینی بین لایه‌ای را در دمای پایین، به دو روش مونت کارلوی ساده و مبادله‌ی پیکربندی‌ها به کمک یک کد مونت کارلو که در دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان توسعه یافته است، محاسبه کرده و با مقایسه‌ی نتایج حاصل، روش مبادله‌ی پیکربندی‌ها به عنوان روشی بهینه برای بررسی *BMNO* معرفی شده است.

Classical Monte Carlo and Parallel Tempering simulations of inter-layer spin correlation function in $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$

Karimi, Homa; Rezaei, Nafiseh; Alaei, Mojtaba

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

$\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ (*BMNO*) is a honeycomb bilayers antiferromagnet, not showing any ordering down to very low temperatures despite having a relatively large Curie-Weiss temperature. The absence of long ranged ordering in this compound is due to competition between two collinear spin states. Both states have Néel type magnetic ordering in each honeycomb layer, but the magnetic moment orientations of two-layer in N_1 is anti-parallel while in N_2 is parallel. To speculate about the ground state of the Hamiltonian, the interlayer spin correlation function at a low temperature is calculated by two Classical Monte Carlo and Parallel Tempering algorithms using a Monte Carlo code which is developed at the Physics department of Isfahan University of Technology. By comparing the results, the Parallel tempering method has been introduced as an optimal method for studying *BMNO*.

مقدمه

وابستگی دمایی پذیرفتاری مغناطیسی علی‌رغم مقدار بزرگ دمای کوری-وایس، ۲۵۷- کلوین، هیچ نظم بلندبردی را تا دمای پایین ۰/۴ کلوین نشان نمی‌دهد [۱، ۲]. این فقدان نظم بلندبرد با اندازه-گیری‌های گرمای ویژه [۱، ۲]، پراکندگی نوترونی [۳] و تشدید اسپین الکترونی [۴] نیز تایید شده است. مطالعات ابتدا به ساکن نظریه‌ی تابعی چگالی، برای این ترکیب یک هامیلتونی اسپینی مؤثر را پیشنهاد

BMNO ساختار جدیدی با شبکه‌ی مغناطیسی دو لایه، متشکل از صفحه‌های لانه‌زنبوری است که خواص مشابهی با سیستم‌های ناکام مغناطیسی از خود نشان می‌دهد. شکل ۱ نمایی از ساختار بلوری و شبکه‌ی مغناطیسی لانه‌زنبوری آن را که متشکل از اتم‌های مغناطیسی Mn^{4+} با اسپین $S=3/2$ است، نشان می‌دهد.

کارلوی ساده، تابع همبستگی اسپین-اسپین را بین دو لایه‌ی شبکه‌های لانه‌زنبوری، با میانگین‌گیری روی مقادیر حاصل از شبیه‌سازی‌های مونت کارلوی متعدد با شرایط اولیه‌ی متفاوت محاسبه کرده‌اند و نشان داده‌اند که مقدار تابع همبستگی اسپینی بین لایه‌های برای BMNO بسیار ناچیز و نزدیک به صفر است. علاوه بر آن، با افزایش (کاهش) جزئی در مقدار برهم‌کنش‌های بین لایه‌ای، مقدار تابع همبستگی اسپینی متناظر با یکی از ساختارهای N_1 (N_2) می‌شود. در نتیجه سیستم در مرز بین این دو حالت قرار دارد که باعث ایجاد ناکامی و عدم حضور نظم بلندبرد مغناطیسی در حالت پایه‌ی آن می‌شود [۶].

هدف

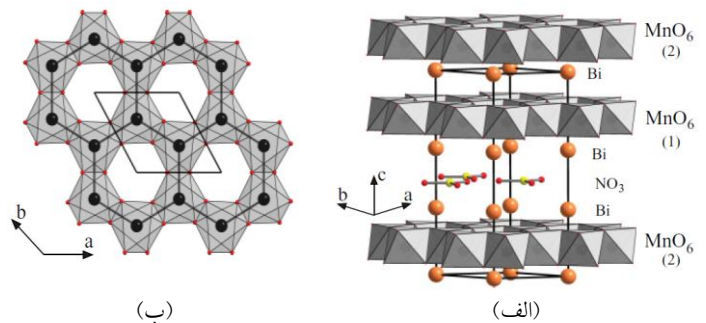
از آنجا که وجود ناکامی در یک سیستم برای مقایسه‌ی انواع روش‌های مونت کارلو مناسب است و همچنین با توجه به کار انجام شده در مرجع [۶]، در این مقاله یک هامیلتونی هایزنبرگ پادفرومغناطیس کلاسیکی به صورت $\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i \cdot S_j$ در نظر گرفته‌ایم و تابع همبستگی اسپین-اسپین بین لایه‌های را به دو روش مختلف مونت کارلو یعنی با استفاده از الگوریتم متروپلیس ساده و الگوریتم مبادله‌ی پیکربندی‌ها محاسبه می‌کنیم و نتایج آن‌ها را با یکدیگر مقایسه می‌کنیم.

در حقیقت به دنبال پاسخ به این پرسش هستیم که آیا می‌توان در روش مبادله‌ی پیکربندی‌ها، بدون تکرار شبیه‌سازی‌ها با شرایط اولیه‌ی متفاوت، به نتیجه‌ای قابل اعتماد از رفتار واقعی BMNO دست یافت؟ بدین منظور برای انجام شبیه‌سازی‌ها از یک بسته‌ی محاسباتی مونت کارلو [۷] که در دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان توسعه یافته است، استفاده کرده‌ایم.

الگوریتم متروپلیس و الگوریتم مبادله‌ی پیکربندی‌ها

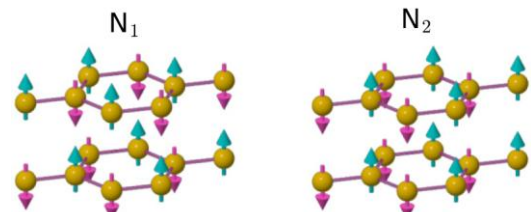
یکی از معروف‌ترین روش‌های حل عددی در مکانیک آماری و محاسبه‌ی خواص سیستم‌های بس‌ذره‌ایی، روش‌های شبیه‌سازی مونت کارلو است. رهیافت مونت کارلو برای حل مسائلی هم‌چون محاسبه‌ی تابع پارش و مقدار چشمداشتی یک کمیته، استفاده از نمونه‌های تصادفی است [۸]. الگوریتم متروپلیس یا نمونه برداری با اهمیت یکی از روش‌های مونت کارلو برای انتخاب نمونه‌های

می‌دهد، که تنها شامل جمله‌ی برهم‌کنش‌های اسپینی پادفرومغناطیس هایزنبرگ میان نزدیک‌ترین همسایه‌ها است [۵ و ۶].



شکل ۱: (الف) نمای کلی از لایه‌ها ساختار BMNO. (ب) شبکه‌ی لانه‌زنبوری با خطوط تیره مشخص شده‌اند و اتم‌های مغناطیسی Mn^{4+} را به یکدیگر متصل می‌کنند [۱ و ۲].

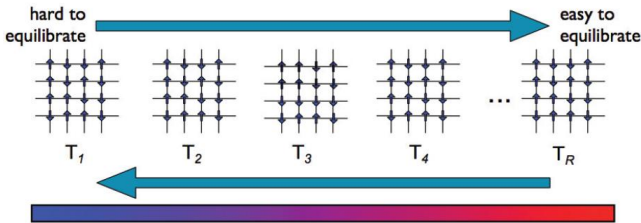
تا کنون آزمایش‌ها و مطالعات زیادی برای بررسی علت ظهور ناکامی روی این ترکیب، انجام شده است. در آخرین گزارش ارائه شده، در مرجع [۶]، عدم حضور نظم بلندبرد مغناطیسی، ناشی از رقابت بین دو پیکربندی اسپینی مشخص شده در شکل ۲ است. این دو ساختار دارای مقدار انرژی نزدیک به یکدیگر هستند و در بین سایر ساختارهای مغناطیسی ممکن برای این ترکیب، کمینه‌ترین مقدار را دارند. در هر یک از این ساختارها، درون صفحه‌های لانه‌زنبوری نظم نیل برقرار است. آرایش اسپین‌ها در بین دو صفحه‌ی لانه‌زنبوری، در ساختار N_1 ، پادموازی با یکدیگر و در ساختار N_2 ، موازی با یکدیگر است.



شکل ۲: دو پیکربندی اسپینی محتمل برای ترکیب BMNO [۶].

تابع همبستگی اسپین-اسپین، $\langle S_i \cdot S_j \rangle$ ، میزان وابستگی جهت‌گیری دو اسپین در موقعیت‌های مختلف را مشخص می‌کند. به عنوان مثال در یک فرومغناطیس که اسپین‌ها هم‌جهت با یکدیگر قرار دارند، مقدار این تابع مثبت است، در حالی‌که در پادفرومغناطیس‌ها، اسپین‌ها نسبت به یکدیگر پادموازی و مقدار تابع منفی می‌شود. آن‌ها نیز در کار خود با استفاده از شبیه‌سازی مونت

به پیکربندی در دمای پایین کمک می کند تا از سدهای انرژی عبور کند و در دمای پایین نیز امکان نمونه برداری از تمام فضای فاز وجود وجود داشته باشد.

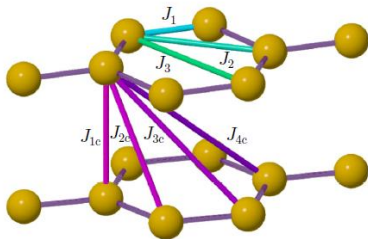


شکل ۳: شمای الگوریتم مبادله‌ی پیکربندی‌ها [۱۰].

$$A = \begin{cases} e^{-(\beta_{low} - \beta_{high}) \Delta E} & , (E_{high} - E_{low}) > 0 \\ 1 & , (E_{high} - E_{low}) < 0 \end{cases} \quad (5)$$

نتایج حاصل از شبیه‌سازی شبکه‌ی BMNO

در این بخش نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های مونت کارلو را به ازای هر یک از الگوریتم‌های به کار گرفته شده بیان می‌کنیم. همان‌طور که گفته شد، یک مدل کلاسیکی هایزنبرگ را با توجه به مقادیر برهم‌کنش‌های پادفرومغناطیس گزارش شده در مرجع [۶]، تعریف کرده‌ایم. مطابق شکل ۴، این مقادیر شامل برهم‌کنش‌های نزدیک‌ترین همسایه‌های درون لایه‌ای تا مرتبه‌ی سوم و بین لایه‌ای تا مرتبه‌ی چهارم می‌شود.



شکل ۴: برهم‌کنش‌های تعریف شده برای تعریف هامیلتونی [۶].

محاسبات در روش متروپلیس با دینامیک چرخش تک اسپین و اعمال شرایط مرزی دوره‌ای، روی یک ابرباخته‌ی $24 \times 24 \times 1$ ، شامل 2304 اتم Mn، انجام شده است. تعداد 5×10^6 گام مونت کارلو برای تعادل گرمایی و پس از آن تعداد 5×10^6 گام مونت کارلوی دیگر برای نمونه‌برداری در نظر گرفته شده است. به منظور کاهش میزان همبستگی بین کمیته‌ها، اندازه‌گیری‌ها پس از طی هر 5 گام مونت کارلوانجام می‌شوند. محاسبه‌ی تابع همبستگی بین لایه‌ای در دمای 2 کلون انجام شده است. همان‌طور که در شکل ۵ مشاهده می‌شود، مقدار تابع همبستگی اسپینی بین لایه‌ای به دست آمده از یک مرتبه

تصادفی است. در این الگوریتم طی یک فرآیند مارکوف، زنجیره‌ای از حالت‌های سیستم به‌طور تصادفی و با احتمال گذار $P(\mu \rightarrow \nu)$ ایجاد می‌شوند [۸]. طبق رابطه‌ی (۲)، این احتمال را می‌توان به صورت حاصل ضرب دو احتمال انتخاب و احتمال پذیرش تعریف کرد [۸].

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu) \quad (2)$$

برای یک سیستم اسپینی و با فرض دینامیک چرخش تک اسپین، مقدار این دو احتمال مطابق با روابط (۳) و (۴) تعریف می‌شوند. یعنی اسپین‌ها با احتمال $g(\mu \rightarrow \nu)$ برای ایجاد تغییر در حالت سیستم انتخاب می‌شوند، سپس حالت جدید با احتمال $A(\mu \rightarrow \nu)$ پذیرفته یا رد می‌شود. این چرخه تکرار شده و میانگین‌گیری روی حالت‌های مختلف صورت می‌گیرد [۸].

$$g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N} \quad (3)$$

$$A = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & , (E_\nu - E_\mu) > 0 \\ 1 & , (E_\nu - E_\mu) < 0 \end{cases} \quad (4)$$

در سیستم‌های ناکام مغناطیسی، سیمای سطح انرژی در فضای فاز، دارای تعداد زیادی کمینه‌های موضعی است؛ یعنی دارای تعداد زیادی از دره‌ها است که توسط قله‌هایی با ارتفاع‌های مختلف از یک‌دیگر جدا شده‌اند [۸]. هنگام شبیه‌سازی این سیستم‌ها با الگوریتم متروپلیس، به خصوص در دماهای پایین، احتمال گذار به سایر حالت‌های پایدار به صورت نمایی کاهش می‌یابد، زیرا سیستم در یکی از این دره‌ها به دام افتاده و زمان تعادل بسیار طولانی خواهد بود [۸]. از طرف دیگر، اگر چندین شبیه‌سازی با حالت‌های اولیه‌ی متفاوت اجرا شود، ممکن است در هر مرتبه اجرا، سیستم در ناحیه‌ی متفاوتی به دام افتد و پاسخ متفاوتی از رفتار سیستم را نشان دهد. بنابراین لازم است تا از تکنیک‌های نمونه‌برداری کامل‌تری استفاده شود که از میان آن‌ها می‌توان به الگوریتم مبادله‌ی پیکربندی‌ها اشاره کرد [۹].

در این الگوریتم، مطابق شکل ۳، شبیه‌سازی روی چندین نسخه از یک پیکربندی سیستم در دماهای مختلف و به‌صورت هم‌زمان انجام می‌شود [۱۰]. پس از طی تعداد مشخصی گام مونت کارلو، پیکربندی‌های سیستم در دماهای مجاور را با احتمالی مطابق با رابطه‌ی (۵) جابه‌جا می‌شوند [۸]. در نتیجه پیکربندی در دمای بالاتر

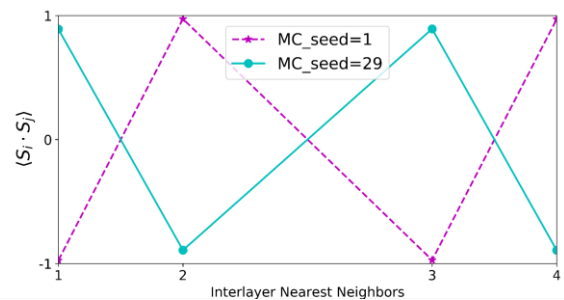
در این مقاله به منظور بررسی حالت پایه‌ی $BMNO$ ، تابع همبستگی اسپین-اسپین را بین دو صفحه‌ی لانه‌زنبوری با دو الگوریتم متروپلیس ساده و الگوریتم مبادله‌ی پیکربندی‌ها محاسبه کردیم.

مشاهده شد که در الگوریتم متروپلیس، تابع همبستگی اسپینی بین لایه‌ای به ازای شرایط اولیه‌ی مختلف نه تنها پاسخ یکتایی را نشان نمی‌دهد، بلکه مقدار این تابع در هر مرتبه اجرا، به‌طور تصادفی، متناظر با نظم مغناطیسی بین لایه‌ای در یکی از ساختارهای N_1 یا N_2 است. برای دستیابی به پاسخی درست از مقدار این تابع، میانگین نتایج مربوط به اجراهای متعدد الگوریتم متروپلیس محاسبه شد. در الگوریتم مبادله‌ی پیکربندی‌ها، بدون تکرار محاسبات و تنها با یک مرتبه اجرای الگوریتم، نتیجه‌ای مشابه با مقدار تابع همبستگی اسپینی بین لایه‌ای میانگین‌گیری شده در روش متروپلیس به دست آوردیم. بنابراین در این الگوریتم، با حجم کم‌تری از محاسبات، نتیجه‌ی دقیق‌تر و نزدیک‌تر به رفتار حقیقی $BMNO$ به دست می‌آید و نسبت به الگوریتم متروپلیس، روش مناسب‌تری برای مطالعه‌ی این ماده است.

مرجع‌ها

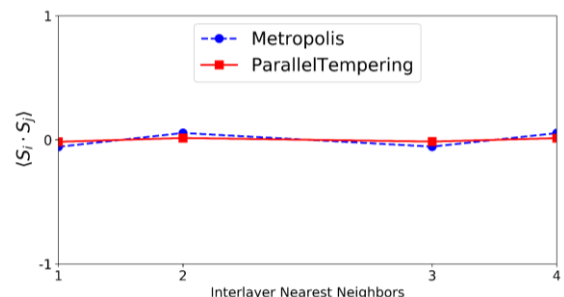
- [۱] Smirnova, Olga, et al. "Synthesis, crystal structure, and magnetic properties of $Bi_3Mn_4O_{12}(NO_3)$ oxynitrate comprising $S=3/2$ honeycomb lattice." *Journal of the American Chemical Society* **131**.23 (2009): 8313-8317.
- [۲] Onishi, N., et al. "Magnetic ground state of the frustrated honeycomb lattice antiferromagnet $Bi_3Mn_4O_{12}(NO_3)$." *Physical Review B* **85**.18 (2012): 184412.
- [۳] Matsuda, M., et al. "Disordered Ground State and Magnetic Field-Induced Long-Range Order in an $S=3/2$ Antiferromagnetic Honeycomb Lattice Compound $Bi_3Mn_4O_{12}(NO_3)$." *Physical review letters* **105**.18 (2010): 187201.
- [۴] Okubo, Susumu, et al. "High-field ESR measurements of $S=3/2$ honeycomb lattice antiferromagnet $Bi_3Mn_4O_{12}(NO_3)$." *Journal of Physics: Conference Series*. Vol. 200. No. 2. IOP Publishing, 2010.
- [۵] Kandpal, Hem C., and Jeroen van den Brink. "Calculation of magnetic exchange couplings in the $S=3/2$ honeycomb system $Bi_3Mn_4O_{12}NO_3$ from first principles." *Physical Review B* **83**.14 (2011): 140412.
- [۶] Alaei, Mojtaba, et al. "Origin of magnetic frustration in $Bi_3Mn_4O_{12}(NO_3)$." *Physical Review B* **96**.14 (2017): 140404
- [۷] n-rezaee@ph.iut.ac.ir
- [۸] Newman, M., and G. Barkema. *Monte carlo methods in statistical physics chapter 1-4*. Oxford University Press: New York, USA, 1999.
- [۹] Marinari, Enzo, and Giorgio Parisi. "Simulated tempering: a new Monte Carlo scheme." *EPL (Europhysics Letters)* **19**.6 (1992): 451.
- [۱۰] Yucesoy, Burcu. "Replica exchange Monte Carlo simulations of the ising spin glass: Static and dynamic properties." (2013).

اجرای شبیه‌سازی متروپلیس به ازای شرط اولیه‌ی متفاوت، یکسان نیست.



شکل ۵: تابع همبستگی اسپینی بین لایه‌ای در الگوریتم متروپلیس به ازای مقدار بذر ۱، نظم ساختار N_1 و به ازای بذر ۲۹، نظم ساختار N_2 را نشان می‌دهد. بنابراین مقدار تابع همبستگی را با متوسط‌گیری روی نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های متروپلیس که به ازای ۵۴ شرط اولیه‌ی متفاوت انجام شده است، محاسبه کرده‌ایم که در شکل ۶ نشان داده شده است.

در گام بعدی، مقدار این تابع را با الگوریتم مبادله‌ی پیکربندی‌ها محاسبه کرده‌ایم. برای انجام این الگوریتم، لازم است تا تعداد دمای بهینه و بهترین بازه‌ی دمایی برای انجام شبیه‌سازی‌ها محاسبه شوند. در محاسبات ما، شبیه‌سازی به ازای تعداد ۶۴ دما در بازه‌ی دمایی ۲ تا ۱۰ کلون انجام شده است و پس از هر ۸ گام مونت کارلو امکان جابه‌جایی پیکربندی‌ها فراهم شده است. برای مقایسه‌ی بهتر، مقدار تابع همبستگی اسپینی بین لایه‌ای به دست آمده در الگوریتم مبادله‌ی پیکربندی‌ها نیز در شکل ۶ نشان داده شده است. این مقدار با یک مرتبه اجرای شبیه‌سازی حاصل شده است. همچنین مقدار تابع همبستگی، $\langle S_i \cdot S_j \rangle$ ، نسبت به الگوریتم متروپلیس خیلی نزدیک‌تر به صفر است که دقت بالای این الگوریتم را نشان می‌دهد.



شکل ۶: نمودار تابع همبستگی اسپینی بین لایه‌ای در دمای ۲ کلون حاصل از به‌کارگیری روش متروپلیس ساده و مبادله‌ی پیکربندی‌ها.

نتیجه‌گیری

سنتز و بررسی خواص ساختاری و مغناطیسی نانوکامپوزیت Fe₃O₄@GO

مرادیان^۱، رستم^۱؛ منوچهری^۲، ایرج^۲؛ سلیمانی^۳، بهاره^۳

^۱ گروه فیزیک، دانشگاه رازی، کرمانشاه

^۲ گروه فیزیک، دانشگاه رازی، کرمانشاه

^۳ گروه فیزیک، دانشگاه رازی، کرمانشاه

چکیده

نانوذرات مغناطیسی Fe₃O₄ و نانوکامپوزیت Fe₃O₄@GO به روش هم‌رسوبی تهیه شدند. ساختار و رفتار مغناطیسی نمونه‌ها با استفاده از FTIR، XRD و VSM مورد ارزیابی قرار گرفت. آنالیز XRD تشکیل مگنتیت را نشان داد و اندازه بلوری حدود ۱۴ نانومتر بود. طیف FTIR تشکیل نانوکامپوزیت و ساختار اسپینلی معکوس مگنتیت را تأیید کرد. مغناطش سنج ارتعاشی نمونه رفتار ابرپارامغناطیسی نمونه‌ها را تأیید کرد. در آزمایش خواص مغناطیسی، نمونه‌ها به سرعت در مجاور آهنربای دائمی جمع شدند. نانوکامپوزیت‌های با رفتار ابرپارامغناطیس بالا می‌توانند در انتقال هدفمند دارو و حامل دارو استفاده شوند.

Synthesis and characterization of structure and magnetic properties of Fe₃O₄@GO nanocomposites

Moradian, Rostam¹; Manouchehri, Iraj²; Soleimani, Bahareh³

¹ Department of Physics, Razi University, Kermanshah

² Department of Physics, Razi University, Kermanshah

³ Department of Physics, Razi University, Kermanshah

Abstract

Magnetic magnetite (Fe₃O₄) nanoparticles and Fe₃O₄@GO nanocomposites synthesized by chemical co-precipitation. Structure and magnetic behavior of samples were characterized using XRD, FT-IR and VSM. The XRD analysis showed the formation of Fe₃O₄ and the crystal size of Fe₃O₄ is about 14 nm. The FTIR spectrum confirmed the formation of nanocomposites and inverse spinel structure of magnetite. The vibrating sample magnetometer (VSM) confirmed superparamagnetic behavior of samples. In the test for magnetic properties, the samples gathered rapidly in the vicinity of the permanent magnet. The nanocomposites, with high superparamagnetism, can be used in drug targeting transports and drug carrier.

مقدمه

می‌دهد و در دمای اتاق فری مغناطیس است. ذرات مگنتیت متخلخل نیستند و انحلال آن‌ها از هر اکسید آهن سه ظرفیتی خالص دیگری سریع‌تر اتفاق می‌افتد. این ماده به‌واسطه گاف انرژی نسبتاً کوچک رفتار شبه‌فلزی از خود نشان می‌دهد. مگنتیت کاربردهای بالقوه‌ای در بیوپزشکی/پزشکی، مهندسی محیط زیست، میکروسیال و میدان‌های مکانیکی-الکتریکی و... دارد [۱و۲]. گرافن نام یکی از

نانوذرات مغناطیسی به خاطر ویژگی‌های یکتایشان هم از دیدگاه آزمایشگاهی و صنعتی موضوع مورد علاقه‌ی پژوهشگران و دانشمندان است. در بین انواع نانوذرات مغناطیسی، به ویژه مگنتیت به دلیل عدم سمیت و زیست سازگاری بالا بیشترین کاربردها را در زمینه‌های مختلف داشته‌اند. مگنتیت مغناطیس دائم از خود نشان

بخش تجربی

مواد و دستگاه ها:

اکسید گرافن (GO)، کلرید فریک ۶ آبه، کلرید فرس ۴ آبه، هیدروکسید سدیم، آب دو بار تقطیر، اسپاتول، آون، ترازوی دیجیتال، آهنربا، دستگاه همزن، کپسول نیتروژن و دستگاه های XRD، VSM و FTIR مواد و تجهیزات استفاده شده در این کار تحقیقاتی بودند.

سنتز نانوذرات مغناطیسی Fe₃O₄:

نانوذرات مغناطیسی مگنتیت با استفاده از روش همرسوبی تهیه شدند. ابتدا ۲ گرم از FeCl₃.6H₂O و ۱ گرم از FeCl₂.4H₂O مخلوط شده و در ۱۰ میلی لیتر آب دو بار تقطیر حل شدند. محلول حاصل در دمای اتاق با استفاده از یک همزن مغناطیسی کاملاً زده شد. سپس ۱۰ میلی لیتر از سدیم هیدروکسید به صورت قطره قطره و تحت عبور گاز نیتروژن به محلول حاصل اضافه شد. بلافاصله رسوب سیاه رنگی در انتهای ظرف تشکیل شد که نشان دهنده تشکیل نانوذرات مغناطیسی آهن بود. بعد از ۱۵ دقیقه همزدن با قرار دادن آهنربا زیر ظرف واکنش رسوب حاصل جمع آوری شد و سه بار با آب مقطر شست و شو داده شد.

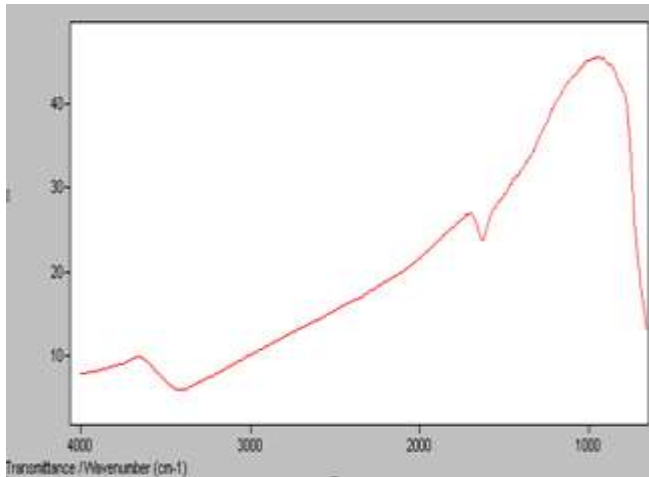
سنتز نانوکامپوزیت Fe₃O₄@GO:

ابتدا ۰/۰۵ گرم گرافن اکسید در ۱۰ میلی لیتر آب دوبار تقطیر حل شد و به مدت ۳۰ دقیقه تحت اولتراسونیک قرار گرفت. سپس یک محلول تشکیل شده از ۰/۲ گرم FeCl₃.6H₂O و ۰/۱ گرم FeCl₂.4H₂O به گرافن اکسید اضافه شد و به مدت ۳۰ دقیقه همزده شدند. سپس ۱۰ میلی لیتر سدیم هیدروکسید قطره قطره و تحت عبور گاز نیتروژن به محلول فوق اضافه شد و به مدت ۳۰ دقیقه همزده شد. رسوب حاصل با یک آهنربا از محلول جدا شده و سه بار با آب مقطر شست و شو داده شد.

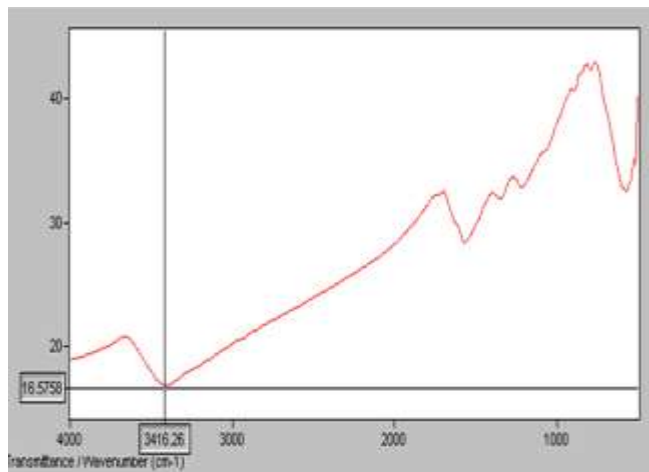
نتایج ساختاری و مغناطیسی

آلوتروپ های کربن است که دارای ساختار بلوری دو بعدی لانه زنبوری است و در آن هر اتم کربن به کمک سه الکترون ظرفیت خود، با سه پیوند sp² به سه اتم کربن دیگر متصل شده است. یک الکترون ظرفیت باقی مانده نیز بر روی کل صفحه گرافن و بین تمام اتم ها به اشتراک گذاشته شده و الکترون آزاد است. گرافن به علت داشتن خواص فوق العاده در رسانندگی گرمایی، رسانندگی الکتریکی، چگالی بالا، رسانندگی اپتیکی، خواص مکانیکی و تحرک پذیری حامل های بار به ماده ای منحصر به فرد تبدیل شده است. این سامانه جدید حالت جامد به واسطه این خواص فوق العاده به عنوان کاندید بسیار مناسب برای جایگزینی سیلیکان در نسل بعدی قطعه های فوتونیک و الکترونیک در نظر گرفته شده است و از این رو توجه کم سابقه ای را در تحقیقات بنیادی و کاربردی به خود جلب کرده است. ورقه های گرافن خالص با وجود ویژگی های عالی که دارد، کاربرد بسیار محدودی از آنها دیده می شود بنابراین جذابیت نانوکامپوزیت های گرافنی برای محققان بسیار افزایش می یابد. گرافن و نانوکامپوزیت های پایه گرافنی عامل دار شده با فلز، اکسیدهای فلزی، کالکوزن ها، کوانتوم دات و ... خواص شیمیایی، نوری، الکترونی و مکانیکی منحصر به فرد دارند که می توانند بنیان و اساسی برای گسترش محدوده مواد نانو ساختار باشند. گرافن آبریز است که مانع کارایی آن در آب می شود. برای بهبود خاصیت انحلال آن، گرافن می تواند از طریق اکسیداسیون به اکسید گرافن تبدیل شود. صفحات اکسید گرافن به خاطر گروه های عاملی اکسیژن دار (هیدروکسیل، کربوکسیل، اپوکسی، کربونیل) موجود روی سطح خود به راحتی می تواند با نانوذرات دیگر ترکیب شده و کامپوزیت های پایه گرافنی را تشکیل دهد [۳ و ۴]. در سال های اخیر ترکیب مگنتیت و گرافن و تشکیل کامپوزیت به علت ویژگی های جدید و یا افزایش یافته ای که به واسطه ی هردو جزء به تنهایی بدست نمی آید یک موضوع نوید بخش برای آینده است. در این تحقیق نانوذرات مگنتیت و نانوکامپوزیت گرافن اکسید/مگنتیت به روش همرسوبی تهیه شدند و خواص مغناطیسی و ساختاری نمونه ها با VSM، FTIR و XRD بررسی شده است.

Fe-O مربوط باشد که نشان دهنده‌ی حضور نانوذرات مگنتیت است. ظهور قله‌های جدید نشان می‌دهد که نانوکامپوزیت به طور موفقیت‌آمیز سنتز شده است.



(a)

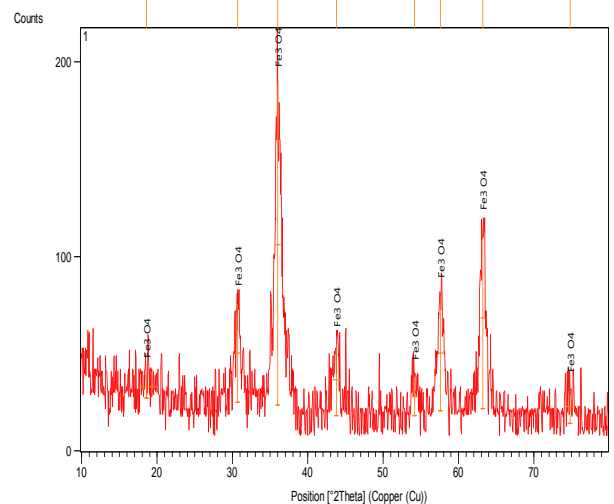


(b)

شکل ۲: طیف FTIR نمونه‌ها: مگنتیت (a) و گرافن اکسید/مگنتیت (b)

منحنی‌های هیستریزس مغناطیسی مگنتیت و نانوکامپوزیت گرافن اکسید/مگنتیت در دمای اتاق با استفاده از VSM اندازه‌گیری شدند. همانطور که در شکل ۳ نشان داده شده است منحنی‌های هیستریزس نمونه‌ها منحنی‌های S شکل هستند و تقریباً از مبدأ عبور می‌کنند و این نشان می‌دهد که نمونه‌ها دارای میدان وادارندگی و مغناطش پسماند ناچیز هستند. این نتایج نشان دهنده‌ی رفتار ابرپارامغناطیسی ذرات سنتز شده است. مقدار مغناطش اشباع مگنتیت و نانوکامپوزیت به ترتیب 11.85 emu/g و 57 emu/g

ساختار و ترکیب نمونه‌های آماده شده با استفاده از الگوهای پراش اشعه ایکس (XRD) مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده است الگوی XRD برای نانوذرات مگنتیت هشت قله مشخص در 18.5 ، 30.6 ، 35.9 ، 43.7 ، 54.1 ، 57.5 ، 63.2 و 74.7 درجه مربوط به بازتاب صفحات بلوری (111) ، (220) ، (311) ، (400) ، (422) ، (511) ، (440) ، (533) مطابق با داده‌های استاندارد XRD برای بلورهای اسپینلی مکعبی مرکز وجهی مگنتیت را نشان می‌دهد. قله‌های پراش پهن نشان می‌دهد که اندازه نانوذرات کوچک است. میانگین اندازه‌ی بلوری از FWHM قله (311) با استفاده از فرمول دبای شرر محاسبه شد و مقدار آن 14 نانومتر است.



شکل ۱: الگوی XRD نانوذرات مگنتیت

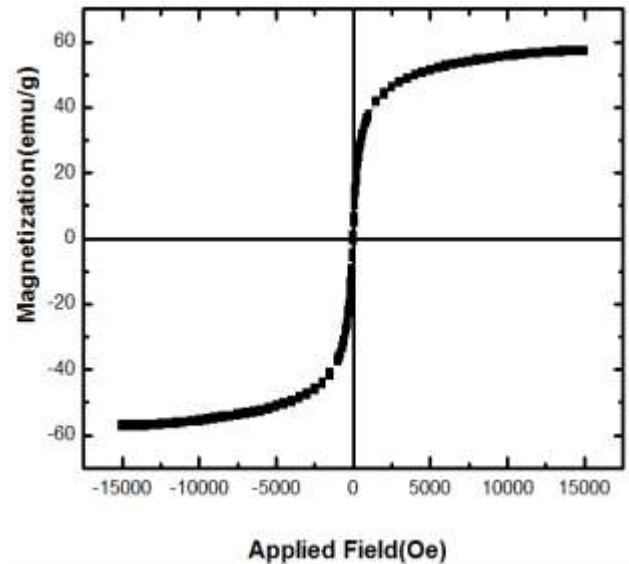
به منظور بررسی ترکیب مگنتیت و گرافن اکسید، طیف‌های FTIR از نمونه‌ها جمع‌آوری شد. همانطور که در شکل ۲ نشان داده شده است. در طیف FTIR مگنتیت قله جذبی ظاهر شده در 570 به ارتعاش کششی باند Fe-O مربوط می‌باشد. همچنین قله جذبی در 3416 در هر دو طیف به ارتعاش کششی باند OH- مربوط می‌باشد. باند در 1658 به دلیل ارتعاش زاویه O-H است. برای طیف FTIR نانوکامپوزیت گرافن اکسید/مگنتیت قله‌های در حدود 1554 و 1211 به ترتیب به گروه‌های COOH و ارتعاش کششی C-O اپوکسی مربوط می‌باشد. قله آشکار در حدود 570 می‌تواند به باند

نانوکامپوزیت در مقایسه با مگنتیت را نشان داد که دلایل مختلف از جمله وجود ورقه‌های غیر مغناطیسی گرافن اکسید می‌تواند داشته باشد.

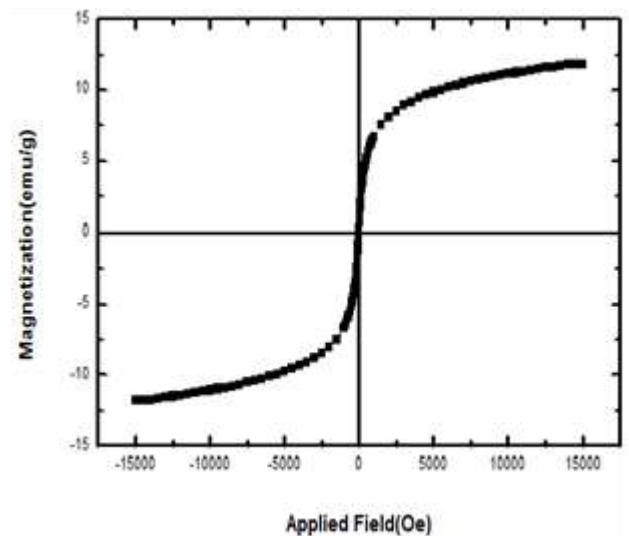
است. کاهش در مقدار مغناطش اشباع می‌تواند به وجود ورقه‌های غیر مغناطیسی GO، ناخالصی‌ها بر روی سطح نانوذرات مگنتیت و همچنین مقدار بارگذاری کمتر مگنتیت مرتبط باشد.

منابع

- [۱] Wu, Wei, Zhaohui Wu, Taekyung Yu, Changzhong Jiang, and Woo-Sik Kim. "Recent progress on magnetic iron oxide nanoparticles: synthesis, surface functional strategies and biomedical applications." *Science and technology of advanced materials* 16, no. 2 (2015): 023501.
- [۲] Yadollahpour, Ali. "Magnetic nanoparticles in medicine: a review of Synthesis methods and important characteristics." *Oriental Journal of Chemistry* 31, no. Special Issue 1 (2015): 271-277.
- [۳] Singh, Virendra, Daeha Joung, Lei Zhai, Soumen Das, Saiful I. Khondaker, and Sudipta Seal. "Graphene based materials: past, present and future." *Progress in materials science* 56, no. 8 (2011): 1178-1271.
- [۴] Fu, Ruimin, and Mingfu Zhu. "Synthesis and characterization of structure of Fe₃O₄@ graphene oxide nanocomposites." *Adv. Comp. Lett* 25 (2016): 143-146.



(a)



(b)

شکل ۳: منحنی‌های مغناطیسی مگنتیت (a) و گرافن اکسید/مگنتیت (b)

نتیجه گیری

آنالیز ساختاری پراش اشعه ایکس تشکیل فاز اسپینلی و بلورینگی نانوذرات را تأیید کرد. همچنین نتایج FTIR به خوبی نشان داد که نانوذرات مگنتیت و نانوکامپوزیت گرافن اکسید/مگنتیت به طور موفقیت آمیز سنتز شدند. آنالیز مغناطیسی کاهش در مغناطش اشباع

آشوب کوانتومی در زنجیره XXZ اسپین $1/2$ - در حضور میدان مغناطیسی عرضی

سپیده مشفق^۱؛ عاطفه عاشوری^۱؛ سعید مهدوی فر^۱

^۱گروه فیزیک دانشگاه گیلان، رشت

چکیده

مدل زنجیره یک بعدی ناهمسانگرد XXZ اسپین $1/2$ - انتگرال پذیر بوده و توسط حدس بته قابل حل دقیق است. انتگرال پذیری در این مدل با اعمال یک میدان عرضی شکسته می شود و دیگر حل دقیق ندارد. یک مقدار استثنایی از میدان عرضی وجود دارد که فاکتور میدان h_f نامیده می شود، جایی که نوسانات کوانتومی از میدان عرضی خنثی می شوند و حالت های پایه با حل دقیق بدست می آیند. ما در این مقاله اثر میدان عرضی را برای گذار انتگرال پذیر به آشوب در مدل زنجیره XXZ اسپین $1/2$ بررسی می کنیم. با اجرای روش قطری سازی دقیق، مشخصه های آشوب کوانتومی، از قبیل توزیع فضایی ترازهای انرژی و ساختار ویژه حالت ها را در هامیلتونی با اندازه متناهی از زنجیره بررسی می نماییم. به محض اعمال میدان عرضی در سیستم، تقارن شکسته شده و حل دقیق امکان پذیر نمی باشد و سیستم آشوبناک می شود. در ناحیه $h < h_f$ سیستم آشوبناک می ماند، و در نقطه فاکتور میدان h_f گذار از آشوب به انتگرال پذیری صورت می گیرد. نتایج تعداد مولفه های اصلی، این گذار را تایید می نماید.

Quantum chaos in a spin-1/2 transverse-field XXZ chain

Moshfegh, Sepideh¹; Ashouri, Atefeh¹; MahdaviFar, Saeed¹

¹ Department of Physics, University of Guilan

Abstract

One-dimensional (1D) spin-1/2 XXZ model is integrable and can be exactly solved by the Bethe ansatz. The exact integrability is lost when the symmetry-breaking transverse magnetic field (TF) is applied. There is an exceptional value of the TF called factorized field, h_f , where the quantum fluctuations are compensated by the TF and the ground state will be obtained exactly. Here, we study the effect of a TF on the integrable to chaotic transition in the XXZ chain. We use the numerical full diagonalization method and calculate the eigenvalues and eigenvectors of the Hamiltonian in finite size chains. As soon as the TF is applied the spectrum exhibits repulsion of the energy levels as a main signature of quantum chaos. The system remains chaotic in the region $h < h_f$ and undergoes a transition into the non-chaotic region at the factorized field. Results of the number of principal components confirm the mentioned transition.

PACS No.

اعمال شود حل دقیق امکان پذیر نیست. نظریه آشوب و انتگرال پذیری در سیستم های اسپین کوانتومی در چند دهه گذشته توجه محققان زیادی را به خود جلب کرده است [3-4]. یکی از مهم ترین نشانه های آشوب در سیستم های کوانتومی در توزیع فاصله میان ترازهای انرژی مجاور می باشد. توزیع ترازهای انرژی از قانون جهانی پیروی می نماید [5]، که بسته به مشخصه انتگرال پذیری یا آشوبناکی سیستم، از توزیع پواسونی، $P_p(s) = \exp(-s)$ ، در سیستم های کاملاً انتگرال پذیر [6]، به

مقدمه

یک زمینه مناسب برای مطالعه گذارهای فاز کوانتومی دمای صفر، سیستم های اسپینی در میدان های مغناطیسی خارجی هستند. اثر میدان مغناطیسی روی زنجیره پاد فرو مغناطیس از نقطه نظر دیدگاه نظری بسیار جالب می باشد. ساده ترین مدل پاد فرو مغناطیس ناهمسانگرد یک بعدی مدل XXZ اسپین $1/2$ است. این مدل در میدان طولی به طور کامل بررسی شده است [1-2]، که به طور دقیق با روش حدس بته حل می شود، به طوری که وقتی میدان عرضی

توزیع ویگنری، $P_{WD}(s) = (ps/2) \exp(-ps^2/4)$ ، در سیستم‌های کاملاً آشوبناک تغییر می‌یابد. همچنین، در این مقاله برای شناسایی ظهور آشوب کوانتومی، ساختار ویژه حالت‌ها را نیز بررسی کردیم. تعداد مولفه‌های اصلی، NPC، یکی دیگر از روش‌هایی است که برای تشخیص رفتار آشوبناکی سیستم به کار می‌رود [7]. در سیستم‌های انتگرال‌پذیر، نوسانات بزرگی در NPC مشاهده می‌شود، در حالیکه در سیستم‌های آشوبناک، به تابعی آرام بر حسب انرژی تبدیل می‌شود.

مدل

همایلتونی مدل XXZ ناهمسانگرد در حضور میدان مغناطیسی عرضی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = J \sum_{i=1}^L (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z) + h \sum_{i=1}^L S_i^z \quad (1)$$

که در آن $S_n^{x,y,z}$ عملگرهای اسپین-۱/۲ در سایت n -ام می‌باشند. $J > 0$ معرف برهمکنش پادفرومغناطیس Δ ، پارامتر ناهمسانگردی و h میدان مغناطیسی عرضی می‌باشد.

زنجیره اسپینی XXZ، ساده‌ترین مدل حل‌پذیر دقیق می‌باشد که توزیع فضایی ترازهای انرژی آن از رفتار پواسونی پیروی می‌نماید. در غیاب میدان مغناطیسی خارجی ($h=0$)

در رژیم شبه-آیزینگ یعنی $\Delta > 1$ ، حالت پایه انتگرال‌پذیر بوده و دارای حل دقیق است [8]. در رژیم $-1 < \Delta < 1$ حالت پایه فوق در فاز سیال - اسپینی است و هیچ گاف انرژی در طیف سیستم وجود ندارد. در ناحیه $\Delta < -1$ حالت پایه این مدل در فاز فرومغناطیس است که در طیف انرژی آن گاف وجود دارد [6]. با اعمال میدان عرضی، سیستم حل دقیق ندارد و انتگرال‌پذیر نمی‌باشد.

نتایج محاسبات عددی

به عنوان انتخاب اول، همایلتونی معادله (1) را در غیاب میدان عرضی در نظر می‌گیریم $h=0$ ، که انتگرال‌پذیر بوده و بر اساس حدس بته قابل حل است. برای این زنجیره که با همایلتونی فوق توصیف می‌شود، اسپین کل:

$$S^z = \sum_{n=1}^L S_n^z$$

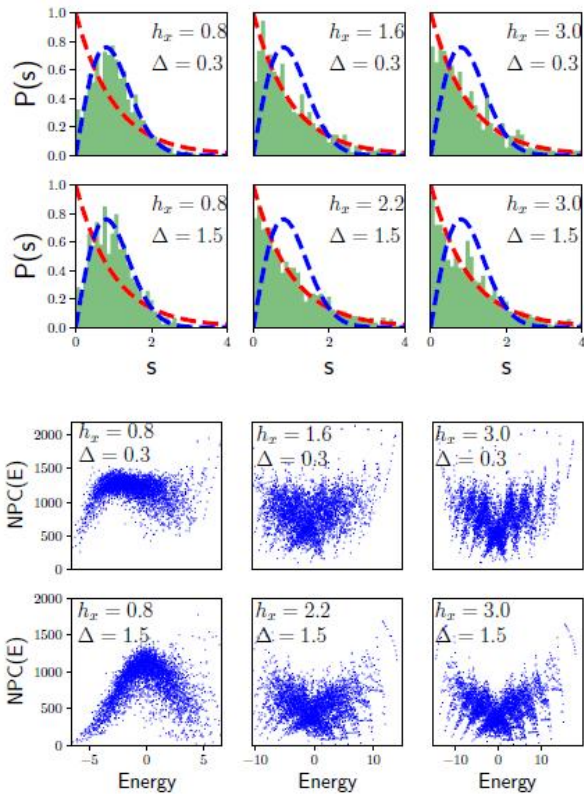
در جهت Z پایسته می‌باشد. $[H, S^z] = 0$ که یک تقارن سیستم را نشان می‌دهد به این معنی که تعداد کل برانگیختگیها در سیستم ثابت می‌ماند و همایلتونی تنها می‌تواند بر انگیختگی را در سیستم پیش ببرد. زیر فضای سیستم $S^z = 1$ است. بهترین بردارهای پایه ای که برای این سیستم در نظر گرفته می‌شود آرایه ای از اسپینهای بالا و پایین در جهت محور Z می‌باشد که بردارهای پایه تک سائیتی نامیده می‌شوند.

اسپین کل را بر روی رفتار توزیع فضایی و توزیع NPC متناظر، تحت شرایط ذکر شده، بررسی کردیم.

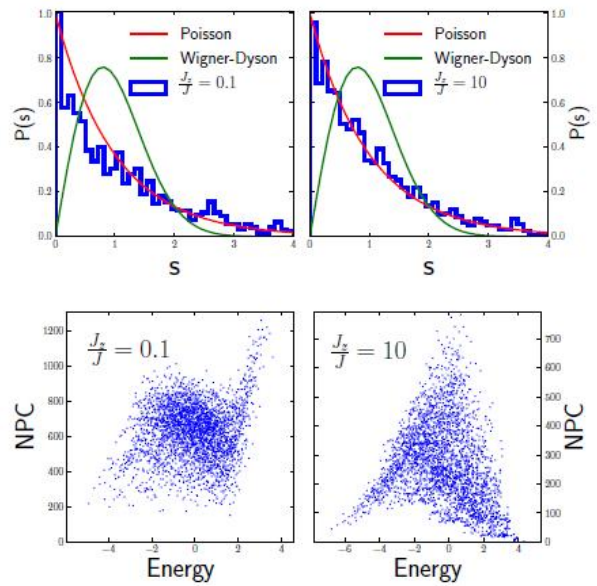
همانطوری که از رفتار توزیع فضایی $P(s)$ ، مشاهده می‌شود برای مقادیر مختلف پارامتر ناهمسانگردی، توزیع فضایی رفتاری پواسونی دارد (نمودارهای بالا از شکل 1)،

در نمودارهای پایین از شکل 1، رفتار توزیع NPC را بر حسب انرژی در پایه‌های تک سائیتی بررسی کردیم. همانطور که از شکل دیده می‌شود دارای نوسانات زیادی هستند. ما طیف انرژی را برای زنجیر با طولهای مختلف و برای پارامتر ناهمسانگردی مختلف Δ انجام دادیم، مشاهده می‌شود که سیستم رفتاری انتگرال‌پذیر دارد.

در نمودارهای پایین از شکل 2، رفتار توزیع NPC را بر حسب انرژی در پایه‌های تک سایتی بررسی کردیم. در گذار از آشوب به انتگرال پذیری، نوسانات بیشتری مشاهده می‌کنیم و همچنین میزان غیرجایگزیدگی به طور قابل ملاحظه‌ای در حوزه انتگرال پذیری کاهش می‌یابد. در واقع زنجیر XXZ اسپین 1/2 در نقطه فاکتور میدان، انتگرال پذیر می‌شود و گذار از آشوب به انتگرال پذیری صورت می‌گیرد. همانطور که از شکل مشاهده می‌شود برای مقادیر $h_f < h$ سیستم رفتار پواسونی از خود نشان می‌دهد و انتگرال پذیر می‌شود.



شکل 2: نمودارهای بالا و پایینی، توزیع فضایی ترازهای انرژی $P(s)$ و تعداد مولفه‌های اصلی $NPC(E)$ به طور متناظر برای هامیلتونین معادله (1) برای زنجیره‌ای به طول $L=14$ و برای مقادیر مختلف میدان عرضی و پارامتر ناهمسانگردی رسم شده است. در هر دو نمودار توزیع فضایی، نمودارهای با خط قرمز و سبز متناظر با منحنی‌های تئوری و نمودار آبی مربوط به نتایج عددی می‌باشند.



شکل 1: نمودارهای بالا و پایین، توزیع فضایی ترازهای انرژی $P(s)$ و تعداد مولفه‌های اصلی $NPC(E)$ به طور متناظر برای هامیلتونین معادله (1) برای زنجیره‌ای به طول $L=14$. در غیاب میدان مغناطیسی ستون سمت چپ 0.5 $\Delta=$ و ستون سمت راست 1.5 $\Delta=$ ، ویژه مقادیر با پارامتر جدا شده اند. اسپین در جهت Z مثبت قرار دارند. در هر دو نمودار توزیع فضایی، نمودارهای با خط قرمز و سبز متناظر با منحنی‌های تئوری و نمودار آبی مربوط به نتایج عددی می‌باشند.

در حضور میدان عرضی

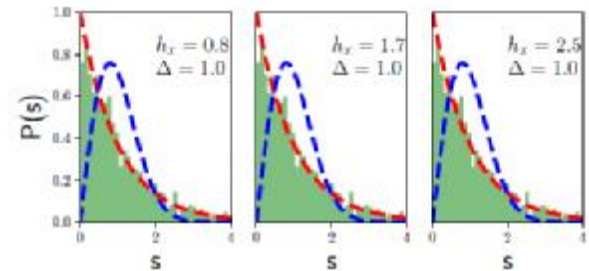
به عنوان انتخاب دوم در ادامه، اثر مقادیر مختلف میدان عرضی h و پارامتر ناهمسانگردی Δ را در شکست انتگرال پذیری بررسی می‌نماییم. توزیع فضایی ترازهای انرژی $P(s)$ و تعداد مولفه‌های اصلی $NPC(E)$ در شکل (2) برای دو مقدار پارامتر ناهمسانگردی $\Delta = 0/3$ و $\Delta = 1/5$ که فاکتور میدان عرضی به ترتیب $h_f = \sqrt{2.5}$ و $h_f = \sqrt{5}$ می‌باشند، رسم شده است.

همانطوری که در شکل مشاهده می‌شود برای مقادیر $h_f < h$ رفتار توزیع فضایی $P(s)$ ، نمودارهای بالا، ترازهای انرژی شروع به دفع همدیگر می‌نمایند، تا اینکه توزیعی شبیه به توزیع ویگنر-دایسون حاصل می‌شود،

[۷] V. Zelevinsky, B. A. Brown, N. Frazier, and M. Horoi, "The nuclear shell model as a testing ground for manybody quantum chaos," Phys. Rep. 276, 85-174 (1996).

[8] Takahashi, M., Thermodynamics of one-dimensional solvable models. Cambridge University Press (2005). 1] C. N. Yang and C. P. Yang, Phys. Rev. B. 150, 321 (1966).

به عنوان آخرین انتخاب، سیستم را برای پارامتر ناهمسانگرد $\Delta=1$ مورد بررسی قرار دادیم که برای همه مقادیر میدان عرضی مدل انتگرال پذیر بوده و دارای حل دقیق می باشد.



شکل 3: نمودارهای توزیع فضایی ترازهای انرژی $P(s)$ به طور متناظر برای هامیلتونین معادله (1) برای زنجیره‌ای به طول $L=14$ و برای مقادیر 8 اسپین در جهت Z مثبت و برای مقادیر مختلف میدان عرضی و پارامتر ناهمسانگردی با مقدار ثابت $\Delta=1$. در هر دو نمودار توزیع فضایی، نمودارهای با خط قرمز و سبز متناظر با منحنی‌های تئوری و نمودار آبی مربوط به نتایج عددی می باشد.

نتیجه گیری

با استفاده از تکنیک قطری سازی دقیق، زنجیره اسپینی XXZ با اسپین $1/2$ در حضور میدان عرضی مورد بررسی قرار گرفت. هدف اصلی، بررسی نقاط گذار از آشوب به انتگرال پذیری در حضور میدان عرضی و پارامتر ناهمسانگردی Δ بود. نشان دادیم که بدون در نظر گرفتن میدان عرضی سیستم انتگرال پذیر بوده و دارای حل دقیق می باشد. با اعمال یک میدان عرضی سیستم آشوب ناک شده و دیگر حل دقیق ندارد. در ناحیه $h < hf$ سیستم آشوبناک می ماند، و در نقطه فاکتور میدان hf گذار از آشوب به انتگرال پذیری صورت می گیرد.

مرجع ها

- [1] C. N. Yang and C. P. Yang, Phys. Rev. B. 150, 321 (1966).
- [2] C. N. Yang and C. P. Yang, Phys. Rev. B. 150, 327 (1966).
- [3] L. F. Santos, G. Rigolin, and C. O. Escobar, Phys. Rev. A **69**, 42304 (2004).
- [4] L. F. Santos, Phys. Rev. A. **67**, 062306 (2003).
- [5] NATO Les Houches Lecture Notes 1981, Chaotic Behavior of Deterministic Systems, eds. G. Ioss, R. Helleman and R. Stora (North-Holland, Amsterdam, 1983)
- [6] L. F. Santos, F. Borgonovi, and F. M. Izrailev, Phys. Rev. Lett. **108**, 094102 (2012).

تاثیر زمان آسیاب کاری پر انرژی تر بر ویژگی های مغناطیسی نانوذرات هماتیت

مظفری، مرتضی^۱؛ شاتوتی، سارا^۱

^۱گروه فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان

چکیده

در این پژوهش نانوذرات هماتیت با آسیاب کاری پر انرژی تر هماتیت کپه ای که یک محصول فرعی از مجتمع فولاد مبارکه بود تهیه شد. آسیاب کاری با یک آسیاب اسپکس مدل 8000 D در زمان های آسیاب کاری گوناگون از ۲ تا ۱۰ ساعت و با نسبت جرمی گلوله به پودر ۱۰ انجام شد. برخی از ویژگی های فیزیکی نانوذرات به دست آمده با روش های پراش سنجی پرتو ایکس (XRD) و مغناطش سنجی نمونه لرزشی (VSM) اندازه گیری و تغییرات آنها بررسی شد. هم چنین دمای کوری نمونه ها با یک دستگاه ترازوی فاراده در یک میدان ضعیف اندازه گیری شد. نتایج پراش سنجی پرتو ایکس نمونه ی ده ساعت آسیاب کاری شده نشان می دهد که افزون بر فاز هماتیت، یک فاز اسپینلی به هنگام آسیاب کاری تشکیل شده است هم چنین میانگین اندازه ی بلورک ها با روش شرر برآورد و در بازه ی ۲۵-۶۵ نانومتر به دست آمد. اندازه گیری های مغناطیسی نشان می دهد که با افزایش زمان آسیاب کاری تا ده ساعت یک مغناطش اشباعی به بزرگی ۹۰ emu/g به دست آمده است. این مغناطش بزرگ به حضور فاز اسپینلی و توزیع کاتیونی متفاوت هماتیت نسبت داده شد.

The Effect of Wet High Energy Milling Time on the Magnetic Properties of Hematite Nanoparticles

Mozaffari, Morteza¹; Shatooti, Sarah¹

¹ Department of Physics, Isfahan University, Isfahan

Abstract

In this work hematite nanoparticles were prepared via wet high energy milling of a bulk hematite, which is a byproduct of Mobarake Steel Complex. Milling was carried out by a SPEX 8000D mill at different milling times from 2 to 10h, using a ball to powder mass ratio 10. Structural and physical properties of the nanoparticles were measured by X-ray diffractometer and vibrating sample magnetometer (VSM), respectively, and their changes were investigated. Also Curie temperatures of the samples in a weak magnetic field were measured by a Faraday balance. The results of XRD show that in addition to hematite a spinel phase was formed after 10 h milling. Mean crystallite sizes of the milled samples estimated by Scherrer's formula, which are in the range of 25-65 nm. Magnetic measurements showed that by increasing milling time up to 10 h a saturation magnetization of as high as 90emu/g was achieved. This high magnetization has been assigned to presence of the spinel phase and different cation distribution of hematite.

PACS No. ۷۵

دست یافت [۲]. هماتیت ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) یکی از اکسیدهای نامغناطیسی آهن است که ساختار بلوری رمبوهدرال دارد و تنها از کاتیون های Fe^{3+} تشکیل شده و از دیدترمودینامیکی یک ترکیب پایدار است [۳]. هماتیت با روش های گوناگونی همانند هیدروترمال [۴]، هم رسوبی [۵] و آسیاب کاری [۶] تهیه می شود. هماتیت با گرما دادن مگماتیت در دماهای بالاتر از 300°C

مقدمه

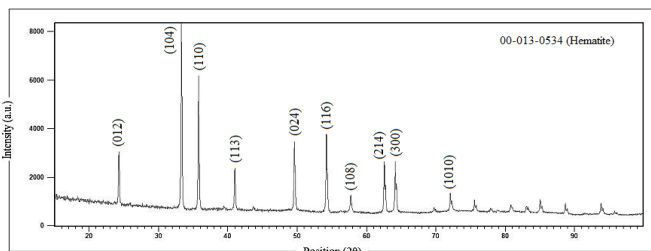
آسیاب کاری مکانیکی، آلیاژسازی مکانیکی و فرآیند مکانوشیمیایی، فرآیندهای آسیاب کاری پر انرژی هستند که مواد اولیه به گونه ای مکرر شکسته شده و دوباره جوش سرد می خورند تا محصول مورد نظر به دست آید [۱]. با این فرآیندها می توان افزون بر آلیاژها، به ترکیب های گوناگون دیگر همانند اکسیدها

و/یا آسیاب کاری تهیه می‌شود [۷، ۸]. هماتیت در دماهای کم‌تر از 263K یک پادفرومغناطیس و در بازه‌ی دمایی $263\text{K} < T < 645\text{K}$ یک فرومغناطیس ضعیف است. نیل پیشنهاد کرد که کاستی‌ها و/یا ناخالصی مگنتایت ممکن است به این ویژگی ضعیف فرومغناطیسی و مغناطش خودبه‌خودی ضعیف بینجامد. لی پیشنهاد کرد که گشتاورهای جبران نشده در دیواره‌های حوزهی مغناطیسی که حوزهای پادفرومغناطیس را از یکدیگر جدا می‌کنند، ممکن است آن مغناطش خودبه‌خودی را ایجاد کرده باشند [۹]. در این پژوهش نانوذرات هماتیت با آسیاب کاری پارانرژی تر هماتیت کپه-ای محصولی فرعی از مجتمع فولاد مبارکه اصفهان در زمان‌های آسیاب کاری گوناگون تهیه و ویژگی‌های فیزیکی آن‌ها بررسی شده است.

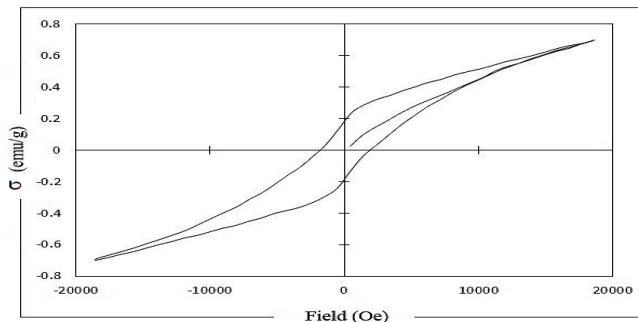
روش تهیه

نانوذرات هماتیت با آسیاب کاری پارانرژی تر هماتیت کپه‌ای که محصول فرعی از مجتمع فولاد مبارکه اصفهان بود تهیه شد. شکل ۱ الگوی پراش پرتو ایکس پودر هماتیت اولیه را نشان می‌دهد. همان‌گونه که دیده می‌شود همهی قله‌های پراش با فاز هماتیت ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) بر پایه‌ی کارت استاندارد ۰۰-۰۱۳-۰۵۳۴ هم‌خوانی دارد. شکل ۲ منحنی پسماند هماتیت اولیه را نشان می‌دهد. مغناطش تا بیشینه میدان کاربستی $18\text{kOe} \pm$ به اشباع نرسیده است و مغناطش ناچیزی (0.3 emu/g) دارد که رفتار فرومغناطیس ضعیف هماتیت در دمای اتاق را تایید می‌کند.

آسیاب کاری با یک دستگاه آسیاب پارانرژی اسپکس مدل 8000 D انجام شد. هر بار $3/8$ از هماتیت همراه با 38g گلوله-ی فولادی سخت شده با اندازه‌های گوناگون در یک ظرف فولادی از همان جنس با حجم 80ml ریخته شد به گونه‌ای که نسبت جرمی گلوله به پودر 10 شود. هم‌چنین 20ml آب دو بار تقطیر به هماتیت افزوده شد و برای مدت زمان‌های 2 ، 4 ، 6 ، 8 و 10 ساعت آسیاب کاری تر شدند. رنگ نمونه‌ها با افزایش زمان آسیاب کاری از قرمز به قهوه‌ای و پس از آن به مشکی تغییر کرد. برای بازیابی فاز هماتیت، نمونه‌های آسیاب کاری شده در دمای 200°C برای دو ساعت بازپخت شدند. الگوهای XRD نمونه‌ها با یک دستگاه پراش سنج پرتو ایکس (X'Pert Pro MPD) با لامپ مسی Cu-



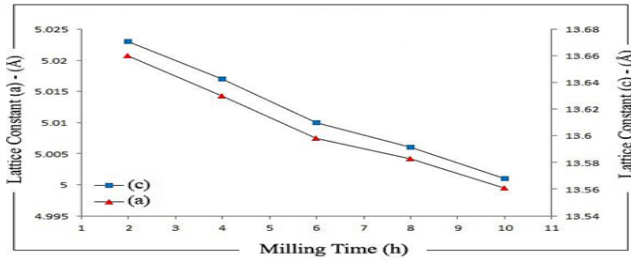
شکل ۱: الگوی XRD پودر هماتیت اولیه: قله‌ها بر پایه‌ی کارت استاندارد ۰۰-۰۱۳-۰۵۳۴ برچسب زده شده‌اند.



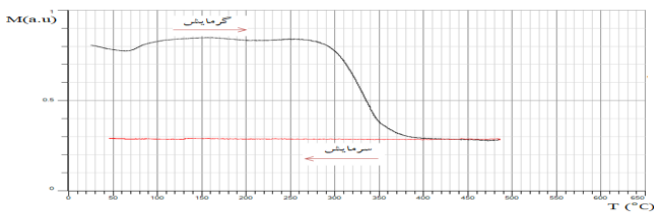
شکل ۲: منحنی پسماند پودر هماتیت اولیه

بحث و نتیجه‌گیری

شکل ۳ (الف و ب) به ترتیب الگوهای پراش نمونه‌های آسیاب کاری و بازپخت شده در زمان‌های 2 ، 4 ، 6 ، 8 و 10 ساعت را نشان می‌دهند. همان‌گونه که دیده می‌شود افزون بر قله‌های پراش هماتیت، قله‌های دیگری پدیدار شده که با فاز اسپینل هم‌خوانی دارند. این پدیده پیامدی از واکنش هماتیت با آب به‌هنگام آسیاب کاری است که به تشکیل فاز اسپینل انجامیده است. اگر چه تشخیص آن که این فاز مگنتایت و/یا مگهماتیت دشوار است، ولی با توجه به رنگ مشکی نمونه‌ها فاز مگنتایت محتمل تر است. بنابراین کارت استاندارد (مگنتایت، ۰۱-۰۸۹-۱۳۳۹) انتخاب شد.



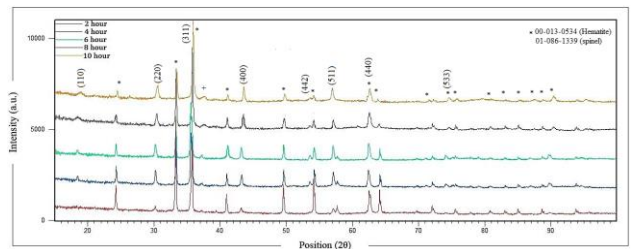
شکل ۵: تغییر ثابت‌های شبکه‌ی هماتیت (c,a) را برحسب زمان آسیاب‌کاری شده بر حسب زمان آسیاب‌کاری به‌هنگام گرمایش از دمای اتاق تا 590°C و سرمایش پس از آن را نشان می‌دهد. همان‌گونه که دیده می‌شود دمای کوری نمونه $10^{\circ}\text{C} \pm 4.0$ است و به‌هنگام سرد شدن مغناطش نمونه بر نمی‌گردد.



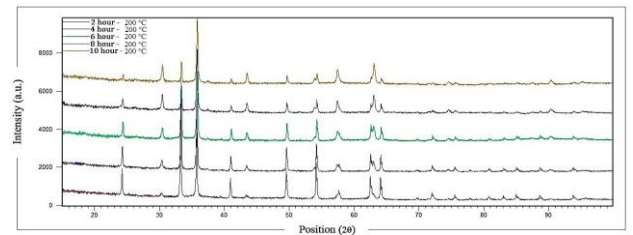
شکل ۶: منحنی مغناطش-دما برای نمونه‌ی ۱۰ ساعت آسیاب‌کاری شده در گرمایش و سرمایش

شکل (۷ الف) منحنی‌های پسماند نمونه‌های آسیاب‌کاری شده در زمان‌های ۲، ۴، ۶، ۸ و ۱۰ ساعت و شکل (۷ ب) همان منحنی‌ها پس از بازپخت در دمای 200°C را نشان می‌دهند. همان‌گونه که دیده می‌شود، مغناطش نمونه‌های آسیاب‌کاری شده نسبت به مغناطش هماتیت اولیه بسیار بالا است و در بیشینه میدان کاربستی ($18 \text{ kOe} \pm$) به اشباع رسیده‌اند. این رفتار پیامدی از حضور فاز اسپینلی و/یا توزیع متفاوت کاتیونی در نانوذرات هماتیت نسبت به نمونه‌ی کپه‌ای است. از آن‌جا که درصد وزنی فاز اسپینل ناچیز است، این مغناطش بزرگ بیشتر پیامدی از توزیع متفاوت کاتیونی در نانوذرات هماتیت است. تغییرات مغناطش اشباعی σ_s و نیروی وادارندگی H_C نمونه‌های آسیاب‌کاری و بازپخت شده برحسب زمان آسیاب‌کاری به‌ترتیب در شکل ۸ (الف و ب) آمده است. همان‌گونه که دیده می‌شود با افزایش زمان آسیاب‌کاری در حالی که مغناطش اشباعی افزایش یافته، نیروی وادارندگی کاهش یافته است که پیامدی از تک حوزه بودن نمونه‌ها است [۱۴]. به عبارت دیگر، برای نمونه‌های بازپخت شده نیروی وادارندگی نخست تا ۶ ساعت آسیاب‌کاری، افزایش و پس از آن کاهش یافته است که نشان می‌دهد میانگین اندازه‌ی بلورک‌های آن پیرامون اندازه‌ی

الگوهای پراش XRD قله‌های پهن با شدت پایین دارند که نشانه‌ی ریز بودن و کرنیده بودن نانوذرات است [۱۰]. شکل ۴ تغییر میانگین اندازه‌ی بلورک‌های هماتیت و فاز اسپینل را بر حسب زمان آسیاب‌کاری نشان می‌دهد. همان‌گونه که دیده می‌شود، میانگین اندازه‌ی بلورک‌های هر دو فاز با افزایش زمان آسیاب‌کاری کاهش می‌یابد، که پیامدی از تغییر شکل موم‌سان (پلاستیک) به-هنگام آسیاب‌کاری و به‌دنبال آن افزایش سختی و پس از آن افزایش تردی است. از سوی دیگر وجود آب به‌هنگام آسیاب‌کاری

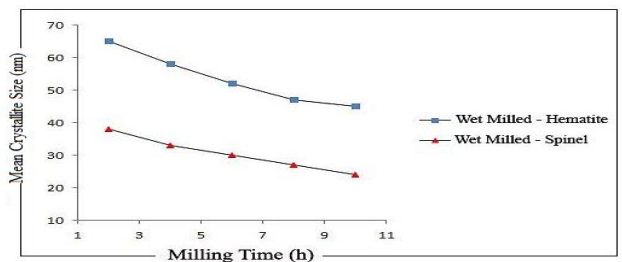


(الف)



(ب)

شکل ۳ (الف و ب): الگوی XRD نمونه‌های آسیاب‌کاری تر و بازپخت شده در زمان‌های ۲، ۴، ۶، ۸ و ۱۰ ساعت جوش‌خوردگی را کاهش می‌دهد که می‌تواند به کاهش برخورد-های و به‌دنبال آن کاهش بازدهی آسیاب‌کاری بینجامد [۱۱، ۱۲].



شکل ۴: تغییر میانگین اندازه‌ی بلورک‌های هماتیت و فاز اسپینل شکل ۵ تغییر ثابت‌های شبکه‌ی هماتیت (c,a) را برحسب زمان آسیاب‌کاری نشان می‌دهد. همان‌گونه که دیده می‌شود ثابت‌های شبکه با افزایش زمان آسیاب‌کاری کاهش می‌یابد که به‌خاطر ریز شدن و افزایش نسبی انرژی سطحی نانوذرات است [۱۳]. شکل ۶ تغییرات مغناطش بر حسب دمای نمونه‌ی ۱۰ ساعت

نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که آسیاب‌کاری پراثری ویژگی‌های هماتیت کپه‌ای را به شدت مورد تأثیر قرار می‌دهد، به گونه‌ای که نانوذرات به دست آمده ویژگی فری مغناطیس با مغناطشی به بزرگی 90 emu/g دارند. اگر چه بخشی از این مغناطش بزرگ به فاز اسپینل تشکیل شده مربوط است، اما بخش بزرگ‌تر به توزیع کاتیونی متفاوت نانوذرات هماتیت کپه‌ای مربوط می‌شود.

مرجع‌ها

[1] C. Suryanarayana, "Recent developments in mechanical alloying", Review on Advancend Materials Science **18**, (2008) 203-211.

[2] A. Hasanpour, M. Mozaffari, J. Amighian, "Preparation of Bi-Fe₃O₄ nanocomposite through reduction of Bi₂O₃ with Fe via high-energy ball milling", Physica B **387**, (2007) 298-301.

[3] M. M. Can, M. Coşkan, T. Firat, "A comparative study of nanosized iron oxide particle; magnetite (Fe₃O₄), maghemite (γ -Fe₂O₃) and hematite (α -Fe₂O₃) using ferromagnetic resonance", Journal of Alloys and Compounds. **542**, (2012) 241-247.

[4] M. Zhu, Y. Wang, D. Meng, X. Qin, and G. Diao, "Hydrothermal synthesis of hematite nanoparticles and their electrochemical properties", The Journal of Physical Chemistry C, **116** (2012) 16276-16285

[5] A, Lassoued, B, Dkhil, A, Gadri, S, Ammar, "Control of the shape and size of iron oxide (α -Fe₂O₃) nanoparticles synthesized through the chemical precipitation method", Results in Physics **7** (2017) 3007-3015

[6] S. GH. Hosseini, "Synthesis of α -Fe₂O₃ nanoparticles by dry high-energy ball-milling method and investigation of their catalytic activity", Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, **128** (2017) 915-924

[7] J. Xue, Z. Zhou, John Wang, "Nanocrystalline Maghemite (γ -Fe₂O₃) in Silica by Mechanical Activation of Precursors", Journal of American Ceramic Society., **85**, **4**, (2002) 807-11.

[8] N. Randrinantoandro, A. M. Mercier, M. Hervieu, J. M. Grenèche, "Direct phase transformation from hematit to maghemite during high energy ball milling", Materials Letters **47** (2001) 150-158.

[9] A. H. Morrish, The Physical Principles of Magnetism, IEEE Press, (2001), 479.

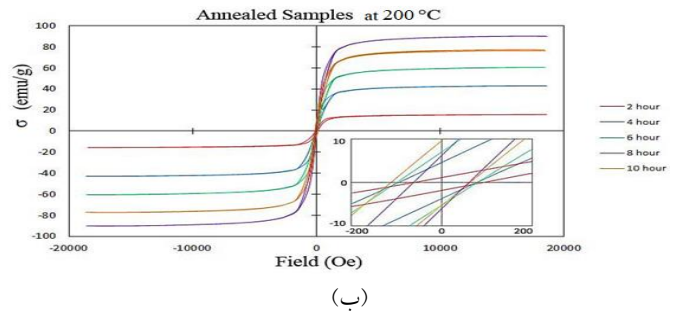
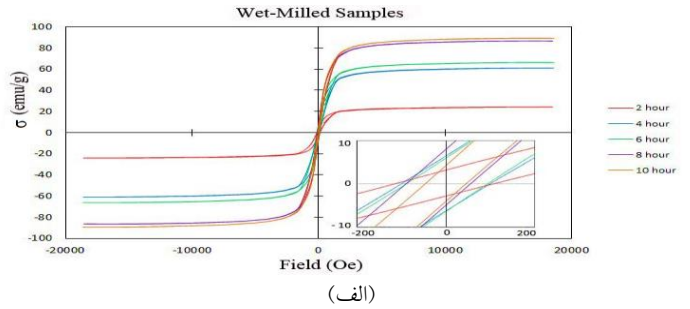
[10] S. D. Shenoy, P. A. Joy, "Effect of mechanical milling on the structural, magnetic and dielectric properties of zinc ferrite", Journal of Magnetism and Magnetic Material **269**, (2004) 217-226.

[11] R. M. Daivis, B. McDermott, C. C. Koch, "Mechanical alloying of brittle materials", Metal. Trans. **A19**, (1988) 2867-2874.

[12] J. M. D. Coey, Magnetism and Magnetic Materials, Cambridge University Press, UK, (2010) 203.

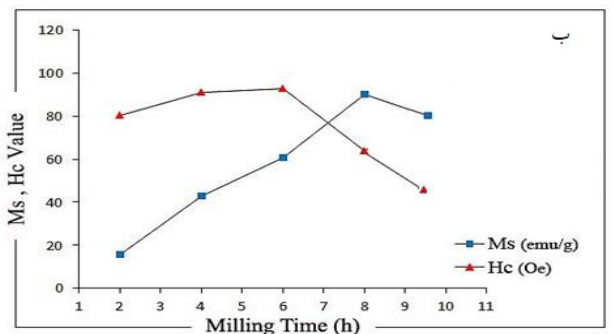
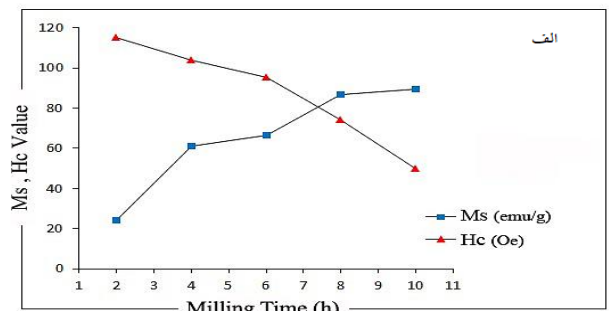
[13] R. M. Cornell, U. Schwertmann, The Iron oxides: structure, properties, reactions, occurrence and uses, Wiley- VCH, Weinheim, (2003) 123.

[14] B. D. Cullity, C. D. Graham, Introduction to Magnetic Materials, John Wiley & Sons, New Jersey, (2009) 360.



شکل ۷: منحنی پسماند الف) نمونه‌های آسیاب کاری تر و ب) بازپخت شده در 200°C

بحرانی تک حوزه است [۱۴]. مغناطش اشباعی σ_s نمونه‌های بازپخت شده پایین‌تر از نمونه‌های آسیاب‌کاری شده است، که پیامدی از بازگشت کاتیون‌ها به توزیع کپه‌ای است.



شکل ۸: منحنی تغییرات مغناطش اشباعی و نیروی وادارندگی الف) نمونه‌های آسیاب کاری تر و ب) بازپخت شده در 200°C

نتیجه‌گیری

ساخت نانوکامپوزیت مغناطیسی $Bentonite/Fe_3O_4$ در حضور میدان مغناطیسی

مقدم ضیابری، سید اشکان^۱؛ بابامرادی، محسن^۱؛ ملکی، علی^۲؛ حاجی زاده، زلیخا^۲

^۱دانشکده فیزیک دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

^۲آزمایشگاه تحقیقاتی کاتالیزورها و سنتز آلی، دانشکده شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

چکیده

در این مقاله نانوکامپوزیت $Bentonite/Fe_3O_4$ در حضور یک میدان مغناطیسی خارجی ساخته شد و اثر میدان مغناطیسی در حین ساخت نمونه مورد بررسی قرار گرفت. نانوکامپوزیت های ساخته شده در حضور میدان به کمک آنالیزهای VSM ، XRD و SEM مشخصه یابی و با نمونه های ساخته شده بدون حضور میدان مغناطیسی مورد مقایسه قرار گرفت. نتایج آنالیز VSM نشان داد که مغناطش اشباع از مقدار 23 emu/g برای نمونه سنتز شده بدون حضور میدان به مقدار 58 emu/g برای نمونه سنتز شده در حضور میدان مغناطیسی افزایش پیدا می کند. نتایج آنالیز XRD بلورینگی نانوذرات را در هر دو حالت تأیید می کند. تصاویر SEM پخش یکسان نانوذرات در کامپوزیت را نشان می دهد.

Magnetic nanocomposite $Bentonite/Fe_3O_4$ synthesizing in the presence of external magnetic field

Moghadam Ziabari, Seyed Ashkan¹; Babamoradi, Mohsen¹; Maleki, Ali²; Hajizadeh, Zoleikha²

¹ Department of Physics, Iran University of Science and Technology, Tehran

² Catalysts and Organic Synthesis Research Laboratory, Department of Chemistry, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

Abstract

In this paper, $Bentonite/Fe_3O_4$ nanocomposites synthesized in the presence of an external magnetic field and the effect of the magnetic field in synthesizing sample was investigated. Synthesized nanocomposites in the presence and absence of the external magnetic field characterized by SEM, XRD, VSM analyzes and compared with each other. VSM results revealed the magnetization saturation for the synthesized samples in the absence and presence of the external magnetic field as 23 emu/g and 58 emu/g , respectively. The XRD pattern confirmed the crystallinity of the all samples. The SEM images showed the dispersing of nanoparticles in the composite.

مقدمه

در سنسورها دارند را معرفی کرده است [۱]. دسته ای از این نانوکامپوزیت ها، نانوکامپوزیت های مغناطیسی هستند که در زمینه های وسیعی به کار گرفته شده اند که به عنوان نمونه به ذخیره سازی اطلاعات می توان اشاره کرد [۲ و ۳]. از طرف دیگر، ساخت مواد ابرپارامغناطیس زیست سازگار، در صنعت زیست پزشکی بسیار

نانوکامپوزیت ها به دسته ای از مواد گفته می شود که در آن ها یکی از اجزاء ابعاد نانومتری داشته باشد. هیبرید های طبیعی و معدنی نسل جدیدی از کامپوزیت ها که کاربردهای مختلفی از قبیل کاربرد کاتالیستی، کاربرد در دستگاه های الکترونیکی و فوتونیک و کاربرد

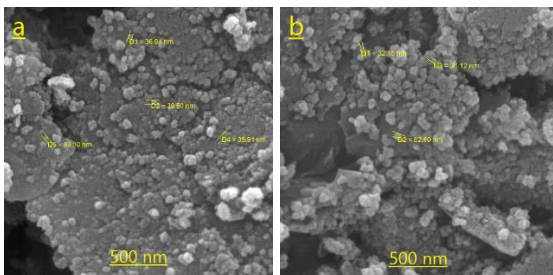
آهنربا جدا شده و ۲۴ ساعت در دمای ۸۰ درجه قرار گرفت تا خشک شود.

روش تهیه ی نانوکامپوزیت Bentonite/Fe₃O₄

برای تهیه نانوکامپوزیت ابتدا ۰,۱ گرم از ماده بنتنیت به همراه ۰,۱ گرم Fe₃O₄ به نسبت ۱ به ۱ با مقداری آب مقطر درون بشری به مدت نیم ساعت توسط یک همزن مکانیکی در دمای اتاق هم زده شد و سپس محلول حاصله، به مدت ۱ ساعت یکبار درون میدان مغناطیسی ۰,۴ تسلا و در دمای ۶۵ درجه سانتی گراد و یکبار هم بدون اعمال میدان مغناطیسی خارجی با همان دما قرار گرفت تا نانوکامپوزیت تشکیل شود.

نتایج و تحلیل ها

شکل ۱، تصاویر SEM از نمونه ی Bentonite/Fe₃O₄ تولید شده در عدم حضور میدان خارجی (a) و در حضور میدان خارجی (b) را نشان می دهد. با توجه به تصاویر، می توان وجود نانوذرات در بستر پلیمری را مشاهده کرد. همچنین میتوان مشاهده کرد که در شکل (b)، توده ها کمی متراکم تر از توده های نشان داده شده در شکل (a)، هستند. این افزایش حجم کلوخه ها به دلیل نیروی جاذبه قویتر بین نانوذرات مغناطیسی در نمونه تولید شده در حضور میدان مغناطیسی می باشد. اما تفاوت قدرت مغناطیسی از تصاویر اس ای ام آنچنان مشخص نمی شود. از طرفی عکس های این آنالیز نشان می دهند که نانوذرات موجود در هر دو نمونه به خوبی در بتونیت توزیع شده اند و نانوکامپوزیت های تقریباً یکنواختی تشکیل شده است. به عبارت ساده تر، اعمال میدان مغناطیسی در حین ساخت تغییر چندانی در ظاهر کامپوزیت ایجاد نکرده است [۹ و ۱۰].



شکل ۱) تصاویر SEM نمونه های تولید شده (a) در عدم حضور میدان مغناطیسی خارجی (b) در حضور میدان مغناطیسی خارجی.

مورد توجه قرار گرفته است که از کاربردهای آن می توان به دارو رسانی، گرمادرمانی ضدسرطان و بی حرکت سازی آنزیم ها اشاره کرد. پیشرفت های اخیر در زمینه علم پلیمر نشان می دهد که امکان ساخت گستره وسیعی از مواد با کنترل پذیری در خواص مکانیکی، حرارتی و الکتریکی به وجود آمده است اما ساخت مواد طبیعی و زیست سازگار پلیمری با خاصیت مغناطیسی و پذیرفتاری های بالا در قیاس با مواد صنعتی مطالعات ویژه ای را می طلبد. ساخت نانوکامپوزیت های مغناطیسی، به منظور ترکیب پلیمرهای طبیعی پیشنهاد شده است [۴].

بنتنیت (Bentonite) یک نوع رس طبیعی ارزان و سنتی است که به سبب ساختار خاصی که دارد، پتانسیل بالایی برای حذف یون های فلزی سنگین از پساب ها را دارد. در مقایسه با انواع دیگر رس ها، بنتنیت خواص جذبی فوق العاده ای دارد و این خواص ناشی از فضای بین لایه ای این ماده همانند سطوح و صفحات خارجی آن است. از این رو بنتنیت به عنوان یکی از کاندیداهای مناسب برای کامپوزیت های مغناطیسی شمرده می شود [۵-۸]. در این مقاله نانوکامپوزیت Bentonite/Fe₃O₄ به منظور بررسی خواص آن ساخته شد و برای اولین بار به کمک اعمال یک میدان مغناطیسی در حین ساخت نانوکامپوزیت، برای خواص مغناطیسی آن افزایش چشمگیری به دست آمد.

روش انجام آزمایش

روش تهیه Fe₃O₄

۴,۷ گرم از FeCl₃ ۶ آبه و ۰,۲ مولار و ۲,۷ گرم از FeCl₂ ۴ آبه و ۰,۱ مولار را با ۱۰۰ میلی لیتر آب مقطر درون بشری ریخته و در دمای ۸۰ درجه سانتی گراد به مدت ۱ ساعت به وسیله یک همزن مکانیکی هم زده شد. بعد از گذشت یک ساعت، ۱۰ میلی لیتر آمونیاک به صورت قطره قطره و به مدت ۱۰ دقیقه به محلول اضافه شد تا کاملاً به رنگ تیره در بیاید. پس از ۳۰ دقیقه، هم زدن متوقف شد و رسوب آن ته نشین گردید. سپس رسوب چندین بار توسط آب مقطر شسته شد و سرانجام رسوب حاصله توسط یک

وجود ندارد و بنابراین هر دو نمونه سوپر پارامغناطیس می‌باشند [۱۴و۱۵]. برای نمونه تولید شده در غیاب میدان مغناطیسی خارجی، مغناطش اشباع $22,95 \text{ emu/g}$ و برای نمونه تولید شده در حضور میدان مغناطیسی خارجی، $58,16 \text{ emu/g}$ به دست آمد. دلیل افزایش مغناطش اشباع را می‌توان به جهت‌گیری هرچه بهتر دو قطبی‌های مغناطیسی در راستای میدان مغناطیسی خارجی در حین ساخت مربوط کرد. در حین ساخت در حضور میدان مغناطیسی، تعداد بیشتری از دو قطبی‌های مغناطیسی با میدان مغناطیسی هم‌جهت شده و قدرت مغناطیسی نمونه افزایش پیدا کرده است.

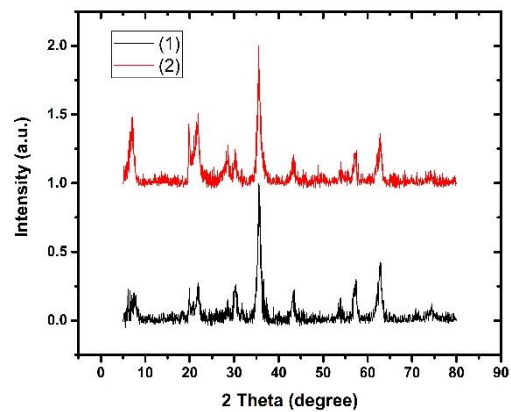
نتیجه گیری

برای اولین بار به وسیله اعمال میدان مغناطیسی در حین ساخت نانوکامپوزیت مغناطیسی $\text{Bentonite/Fe}_3\text{O}_4$ مورد بررسی قرار گرفت. نتایج آنالیز VSM افزایش حدود ۱۵۰ درصدی مغناطش اشباع را نشان داد. میدان مغناطیسی در حین ساخت نانوکامپوزیت باعث بیشتر هم‌جهت شدن نانوذرات مغناطیسی شده و بنابراین خاصیت مغناطیسی کامپوزیت افزایش چشم‌گیری خواهد داشت. این نتایج در بهبود خواص نانوکامپوزیت‌های مغناطیسی و کاربرد وسیع‌تر آنها می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد.

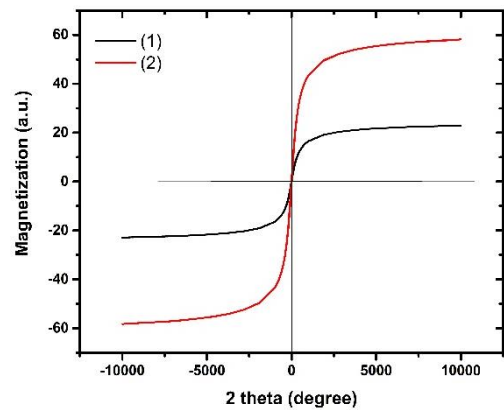
مراجع

- [۱] Liu, P. and Su, Z., 2006. Preparation and Characterization of PMMA/ZnO Nanocomposites via In-Situ Polymerization Method. *Journal of Macromolecular Science, Part B: Physics*, 45(1), pp.131-138.
- [۲] Pyun, J., 2007. Nanocomposite materials from functional polymers and magnetic colloids. *Polymer Reviews*, 47(2), pp.231-263.
- [۳] Bull, M.M., Chung, W.J., Anderson, S.R., Kim, S.J., Shim, I.B., Paik, H.J. and Pyun, J., 2010. Synthesis of ferromagnetic polymer coated nanoparticles on multi-gram scale with tunable particle size. *Journal of Materials Chemistry*, 20(29), pp.6023-6025.
- [۴] Bajpai, A.K. and Gupta, R., 2010. Synthesis and characterization of magnetite (Fe_3O_4)—Polyvinyl alcohol-based nanocomposites and study of superparamagnetism. *Polymer composites*, 31(2), pp.245-255.
- [۵] Feng, G., Ma, J., Zhang, X., Zhang, Q., Xiao, Y., Ma, Q. and Wang, S., 2019. Magnetic natural composite Fe_3O_4 -chitosan@ bentonite for removal of heavy metals from acid mine drainage. *Journal of colloid and interface science*, 538, pp.132-141.
- [۶] Zhu, R., Chen, Q., Zhou, Q., Xi, Y., Zhu, J. and He, H., 2016. Adsorbents based on montmorillonite for contaminant removal from water: A review. *Applied Clay Science*, 123, pp.239-258.
- [۷] Yuan, P., Fan, M., Yang, D., He, H., Liu, D., Yuan, A., Zhu, J. and Chen, T., 2009. Montmorillonite-supported magnetite nanoparticles for the removal of hexavalent chromium [Cr (VI)] from aqueous solutions. *Journal of Hazardous materials*, 166(2-3), pp.821-829.

در شکل ۲، نتایج آنالیز XRD را برای دو نمونه ساخته شده در حضور و عدم حضور میدان مغناطیسی خارجی نشان می‌دهد. قله‌های $7,56$ و $19,83$ و $26,47$ درجه در هر دو نمودار مربوط به بتونیت می‌باشند (با شماره کارتهای 9-2 و 649-1) و قله‌های مربوط به نانوذرات Fe_3O_4 در زوایای $30,8$ ، $36,5$ ، $57,4$ و $63,1$ درجه (با نتایج استاندارد 01-075-0449 JCPD) در هر دو نمودار مشخص شده‌اند [۱۱-۱۳].



شکل ۲) طیف آنالیز XRD از نانوکامپوزیت تولید شده بدون اعمال میدان مغناطیسی (۱) و ساخته شده در حضور میدان مغناطیسی (۲).



شکل ۳) آنالیز VSM برای نمونه تولید شده بدون اعمال میدان مغناطیسی (۱) و برای نمونه تولید شده در حضور میدان مغناطیسی خارجی (۲).

در شکل ۳، نمودار ۱ منحنی آنالیز VSM را برای نمونه تولید شده در غیاب میدان مغناطیسی و نمودار ۲ برای نمونه تولید شده در حضور میدان مغناطیسی را نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود، هر دو نمودار در دمای اتاق از صفر عبور کرده‌اند که این نشان می‌دهد پسماند مغناطیسی و میدان وادارندگی در این دما

- [^۸] Hosterman, J.W., 1985. *Bentonite and Fuller's earth resources of the United States* (No. 92).
- [^۹] Zhou, W. and Wang, Z.L. eds., 2007. *Scanning microscopy for nanotechnology: techniques and applications*. Springer science & business media.
- [^{۱۰}] Laudate, T., 2003. Imaging guidelines for scanning electron microscopy. *Advanced materials & processes*, 161(7), pp.23-25.
- [^{۱۱}] Gilberto, T.J., Marçal, L., Silva, J.M., Rocha, L.A., Ciuffi, K.J., Faria, E.H. and Nassar, E.J., 2016. Hybrid materials based on bentonite functionalized with amine groups via the hydrolytic sol-gel method. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 27(5), pp.933-940.
- [^{۱۲}] Cullity, B.D., *Elements of X-ray Diffraction*. 1978.
- [^{۱۳}] Ruíz-Baltazar, A., Esparza, R., Rosas, G. and Pérez, R., 2015. Effect of the surfactant on the growth and oxidation of iron nanoparticles. *Journal of Nanomaterials*, 16(1), p.202.
- [^{۱۴}] Maity, D. and Agrawal, D.C., 2007. Synthesis of iron oxide nanoparticles under oxidizing environment and their stabilization in aqueous and non-aqueous media. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 308(1), pp.46-55.
- [^{۱۵}] Cullity, Bernard Dennis, and Chad D. Graham. *Introduction to magnetic materials*. John Wiley & Sons, 2011.

طراحی سوئیچ چند طول موج مبتنی بر شفافیت القایی ناشی از اثر پلاسمونیک

ملایی برجهری، مهسا^۱؛ پورمحمی آبادی، مریم^۲

^۱ آزمایشگاه الکترونیک نوری، دانشکده فنی - بخش مهندسی برق، دانشگاه شهید باهنر کرمان

^۲ آزمایشگاه الکترونیک نوری، دانشکده فنی - بخش مهندسی برق، دانشگاه شهید باهنر کرمان

چکیده

در این مقاله یک سوئیچ چند طول موج مبتنی بر اثر شفافیت القایی ناشی از پلاسمونیک (PIT)، که از یک موجبر MIM^۱ تزویج شده با تشدیدگرهای روشن-تاریک-تاریک تشکیل شده، ارائه شده است. ساختار پیشنهادی با استفاده از روش FDTD^۳ تحلیل و شبیه سازی شده است. پدیده PIT معمولی و دوگانه در طیف انتقال ساختار، مشاهده و تغییرات پنجره PIT نسبت به تغییر پارامترهای مختلف ساختار از جمله شعاع نانوکاوک حلقوی یا طول نانوکاوک بررسی شده است. نتایج نشان می دهد که ساختار می تواند با افزودن نانوکاوک های مختلف، در طول موج های مختلف مانند یک سوئیچ پسیو عمل کند. ساختار پیشنهادی پتانسیل کاربرد در مدارات مجتمع نوری را داراست.

کلید واژه- تشدیدگر، سوئیچ پلاسمونیک، شفافیت القایی، نانوکاوک

Design of Multi-wavelength switch based on Plasmonic Induced Transparency

Molaei Barjahri, Mahsa¹; Pourmahyabadi, Maryam²

¹ Optoelectronic Laboratory, Electrical Engineering Department, Shahid Bahonar University

² Optoelectronic Laboratory, Electrical Engineering Department, Shahid Bahonar University

Abstract

Abstract - In this paper, an multi-wavelength switch based on Plasmonic Induced Transparency (PIT) effect, consisting of a MIM waveguide coupled with light/dark/dark resonators, is presented. The proposed structure has been analyzed and simulated using the FDTD method. The typical and dual PIT phenomenon has been observed in the transition spectrum of the structure. Also, the switching performance of structure is shown for different wavelengths. The results revealed that the structure can be operated by adding different nanocavities at different wavelengths such as a passive switch. The proposed structure has the potential applications in optical integrated circuits.

Keyword-Induced Transparency, Nanocavity, Plasmonic Switch, Resonator.

PACS No. 85

^۱ Plasmonic Induced Transparency

^۲ Metal- Insulator-Metal

^۳ Finite Difference Time Domain

مقدمه

یک موجبر MIM که انتشار پلاریتون‌های پلاسمون سطحی (SPPها) در سطح مشترک فلز-عایق را پشتیبانی می‌کند و نور را در مقیاس زیر طول موج تنظیم می‌کند، می‌تواند به‌عنوان یک عنصر نوری ایده آل در ادوات پلاسمونیک مجتمع شده در نظر گرفته شود. در سال‌های اخیر تحقیقات زیادی در زمینه ساختارهای پلاسمونیک مبتنی بر موجبرهای MIM انجام شده است. در بین این ساختارهای پلاسمونیک، سوئیچ‌ها و مدولاتورها مهم‌ترین اجزای مورد استفاده برای مسیریابی و سوئیچینگ نور در ارتباطات نوری پهن باند هستند [۱].

شفافیت القایی ناشی از الکترومغناطیس (EIT) که یک حالت خاص از رزونانس فانو است، که از تداخل مخرب کوانتومی بین دو مسیر تحریک متفاوت در یک سیستم اتمی چند سطحی، ناشی می‌شود. به تازگی شفافیت القایی ناشی از پلاسمون (PIT)، به عنوان یک اثر شبه EIT در سیستم‌های پلاسمونیک به شدت مورد توجه قرار گرفته است. بر اساس پدیده‌ی تداخل مخرب بین مود روشن و تاریک، PIT فقط به شرایط آزمایشگاهی نوری معمولی نیاز دارد و می‌تواند بر روی فرامواد و موجبرهای پلاسمونیک با مساحت‌های کوچک بدست آید [۲]، که این امر، مجتمع‌سازی ادوات کاربردی چندگانه مانند سنسورها، فیلترها و ادوات نور کند را نوید می‌دهد.

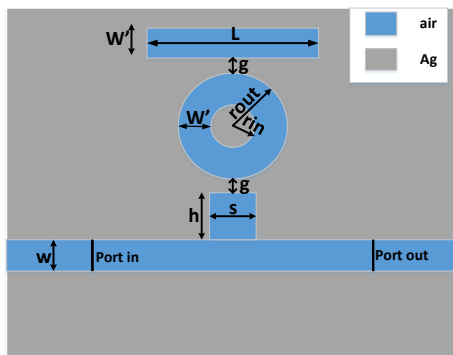
در این مقاله، PIT قابل تنظیم پویا، بصورت تئوری بر اساس موجبر پلاسمونیک MIM تزویج شده با تشدیدگر stub و تشدیدگر حلقوی دایروی (SRR) بررسی شده است. پنجره‌های PIT تکی و دوگانه، می‌توانند با تزویج بین مودهای تاریک و روشن محقق شده و با تئوری تابش چند تشدیدگری تجزیه و تحلیل شوند [۳]. در اینجا، از روش FDTD برای آنالیز ساختار پیشنهادی استفاده می‌شود. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که پنجره انتقال شبه EIT معمولی می‌تواند در سیستم‌های پلاسمونیک مجتمع شده، محقق شود. با استفاده از ویژگی‌های طیفی PIT، سوئیچینگ پسیو چند طول موج در ساختار پیشنهادی بدست آمده است.

ساختار پیشنهادی و تئوری

ساختار پیشنهادی که شامل سه نانوکاوک و یک موجبر اصلی است، در شکل ۱ نشان داده شده است. هر سه نانوکاوک (تشدیدگر stub و تشدیدگر حلقوی و تشدیدگر مستطیلی) و موجبر اصلی از ساختار MIM ساخته شده‌اند. بستر از جنس Si است و یک لایه نقره روی آن قرار گرفته است. موجبر اصلی و نانوکاوک‌ها درون لایه‌ی نقره ایجاد شده‌اند و از جنس هوا با ضریب گذردهی $\epsilon_i=1$ هستند. رابطه گذردهی نسبی نقره با مدل درود توصیف می‌شود:

$$\epsilon_m = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{(\omega^2 + j\omega\gamma)} \quad (1)$$

که در اینجا، ϵ_∞ ثابت محیط برای فرکانس نامحدود است، ω_p فرکانس بالک برای پلاسما را نشان می‌دهد، γ فرکانس تضعیف برای تشدید الکترون و ω فرکانس زاویه‌ای نور فرودی است. پارامترهای نقره بصورت: $\epsilon_\infty=7/3$ ، $\omega_p=1.38 \times 10^{16} \text{ Hz}$ ، $\gamma=2.73 \times 10^{14} \text{ Hz}$ هستند [۴]. ابعاد ساختار بصورت $W=50 \text{ nm}$ ، $g=15 \text{ nm}$ ، $s=60 \text{ nm}$ ، $h=120 \text{ nm}$ ، $w=50 \text{ nm}$ ، $L=480 \text{ nm}$ ، $r_{\text{out}}=125 \text{ nm}$ ، $r_{\text{in}}=75 \text{ nm}$ تعریف شده‌اند.



شکل ۱: طرح ساختار پیشنهادی

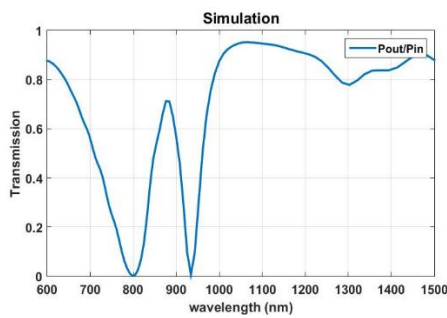
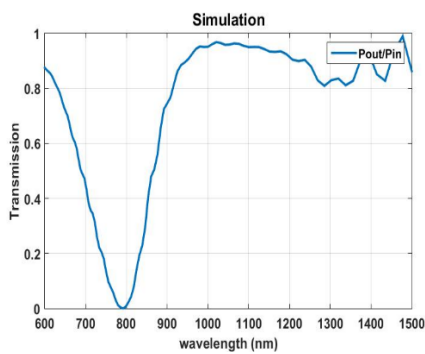
اثر PIT از تداخل بین مود روشن (مود تحریک شده بصورت مستقیم) و مود تاریک (مود تحریک شده بصورت غیرمستقیم)، در سیستم پلاسمونیک حاصل می‌شود. برای تعریف اثر PIT در سیستم پلاسمونیک مجتمع، یک موجبر MIM کوپل شده از کنار به یک نانوکاوک روشن و چند نانوکاوک تاریک را در نظر می‌گیریم. نانوکاوک اول به‌عنوان نانوکاوک روشن، به‌صورت مستقیم به موجبر

$$n_g = \frac{\tau_N \cdot c}{l} = \frac{1}{2l} \operatorname{Im} \left[T_N \frac{d(Z\sigma_N)}{d\omega} \right] \quad (6)$$

که در آن c سرعت نور در خلأ، l طول موجبر MIM، T_N تأخیر گروهی سیستم با N نانوکاوک و Z امپدانس موج است که از $Z = \frac{\alpha(\omega) w}{\omega \epsilon_0 \epsilon_1}$ استخراج شده است، ϵ_0 گذردهی خلأ، ϵ_1 گذردهی ماده پرشده درون نانوکاوک ها، $\alpha(\omega)$ ثابت انتشار در نانوکاوک های MIM و w عرض موجبر MIM است و با استفاده از معادله $v_g = \frac{c}{n_g}$ می توان سرعت گروهی در این سیستم را بدست آورد که می تواند برای مطالعه نور کند استفاده شود. انتقال ساختار با معادله $T = \frac{P_{out}}{P_{in}}$ محاسبه می شود که P_{in} توان فرودی در پورت ورودی و P_{out} توان انتقالی به پورت خروجی است.

شبیه سازی و نتایج

از روش FDTD برای آنالیز و شبیه سازی این ساختار استفاده شده است. شکل ۲ طیف انتقال ساختار را برای حالت های یک و ۲ و ۳ کاواک نشان می دهد. مشاهده می شود که یک پنجره PIT معمولی در حالت دوکاواک (شکل ۲ب) و یک PIT دوگانه در حضور سه کاواک در طیف انتقال ظاهر شده است.



اصلی تزویج شده است، نانوکاوک دوم به عنوان نانوکاوک تاریک، به صورت ناپایدار به نانوکاوک اول تزویج شده است، نانوکاوک سوم به عنوان نانوکاوک تاریک، به صورت ناپایدار به نانوکاوک دوم تزویج شده است و غیره. به عبارت دیگر، j امین نانوکاوک فقط با $(j-1)$ و $(j+1)$ امین نانوکاوک اندرکنش دارد. در این مورد، یک نظریه چند عاملی تحلیلی، ارائه شده است که از سیستم دو تشدیدگری معمولی بدست می آید، که در آن،

$$D_j = 1 - \left(\frac{\omega}{\omega_j} \right)^2 - i\gamma_j \left(\frac{\omega}{\omega_j} \right) \quad (2)$$

و $(j=1,2,\dots,N)$ است [۵]. ω_j فرکانس رزونانس j امین نانوکاوک و γ_j فاکتور میرایی j امین نانوکاوک است که با تحریک $h_j(\omega)$ توصیف شده است. نانوکاوک روشن با نیروی خارجی $f(\omega)$ تحریک شده است. سیستم می تواند با معادله ماتریس هارمونیک تزویج شده، به صورت زیر توصیف شود:

$$h_j(\omega) = \frac{f(\omega)}{D_1 - \frac{k_1^2}{D_2 - \frac{k_2^2}{\vdots D_{N-1} \frac{k_{N-1}^2}{D_N}}} \quad (3)$$

k_j نیروی تزویج بین j امین و $j+1$ امین نانوکاوک است. پاسخ مؤثر با هدایت پذیری سیستم توصیف می شود، که برای این سیستم با N نانوکاوک (یک نانوکاوک روشن و $N-1$ نانوکاوک تاریک) به صورت زیر است:

$$\sigma_N = -i\omega h(\omega)$$

$$\sigma_N = \frac{-i\omega}{D_1 - \frac{k_1^2}{D_2 - \frac{k_2^2}{\vdots D_{N-1} \frac{k_{N-1}^2}{D_N}}} \quad (4)$$

ضریب انتقال و ضریب شکست گروهی این سیستم به صورت زیر نوشته می شود:

$$T_N = \frac{2}{2 + Z\sigma_N} \quad (5)$$

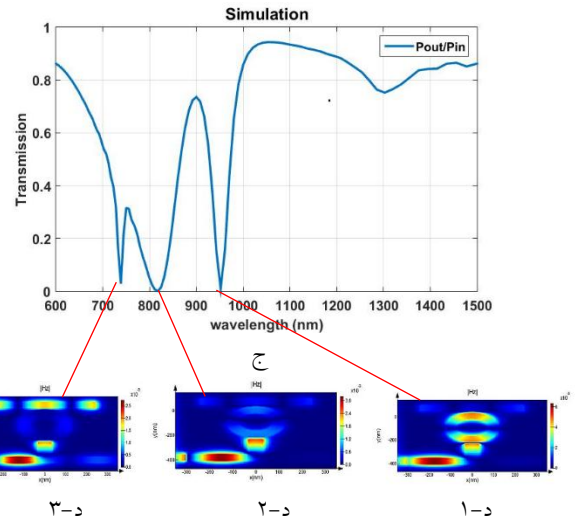
نتایج نشان می‌دهد که، پدیده PIT معمولی در حضور دو تشدیدگر stub (روشن) و تشدیدگر حلقوی (تاریک) اتفاق می‌افتد. همچنین با اضافه کردن تشدیدگر مستطیلی (تاریک)، پدیده PIT دوگانه قابل مشاهده است. با توجه به نتایج بدست آمده ساختار پیشنهادی خاصیت سوئیچینگ در طول موج های مختلف را از خود نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که PIT در ساختار پیشنهادی مقادیری تا حدود ۰/۹ از خود نشان می‌دهد، در حالی که ساختارهای قبلی [۵] پیک انتقال حداکثر تا حدود ۰/۴۵ را از خود نشان می‌دهند، همچنین ساختار نرخ خاموشی بالای ۱۹/۸۲dB را از خود نشان داده است.

جدول ۱: عملکرد سوئیچینگ پلاسمونیک ساختار در طول موج ۹۵۰ نانومتر در حالت حضور و عدم حضور کاواک ۳

طول موج (nm)	عدم وجود کاواک ۲ و ۳			در حضور کاواک ۲ و ۳			نرخ خاموشی (dB)
	انتقال	بازری روشن/خاموش	۱	انتقال	بازری روشن/خاموش	۰	
۷۵۰	۰/۳۳	روشن	۱	۰/۰۲	خاموش	۰	۱۲/۱۷
۸۰۰	۰/۰۰۰۱	خاموش	۰	۰/۰۰۰۱	خاموش	۰	-
۹۵۰	۰/۹۶	روشن	۱	۰/۰۱	خاموش	۰	۱۹/۸۲

مراجع

- [1] Y. Huang, C. Min, and G. Veronis, "Compact slit-based couplers for metal-dielectric-metal plasmonic waveguides," *Optics express*, vol. 20, pp. 22233-22244, 2012.
- [2] S. Zhang, D. A. Genov, Y. Wang, M. Liu, and X. Zhang, "Plasmon-induced transparency in metamaterials," *Physical Review Letters*, vol. 101, p. 047401, 2008.
- [3] S.-L. Yang, D.-M. Yu, G.-D. Liu, Q. Lin, X. Zhai, and L.-L. Wang, "Perfect Plasmon-Induced Absorption and Its Application for Multi-Switching in Simple Plasmonic System," *Plasmonics*, vol. 13, pp. 1015-1020, 2018.
- [4] Z. Zhang, J. Yang, X. He, Y. Han, J. Zhang, J. Huang, et al., "All-optical multi-channel switching at telecommunication wavelengths based on tunable plasmon-induced transparency," *Optics Communications*, vol. 425, pp. 196-203, 2018.
- [5] Z. He, H. Li, S. Zhan, B. Li, Z. Chen, and H. Xu, "Tunable multi-switching in plasmonic waveguide with Kerr nonlinear resonator," *Scientific reports*, vol. 5, p. 15837, 2015.



شکل ۲) طیف انتقال الف) فقط در حضور نانو کاواک روشن (تشدیدگر STUB) در صورت وجود تشدیدگر STUB و تشدیدگر حلقوی ج) در حضور هر سه تشدیدگر د- تا ۳) پروفایل توزیع میدان در سه طول موج ۷۵۰nm، ۹۵۰nm و ۸۱۲nm

در حالت حضور همزمان کاواک اول و دوم، با توجه به نتایج، می‌بینیم که ساختار دو عمق در طول موج های ۸۰۰nm و ۹۵۰nm نشان می‌دهد با توجه به اینکه در حالت حضور فقط کاواک شاخه‌ای (کاواک ۱)، طیف انتقال فقط در طول موج ۸۰۰nm یک عمق نشان داده است، بنابراین ساختار در حالت های حضور و عدم حضور کاواک ۲ در طول موج ۹۵۰nm عملکرد سوئیچینگ دارد.

با توجه به نتایج شکل ۲ مشاهده می‌شود که با تعریف کاواک ۳ در ساختار، طیف انتقال علاوه بر طول موج ۸۰۰nm و ۹۵۰nm در طول موج ۷۵۰nm نیز یک عمق نشان می‌دهد، با توجه به اینکه در حالت حضور فقط کاواک ۱، طیف انتقال فقط در طول موج ۸۰۰nm عمق نشان داده است، بنابراین ساختار در حالت های حضور و عدم حضور کاواک ۳ در طول موج ۷۵۰nm و ۹۵۰nm عملکرد سوئیچینگ دارد که نتایج در جدول ۱ نشان داده شده است.

نتیجه گیری

در این مقاله یک ساختار سوئیچ پلاسمونیک پسیو شامل یک موج بر MIM کوپل شده از کنار به نانو تشدیدگرهای روشن-تاریک-تاریک (stub-حلقوی و مستطیلی) پیشنهاد شده است.

تأثیر افزایش غلظت کلسیم بر خواص ساختاری و مغناطیسی نانو بلورهای فریت کلسیم- کادمیم

وفایی، سمیه؛ ناصری، محمود

دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه ملایر

چکیده

در این تحقیق نانو بلورهای فریت کلسیم-کادمیم با فرمول کلی $Ca_{1-x}Cd_xFe_2O_4$ به روش عملیات گرمایی در دمای ۷۷۳ کلوین سنتز شد. مشخصات ساختاری به وسیله پراش پرتو ایکس (XRD) و میکروسکوپ الکترونی روبشی (FESEM) تعیین گردید. خواص مغناطیسی این نانو بلورها مانند مغناطش اشباع (M_s) و پسماند (M_r) توسط دستگاه مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی (VSM) در دمای اتاق بررسی شد. اندازه این نانو بلورها با استفاده از رابطه شرر و میکروسکوپ الکترونی روبشی برای یکی از نمونه ها مقایسه گردید که توافق بسیار خوبی با یکدیگر داشتند.

The effect of increasing the concentration of calcium on the structural and magnetic properties of Calcium-Cadmium ferrite nanocrystals

Vafaei, Somayeh; Naseri, Mahmoud;

Department of Physics, Malayer University, Malayer

Abstract

In this research, Calcium-Cadmium ferrite nanocrystals with the general formula $Ca_{1-x}Cd_xFe_2O_4$ were synthesized by thermal treatment method at 773 K. Structural characterization were determined by X-ray diffraction (XRD) and filed electron scanning microscopy (FESEM). The magnetic properties of these nanocrystals, such as saturated magnetization (M_s) and remanent (M_r), were investigated by a vibrational sample magnetometer (VSM) at room temperature. The size of these nanocrystals for one of the samples was compared by the Sherer relation and filed electron scanning microscopy which had good agreement with together.

PACS No. 7520

۱-مقدمه:

پرداخته‌اند. نانو بلورهای مغناطیسی به‌عنوان گروهی از مواد نانومقیاس، انقلاب عظیمی را در روش‌های تشخیص و درمان در دانش پزشکی ایجاد کرده‌اند. علاوه بر تشخیص پزشکی، در داروسازی هدفمند، در ابزارها و وسایل الکترونیکی در ذخیره‌سازی اطلاعات کاربرد دارند [۱]. امروزه با توجه به ویژگی‌های مفید و منحصر به فرد نانو بلورهای مغناطیسی، استفاده از آن‌ها در حوزه‌های مختلفی مورد توجه قرار گرفته است. در این میان نانوبلورهای فریت‌های اسپینلی با فرمول عمومی MFe_2O_4 که در آن M ترکیبی از یک یا چند یون دو ظرفیتی می‌باشد از پرکاربردترین انواع نانو

صنعت مغناطیس یکی از شاخه‌های بسیار مهم در عرصه‌های مختلف علمی و صنعتی، زیست‌محیطی و پزشکی می‌باشد که بانفوذ فناوری نانو دستخوش تغییرات بسیاری شده است. با وجود پژوهش‌های صورت گرفته‌ی فراوان و پیشرفت‌های بسیار بزرگ در زمینه‌ی نانو بلورهای مغناطیسی، این شاخه از علم هنوز دارای قابلیت‌های بسیاری برای توسعه و پیشرفت بیشتر می‌باشد. به دلیل جذابیت و اهمیت کاربردی نانو بلورها، تاکنون پژوهشگران زیادی به تحقیق و مطالعه بر روی نانو بلور و ویژگی‌های گوناگون آن‌ها

جدول ۱ مقادیر مواد مورد نیاز

ماده	وزن بر حسب گرم
نیترات کلسیم و کادمیم	۰.۱ میلی مول
نیترات آهن III	۰.۲ میلی مول
پلی وینیل پیرولیدون	۴ g
آب مقطر	۱۰۰ ml

۲-۲ روش انجام آزمایش:

ابتدا یک محلول با حل کردن ۴ گرم PVP در ۱۰۰ میلی لیتر آب مقطر با دمای ۸۰ درجه روی یک همزن مغناطیسی همراه یک مگنت برای ایجاد مغناطیس و جلوگیری از به هم چسبیدگی مواد در درون بشر آماده شد. باگذشت زمان معین بافاصله کمی از هم مقدار معینی از نیترات آهن، کلسیم و کادمیم به آن اضافه شد. و به مدت ۲ ساعت روی هیتر قرار گرفت. محلول حاصل را به مدت ۲۴ ساعت درون آن قرار گرفت. بعد از خشک شدن محلول به مدت ۲۰ دقیقه نمونه آسیاب شد. نمونه آسیاب شده که به صورت پودر صاف و یکدست درآمد به منظور کلسینه شدن و شکل گیری نانو بلورها درون کوره در دمای ۵۰۰ درجه کلین قرار گرفت.

۳-۲ بحث و نتایج:

۳-۱ بررسی نتایج پراش پرتو ایکس (XRD):

الگوهای پراش اشعه ایکس با استفاده از دستگاه پراش اشعه X مدل Philips و PW1730 و با طول موج $\lambda = 1.54$ آنگستروم مورد بررسی قرار گرفت. الگوی پراش پرتو ایکس اطلاعاتی راجع به آنالیز فازی، اندازهی بلورها و ذرات نانو مواد، نوع شبکه بلوری ماده، تعیین پارامترهای شبکه بلوری، اندازهی متوسط دانه های بلوری، وجود ناخالصی در نمونه و... در اختیارمان قرار می دهد شکل ۱ الگوی پراش پرتو ایکس نانو بلورهای فریت کلسیم - کادمیم را نشان می دهد که نمودار a مربوط به $\text{Ca}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Fe}_2\text{O}_4$ و نمودار b مربوط به $\text{Ca}_{0.2}\text{Cd}_{0.8}\text{Fe}_2\text{O}_4$ می باشد.

مواد هستند که ویژگی های منحصر به فردشان موجب کارایی خاص آن ها نسبت به سایر نانو ساختارها می شود [۲-۵]. به ویژه این که در سال های اخیر استفاده از این نانو بلورها در درمان های پزشکی با استفاده از رفتارهای مغناطیسی آن ها جلوه خاصی به این زمینه مطالعاتی داده است [۶ و ۷].

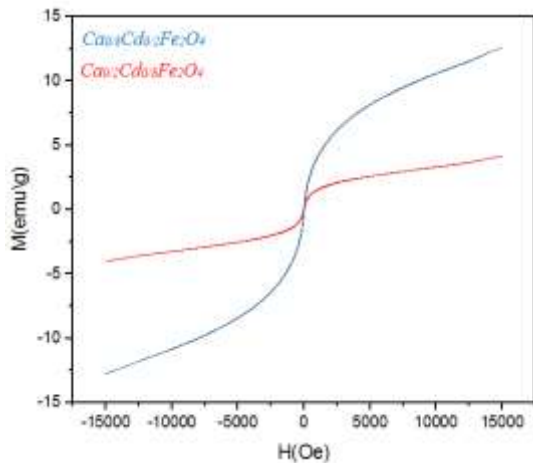
ویژگی های مغناطیسی فریت ها به نوع کاتیون ها و توزیعشان در میان جایگاه های چهاروجهی و هشت وجهی بستگی دارد [۸]. چگونگی توزیع یون های فلزی در جایگاه های هشت وجهی و چهاروجهی به عواملی همچون شعاع یونی، ظرفیت یون ها، ساختار الکترونی و انرژی الکترواستاتیکی در ساختار اسپینلی بستگی دارد. فریت کلسیم - کادمیم یک فریت اسپینلی آمیخته است که در آن یون های Fe^{+3} و Cd^{+2} در A و Ca^{+2} و Fe^{+3} در جایگاه B در یک شبکه اسپینلی جایگاه مکعبی قرار می گیرند [۹]. برای ساخت فریت ها روش های گوناگونی از جمله سل - ژل، سنتز با ریزموج، واکنش حالت جامد، روش تجزیه گرمایی، مکانو شیمیایی، هیدروترمال و... به کار گرفته شده است. در میان این روش ها، که هر کدام معایبی دارد روش عملیات گرمایی به دلیل برتری اش به سبب ویژگی های منحصر به فردی از قبیل غیر سمی بودن، متناسب با محیط زیست، زمان واکنش کم و بازدهی بالا که معایب روش های فوق را ندارد یک روش مفید برای تهیه نانو بلور است که در این پژوهش برای تهیه نمونه ها به کار گرفته شد [۱۰ و ۱۱].

۲-۲ بخش تجربی:

۲-۱ مواد مورد نیاز:

برای تهیهی نانو بلور $\text{Ca}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ مواد اولیه مورد نیاز، نیترات آهن $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ ، نیترات کادمیم $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ و نیترات کلسیم $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ با درصد خلوص بالای ۹۹ درصد مورد استفاده قرار گرفت که از شرکت Sigma Aldrich خریداری شد. از آب مقطر به عنوان حلال و از پلی وینیل پیرولیدون (PVP) برای جلوگیری از کپه ای شدن مواد و عامل محدود کنندهی اندازهی بلورها استفاده شد مقادیر مورد نیاز در جدول ۱ ذکر شده است.

کلسینه شده هر دو رفتار فرو مغناطیس از خود نشان دادند. شکل ۲ نمودار حلقه پسماند دو نمونه نشان داده شده است.

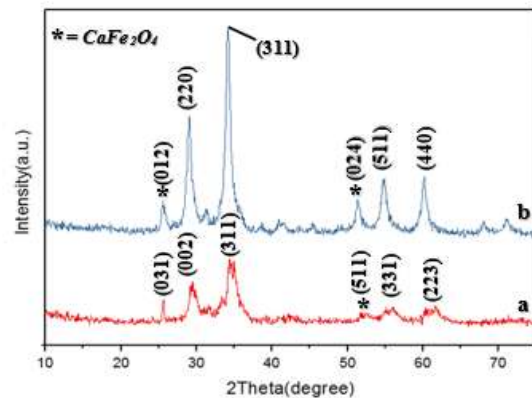


شکل ۲ نمودار حلقه پسماند نانو ذرات $\text{Ca}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$

توزیع مجدد کاتیون‌ها یکی از مهم‌ترین پارامترهایی است که می‌تواند ویژگی‌های مغناطیسی را نسبت به حالت توده‌ای تغییر دهد. در حالت توده‌ای فریت کادمیم، یک ساختار اسپینل عادی دارد که در آن Cd^{2+} و در جایگاه A و Fe^{3+} در جایگاه B قرار می‌گیرند با افزایش Ca^{+2} سبب تغییر ساختار فریت کادمیم از اسپینل عادی به اسپینل ترکیبی می‌شود این توزیع مجدد کاتیون‌ها باعث می‌شود که برهمکنش گشتاورهای یون‌های قرار گرفته در جایگاه‌های مختلف شبکه تغییر کند [۱۴]. در جدول ۲ نتایج حاصل از مغناطش اشباع و وادارندگی مغناطیسی آورده شده است. بررسی‌ها نشان داد که مقادیر مغناطش اشباع و وادارندگی مغناطیسی با افزایش اندازه نانو بلورها کاهش یافته است. در بعضی از نانو فریت‌های مغناطیسی (همانند فریت کادمیم و فریت روی) به علت ساختار نرمال، با افزایش اندازه بلور، مغناطش اشباع کاهش می‌یابد [۱۲، ۱۵].

در حالیکه در نانو فریت‌های با ساختار معکوس (همانند فریت کبالت و فریت نیکل) هنگامی که اندازه بلور افزایش می‌یابد مغناطش اشباع هم افزایش می‌یابد [۱۰، ۱۶].

در دیگر فریت‌ها که ساختار ترکیبی دارند (همانند فریت کلسیم) [۱۱] بسته به اینکه کدام ساختار در ترکیب نهایی غالب می‌باشد (معکوس یا نرمال) مغناطش اشباع می‌تواند افزایش یا کاهش یابد. با توجه به اینکه فریت کادمیم یک فریت نرمال و فریت کلسیم



شکل ۱ نمودار پراش پرتو ایکس نمونه $\text{Ca}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$

الگوهای پراش X نمونه‌های پخت داده شده در دمای ۷۷۳ کلوین و با نسبت‌های X برابر با ۰/۲ و ۰/۸ می‌باشد. نمونه‌های کلسینه شده در صفحات براگ (۲۲۰)، (۳۱۱)، (۵۱۱)، (۴۴۰)، (۰۳۱)، (۰۰۲)، (۳۳۱) در دو نمونه دیده می‌شود. در این صفحات تشکیل ساختار اورتورومبیک برای نمونه‌ای با $X=0.2$ و مکعبی برای نمونه‌ای با $X=0.8$ تأیید شده است. که به ترتیب با الگوی استاندارد cubic, ICDD:00-032-0168, Orthorhmic ICDD:00-022-1063 CaFe_2O_4 مطابقت داشتند فازهای ناخالص در نانو بلورهای فریت کلسیم - کادمیم مشهود است [۱۲ و ۱۱]. همچنین نتایج حاصل از رابطه شرر (۱) که در جدول ۲ مشاهده می‌شود نشان داد که با افزایش کلسیم اندازه بلورها کوچکتر شده است.

$$D = \frac{k\lambda}{\beta \cos\theta} \quad (1)$$

که D اندازه نانو بلورها در روش شرر، $K=0.9$ (مربوط به نانو بلورهای با شکل کره‌ای) $\lambda = 1.54$ آنگستروم طول موج تابش پرتو ایکس، β پهنای پیک اصلی در نصف ارتفاع و θ زاویه پراش می‌باشد [۱۳].

۳-۲ بررسی نتایج حاصل از دستگاه مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی (VSM):

خواص مغناطیسی نانوبلورها توسط مغناطیس سنج نمونه لرزان (VSM) شرکت مغناطیسی دقیق کویر مورد بررسی قرار گرفته است. حلقه‌های پسماند نانو بلورهای مغناطیسی دو نمونه در دمای ۷۷۳ کلوین در شکل ۲ نشان داده شده‌اند. نمونه‌ای با $X=0.2$ و $X=0.8$

ایکس، تشکیل فازهای بلوری تأیید شد. نتایج دستگاه مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی (VSM) نشان داد که نانو بلور $\text{Ca}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Fe}_2\text{O}_4$ و نانو بلور $\text{Ca}_{0.2}\text{Cd}_{0.8}\text{Fe}_2\text{O}_4$ هر دو رفتار فرو مغناطیس داشتند و همچنین به دلیل غلبه ساختار نرمالی فریت کادمیم ساختار نهایی یک ساختار متمایل به نرمال می باشد که با افزایش اندازه بلور مغناطش اشباع کاهش می یابد. با استفاده از تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی اندازه و شکل توزیع بلورها مشخص گردید. مرجع ها:

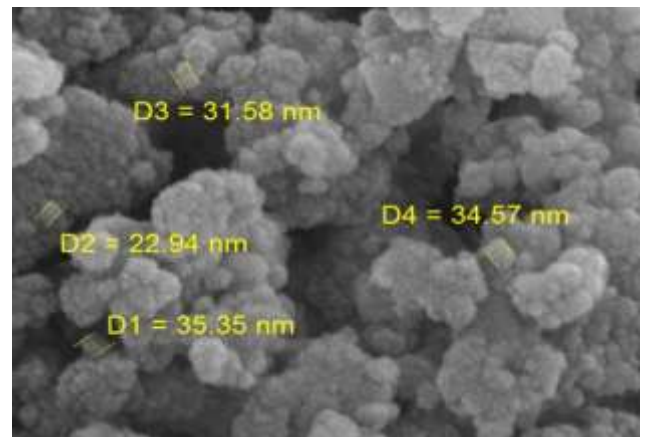
هم یک فریت ترکیبی می باشد می توان گفت ساختار نهایی یک ساختار متمایل به نرمال می باشد که با افزایش اندازه بلور مغناطش اشباع کاهش می یابد که آزمایش مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی نیز آن را تأیید نموده است.

جدول ۲ نتایج حاصل از (XRD) و (VSM)

نمونه	Ms (emu/g)	Hc (Oe)	XRD(nm)
$\text{Ca}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Fe}_2\text{O}_4$	12.722	44.795	18.6
$\text{Ca}_{0.2}\text{Cd}_{0.8}\text{Fe}_2\text{O}_4$	4.180	7.938	38.8

۳-۳ بررسی نتایج حاصل از میکروسکوپ الکترونی روبشی (FESEM):

دستگاه FESEM اندازه نانو بلورها را مشخص میکند. مقادیر اندازه نانو بلورها بر روی شکل ۳ نشان داده شده است که این مقادیر توافق بسیار خوبی با نتایج حاصل از XRD و رابطه شرر موجود در جدول ۲ دارد. اندازه بلورهای به دست آمده از آزمایش FESEM ثابت می کند که توزیع بلورها یکنواخت بوده و دارای ریخت منظمی می باشند. تجمع و کلوخه ای شدن در پاره ای از مناطق ناشی از برهم کنش های مغناطیسی بین بلورها باتوجه به خاصیت مغناطیسی نانو فریت که به طور طبیعی اتفاق می افتد است [۱۱، ۱۲].



شکل ۳ تصویر میکروسکوپ الکترونی برای $\text{Ca}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$

نتیجه گیری:

در این پژوهش نانوبلور $\text{Ca}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ در حضور PVP به روش عملیات گرمایی سنتز شد. با استفاده از الگوی پراش پرتو

[۱] نصری، محمود، نادری، احسان، سایون، الیاس "مطالعه خواص نانو ذرات فریت سنتز شده به روش عملیات گرمایی" (۱۳۹۵) نانومقیاس، شماره یک بهار ۱۳۹۵

- [2]. R Raut, D Barkule, and K Shengule, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **358** (2014) 87.
- [3] D S Mathew and R S Juang, *Chemical Engineering Journal* **129** (2007) 51.
- [4]. S Soibam Phanjoubam, and C. Prakash, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **321** (2009) 2779.
- [5] E De Fazio, P Bercoff, and S Jacobo, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **323** (2011) 2813.
- [6]. M E F Brolo, J M Orozco-Henao, R López-Ruiz, D Muraca, C S B Dias, K R Pirota, and M Knobel, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **397** (2016) 20.
- [7] V Peebles, Goonavar, C Peebles, D Spence, V Parker, C Bell, D Biswal, G T Ramesh, and A K Pradhan, *J. Nanopart. Res.* **16** (2014) 2290.
- [8]. K Maaz, W Khalid, A Mumtaz, S Hasanain, J Liu, and J Duan, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **41** (2009) 593.
- [9] M Rahimi, M Eshraghi, and P kameli, *Ceramics Internationa* **140** (2014) 15569.
- [10] Naseri, M. G., Saion, E. B., Ahangar, H. A., Shaari, A. H., & Hashim, M. (2010). Simple synthesis and characterization of cobalt ferrite nanoparticles by a thermal treatment method. *Journal of Nanomaterials*, 2010, 75.
- [11] Naseri, M., Naderi, E., & Sadrolhosseini, A. R. (2016). Effect of phase transformation on physical and biological properties of PVA/CaFe₂O₄ nanocomposite. *Fibers and Polymers*, 17(10), 1667-1674.
- [12] Naseri, M. (2015). Optical and magnetic properties of monophasic cadmium ferrite (CdFe₂O₄) nanostructure prepared by thermal treatment method. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 392, 107-113.
- [13] V.R Palkar., S.K Malik, *Solid State Commun.* 134 (2005) 783-787

[۱۴] نصری، محمود، نادری، احسان مقایسه خواص فیزیکی نانوکامپوزیتهای $\text{CaFe}_2\text{O}_4/\text{PVA}$ و $\text{CdFe}_2\text{O}_4/\text{PVA}$ (۱۳۹۵) نانومقیاس، شماره چهارم، سال چهارم، زمستان ۱۳۹۶.

- [15] Mahmoud Goodarz Naseri, Synthesis and characterization of zinc ferrite nanoparticles by a thermal treatment method, *Solid State Communications* 151 (2011) 1031-1035.
- [16] Mahmoud Goodarz Naseri, Simple preparation and characterization of nickel ferrite nanocrystals by a thermal treatment method, *Powder Technology* 212 (2011) 80-88.