

فصلنامه علمی

فیزیک کاربردی ایران

سال سیزدهم / پیاپی ۳۵ / فصلنامه / زمستان ۱۴۰۲

- ۷-۱۹ طراحی حسگر پلاسمونیک ساده مبتنی بر حلقه‌های گرافنی در ناحیه تراهرتز
فاطمه مهدی‌زاده و مهدی خزاعی نژاد قره‌تکان
- ۲۰-۳۳ مطالعه عددی گذارهای الکترومغناطیسی در گیراندازی تابشی پروتونی ^{10}B
حسن خلیلی و معصومه دالوند
- ۳۴-۵۶ فوران‌های تاج خورشید و تاثیر آن بر روی اتمسفر زمین
سیما ضیغمی، احسان توایی و هدیه روستایی
- ۵۷-۶۹ شبیه‌سازی ذره‌ای دوبعدی شتاب الکترون در برهم‌کنش پالس لیزری کوتاه با پلاسمای دارای رمپ چگالی در رژیم حبایی
آمنه کارگریان
- ۷۰-۹۲ ویژگی‌های اپتیکی جلبک‌ها در جهت طراحی و ساخت دستگاه سنجش میزان کلروفیل مخازن آبی به روش نشر فلورسانس
اپتیکی
احسان کوشکی و عیسی کهن باغخیراتی
- ۹۳-۱۱۱ بررسی اثر نیمه رساناهای مختلف بر عملکرد باتری رادیوایزوتوپی
نجمه محمدی
- ۱۱۲-۱۲۸ بررسی رفتارهای خطی و غیرخطی نانوذرات اکسید نقره در محلول اکسیدگرافن
سعید میمنت‌آبادی، حمید نجاری و رضا رسولی
- ۱۲۹-۱۴۳ بررسی گذار فاز توپولوژی آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) از نیم‌فلز دیراک به نیم‌فلز وایل با
استفاده از روش ابتدا به ساکن
سمیرا سادات نوری‌زاده و امین‌الله واعظ
- ۱۴۴-۱۶۱ بررسی بهره‌وری سلول خورشیدی پروسکایتی با لایه‌ی فعال معدنی $RbGeBr_3$ و لایه‌های متفاوت جمع‌کننده الکترون و
حفره
شیمای ولی‌زاده، علی اصغر شکری و امیرعباس صبوری دودران
- IX-XVII چکیده مقالات به انگلیسی

به نام خدا



فصلنامه علمی

فنزیک کاربردی ایران

سال سیزدهم، پیاپی ۳۵، زمستان ۱۴۰۲



فصلنامه علمی

فیزیک کاربردی ایران

سال دوازدهم، پیاپی ۳۵، زمستان ۱۴۰۲

صاحب امتیاز: معاونت پژوهشی دانشگاه الزهرا

مدیر مسئول: سعیده شعاری نژاد، دانشیار دانشگاه الزهرا

سرمدبیر: عزیزاله شفیع‌خانی، استاد دانشگاه الزهرا

اعضای هیأت تحریریه:

داود درانیان، فیزیک پلاسما، استاد دانشگاه آزاد اسلامی

محمودرضا روحانی، فیزیک پلاسما، دانشیار دانشگاه الزهرا

فاطمه شجاعی باغبینی، فیزیک گرانش، استاد دانشگاه تهران

عزیزاله شفیع‌خانی، نانوفیزیک، استاد دانشگاه الزهرا

فاطمه شهشهانی، فیزیک لیزر، دانشیار دانشگاه الزهرا

مرتضی فتاحی، ژئوفیزیک، دانشیار دانشگاه تهران

طیب کاکاوند، فیزیک هسته‌ای، استاد دانشگاه بین‌المللی امام خمینی قزوین

عبداله مرتضی‌علی، فیزیک ماده چگال، استاد دانشگاه الزهرا

عزالدین مهاجرانی، فیزیک فوتونیک، استاد دانشگاه شهید بهشتی

ترانه وظیفه‌شناس، فیزیک ماده چگال، دانشیار دانشگاه شهید بهشتی

ناشر: معاونت پژوهشی دانشگاه الزهرا

دبیر اجرایی: مریم امیری‌خواه

ویراستار: فاطمه رستمیان

صفحه‌آرا: مریم امیری‌خواه

ترتیب انتشار: فصلنامه

این نشریه به موجب نامه شماره ۱۳۹۲۰۳ مورخ ۱۳۹۰/۰۷/۲۵ از وزارت علوم، تحقیقات و فناوری مجوز انتشار دارد.

نشانی: تهران، ونک، ده ونک، دانشگاه الزهرا، معاونت پژوهشی، کدپستی ۱۹۹۳۸۹۳۹۷۳

Email: aujap@alzahra.ac.ir

شاپا الکترونیکی: ۲۷۸۳-۱۰۵۱

راهنمای نویسندگان

مجله فیزیک کاربردی ایران، مجله‌ای با داوری همتاست، که بستری برای انتشار دستاوردهای پژوهشی محققان در حوزه فیزیک کاربردی به زبان فارسی ایجاد می‌کند. این مجله از تحقیقات و پژوهش‌های اصیل استقبال می‌کند. مقالات ممکن است از حوزه‌های نظری گرفته تا آزمایش‌های تجربی و شبیه‌سازی‌های سامانه‌های فیزیکی با رهیافت‌های متنوع، یا مشاهدات جدید را گزارش کند.

قبل از تحویل به مجله اطمینان حاصل کنید که:

- (۱) یک نفر نویسنده مسئول معرفی شود.
- (۲) رایانامه و وابستگی سازمانی افراد به صورت دقیق آماده شده باشد.
- (۳) مقاله در نرم‌افزار ورد تایپ شده باشد و حتماً فایل مقاله در قالب ورد ارسال شود.
- (۴) مشخصات نویسندگان و وابستگی سازمانی آنان هم به فارسی و هم به انگلیسی در فایل جداگانه در قالب ورد ارسال شود.

اصول اخلاقی

- (۱) مقاله قبلاً در نشریه دیگری چاپ نشده باشد (مگر به صورت چکیده یا بخشی از سخنرانی یا رساله دانشگاهی) و همزمان با این مجله به مجله دیگری ارسال نشده باشد.
- (۲) نویسندگان تعهد می‌کنند که بعد از چاپ نیز مقاله را به مجله دیگری که فارسی باشد ارسال نکنند.
- (۳) تمامی نویسندگان باید هر رابطه مالی و شخصی را با افراد و سازمان‌های دیگر، که به مقاله ایشان مربوط می‌شود، در نامه همراه به صورت شفاف شرح دهند.
- (۴) تمامی نویسندگان باید در مقاله سهم اساسی داشته باشند و همگی باید از ترتیب و فهرست نویسندگان آگاه باشند.
- (۵) دقت کنید که حذف و اضافه یا تغییر دادن ترتیب نویسندگان و نیز تغییر نویسنده مسئول پس از پذیرش نهایی مجاز نیست.

تدوین مقاله

زبان مقاله

- (۱) متن مقاله به زبان فارسی نوشته می‌شود.
- (۲) چکیده و نام نویسندگان و نشانی ایشان و کلیدواژه‌ها به فارسی و انگلیسی تهیه شود.

حروف چینی و نگارش مقاله

- (۳) مقاله به زبان فارسی و در نرم‌افزار مایکروسافت ورد در صفحه A4 تایپ شود. عنوان مقاله با قلم زر پررنگ ۱۶، چکیده انگلیسی با قلم تایمز ۱۲، اسامی نگارندگان با قلم زر ۱۲ تایپ شود. قلم زر معمولی ۱۲ برای

- متن مقاله به کار برده شود. فواصل خطوط در متن فارسی و انگلیسی ۱ باشد و تمام صفحات شماره گذاری شود. حاشیه‌ها از هر طرف ۲.۵ سانتی متر باشد.
- (۴) کل مقاله بیش از بیست صفحه نباشد.
- (۵) حتماً فایل word مقاله ارسال شود.
- (۶) مشخصات نویسندگان و وابستگی سازمان کامل آنان باید به زبان فارسی و انگلیسی در یک فایل word جداگانه ارسال شود.
- (۷) عنوان مقاله باید کوتاه و رسا باشد.
- (۸) چنانچه ارائه کننده مقاله دانشجو باشد، نام استاد راهنمای دانشجو نیز باید ذکر شود.
- (۹) چکیده فارسی و انگلیسی مقاله باید شامل مطالب مهم یافته‌های تحقیق باشد و از ۲۵۰ کلمه تجاوز نکند. ضروری است نویسندگان واژگان کلیدی (سه تا پنج واژه) را در انتهای چکیده فارسی و انگلیسی درج نمایند.
- (۱۰) متن مقاله به ترتیب باید شامل بخش‌های مقدمه، روش کار (مواد، دستگاه‌ها و روش‌ها)، نتایج، بحث و نتیجه‌گیری، منابع و تقدیر و تشکر باشد.
- (۱۱) بهتر است برای بیان اوزان از سیستم متریک استفاده شود. در غیر این صورت واحدها در آغاز مقاله بیاید و با حروف نوشته شود.
- (۱۲) استفاده از جدول وقتی مجاز است که درج اطلاعات به دست آمده در متن به راحتی میسر نباشد. عنوان جدول در بالای جدول نوشته شده و گویا باشد، به نحوی که نیاز به مراجعه به متن مقاله نباشد، اختصارات و علائم متن جدول باید در زیرنویس مشخص شود.
- (۱۳) عکس‌ها باید اصل و ترجیحاً سیاه و سفید باشد. توصیه می‌شود عکس‌های میکروسکوپ الکترونی به طور مجزا به صورت JPG تهیه و ارسال گردد. تمام شکل‌ها باید دارای عنوان باشند و به ترتیب شماره گذاری در متن ذکر شوند.
- (۱۴) کلیه جدول‌ها و نمودارها باید رسم شود و عکس نباشد.
- (۱۵) بخش تقدیر و تشکر به انتهای مقاله اضافه شود، تقدیر لزوماً از حامی مالی نیست.

منابع:

- (۱۶) منابع در انتهای مقاله با قلم تایمز ۹ مطابق دستور کار زیر به روش APA آورده شوند:
- **کتاب:** چگونگی آوردن کتاب‌ها در بخش مراجع به ترتیب زیر است:
نام خانوادگی و نام نویسنده، عنوان کتاب و ناشر آن، محل نشر، نوبت چاپ، شماره صفحه و سال انتشار
- Crano J.C. and Guglielmetti R.J., *Organic Photochromic and Thermochromic Compounds: Main Photochromic Families*, 1st ed. Kluwer Academic, Boston, **1**, 1-9, 2002.
- *Industrial Biofouling: Detection, Prevention and Control*, Walker J., Surman S. and Jass J. (Eds.), John Wiley and Sons, New York, 57-63, 2000.

• **مقاله‌ها:** نحوه آمدن مقاله‌ها به ترتیب زیر است:

نام خانوادگی و نام نویسنده، عنوان مقاله، نام مجله، شماره جلد، صفحه‌های ابتدایی و انتهایی مقاله، سال انتشار و

کد DOI.

- Keyvan Rad J., Mahdavian A.R., Salehi-Mobarakeh H., and Abdollahi A., FRET Phenomenon in Photoreversible Dual-Color Fluorescent Polymeric Nanoparticles Based on Azocarbazole/Spiropyran Derivatives, *Macromolecules*, **49**, 141-152, 2016, <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.5b02401>.

• **مجموعه مقالات**

- Khoubi-Arani Z. and Mohammadi N., Thermodynamically Controlled Assemblies of Hard/Soft Polymeric Nanoparticles for Mechanical Waves and Shock Absorption, *Proceeding of 12th International Seminar on Polymer Science and Technology*, Islamic Azad University, Tehran, 2-5 November, 2016.

• **پایان نامه‌ها**

- Doddapaneni V., The Polymer-Based Nanocomposites for Electrical Switching Applications, PhD Thesis, School of Engineering Sciences, KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden, 2017.

• **ثبت اختراع**

- Chin D.A. and Irvin D.J., Actuator Device Utilizing a Conductive Polymer Gel, US Pat.6,685,442, 2004.

• **تارنما**

- Mauritz K., Sol-gel , <http://www.psrc.usm.edu/mauritz/solgel.htm>, Available in 13 February 2005.

• **استانداردها**

- Standard Test Method for Solidification Point of BPA, Annual Book of ASTM Standard, **06.04**, D 4493-94, 2000.

منابع غیرانگلیسی نیز باید به انگلیسی ترجمه شود و زبان اصلی منبع در پایان هر منبع داخل پرانتز ذکر شود؛ برای مثال برای منابع فارسی ترجمه شده به انگلیسی در پایان عبارت (in Persian) در پرانتز درج شود.

فهرست مطالب

۷-۱۹	طراحی حسگر پلاسمونیک ساده مبتنی بر حلقه‌های گرافنی در ناحیه تراهرتز فاطمه مهدی‌زاده و مهدی خزاعی نژاد قره‌تکان
۲۰-۳۳	مطالعه عددی گذارهای الکترومغناطیسی در گیراندازی تابشی پروتونی 10B حسن خلیلی و معصومه دالوند
۳۴-۵۶	فوران‌های تاج خورشید و تاثیر آن بر روی اتمسفر زمین سیما ضیغمی، احسان توایی و هدیه روستایی
۵۷-۶۹	شبیه‌سازی ذره‌ای دوبعدی شتاب الکترون در برهم‌کنش پالس لیزری کوتاه با پلاسما دارای رمپ چگالی در رژیم حبایی آمنه کارگریان
۷۰-۹۲	ویژگی‌های اپتیکی جلبک‌ها در جهت طراحی و ساخت دستگاه سنجش میزان کلروفیل مخازن آبی به روش نشر فلورسانس اپتیکی احسان کوشکی و عیسی کهن باغخیراتی
۹۳-۱۱۱	بررسی اثر نیمه رساناهای مختلف بر عملکرد باتری رادیوایزوتوپی نجمه محمدی
۱۱۲-۱۲۸	بررسی رفتارهای خطی و غیرخطی نانوذرات اکسید نقره در محلول اکسیدگرافن سعید میمنت‌آبادی، حمید نجاری و رضا رسولی
۱۲۹-۱۴۳	بررسی گذار فاز توپولوژی آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) از نیم‌فلز دی‌راک به نیم‌فلز وایل با استفاده از روش ابتدا به ساکن سمیرا سادات نوری‌زاده و امین‌الله واعظ
۱۴۴-۱۶۱	بررسی بهره‌وری سلول خورشیدی پروسکایتی با لایه‌ی فعال معدنی $RbGeBr_3$ و لایه‌های متفاوت جمع‌کننده الکترون و حفره شیمایلی‌زاده، علی‌اصغر شکری و امیرعباس صیوری دودران
IX-XVII	چکیده مقالات به انگلیسی

طراحی حسگر پلاسمونیک ساده مبتنی بر حلقه‌های گرافنی در ناحیه تراهرتز^۱

فاطمه مهدی‌زاده^۲ و مهدی خزاعی نژاد قره تکان^{۳*}

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۱/۲۶

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۰۵/۰۹

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۶/۱۳

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال سیزدهم، پیاپی ۳۵، زمستان ۱۴۰۲

صص ۷ - ۱۹

چکیده:

در دو دهه اخیر طراحی حسگرهای اپتیکی در ناحیه تراهرتز جهت کاربرد در علوم زیستی و پزشکی مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است. در کار حاضر، طراحی یک حسگر اپتیکی به کمک ساختارهای دو بعدی و دوره‌ای از حلقه‌های گرافنی که بر روی یک زیرلایه دی الکتریک قرار گرفته پیشنهاد شده است. حسگر ضریب شکست پیشنهادی بر اساس پدیده تشدید پلاسمون سطحی عمل می‌کند. در ابتدا با تغییر پارامترهای هندسی ساختار، پارامترهای بهینه جهت عملکرد حسگر استخراج شده است. سپس میزان حساسیت حسگر بر اساس تغییر ضریب شکست محیط اطراف محاسبه شده است. میزان حساسیت حسگر پیشنهادی برابر با $11/2 \mu m/RIU$ است. مقدار حساسیت حسگر پیشنهادی با وجود سادگی ساختار هندسی آن از حسگرهای با ساختار مشابه بیشتر است. همچنین با افزایش ضریب شکست محیط سنجش کیفیت عملکرد حسگر تا حدودی کاهش می‌یابد. با مقیاس‌بندی مناسب حسگر پیشنهادی می‌توان از آن جهت آشکارسازی آلودگی‌های موجود در هوای اطراف حسگر استفاده کرد. در کار پیش‌رو از بسته نرم افزاری لومریکال که مبتنی بر روش تفاضل‌های متناهی در بازه زمانی عمل می‌کند، برای رسیدن به این هدف استفاده شده است.

واژگان کلیدی: حسگر پلاسمونیک، مواد دوبعدی، روش تفاضل‌های محدود بازه زمان، حساسیت، ضریب شایستگی.

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.43454.1319

^۲ دانش آموخته کارشناسی ارشد گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران. Email: mehdizadeh304@gmail.com

^۳ استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران. (نویسنده مسئول). Email: Khazaeinezhad@um.ac.ir



۱. مقدمه

پلاسمونیک بخش عمده‌ای از حوزه نانو فوتونیک را شامل می‌شود و در آن در جستجوی راهکارهایی جهت محصورسازی امواج الکترومغناطیسی در ابعادی برابر و یا حتی کوچک‌تر از طول موج میدان ورودی هستند. موضوع علم پلاسمونیک بررسی برهم‌کنش بین امواج الکترومغناطیسی و الکترون‌های رسانش در سطوح مشترک فلز-دی‌الکتریک یا در نزدیکی نانو ساختارهای فلزی کوچک است [۱-۳]. این برهم‌کنش‌ها منجر به تقویت میدان نوری در ناحیه پراش میدان نزدیک و در ابعاد زیر طول موجی می‌شود. براساس الگوی پلاسمایی برای فلزات، با قرار گرفتن فلز در معرض میدان الکترومغناطیسی، الکترون‌های آزاد درون فلز در پاسخ به میدان الکتریکی متناوب خارجی شروع به نوسانات دسته‌جمعی می‌کنند. این حرکت نوسانی، نوسانات پلاسمای نامیده می‌شود. به هر کوانتوم از این نوسانات، پلاسمون گویند. اگر نوسانات درون فلز ایجاد شود، به پلاسمون ایجاد شده پلاسمون حجمی و اگر نوسانات در نزدیکی سطح خارجی نانو ذرات فلزی و یا فصل مشترک فلز-دی‌الکتریک رخ دهد به آن پلاسمون سطحی می‌گویند. به عبارتی منظور از پلاسمون سطحی، نوسان دسته‌جمعی الکترون‌های رسانش فلزی در فصل مشترک بین فلز و دی‌الکتریک است [۱-۳]. پلاسمون‌های سطحی را به دو دسته‌ی پلاریتون پلاسمون‌های سطحی (SPP) و پلاسمون‌های سطحی جایگزیده (LSP) دسته‌بندی می‌کنند. در پلاریتون پلاسمون‌های سطحی، نوسانات تجمعی الکترون‌های رسانش فلزی به تقلید از میدان ورودی در فصل مشترک فلز-دی‌الکتریک منتشر می‌شوند. در حالی که در پلاسمون‌های سطحی جایگزیده نوسانات تجمعی الکترون‌های رسانش امکان انتشار ندارند و اغلب در محل گوشه‌ها در فصل مشترک یا در نزدیکی سطح خارجی نانو ذرات فلزی محدود شده‌اند. فرکانس تشدید پلاسمون‌های سطحی به جنس فلز و دی‌الکتریک و پارامترهای هندسی ساختار مانند شکل، اندازه و دوره تناوب ساختار بستگی دارد. اگر فرکانس نور فرودی بر فرکانس تشدید پلاسمون‌های سطحی برابر باشد، تشدید پلاسمون سطحی رخ می‌دهد. امروزه از پدیده تشدید پلاسمون‌های سطحی در زمینه‌هایی چون ساخت سلول-های خورشیدی، حسگرهای اپتیکی و لیتوگرافی با دقت بالا استفاده می‌شود [۱-۳].

حسگرهای اپتیکی، دستگاهی است که ورودی تحت اندازه‌گیری چون دما، فشار و ضریب شکست محیط اطراف را به خروجی دیگری بر حسب یکی از مشخصه‌های نوری مانند فاز، میدان مغناطیسی، قطبش، طول موج و زاویه جفت‌شدگی در خروجی تبدیل می‌نماید [۴-۶]. حسگرهای اپتیکی در علوم زیستی جهت آشکارسازی باکتری‌های مختلف، ویروس‌ها، پروتئین‌ها، گلوکز، اسید اوریک و سلول‌های سرطانی بسیار کاربرد دارند. این حسگرها بر اساس روش‌های مختلفی از جمله تداخل،



جذب، پراکندگی، تشدید، فلورسانس و انعکاس نور ورودی و در بسترهای مختلفی از قبیل تشدیدگرهای اپتیکی، فیبرهای نوری و بلورهای فوتونی طراحی می‌شوند. یک دسته مهم از حسگرهای اپتیکی جهت اندازه‌گیری تغییرات ضریب شکست محیط اطراف، حسگرهایی هستند که بر اساس پدیده تشدید پلاسمون‌های سطحی عمل می‌کنند. در این حسگرها با تغییر ضریب شکست محیط اطراف فرکانس تشدید پلاسمون‌های سطحی در طیف عبور، انعکاس و یا جذب ساختار تغییر می‌کند [۷ و ۸]. در حقیقت، از روی میزان جابه‌جایی فرکانس تشدید ساختار می‌توان به میزان تغییرات ضریب شکست محیط اطراف و نوع عامل خارجی پی برد. از مزایای حسگرهای مبتنی بر تشدید پلاسمون سطح می‌توان به سرعت اندازه‌گیری، دقت و حساسیت بالا، هزینه پایین آماده‌سازی و تولید، دقیق بودن نتایج، انتقال سریع داده‌ها اشاره کرد [۶-۴].

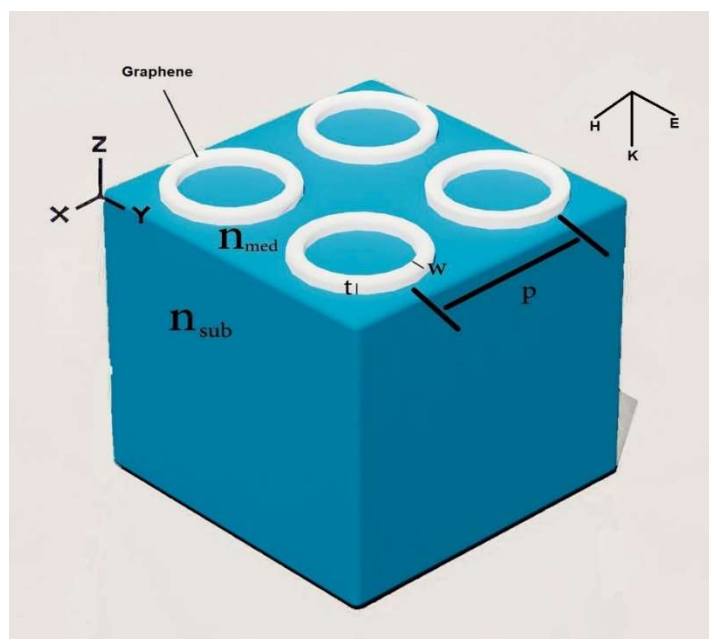
مواد دو بعدی، موادی هستند که تنها یک بعد آن‌ها در مقیاس نانو می‌باشد. با معرفی گرافن در سال ۲۰۰۴ به عنوان نازک‌ترین نانوساختار دو بعدی، مطالعات بسیاری روی نانو مواد دو بعدی به دلیل ویژگی‌های غیرطبیعی آن‌ها صورت پذیرفته است. مواد دو بعدی، به دلیل برخورداری از ویژگی‌های فیزیکی قابل توجه با ویژگی‌های انعطاف پذیری، همسانی و چند کاربردی بودن مورد توجه بسیاری از افراد قرار گرفته است [۹]. در سال‌های کنونی، برهم‌کنش موثر نور و ماده، به عنوان یک مسئله اساسی برای کاربرد یک ماده، توجه گسترده‌ای را در نانو فوتونیک و اپتو الکترونیک به ویژه برای مواد دو بعدی با ضخامت اتمی چون گرافن، فلزات واسطه دی‌کالکوژن و نیتريد بور شش ضلعی جلب کرده است [۱۰]. در میان مواد دو بعدی، گرافن با شکاف انرژی صفر می‌تواند با نور در یک طیف گسترده از ناحیه فرابنفش تا تراهرتز برهم‌کنش داشته باشد. گرافن بدلیل ویژگی‌های نوری و الکترونیکی منحصر به فرد، توجه زیادی را در پژوهش‌های الکترونیکی و فوتونیکی به خود اختصاص داده است. از ویژگی‌های گرافن می‌توان به تنظیم اختصاص اپتیکی و الکترونیکی آن با استفاده از عوامل خارجی از جمله اعمال میدان الکتریکی، میدان مغناطیسی، تنش و کرنش مکانیکی اشاره کرد که منجر به تغییر رسانندگی الکتریکی موثر سطحی گرافن می‌شود [۱۴-۱۱].

در این مقاله، یک حسگر ضریب شکست پلاسمونیک مبتنی بر آرایه‌ای از حلقه‌های گرافنی طراحی و پیشنهاد می‌شود. با تغییر پارامترهای هندسی ساختار، پارامترهای بهینه جهت عملکرد حسگر استخراج شده است. در نهایت میزان حساسیت حسگر بر حسب تغییر ضریب شکست محیط اطراف بررسی شده است. در مقایسه با ساختارهای قبلی، ساختار ارائه شده در عین سادگی دارای حساسیت بیشتری است. در این پژوهش از نرم افزار لومریکال برای بررسی عملکرد ساختار استفاده شده است.

این نرم افزار بر اساس گسسته سازی معادلات ماکسول در حوزه زمان و مکان مبتنی بر روش تفاضل های محدود در بازه ی زمان (FDTD) عمل می کند [۱۵].

۲. ساختار و مشخصات حسگر

در شکل (۱)، ساختار هندسی حسگر مورد مطالعه ترسیم شده است. این ساختار شامل آرایه ای از حلقه های گرافنی است که بر روی یک بستر با ضریب شکست n_{sub} و یک محیط سنجش با ضریب شکست n_{med} قرار گرفته اند. ارتفاع بستر را به اندازه کافی بزرگ در نظر گرفته و آشکارساز جهت اندازه گیری طیف عبور ساختار را در داخل بستر قرار می دهیم. حلقه هایی از جنس گرافن با دوره تناوب ثابت P را روی بستر قرار می دهیم. پهنای حلقه های گرافنی W و ضخامت آنها t است.



شکل ۱ طرحواره ای از حسگر مورد بررسی شامل آرایه ای متناوب با دوره تناوب P از حلقه های گرافنی با پهنای W و ضخامت t بر روی یک بستر با ضریب شکست n_{sub} در یک محیط سنجش با ضریب شکست n_{med} .



رسانایی سطحی گرافن را می‌توان از راه رابطه کوپو در منبع [۱۶] بدست آورد. این رابطه شامل سهم انتقال درون نواری و بین نواری است. در محدوده فرکانسی پایین‌تر از تراهرتز، انتقال بین نواری و سهم انتشار فونون‌های نوری بسیار کم است و اثرات آن‌ها را می‌توان نادیده گرفت. افزون بر این، در فرآیند محاسبه، دمای T در 300 کلوین تنظیم می‌شود. با هدایت چگالی حامل‌های بار در گرافن می‌توان شرط $E_F \gg K_B T$ را برآورده کرد. به صورت کلی، بر اساس با اصل حذف پائولی، رسانای سطحی گرافن را می‌توان به عنوان یک حالت ویژه از الگوی درون نواری درود به صورت زیر تقریب زد [۱۶ و ۱۷]:

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2 E_F}{\pi \hbar^2} \frac{1}{\omega + i\tau^{-1}} \quad (1)$$

در رابطه بالا، e بار الکترون، ω فرکانس زاویه‌ای موج فرودی و \hbar ثابت پلانک کاهش یافته است. پارامترهای زمان آرامش (τ) و انرژی فرمی (E_F) را می‌توان از روابط زیر بدست آورد:

$$\tau = \mu \hbar \sqrt{\pi |n_g|} / e v_F \quad (2)$$

$$E_F = \hbar v_F \sqrt{\pi |n_g|} \quad (3)$$

که در آن، n_g چگالی الکترونی گرافن، v_F سرعت فرمی و μ میزان تحرک‌پذیری حامل‌های بار در گرافن است. مقدار این پارامترها در منبع [۱۶] بیان شده است. گذردهی الکتریکی گرافن بر اساس رابطه زیر با رسانندگی سطحی و ضخامت حلقه‌های گرافنی ارتباط دارد [۱۸]:

$$\varepsilon_g(\omega) = 1 + \frac{i\sigma(\omega)}{\varepsilon_0 \omega t} \quad (4)$$

در این مقاله پاسخ طیفی حسگر طراحی شده مبتنی بر حلقه‌های گرافنی را با استفاده از روش $FDTD$ محاسبه می‌کنیم. برای شبیه‌سازی از نرم افزار لومریکال استفاده شده است. در فرآیند شبیه‌سازی با استفاده از رابطه پاشندگی بالا برای لایه‌های گرافن، ابتدا ضریب شکست و ضریب خاموشی گرافن را در طول موج‌های مختلف در ناحیه تراهرتز بدست آورده و به عنوان یک ماده جدید در نرم افزار لومریکال تعریف شده است. در تمام فرآیند محاسبه، شرایط مرزی در جهت‌های x, y متناوب انتخاب شده است. در راستای z شرط مرزی لایه کاملاً هم‌سو (PML) بکار گرفته شده است. موج فرودی در جهت z منتشر می‌شود. در تمامی شبیه‌سازی‌ها از موج صفحه‌ای تخت با قطبش در راستای محور y به عنوان منبع نور استفاده می‌کنیم [۷].



عملکرد یک حسگر اپتیکی با دو معیار حساسیت (S) و ضریب شایستگی (FOM) که به صورت زیر تعریف می‌شوند، سنجیده می‌شود [۱۹]:

$$S = \frac{\Delta\lambda}{\Delta n} \quad (5)$$

$$FOM = \frac{S}{FWHM} \quad (6)$$

بر اساس رابطه (۵)، حساسیت حسگر برابر با میزان جابه‌جایی طول موج تشدید ساختار به ازای واحد تغییرات ضریب شکست محیط سنجش است. در رابطه (۶)، پارامتر FWHM مقدار نیم‌پهنای قله (و یا دره) در نصف مقدار بیشینه (کمینه) در طیف عبور ساختار است. بنابراین شایستگی حسگر از تقسیم میزان حساسیت حسگر به پارامتر FWHM بدست می‌آید.

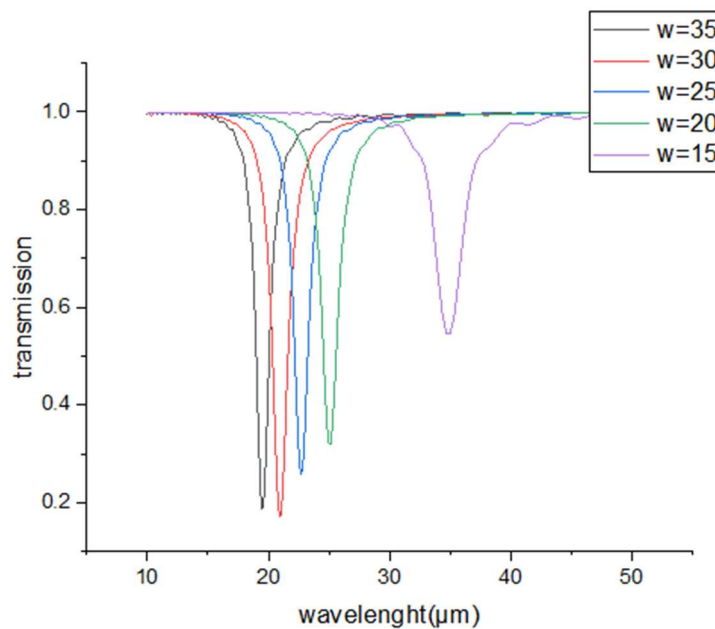
۳. نتایج و بحث

در این مقاله، از یک آرایه چهارتایی با دوره تناوب $p=300\text{ nm}$ از تک حلقه‌های گرافنی بر اساس شکل (۱) استفاده شده است. این سلول واحد گرافنی بر روی یک بستر با ضریب شکست $1/45$ و در محیط سنجش خلا با ضریب شکست $n_{sub}=1$ قرار دارد. با فرض اینکه چگالی حامل‌های بار در گرافن $n_g = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ و ضخامت حلقه‌ها $t=1\text{ nm}$ باشد، تاثیر پارامترهای هندسی مختلف در طیف عبور ساختار مورد بررسی قرار گرفته است. یکی از پارامترهای اثرگذار، شعاع داخلی حلقه‌ها و پهنای حلقه‌ها است. در شکل (۲) طیف عبور ساختار به ازای پهنای مختلف حلقه‌های گرافنی نمایش داده شده است. همان‌طور که در شکل (۲) مشاهده می‌شود، طیف عبور ساختار به ازای پهنای مختلف شامل یک دره کمابیش باریک است. با تغییر پهنای حلقه‌ها متوجه می‌شویم که آرایه‌های گرافنی طیف تشدید وسیعی دارند به گونه‌ای که با تغییر این پارامتر هندسی طول موج تشدید از $18/9$ به $34/8$ میکرومتر افزایش می‌یابد. همچنین مقدار FWHM در این نمودارها برای پهنای 15 ، 20 ، 25 ، 30 و 35 نانومتر به ترتیب برابر با $2/46$ ، $2/19$ ، $1/86$ ، $1/96$ و $1/62$ میکرومتر است. هنگامی که پهنای حلقه‌های گرافنی (W) از 15 به 35 نانومتر افزایش می‌یابد، فاصله بین حلقه‌ها کاهش می‌یابد و در نتیجه اثر جفت‌شدگی بین حلقه‌ها افزایش می‌یابد و منجر به افزایش عمق دره‌ها در طیف عبور حسگر می‌شود. افزون بر این، با افزایش W طول موج تشدید نیز افزایش می‌یابد و بعد از 30 نانومتر با کاهش ارتفاع دره در طیف عبور روبرو می‌شویم، در نتیجه در پهنای 30 نانومتر با اختلاف جزئی دره ایجاد شده در طیف عبور عمیق‌تر است.

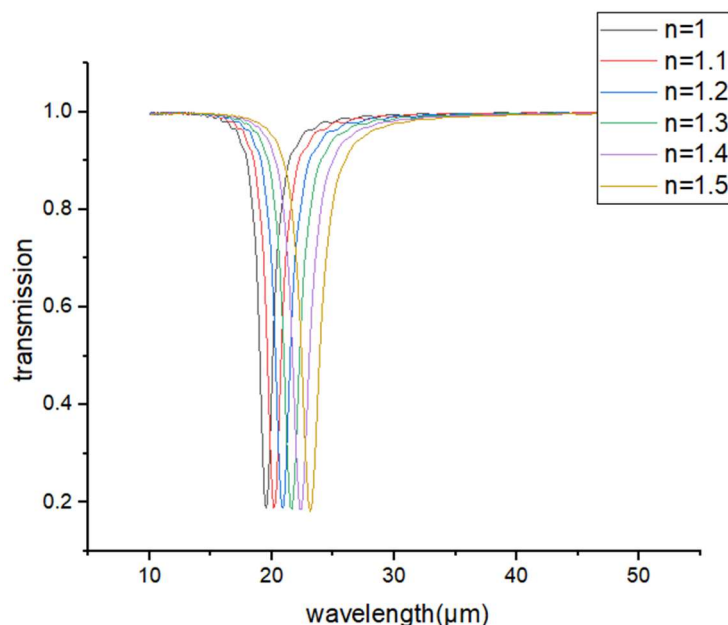


در ادامه طیف عبور حسگر پیشنهادی به ازای تغییر ضریب شکست محیط سنجش بررسی می‌شود. مطابق شکل (۳)، حسگر نسبت به افزایش ضریب شکست محیط اطراف تغییرات مثبتی را از خود نشان می‌دهد و با افزایش ضریب شکست محیط اطراف، طول موج تشدید ساختار به سمت طول موج‌های بالاتر جابه‌جا می‌شوند. بر اساس نتایج بالا تاثیر تغییر ضریب شکست محیط سنجش بر طول موج تشدید ساختار پلاسمونی مورد مطالعه مشهود است. همان طور که می‌دانیم طول موج تشدید در یک ساختار دو بعدی دوره ای از رابطه زیر تبعیت می‌کند [۱]:

$$\lambda_{SPP}(n, m) = \frac{p}{\sqrt{n^2 + m^2}} \sqrt{\frac{\epsilon_d \epsilon_g(\lambda)}{\epsilon_d + \epsilon_g(\lambda)}} \quad (7)$$



شکل ۲ طیف عبور حسگر پیشنهادی به ازای پهنای متفاوت حلقه‌های گرافنی با ضریب شکست ثابت 1 برای محیط سنجش.

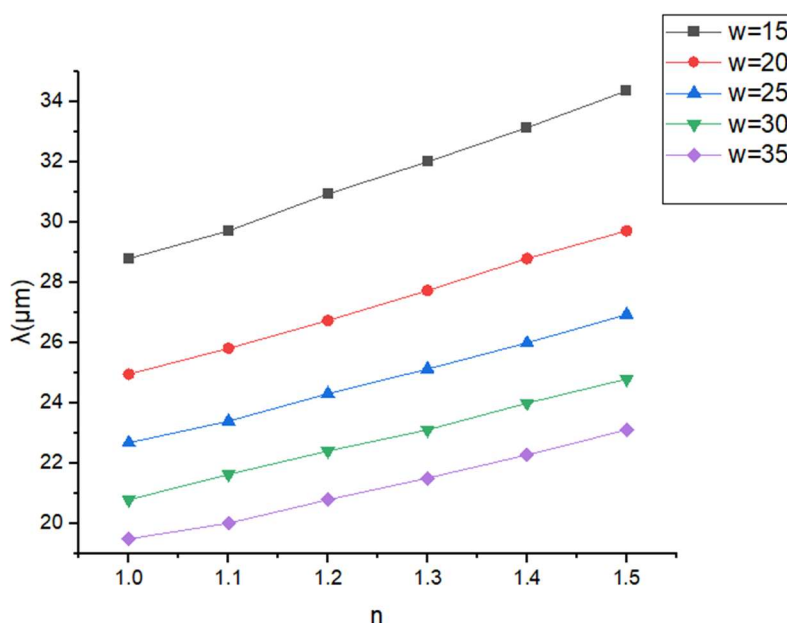


شکل ۳ طیف عبور حسگر پیشنهادی بر حسب تغییر ضریب شکست محیط مورد سنجش به ازای $w = 35 \text{ nm}$.

در رابطه بالا، p دوره تناوب ساختار، (m, n) شماره مد، ϵ_g گذردهی الکتریکی گرافن و ϵ_d ثابت گذردهی الکتریکی محیط دی الکتریک است. بر اساس این رابطه، جابه جایی طول موج تشدید مدهای پلاسمون سطحی با تغییر ضریب شکست و ثابت گذردهی الکتریکی محیط اطراف قابل انتظار است. نیاز به یاد آوری است که در ساختار مورد بررسی در ناحیه تر اهرتر یک مد تشدید پلاسمونی مشاهده می شود. در این مد با توجه به نتایج بدست آمده از نمودار شکل (۳) با افزایش ضریب شکست محیط اطراف طول موج تشدید پلاسمون سطحی افزایش می یابد.

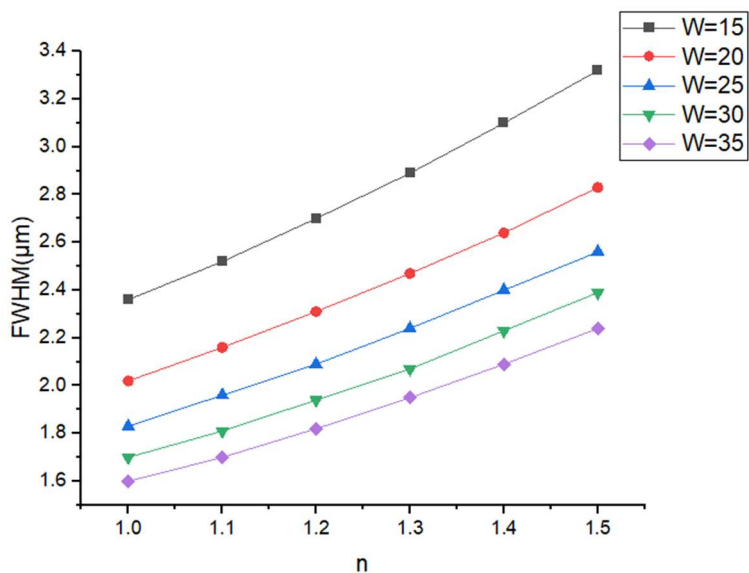
جهت انتخاب بهینه پارامترهای هندسی در شکل (۴) نمودار تغییرات طول موج تشدید ساختار بر حسب تغییر ضریب شکست محیط اطراف به ازای پهناهای مختلف حلقه های گرافنی رسم شده است. همان طور که در شکل (۴) مشاهده می شود، تغییر طول موج تشدید بر حسب ضریب شکست محیط سنجش یک رابطه خطی را نشان می دهد. بر اساس رابطه (۵)، شیب نمودار بالا میزان حساسیت (S) حسگر طراحی شده را نشان می دهد. با برازش خطی نمودارها و محاسبه شیب آن ها مشاهده می کنیم که با کاهش پهنای حلقه های گرافنی از ۳۵ به ۱۵ نانومتر میزان حساسیت حسگر پیشنهادی از $7.3 \mu\text{m}/\text{RIU}$ به $11.2 \mu\text{m}/\text{RIU}$ افزایش می یابد.



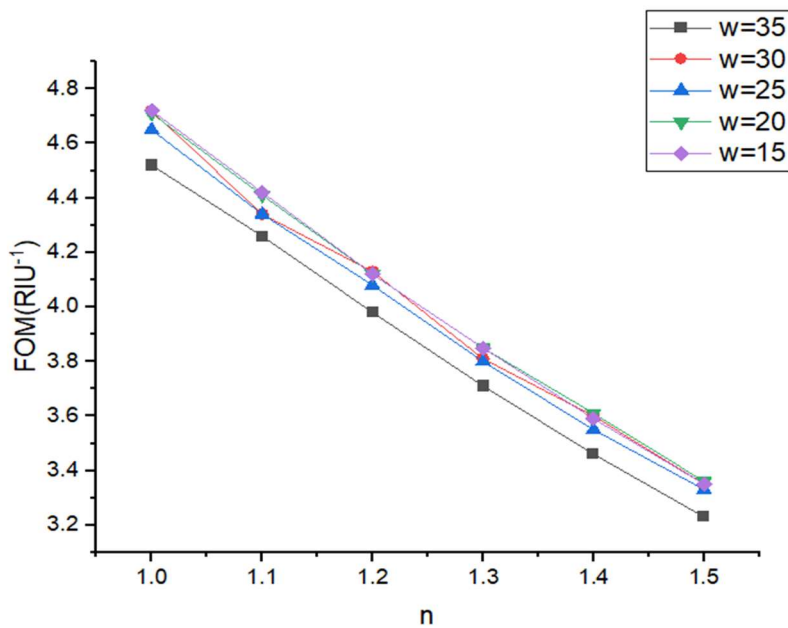


شکل ۴ بررسی طول موج تشدید حسگر پیشنهادی بر حسب تغییرات ضریب شکست محیط اطراف به ازای پهناهای مختلف حلقه‌های گرافنی.

یکی دیگر از پارامترهای اساسی در سنجش عملکرد یک حسگر کمیت ضریب شایستگی حسگر است. در شکل‌های (۵) و (۶) پارامترهای FWHM و FOM بر حسب تغییرات ضریب شکست محیط سنجش به ازای پهناهای مختلف حلقه‌های گرافنی ترسیم شده‌اند. نتایج حاصل از تحلیل نمودارهای رسم شده در شکل‌های (۵) و (۶) نشان می‌دهد که افزایش ضریب شکست محیط اطراف سبب پهن شدن دره‌ها در طیف عبور و کاهش ضریب شایستگی حسگر طراحی شده می‌شود. بنابراین افزایش ضریب شکست محیط اطراف تا حدودی عملکرد حسگر را تحت تاثیر قرار می‌دهد. همچنین بر اساس این نمودارها کماکان هر چه پهناهای حلقه‌های گرافنی کمتر باشد، ضریب شایستگی و کیفیت عملکرد حسگر افزایش می‌یابد.



شکل ۵ میزان تغییرات FWHM حسگر پیشنهادی بر حسب تغییرات ضریب شکست محیط اطراف به ازای پهناهای مختلف حلقه‌های گرافنی.



شکل ۶ میزان تغییرات FOM حسگر پیشنهادی بر حسب تغییرات ضریب شکست محیط اطراف به ازای پهناهای مختلف حلقه‌های گرافنی.



بر اساس نتایج بدست آمده حسگر پیشنهادی دارای حساسیت بالا و ضریب شایستگی بزرگ در ضریب شکست‌های کوچک محیط اطراف می‌باشد. بنابراین از این حسگر می‌توان جهت سنجش آلودگی‌های ایجاد شده در هوای آزاد استفاده نمود. آلودگی‌های ایجاد شده می‌تواند به میزان جزئی ضریب شکست محیط اطراف ساختار را تحت تاثیر قرار دهد. تغییرات جزئی در ضریب شکست محیط اطراف منجر به جابه‌جایی قابل توجه در فرکانس تشدید در طیف عبور حسگر می‌شود. با مدرج کردن مناسب حسگر بر اساس عوامل زیست‌شناختی شناخته شده در هوای آزاد اطراف ساختار می‌توان پی به نوع آلودگی ایجاد شده برد.

در انتها و در جدول (۱) میزان حساسیت حسگر طراحی شده در این پژوهش با حسگرهای گرافنی مشابه در منابع [۲۰] و [۲۱] مقایسه شده است. با مقایسه نتایج حسگر مورد بررسی و حسگرهای مشابه آن در مقالات نشان داده شده در جدول (۱)، افزایش میزان حساسیت ساختار قابل مشاهده است.

جدول ۱ مقایسه میزان حساسیت ساختار مورد مطالعه در این پژوهش و ساختارهای مشابه

منبع	حساسیت حسگر ($\mu m/RIU$)
[۲۰]	۴/۵
[۲۱]	۵/۲۰
ساختار در این پژوهش	۱۱/۲

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله، یک حسگر ضریب شکست مبتنی بر ساختارهای تشدید پلاسمون سطحی در ناحیه تراهرتز طراحی شده است. ساختار مورد نظر شامل آرایه‌ای از حلقه‌های گرافنی است که بر روی یک بستر با ضریب شکست ثابت ۱/۴۵ قرار گرفته‌اند. با تغییر پارامترهای هندسی ساختار، پارامترهای بهینه جهت عملکرد حسگر استخراج شده است. این حسگر را در داخل یک محیط سنجش با ضریب شکست متغیر قرار داده و میزان حساسیت حسگر بر حسب تغییر ضریب شکست محیط اطراف بررسی شده است. در مقایسه با ساختارهای پیشین، ساختار ارائه شده در عین سادگی دارای حساسیت بیشتری است. همچنین افزایش ضریب شکست محیط اطراف سبب افزایش پهنای نمودارها در طیف عبور و کاهش پارامتر ضریب شایستگی حسگر می‌شود. با توجه به نتایج بدست آمده باور داریم که حسگر طراحی شده دارای توانایی کاربرد گسترده در زمینه زیستی و شناسایی آلودگی‌های موجود در هوای آزاد اطرافش می‌باشد.

۵. تقدیر و تشکر

از مسئولین مجله فیزیک کاربردی ایران تقدیر و تشکر می‌شود. از داوران گرامی نیز به خاطر ارائه رهنمودهای ارزشمند سپاس گزاریم.

منابع

- [1] Oliveira L. C., Lima A. M. N., Thirstrup C., Neff H. F., "Surface plasmon resonance sensors: a materials guide to design and optimization", *Springer*, New York, 1st ed, 11-25, 2015.
- [2] Maier S. A., "Plasmonics: Fundamentals and Applications Springer", *Springer*, New York, 1st ed, 1-88, 2007.
- [3] Sovizi M. and Aliannezhadi, M., "Localized surface plasmon resonance (LSPR) of coupled metal nanospheres in longitudinal, transverse and three-dimensional coupling configurations", *Optik* **252**, p.168518, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.168518>.
- [4] Homola J., Yee S. S., Gauglitz G., "Surface plasmon resonance sensors", *Sensors and actuators B: Chemical* **54**, 3-15, 1999. [https://doi.org/10.1016/S0925-4005\(98\)00321-9](https://doi.org/10.1016/S0925-4005(98)00321-9).
- [5] Danyiyal W. M. E. M. M., Wing Fen Y., Fauzi N. I. M., Hashim H. S., Ramdzan N. S., Omar N. A. S. Omar, "Recent advances in surface plasmon resonance optical sensors for potential application in environmental monitoring", *Sens. Mater* **32(12)**, 4191-4200, 2020. <https://doi.org/10.18494/SAM.2020.3204>.
- [6] Ogawa S, Fukushima S and Shimatani M, "Graphene Plasmonics in Sensor Applications: A Review", *Sensors* **20**, 3563, 2020. <https://doi.org/10.3390/s20123563>.
- [7] Sovizi M. and Aliannezhadi, M., "Design and simulation of high-sensitivity refractometric sensors based on defect modes in one-dimensional ternary dispersive photonic crystal", *JOSA B* **36(12)**, pp.3450-3456, 2019. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.36.003450>.
- [8] Aliannezhadi M., Mozaffari M.H. and Amirjan, F., "Optofluidic R6G microbubble DBR laser: A miniaturized device for highly sensitive lab-on-a-chip biosensing", *Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications* **53**, p.101108, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.photonics.2023.101108>.
- [9] Zhaohe D., Luqi L., Zhong Z., "Strain engineering of 2D materials: issues and opportunities at the interface", *Advanced Materials* **31(45)**, 1805417, 2019. <https://doi.org/10.1002/adma.201805417>.
- [10] Glavin N. R., Rao R., Varshney V., Bianco E., Apte A., Roy A, Ringe E, Ajayan P., "Emerging applications of elemental 2D materials", *Advanced Materials* **32(7)**, 1904302, 2020. <https://doi.org/10.1002/adma.201904302>.
- [11] Geim A. K., and K. S. Novoselov, "The Rise of Graphene", *Nature Materials* **6**, 3-183, 2007. <https://doi.org/10.1038/nmat1849>.
- [12] Katsnelson M. I., "Graphene: Carbon in Two Dimensions", *Materials Today* **10**, 1-20, 2007, [https://doi.org/10.1016/S1369-7021\(06\)71788-6](https://doi.org/10.1016/S1369-7021(06)71788-6).
- [13] Pang S., Hernandez Y., Feng X., Müllen K., "Graphene as transparent electrode material for organic electronics", *Adv. Mater* **23**, 2779-2795, 2011. <https://doi.org/10.1002/adma.201100304>.



- [14] Lee C, Wei X, Kysar JW, Hone J, "Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene", *Science* **321**, 385-388, 2008. <https://doi.org/10.1126/science.1157996>.
- [15] Taflove A., Hagness S. C., Picket-May M., "Computational Electromagnetics: The Finite-Difference Time-Domain Method", In *the Electrical Engineering Handbook*, Elsevier Inc., 629-670, 2005. <https://doi.org/10.1016/B978-012170960-0/50046-3>.
- [16] Liu T., Wang H., Liu Y., Xiao L., Zhou C., Liu Y., Xu C., Xiao S., "Independently tunable dual-spectral electromagnetically induced transparency in a terahertz metal-graphene metamaterial", *J. Phys. D Appl. Phys.* **51**, 415105, 2018. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/aadb7f>.
- [17] Shangguan Q., Chen Z., Yang H., Chrng S., Yang W., Yi Z., Wu X., Wang S., Yi Y., Wu P., "Design of ultra-narrow band graphene refractive index sensor", *Sensors* **22(17)**, 6483, 2022. <https://doi.org/10.3390/s22176483>.
- [18] Cheng Y., Zho X., Li J., Chen F., Luo H., Wu L., "Terahertz broadband tunable reflective cross-polarization convertor based on complementary cross-shaped graphene metasurface", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **134**, 114893, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2021.114893>.
- [19] Chen H., Chen, Z., Yang H., Wen L., Yi Z., Zhou Z., Dai B., Zhang J., Wue X., Wuf P., "Multi-mode surface plasmon resonance absorber based on dart-type single-layer grapheme", *RSC Adv.* **12**, 7821, 2022. <https://doi.org/10.1039/D2RA00611A>.
- [20] Liu J., Wang W., Xie F., Zhang X., Zhou X., Yuan Y., Wang L., "Excitation of Surface Plasmon Polariton Modes with Double-Layer Gratings of Graphene", *Nanomaterials* **12(7)**, 1144, 2022. <https://doi.org/10.3390/nano12071144>.
- [21] Cen C., Lin H., Huang J., Liang C., Chen X., Tang Y., Yi Z., Ye X., Liu J., Yi Y., Xiao S., "A tunable plasmonic refractive index sensor with nanoring-strip graphene arrays", *Sensors* **18(12)**, 4489, 2018. <https://doi.org/10.3390/s18124489>.



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



مطالعه عددی گذارهای الکترومغناطیسی در گیراندازی تابشی پروتونی $^{10}\text{B}^1$

حسن خلیلی* و معصومه دالوند^۲

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۱/۱۵

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۰۳/۱۲

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۴/۱۵

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال سیزدهم، پیاپی ۳۵، زمستان ۱۴۰۲

صص ۲۰ - ۳۳

چکیده:

تجزیه و تحلیل قدرت گذارهای الکترومغناطیسی یکی از روش‌های مطالعه توسعه هسته‌های اتمی انفجار بزرگ و چرخه سوخت ستارگان در اخترفیزیک هسته‌ای، سنتز هسته‌ای و گیراندازی پروتوی هسته‌ها است. از این رو مطالعه هسته‌هایی با عدد جرمی (A) ۱۱، چون ^{11}C و ^{11}B ، از اهمیت بالایی برخوردار بوده که با گیراندازی تابشی پروتون در ^{10}B تولید می‌شوند. در این پژوهش، وابستگی احتمال گذار کاهش یافته مربوط به چهار قطبی الکتریکی $[B(E2)]$ و دوقطبی مغناطیسی $[B(M1)]$ که در گیراندازی تابشی پروتون به کمک هسته ^{10}B رخ می‌دهد، بررسی شده است که به انرژی برانگیختگی و اسپین - پارته حالات درگیر برای رخ دادن گذارهای $E2$ و $M1$ بستگی دارد. چارچوب نظری محاسبات براساس الگوی پتانسیل وودز-ساکسون $M3Y$ برای ایجاد حالت‌های پایه و برانگیخته ^{11}C استفاده شده است. نتایج بدست آمده براساس هریک از الگوهای پتانسیل‌های یاد شده، همخوانی مطلوبی دارند. مشخص شد که $B(E2)$ با افزایش انرژی تحریک شده بدون توجه به اسپین حالت‌های برانگیخته افزایش می‌یابد. در حالی که $B(M1)$ به اسپین حالت‌های برانگیخته بسیار حساس بوده و در حالت‌های $(3/2)$ جدا از انرژی تحریک شده هستند.

واژگان کلیدی: احتمال گذار کاهش یافته، پتانسیل وودز-ساکسون، پتانسیل دبل فولدینگ $M3Y$ ، گذار الکترومغناطیس.

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.43665.1322

^۲ استادیار، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه اراک، اراک، ایران (نویسنده مسئول) Email: h-khalilir@araku.ac.i

^۳ دانش‌آموخته کارشناسی ارشد، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه اراک، اراک، ایران. Email: mass.dalvand@gmail.com



۱. مقدمه

اندازه‌گیری و تجزیه و تحلیل قدرت گذار الکترومغناطیسی هسته‌های اتمی نقشی مهمی در گسترش فیزیک هسته‌ای داشته است [۱]. به ویژه، غالب‌ترین احتمالات گذار کاهش یافته، یعنی $B(E1)$ ، $B(M1)$ و $B(E2)$ ، شاهد بسیار قابل اعتمادی برای درک ویژگی‌های حالت‌های برانگیخته هسته‌ای و ویژگی‌های جمعی ساختار هسته‌ای هستند [۲-۴]. دانش دقیق احتمال گذار کاهش یافته برای درک الگوهای مختلف هسته‌ای و بسیاری از پدیده‌های اخترفیزیکی ضروری است [۵ و ۶]. به عنوان نمونه، مطالعه دقیق نرخ واکنش‌های مختلف گرما هسته‌ای برای درک سوختن هیدروژن (تبدیل چهار پروتون به یک ذره α) در داخل ستارگان و سنتز هسته در محیط‌های ستاره‌ای مختلف، اهمیت بسیاری دارد. نرخ واکنش‌های گرما هسته‌ای به نوبه خود به مقادیر دقیق قدرت گذار نیاز دارد. در حقیقت، افزون بر زنجیره‌های pp ، برخی از چرخه‌های واکنش دیگر، مانند چرخه‌های مختلف CNO، نقش عمده‌ای در سوختن هیدروژن دارند [۷ و ۸]. بسته به دما و ترکیب شیمیایی پلاسمای ستاره‌ای، چرخه‌های مختلف CNO می‌تواند شامل ایزوتوپ‌های مختلف کربن، نیتروژن و فلئوئور شود. گیراندازی تابشی پروتون در ^{10}B برای هسته‌های با جرم ۱۱ مانند ^{11}C و ^{11}B (به کمک واپاشی β^+) مهم است. همچنین ^7Li و ^7Be با جذب تابشی واکنش $^{10}\text{B}(p,\gamma)^{11}\text{C}$ ایجاد می‌شوند. این واکنش بخشی از چرخه‌های کربن-نیتروژن-اکسیژن (CNO) می‌باشد که در حالت‌های ستاره‌ای مختلف چون غول سرخ، ستارگان غول پیکر مجانبی و نواخترهای کلاسیک فعال می‌شوند. از این رو، فراوانی ^{11}C به سرعت واکنش $^{10}\text{B}(p,\gamma)^{11}\text{C}$ بسیار وابسته است. از آنجایی که در این واکنش گسیل γ رخ می‌دهد، بررسی قدرت گذار الکترومغناطیسی برای درک این واکنش مهم و ضروری می‌باشد. از این رو، در این کار، قدرت گذار از حالت‌های برانگیخته ^{11}C که به انرژی و اسپین حالت‌های برانگیخته وابسته می‌باشد، با استفاده از الگوی خوشه‌ای $p+^{10}\text{B}$ بررسی شده است. همانطور که می‌دانیم ساختار خوشه‌ای در هسته‌های سبک به سه دلیل اتفاق می‌افتد که عبارتند از: (۱) مولکول‌های هسته‌ای (۲) هسته‌هایی با ساختار مغز و خوشه (۳) هسته‌های آلفا-زوج. در این الگو، هر خوشه با چاه پتانسیل مربوط به خودش بررسی می‌شود که در اینجا، برای بررسی احتمال گذار کاهش یافته از الگوی هسته‌ای دو ذره‌ای شامل مغز (^{10}B) و خوشه (p) استفاده شده است. افزون بر این، الگوی دابل فولدینگ $^1\text{M3Y}$ و پتانسیل وودز-ساکسون برای

¹ double-folding

ایجاد حالت‌های پایه و برانگیخته ^{11}C استفاده می‌شود [۹]. در سال ۲۰۱۸، با پتانسیل $M3Y$ احتمال گذار برای واکنش $^{17}\text{O}(p,g)^{18}\text{F}$ مورد بررسی قرار گرفته است [۱۰]. در این مقاله پس از مقدمه‌ای کوتاه در مورد اهمیت واکنش و بیان برخی محاسبات انجام شده، ابتدا به صورت مختصر در مورد روابط و چارچوب محاسبات و فرمولبندی مربوط به احتمال گذار کاهش یافته مطالبی بیان شده است. سپس در قسمت سوم به نتایج محاسبات و مقایسه آن‌ها می‌پردازیم.

۲. روش محاسبات

برای پتانسیل کروی متقارن، تابع موج حالت پایه دستگاهی مانند c شامل دو خوشه a و b را می‌توان به بخش‌های اسپینی-زاویه‌ای و شعاعی تقسیم کرد.

$$\psi_{JM}(r) = \frac{u_{lj}^J(r)}{r} Y_{JM}^l \quad (1)$$

تابع موج اسپینی-زاویه‌ای بر حسب هارمونیک‌های کروی و تابع موج اسپینور بیان می‌گردد. در حالی که تابع موج شعاعی حالت پایه دستگاه $(a+b)$ با حل معادله شعاعی شرودینگر زیر بدست می‌آید.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{ab}} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_{lj}^J(r) + V(r)u_{lj}^J(r) = E_i u_{lj}^J(r) \quad (2)$$

در حالی که، شرایط مرزی تابع موج $u_{lj}^J(r=0) = u_{lj}^J(r=\infty) = 0$ بوده و پتانسیل $V(r)$ برابر است با:

$$V(r) = V_0(r) + V_c(r) + \langle \vec{s} \cdot \vec{l} \rangle V_s(r), \quad (3)$$

در این رابطه $V_0(r)$ ، $V_c(r)$ و $\langle \vec{s} \cdot \vec{l} \rangle V_s(r)$ به ترتیب بیانگر پتانسیل مرکزی، پتانسیل کولنی و پتانسیل اسپین-مدار می‌باشند.



پتانسیل کولنی را می‌توان به راحتی به عنوان پتانسیل بدست آمده از توزیع یکنواخت بارهای الکتریکی در نظر گرفت.

$$V_c(r) = \frac{Z_a Z_b e^2}{r} \quad r > R_c$$

$$V_c(r) = \frac{Z_a Z_b e^2}{2R_c} \left(3 - \frac{r}{R_c} \right) \quad r < R_c$$

(۴)

در حالی که، Z_a و Z_b به ترتیب بیانگر تعداد بارهای ذرات a و b می‌باشند. همچنین، R_c شعاع کولنی است که اغلب به عنوان مجموع شعاع هسته‌هایی که برهمکنش دارند، در نظر گرفته می‌شود. برای دستگاه $^{10}\text{B}p$ شعاع کولنی عبارت است از $1.2 \times 10^{1/3} + 0.7 = 2.58 \text{ fm}$. الگوی پتانسیل وودز-ساکسون^۱ برای پتانسیل مرکزی و اسپین-مدار استفاده شده است که شکل ساده آن‌ها به صورت زیر می‌باشد [۹]:

$$V_0(r) = V_0 f_0(r) \quad (۵)$$

$$V_s(r) = -V_{so} \left(\frac{\hbar}{m_\pi c} \right)^2 \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f_0(r) \quad (۶)$$

$$f_0(r) = \frac{1}{1 + \exp \left[\frac{(r - R_0)}{a_0} \right]} \quad (۷)$$

پارامترهای استفاده شده در معادلات بالا براساس انرژی حالت مقید تنظیم می‌شوند. در این مطالعه از پتانسیل جایگزین دیگری بنام M3Y که در بررسی سطح مقطع جذب تابشی برخی واکنش‌ها نتایج نسبتاً مطلوبی در انرژی‌های کم و متوسط داشته است، استفاده شده است. به دلیل پیچیده بودن برهمکنش‌های نوکلئون-نوکلئون در هسته‌ها می‌توان برای بدست آوردن ویژگی‌های هسته‌ها برهمکنش‌های پیچیده‌ی درون هسته را تعدیل نمود و گاهی نیز مناسب است از برهمکنش‌های موثر پدیده شناختی استفاده شود [۱۱]. یکی از برهمکنش‌های موثر شناخته شده پتانسیل سه جمله‌ای یوکاوا (M3Y) است. قسمت شعاعی برهمکنش M3Y از راه برازش عناصر

¹ Woods-Saxon potential

ماتریسی آن در پایه‌های نوسانگر هماهنگ ماتریس G از راه برهمکنش پدیده شناختی نوکلئون- نوکلئون راید- الویت^۱، با مغزی نرم بدست آمده است [۱۲]. در این بخش به صورت خلاصه در مورد این پتانسیل توضیح داده می‌شود. در ساده‌ترین شکل، برهمکنش $M3Y$ با دو عبارت مستقیم با بردهای مختلف، و یک جمله تبدیلی که با برهمکنش دلتا نشان داده می‌شود، ارائه می‌شود [۱۲] و [۱۳]:

$$t = A \frac{e^{-\beta_1 s}}{\beta_1 s} + B \frac{e^{-\beta_2 s}}{\beta_2 s} + C \delta(s) \quad (8)$$

که در آن، پارامترها برابر با $A=7999 \text{ MeV}$ ، $B=-2134 \text{ MeV}$ ، $C=-276 \text{ MeV fm}^3$ ، $\beta_1=4 \text{ fm}^{-1}$ و $\beta_2=2.5 \text{ fm}^{-1}$ می‌باشند [۱۲ و ۱۳]. بخش مرکزی پتانسیل با چگالی حالت پایه، ρ_a و ρ_b هسته‌های a و b بدست می‌آید:

$$V_0^{M3Y}(r) = \lambda_0 V^{M3Y}(r) = \lambda_0 \int d^3 r_1 d^3 r_2 \rho_a(r_1) \rho_b(r_2) t(s) \quad (9)$$

در حالی که، $s = |\mathbf{r} + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$ و همچنین، λ_0 عامل بهنجاری است که به انرژی بستگی حالت‌ها، که با حل معادله شرودینگر شعاعی بدست می‌آیند، بستگی دارد. چگالی هر دو خوشه a و b گاوسی با پارامترهای شعاع 0.7 fm برای پروتون و $2.05 \text{ fm} = (1/2 \times 10^{1/3}) \text{ fm}$ برای ^{10}B فرض شده است. قسمت اسپین مدار پتانسیل بر حسب مشتق فضایی پتانسیل در نظر گرفته می‌شود:

$$V_S^{M3Y}(r) = -\lambda_{S0} \left(\frac{\hbar}{m_\pi c} \right)^2 \frac{1}{r} \frac{d}{dr} V_0^{M3Y}(r). \quad (10)$$

اکنون می‌توان احتمال گذار کاهش یافته را با رابطه زیر بدست آورد [۹]:

$$B(\pi\lambda : l_0 j_0 J_0 \rightarrow \lambda j J) = (2J+1) \left\{ \begin{matrix} j_f & J_f & I_a \\ J_i & j_i & \lambda \end{matrix} \right\}^2 \left| \langle l_j \| \hat{O}_{\pi\lambda} \| l_0 j_0 \rangle \right|^2, \quad (11)$$

در این رابطه به جای π ، E (مربوط به گذار الکتریکی) و M (مربوط به گذار مغناطیسی) قرار می‌گیرد. همچنین λ نمایش چند قطبی تابش الکترومغناطیسی است. عملگرهای گذار الکتریکی و مغناطیسی به شرح زیر می‌باشند. در تقریب طول موج‌های بلند عملگر چند قطبی الکتریکی مرتبه λ با رابطه زیر محاسبه می‌شود [۵]:

¹ Reid-Elliott



$$\hat{O}(E\lambda) = e_{eff,\lambda} r^\lambda y_{\lambda\mu}(\hat{r}),$$

$$e_{eff,\lambda} = Z_b e \left(-\frac{m_a}{m_c} \right)^\lambda + Z_a e \left(\frac{m_b}{m_c} \right)^\lambda, \quad (12)$$

که در آن، $e_{eff,\lambda}$ بار موثر می‌باشد که از روابط زیر پیروی می‌کند. در هسته‌هایی که از تعداد مشابه‌ای نوترون‌ها و پروتون‌ها تشکیل شده‌اند، گذار E1 بین حالت‌های ایزواسپین صفر صورت نمی‌گیرد [۱۴]. اگر نسبت جرم‌ها با نسبت اعداد جرمی Aa و Ab جایگزین شود، بار موثر ناپدید می‌شود. همچنین، سهم باقی‌مانده ناشی از نابرابری ایزواسپین را می‌توان با بار موثر و گنجاندن جرم‌های مناسب همراه با ضریب عادی سازی SF در نظر گرفت. افزون بر این، در تقریب طول موج بلند، احتمال انتشار چند قطبی λ به سرعت با افزایش λ کاهش می‌یابد و برای همان مرتبه چند قطبی λ ، شدت تابش مغناطیسی بسیار کمتر از تابش الکتریکی است، در این شرایط کافی است که گذار دو قطبی مغناطیسی را تنها در نظر بگیریم [۵].

$$\hat{O}(M\lambda) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \mu N \left[e_{eff,M} l_\mu + \sum_{i=a,b} g_i (S_i)_\mu \right],$$

$$e_{eff,M} = \left(\frac{m_a^2 Z_a}{m_c^2} + \frac{m_b^2 Z_b}{m_c^2} \right). \quad (13)$$

که در آن، μN مگنتون هسته‌ای، g_i نسبت‌های ژیرو مغناطیسی، l_μ و S_μ به ترتیب مولفه‌های کروی از مرتبه μ تکانه زاویه‌ای مدار و اسپینی هستند. عنصر ماتریس برای گذار $JM \rightarrow J_0 M_0$ ، به صورت زیر بیان می‌شود [۱۳]:

$$\langle JM | O_{E\lambda\mu} | J_0 M_0 \rangle = \langle J_0 M_0 \lambda \mu | JM \rangle \frac{\langle J || O_{E\lambda} || J_0 \rangle}{\sqrt{2J+1}} \quad (14)$$

عناصر ماتریس کاهش یافته $\langle J || O_{E\lambda} || J_0 \rangle$ عبارت است از [۱۴]:

$$\langle J || O_{E\lambda} || J_0 \rangle = (-1)^{j+I_a+J_0+\lambda} [(2J+1)(2J_0+1)]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} j & J & I_a \\ J_0 & j_0 & \lambda \end{matrix} \right\} \langle j || O_{E\lambda} || I_0 j_0 \rangle. \quad (15)$$



اکنون با استفاده از قضیه ویگنر-اکارت، عناصر ماتریسی این عملگرها را می‌توان بر حسب عناصر ماتریس کاهش یافته بیان کرد که به آسانی با استفاده از فرمول‌های استاندارد جبر تکانه زاویه‌ای قابل محاسبه می‌باشند [۱۶ و ۱۷]:

$$\langle l_j \| \hat{O}(E\lambda) \| l_0 j_0 \rangle_J = \frac{e_\lambda}{\sqrt{4\pi}} (-1)^{l_0+l+j_0-j} \frac{\hat{\lambda} \hat{j}_0}{\hat{j}} \left\langle j_0 \frac{1}{2} \lambda_0 \left| j \frac{1}{2} \right. \right\rangle \times \int_0^\infty dr r^\lambda u_{l_j}^{\prime}(r) u_{l_0 j_0}^{\prime}(r), \quad (16)$$

لازم به یادآوری است که رابطه بالا به ازای مقدار $l+j+\lambda$ فرد، صفر می‌شود و برای گذار مغناطیسی داریم [۱۶ و ۱۷]:

$$\langle l_j j_j \| \hat{O}(M\lambda) \| l_i j_i \rangle = (-1)^{j+l_i+j_0+1} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \hat{J} \hat{J}_0 \times \begin{Bmatrix} j & J & I_a \\ J_0 & j_0 & 1 \end{Bmatrix} \mu_N \times \left\{ b \frac{1}{\hat{l}_0} e_M \left[\frac{2\hat{j}_0}{\hat{l}_0} (l_0 \delta_{j_0, l_0+1/2} + (l_i+1) \delta_{j_0, l_0-1/2}) + (-1)^{l_0+1/2-j} \frac{\hat{j}_i}{\sqrt{2}} \delta_{j_0, l_0+1/2} \cdot \delta_{j_0, l_0+1/2} \right] + g_N \frac{1}{\hat{j}_i^2} \left[(-1)^{l_0+1/2-j_0} \hat{j}_i \delta_{j_i, j_0} - (-1)^{l_0+1/2-j} \frac{\hat{j}_i}{\sqrt{2}} \delta_{j_0, l_0+1/2} \cdot \delta_{j_0, l_0+1/2} \right] \right\} (r) u_{l_j j_0}^{\prime}(r), \quad (17)$$

$$+ g_a (-1)^{l_0+j_0+J+1} \hat{J} \hat{J}_0 \hat{I}_a \begin{Bmatrix} I_a & J & j_0 \\ J_0 & I_a & 1 \end{Bmatrix}$$

در این رابطه، ضریب اسپین g برای پروتون برابر $g_N = 5.586$ و برای نوترون برابر $g_N = -3.826$ بوده و گشتاور مغناطیسی هسته با $\mu_a = g_a \mu_N$ نشان داده می‌شود. همچنین، اگر l مخالف l_0 باشد، عنصر ماتریس دو قطبی مغناطیسی صفر است.

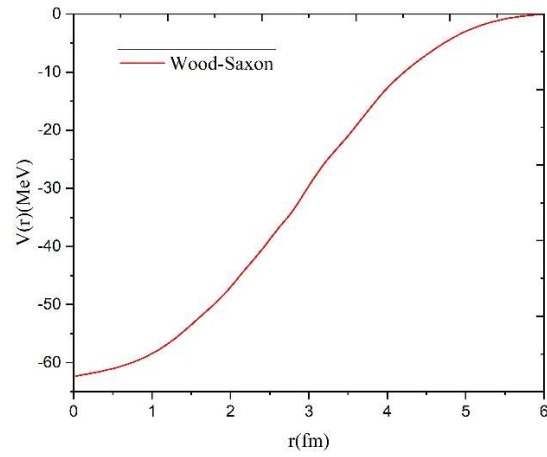
اجزای اصلی مورد نیاز در محاسبه قدرت‌های گذار، انتگرال‌های شعاعی هستند و برای محاسبه آن‌ها، داشتن توابع موج شعاعی ضروری است. توابع موج شعاعی حالت برانگیخته و پایه با حل معادله شرودینگر مربوطه برای پتانسیل، که پیش از این بحث شد، بدست می‌آیند. در اینجا لازم به یادآوری است که تمامی محاسبات با استفاده از کد RADCAP انجام شده است [۹]. این کد براساس زبان برنامه نویسی فرترن نوشته شده و معادله شرودینگر شعاعی را برای حالت‌های مقید و پیوسته حل می‌نماید. ابتدا ویژه مقدار انرژی با استفاده از روش WKB محاسبه می‌شود. سپس از انتگرال گیری Numerov استفاده می‌شود و با مقایسه آن در سطح هسته برای بدست آوردن انرژی و تابع موج مقید با دقت خوب انجام می‌شود. حالت‌های پیوسته توسط انتگرال رانگ-کوتا



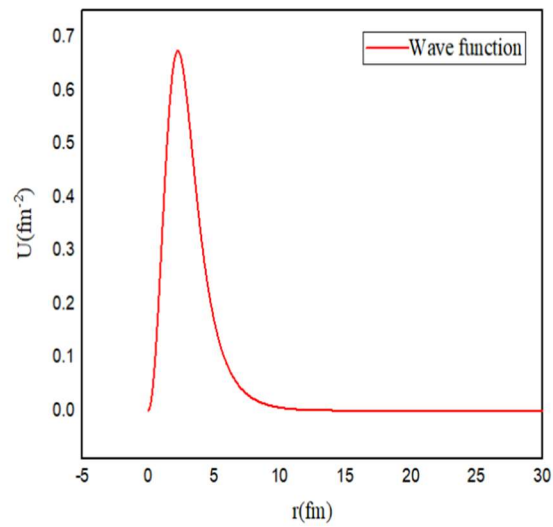
بدست می آیند که با توابع موج کولنی در فواصل بلند خارج از محدوده پتانسیل هسته ای هماهنگی دارد.

۳. بحث و نتیجه گیری

در این پژوهش از دو پتانسیل وودز- ساکسون و $M3Y$ برای حل معادله شرودینگر و محاسبه تابع موج و انرژی حالت مقید و حالت های برانگیخته واکنش $^{10}\text{B}(p,\gamma)^{11}\text{C}$ استفاده نموده ایم. دلیل استفاده از دو پتانسیل این است که داده های تجربی و نظری وجود ندارد و ما توانستیم داده های بدست آمده را با مقایسه نتایج پتانسیل های مختلف مورد تجزیه و تحلیل قرار دهیم. انرژی بستگی هریک از حالت های واکنش $^{10}\text{B}+p(^{11}\text{C})$ را می توان با تغییر پارامترهای وودز- ساکسون و $M3Y$ محاسبه نمود. اسپین- پاریته حالت پایه ^{11}C برابر $J^\pi = (3/2)^-$ و انرژی بستگی پروتون 8.68 مگاواولت است که برای بازتولید آن پارامترهای پتانسیل وودز- ساکسون مطابق جدول (۱) تنظیم و نمودار آن در شکل (۱) نشان داده شده است. همچنین، تابع موج شعاعی بدست آمده براساس پارامترهای پتانسیل جدول (۱) برای حالت پایه ^{11}C در شکل (۲) نمایش داده می شود. حالات برانگیخته به همراه انرژی برانگیختگی و اسپین- پاریته آن ها برای ^{11}C که برای گذارهای $M1$ و $E2$ براساس قوانین انتخاب تعیین شده اند، در جدول (۲) آمده است. انرژی حالت های مختلف از منبع [۱۷] گرفته شده است. در این جدول پارامترهای وودز- ساکسون براساس بازتولید انرژی بستگی حالت ها مندرج در جدول (۱) تنظیم شده اند. چون برای گذار $E1$ مقدار $\lambda + j + I$ فرد می شود، این گذار صفر می شود. لیست قدرت گذار کاهش یافته مربوط به $B(M1)$ و $B(E2)$ از حالت های برانگیخته به حالت پایه در جدول (۲) مربوط به پتانسیل های وودز- ساکسون و $M3Y$ آمده است. همانطور که ملاحظه می شود، داده های احتمال گذارهای کاهش یافته الکترومغناطیسی برای هر دو پتانسیل همخوانی مطلوبی دارند و می تواند تاییدی برای نتایج این پژوهش باشد.



شکل ۱ نمودار پتانسیل حالت پایه.



شکل ۲ تابع موج شعاعی حالت پایه $u_{1,3/2}^{3/2}(r)$.



جدول ۱ پارامترهای پتانسیل وودز- ساکسون برای حالت پایه و حالت های برانگیخته واکنش $^{11}\text{C}(p,\gamma)^{10}\text{B}$.

انرژی بستگی	V0	R0	a ₀ =a _s	Vso	Rso	Rc
۸/۶۸	-۵۷/۰۰۷	۲/۷۳۶	۰/۴۰۴۱۷۴	۲۱/۱۸۴	۲/۵۸۴۰	۲/۷۳۶
۶/۶۸	-۵۹/۹۸۷۱	۲/۶۶۷۵	۰/۴۰۴۱۷۴	۳۲/۶۵۳	۲/۵۰۴۲	۲/۶۶۷۵
۴/۳۷	-۵۷/۹۲۷۱	۲/۶۲۹۵۹	۰/۵۰۴۱۷۴	۳۲/۶۵۳	۲/۵۰۴۲	۲/۶۲۹۵۹
۳/۸۸	-۵۷/۰۰۷۱	۲/۶۲۹۵۹	۰/۵۰۴۱۷۴	۳۲/۶۵۳	۲/۵۰۴۲	۲/۶۲۹۵۹
۲/۳۱	-۵۵/۰۰۷۱	۲/۵۹۷۰۹	۰/۵۰۴۱۷۴	۳۲/۶۵۳	۲/۵۰۴۲	۲/۵۹۷۰۹
۱/۷۸	-۵۴/۲۴۷۱	۲/۵۸۷۰۹	۰/۵۰۴۱۷۴	۳۲/۶۵۳	۲/۵۰۴۲	۲/۵۸۷۰۹

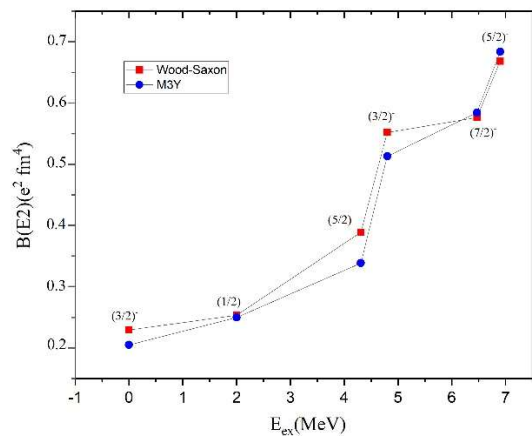
جدول ۲ مقادیر انرژی تحریکی، انرژی بستگی، اسپین پارینه هسته ^{11}C و مقادیر B(E2) و B(M1) بین حالت های برانگیخته و حالت پایه نشان داده شده است (واحد انرژی ها بر حسب MeV می باشد).

انرژی تحریکی (MeV)	انرژی اسپین پارینه (MeV)	انرژی بستگی (MeV)	B(E2) (e ² fm ⁴) Wood-Saxon	B(E2) (e ² fm ⁴) M3Y	B(M1) (e2 fm ²)×10 ⁻² Wood-Saxon	B(M1) (e2 fm ²)×10 ⁻² M3Y
۰	(۳/۲) ⁻	۸/۶۸	۰,۲۲۹۲	۰,۲۰۴۸	۰,۲۱۴۲	۰,۲۲۶۲
۲	(۱/۲) ⁻	۶,۶۸	۰,۲۵۳۱	۰,۲۴۹۵	۰,۲۲۲۱	۰,۲۳۰۳
۴/۳۱	(۵/۲) ⁻	۴,۳۷	۰,۳۸۹۰	۰,۳۳۸۵	۰,۴۵۱۸	۰,۴۲۶۱
۴/۸۰	(۳/۲) ⁻	۳,۸۸	۰,۵۵۱۸	۰,۵۱۲۸	۰,۲۵۱۹	۰,۲۲۹۷
۶/۴۷	(۷/۲) ⁻	۲,۳۱	۰,۵۷۶۳	۰,۵۸۴۳	۰,۷۰۲۲	۰,۷۰۸۰
۹/۷۸	(۵/۲) ⁻	۱,۱۰	۰,۶۶۸۳	۰,۶۸۳۹	۰,۴۴۱۰	۰,۴۴۴۰

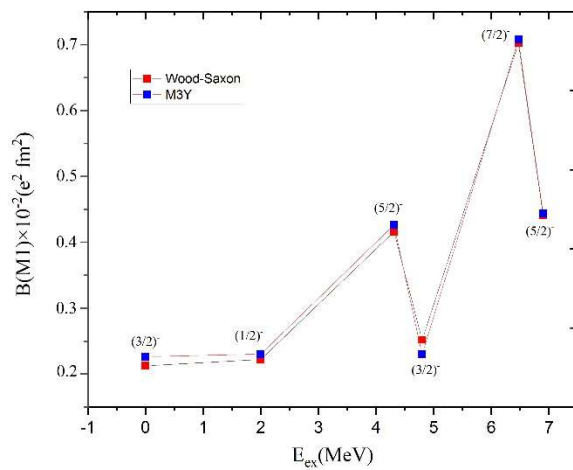
تغییرات احتمال گذار چهار قطبی الکتریکی [B(E2)] در شکل (۳) رسم شده است. بر اساس شکل (۳) روشن است که با افزایش انرژی برانگیختگی قدرت گذار نیز افزایش می یابد. ممکن است به دلیل کوتاه تر شدن عمر متوسط حالت های برانگیخته با افزایش انرژی تحریکی باشد که در ارتباط با رابطه عدم قطعیت می باشد. به همین خاطر قدرت واپاشی ترازهای بالاتر به ترازهای پایین تر بیشتر از واپاشی لایه های زیرین است. افزون بر آن، از این داده ها عدم وابستگی قدرت گذار به اسپین- پارینه حالت ها را می توان برداشت کرد. لازم به یادآوری است که انواع گذارهای الکتریکی با

چند قطبی های فرد مشاهده نمی شوند. بنابراین سهم گذارهای الکتریکی دیگر به جز گذار چهار قطبی الکتریکی بسیار ناچیز است، چرا که احتمال گذار با افزایش قطبیدگی به شدت کم می گردد. در شکل (۴) تغییرات قدرت گذار دوقطبی مغناطیسی بر حسب انرژی حالت های برانگیخته نشان داده شده است. همانگونه که مشاهده می شود مقادیر بدست آمده با پتانسیل های وودز-ساکسون و $M3Y$ با یکدیگر هماهنگی خوبی دارند. همچنین احتمال گذار با افزایش انرژی برانگیختگی به صورت نوسانی افزایش می یابد که ممکن است دلیل افزایش آن کوتاهی عمر متوسط حالت های برانگیخته باشد. بیشترین احتمال گذار دوقطبی مغناطیسی $[B(M1)=0.7022 \times 10^{-2} \text{ e}^2 \text{ fm}^2]$ مربوط به حالت $J^\pi=(7/2)^-$ است. مقادیر $B(M1)$ برای حالت $(3/2)^-$ برابر $0.2124 \times 10^{-2} \text{ e}^2 \text{ fm}^2$ و برای حالت $(5/2)^-$ برابر $0.4518 \times 10^{-2} \text{ e}^2 \text{ fm}^2$ و برای $(5/2)^+$ برابر $0.4410 \times 10^{-2} \text{ e}^2 \text{ fm}^2$ می باشد. مقادیر $B(M1)$ برای حالت $(3/2)^-$ و $(1/2)^-$ و همچنین برای حالت های $(5/2)^+$ و $(5/2)^-$ کمابیش یکسان است و با افزایش انرژی برانگیختگی تغییر زیادی ندارند. در نتیجه احتمال گذار و اسپین-پارته در این حالت ها جدا از انرژی برانگیختگی بدست آمده اند. از این رو، براساس قاعده انتخاب، گذارهای $(1/2)^-$ و $(3/2)^-$ به حالت پایه $(3/2)^-$ قادر به واپاشی دوقطبی مغناطیسی می باشند و از باقی گذارها چشم پوشی می شود. افزون بر این، گذار دوقطبی الکتریکی برای این دستگاه قابل صرف نظر کردن است. در نتیجه، دوقطبی مغناطیسی تنها گذار ممکن در این مورد است که منجر به مقدار زیادی $B(M1)$ می شود. افزون بر گذارهای دوقطبی مغناطیسی از حالت های $(1/2)^-$ و $(3/2)^-$ به حالت پایه ممکن است گذار چهار قطبی نیز رخ دهد. همانطور که در جدول (۲) ملاحظه می شود، گسیل چهار قطبی الکتریکی با ضریب 10^2 محتمل تر از گسیل دوقطبی مغناطیسی از همان مرتبه است.





شکل ۳ نمودار تغییرات قدرت گذار چهار قطبی الکتریکی [B(E2)] بر حسب انرژی‌های برانگیخته حالت‌های تحریک شده.



شکل ۴ نمودار تغییرات قدرت گذار دو قطبی مغناطیسی [B(M1)] بر حسب انرژی‌های برانگیخته حالت‌های تحریک شده.

۴. نتیجه گیری

به صورت خلاصه، تغییر مقادیر $B(E2)$ و $B(M1)$ با توجه به انرژی برانگیختگی و اسپین حالت‌های برانگیخته هسته ^{11}C در چارچوب الگوی مبتنی بر برهمکنش نوکلئون-نوکلئون پتانسیل وودز-ساکسون و پتانسیل میکروسکوپی $M3Y$ با استفاده از الگوی خوشه‌ای $^{10}\text{B}+p$ مورد مطالعه قرار گرفته است. مشاهده می‌شود که مقادیر $B(E2)$ به شدت به انرژی تحریک بستگی دارد. در حالی که، مقادیر $B(M1)$ به اسپین حالت‌های برانگیخته درگیر در گذار حساس‌تر هستند. از این رو، از اندازه‌گیری $B(E2)$ برای تعیین انرژی برانگیختگی حالت‌های برانگیخته و از اندازه‌گیری $B(M1)$ برای تعیین اسپین حالت برانگیخته ممکن است استفاده شود. همچنین نتایج بدست آمده در این پژوهش با دو چارچوب نظری مختلف یعنی پتانسیل وودز-ساکسون و پتانسیل $M3Y$ همخوانی مطلوبی مشاهده گردید.

۵. تقدیر و تشکر

از کلیه همکارانی که در این مقاله ما را یاری رساندن تقدیر و تشکر می‌نمایم.

منابع

- [1] Alder K., Bohr A., Huus T., Mottelson T., and Winther A., Study of nuclear structure by electromagnetic excitation with accelerated ions, *Reviews of modern physics*, **28**, 432-542, 1956. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.28.432>
- [2] Radford D.C., Baktash C., Beene J.R., Fuentes B., Galindo-Uribarri A., Gross C.J., Hausladen P.A. et al., *Coulomb Excitation of Radioactive ^{132}Te , ^{134}Te , ^{136}Te Beams and the Low $B(E2)$ of ^{136}Te* , *Physical review letters*, **88**, 222501-222505, 2002, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.222501>
- [3] Padilla-Rodal E., Galindo-Uribarri A., Baktash C., Batchelder J. C., Beene J. R., Bijker R., Brown B.A et al. *B(E2) measurements for radioactive neutron-rich Ge isotopes: Reaching the N= 50 closed shell.*, *Physical review letters*, **94**(12), 122501-122505, 2005. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.122501>
- [4] Allmond -James M., Brown B. A., Andrew E., Stuchbery A., Galindo-Uribarri E., Padilla-Rodal D.C., Radford J. C., Batchelder et al., High-precision $B(E2)$ measurements of semi-magic Ni 58, 60, 62, 64 by Coulomb excitation, *Physical Review C*, **90**(3), 034309-034315, 2014. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.90.034309>
- [5] Bolsterli M., *A New Exposition of Nuclear Physics: Nuclear Structure. Vol. 1. Single-Particle Motion.* Aage Bohr and Ben R. Mottelson. Benjamin, New York, 1969 <https://doi.org/10.1126/science.166.3904.489.a>



- [6] Bertulani C.A., and Baur G., Electromagnetic processes in relativistic heavy ion collisions, *Nuclear Physics A* ,**458**, 725-744, 1986. [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(86\)90197-1](https://doi.org/10.1016/0375-9474(86)90197-1)
- [7] Adelberger-Eric G.,García A., Hamish-Robertson R.G ., Snover K.A ., Balantekin A.B., Heeger K., Ramsey-Musolf M. J et al., Solar fusion cross sections. II. The p p chain and CNO cycles, *Reviews of Modern Physics*, **83**, 195-245, 2011. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.83.195>
- [8] Wiescher M., Görres J., Uberseder E., Imbriani G., and Pignatari M., The cold and hot CNO cycles, *Annual Review of Nuclear and Particle Science* ,**60**, 381-404, 2010. <https://doi.org/10.1146/annurev.nucl.012809.104505>
- [9] Bertulani C.A., RADCAP: A potential model tool for direct capture reactions., *Computer Physics Communications* ,**156**(1), 123-141, 2003. [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(03\)00441-7](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(03)00441-7)
- [10] Kharab R., Dependence of B (E2) and B (M1) transition strengths on energy and spin of excited states of ^{18}F , *Modern Physics Letters A*, **33**, 1850188- 1850196, 2018. <https://doi.org/10.1142/S0217732318501882>
- [11] Greiner W., and Joachim A., *Nuclear models*, Berlin: Springer-Verlag, 1996.
- [12] Bertsch G., Borysowicz J.,McManus H., and Love W.G, Interactions for inelastic scattering derived from realistic potentials, *Nuclear Physics A*, **284**, 399-419, 1977. [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(77\)90392-X](https://doi.org/10.1016/0375-9474(77)90392-X)
- [13] Kobos A. M., Brown B.A., Lindsay R., and Satchler G.R., Folding-model analysis of elastic and inelastic α -particle scattering using a density-dependent force, *Nuclear Physics A* ,**425**, 205-232, 1984. [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(84\)90073-3](https://doi.org/10.1016/0375-9474(84)90073-3)
- [14] Edmonds., Alan Robert., Angular momentum in quantum mechanics, Vol. 4. *Princeton university press*, 1996.
- [15] Lawson R.D., Theory of the nuclear shell model, *science*,**213** , 4509-752 ,1980. <https://doi.org/10.1126/science.213.4509.752.a>
- [16] Buckner M.Q., Iliadis C., Kelly K.J., Downen L.N., Champagne A. E., Cesaratto J. M., Howard C., and Longland R., High-intensity-beam study of $^{17}\text{O}(p, \gamma)^{18}\text{F}$ and thermonuclear reaction rates for $\text{O }^{17+} \text{ p}$, *Physical Review C* ,**91**, 015812-015827, 2015. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.91.015812>
- [17] Tonchev A.P., Nelson S. O., Sabourov K., Crowley B. T., Joshi K., Weller H. R., Kelley J.H., Prior R.M., Spraker M., and Kalantar-Nayestanaki N., The $^{10}\text{B}(p, \gamma)^{11}\text{C}$ reaction at astrophysically relevant energies, *Physical Review C* ,**68**, 045803-045815, 2003. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.68.045803>



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



فوران‌های تاج خورشید و تاثیر آن بر روی اتمسفر زمین^۱

سیما ضیغمی^{۲*}، احسان توایی^۳ و هدیه روستایی^۴

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۴/۱۰

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۰۶/۰۲

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۶/۳۰

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال سیزدهم، پیاپی ۳۵، زمستان ۱۴۰۲

صص ۳۴ - ۵۶

چکیده:

بادهای خورشیدی نتیجه‌ی فوران جریانات پلاسما از تاج خورشید می‌باشند. این پلاسما که از ذرات پروتون، الکترون، پرتو ایکس و امواج رادیویی تشکیل شده است، به ناحیه‌ی هلیوسفر نفوذ کرده و از فضای بین سیارات با انرژی جنبشی و انرژی حرارتی بالایی به سمت کره‌ی زمین شتاب می‌گیرد. افزون بر این، در صورت برخورد با اتمسفر زمین سبب مختل شدن زندگی بشر می‌گردد. اما با وجود میدان مغناطیسی زمین و فرآیند اتصال مجدد مغناطیسی که در این ناحیه اتفاق می‌افتد. ناحیه‌ی مگنتوسفر زمین همچون یک سپر عمل کرده و مانع از تأثیر گذاری این مواد بر روی کره‌ی زمین می‌گردد. استفاده از داده‌های ماهواره‌ها به منظور دستیابی به داده‌های مورد نیاز برای بررسی انواع پدیده‌هایی که در اطراف خورشید رخ می‌دهد، بهترین و مطمئن‌ترین روش از نظر درستی و به روز بودن داده‌ها می‌باشد. در این مقاله از داده‌های ماهواره‌ی هوشناسی گوئس، فضایی‌های لاسکو و رصدخانه‌ی دینامیکی خورشید بهره گرفته شده است. برای بررسی دقیق همبستگی بین فوران‌های خورشید و تغییرات لایه مگنتوسفر زمین از روش تحلیل موجک با پایه مورلت استفاده شده است که ابزار مهمی برای پردازش نوسانات می‌باشد. نتایج محاسبات عددی دقیق این پژوهش نشان داد که همبستگی قوی بین فعالیت‌های مغناطیسی خورشید و ایندکس‌های مشخصه لایه مگنتوسفر زمین وجود دارد که به پیروی از آن می‌تواند بر روی اتمسفر زمین نیز تاثیر بگذارد.

واژگان کلیدی: شراره خورشیدی، میدان مغناطیسی، ذرات پروتون، ذرات الکترون، پرتو ایکس.

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2023.44254.1335

^۲ استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران. (نویسنده مسئول). Email: zeighami@iaut.ac.ir

^۳ دانشیار، دانشکده فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران. Email: e_tavabi@pnu.ac.ir

^۴ دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران. Email: hroostae69@gmail.com



۱. مقدمه

فعالیت‌های خورشیدی به تمام پدیده‌هایی اشاره می‌کند که در سطح یا درون خورشید روی می‌دهد. از جمله این فعالیت‌ها می‌توان به لکه‌های خورشید، چرخه‌ی فعالیت خورشیدی، شراره‌های خورشیدی، برجستگی‌های فورانی، باد‌های خورشیدی توده‌های پرتاب شده‌ی تاجی اشاره کرد. لکه‌های خورشید تحت تاثیر فعالیت مغناطیسی شدید خورشید، میزبان پدیده‌های ثانویه چون حلقه‌های تاجی (زبانه‌ها) و پدیده‌های اتصال مجدد می‌باشند. شراره خورشیدی زمانی رخ می‌دهد که انرژی مغناطیسی در اتمسفر خورشید به صورت ناگهانی آزاد می‌شود. تابش گسیل شده از شراره‌ی خورشیدی کمابیش در تمام طیف الکترومغناطیسی از طول موج‌های بلند چون امواج رادیویی، امواج مرئی تا طول موج‌های کوتاه مثل پرتو ایکس و گاما گسترده شده است. انرژی که از این پدیده بدست می‌آید برابر مقدار انرژی است که از انفجار ۱۰۰ مگا تن بمب هیدروژنی بدست می‌آید.

کاوشگرهای فضایی طیف‌های بدست آمده از نوسانات در منطقه انتقالی و تاج خورشید را رصد کرده‌اند [۵-۱]. معمولاً هر شراره‌ی خورشیدی شامل سه مرحله است. اولین مرحله، مرحله‌ی پیشرو می‌باشد که سبب رهاسازی انرژی مغناطیسی شده و تابش پرتو ایکس نرم در این مرحله مشاهده می‌شود [۶]. در مرحله‌ی دوم یا فاز ضربه‌ای یا لحظه‌ای، الکترون‌ها و پروتون‌ها شتاب گرفته و انرژی آن‌ها به ۱ MeV افزایش می‌یابد که در این مرحله، امواج رادیویی، پرتو ایکس سخت و پرتو گاما گسیل می‌شود. در مرحله‌ی سوم یا مرحله‌ی فروپاشی، به صورت تدریجی پدید آمدن پرتو ایکس و نابودی آن قابل شناسایی است. این سه مرحله می‌تواند چند ثانیه یا چند ساعت به طول بیانجامد. شراره‌های خورشیدی را می‌توان براساس بسامد پرتو ایکس فرودی طبقه‌بندی نمود که توسط ماهواره‌ی گوئس اندازه‌گیری می‌شود. شراره‌ی خورشیدی برای اولین بار در روی خورشید توسط ریچارد کریستوفر کارینگتون و همچنین ریچارد هاجسون در سال ۱۸۵۹ میلادی مشاهده گردید. شراره‌های خورشیدی از یک انفجار بزرگ در جو خورشید و در نزدیکی مجموعه لکه‌های فعال پدید آمده و موجب آزاد شدن انرژی بسیار زیاد در حدود $10^{25} \times 6$ ژول می‌گردند، که در حدود یک ششم انرژی خروجی از سطح خورشید در هر دقیقه است [۷]. شراره‌ی خورشیدی تمامی لایه‌های سطح خورشید شامل شیدسپهر، رنگین سپهر و تاج را تحت تاثیر قرار می‌دهد. همچنین سبب گرم شدن پلاسما تا چندین میلیون کلوین می‌شود. شراره‌ها به این دلیل از نظر علمی مورد توجه‌اند که در مدت کوتاه عمر خود، همراه با تابش شدید امواج الکترومغناطیسی با سرعت نور به زمین می‌رسند و این امواج بر روی لایه یونسفر زمین تاثیر گذاشته و در رادارها و تجهیزاتی که وابسته به

بسامد هستند، ایجاد اختلال می‌نمایند [۸]. افزون بر این، شراره‌ها ابرهایی از ذرات یونیده (پلازما) به فضا می‌فرستند که با سرعت هزاران کیلومتر در ثانیه حرکت کرده و میدان مغناطیسی زمین را تحت تأثیر قرار داده و شفق‌های قطبی شمالی و جنوبی را در زمین پدید می‌آورند. بسامد به وجود آمده از شراره‌های خورشیدی تغییرات زیادی را شامل می‌شوند که این تغییرات از ۱ بار در روز (زمانی که خورشید در حالت فعال است) تا ۱ بار در هفته (زمانی که سطح خورشید آرام است) متغیر می‌باشد.

شراره‌های بزرگ عموماً همراه با فوران‌هایی از جرم در فضای میان سیاره‌ای هستند که اصطلاحاً CME نامیده می‌شوند، که در حقیقت انفجار گسترده‌ای از پلازما هستند که از خورشید پرتاب می‌شوند [۹ و ۱۰]. سرعت CME ممکن است بیشتر از ۲۰۰۰ یا کوچک‌تر از ۱۰۰ کیلومتر در ثانیه باشد، که وابسته به ویژگی‌های آن‌ها است. CME‌ها مقادیر عظیمی از ماده و تابش الکترومغناطیسی در فضا منتشر می‌کنند [۱۱]. مواد خارج شده از پلازما در درجه‌ی اول شامل الکترون‌ها و پروتون‌ها است، اما ممکن است مقادیر کمی از عناصر سنگین از قبیل هلیوم، اکسیژن و حتی آهن داشته باشد. به بیان دیگر می‌توان گفت شراره‌ها ابرهای بسیار پرنوری هستند که در بالای رنگین سپهر و ناحیه‌ی زیرین تاج ظاهر می‌شود که تفاوت شان با زبانه‌ها در میزان درخشش، اندازه و پایداری آن‌ها است. شراره‌ها اگر در شدت بیشینه باشند، پرنورترین لگه‌های سفید روی خورشیداند. شراره‌ها از زبانه‌ها کوچک‌تر هستند، ارتفاع‌شان اغلب تنها ۱۵۰۰۰ کیلومتر است و برخلاف زبانه‌ها به سرعت بسیار زیاد ایجاد و سپس ناپدید می‌شوند. شراره‌ها در مدت چند دقیقه به بیشترین روشنی خود می‌رسند و پس از یک ساعت یا بیشتر ناپدید می‌شوند.

بر اساس سازمان فضایی آمریکا انواع شراره‌های خورشیدی با حروف A, B, C, M, X مشخص می‌شوند. جدول (۱) انرژی شراره‌ها بر اساس رده‌بندی آن‌ها را نشان می‌دهد. بزرگترین شراره‌ها در گروه X قرار داشته و قوی‌ترین نوع محسوب می‌شوند، در مقابل آن کوچک‌ترین نوع شراره‌ها در گروه A قرار دارند. همانند مقیاس ریشتر برای زمین لرزه‌ها، در اینجا نیز به ازای هر حرف میزان انرژی نسبت به حرف قبلی ۱۰ برابر افزایش می‌یابد. به عنوان مثال، شراره‌های دسته X ، ۱۰ برابر قوی‌تر از دسته‌ی M و ۱۰۰ برابر قوی‌تر از دسته‌ی C هستند. هدف اصلی این مقاله، نشان دادن ارتباط نزدیک و مستقیم بین تمامی پدیده‌هایی است که در سطح خورشید رخ می‌دهند، و در نهایت پی بردن به زمان رخداد شراره‌ها با استفاده از داده‌های آن‌ها و داده‌های سایر پدیده‌ها.



جدول ۱ انرژی شراره‌ها بر اساس رده‌بندی آن‌ها.

رده‌بندی	میزان انرژی (W/m^2)
A	$< 10^{-7}$
B	$10^{-7} - 10^{-6}$
C	$10^{-6} - 10^{-5}$
M	$10^{-5} - 10^{-4}$
X	$10^{-4} - 10^{-3}$
Z	$> 10^{-3}$

۲. روش تحقیق و تحلیل نتایج

برای بررسی فوران‌های تاجی خورشید و تاثیر آن‌ها بر روی کره‌ی زمین ابتدا باید ملاحظه کنیم که این فوران‌های عظیم چون شراره‌ها در چه بازه‌های زمانی در اوج رخداد و فعالیت خود هستند و با استفاده از چه داده‌ها و ابزارهایی به محتمل‌ترین زمان و مکان رخداد آن‌ها می‌توان دست یافت. بی‌گمان داده‌های ماهواره‌ها معتبرین منابع در این زمینه هستند و امروزه تمامی پژوهش‌ها بر پایه و اساس این داده‌ها می‌باشند. آنچه که در هنگام رخداد شراره مهم است، این است که بی‌گمان رخداد این پدیده با پدیده‌های دیگری چون میدان مغناطیسی سطح خورشید، چرخه فعالیت خورشید، لگه-های خورشیدی، خروج ذرات باردار الکترون و پروتون از تاج خورشید، میزان رخداد CME از تاج، سرعت متوسط و بیشینه CME و تابش پرتو ایکس در رده‌ی کلاس M، که بالاترین رده انرژی برای تابش پرتو ایکس می‌باشد، ارتباط مستقیم و نزدیک دارد. از این رو، برای اینکه به هدف نهایی خود که رسیدن به زمان رخداد شراره‌هایی با انرژی بالا است دست یابیم، باید ابتدا پارامترهای مربوطه را، که با روند پژوهش پیش‌رو در ارتباط هستند، بررسی کنیم.

لازم به یادآوری است که بازه زمانی مورد نظر برای بررسی هر کدام از پارامترها بسیار مهم است. در کار حاضر، ابتدا بازه زمانی طولانی مدت از سال ۲۰۰۶ تا ۲۰۱۸ در نظر گرفته شده که در این بازه زمانی چرخه‌ی ۱۱ ساله فعالیت خورشیدی قرار دارد. به این صورت که نمودارهایی را که برای میزان خروج جرم از خورشید و تعداد لگه‌های خورشید رسم شده، در این بازه‌ی زمانی باشد. پس از رسم نمودار این دو پارامتر، حدود بیشینه و کمینه در این دوره کاملاً مشهود است (شکل‌های (۱) ، (۲) و (۳)). در کار حاضر توجه روی حدود بیشینه و کمینه است، از این رو، هر چه در روند بررسی جلوتر رویم بازه‌ی زمانی کوچک‌تر می‌شود. کوچک شدن بازه‌ی زمانی به بالا رفتن دقت و درستی پژوهش انجام شده کمک زیادی خواهد کرد. هدف نهایی بدست آوردن زمان دقیق برای

شراره‌هایی با انرژی بالا و مقایسه کردن زمان رخداد شراره‌ها با نمودارهای پارامترهای مرتبط در همان زمان است.

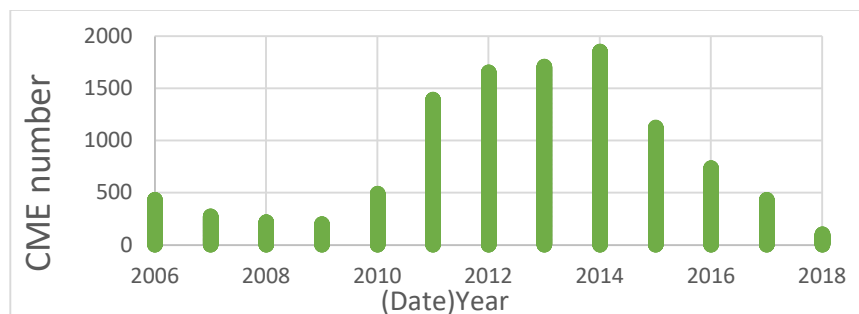
با بررسی نمودارهای کلی از سرعت بیشینه، خروج جرم از خورشید و لگه‌های خورشیدی در بازه ی زمانی مورد نظر مشاهده می‌شود که به دلیل بیشینه بودن پارامترها در سال ۲۰۱۴ نسبت به دیگر سال‌ها و وجود ارتباط زیادی بین این پدیده‌ها، بی‌گمان در سال ۲۰۱۴ شراره با انرژی بالا اتفاق افتاده است و در سال ۲۰۱۸ شراره‌ها با میزان انرژی پایین رخ داده است.

حال بازه ی زمانی را کوچک‌تر کرده تا زمان دقیق رخداد شراره را بدست آوریم. با توجه به اینکه رابطه مستقیمی بین میزان خروج ذرات باردار پروتون و الکترون از سطح با شراره‌ها وجود دارد، ابتدا نمودارهای پروتون و الکترون بررسی خواهد شد. با استفاده از سایت www.satdat.ngdc.noaa.gov نمودارهای ۱۲ ماه سال ۲۰۱۴ را بررسی شد. با توجه به این نمودارها زمان‌هایی که میزان انرژی ذرات باردار یونیزه بالا می‌باشد را می‌توان مبنای رخداد شراره قرار داد (شکل‌های (۶)، (۷) و (۸)). در بررسی اولین نمودار که مربوط به ماه ژانویه می‌باشد مشاهده می‌شود که در ماه ژانویه سال ۲۰۱۴ به این دلیل که در روزهای پنجم تا یازدهم میزان انرژی ذرات یونیزه افت‌وخیز شدیدی دارد، احتمال رخداد شراره با انرژی بالا در این بازه ی زمانی وجود دارد. همچنین می‌توان نمودارهای دیگر ماه‌های سال ۲۰۱۴ را هم مورد بررسی قرار داد و روند کار را ادامه داد، اگرچه در این روش پژوهش به یک مورد بسنده شده است. در کار حاضر برای مثال شراره ماه ژانویه را انتخاب نموده و روند بررسی با توجه به این بازه ی زمانی انجام شده است. برای دیگر شراره‌ها در بازه‌های زمانی مختلف روند بررسی به همین شکل است. منظور از روند بررسی این است که وقتی زمان رخداد شراره بدست آمد، حال برای اثبات این موضوع به سراغ نمودارها و شکل‌ها و فیلم‌های دیگر در این بازه زمانی رفته تا رخداد شراره در این بازه ی زمانی ثابت شود.

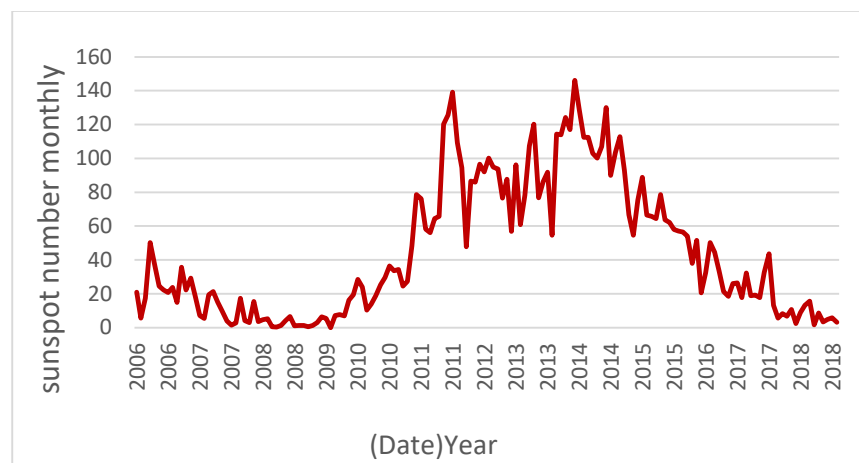
تمامی نکاتی که در مورد رخداد شراره در سال ۲۰۱۴ بیان شد، برای سال ۲۰۱۸ هم بیان می‌شود، البته به صورت برعکس. بر اساس داده‌های بدست آمده از سایت Cactus CME و رسم نمودار خروج جرم از خورشید و لگه‌های خورشیدی ماهیانه و روزانه مشخص می‌شود که سال ۲۰۱۴ بیشینه و سال ۲۰۱۸ کمینه رخداد این دو پارامتر را داریم. بدیهی است که سرعت بیشینه و سرعت متوسط پلاسمای خارج شده از خورشید هم در این سال در بیشینه میزان خود باشد (نمودارهای (۴) و (۵)). با توجه به اینکه سال ۲۰۱۴ همه داده‌ها مقدار بیشینه دارند، بی‌گمان در این سال افزون بر میکرو



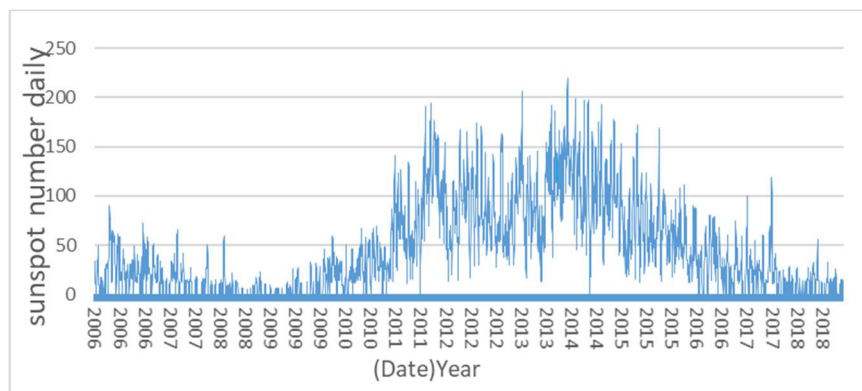
شراره‌ها، شراره‌هایی با انرژی بالا هم رخ داده است. برای بدست آوردن زمان رخداد این شراره‌ها نمودارهای این سال نیز مورد بررسی قرار گرفته است.



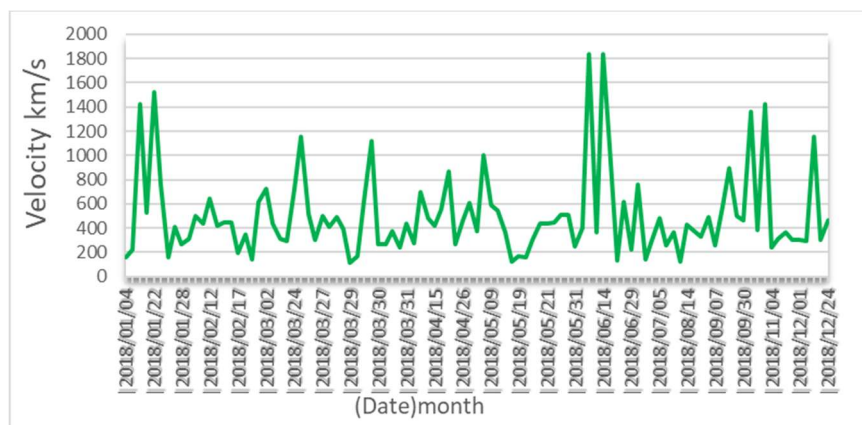
شکل ۱ نمودار خروج جرم از خورشید از سال ۲۰۰۶ تا ۲۰۱۸ براساس سایت cactus CME.



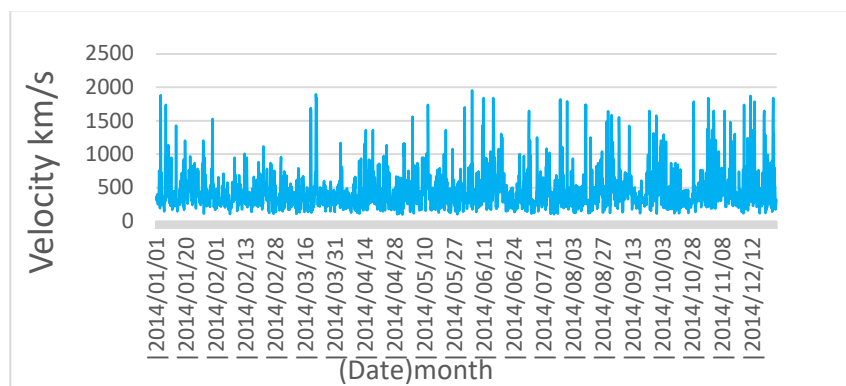
شکل ۲ نمودار ماهیانه لگه‌های خورشیدی از سال ۲۰۰۶ تا ۲۰۱۸.



شکل ۳ نمودار روزانه‌ی لگه‌های خورشیدی از سال ۲۰۰۶ تا ۲۰۱۸.



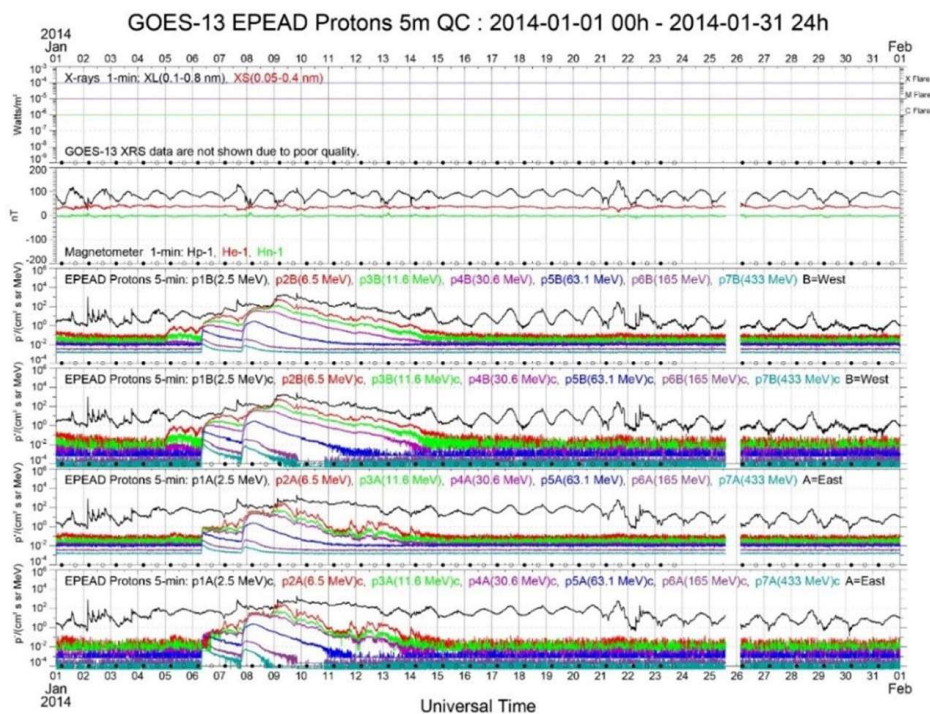
شکل ۴ نمودار سرعت بیشینه خروج جرم از خورشید سال ۲۰۱۸ براساس سایت Cactus CME.



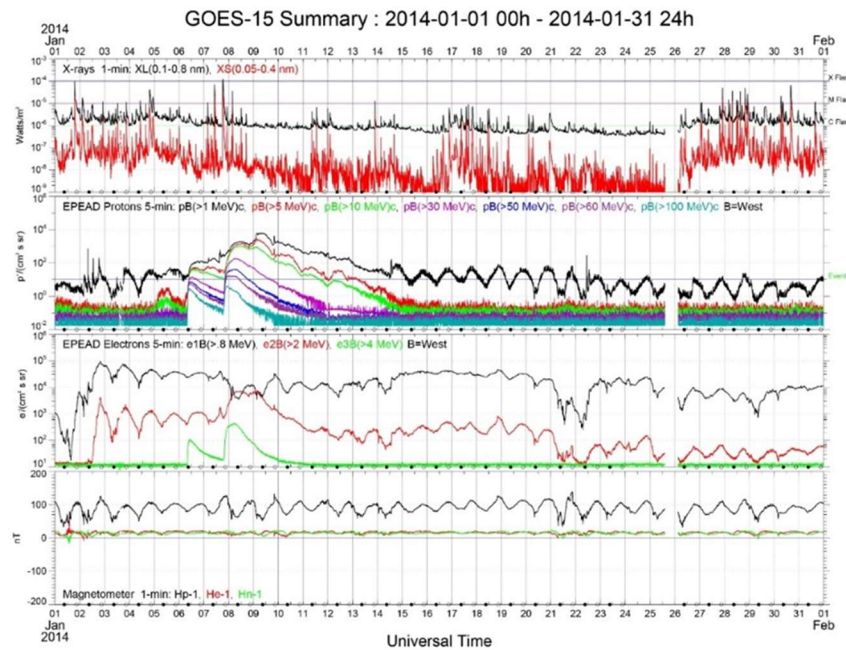
شکل ۵ نمودار سرعت بیشینه خروج جرم از خورشید سال ۲۰۱۴ براساس سایت Cactus CME.



پس از بررسی‌های انجام شده از نمودارهای پروتون سال ۲۰۱۴ مشاهده می‌شود که در بعضی از زمان‌ها شدت انرژی شارها به حدی بوده است که به دنبال رخداد شارها پر انرژی، یک فوران پر جرم از خورشید نیز به فضای بین سیارات گسیل شده است. البته لازم به یادآوری است که شارهای بسیار زیادی رخ می‌دهد اما در حد میکرو شارها می‌باشند.



شکل ۶ نمودار پروتون ماه ژانویه سال ۲۰۱۴ با استفاده از داده‌های ماهواره‌ی گونس ۱۳.



شکل ۷ نمودار ذرات خروج جرم از خورشید ماه ژانویه سال ۲۰۱۴ با استفاده از داده‌های ماهواره‌ی گونِس ۱۵.

در نمودار شکل (۸) که مربوط به سال ۲۰۱۸ است، به این دلیل که تمامی پارامترها در این سال به میزان کمینه خود هستند، انتظار می‌رود که شراره‌ها در حد میکرو شراره رخ دهند. پیش‌بینی می‌شود که اگر به ویدئوهای بدست آمده از ماهواره رصدخانه‌ی دینامیکی خورشید و یا ماهواره لاسکو در بازه‌ی زمانی مورد نظر در این سال رجوع شود، رخداد شراره مشاهده شود. شکل (۱۴) نمونه‌ای از تصاویر شراره می‌باشد. افزون بر پروتون‌ها و الکترون‌ها تابش پرتو ایکس هم باید با رخداد شراره همخوانی داشته باشد. شکل (۹) مربوط به نمودار سال ۲۰۱۴ است که از سایت www.polarlicht-vorhersage گرفته شده است. با بررسی دقیق این نمودار مشاهده می‌شود که میزان انرژی پرتو ایکس در این سال در حد کلاس X یعنی بالاترین میزان انرژی می‌باشد. برعکس در شکل (۱۰) میزان انرژی پرتو ایکس در حد کلاس C می‌باشد، که این تفاوت به روشنی نشان دهنده هدف مورد نظر می‌باشد. شکل (۱۱) نمودار ذرات پروتون بین روزهای چهارم تا هفتم ژانویه سال ۲۰۱۸ از ماهواره گونِس ۱۵ را نشان می‌دهد. با تمام این بررسی‌ها برای تایید درستی نتایج کار، تنها راه ممکن مشاهده فیلم و عکس شراره‌ها است. با استفاده از سایت <http://Lasco-> www.nrl.navy.mil که مربوط به نیروی دریایی آمریکا و ماهواره‌ی لاسکو می‌باشد و همچنین



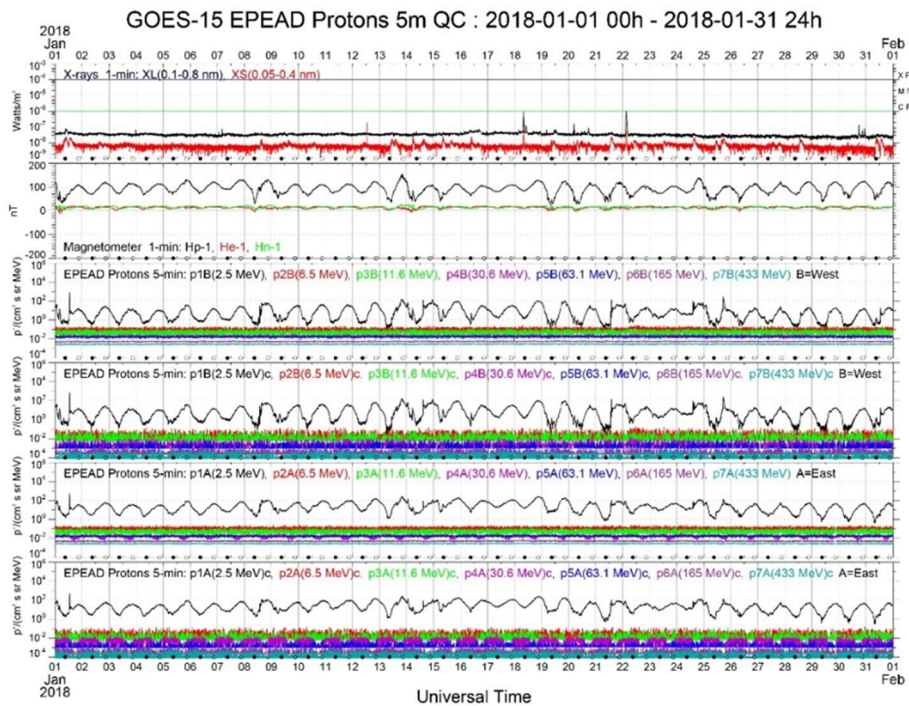
سایت‌های <http://umbra.nascom.nasa.gov> و www.soho.nascom.nasa.gov که مرتبط با ماهواره سوهو می‌باشند، می‌توان فیلم و عکس لحظه رخداد شراره را بدست آورد. و از این راه اثبات کرد که فرآیند رسم نمودارها درست است.

پس از مشخص شدن وجود بیشینه فعالیت مغناطیسی خورشید در سال ۲۰۱۴، برای اثبات این موضوع می‌توان به صفحه‌ی وب به آدرس www.helioviewer.org مراجعه کرده و فیلم رخداد شراره بر روی سطح خورشید را که به وسیله رصدخانه دینامیکی خورشید و بسته ابزاری AIA در طول موج ۱۷۱ آنگسترم تهیه شده است را بررسی نمود. پس از مشاهده این فیلم زمان رخداد شراره‌هایی که دارای انرژی بیشینه در بازه زمانی مورد نظر، یعنی روز اول تا هشتم ماه ژانویه سال ۲۰۱۴ هستند، را می‌توان بدست آورد. در جدول (۲) زمان دقیق شراره‌ها با مقدار انرژی آن‌ها درج شده است. بر این اساس بی‌گمان باید بر اساس داده‌های بدست آمده در این زمان‌ها هم نمودار ذرات پروتون، الکترون و پرتو ایکس گواهی این موضوع باشند. به عنوان نمونه، اگر یکی از شراره‌ها در نظر گرفته شود که در روز هفتم در ساعت ۲۱:۱۴:۳۵ با میزان انرژی ۵۰۶۰/۴ وات بر مترمربع رخ داده است، با توجه به نمودار پروتون در این بازه‌ی زمانی، مشخص است که این نمودار هم رخداد شراره را اثبات می‌کند.

در سایت www.swpc.noaa.gov نمودارهایی را می‌توان مشاهده کرد که به صورت دقیق‌تر به بررسی این نتایج پرداخته است. در نمودار شکل (۹) روشن است که هر روز به هشت بازه‌ی سه ساعته تقسیم شده است. ما بین روزهای ششم و هفتم در حدود ساعت ۸ صبح (بر اساس جدول (۲)) رخداد شراره مشاهده می‌شود و این همان نتیجه و هدف مورد نظر است. در نمودار شکل‌های (۹)، (۱۰) در حدود ساعت هفت بعدظهر (بر اساس جدول (۲)) دوباره رخداد شراره مشاهده می‌شود. در این نمودار بر اساس مشاهده‌ی فیلم و نتایجی که در جدول (۲) ثبت شده است، سه شراره در این زمان رخ داده است که با آنچه در نمودار مشاهده می‌شود، هماهنگ است و منحنی نمودار با شدت بیشتری رو به بیشینه مقدار خود رسم شده است. پس از این زمان نمودارهای رسم شده سیر نزولی خود دارند. به این معنا که در حقیقت شراره‌های در حد کلاس A نسبت به شراره‌هایی در حد کلاس X بیشتر رخ می‌دهند.

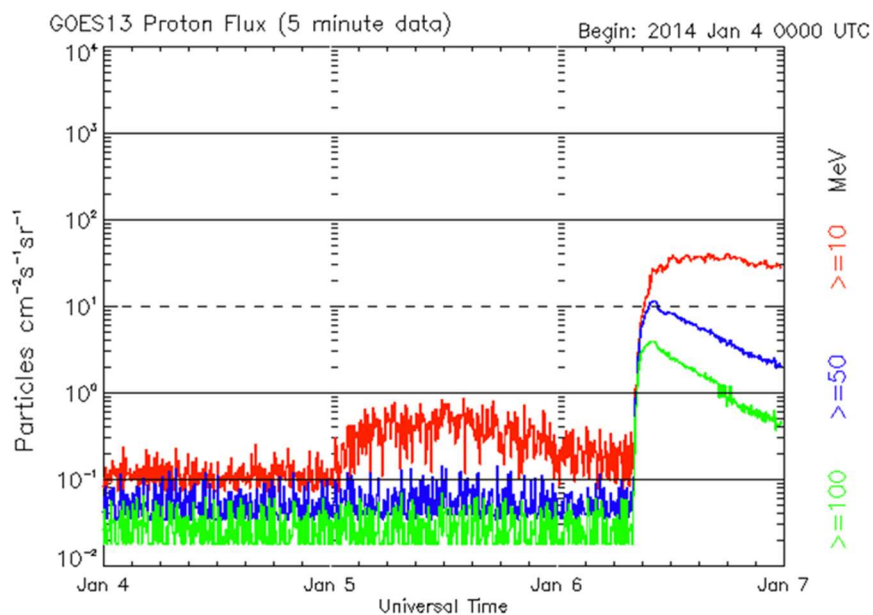
در نمودارهای سال ۲۰۱۸ بی‌گمان افت و خیز شدیدی به دلیل نبود شراره با انرژی بالا رخ نخواهد داد. در مجموعه تصاویر شکل (۱۲) با توجه به فیلم مشاهده شده، لحظه دقیق شراره‌ها نشان داده شده است. شکل (۱۳) تصاویری از لحظه‌ی رخدادن CME که توسط ماهواره‌ی لاسکو با دیسک

C3 در ۷، ۶ و ۹ ماه ژانویه سال ۲۰۱۴ گرفته شده است. در این شکل، (الف) تصویر مربوط به دیسک C3 در تاریخ ۰۶-۰۱-۲۰۱۴ در زمان ۱۰/۰۶/۰۶ و ۱۳ (ب) تصویر مربوط به دیسک C3 در تاریخ ۰۹-۰۱-۲۰۱۴ در زمان ۰۶/۵۴/۰۵ را نشان می‌دهد. هدف اصلی این پژوهش اثبات وجود ارتباط مستقیم بین پدیده‌های خورشیدی و همچنین اثبات این موضوع که دلیل اصلی انتشار ذرات باردار پروتون و الکترون رخداد شارها با میزان انرژی بالا است، بوده است. شکل (۱۵) و (۱۶) نمودارهای انرژی پرتو ایکس به ترتیب در روزهای ۴ تا ۷ و ۶ تا ۹ ماه ژانویه سال ۲۰۱۴ توسط ماهواره گوئس را نشان می‌دهد.

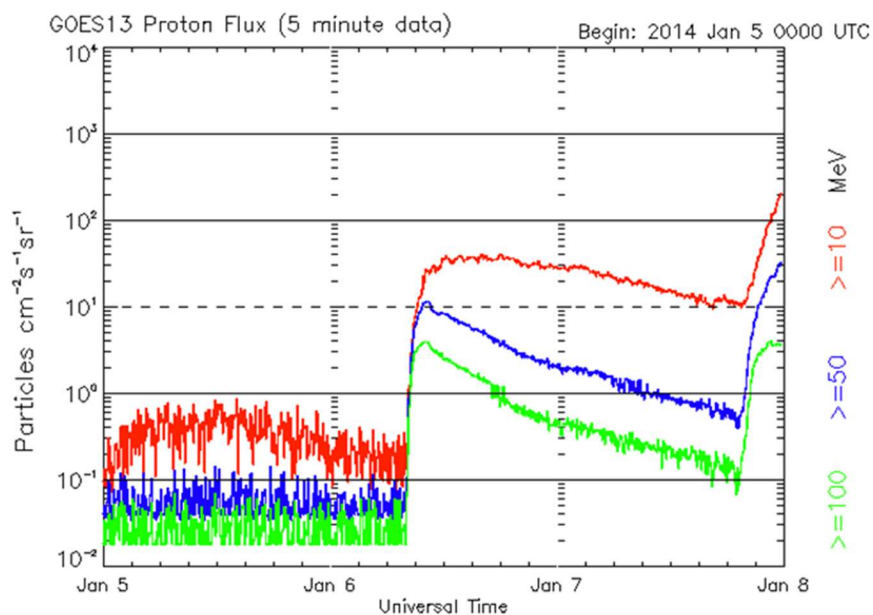


شکل ۸ نمودار پروتون ماه ژانویه سال ۲۰۱۸ با استفاده از داده‌های ماهواره‌ی گوئس ۱۵.

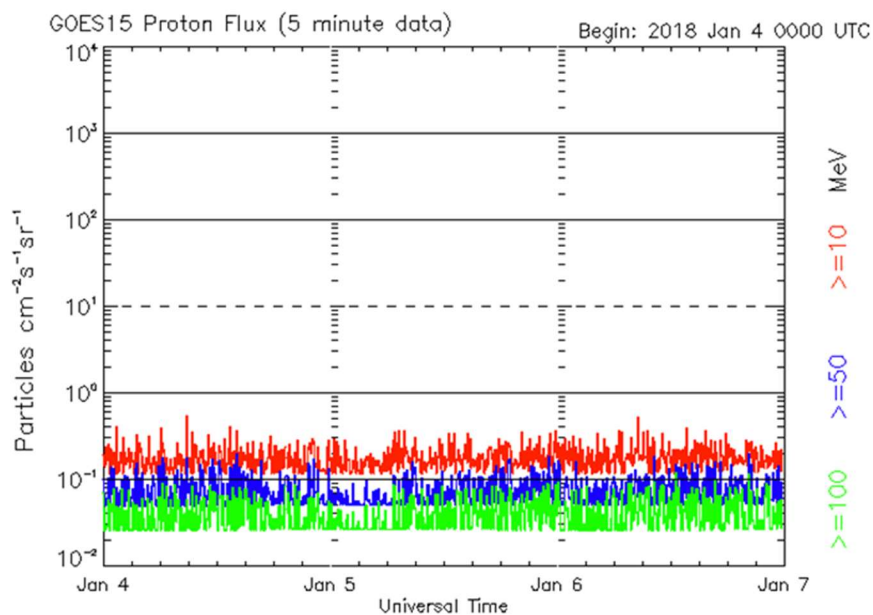




شکل ۹ نمودار ذرات پروتون بین روزهای چهارم تا هفتم ماه ژانویه سال ۲۰۱۴ از ماهواره گوس ۱۳.



شکل ۱۰ نمودار ذرات پروتون بین روزهای پنجم تا هشتم ماه ژانویه سال ۲۰۱۴ از ماهواره ی گوس ۱۳.

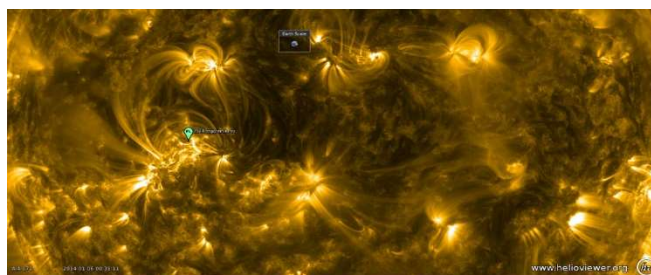


شکل ۱۱ نمودار ذرات پروتون بین روزهای چهارم تا هفتم ژانویه سال ۲۰۱۸ از ماهواره گوتس ۱۵.

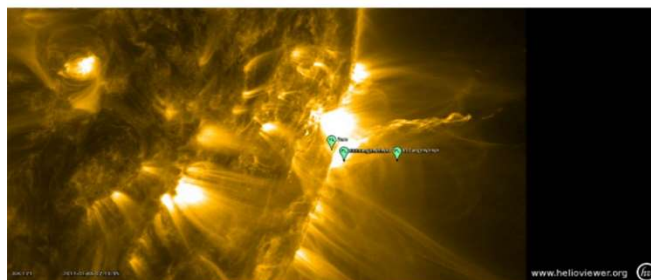
جدول ۲ تاریخ رخداد شارها بر اساس فیلم بدست آمده از سایت www.helioviewer.org

انرژی	میزان W/m ²	تاریخ	زمان
	۱۱۷۷	۲۰۱۴/۱/۶	۲۲:۱۳:۲۳
	۱۰۳۰	۲۰۱۴/۱/۶	۲۲:۱۳:۲۳
	۱۹۶۷/۵	۲۰۱۴/۱/۶	۰۰:۳۱:۱۱
	۲۱۰۴/۵	۲۰۱۴/۱/۶	۷:۴۶:۳۵
	۶۲۱۳	۲۰۱۴/۱/۷	۱۲:۵۹:۱۱
	۳۴۵۶/۲	۲۰۱۴/۱/۷	۱۸:۵۷:۴۰
	۲۰۶۷/۹	۲۰۱۴/۱/۷	۱۸:۵۷:۴۰
	۳۰۰۴/۵	۲۰۱۴/۱/۷	۱۸:۵۷:۴۰
	۵۰۶۰/۴	۲۰۱۴/۱/۷	۲۱:۱۴:۳۵
	۳۴۵۶	۲۰۱۴/۱/۷	۲۱:۱۴:۳۵
	۶۲۱۳	۲۰۱۴/۱/۸	۰۱:۱۵:۲۳





(الف)



(ب)

شکل ۱۲ تصاویر مربوط به رخداد شراره‌ها براساس جدول زمان‌بندی شماره‌ی ۲. (الف) تصویر رخداد شراره در تاریخ ۶-۱-۲۰۱۴ توسط رصدخانه‌ی دینامیکی خورشید به کمک بسته‌ی ابزاری AIA در طول موج ۱۷۱ آنگسترم در زمان ۰۰/۳۱/۱۱. (ب) تصویر رخداد شراره در تاریخ ۶-۱-۲۰۱۴ توسط رصدخانه‌ی دینامیکی خورشید به کمک بسته‌ی ابزاری AIA در طول موج ۱۷۱ آنگسترم در زمان ۰۷/۴۶/۳۵.

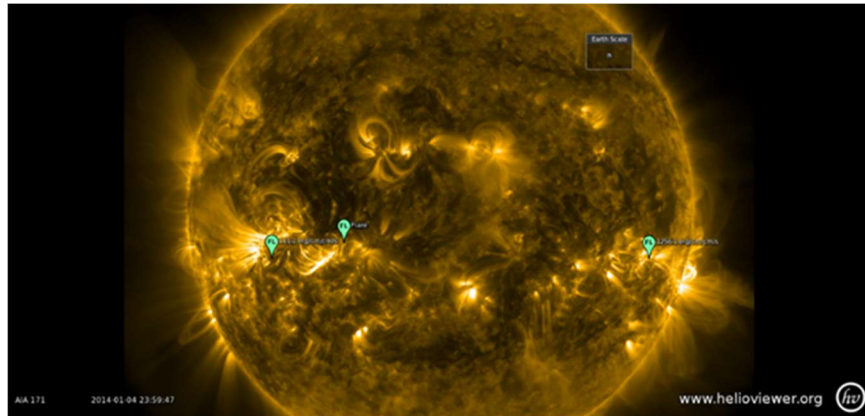


(ب)

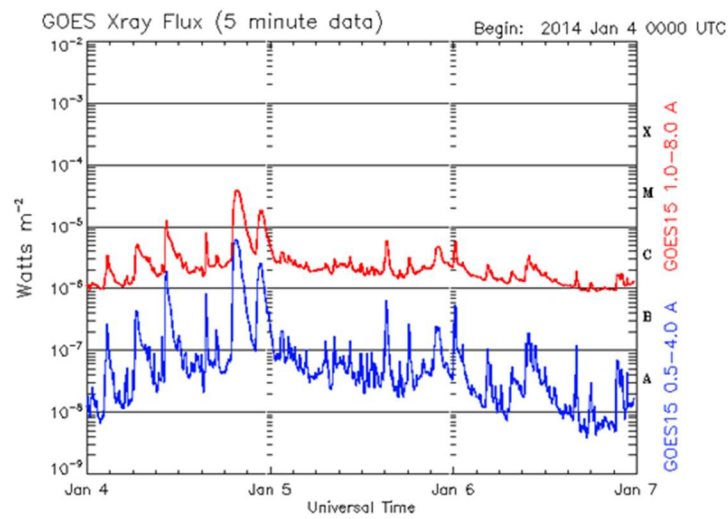


(الف)

شکل ۱۳ تصاویری از لحظه‌ی رخ دادن CME که توسط ماهواره لاسکو با دیسک C3 در ۶،۷ و ۹ ماه ژانویه سال ۲۰۱۴ گرفته شده است. (الف) تصویر مربوط به دیسک C3 در تاریخ ۰۶-۰۱-۲۰۱۴ در زمان ۱۰/۰۶/۰۶. (ب) تصویر مربوط به دیسک C3 در تاریخ ۰۹-۰۱-۲۰۱۴ در زمان ۰۶/۵۴/۰۵.

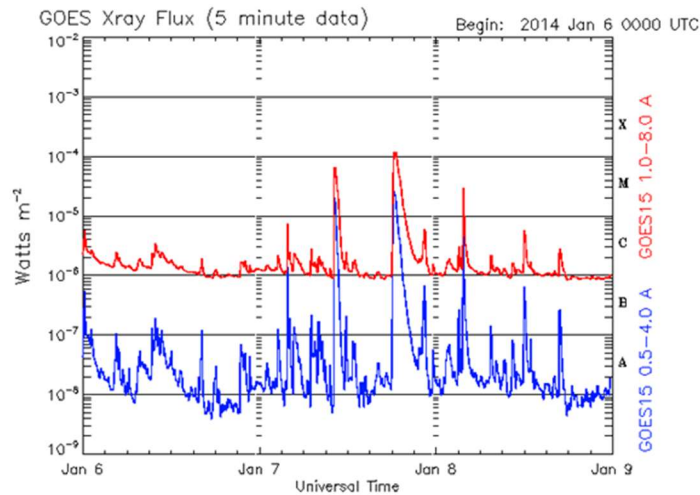


شکل ۱۴ تصویری از رخداد شراره در روز چهارم ماه ژانویه سال ۲۰۱۴ که توسط ماهواره‌ی SDO در طول موج ۱۷۱ آنگسترم به کمک بسته‌ی ابزار AIA گرفته شده است.



شکل ۱۵ نمودار انرژی پرتو ایکس در روزهای ۴ تا ۷ ماه ژانویه سال ۲۰۱۴ توسط ماهواره گونس.

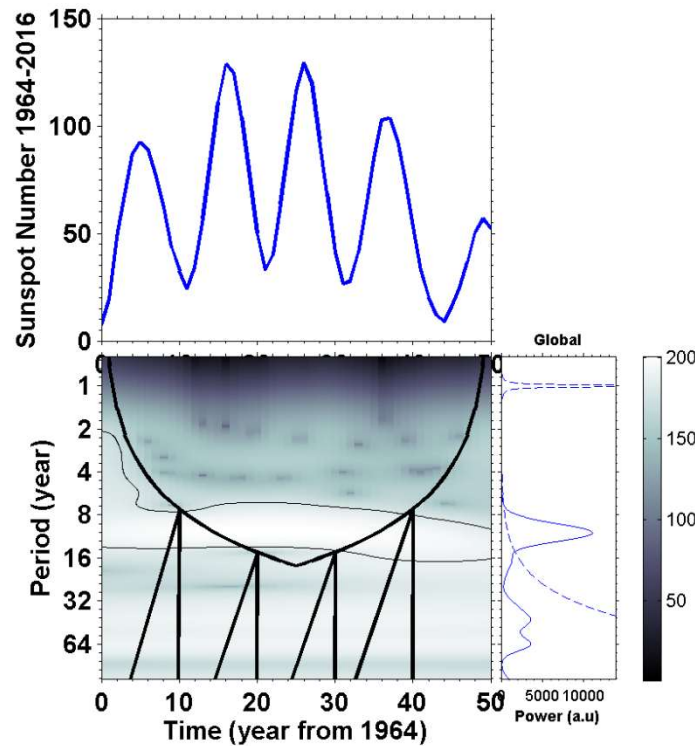




شکل ۱۶ نمودار انرژی پرتو ایکس در روزهای ۶ تا ۹ ماه ژانویه سال ۲۰۱۴ توسط ماهواره گونس.

ناحیه اطراف یک سیاره را که تحت تاثیر میدان مغناطیسی همان سیاره است، "مغناطیس سپهر یا مگنتوسفر" می گویند. کره زمین نیز مغناطیس سپهر یا مگنتوسفر دارد. مگنتوسفر چون یک پوسته نامرئی میدان مغناطیسی زمین را فرا گرفته است. مگنتوسفر در اثر وزش بادهای خورشیدی تغییر شکل داده و شکل و گستره آن پیوسته تغییر می یابد، اگرچه از هم نمی پاشد. مغناطیس سپهر یا مگنتوسفر زمین، زمین را در برابر بادهای خورشیدی و پرتوها و ذرات خطرناک خورشید محافظت می کند. وزش بادهای خورشیدی و اثرات آن بر میدان مغناطیسی زمین سبب می شود ناحیه نامرئی ویژه ای اطراف زمین تعریف شود که همان مگنتوسفر زمین می باشد. به بیان دیگر، مگنتوسفر مرز میدان مغناطیسی زمین با بادهای خورشیدی است. از این رو، میدان مغناطیسی زمین و مگنتوسفر زمین دو مفهوم جداگانه اما به هم وابسته اند. مگنتوسفر، زمین را از برخی پرتوها و ذرات مضر خورشیدی محافظت می کند.

به منظور بررسی دقیق اثر فعالیت مغناطیسی خورشیدی بر روی لایه مگنتوسفر زمین، به روش مویک طیف توان پارامترهای مهم یعنی تعداد لگه های خورشید و ضریب های مغناطیسی لایه مگنتوسفر زمین را در مدت سال های ۱۹۶۴ تا ۲۰۱۶ مورد بررسی قرار داده ایم.

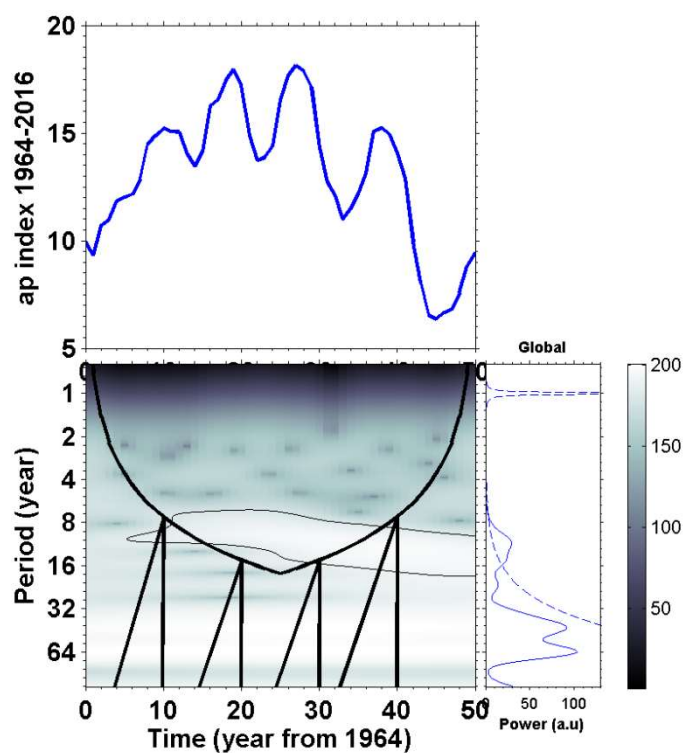


شکل ۱۷ نتایج آنالیز موجک نوسانات تعداد لکه‌های خورشید در مدت سال‌های ۱۹۶۴ تا ۲۰۱۶. شکل بالا نوسانات تعداد لکه‌های خورشید نسبت به زمان و شکل پایین آنالیز موجک است که نوسانات ۱۱ تا ۱۲ ساله غالب قابل مشاهده می‌باشد. ناحیه هاشور زده بر روی شکل منطقه‌ای است که در آن طیف توان موجک به دلیل اثرات نقاط انتهایی سیگنال‌های طولی محدود مختل می‌گردد. شکل پایین راست تبدیل فوریه نوسانات را نشان می‌دهد.

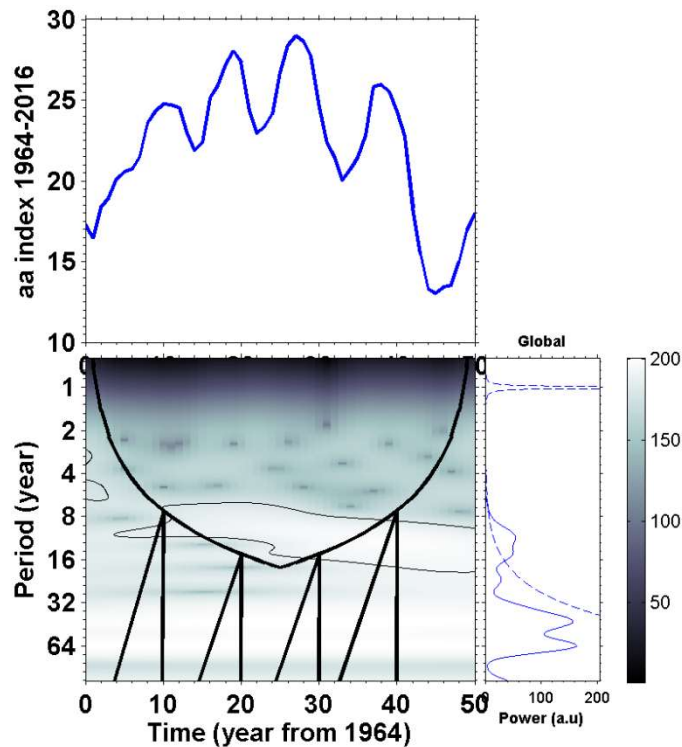
هر کمیت فیزیکی که بر حسب یک پارامتر و یا متغیر جداگانه تغییر کند، "سیگنال" نامیده می‌شود. سیگنال اگر متغیر زمان باشد، "سیگنال زمانی" و اگر متغیر مکان باشد "متغیر مکانی" نامیده می‌شود. دلیل اهمیت این سیگنال‌ها این است که شامل داده‌هایی در مورد منابع خود هستند. از این رو، با پردازش روی سیگنال‌ها می‌توان رفتار منابع را بررسی و پیش‌بینی نمود. در این کار، از روش تحلیل موجک با موج پایه مورلت استفاده شده است که ابزار مهمی برای پردازش نوسانات می‌باشد. شکل - های (۱۸)، (۱۹) و (۲۰) به ترتیب نتایج بررسی موجک را برای متغیرهای تعداد لکه‌های خورشید، ایندکس aa و ایندکس ap نشان می‌دهند. با مقایسه این سه تصویر مشاهده می‌شود که هر سه پارامتر با دوره تناوب کمابیش ۱۱ تا ۱۲ ساله در حال تغییر و نوسان می‌باشند. به بیانی دیگر، با



افزایش فعالیت مغناطیسی خورشید که به دنبال آن فوران‌های خورشید نیز بیشتر رخ می‌دهد، وضعیت لایه مگنتوسفر زمین نیز دچار تغییر و دگرگونی شده و می‌تواند بر روی آب و هوای زمین نیز تاثیر بگذارد. با کاهش روند فعالیت‌های مغناطیسی این روند سیر کاهشی می‌یابد.



شکل ۱۸ نتایج آنالیز موجک ایندکس ap در مدت سال‌های ۱۹۶۴ تا ۲۰۱۶. شکل بالا نوسانات ایندکس ap سبت به زمان و شکل پایین آنالیز موجک است که نوسانات ۱۱ تا ۱۲ ساله غالب قابل مشاهده می‌باشد. ناحیه هاشور زده بر روی شکل منطقه‌ای است که در آن طیف توان موجک به دلیل اثرات نقاط انتهایی سیگنال‌های طولی محدود مختل می‌گردد. شکل پایین راست تبدیل فوریه نوسانات را نشان می‌دهد.



شکل ۱۹ نتایج آنالیز موجک ایندکس aa در مدت سال‌های ۱۹۶۴ تا ۲۰۱۶. شکل بالا نوسانات ایندکس aa نسبت به زمان و شکل پایین آنالیز موجک است که نوسانات ۱۱ تا ۱۲ ساله غالب قابل مشاهده می‌باشد. ناحیه هاشورزده بر روی شکل منطقه‌ای است که در آن طیف توان موجک به دلیل اثرات نقاط انتهایی سیگنال‌های طولی محدود مختل می‌گردد. شکل پایین راست تبدیل فوریه نوسانات را نشان می‌دهد.

۳. نتیجه‌گیری

هدف اصلی این پژوهش، اثبات وجود ارتباط نزدیک بین تمامی پدیده‌های سطح خورشید و همچنین، اثبات میدان مغناطیسی خورشید به عنوان مینا و منشأ اصلی تمامی رخداد‌های در سطح آن بود. تمرکز بیشتر بر روی دو پدیده شراره‌ها و CME‌ها قرار گرفت. زمانی که در ساختار پیچیده میدان مغناطیسی خورشید تغییراتی محسوس به وجود آید که این تغییرات با فاز چرخه فعالیت خورشید ارتباط نزدیکی دارند، فراوانی چنین پدیده‌هایی در سطح خورشید به روشنی مشاهده



می‌شود. در زمان‌های نزدیک به اوج فعالیت خورشید شراره‌ها بیش از ۵۰ بار، بیشتر از زمانی که خورشید آرام است، شکل می‌گیرند و بازه‌ی زمانی رخداد فوران‌های تاجی ماده، که در شرایط عادی هر چند روز یا هفته‌ای یک بار رخ می‌دهد، به حدود یک روز کاهش می‌یابد. البته این نکته را نیز باید در نظر گرفت که تنها فراوانی و احتمال رخداد این پدیده‌هاست که ارتباطی مشخص با فاز چرخه فعالیت خورشید دارد و هنوز ارتباط روشنی میان شدت پدیده‌های مغناطیسی اشاره شده و سال‌های اوج چرخه فعالیت خورشید مشاهده نشده است. باد خورشیدی نیز در زمان شدت یافتن فعالیت خورشید سریع‌تر و شدیدتر جریان یافته و فاصله‌های دورتری از خورشید در فضای میان سیاره‌ای را پوشش می‌دهد. از این رو، تعداد ذرات بارداری که روانه‌ی جو زمین می‌گردند، افزایش چشمگیری می‌یابد و در نتیجه شفق‌های قطبی گسترده و پرنوری در زمین مشاهده می‌شود. مجموع همه این فعالیت‌ها سبب می‌شود تا قلمرو مغناطیسی خورشید در منظومه شمسی گسترش یابد و سد عظیمی که در برابر تابش‌ها و ذرات کیهانی هجوم آورنده به زمین تشکیل می‌شود، محکم‌تر و مقاوم‌تر از هر زمان دیگری باشد.

این دو پدیده زمانی که میدان مغناطیسی خورشید دچار اختلال شده و حتی گاهی با هم رخ می‌دهند. هنگام رخداد هر دو، انرژی بسیار زیادی به صورت انرژی گرمایی و جنبشی به صورت ناگهانی آزاد می‌شود. اگرچه تفاوت‌هایی نیز با هم دارند. به عنوان نمونه،

(۱) شراره‌ها فوران‌های غول‌آسا از پرتوهای X و پرنرژی هستند که با سرعت نور در همه‌ی جهت‌ها منتشر می‌شوند، ولی CMEها ابرهای غول‌پیکری از ذرات پلاسما هستند که به درون فضا دمیده می‌شوند.

(۲) همچنین، ۱ تا ۳ روز زمان می‌برد تا CMEها به زمین برسند، در حالی که شراره‌ها فاصله‌ی خورشید تا زمین را در ۸ دقیقه می‌پیمایند.

(۳) فوران‌های گوناگونی روی خورشید رخ می‌دهد. هم شراره‌های خورشیدی و هم فوران‌های تاجی با انفجارهایی سهمگینی از انرژی همراهند ولی با این وجود بسیار با هم متفاوتند. این دو پدیده گاهی همزمان رخ می‌دهند. در حقیقت نیرومندترین شراره‌ها کمابیش همیشه با فوران‌های تاجی در ارتباط هستند. ولی هر کدام ذرات متفاوتی را گسیل می‌کنند.

(۴) ظاهر آن‌ها و شیوه جابه‌جایی‌شان متفاوت است و اثرهای متفاوتی را هم در نزدیکی سیاره‌ها ایجاد می‌کنند.

هر دوی این فوران‌ها زمانی پدید می‌آیند که جنبش‌های درونی خورشید میدان‌های مغناطیسی آن را درهم می‌پیچاند و تغییر می‌دهد. این میدان‌ها ناگهان تراز و آرایشی دوباره گرفته و سبب آزاد شدن مقدار زیادی انرژی به فضا می‌گردند. اگر به صورت درخشندگی نوری ناگهانی باشند، شراره خورشید است.

شراره‌ها که مقدار عظیمی انرژی در خود دارند، می‌توانند از چند دقیقه تا چند ساعت دوام بیاورند. درخشش یک شراره که با سرعت نور حرکت می‌کند ۸ دقیقه طول می‌کشد تا به زمین برسد. بخشی از انرژی آزاد شده در شراره سبب شتاب بخشیدن به ذرات بسیار پر انرژی شده که آن‌ها هم چند ده دقیقه بعد به زمین می‌رسند. این پیچ خوردگی‌های مغناطیسی می‌تواند گونه دیگری از انفجار را هم پدید آورد که سبب پرتاب مواد خورشیدی به فضا شده که همان CME می‌باشد.

افزون بر این، یک شراره نوعی طی حدود ۵ دقیقه به بیشینه فعالیت خود می‌رسد و طی حدود ۲۰ دقیقه هم ناپدید می‌شود. برخی از شراره‌ها می‌توانند تا سه ساعت هم دوام بیاورند. بدنبال یک شراره، مقادیر بسیار زیادی انرژی در طول موج‌های پرتو ایکس، گاما و امواج رادیویی آزاد می‌گردد.

ذرات زیراتمی شامل الکترون، که در بسیاری موارد سرعت آن‌ها به نصف سرعت نور می‌رسد، پروتون و تعدادی هم عناصر سنگین‌تر به فضا پرتاب شده به صورت ابری پلاسمایی به محیط بین سیاره‌ای پرتاب می‌شوند. به دنبال برخورد پلاسما و ذرات پرانرژی با تاج امواج، شوک به وجود می‌آید که سطح خورشید را تحت تاثیر قرار داده و موجب به وجود آمدن زبانه‌های جدید می‌شود. این را هم می‌توان با اطمینان گفت که در هر ناحیه از سطح خورشید که لگه‌های خورشیدی وجود داشته باشد، امکان بروز شراره نیز وجود خواهد داشت.

نتیجه تمام این پژوهش‌ها این است که میدان مغناطیسی خورشید نقش اصلی و مهمی را در رخدادان تمامی پدیده‌های خورشیدی ایفا می‌کند. تحرکات و جریان‌های میدان مغناطیسی خورشید است که سبب شتاب گرفتن پلاسما و ذرات باردار خورشید می‌گردد [۵]. در صورت نبود یا فعالیت کم این میدان مغناطیسی، پلاسمای خورشید شتاب و انرژی نخواهد گرفت و به دنبال آن پدیده‌های خورشید رخ نخواهند داد. اگر روش عملکرد صحیح میدان مغناطیسی در فرآیند اتصال دوباره مغناطیسی وجود نداشته باشد، شکل‌گیری CMEها دچار اختلال شده و حتی شاید چنین پدیده‌ای در سطح خورشید رخ ندهد. نتیجه‌ی مهم و دیگری که شاید به نظر نقششان کم‌رنگ به نظر برسد،



داده‌های درست و دقیقی است که ماهواره‌ها به ویژه ماهواره‌های هواشناسی برای پژوهش در اختیار دانشمندان قرار می‌دهند.

نتایج محاسبات عددی دقیق این پژوهش نشان داد که همبستگی قوی بین فعالیت‌های مغناطیسی خورشید و تغییرات ایندکس‌های مشخصه لایه مگنتوسفر زمین وجود داشته که به پیروی آن می‌تواند بر روی اتمسفر زمین نیز تاثیر بگذارد.

۴. تقدیر و تشکر

نویسندگان از داوران محترم برای نظرات و پیشنهادات ارزشمند که منجر به بهبود نسخه اولیه مقاله گردید تقدیر و تشکر می‌نمایند.

منابع

- [1] Tavabi E. & Koutchmy S., "Chromospheric Peculiar Off-limb Dynamical Events from IRIS Observations", *The Astrophysical Journal* **883**, id. 41. 2019. <https://doi.org/10.3847/1538-4357/ab3730>.
- [2] Tavabi E., Koutchmy S. and Golub L., "Polar Corona Plumes as Jet-like Tornados", *The Astrophysical Journal* **866**, 35T, 2018. <https://doi.org/10.3847/1538-4357/aadc64>.
- [3] Tavabi E., "Synchronized Observations of Bright Points from the Solar Photosphere to Corona", *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **476**, 868-874, 2018. <https://doi.org/10.1093/mnras/sty020>
- [4] Zeighami S., Tavabi E., and Amirkhanlou E, "Waves propagation in network and inter-network bright points channels between the chromosphere and transition regions with IRIS observations", *Journal of Astrophysics and Astronomy* **41**, 1-14, 2020. <https://doi.org/10.1007/s12036-020-09633-y>.
- [5] Koutchmy S., Tavabi E. & Urtado O., "Observation of galactic cosmic ray Spallation Events from the SoHO mission 20-Year operation of LASCO", *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **478**, 1265-1271, 2018. <https://doi.org/10.1093/mnras/sty1205>.
- [6] Williams D. R., Torok T., Demoilin P., van Driel-Gesztelyi L., & Kliem B., "Eruption of a Kink-unstable Filament in NOAA Active Region 10696", *The Astrophysical Journal* **628(2)**, L163, 2005. <https://doi.org/10.1086/432910>.
- [7] Labrose N., Heinzl P., Vial J. C., et al., "Physics of Solar Prominences: I—Spectral Diagnostics and Non-LTE Modelling", *Space Science Reviews* **151**, 243, 2010. <https://doi.org/10.1007/s11214-010-9630-6>.
- [8] Gopalswamy N., Shimojo M., Lu W., et al., "Prominence Eruptions and Coronal Mass Ejection: A Statistical Study Using Microwave Observations", *The Astrophysical Journal* **586**, 562, 2003. <https://doi.org/10.1086/367614>.
- [9] Filippov B., "A Filament Eruption on 2010 October 21 from Three Viewpoints", *The Astrophysical Journal* **773**, 10, 2013. <https://doi.org/10.1088/0004-637X/773/1/10>.
- [10] Zuccarello F. P., Seaton D. B., Filippov B., Mierla M., et al., Erratum, "Observational Evidence of Torus Instability as Trigger Mechanism for Coronal Mass Ejections, The



- 2011 August 4 Filament Eruption”, *ApJ*, **795**, 175, 2014. <https://doi.org/10.1088/0004-637X/785/2/88>.
- [11] Zhang Q. M., Li D., & Ning Z. J., “Simultaneous Transverse and Longitudinal Oscillations in a Quiescent Prominence Triggered by a Coronal Jet”, *The Astrophysical Journal* **851**, 47, 2017. <https://doi.org/10.3847/1538-4357/aa9898>.



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



شبیه‌سازی ذره‌ای دوبعدی شتاب الکترون در برهم‌کنش پالس لیزری کوتاه با پلاسمای دارای رمپ چگالی در رژیم حبایی^۱ آمنه کارگریان^۲

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۱۱/۲۹
تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۰۳/۰۵
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۴/۰۶

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران
دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا
سال سیزدهم، پیاپی ۳۵، زمستان ۱۴۰۲
صص ۵۷ - ۶۹

چکیده:

در این مقاله، با استفاده از شبیه‌سازی ذره‌ای دوبعدی پلازما، شتاب الکترون در رژیم حبایی در اثر برهم‌کنش پالس لیزری پر شدت کوتاه با یک پلاسمای رقیق دارای رمپ چگالی مورد بررسی قرار گرفته است. در اثر نیروی پاندروماتیو لیزری، موج پلاسمایی و میدان الکتریکی متناظر با آن در پلازما تشکیل می‌شود. الکترون‌های تزریق شده در ناحیه‌ی متمرکزکننده و شتاب‌دهنده‌ی موج پلاسمایی می‌توانند از موج انرژی گرفته و تا انرژی‌هایی از مرتبه‌ی گیگاالکترون‌ولت شتاب داده شوند. نتایج شبیه‌سازی ذره‌ای دوبعدی نشان می‌دهد با افزایش شیب چگالی پلازما، سرعت فاز موج پلاسمایی ایجاد شده افزایش و طول موج متناظر با آن کاهش می‌یابد. این امر موجب جابجایی ناحیه‌ی متمرکزکننده و شتاب‌دهنده‌ی موج پلاسمایی و در نهایت افزایش طول شتاب در فرآیند شتابدهی الکترون می‌گردد. با در نظر گرفتن پالس لیزری با دامنه شدت بدون بعد $a_0 = 4$ ، پهنای پالس $c\tau = 5\mu m$ و پلازما با رمپ چگالی به طول $L = 20$ ، میدان الکتریکی شتاب‌دهنده متناظر با موج پلاسمایی با دامنه‌ی $E_0 = 200 GeV / m$ بدست آمده. نتایج بدست آمده می‌تواند در انتخاب پروفایل مناسب چگالی پلازما در طراحی سامانه‌ی شتاب‌دهنده لیزر- پلازما برای دستیابی به انرژی‌هایی از مرتبه گیگاالکترون‌ولت در زمان‌های کوتاه دارای اهمیت باشد.

واژگان کلیدی: شبیه‌سازی ذره‌ای دوبعدی، رمپ چگالی پلازما، موج دنباله.

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2023.42964.1314

^۲ استادیار، پژوهشکده پلازما و گداخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، تهران، ایران. Email: akargarian@aeoi.org.ir



۱. مقدمه

در سازوکار شتابدهی در سامانه‌ی برهم‌کنش لیزر-پلازما، عامل فیزیکی تولید موج پلاسمایی نیروی گرانیوی^۱ لیزر است که از وجود یک شیب در پروفایل شدت لیزر ناشی می‌شود. این نیرو الکترون‌ها را در نیمه‌ی جلویی یک پالس لیزر که در آن شیب شدت منفی است به سمت جلو و در نیمه‌ی عقبی پالس به سمت عقب می‌راند و در نتیجه سبب جدایش بار در پلازما می‌شود. با انتشار یک پالس لیزری پرشدت و کوتاه در پلاسمای رقیق، نیروی گرانیوی شعاعی لیزر الکترون‌ها را از مرکز دور کرده و یک کانال یونی در پلازما شکل می‌گیرد و مؤلفه‌ی محوری نیروی گرانیوی لیزر با ایجاد اختلال در چگالی پلازما سبب تولید میدان‌های طولی شده و در پشت سر خود موجی از نوسانات الکترونی پلازما برجای می‌گذارد که سرعت فازی کمابیش برابر سرعت گروه لیزر خواهد داشت و موج دنباله^۲ نامیده می‌شود [۱]. این موج تولید شده قادر است الکترون‌های تزریق‌شده به پلازما و یا الکترون‌های زمینه پلازما را به دام بیاندازد. همچنین، الکترون‌هایی که سرعتی برابر با سرعت فاز موج دارند و در ناحیه متمرکزکننده و شتاب^۳ الکترون به دام می‌افتند، می‌توانند همراه با موج حرکت کرده و با دریافت انرژی موج تا انرژی‌های بالا شتاب بگیرند.

پدیده‌های غیرخطی مختلف که در طول انتشار پالس لیزری پراثری کوتاه در پلازما اتفاق می‌افتند، موجب ایجاد اختلال در فرآیند شتاب الکترون می‌شوند. افزون بر این، اتلاف انرژی لیزر، کاهش طول هم‌فازی موج-الکترون و ناپایداری‌های لیزر-پلازما منجر به کاهش شتاب الکترون می‌شود. در سال‌های کنونی، روش‌های مختلفی برای کاهش محدودیت‌های شتاب الکترون در سامانه برهم-کنش لیزر-پلازما، گزارش شده است. در این راستا، استفاده از دو بیم لیزری انتشاریافته در جهات مختلف برای تولید موج پلاسمایی مورد بررسی قرار گرفته است [۲]. شتاب الکترون‌های تزریق شده در موج پلاسمایی برانگیخته‌شده توسط پالس‌های لیزری برخوردار نیز بررسی شده است [۳]. نتایج بررسی‌ها در این زمینه، افزایش انرژی الکترون با استفاده از یک پالس لیزری با قطبش شعاعی در حضور یک کانال یونی را نشان می‌دهد [۴]. افزون بر این، شتاب موج پلاسمایی لیزری در سامانه برهم‌کنش لیزر با پلاسمای جفت-یون [۵]، پلاسمای غیرهمگن [۶] و پلاسمای یون-الکترون-پوزیترون [۷] با استفاده از شبیه‌سازی ذره‌ای مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج تجربی بدست آمده در سامانه‌ی شتاب الکترون توسط موج برانگیخته‌شده در اثر برهم‌کنش بیم پروتون پراثری با

¹ Pondermotive Force

² Wake field

³ Focusing and Acceleration Region



پلازما، نشان می‌دهد برای دستیابی به میدان موج پلاسمایی پایدار و به‌دنبال آن شتاب الکترون تا انرژی‌های بالا، انتخاب یک شیب در چگالی پلازما مهم می‌باشد [۸]. نتایج شبیه‌سازی ارائه شده بر روی افزایش انرژی الکترون توسط موج برانگیخته شده با لیزر در حضور پلاسمایی با رمپ در انتهای چگالی آن نیز گزارش شده است [۹]. افزون بر این، تأثیر طول مقیاس چگالی پلازما بر روی شتاب الکترون در رژیم غیرخطی ($a_0 \geq 1$) به صورت تجربی [۱۰] و همچنین با استفاده از شبیه‌سازی ذره‌ای یک‌بعدی پلازما مورد بررسی قرار گرفته است [۱۱، ۱۲]. بهینه‌سازی انرژی الکترون در سامانه‌ی برهم‌کنش لیزر با پلازما نیز نشان می‌دهد با در نظر گرفتن پلاسمایی با طول رمپ مناسب می‌توان به انرژی‌های از مرتبه گیگا‌الکترون‌ولت دست یافت [۱۳].

مطالعات انجام شده در این زمینه نشان می‌دهند با تصحیح پارامترهای پالس لیزری محرک و هم‌چنین پارامترهای پلازما می‌توان فرآیند شتابدهی در سامانه‌ی برهم‌کنش لیزر-پلازما را بهبود بخشید. در این مقاله، با استفاده از روش شبیه‌سازی ذره‌ای دوبعدی، برهم‌کنش پالس لیزری قوی کوتاه با یک پلاسمای رقیق دارای رمپ چگالی، با هدف بررسی اثر طول رمپ، چگالی پلازما بر روی میدان دنباله‌ی ایجاد شده و شتاب الکترون در رژیم حبایی^۱ مورد بررسی قرار می‌گیرد. رژیم حبایی، برای لیزر با شدت بالا ($a_0 \geq 4$) و طول پالس کوتاه ($\tau \leq \lambda_p$) رخ می‌دهد [۱۳-۱۵]. در این رژیم شدت لیزر به اندازه‌ای زیاد است که مؤلفه عرضی نیروی پاندرماتیو^۲ لیزری تمام الکترون‌ها را از مرکز دور کرده و یک حباب در مرکز شکل می‌گیرد و مؤلفه طولی آن موجب نوسانات طولی الکترون‌ها و ایجاد موج پلاسمایی می‌گردد.

در بخش دوم مقاله حاضر، روش شبیه‌سازی و پارامترهای استفاده شده توضیح داده شده است. در بخش سوم، نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی تشکیل موج پلاسمایی، میدان متناظر با آن و شتاب الکترون ارائه شده است. بخش پنجم نیز شامل خلاصه و نتیجه‌گیری می‌باشد.

۲. شبیه‌سازی ذره‌ای دوبعدی

الگوریتم ذره‌ای یا ذره در جعبه (3PIC) به دلیل استفاده گسترده در زمینه‌های مختلف فیزیک از جمله مطالعه پلاسماهای اخترفیزیکی، پلاسماهای همجوشی، برهم‌کنش‌های پرتو ذرات-پلازما و لیزر-پلازما، و شتاب‌دهنده‌ها بسیار مورد توجه است. با این حال، با وجود استفاده گسترده‌ی روش

¹ Bubble regime

² Pondermotive Force

³ Particle-In-Cell



شبیه‌سازی برای مطالعه پدیده‌های فیزیکی مختلف، این روش از نظر محاسباتی بسیار گران می‌باشد که منجر به اعمال محدودیت‌هایی در شبیه‌سازی سامانه‌های فیزیکی می‌شود. این امر به‌ویژه هنگام شبیه‌سازی برهم‌کنش پلاسما با لیزر و پرتو ذرات قابل توجه هستند. در روش‌های جدید شبیه‌سازی PIC، هدف کاهش هزینه با کمینه محدودیت‌ها می‌باشد. کد شبیه‌سازی FBPIC1 [۱۶]، که در مقاله پیش‌رو از آن استفاده شده است، یک کد شبیه‌سازی دو بعدی دقیق در مختصات استوانه‌ای است که برای شبیه‌سازی سامانه‌های دارای تقارن از جمله سامانه‌ی برهم‌کنش لیزر- پلاسما بسیار مناسب می‌باشد. به صورت کلی، در روش شبیه‌سازی PIC چگالی ذرات بر روی یک شبکه مجازی به روش وزن‌دهی محاسبه می‌شود. سپس میدان الکتریکی با حل معادله پواسون بر روی نقاط شبکه بدست می‌آید. میدان الکتریکی شبکه از راه درون‌یابی در محل ذرات محاسبه می‌شود. پس از آن مکان و سرعت جدید ذرات با استفاده از معادله نیوتون- لورنتس نسبیته محاسبه می‌گردد. در این روش هر ذره هماهنگ با نیروی لورنتس اعمال شده توسط میدان‌های الکترومغناطیسی در موقعیت ذره حرکت می‌کند [۱۷]:

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}) \quad (1)$$

تغییرات فضا- زمانی میدان‌ها نیز بر اساس معادلات ماکسول به صورت زیر می‌باشد:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi\rho \quad (2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \vec{j} \quad (3)$$

$$-\vec{\nabla} \times \vec{E} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (4)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (5)$$

$$\vec{j}(\vec{x}) = \sum_{i=1}^N q_i v_i \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \quad (6)$$

$$\rho(\vec{x}) = \sum_{i=1}^N q_i \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \quad (7)$$

در بخش بعدی مقاله، با استفاده از این روش شبیه‌سازی، تشکیل میدان دنباله و شتاب الکترون در پلاسمای دارای رمپ چگالی در سامانه‌ی برهم‌کنش لیزر- پلاسما بررسی می‌شود.

¹ Fourier-Bessel Particle-In-Cell



برای بررسی برهم‌کنش پالس لیزری قوی کوتاه با یک پلاسما رقیق دارای رمپ چگالی با استفاده از شبیه‌سازی ذره‌ای، پالس لیزر گاوسی با طول‌موج $\lambda = 1 \mu m$ ، پهنای پالس $c\tau = 5 \mu m$ ، شعاع لکه‌ای $\omega_0 = 5 \mu m$ و دامنه‌ی بدون بعد $a_0 = 4$ که با شدت لیزر به صورت $I = 1.37 \frac{a_0^2}{\lambda^2} \times 10^{18} \omega / cm^2$ رابطه دارد، و پلاسما با چگالی $n = 4 \times 10^{24} m^{-3}$ و دارای رمپ با طول مقیاس متفاوت در نظر گرفته شده است. در شبیه‌سازی انجام‌شده طول جعبه شبیه‌سازی $L = 240$ و گام مکانی $\delta x = 0.05$ در نظر گرفته شده است. لازم به یادآوری است در شبیه‌سازی انجام شده زمان‌ها به عکس فرکانس لیزر و طول‌ها به طول موج لیزر بی‌بعد شده‌اند.

۳. بحث و نتیجه‌گیری

۳-۱ شبیه‌سازی تشکیل موج پلاسمایی

تشکیل موج پلاسمایی ایجاد شده در اثر برهم‌کنش پالس لیزر با پلاسما با سه رمپ چگالی متفاوت در دو زمان بی‌بعد $T = 120$ و $T = 210$ در شکل (۱) نشان داده شده است. شکل‌های ۱ (الف)، ۱ (ب)، ۱ (ج) به ترتیب (از بالا به پایین) تحول موج تشکیل شده برای چگالی با طول رمپ $L = 60$ ، $L = 40$ و $L = 20$ را نشان می‌دهند. همان‌گونه که مقایسه شکل‌ها نشان می‌دهند، با کاهش طول رمپ چگالی که متناظر با افزایش شیب چگالی پلاسما است، طول موج مربوط به موج پلاسمایی ایجاد شده در پلاسما کاهش می‌یابد. این امر منجر به تشکیل سریع‌تر ناحیه‌ی متمرکزکننده و شتاب الکترون می‌گردد. افزون بر این، با کاهش طول رمپ، سرعت فاز موج پلاسمایی افزایش پیدا می‌کند که می‌تواند موجب افزایش طول هم‌فازی موج-الکترون گردد.

تحول میدان الکتریکی متناظر با موج پلاسمایی تشکیل شده در پلاسما با دو طول رمپ متفاوت $L = 40$ و $L = 20$ (از بالا به پایین) در سه زمان بی‌بعد $T = 120$ ، $T = 210$ و $T = 280$ در شکل (۲) نشان داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود در پلاسما با طول رمپ کوچک‌تر نیمه‌ی دوم موج که ناحیه‌ی متمرکزکننده و شتاب‌دهنده‌ی الکترون است در زمان‌های کوتاه‌تری شکل گرفته است. افزون بر این، دامنه میدان دنباله‌ی شتاب‌دهنده ایجاد شده برای طول رمپ کوچک‌تر بیشتر از طول رمپ بزرگ‌تر است.

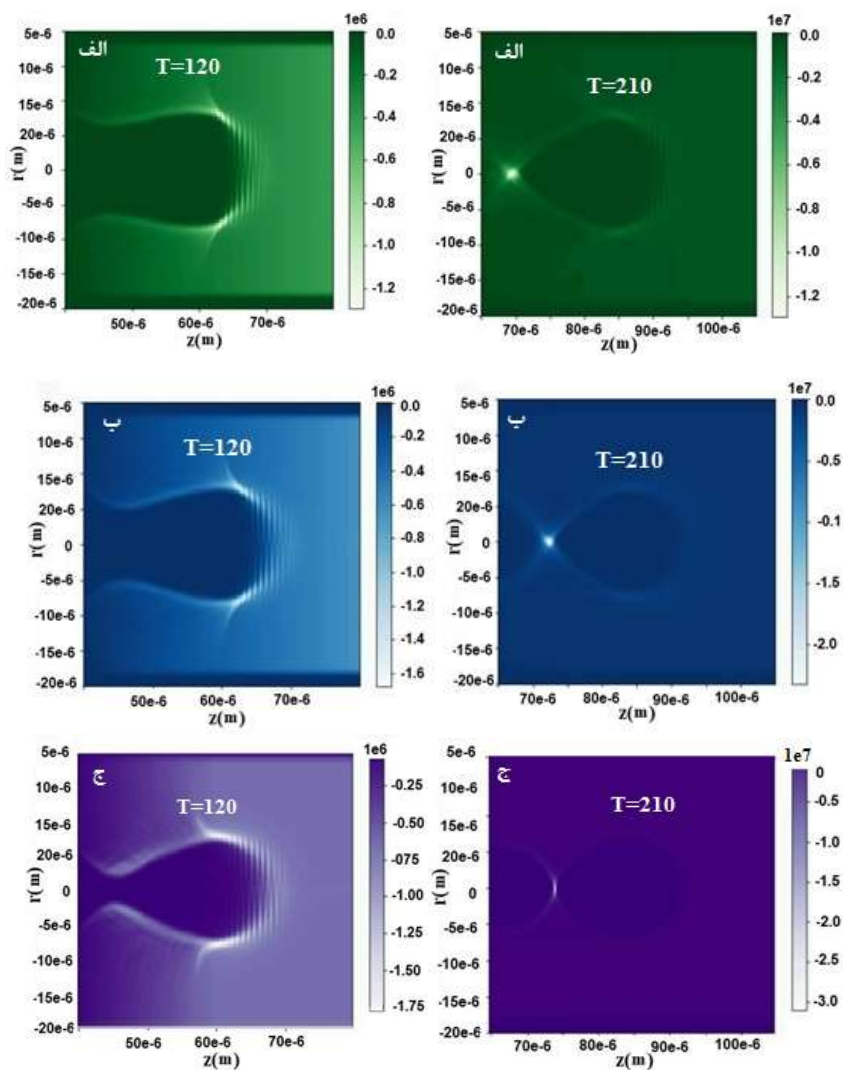
همانطور که شکل (۲) نشان می‌دهد، دامنه میدان الکتریکی برانگیخته‌شده برای رمپ با طول کوچک‌تر به $E_0 = 200 GeV / m$ رسیده است. پیش از این، اثرات پهنای پالس لیزری و طول رمپ چگالی بر روی شتاب الکترون در اثر اندرکنش لیزر با دامنه $a_0 = 1$ با استفاده از شبیه‌سازی ذره‌ای

یک بعدی مورد بررسی قرار گرفته است [۱۱، ۱۲]. با توجه به نتایج شبیه سازی ارائه شده در این منابع، بیشینه انرژی کسب شده توسط الکترون در زمان هایی از مرتبه ی پیکوثانیه حدود $100MeV$ می باشد. اگرچه با توجه به نتایج مقاله حاضر، در رژیم جاببی، الکترون توانایی دستیابی به انرژی هایی از مرتبه گیگا الکترون در زمان های کوتاه تر را دارا می باشد.

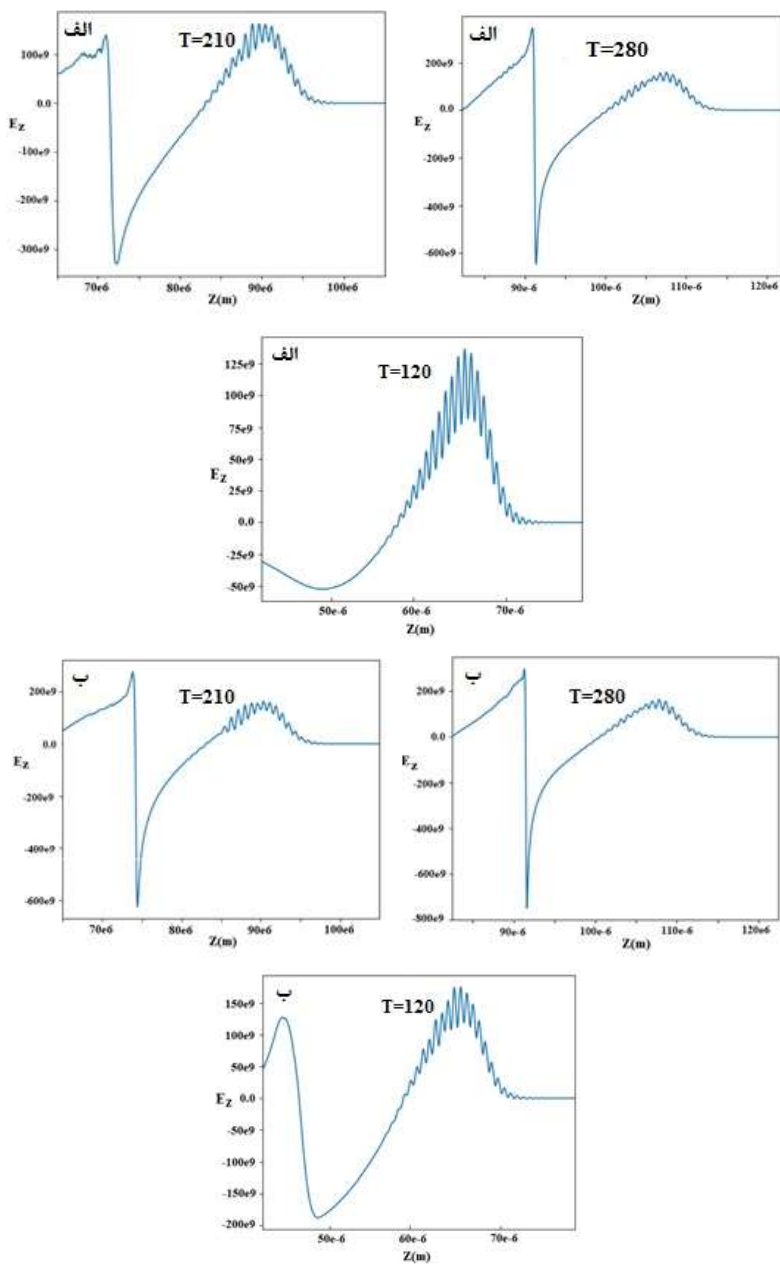
بهینه سازی انرژی الکترون های داخل پلاسما در رژیم جاببی با در نظر گرفتن پلاسما با طول مقیاس چگالی از مرتبه ی چند صد میکرومتر نیز مطالعه شده است [۱۳]. نتایج بدست آمده از این بررسی که برای یک پالس لیزری با پهنا $\tau = 30fs$ که دو برابر پهنا ی پالس در مقاله حاضر و پلاسمایی با چگالی $n = 4 \times 10^{25} m^{-3}$ که ده برابر چگالی در نظر گرفته شده در مقاله حاضر است، نشان می دهند که در رژیم جاببی با در نظر گرفتن پالس لیزری بلند و پلاسمای چگال تر با طول رمپ های بلند، انرژی بدست آمده توسط الکترون از مرتبه چند دهم گیگا الکترون ولت در زمان هایی از مرتبه پیکوثانیه می باشد. در حالی که، در مقاله حاضر با در نظر گرفتن رمپ های پلاسمایی با طول یک دهم نسبت به منبع اشاره شده، الکترون ها به انرژی حدود چند صد گیگا الکترون ولت در زمان های حدود $300fs$ می رسند.

تحول میدان دنباله ی متناظر با موج پلاسمایی نشان می دهد در زمان های اولیه به دلیل طول رمپ های چگالی متفاوت و تغییر در چگالی پلاسما، شکل میدان متناظر با موج برانگیخته شده در پلاسما متفاوت است. اما در زمان های طولانی تر که موج پلاسمایی برانگیخته شده وارد ناحیه چگالی یکنواخت می شود، شکل میدان متناظر با موج برانگیخته شده در پلاسما با طول رمپ های متفاوت به یکدیگر نزدیک است و تنها تفاوت در دامنه ی میدان است که در حالت طول رمپ کوتاه تر، دامنه ی میدان افزایش بیشتری یافته است.





شکل ۱ تحول موج تشکیل شده برای چگالی با طول ریب (الف) $L = 60$ ، (ب) $L = 40$ ، (ج) $L = 20$ در دو زمان متفاوت.



شکل ۲ تحول میدان دنباله‌ی متناظر با موج پلاسمایی برای چگالی با طول رمپ (الف) $L = 40$ و (ب) $L = 20$ در سه زمان متفاوت.



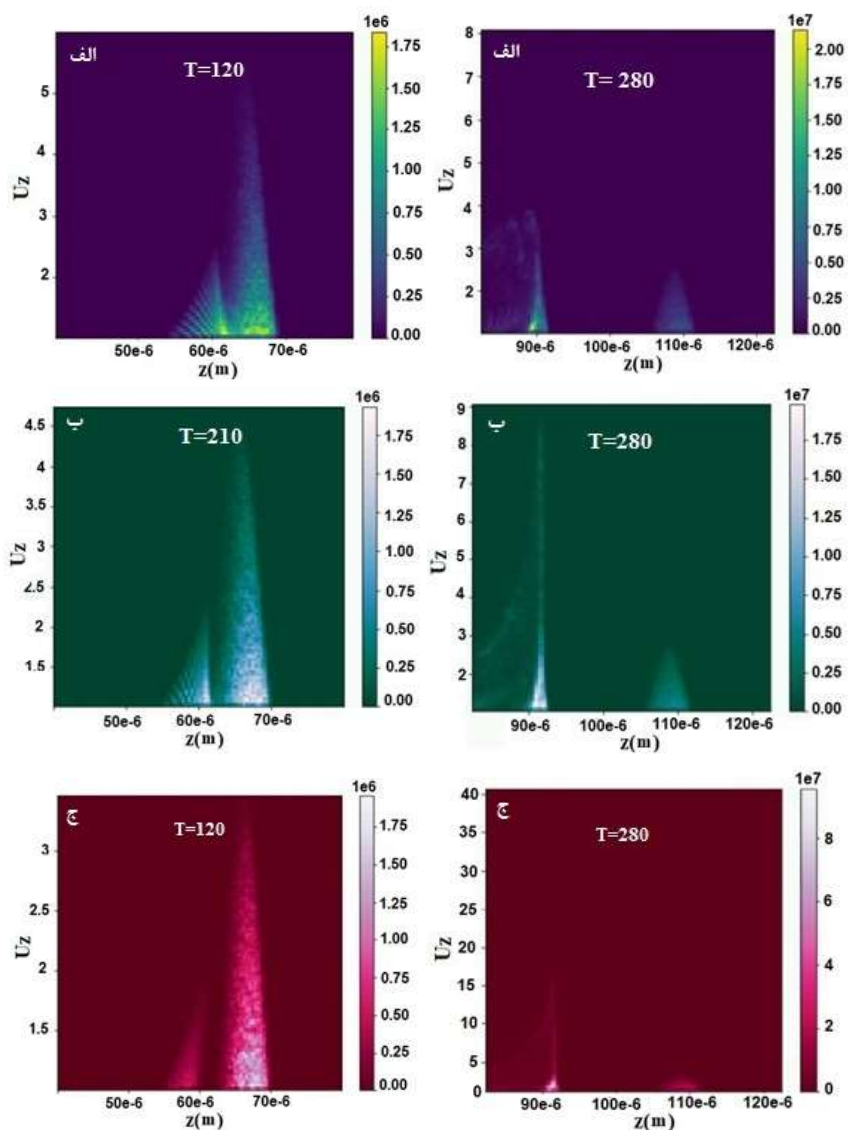
۲-۳ شبیه‌سازی ذره‌ای شتاب‌دهی الکترون در میدان دنباله موج پلاسمایی

برای بررسی تأثیر طول رمپ چگالی پلازما بر روی شتاب‌دهی الکترون، فضای فاز الکترون برای پلازما با سه طول رمپ متفاوت و در زمان‌های مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. در شکل‌های ۳ (الف)، ۳ (ب) و ۳ (ج) به ترتیب (از بالا به پایین)، فضای فاز الکترون برای چگالی با سه طول رمپ $L=60$ ، $L=40$ و $L=20$ در دو زمان بی‌بعد $T=210$ و $T=280$ نشان داده شده است. بررسی نمودارهای فضای فاز الکترون نشان می‌دهد، با گذشت زمان، افزایش شیب چگالی پلازما (کاهش طول رمپ چگالی) منجر به شتاب‌دهی تعداد بیش‌تری از الکترون‌ها تا انرژی‌های بالاتر می‌شود. افزایش شیب چگالی پلازما منجر به کاهش طول موج و افزایش سرعت فاز موج پلاسمایی ایجادشده در اثر اندرکنش پلازما با پالس لیزری کوتاه و پرشدت می‌شود که این امر منجر به افزایش طول هم‌فازی الکترون-موج می‌گردد. بنابراین، تعداد بیش‌تری از الکترون‌ها و در زمان‌های طولانی‌تری از موج پلاسمایی برانگیخته‌شده انرژی می‌گیرند.

در حقیقت، در رژیم خطی برهم‌کنش لیزر-پلازما، طول موج متناظر با موج پلاسمایی برانگیخته شده از مرتبه‌ی طول مشخصه‌ی دبای پلازما (λ_D) و سرعت فاز آن با سرعت گروه لیزر برابر است، اما رژیم حبایی که در مقاله حاضر مورد بررسی قرار گرفته است یک رژیم کاملاً غیرخطی است که میدان متناظر با موج در این رژیم غیرخطی است و در طی انتشار در پلازما در اثر افزایش اثرات پدیده‌های غیرخطی و نسبی، طول موج آن افزایش و سرعت فاز آن کاهش می‌یابد که این امر منجر به تغییر طول ناحیه متمرکزکننده و شتاب‌دهی موج و در نتیجه غیرهم‌فازی موج-الکترون و در نهایت کاهش شتاب می‌گردد. با تغییر پروفایل چگالی پلازما به سمت رمپ با شیب تندتر، در حقیقت چگالی پلازما در طی زمان تشکیل و انتشار موج پلاسمایی تغییر کرده و موجب کاهش طول موج و افزایش سرعت فاز موج می‌گردد. به این ترتیب، با افزایش طول غیرهم‌فازی^۱ الکترون-موج، الکترون در طی فرآیند شتاب‌دهی می‌تواند انرژی بیشتری از موج پلاسمایی دریافت کند.

^۱ Dephasing length





شکل ۳ فضای فاز الکترون برای چگالی با طول رمپ (الف) $L=60$ ، (ب) $L=40$ ، (ج) $L=20$ در دو زمان متفاوت.



۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله تحول موج پلاسمایی و میدان دنباله متناظر با آن و شتاب الکترون در پلازما با طول رمپ چگالی مختلف در اثر اندرکنش با پالس لیزری کوتاه پرشدت مورد بررسی قرار گرفته است. بدین منظور از یک کد شبیه‌سازی ذره‌ای دوبعدی ارتقایافته استفاده شده است. نتایج شبیه‌سازی ذره‌ای دو بعدی، تأثیر قابل توجه طول رمپ چگالی پلازما بر روی تشکیل موج دنباله‌ای پلاسمایی و شتاب الکترون‌های تزریق شده در میدان موج ایجاد شده را نشان می‌دهند. با کاهش طول رمپ چگالی پلازما، طول موج مربوط به موج دنباله کاهش یافته و سرعت فاز آن افزایش می‌یابد. تغییر طول موج و سرعت فاز موج دنباله منجر به تغییر ناحیه به‌دام افتادن و شتاب الکترون و هم‌چنین افزایش طول هم‌فازی الکترون-موج می‌گردد. این امر منجر به افزایش شتاب الکترون در سامانه‌ی برهم‌کنش لیزر-پلازما می‌گردد. در رژیم حبایی مطالعه‌شده در اثر برهم‌کنش پالس لیزری با دامنه شدت بدون بعد $a_0 = 4$ و پهنای پالس $c\tau = 5\mu m$ با پلاسمایی با طول رمپ چگالی کوتاه $L = 20$ ، میدان الکتریکی شتاب‌دهنده‌ی متناظر با موج پلاسمایی با دامنه‌ی $E_0 = 200 GeV / m$ بدست می‌آید. نتایج شبیه‌سازی [۱۱، ۱۲] و تجربی [۱۰] در رژیم غیرخطی با در نظر گرفتن پالس لیزری با شدت به مراتب پایین‌تر ($a_0 \ll 1$) افزایش انرژی الکترون تا مرتبه‌ی مگا الکترون‌ولت در بازه‌های زمانی طولانی از مرتبه پیکوثانیه را نشان می‌دهند. از این رو، نتایج بدست آمده از مقاله حاضر در انتخاب پروفایل مناسب چگالی پلازما در طراحی سامانه‌ی شتاب‌دهنده لیزر-پلازما به منظور دستیابی به انرژی‌هایی از مرتبه‌ی گیگاالکترون‌ولت در زمان‌های کوتاه دارای اهمیت می‌باشد.

۵. تقدیر و تشکر

نویسنده لازم می‌داند مراتب امتنان و قدردانی خود را از داوران محترم مقاله بابت نظرات و پیشنهادات ارزشمند ایشان که موجب ارتقای سطح علمی و ساختاری مقاله شده است، صمیمانه ابراز نماید. همچنین، از توسعه‌دهندگان کد FBPIC که نتایج مقاله حاضر با استفاده از نسخه‌ی برهم‌کنش لیزر با پلاسمای این کد استخراج شده است، قدردانی می‌گردد.



منابع

- [1] Litos M., Adli E., An W., Clarke C.I., Clayton C.E., Corde S., Delahaye J.P., England R.J., Fisher A.S., Frederico J. and Gessner S., "High-efficiency acceleration of an electron beam in a plasma wakefield accelerator", *Nature*, **515**, 92-95, 2014. <https://doi.org/10.1038/nature13882>
- [2] Shvets G., Fisch N.J. and Pukhov A., "Excitation of accelerating plasma waves by counter-propagating laser beams", *Phys. Plasmas*, **9**, 2383-2392, 2002. <https://doi.org/10.1063/1.1468649>
- [3] Faure J., Rechatin C., Norlin A., Lifschitz A., Glinec Y. and Malka V., "Controlled injection and acceleration of electrons in plasma wakefields by colliding laser pulses", *Nature* **444**, 737, 2006. <https://doi.org/10.1038/nature05393>
- [4] Kaur M. and Gupta D.N., "Electron acceleration by a radially polarized laser pulse in an ion channel", *IEEE Trans. Plasma Sci.* **45**, 2841-2847, 2017. <https://doi.org/10.1109/TPS.2017.2740344>
- [5] Kargarian A., Hajisharifi K. and Mehdian H., "Laser-driven electron acceleration in hydrogen pair-ion plasma containing electron impurities", *Laser Part. Beams*, **36**, 203-209, 2018. <https://doi.org/10.1017/S0263034618000174>
- [6] Kargarian, A., Hajisharifi, K. and Mehdian, H., "Plasma inhomogeneity effects on particles energization by high-power laser pulse in a finite-size plasma", *Waves in Random and Complex Media*, **32**, 2980-2990, 2022. <https://doi.org/10.1080/17455030.2021.1873454>
- [7] Kargarian, A., "Particle energization by high-power laser pulse in a finite-size electron-positron-ion plasma", *Laser Physics*, **30**, 096002, 2020. <https://doi.org/10.1088/1555-6611/aba9dd>
- [8] Braunmüller, F., Nechaeva, T., Adli, E., Agnello, R., Aladi, M., Andrebe, Y., Apsimon, O., Apsimon, R., Bachmann, A.M., Baistrukov, M.A. and Batsch, F., "Proton bunch self-modulation in plasma with density gradient", *Physical review letters* **125**, 264801, 2020. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.264801>
- [9] Trines, R.M., Bingham, R., Najmudin, Z., Mangles, S., Silva, L.O., Fonseca, R. and Norreys, P.A., "Electron trapping and acceleration on a downward density ramp: a two-stage approach", *New Journal of Physics*, **12**, 045027, 2010. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/12/4/045027>
- [10] Aniculaesei, C., Pathak, V.B., Kim, H.T., Oh, K.H., Yoo, B.J., Brunetti, E., Jang, Y.H., Hojbota, C.I., Shin, J.H., Jeon, J.H. and Cho, S., "Electron energy increase in a laser wakefield accelerator using up-ramp plasma density profiles", *Scientific Reports*, **9**, 11249, 2019. <https://doi.org/10.1038/s41598-019-47677-5>
- [11] Pishdast, M., Yazdanpanah, J. and Ghasemi, S.A., "Electron acceleration by an intense laser pulse inside a density profile induced by non-linear pulse evolution", *Laser and Particle Beams*, **36**, 41-48, 2018. <https://doi.org/10.1017/S0263034617000970>
- [12] Pishdast, M., Ghasemi, S.A. and Yazdanpanah, J., "The effect of density scale length on the plasma scattering and heating in relativistic laser interaction with under dense plasma", *Journal of Nuclear Science and Technology (JonSat)*, **40**, 119-129, 2019. <https://doi.org/10.24200/nst.2019.1032>
- [13] Kaur, M. and Gupta, D.N., "Electron energy optimization by plasma density ramp in laser wakefield acceleration in bubble regime", *Laser and Particle Beams*, **36**, 195-202, 2018. <https://doi.org/10.1017/S0263034618000162>
- [14] Pukhov, A. and Meyer-ter-Vehn, J., "Laser wake field acceleration: the highly non-linear broken-wave regime", *Applied Physics B*, **74**, 355-361, 2002. <https://doi.org/10.1007/s003400200795>



- [15] Kostyukov, I., Pukhov, A. and Kiselev, S., "Phenomenological theory of laser-plasma interaction in "bubble" regime", *Physics of Plasmas*, **11**, 5256-5264, 2004. <https://doi.org/10.1063/1.1799371>
- [16] Lehe, R., Kirchen, M., Jalas, S., Peters, K. and Dornmair, I., "Fourier-Bessel Particle-In-Cell (FBPIC) v0. 1.0", Lawrence Berkeley National Lab. (LBNL), Berkeley, CA (United States), 2017.
- [17] Hockney R.W., Estwood J.W., "Computer Simulation Using Particles", McGraw-Hill, New York, 1981.



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

ویژگی‌های اپتیکی جلبک‌ها در جهت طراحی و ساخت دستگاه سنجش میزان کلروفیل مخازن آبی به روش نشر فلورسانس اپتیکی^۱

احسان کوشکی^{۲*} و عیسی کهن باغخیراتی^۳

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۲/۲۲

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۰۴/۱۵

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۵/۱۳

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال سیزدهم، پیاپی ۳۵، زمستان ۱۴۰۲

صص ۷۰ - ۹۲

چکیده:

در این مقاله، در ابتدا با ویژگی‌های نوری جذبی و نشری جلبک‌ها و انواع کلروفیل‌ها آشنا شده و سپس به بررسی چندمان اپتیکی اندازه‌گیری نور فوتولومینسانس بدست آمده از جلبک‌ها می‌پردازیم که پایه ساخت دستگاه‌های اندازه‌گیری غلظت کلروفیل‌ها می‌باشد. با بررسی نمونه‌های جلبکی در استخرهای آب شیرین مناطقی از ایران و تشخیص نوع غالب جلبک‌های موجود در آن، طیف‌سنجی و اندازه‌گیری غلظت به کمک روش هموستیومتر یا لام نئوبار انجام شد. مهم‌ترین ابزار برای اندازه‌گیری غلظت جلبک‌ها، کلروفیل a است که در همه انواع جلبک‌ها با درصد متفاوت وجود داشته و دارای ویژگی فلورسانس است که از راه اندازه‌گیری نور قرمز بدست آمده از فوتولومینسانس، میزان کلروفیل a را می‌توان برآورد نمود. طرح اصلی دستگاهی برای اندازه‌گیری میزان کلروفیل a بر اساس سنجش شدت نور فوتولومینسانس برای این مهم در نظر گرفته شد. سپس از دیدگاه نرم افزاری و سخت افزاری بهینه شده و مورد استفاده قرار گرفت. در این طرح، روند و توابع شدت‌های نور بر حسب غلظت، جهت کالیبراسیون دستگاه انجام شد و معایب و مزایای طرح مورد بررسی قرار گرفت. اندازه‌گیری مستقیم نور، نوفه‌های کم، پایداری بالا و تهیه روال منطقی بین داده‌ها می‌تواند به افزایش قابلیت‌ها و بهبود کیفیت کمک کند. از این رو، این دستگاه به ابزاری دقیق برای اندازه‌گیری غلظت کلروفیل تبدیل شد که قابلیت تجاری‌سازی نیز دارد. افزون بر این، پایداری، تکرارپذیری و دقت بالای دستگاه نشان از مزیت روش‌های طیف‌سنجی نشری (فوتولومینسانس) نسبت به روش‌های جذبی طیف‌سنجی است.

واژگان کلیدی: ویژگی‌های نوری جلبک، کلروفیل a ، فوتولومینسانس، طیف‌سنجی، لام نئوبار.

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.43744.1324

^۲ استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار، خراسان رضوی، ایران. (نویسنده مسئول) Email: ehsan.koushki@hsu.ac.ir

^۳ استادیار، گروه زیست‌شناسی، دانشکده علوم، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار، خراسان رضوی، ایران. Email: eisa_kohan@yahoo.com



۱. مقدمه

افزایش جمعیت ساکنان زمین و به پیروی از آن افزایش میزان تقاضا برای منابع آبی قابل استفاده، و نیز تغییرات آب و هوای جهانی، همواره آب را به عنوان یکی از مهمترین عوامل دستیابی به توسعه پایدار مطرح ساخته است. اگر معیارهای تفاوت میان کشورهای در حال توسعه و توسعه یافته را در نظر بگیریم، مدیریت بهینه منابع آبی یکی از معیارهای بسیار پررنگ و با اهمیت خواهد بود. منابع آبی تنها راه حفظ بقا و توسعه پایدار در قرن حاضر است. با توجه به گزارشات یونسکو، اگر سرانه آبی هر کشور بین ۱۰۰۰ تا ۲۰۰۰ مترمکعب باشد، آن کشور دچار کم آبی و بحران منابع آبی است. بنابراین سرانه آبی هر کشور که زیر ۱۰۰۰ مترمکعب باشد، آن کشور بحران زده بوده و نیازمند مدیریت اضطراری است. بر اساس این تعریف در حال حاضر ۲۶ کشور جهان و از جمله ۹ کشور در خاورمیانه شدیداً با کمبود آب روبرو هستند و دو میلیارد نفر در جهان محروم از آب شیرین و مناسب هستند. این در حالی است که در طی ۷۰ سال اخیر تقاضای آب در جهان سه برابر شده است [۱-۳].

ایران نیز به عنوان کشوری در حال توسعه مشمول این اصل است. کمبود بارش های سالانه در ایران، توجهی ویژه به منابع آبی را می طلبد. بیش از نود درصد از مساحت کل ایران در ناحیه های خشک و نیمه خشک قرار دارد. متوسط بارش سالانه در ایران ۲۴۰ میلیمتر است که این میزان بسیار کمتر از میانگین جهانی است. توزیع ناهمگون بارش ها در ایران به گونه ای است که در آستارا سالی ۲۰۰۰ میلی متر و در کویر لوت ۰.۵ میلی متر بارش داریم. گذشته از این، آلودگی منابع آب های سطحی و زیرزمینی، شورشیدن سفره های آب زیرزمینی در اثر نفوذ سفره های آب شور به آن، افت شدید سطح آب در اثر پمپاژ بیش از حد آن در بخش صنعت و کشاورزی، نارسایی در زمینه انتقال آب و مشکلات در زمینه لوله کشی شهری و انتقال فاضلاب، عدم تصفیه درست فاضلاب های شهری و صنعتی، و درصد بالای آلاینده ها به ویژه فلزات سنگین، بیش از پیش به مشکلات بخش آب در ایران دامن زده است.

در این میان افزون بر تلاش برای حل مشکلات بالا، حفظ و نگهداری منابع آبی موجود و نیز دستیابی به منابع جدید آبی از اهمیت بسزایی برخوردار است. با این وجود، بررسی کیفیت مطلوب منابع و مخازن آبی می تواند گاهی پرهزینه و دشوار باشد. یکی از شاخص های سلامت و کیفیت آب، جلبک ها و فیتوپلانکتون های موجود در آب است که شامل کلروفیل و به صورت ویژه کلروفیل نوع a (کلروفیل-a) هستند که البته از مهم ترین پارامترهای کیفیت آب به شمار می آید [۴ و ۱].

برای نخستین بار، لینه گیاه‌شناس در سال ۱۷۵۴، جلبک‌ها را با نام علمی آَلجی^۱ بررسی و معرفی کرد. در بیشتر جلبک‌ها هر سلول دارای ۱ تا ۲ عدد کلروپلاست (سبزینه) و به ندرت دارای کروماتوفور هستند. جلبک‌ها در اولین گروه‌بندی بر اساس رنگشان در شاخه‌های مختلفی چون جلبک‌های سبز، قهوه‌ای، قرمز و ریز جلبک‌ها (جلبک‌های سبز-آبی) تقسیم‌بندی می‌شوند. همان‌طور که از نامگذاری این شاخه‌ها مشخص است، رنگ جلبک‌ها معیاری از رنگیزه‌های کلروفیلی و غیر کلروفیلی موجود در آن‌ها است که می‌تواند برای سنجش غلظت انواع جلبک‌ها به کار رود. درصد انواع کلروفیل و رنگیزه‌های غیر کلروفیلی در رنگ جلبک‌ها مهم است. هر سلول جلبک دارای چند عدد کلروپلاست و هر کلروپلاست شامل صدها مولکول کلروفیل (سبزینه) از انواع مختلف است. شمار کلروپلاست‌ها در هر سلول به صورت ژنتیکی مشخص می‌شود. کلروپلاست‌ها به امواج مختلف طیف مرئی حساس بوده و با استفاده از کلروفیل خود انرژی فوتون‌ها را صرف تشکیل پیوندهای شیمیایی می‌کنند.

کلروفیل‌ها رنگیزه عمده‌ی فتوسنتزی در عالم گیاهان می‌باشند. مولکول کلروفیل شامل سر پورفیرینی (چهار حلقه‌ی پیرول محتوی عامل نیتروژن که به یک یون منیزیم در مرکز متصل هستند) و یک دنباله‌ی هیدروکربنی (فیتول) هست. کلروفیل‌ها با دنباله‌ی هیدروکربنی محلول در چربی در همه جلبک‌ها، گیاهان عالی و سیانوباکتری‌ها یافت می‌شوند و عمل فتوسنتز را انجام می‌دهند [۵]. چهارنوع کلروفیل در جلبک‌ها شناسایی شده است: کلروفیل a در همه گروه‌های جلبکی و سیانوباکتری‌ها موجود می‌باشد. کلروفیل b در جلبک‌های سبز، کلروفیل c در دیاتومه‌ها، دینوفلاژلات‌ها و جلبک‌های قهوه‌ای، کلروفیل d تنها در جلبک‌های قرمز [۶] و کلروفیل f در برخی از سیانوباکتری‌ها یافت می‌شود [۷]. کلروفیل a فراوان‌ترین شکل کلروفیل در موجودات فتوسنتز کننده است و سبب رنگ سبز در گیاهان و جلبک‌ها می‌شود [۸] و افزون بر این به عنوان یک شاخص معتبر برای توده زیستی فیتوپلانکتون (جلبک‌ها) و کیفیت آب محسوب می‌شود [۹]. سایر کلروفیل‌ها به عنوان رنگدانه‌های کمکی و مولکول‌های رابط عمل کرده و به کلروفیل a در فتوسنتز کمک می‌کنند. ساختار مولکولی این کلروفیل‌ها در شکل ۱ نمایش داده شده است.

طول موج‌های جذبی انواع مختلف کلروفیل متفاوت است به صورتی که کلروفیل a نور بنفش و نارنجی را به صورت عمده جذب می‌کند. کلروفیل b اغلب نور آبی و زرد را جذب می‌کند. هر دو نوع کلروفیل a و b، به میزان کمتر جذب کننده‌ی دیگر طول موج‌های نوری نیز هستند. به صورت

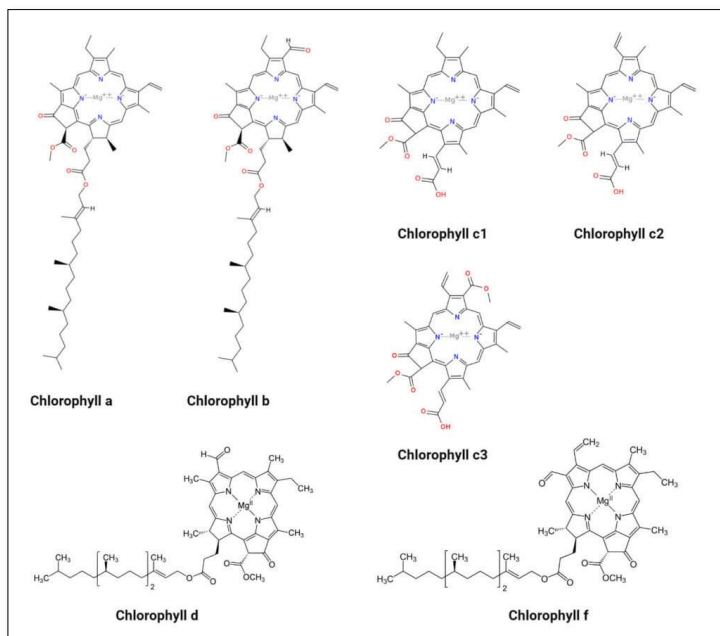
^۱ Algae



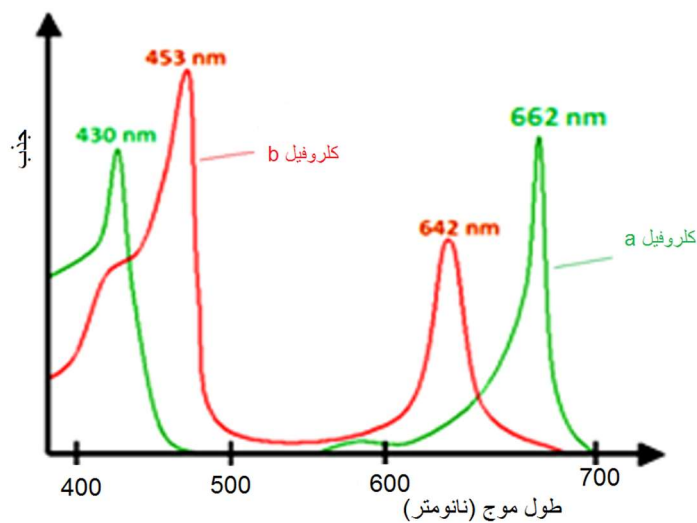
کلی می‌توان گفت که همه انواع کلروفیل، نورهای بنفش-آبی را جذب می‌کنند، اما برخی چون کلروفیل c جذب بالایی را در نورهای زرد و نارنجی نیز نشان می‌دهند و یا برخی دیگر چون کلروفیل a و b در نور قرمز نیز جذب بالایی دارند [۱۰]. به بیان دقیق‌تر مقادیر جذب کلروفیل a- دارای قله‌های جذبی در ۴۳۰ و ۶۶۲ نانومتر و در کلروفیل b- دارای قله جذب تقریبی در ۴۵۳ و ۶۴۲ نانومتر هستند (شکل ۲) [۱۱ و ۱۲]. طیف‌های بدست آمده در آزمایش‌های مختلف ممکن است دارای قله‌های کوچک‌تر اضافی و غیرمنتظره (یک تا سه قله اضافی) نیز باشند که می‌توان آن را به وجود مقادیر اندکی از جاذب‌های غیر کلروفیلی (که به دلیل تصفیه ناقص کلروفیل‌ها وجود دارند) نسبت داد. افزون بر این، حلال مورد استفاده در تعیین محل قله‌ها بسیار مهم است. استفاده از حلال‌های شفاف با درصد‌های مختلفی از آب، اتانول، استون، دی‌اتیل‌اتر، و متانول می‌تواند قله جذب‌های اصلی را به سمت طول موج‌های بلندتر (جابجایی سرخ) و یا طول موج‌های کوتاه‌تر (جابجایی آبی) سوق دهد. دلیل این امر قطبش‌های الکتریکی متفاوت مولکول‌های حلال است که کلروفیل‌ها (با هر ذره دیگر کلئیدی چون نانوذرات که داخل این محلول‌ها پراکنده شده) را احاطه نموده و سبب تغییر پذیرفتاری الکتریکی و ویژگی‌های نوری کلروفیل‌ها می‌شوند [۱۲ و ۱۳]. آزمایش‌ها نشان می‌دهند که حلال‌های ترکیبی بیان شده می‌توانند در کلروفیل a- قله بلند اصلی را در بازه ۶۶۰ تا ۶۶۵.۲ نانومتر تغییر دهند. همچنین، در مورد کلروفیل b- این بازه از ۶۴۱.۸ تا ۶۵۲.۴ نانومتر متغیر است [۱۲]. از این رو، لازم است نتیجه‌گیری کنیم جابجایی‌هایی بین ۵ تا ۱۰ نانومتر در قله‌های اصلی طیف‌ها مربوط به قطبیت و ضریب شکست نوری حلال‌ها است و البته pH حلال نیز می‌تواند در این راستا نقش داشته باشد. با توجه به جدایی طیفی کافی قله‌های کلروفیل‌های a و b، این میزان کم جابجایی نمی‌تواند مانعی برای تشخیص قله اصلی ایجاد کند و با این وجود تشخیص کلروفیل‌های a و b از یکدیگر باز هم ممکن، آسان و بدیعی خواهد بود.

با توجه به ویژگی‌های نوری کلروفیل‌های مختلف، می‌توان از روش‌های اپتیکی چون طیف‌سنجی برای تشخیص و اندازه‌گیری میزان و نوع کلروفیل‌های موجود در آن استفاده نمود. روش‌های نوری بر پایه طیف‌سنجی و به‌ویژه طیف جذبی مرئی-فرابنفش و طیف فوتولومینسانس از روش‌های مرسوم در اندازه‌گیری غلظت کلروفیل‌ها است [۱۱]. کلروفیل a- متداول‌ترین نوع کلروفیل است که در همه موجودات فتوسنتزی تولیدکننده اکسیژن چون گیاهان آوندی، جلبک‌های قرمز و سبز و غیره وجود دارد و کلروفیلی است که بیش از سایرین ویژگی فوتولومینسانس از خود نشان می‌دهد

و با تابش نور بنفش یا آبی، نور قرمز از خود متصاعد می‌کند [۱۲ و ۱۳]. جدول ۱ اطلاعات کامل تری درباره طیف جذبی انواع کلروفیل ارائه می‌دهد.



شکل ۱ ساختار مولکولی کلروفیل‌ها.



شکل ۲ طیف جذبی کلروفیل‌های a و b [۱۲ و ۱۴].



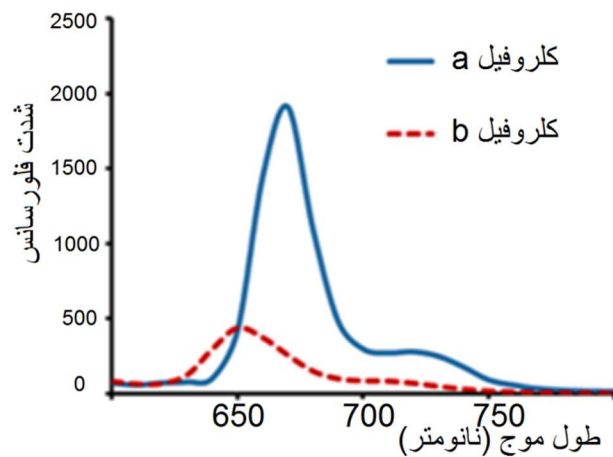
جدول ۱ رنگیزه‌های اصلی فتوسنتزی در جلبک‌ها و ویژگی‌های آن‌ها [۱۰].

Major Chlorophylls in Algae	Algal groups	Solubility	Molecular formula	Absorbance	Function
Chlorophyll a	All photosynthetic algae	Organic solvents- alcohol, diethyl ether, benzene, acetone except petroleum ether	$C_{55}H_{72}O_6N_4Mg$	Red light absorption band-663 nm Other- 430 nm	Light receptor in photosystem I of the light reaction
Chlorophyll b	Chlorophyta Euglenophyta Charophyta	Maximum in acetone and Methanol	$C_{55}H_{70}O_6N_4Mg$	645 nm and 435 nm	Light harvesting pigment transferring absorbed light energy to chlorophyll a
Chlorophyll c ₁	Heterokontophyta	Ether, acetone, methanol, ethyl acetate	$C_{53}H_{70}O_6N_4Mg$	634 nm, 583 nm and 440 nm	Accessory pigment to photosystem II
Chlorophyll c ₂	Dinophyta Cryptophyta Phaeophyta Heterokontophyta	Ether, acetone, methanol, ethyl acetate	$C_{53}H_{72}O_6N_4Mg$	635 nm, 586 nm and 452 nm	Accessory pigment to photosystem II
Chlorophyll d	Cyanobacteria Rhodophyta	Diethyl ether, benzene, acetone, Methanol	$C_{54}H_{70}O_6N_4Mg$	696 nm, 456 nm and 400 nm and 710 nm (Infrared light)	Energy capturing from sunlight
Chlorophyll f	Cyanobacteria Xanthophyta	Diethyl ether, benzene, acetone, Methanol	$C_{55}H_{70}O_6N_4Mg$	>700 nm (Infrared light)	Energy transfer and charge separation

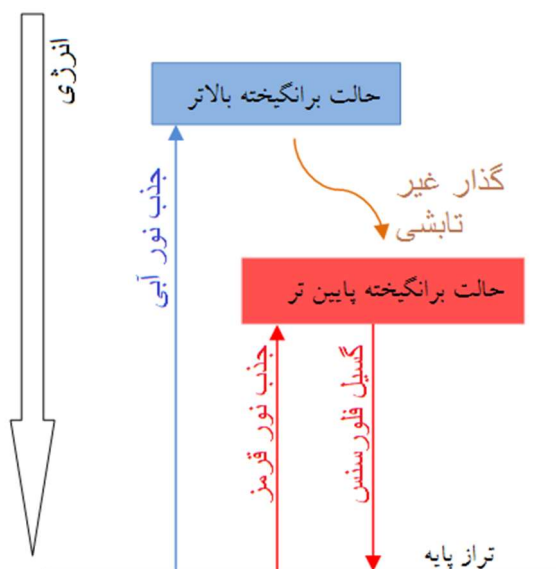
مرور منابع علمی نشان می‌دهد که طیف فوتولومینسانس (فلورسنس) کلروفیل‌های a و b نیز مورد مطالعه پژوهشگران بوده است [۱۱، ۱۲ و ۱۴]. در مقاله‌ای که توسط آیودها و همکاران در سال ۲۰۱۵ منتشر شد، این دو نوع کلروفیل را از گیاه سرخس استخراج و تحت تابش نورهای آبی رنگ طیف‌های فلورسنس آن‌ها را بررسی کردند. آن‌ها دریافتند که شدت نور تغییر یافته خروجی تابعی از طول موج نور ورودی و تهییج کننده است. به عبارتی دیگر، شدت نور قرمز خروجی به طول موج نور تابیده آبی به کلروفیل بستگی دارد [۱۵]. در مطالعه‌ای که توسط لمب و همکارانش در سال ۲۰۱۸ منتشر شد، کلروفیل‌های جلبک کروی کلرلا استخراج شد و مطالعات فلورسنس روی آن‌ها نشان داد که افزون بر طول موج ورودی، دما نیز بر این فرایند مؤثر بوده و افزایش دما می‌تواند شدت نور قرمز خروجی را کاهش دهد [۱۶]. در تمام بررسی‌های انجام شده طول موج نور فلورسنس ساعت شده بین ۶۴۰ تا ۷۰۰ نانومتر (قرمز و فروسرخ نزدیک) بوده است. همچنین بهترین طول موج-های تهییج کننده برای فلورسانس کلروفیل در محدوده ۳۸۰ تا ۴۵۰ یعنی نور بنفش مرئی و آبی بوده است (شکل ۳).

طیف جذبی کلروفیل‌ها بیشتر بر پایه گذارهای از نوع π به π^* است که در راستای قطری مولکول‌های کلروفیل (شکل ۱) و در امتداد اتم‌های نیتروژن قطری آن روی می‌دهد. این گذارها در همه انواع کلروفیل‌ها سبب دو قله جذبی در ناحیه‌های آبی و قرمز می‌شوند که البته طول موج

قله‌ها در انواع مختلف کلروفیل کمی با هم متفاوت است [۱۷]. در مورد کلروفیل a، این دو قله در نواحی آبی (۴۴۰ نانومتر) و قرمز (۶۶۲ نانومتر) رخ می‌دهد و به همین دلیل این کلروفیل سبز رنگ است و نور سبز را جذب نکرده، عبور می‌دهد. در شکل ۴، نمودار انرژی ترازهای جذبی و فلورسانس کلروفیل a مشاهده می‌شود.



شکل ۳ طیف فلورسانس کلروفیل‌های a و b با نور ورودی آبی ۴۴۰ نانومتر [۱۵].



شکل ۴ نمودار انرژی و ترازهای برانگیخته کلروفیل a که منجر به گذارهای جذبی و فوتولومینسانس می‌شود [۱۷].



تعیین عوامل موثر بر رشد جلبک‌ها در آب‌های سطحی از اهمیت زیادی برخوردار است. بررسی پراکنش جمعیت جلبکی (فیتوپلانکتون‌ها) و آگاهی از روابط بین عوامل محیطی و جامعه فیتوپلانکتونی می‌تواند در بهبود کیفیت آب و تصمیم‌گیری‌های مدیریتی تاثیر بگذارد. بررسی فلور جلبکی ۱۹ مخزن آبی در ایران [۱۸]، شامل سدهای امیرکبیر، ارس، چغاخور، گلستان، گلستان مشهد، گلپایگان، حسنلو، جیرفت، کارون، کرخه، مهاباد، میناب، ۱۵ خرداد، قشلاق، سفیدرود، شهناز، طوق، وشمگیر و زاینده رود، نشان دهنده تنوع جلبکی بالایی است به صورتی که ۱۱۲۹ نمونه جلبک از ۹ شاخه جلبکی شناسایی شده است. تنوع این جلبک‌ها شامل سیانوپروکاریوتا با ۱۷۲ گونه، اوگنوفایتا با ۵۳ گونه، کریزوفایتا با ۳۹ گونه، گزاتوفایتا با ۳۹ گونه، باسیلاریوفایتا با ۵۳۱ گونه، دینوفایتا با ۲۵ گونه، کریپتوفایتا با ۷ گونه، کلروفایتا با ۱۷۲ گونه و استرپتوفایتا با ۱۷۲ گونه می‌باشند. در این بین بیشترین فراوانی مربوط به شاخه باسیلاریوفایتا با ۵۳۱ گونه بوده است. تنوع گونه‌ای هر یک از این سدها با منطقه جغرافیایی سد و کیفیت آب آن ارتباط مستقیم دارد به صورتی که جلبک‌های آب شور و آب شیرین با تفاوت معنی داری پراکنش وابسته به میزان شوری آب نشان می‌دهند. در این راستا ساخت دستگاهی که بتواند در محل میزان کلروفیل را اندازه بگیرد اجتناب‌ناپذیر است.

در این پژوهش بر پایه بررسی چیدمان اپتیکی سنجش ویژگی‌های فوتولومینسانس جلبک‌ها، به بررسی دستگاه‌های نوری که برای سنجش کلروفیل استفاده می‌شوند پرداخته و دستگاهی که بر اساس فوتولومینسانس کلروفیل a ساخته شده و در اختیار منابع آب ایران قرار گرفته است، بررسی شده است. تولید این دستگاه می‌تواند گامی در جهت خودکفایی در صنایع اپتیکی بوده و جلوه‌ای دیگر از کاربرد فیزیک در دیگر زمینه‌ها و صنایع را نشان دهد.

۲. روش‌های تجربی اندازه‌گیری غلظت کلروفیل‌ها

مواد آلی را می‌توان از دیدگاه نوری در دسته‌بندی‌های متفاوتی قرار داد. با توجه به چپش مولکول‌ها و تعداد الکترون‌های π غیرجایگزیده و شکل و تعداد حلقه‌های کربنی، اندازه و چیدمان‌های مونومری و پلیمری، ویژگی‌های نوری متفاوتی از آن‌ها دیده می‌شود. در این راستا، جلبک‌ها بعنوان سلول‌های زنده گیاهی دارای ویژگی‌های خاص خود هستند. اندازه نسبتاً بزرگ ساختار جمعیتی آن‌ها سبب پراکندگی قابل توجه نور می‌شود که بیشتر در جذب خالص نوری آن‌ها تداخل ایجاد کرده و طیف‌سنجی از این نمونه‌ها را با مشکل مواجه می‌کند. به عبارت دیگر، در جذب نوری که

از هیبریدهای جلبکی (چون مخلوط در آب) دیده می‌شود، اثرات پراش سبب ایجاد سهم در جذب نوری شده و داده‌های جذب نور عبوری، دیگر به صورت خالص تنها مربوط به جذب طیفی نخواهند بود بلکه پراش نوری هم در آن وارد خواهد شد. بر اساس نظریه کلاسیکی پراکندگی مای^۱، چون اندازه سلول‌های جلبک در مقیاس میکرون و از محدوده طول موج نور مرئی است، انتظار پراکندگی نوری بسیار است. این امر را می‌توان با عبور یک پرتو لیزر پایدار از درون محلول جلبکی به روشنی دید. اگر از یک توان سنج برای اندازه‌گیری توان نور عبوری استفاده کنیم، توان سنج یک عدد ثابت را نشان نخواهد داد. چرا که با کوچک‌ترین حرکت براونی ذرات از مقابل پرتو و پراکنده‌سازی دینامیک نور، عدد متفاوتی خواهیم دید. در این شرایط بهتر است افزون بر استفاده از جذب نوری، جهت ایجاد دقت افزوده از ویژگی نوری دیگری از جلبک‌ها نیز استفاده کرده و آن ویژگی فلورسانس (نوعی فوتولومینسانس) کلروفیل‌های موجود در جلبک‌ها است. چنانکه پیشتر بیان شد، فلورسانس نوعی ویژگی نورتابی (لومینسانس) است که در سیستم‌های شیمیایی گازی، مایع یا جامد و به ویژه در مولکول‌های آلی رخ می‌دهد و اینگونه مواد کاربردهای گوناگونی در فناوری‌های کنونی دارند. فلورسانس در اثر جذب فوتون در حالت پایه و رسیدن به حالت برانگیخته بوجود می‌آید. زمانی که مولکولی برانگیخته، به حالت پایه بازگردد، تابش فوتون‌هایی با انرژی کمتر و طول موج بلندتر را به همراه دارد. نتیجه ساده این فرآیند این است که اگر ماده را با نوری آبی یا بنفش تابانیده و برانگیخته کنیم، ماده نور را جذب نموده و در محدوده دیگری یعنی سبز، زرد یا قرمز خواهد داد. استفاده از ابزارهای دقیق اپتیکی که طیف‌های مختلف جذبی، نثری و فلورسانس را اندازه‌گیری می‌کنند در این حوزه بسیار مهم است.

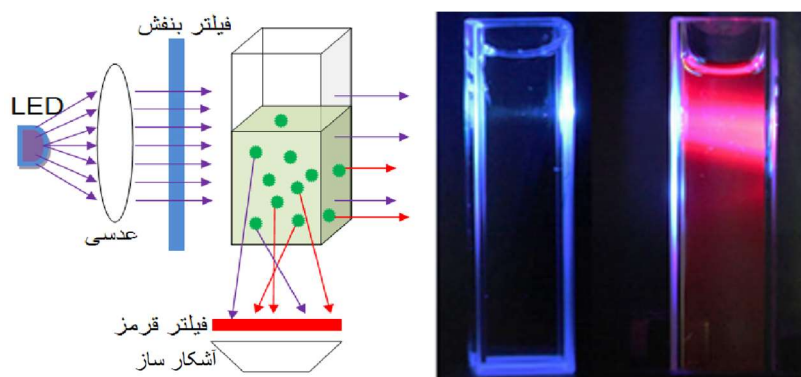
در اندازه‌گیری غلظت جلبک‌ها به روش‌های اپتیکی از دو پدیده اپتیکی استفاده می‌شود: جذب نوری بر پایه قانون بیر-لامبرت و اثر فوتولومینسانس تبدیل نور بنفش-آبی به نور قرمز (در جلبک‌های شامل کلروفیل نوع a). متداول‌ترین چیدمان اپتیکی برای اندازه‌گیری غلظت کلروفیل a در شکل ۵ ملاحظه می‌شود که برای ساخت دستگاه نیز استفاده شده است. در این چیدمان نور بنفش ساطع شده از یک چشمه LED پس از فیلتر شدن (در صورت نیاز) به سل شیشه‌ای یا پلاستیکی شامل محلول آبی جلبک تابانیده شده و نور قرمز بدست آمده از فوتولومینسانس پس از فیلتر در جهت عمود بر راستای تابش، توسط یک آشکارساز^۲ فوتوسل اندازه‌گیری می‌شود [۱۹] و [۲۰]. معمولاً فوتوسل‌ها یک ولتاژ یا جریان خروجی به عنوان سیگنال تولید می‌کنند و یا چون آنچه

¹ Mie Theory

² Detector



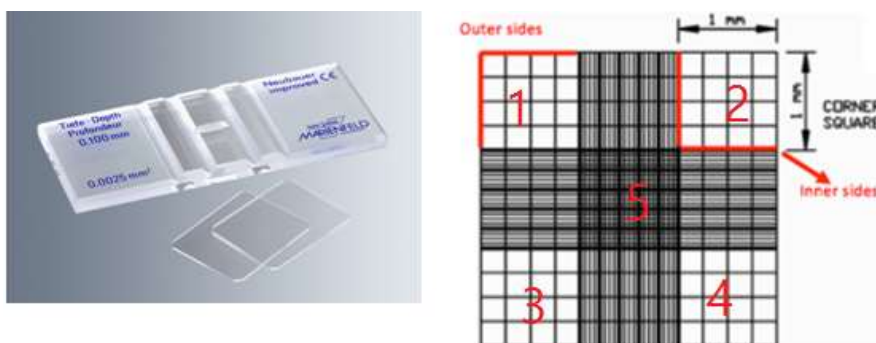
در اینجا انجام شد، تغییر در امیدانس یا مقاومت ظاهری توسط یک ریزپردازنده اندازه گیری می شود. با کالیبراسیون اعداد توسط یک محلول استاندارد که غلظت جلبک آن با روشی دیگر چون لام نئوبال (که در ادامه شرح می دهیم) اندازه گرفته شده، دستگاهی ساخته شد که غلظت جلبک را نمایش می دهد. در ادامه با جزئیات بیشتری از فرایند کالیبراسیون آشنا خواهیم شد.



شکل ۵ اندازه گیری غلظت جلبک. در سمت چپ چیدمان اپتیکی نشان داده شده است. نور آبی ابتدا توسط یک عدسی همگرا موازی سازی شده و پس از فیلتراسیون آبی (در صورت نیاز و پهن بودن طیفی چشمه نور) به سلول شامل جلبک می تابد و پس از ایجاد نور قرمز و فیلتراسیون و جداسازی از نور آبی پراکنده شده، وارد آشکار ساز قرمز می شود. در سمت راست دو نمونه حاوی نور کلروفیل-a (قرمز) و b (آبی) ملاحظه می شوند [۱۹ و ۲۰].

یکی دیگر از روش های شمارش تراکم سلولی کشت جلبکی استفاده از هموسیتومتر یا لام نئوبال است. هموسیتومترها همانطور که از نام آن پیداست، برای شمارش سلول های خونی ساخته شده اند، اگرچه می توان از آن ها برای محاسبه تراکم سلولی کشت جلبکی استفاده کرد، به شرط آنکه سلول ها کمابیش کوچک (۵۰-۵ میکرومتر) و تک سلولی یا زنجیره ای کوتاه باشند. هموسیتومتر برای تراکم سلولی بیش از ۱۰۴ سلول در میلی لیتر استفاده می شود. این لام از یک اسلاید میکروسکوپی شیشه ای ضخیم به همراه کنگره های مستطیلی شکل تشکیل شده که یک محفظه را به وجود می آورد. این محفظه با ساختار توری مانندی از خطوط عمود بر هم توسط لیزر حک شده است. طراحی این وسیله با دقت خاصی بوده و حدود خطوط و عمق دستگاه مشخص می باشد و در نتیجه شمارش تعداد سلول ها در حجم مشخصی از مایع و در نتیجه محاسبه غلظت سلول ها در حجمی از مایع امکان پذیر است. اندازه این محفظه ها می تواند بسته به شرکت سازنده آن متفاوت باشد. در کار حاضر از نام

بازرگانی نئوبار^۱ استفاده کردیم که از دو اتاق تشکیل شده است، هر کدام با حجم ۰/۱ میلی-مترمکعب، شامل یک شبکه شمارش مشخص شده به مساحت ۱ میلی‌متر مربع است (شکل ۶). در نمونه جلبکی سلول‌های غیرمتحرک که نیازی به تثبیت ندارند می‌توانند به محض جمع آوری نمونه شمارش شوند. با این حال، اگر بین جمع آوری نمونه و شمارش تاخیر وجود داشته باشد، یا اگر سلول‌ها متحرک باشند، نمونه باید حفظ شود که رایج‌ترین تثبیت‌کننده مورد استفاده برای ریزجلبک‌های دریایی، محلول لوگول است.



شکل ۶ هموسیتومتر یا لام نئوبار و شبکه شمارش.

۳. بررسی آزمایشگاهی نمونه‌های جلبکی

در نمونه‌هایی که از استخرها و آبگیرهای آب شیرین موجود در شهرستان سبزوار گردآوری شد، جلبک‌های سبز رنگ کلونیدی در آب مورد بررسی قرار گرفتند. در شکل av تصویر نمونه‌های بهم پیوسته و ماکروسکوپی جلبک را می‌بینیم که با چشم غیر مسلح قابل دیدن هستند. در شکل bv، تصویری میکروسکوپی از جلبک‌های زنده کلونیدی واحد مشاهده می‌شود و در شکل cv تصویر بزرگ‌نمایی شده آن دیده می‌شود. تصاویر میکروسکوپی نشان می‌دهند این تصویر متعلق به میکروجلبک سبز سندسموس^۲ است. این میکروجلبک از خانواده سندسماسی^۳ بوده و به عنوان یکی از ریزجلبک‌های مهم که متعلق به رده کلروفیل سی^۴ می‌باشد و برای اهداف آبی‌زی پروری و

¹ Neubauer

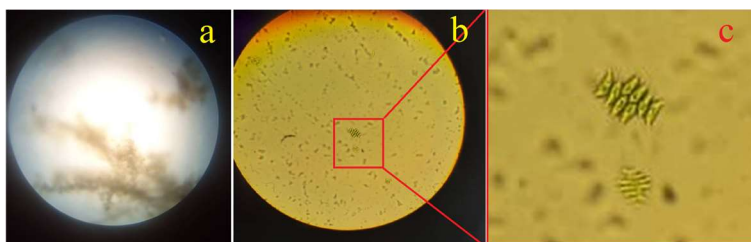
² Scenedesmus

³ Scenedesmaceae

⁴ Chlorophyceae



خوراک انسانی نام برده شده است [۲۱]. تصویری روشن از این میکروجلبک در شکل ۸ قابل مشاهده است [۲۲].



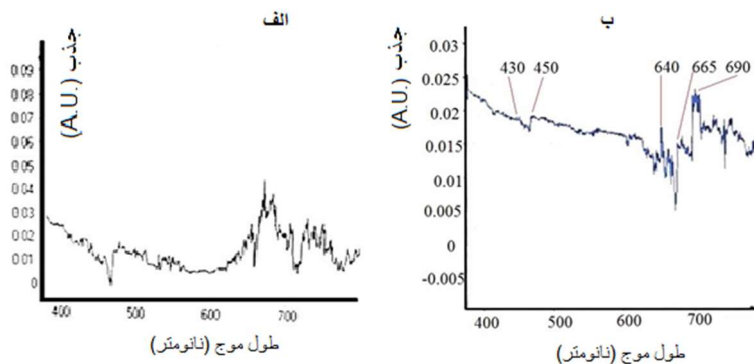
شکل ۷ (a) تصویر جلبک‌های بهم چسبیده رشته‌ای شکل، (b) تصویر میکروسکوپی جلبک‌های کلونیدی در آب، (c) تصویر بزرگنمایی از چند سلول جلبک.



شکل ۸ تصویری با وضوح بالا از جلبک سندسموس [۲۲].

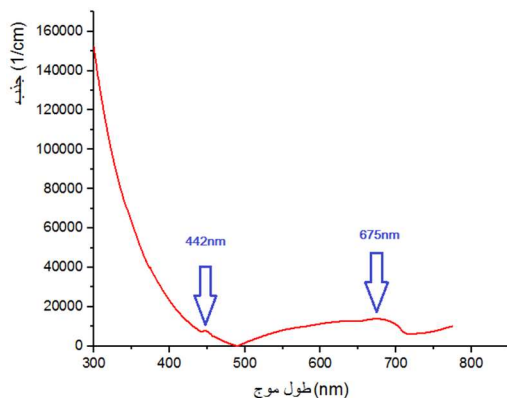
در گام بعد طیف جذبی کلونید این جلبک بررسی شد. چنانکه در شکل ۹ مشاهده می‌شود، با رسوب ذرات درشت کلونید و خوشه‌های بهم چسبیده جلبک، طیف روشن‌تری بدست آمد که بررسی قله‌های آن وجود مقادیری از کلروفیل‌های a و b را نشان می‌دهند. تصفیه به‌روش‌های رسوب‌گذاری یا سانتریفوژ در یافتن طیف‌های واضح‌تر مهم است. وجود تجمع‌هایی از سلول‌ها و مواد رنگینه غیر کرووفیلی تصفیه نشده سبب می‌شود طیف جذبی بدست آمده با طیف کلروفیل‌های خالص شکل ۲ متفاوت باشد. ذرات درشت‌تر با پراکندگی نور سبب ایجاد نوفه‌های بیشتر در نمودار جذبی می‌شوند. اگرچه نوفه‌ها به مقداری نیستند که بتوانند بر قله‌های اصلی جذب، به ویژه بر محل

طول موجی آن‌ها تاثیر بگذارند و از این رو می‌توان از روی قله‌های جذب به نوع کلروفیل همچنان پی برد.



شکل ۹ طیف جذبی نمونه جلبکی مورد آزمایش. (الف) طیف نمونه پیش از رسوب، (ب) طیف نمونه پس از رسوب گذاری.

در شکل ۱۰ طیف جذبی نمونه‌ای از همان حوزچه شکل ۷ را می‌بینیم که پس از تخلیه آب و شست‌وشو، دوباره پس از سه ماه تشکیل شده ولی بسیار رقیق‌تر از پیش است. غلظت این نمونه پس از رسوب گذاری ذرات گرد و غبار و چندین بار غلیظ‌سازی با استفاده از سانتریفیوژ، 0.5 mg/mL بدست آمد. قله‌های جذبی در ۴۴۲ و ۶۷۵ نانومتر دلیل بر وجود مقادیر کمی از کروفیل a است. نوفه‌های کمتر نسبت به شکل ۹ نشان می‌دهد که نمونه از نظر ابعاد ذرات معلق یکدست‌تر بوده و دارای تجمیع‌های درشت نیست. جذب در ناحیه ۳۰۰ تا ۴۰۰ به خاطر پراکندگی مای نورهای فرابنفش است و ارتباطی با غلظت کلروفیل ندارد.



شکل ۱۰ طیف جذبی نمونه جلبکی مورد آزمایش با جلبک‌های جوان.



در نمونه‌هایی که از استخرها و آبیگرهای آب شیرین موجود در شهرستان سبزوار گردآوری شد، تمام جلبک‌های سبز رنگ کلونیدی در آب مورد بررسی قرار گرفتند. تنوع جلبکی موجود در آب مهم است و در تصاویر میکروسکوپی تهیه شده حداقل شش گونه از سه راسته متفاوت جلبکی شناسایی شدند. در شکل ۱۱ (الف)، گونه اول از جنس *Lepocinclis*^۱ از شاخه اوگنوفیتا^۲ نمایش داده شده است. اوگلناها از آغازیانی بوده که در آب‌های غنی از مواد آلی زندگی می‌کنند. از ویژگی‌های ساختاری اوگلناها وجود لکه چشمی قرمز رنگ در نزدیک تاژک بوده که در تشخیص جهت نور موثر است. این جلبک‌ها با مصرف و تجزیه مواد آلی و باقی مانده‌های سایر موجودات در آب به تصفیه آب کمک می‌کنند. با این حال برخی از گونه‌های اوگلنا در آب‌های شور یا شیرین با محتوی نیتروژن بالا رشد کرده و ضمن شکل‌گیری بوم یا شکوفایی جلبکی (افزایش جمعیت جلبک‌ها در سطح آب و ممانعت از ورود نور و اکسیژن به اعماق آب)، منجر به مرگ ماهی‌ها و آبیان می‌شوند [۲۳]. گونه دوم در این نمونه آب از جنس *Gymnodinium*^۳ از خانواده دینوفلاژله‌ها^۴ در شکل ۱۱ (ب) نمایش داده شده است. دینوفلاژله‌ها با حدود ۲۰۰۰ گونه بیش از ۷۰ درصد گونه‌های سمی آب را تشکیل می‌دهند و در آب‌های با نیتروژن بالا در شکوفایی جلبکی نیز مشارکت فعال دارند [۲۴ و ۲۵]. گونه *Gymnodinium* نیز با تولید سم ساکسیتوزین^۵ ایجاد سندرم‌های کشنده و خطرناک می‌کند که از علائم آن واکنش‌های عصبی، عدم تعادل، گیجی و تب است. گونه‌های سوم تا پنجم متعلق به جنس *Desmodesmus*^۶ از خانواده سندماسی^۷ (شکل ۱۱ ج-ه)، و گونه ششم از جنس کلرلا^۸ (شکل ۱۱ و)) که همگی متعلق به شاخه کلروفیتا^۹ می‌باشند. جلبک‌های جنس *Desmodesmus* با تنوع ۷۰ گونه‌ای در کلنی‌های ۴ تا ۸ تایی سبز قرار می‌گیرند. این جلبک‌ها منابع غنی نیتروژن و فسفات را دریافت می‌کنند و نقش ویژه‌ای در تصفیه پساب‌ها دارند.

¹ *Lepocinclis globosa* or *Lepocinclis ovum*

² Euglenophyta

³ *Gymnodinium catenatum*

⁴ Dinophyceae

⁵ Saxitoxin

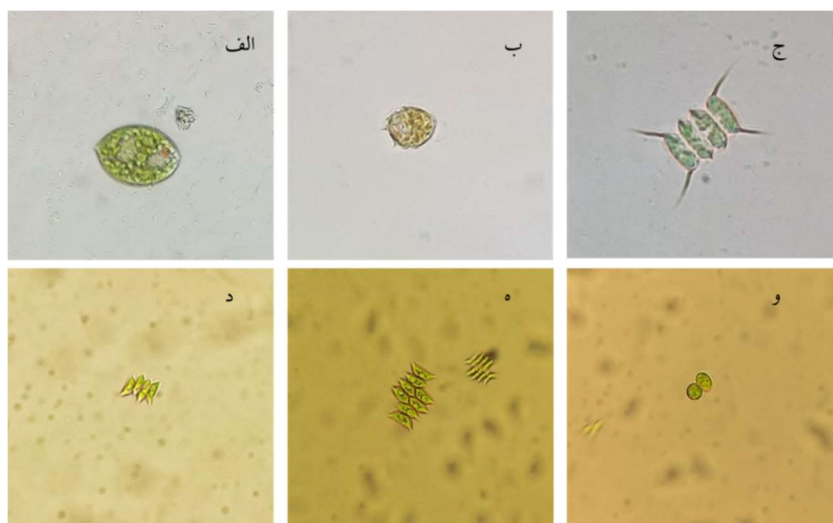
⁶ *Desmodesmus quadricauda* and *Scenedesmus acutus*

⁷ Scenedesmaceae

⁸ *Chlorella vulgaris*

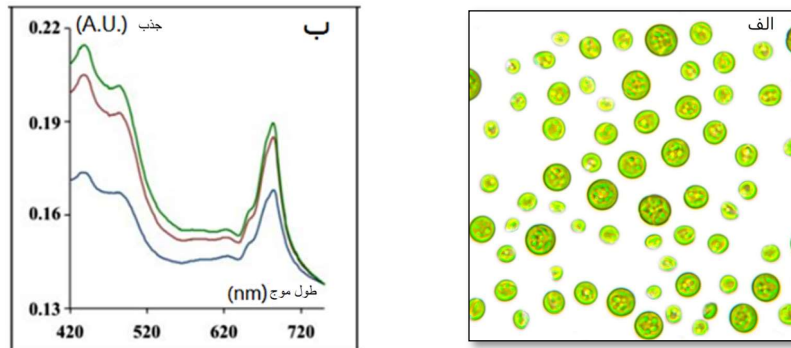
⁹ Chlorophyta





شکل ۱۱ تصویر جلبک‌های میکروسکوپی موجود در نمونه آب شیرین جمع آوری شده از استخر در سبزوار. (الف) جنس لپوسینسلیس از راسته اوگلنا، (ب) جنس جیمنودینیوم از راسته دینوفلاژله‌ها، (ج تا ه) گونه‌های متفاوت از جنس سندسموس و (و) جنس کلرلا همگی از شاخه کلروفیتا.

نمونه دیگری که از شرکت توسعه ذخایر زیستی جلبک‌های فارس خریداری شد به نام علمی کلورلا وولگاریس^۱ است. نمونه تهیه شده تقریباً خالص بوده و شکل جلبک‌ها و طیف جذبی آن در شکل ۱۲ مشاهده می‌شود.



شکل ۱۲ (الف) تصویر جلبک‌های میکروسکوپی کلورلا وولگاریس از شرکت توسعه ذخایر زیستی جلبک‌های فارس و (ب) طیف جذبی کلروفیل در غلظت‌های متفاوت [۲۶].

^۱ Chlorella vulgaris



۴. ساخت دستگاه

دستگاه بر اساس الگوی شکل ۱ ساخته شد. نشتی های نوری به درون دستگاه به عنوان عنصر مخرب ایجاد نوفه کاهش یافت. از یک برد آردوینو به عنوان ریزپردازنده استفاده شد. نرم افزارهای برد میکروکنترلر نوشته و بر روی برد بارگیری شد. همچنین پایداری داده های خروجی و در نهایت کالیبراسیون با جلبک های بیان شده در بالا انجام پذیرفت. طرح اصلی که دستگاه شمارنده سلول های جلبک رومیزی (پورتابل) است در شکل ۱۳ نشان داده شده است. طراحی اپتیکی داخلی بهینه شد و تاثیر نشتی های نوری خارجی مورد ملاحظه قرار گرفت. با کاهش نشتی ها و بهینه سازی در طراحی نوری، میزان نوفه حسگر نوری به شدت کاهش یافت. همچنین سیستم نمایشگر LED رنگی با سرعت بالا بر روی دستگاه نصب و راه اندازی شد که می تواند میزان شدت نور فوتولومینسانس و نیز غلظت جلبک ها را همزمان نمایش دهد. نمونه شامل درپوش جهت جلوگیری از نشتی نوری خارجی است. نگهدارنده سلول مایع که بر اساس استانداردهای طیف سنج های اپتیکی طراحی و چاپ سه بعدی شده است را در شکل ۱۳ ملاحظه می نمایید.



شکل ۱۳ طرح اصلی که دستگاه شمارنده سلول های جلبک رومیزی (پورتابل).

درون دستگاه، چشمه نوری و آشکارساز نور قرار گرفته اند و نور بنفش که از چند LED قوی با طول موج ۳۸۵ نانومتر ساطع شده، از کلونید شامل جلبک ها عبور نموده و به آشکارساز می رسد. نور عبوری پس از عبور از فیبر نوری گیرنده به سنسور تشخیص نور می رسد که شامل سه فیلتر رنگی (سبز- قرمز- آبی) است. پس از فیلتر شدن و حذف باقیمانده نورهای اضافی در هر فیلتر، شدت نورهای آبی، قرمز و سبز با استفاده از سه سنسور که زیر هر فیلتر قرار دارد، خوانده می شود. سنسور دیگری در جهت عمود بر نور تابشی تنها نور قرمز بدست آمده از فوتولومینسانس ساطع شده

از کلروفیل a را می‌خواند. با اندازه‌گیری نور قرمز و با کالیبراسیون آن غلظت کلروفیل-a و به پیروی از آن، غلظت سلول‌های جلبک قابل محاسبه است. برای ساخت دستگاه سنجش غلظت کلروفیل، نخست باید جمع‌آوری داده‌ها انجام شود. جمع‌آوری داده‌ها و در نهایت تجزیه و تحلیل آن‌ها برای کالیبراسیون ضروری است. روش کار و نحوه جمع‌آوری داده‌ها در این دستگاه به این صورت است که ابتدا سل دستگاه با نمونه آب شامل جلبک مورد نظر پر می‌شود. پس از آن دستگاه کار خود را آغاز کرده و در فواصل مشخص نور LED هدایت شده را از درون مایع نمونه عبور می‌دهد. سپس سنسورهای نوری اطلاعات نوری عبوری از مایع نمونه را گرفته و امپدانس‌ها به عنوان داده‌ها بر اساس شدت مولفه‌های نور ثبت و ذخیره می‌شوند. یادآوری می‌شود که فواصل آن‌ها تنظیم شده است تا بهترین بهره و حساسیت بدست آید. تمامی قطعات و ماژول‌های بیان شده به همراه کد نوشته شده، کتابخانه‌های نرم افزاری و غیره در طرح بر روی برد آردوینو مگا نصب و آپلود شده است. فایل‌هایی که توسط نرم افزار سالیید ورکز^۱ طراحی و با استفاده از پرینتر سه بعدی ساخته شده‌اند.

۵. شمارش جلبک‌ها بر اساس هموسیستمتر یا لام نئوبار

به منظور شمارش جلبک‌ها در محیط کشت مورد نظر، باید لام نئوبار یا هموسیستمتر از محلول شامل جلبک پر شود. برای پر کردن محفظه‌های هموسیستمتر، ابتدا لامل ضخیم روی هر دو شبکه قرار گرفت و به کمک سمپلر مقدار ۱۰ میکرولیتر از نمونه جلبکی (کلرلا) از محیط کشت جلبک برداشته شد. سمپلر در زاویه تقریباً ۴۵ درجه (برای کنترل سرعت جریان بیشتر یا کمتر) و نوک آن در لبه جلویی لامل قرار گرفت. با فشار بسیار ملایم، نمونه به سرعت و به صورت یکنواخت در محفظه جریان یافت و محفظه‌ها پر شدند. بعد از حدود یک دقیقه که نمونه‌های جلبکی ته‌نشین و به صورت یکنواخت پخش شدند، شمارش جلبک‌ها در زیر میکروسکوپ با بزرگنمایی ۱۰ صورت گرفت (شکل ۱۴). شمارش جلبک‌ها در محیط‌هایی با رقت‌های مختلف تکرار شد و تعداد جلبک‌ها در هر محیط توسط فرمول ارائه شده در ادامه محاسبه گردید. با هر بار شمارش جلبک‌ها در محیط‌های با رقت‌های مختلف میزان فلورسنت کلروفیل نمونه‌ها به کمک دستگاه طراحی شده مورد سنجش قرار گرفت.

^۱ Solid Works

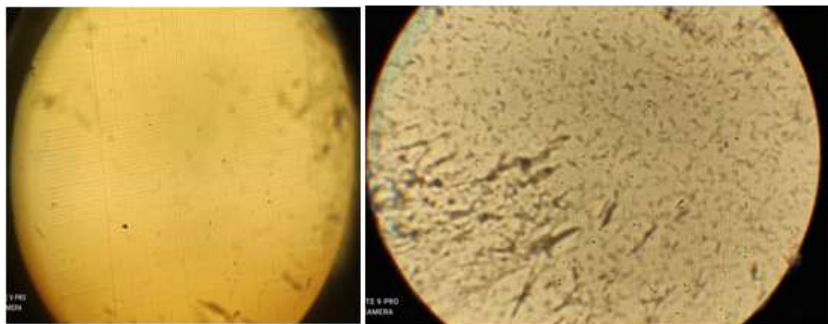


روش استاندارد برای محاسبه تراکم سلولی جلبک در استفاده از لام نئوبار وجود دارد. در ابتدا تعداد میانگین سلول‌ها در هر مربع را محاسبه می‌کنند:

$$(۱) \quad \text{میانگین تعداد سلول در هر مربع} = \frac{\text{تعداد سلول‌های شمارش شده}}{\text{تعداد مربع‌ها}}$$

و از رابطه استاندارد زیر می‌توان به غلظت سلول‌ها (تعداد در یک میلی‌لیتر) رسید:

$$(۲) \quad 10^4 \times \text{میانگین تعداد کل سلول‌ها در 25 مربع} = \text{تعداد کل سلول‌ها در 1 میلی لیتر}$$



شکل ۱۴ تراکم جلبکی بر روی هموسیتومتر یا لام نئوبار.

۶. تست و کالیبراسیون دستگاه و تهیه راهنما

غلظت کلروفیل-a رابطه مستقیمی با شدت نور قرمز تولید شده به روش فوتولومینسانس دارد. بخشی از نور آبی پس از عبور به رنگ قرمز تبدیل شده و در همه جهات پراکنده می‌شود. بعد از فیلتر شدن آن و حذف نور آبی، با آشکارسازی نور قرمز در جهت عمود بر تابش اولیه می‌توان به شدت نور فلورسنس رسید که معیاری برای غلظت کلروفیل-a است. از نمونه جلبکی خالص با غلظت‌های مختلف استفاده شد. دو نور سفید رنگ و آبی رنگ به صورت پیاپی و به مدت ۱ ثانیه از سلول شامل کلونید جلبکی عبور نموده و شدت نورهای عبوری ثبت شد. همانطور که در بخش پیشین مشاهده شد، شمارش نمونه‌های جلبکی انجام شده است. در ابتدا برای یک نمونه غلیظ با حجم ۳ میلی‌لیتر شمارش سلول‌های جلبک انجام شد. در گام بعد با آب مقطر حجم آن نمونه زیاد شد و دوباره خوانش شد و این فرآیند چندین بار تا رسیدن به نمونه‌ای رقیق و به ظاهر کمابیش شفاف ادامه یافت. نمودار شمارش تعداد سلول‌ها بر حسب حجم کل در شکل ۱۵ مشاهده می‌شود. از شکل پیداست که نمودار نزولی است و با حجم نسبت عکس دارد که دلیل آن کاملاً منطقی است. چنانکه می‌دانیم اگر غلظت را با n و تعداد کل سلول‌ها را با N و حجم را با V نشان دهیم، برای اولین غلظت داریم:

$$n_0 = \frac{N_0}{V_0} \quad (3)$$

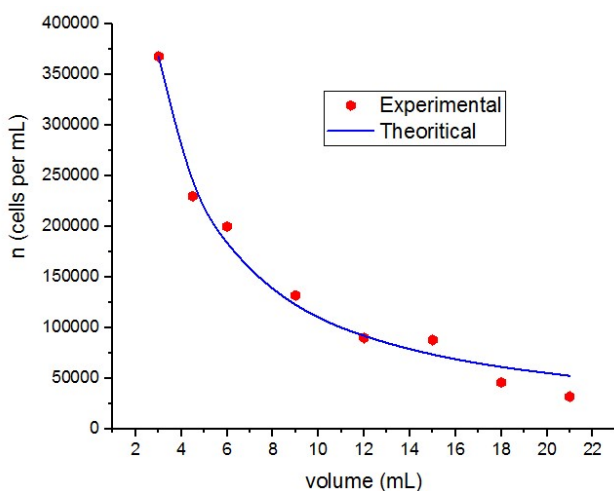
که زیرنویس‌های صفر مربوط به اولین نمونه است. در گام‌های بعد تعداد اولیه جلبک‌ها تغییر نکرده و تنها حجم زیاد و غلظت کم شده است. پس می‌توان نوشت:

$$n(V) = \frac{N_0}{V} \quad (4)$$

از رابطه (۳) می‌توان نوشت:

$$n(V) = \frac{n_0 V_0}{V} \quad (5)$$

یعنی غلظت با معکوس حجم در تناسب است که دو نمودار نیز به روشنی دیده می‌شود.



شکل ۱۵ نمودار غلظت بر حسب حجم تهیه شده.

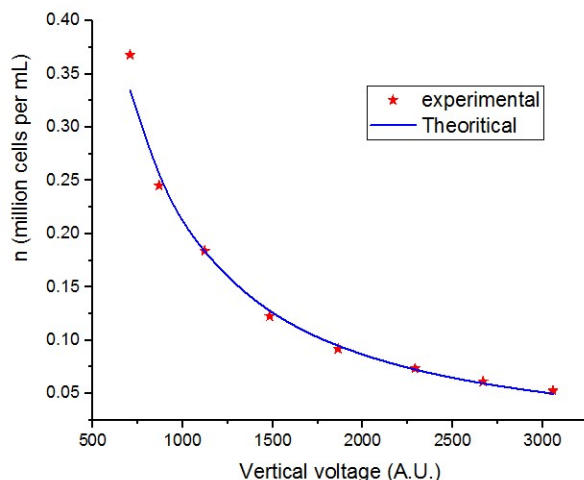
هر غلظت را درون سل دستگاه که شسته شده، ریخته شده است و اعداد سنسورها خوانش شد. مهم‌ترین عدد، عدد سنسور عمودی مربوط به تابش فوتولومینسانس است که اتفاقاً مناسب‌ترین عدد بود (سیگنال عمودی). تابع غلظت سلول‌های جلبکی شمارش شده بر حسب سیگنال عمودی در شکل ۱۶ آمده است. با برازش عددی نمودار به تابع تئوری رسیدیم که تابع کالیبراسیون است:

$$n = \frac{1694000}{(Vertical_signal)^{1.3}} \quad (6)$$



که در آن، n برحسب K_{cell}/mL (هزار سلول در میلی‌لیتر) و $Vertical_signal$ همان سیگنال عمودی است.

در نهایت از راه میان‌یابی ریاضی به این تابع ریاضی رسیدیم که با اعمال آن‌ها در کد برنامه‌نویسی، دستگاه حاضر کالیبره شد و قابل استفاده توسط سازمان منابع آب می‌باشد. پایداری، تکرارپذیری و دقت بالای دستگاه نشان از مزیت روش‌های طیف‌سنجی نشری (فوتولومینسانس) نسبت به روش‌های جذبی طیف‌سنجی است.



شکل ۱۶ نمودار غلظت بر حسب سیگنال عمودی دستگاه.

در آخرین گام ضریب کالیبراسیونی استفاده شد که یک خروجی بر حسب میکروگرم کلروفیل a بر میلی‌لیتر روی صفحه نمایش دهد. از آنجا که اندازه‌گیری جرمی کلروفیل بسیار دقیق و حساس است، از مقالات معتبر برای این امر استفاده شد تا ضریب تبدیل مناسبی برای تعداد سلول‌ها در واحد حجم یافته شود. در سال‌های کنونی، چند روش جدید برای محاسبه جرم دقیق کلروفیل a معرفی شده‌اند [۲۷ و ۲۸]. در منبع [۲۶] زیست توده‌های میکروجلبک‌ها (بیشتر از نوع نمونه‌هایی که در کار حاضر بررسی شد) در شرایط محیطی گوناگون چون تابش نورهای متفاوت و ph های متفاوت در فازهای لگاریتمی (در حال رشد) و رشد یافته بررسی شدند. افزایش زیست توده با استفاده از روش وزن‌سنجی و روش اسپکتروفتومتری بر اساس کلروفیل a موجود در سلول‌های ریزجلبک مشخص شد. تعداد سلول‌های ریزجلبک نیز با استفاده از هموسیتومتر مشخص شد. از بررسی تمام حالات بررسی شده به این نتیجه رسیدیم که به صورت متوسط به ازای هر سلول جلبک 5.5×10^{-8}

میکروگرم کلروفیل a داریم. یا به عبارتی جرم کلروفیل‌های a را $5.5 \times 10^{-8} \frac{\mu g}{cell}$ می‌توان نوشت. این ضریب تبدیل در دستگاه اعمال شده و ppm کلروفیل a را می‌دهد. دقت اندازه‌گیری این دستگاه تا ۱ ppm برآورد شده است که دقت متداول برای دستگاه‌های اندازه‌گیری غلظت کلروفیل a بوده و قابل مقایسه با نمونه‌های خارجی است [۲۹-۳۱].

بیان این نکته ضروری است که برآزش عددی داده‌ها از روش کمینه مربعات^۱ استفاده شده که یک روش ریاضی برای یافتن منحنی مناسب برای مجموعه‌ای از نقاط است. در این روش فرض می‌شود که بهترین منحنی برآزش، منحنی است که دارای کمینه مجموع انحرافات از یک مجموعه داده معین داشته باشد. به عبارت دیگر، بهترین تابع با به کمینه رساندن مجموع مجذور انحرافات نقاط از منحنی تابع بدست می‌آید [۳۲].

۷. نتیجه‌گیری

در این مطالعه، در ابتدا با بررسی نمونه‌های جلبکی در استخرهای آب شیرین و نیز نمونه خالص تهیه شده از شرکت توسعه ذخایر زیستی جلبک‌های فارس، و تشخیص نوع جلبک‌های موجود در آن، طیف‌سنجی و اندازه‌گیری غلظت انجام شد. مهم‌ترین ابزار برای اندازه‌گیری غلظت جلبک‌ها، کلروفیل-a است که در همه انواع جلبک‌ها با درصد متفاوت وجود دارد و دارای ویژگی فلوروسانس است که از راه اندازه‌گیری نور قرمز، میزان کلروفیل-a را می‌توان برآورد نمود. تهیه راهنما و توابع شدت‌های نور بر حسب غلظت، جهت کالیبراسیون دستگاه‌ها انجام شد. اندازه‌گیری مستقیم نور، نوفه‌های کم، پایداری بالا و تهیه روال منطقی بین داده‌ها می‌تواند به افزایش قابلیت‌ها و بهبود کیفیت کمک کند و این طرح به ابزاری دقیق برای اندازه‌گیری غلظت کلروفیل تبدیل شد. پایداری، تکرار پذیری و دقت بالای دستگاه نشان از مزیت روش‌های طیف‌سنجی نشری (فوتولومینسانس) نسبت به روش‌های جذبی طیف‌سنجی است.

۸. تقدیر و تشکر

این پژوهش با حمایت مالی گروه تحقیقات کاربردی شرکت مدیریت منابع آب ایران تحت قرارداد شماره ۱۵۰/۱۴۰۰۲/۰۲ مورخ ۱۴۰۰/۰۲/۰۱ به انجام رسیده است.

^۱ Least-Squares method



منابع

- [1] Kolahchi N., "Sustainable development, water resources, the limits and barriers", *National Conference on Human, Environment and Sustainable Development*, March 2010. Hamadan. Iran (in Persian).
- [2] Five-year plan for agriculture and natural resources. 1367 country program and budget organization (in Persian).
- [3] Kotsar A., "Bulletin of the Water Commission, Watershed management: Bypass towards the wisely Department of Water Resources", *Jihad Sazandegi Publications*, **10**, 8, 1373 (in Persian).
- [4] Strain H. H., "Paper chromatography of chloroplast pigments: Sorption at a liquid-liquid interface", *J. Phys. Chem.* **57** (7), 638-640, 1953. <https://doi.org/10.1021/j150508a007>.
- [5] Rasmussen, R.S. and Morrissey, M.T., "Marine biotechnology for production of food ingredients, In: Steve, L.T. (Ed.)", *Advances in Food and Nutrition Research*. **52**, 237-292, 2007. [https://doi.org/10.1016/S1043-4526\(06\)52005-4](https://doi.org/10.1016/S1043-4526(06)52005-4)
- [6] Patel, B. H. Natural dyes, In: Clark, M. (Ed.), "Handbook and Textile and Industrial Dyeing", *Woodhead Publishing, Science Direct*. 395-424, 2011.
- [7] Pareek, S., Sagar, N. A., Sharma, S., Kumar, V., Agarwal, T., Gonzalez-Aguilar, G. A. and Yahia, E. M., "Chlorophylls: Chemistry and Biological Functions, In: Yahia, E. M. (Ed.)", *Fruit and Vegetable Phytochemicals: Chemistry and Human Health*, *Weily*, 269-284, 2018.
- [8] Balali, S., Hoseini, S. A., Ghorbani, R. and Balali, S., "Correlation of Chlorophyll-A with Secchi Disk Depth and Water Turbidity in the International Alma Gol Wetland, Iran.", *World Journal of Fish and Marine Science*, **4**, 504-508, 2012. DOI: 10.5829/idosi.mejsr.2013.13.10.1124
- [9] Cevic, F. "The influence of some physico-chemical criteria on chlorophyll-a in summer season.", Ph.D. Thesis. *Cukurova University, ADANA. Graw-Hill*, 2005.
- [10] Satpati, G.G. and Pal, R., "Photosynthesis in algae, in: Arumugam", M., Kathiresan, S. and Nagaraj, S. (Eds.), *Applied Algal Biotechnology. Nova Science*, 49-68, 2020.
- [11] Pedros R., Moya I., Goulas Y. and Jacquemoud S., "Chlorophyll fluorescence emission spectrum inside a leaf, Photochem. Photobiol", *Sci.*, **7**, 498-502, 2008. <https://doi.org/10.1039/B719506K>
- [12] Lichtenthaler H. K., Buschmann C., "Chlorophylls and Carotenoids: Measurement and Characterization by UV-VIS Spectroscopy", *Current Protocols in Food Analytical Chemistry*, **1**, F4.3.1-F4.3.8. 2001. <https://doi.org/10.1002/0471142913.faf0403s01>
- [13] Koushki E., "Effect of conjugation with organic molecules on the surface plasmon resonance of gold nanoparticles and application in optical biosensing", *RSC Advances*. **11**, 23390-23399. 2021. <https://doi.org/10.1039/D1RA01842F>
- [14] Fernandez-Jaramillo A. A., Duarte-Galvan C., Contreras-Medina L. M. Torres-Pacheco I., Romero-Troncoso R.d. J., Guevara-Gonzalez R. G. and Millan-Almaraz J.R., "Instrumentation in Developing Chlorophyll Fluorescence Biosensing: A Review", *Sensors*, **12**, 11853-11869, 2012. <https://doi.org/10.3390/s120911853>
- [15] Na Ayudhya T. I., Posey F. T., Tyus J.a C., and Dingra N. N., "Using a Microscale Approach to Rapidly Separate and Characterize Three Photosynthetic Pigment Species from Fern", *J. Chem. Educ.* **92**, 920-923, 2015. <https://doi.org/10.1021/ed500344c>
- [16] Lamb J.J., Rokke G., and Hohamann-Marriott M.F., "Chlorophyll fluorescence emission spectroscopy of oxygenic organisms at 77 K", *PHOTOSYNTHETICA* **56** (1), 105-124. 2018. <https://doi.org/10.1007/s11099-018-0791-y>



- [17] Li Y. and Chen M., "Novel chlorophylls and new directions in photosynthesis research", *Functional Plant Biology* **42**. 493-501. 2015. <https://doi.org/10.1071/FP14350>.
- [18] Zarei Darki B., "Algal Flora of Reservoirs of Iran.", *International Journal on Algae*, **16**(2). 132-143. 2014. <https://doi.org/10.1615/InterJAlgae.v16.i2.40>
- [19] <http://www.citclops.eu/fluorescence-/measuring-water-fluorescence>.
- [20] Yadav S.P., Ibaraki Y., Dutta Gupta S., "Estimation of the chlorophyll content of micropropagated potato plants using RGB based image analysis", *Plant Cell Tiss Organ Cult.* **100**, 183-188. 2020. <https://doi.org/10.1007/s11240-009-9635-6>
- [21] Ganjian Khanari A. Ghasemnejad M., Shakouri M., Ganjian Khanari F. Chashnidel Y., Khosravi M., Rohi A., Farabi V., "Coagulation and Paste Preparation from Scenedesmus Microalgae", *Journal of Breeding and Aquaculture Sciences*, **2**, 55-66, 2014 (in Persian).
- [22] <https://en.wikipedia.org/wiki/Chloroplast>.
- [23] Rahman, M. M., Jewel M.A.S., Khan S. and Haque M.M. "Study of Euglenophytes Bloom and It's Impact on Fish Growth in Bangladesh", *Algae* **22** (3). 185-192. 2007. <https://doi.org/10.4490/algae.2007.22.3.185>
- [24] Mohsenizadeh F., "Fishing sustainability and the necessity of risk prediction of HABS", *4th National Shrimp Conference, Bushehr, Iran*, February 2019 (in Persian).
- [25] Tahami F.S. "Study on Lake water quality of Sanandaj Dam by algal biological indicators", *Ecology and Water Resource Journal*, **1**. 23-32. 2018.
- [26] Pfindler S., Alaoui-Sossé B., Alaoui-Sossé L., Aleya L., "Effects of UV-C radiation on *Chlorella vulgaris*, a biofilm-forming alga", *Journal of Applied Phycology*, **30**. 1607-1616. 2018. <https://doi.org/10.1007/s10811-017-1380-3>
- [27] Ratomski P. and Hawrot-Paw M. "Production of *Chlorella vulgaris* Biomass in Tubular Photobioreactors during Different Culture Conditions", *Appl. Sci.* **11**. 3106. 2021. <https://doi.org/10.3390/app11073106>
- [28] Rinawati M., Sari L. A. and Pursetyo K. T. "Chlorophyll and carotenoids analysis spectrophotometer using method on microalgae", *IOP Conf. Ser.: Earth Environ. Sci.* **441**. 012056. 2020.
- [29] <https://www.yisi.com/accessory/id-6025/6025-chlorophyll-sensor>.
- [30] <https://ppsystems.com/in-situ-spectrofluorometers>.
- [31] <https://www.aquams.com/parametre/55-chlorophyll-a/?lang=en>.
- [32] Koushki E., Koushki A., "Simple Method for Optical Detection and Characterization of Surface Agents on Conjugated Gold Nanoparticles", *Plasmonics*, **18**. 1151-1157. 2023. <https://doi.org/10.1007/s11468-023-01843-8>



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



بررسی اثر نیمه رساناهای مختلف بر عملکرد باتری رادیوایزوتوپی^۱ نجمه محمدی^۲

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۳/۰۲
تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۰۵/۲۹
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۶/۱۸

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران
دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا
سال سیزدهم، پیاپی ۳۵، زمستان ۱۴۰۲
صص ۹۳ - ۱۱۱

چکیده:

هدف از این پژوهش بررسی نظری عملکرد باتری بتاولتائیک با چشمه رادیوایزوتوپی ^{14}C و نیمه رساناهای مختلف بر پایه اتصال $p-n$ است. برای این منظور ابتدا ضخامت اشباع چشمه ^{14}C و توزیع انرژی ذخیره شده ناشی از ذرات بتای گسیل شده در نیمه رساناهای مختلف شامل SiC ، GaN ، GaAs و الماس با استفاده از کد مونت کارلوی MCNPX شبیه سازی و محاسبه شده است. با توجه به نتایج بدست آمده، ضخامت بهینه چشمه ^{14}C ، ۳۰ میکرومتر تعیین گردید. سپس با به کارگیری روابط تحلیلی و الگوی عددی، ارتباط بین چگالی ناخالصی های اضافه شده به نیمه رساناها و پارامترهای عملکرد باتری هسته ای بتاولتائیک از جمله چگالی جریان مدار کوتاه، ولتاژ مدار باز و چگالی توان خروجی باتری ارزیابی شده است. نتایج نشان دادند که در بهترین حالت، با قرار دادن الماس به عنوان نیمه رسانا در چیدمان باتری و با وارد کردن ناخالصی با چگالی $N_d = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ و $N_a = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ توان خروجی باتری به میزان $9.68 \mu\text{W}/\text{cm}^2$ افزایش می یابد.

واژگان کلیدی: باتری بتاولتائیک، نیمه رسانا، چشمه ^{14}C ، اتصال $p-n$

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.44175.1334

² استادیار، گروه فیزیک دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی سهند، تبریز، ایران. Email: n_mohammadi@sut.ac.ir



۱. مقدمه

با توجه به پیشرفت‌های سریع در سامانه‌های میکروالکترومکانیکی، تقاضای زیادی برای باتری‌های هسته‌ای و کاربرد آن‌ها در زمینه‌های تجاری، نظامی، پزشکی و غیره وجود دارد. چرا که، باتری‌های هسته‌ای با طول عمر طولانی، جایگزینی مناسب برای باتری‌های شیمیایی به ویژه در کاربردهای از راه دور می‌باشند. روش‌های متفاوتی برای تبدیل انرژی ذرات گسیل شده به انرژی الکتریکی وجود دارد که در این بین، استفاده از قطعات نیمه‌رسانا جهت تبدیل انرژی ذرات بتا به انرژی الکتریکی از جمله روش‌های کاربردی رایج در این زمینه است. در این باتری‌ها از انرژی پرتوهای گسیل شده از مواد پرتوزا، انرژی الکتریکی تولید می‌شود.

از مزیت‌های باتری‌های هسته‌ای می‌توان به قدرت بالا، طول عمر بالا، وزن کم، سازگاری بهتر با محیط و قابلیت طراحی در مقیاس کوچک‌تر نسبت به باتری‌های فسیلی، خورشیدی و شیمیایی اشاره نمود [۱]. این نوع باتری‌ها در هر شرایط دمایی، رطوبتی و غیره توانایی تولید توان را دارند. افزون بر این، باتری‌های هسته‌ای می‌توانند در مکان‌هایی که امکان شارژ باتری وجود ندارد، مانند حسگرهای داخل چاه نفت، زیر دریایی‌های پژوهشی و کاوشگرهای فضایی نیز مورد استفاده قرار گیرند.

یکی از انواع باتری‌های هسته‌ای، باتری بتاولتائیک است که متشکل از یک چشمه بتا و نیمه‌رسانا می‌باشد. این باتری‌ها انرژی ذرات بتا را از راه تولید جفت الکترون-حفره در حین عبور ذرات بتا از مواد نیمه‌رسانا به جریان الکتریکی تبدیل می‌کنند. این نوع باتری‌ها با دو ساختار اتصال $p-n$ [۲]، و شاتکی^۱ [۳] ساخته و مورد استفاده قرار می‌گیرند.

در مواد نیمه‌رسانا الکترون‌های ظرفیت، نوارهای انرژی موسوم به نوار ظرفیت را پر می‌کنند. نوار انرژی بعدی به نام نوار رسانش به اندازه انرژی شکاف از نوار ظرفیت فاصله دارد. انرژی شکاف مواد نیمه‌رسانا کمتر از مواد عایق است و در نتیجه در دمای اتاق برخی از الکترون‌ها با دریافت انرژی گرمایی به نوار رسانش رفته و در رسانایی الکتریکی شرکت می‌کنند. در اثر این انتقال، در نوار ظرفیت یک حفره ایجاد می‌گردد. پس از این، حفره با استفاده از باقی الکترون‌های ظرفیت پر شده و حفره دیگری به جای آن الکترون‌ها ایجاد می‌شود. بدین ترتیب حفره در نوار ظرفیت حرکت می‌کند. در کاربردهای عملی با افزودن ناخالصی می‌توان تراکم الکترون‌ها یا حفره‌ها را افزایش داد. دو نیمه‌رسانای نوع n و p به کمک افزودن تعدادی مشخص از اتم‌های ناخالصی به نیمه‌رسانا تهیه می‌شوند. نیمه‌رسانای نوع n با افزودن اتم‌های ناخالصی دارای ۵ الکترون در نوار ظرفیت مانند

¹ Schottky



آنتیموان، آرسنیک و فسفر ساخته می‌شود. الکترون باقی مانده از اتم ناخالصی به هیچ پیوندی مقید نیست و در نیمه رسانای نوع n حرکت نسبتاً آزادی دارد. ناخالصی اضافه شده اتم‌های دهنده نامیده می‌شوند. نیمه‌رسانای نوع p از وارد کردن ناخالصی دارای ۳ الکترون ظرفیت مانند بور، گالیوم و ایندیوم ساخته می‌شود. در این صورت برای تکمیل پیوندهای اشتراکی کمبود الکترون یا حفره وجود دارد. ناخالصی تزریق شده اتم‌های پذیرنده نامیده می‌شوند.

با اتصال دو نوع نیمه‌رسانای نوع n و p، که آن را اتصال p-n می‌نامند، الکترون و حفره‌های موجود در ناحیه اتصال ترکیب شده و ناحیه‌ای بدون حامل‌های بار مثبت و منفی ایجاد کرده که ناحیه تهی نامیده می‌شود. ناحیه تهی دارای عرض محدودی است. چرا که در اثر وجود یون‌های ثابت مثبت و منفی در طرفین آن، یک میدان الکتریکی داخلی در ناحیه تهی به وجود می‌آید. با توجه به این که جهت میدان الکتریکی از مثبت به منفی است، جهت این میدان داخلی از سمت یون‌های مثبت به سمت یون‌های منفی می‌باشد.

در باتری‌های بتاولتائیک، ذرات بتا وارد ناحیه تهی شده و اگر انرژی آن از انرژی شکاف بیشتر باشد زوج الکترون-حفره ایجاد شده و جریان الکتریکی در یک جهت ایجاد خواهد شد. جفت الکترون-حفره با استفاده از میدان الکتریکی ایجاد شده در اتصال p-n از هم جدا می‌شوند. منشا اصلی تولید جریان در این باتری‌ها، الکترون-حفره‌ای است که مستقیماً در داخل ناحیه تهی تولید می‌شود.

عملکرد باتری‌های هسته‌ای به نوع چشمه رادیوایزوتوپی و نیمه‌رسانا وابسته است. از این رو پژوهشگران عملکرد باتری‌ها را با توجه به نوع چشمه بتا از نظر طیف انرژی بتا و همچنین نیمه‌رساناهای مختلف با انرژی شکاف متفاوت مورد بررسی قرار داده تا ساختار بهینه‌ای برای باتری بدست آید. برای این منظور از کد مونت کارلو به منظور ترابرد ذرات بتا و ضخامت بهینه چشمه بتا استفاده می‌شود. در دهه‌های گذشته، مطالعات گسترده‌ای در زمینه باتری‌های هسته‌ای انجام شده است. ویژگی‌های الکتریکی نیمه‌رساناها، طراحی بهینه باتری‌های بتاولتائیک برای رسیدن به توان خروجی بالاتر از جنبه‌های مهم پژوهش‌های نظری بر روی باتری‌های هسته‌ای می‌باشد. چشمه‌های رادیو ایزوتوپی ${}^3\text{H}$ ، ${}^{63}\text{Ni}$ و ${}^{147}\text{Pm}$ از جمله چشمه‌هایی هستند که در ساخت باتری‌های هسته‌ای مورد بررسی قرار گرفته‌اند [۴-۹]. در بین رادیو ایزوتوپ‌های گسیلنده بتا، چشمه ${}^{14}\text{C}$ با توجه به انرژی بتا، نیمه‌عمر بالا و نبود محصولات واپاشی نامطلوب، می‌تواند انتخاب مناسبی به عنوان چشمه بتازای مورد استفاده در ساخت باتری‌های هسته‌ای باشد. این رادیو ایزوتوپ یکی از پسماندهای هسته‌ای تولید شده در رآکتورها می‌باشد، که در صورت استفاده از آن در ساخت باتری‌های

هسته‌ای، می‌توان استفاده بهینه‌ای از آن داشت. رادیو ایزوتوپ ^{14}C تولید شده در رآکتور آلوده به سایر ایزوتوپ‌های کربن نیست. هر چند فرآیند جداسازی آن نیازمند فناوری پیچیده‌ای است، اما فرایند استخراج آن نسبت به چشمه‌ای مانند ^{63}Ni از دیدگاه اقتصادی مقرون به صرفه‌تر است [۱۰-۱۲]. این رادیو ایزوتوپ از راه واپاشی بتا با نیمه‌عمر 5730 سال به ^{14}N تبدیل شده، و انرژی بیشینه و انرژی میانگین بتای گسیل شده به ترتیب برابر با 0.156 MeV و 0.0497 MeV است. البته از معایب این چشمه می‌توان به توان گسیلی پایین آن اشاره نمود. چرا که توان گسیلی با عکس نیمه‌عمر متناسب است. اما از سوی دیگر، نیمه عمر بالای این رادیو ایزوتوپ موجب افزایش عمر باتری نیز خواهد شد [۱۳]. با این حال، تاکنون محاسباتی برای عملکرد باتری بتاولتائیک بر اساس این چشمه گزارش نشده است.

از سوی دیگر، مطالعات نظری نشان داده‌اند که هر چه انرژی شکاف نیمه‌رسانا بیشتر باشد، بازده تبدیل انرژی باتری نیز بیشتر خواهد بود [۱۴]. از این رو، نیمه‌رساناهایی همچون GaN ، GaAs و SiC و الماس به صورت موفقیت‌آمیزی در طراحی و ساخت باتری‌های هسته‌ای به کار رفته‌اند [۱۵-۲۲]. به عنوان مثال، Zheng و همکاران طراحی بهینه باتری بتاولتائیک بر پایه نیمه‌رسانای GaAs و چشمه ^{63}Ni را از راه محاسبات عددی انجام داده و بیشینه توان خروجی $0.135\text{ }\mu\text{W}/\text{cm}^2$ را برای باتری با اتصال p-n گزارش نموده‌اند [۲۳]. Lin و همکاران نیز باتری بتاولتائیک بر پایه SiC با چشمه ^{147}Pm را بهبود بخشیده‌اند. آن‌ها برای افزایش بازده باتری، استفاده از دو لایه دهنده الکترون با چگالی ناخالصی متفاوت را پیشنهاد داده‌اند [۲۴].

بنابراین، در این پژوهش، عملکرد باتری بتاولتائیک با ساختار اتصال p-n با چشمه ^{14}C و نیمه-رساناهای مختلف SiC ، GaN ، GaAs و الماس مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور، ضخامت اشباع چشمه و انرژی ذخیره شده در نیمه‌رساناها با استفاده از کد مونت کارلوی MCNPX 2.6 محاسبه شده است [۲۵]. سپس با استفاده از روابط تحلیلی و عددی، پارامترهای مربوط به عملکرد باتری بتاولتائیک محاسبه و مقایسه شد. نتایج بدست آمده می‌تواند اطلاعات مفیدی در اختیار سازندگان باتری‌های هسته‌ای قرار دهد.

۲. مواد و روش‌ها

۱.۲ خودجذبی و ضخامت اشباع

تعدادی از ذرات بتا گسیل شده از چشمه پیش از رسیدن به سطح توسط خود چشمه جذب می‌شوند. این پدیده خود جذب خود چشمه نامیده می‌شود. ذرات بتای تولید شده از واپاشی چشمه رادیوایزوتوپی



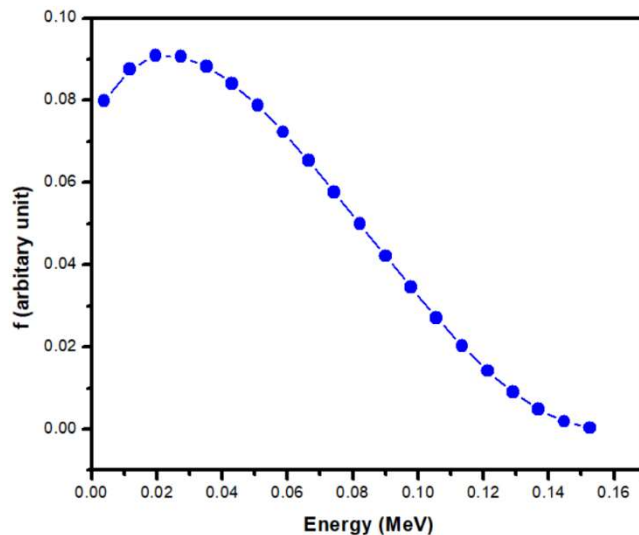
انرژی خود را در فرآیند انتقال از دست داده و در نتیجه فعالیت در سطح چشمه و قدرت انتشار کاهش می‌یابد. هر چه ضخامت چشمه بتازا بیشتر باشد، ذرات گسیل شده از چشمه افزایش می‌یابد. اما با افزایش بیشتر ضخامت چشمه، برخی ذرات بتا که انرژی خود را در عبور از چشمه از دست داده‌اند در داخل ماده چشمه جذب می‌شوند. در نتیجه این اثر، افزایش ذرات بتای خروجی پس از یک ضخامت مشخص متوقف شده و تعداد ذرات خروجی به اشباع می‌رسد. با افزایش ضخامت چشمه، میزان خود جذبی بیشتر شده و روند افزایش شار بتا کاهش می‌یابد. به صورتی که افزایش بیشتر ضخامت چشمه، هیچ تاثیر آشکاری در بهبود اکتیویته و قدرت انتشار چشمه نداشته و تنها سبب هدر رفتن مواد چشمه شده و هزینه ساخت باتری را افزایش می‌دهد.

اثر خود جذبی ذرات بتا در چشمه رادیوایزوتوپی اغلب در الگوسازی نظری طراحی باتری بتاولتائیک، نادیده گرفته می‌شود. اما در حقیقت، کارایی یک باتری بتاولتائیک به کمک اثر خود جذبی چشمه پرتوزا محدود شده است. از این رو، در نظر گرفتن اثر خود جذبی تخمین بهتری از خروجی باتری بتاولتائیک چون جریان اتصال کوتاه، ولتاژ مدار باز و جریان نشتی خواهد داشت [۲۶]. بنابراین لازم است، برای دستیابی به بازده بیشتر باتری بتاولتائیک ضخامت بهینه چشمه بتازا مشخص شود.

۲.۲ شبیه‌سازی مونت کارلو

برای تعیین ضخامت اشباع چشمه ^{14}C ، از کد مونت کارلوی MCNPX 2.6 استفاده شده است. برای این منظور سلول مکعبی با سطح مقطع $1\text{cm} \times 1\text{cm}$ و ضخامت‌های مختلف، از ماده ^{14}C با چگالی $25/25\text{ gr/cm}^3$ شبیه‌سازی گردید. سپس این سلول به عنوان چشمه بتا، با طیف انرژی ^{14}C رسم شده در شکل (۱) تعریف شد. برنامه ورودی در حالت الکترون و فوتون اجرا شده و با استفاده از تالی F1 شار بتای خروجی از مکعب برای ضخامت‌های مختلف از ۱ میکرومتر تا ۶۰۰ میکرومتر محاسبه شد. توزیع انرژی ذخیره شده ناشی از بتا در عمق نیمه‌رساناهای مختلف GaAs، SiC، GaN و الماس نیز با استفاده از مش تالی نوع ۳ محاسبه شد. برای این منظور مش‌هایی مستطیلی با سطح مقطع $1\text{cm} \times 1\text{cm}$ و ضخامت ۱ میکرومتر تعریف شده است.

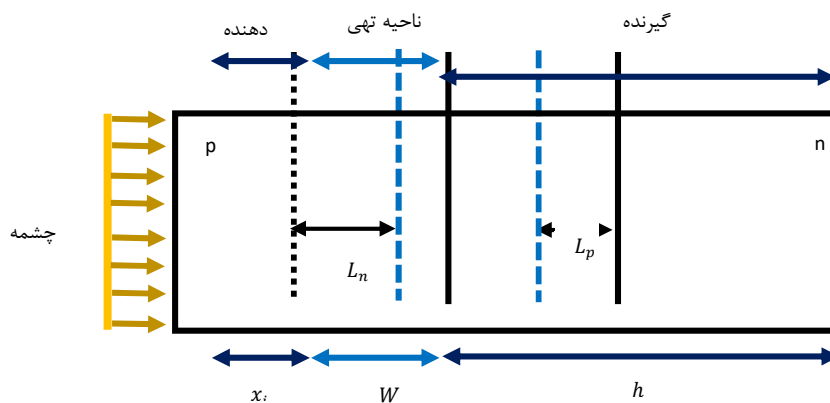




شکل ۱ طیف انرژی بتای گسیل شده از چشمه ^{14}C .

۳.۲ محاسبه پارامترهای مربوط به عملکرد باتری هسته‌ای بتاولتائیک

نمایی از ساختار باتری هسته‌ای بتاولتائیک بر پایه اتصال p-n در شکل (۲) نشان داده شده است.



شکل ۲ نمایی از باتری بتاولتائیک با اتصال p-n.

در این شکل x_i عمق اتصال، h ضخامت لایه پایه (بستر)، L_n طول پخش الکترون‌ها در ناحیه نیمه- رسانای نوع p، و L_p طول پخش حفره‌ها در ناحیه نیمه‌رسانای نوع n می‌باشد. در این ساختار، ناحیه



نوع p به دلیل طول پخش بیشتر الکترون‌ها به عنوان ناحیه گسیلنده در نظر گرفته شده است. زیرا در این صورت الکترون-حفره‌ها در خارج ناحیه تهی نیز جمع آوری خواهند شد. طول پخش حامل‌های بار بر اساس رابطه زیر بدست می‌آید:

$$L_n = \sqrt{\frac{kT}{q} \frac{9400}{1 + \left(\frac{N_a}{1.7}\right)^{0.5}} \left(\frac{1.3 \times 10^9}{N_a}\right)^{0.9}} \quad (1)$$

$$L_p = \sqrt{\frac{kT}{q} \frac{1}{2.5 \times 10^{-3} + 4 \times 10^{-11} \times N_d} \left(\frac{4 \times 10^9}{N_d}\right)^{0.92}} \quad (2)$$

که در آن، q بار الکترون، kk ثابت بولتزمن، T دما بر حسب کلوین (در این مطالعه ۳۰۰ درجه کلوین)، N_a چگالی اتم‌های پذیرنده و N_d چگالی اتم‌های دهنده بر حسب $\frac{1}{cm^3}$ است. پهنای ناحیه تهی نیز از رابطه زیر قابل محاسبه است:

$$W = \sqrt{\frac{kT}{q} \ln \left(\frac{N_a N_d}{n_i^2} \right) \frac{r \epsilon_r \epsilon_0}{q} \left(\frac{N_a + N_d}{N_a N_d} \right)} \quad (3)$$

که در این رابطه، ϵ_r ثابت دی الکتریک نیمه رسانا، ϵ_0 ثابت دی الکتریک خلا و n_i چگالی حامل‌های ذاتی است.

در این نوع ساختار باتری بتاولتائیک، چگالی جریان القایی در لایه گسیلنده (J_E)، در بستر (J_B) و ناحیه تهی (J_D) به صورت زیر بیان می‌شوند:

$$J_E = \frac{q}{E_{ehp}} \frac{G \cdot L_n}{\alpha' L_n^{r-1}} \left[\frac{\frac{S_n L_n}{D_n} + \alpha L_n e^{-\alpha x_j} \left(\frac{S_n L_n}{D_n} \cosh \left(\frac{x_j}{L_n} \right) + \sinh \left(\frac{x_j}{L_n} \right) \right)}{\frac{S_n L_n}{D_n} \sinh \left(\frac{x_j}{L_n} \right) + \cosh \left(\frac{x_j}{L_n} \right)} - \alpha L_n e^{-\alpha x_j} \right] \quad (4)$$

$$J_B = \frac{q}{E_{ehp}} \frac{G \cdot L_p}{\alpha' L_p^{r-1}} e^{-\alpha(x_j+W)} \left[\alpha L_p - \frac{\frac{S_p L_p}{D_p} \left(\cosh \left(\frac{h}{L_p} \right) - e^{-\alpha h} \right) + \sinh \left(\frac{h}{L_p} \right) + \alpha L_p e^{-\alpha h}}{\frac{S_p L_p}{D_p} \sinh \left(\frac{h}{L_p} \right) + \cosh \left(\frac{h}{L_p} \right)} \right] \quad (5)$$

$$J_D = \frac{G_0}{\alpha} e^{-\alpha x_j} (1 - e^{-\alpha W}) \frac{q}{E_{ehp}} \quad (6)$$

که در آن، S سرعت باز ترکیب سطحی حامل‌های بار می‌باشد. E_{ehp} میانگین انرژی یونش در نیمه‌رسانا است که با توجه به انرژی شکاف E_g از رابطه $E_{ehp} = 2/8 E_g + 0/5 eV$ بدست می‌آید.

آهنگ ذخیره انرژی بتا با افزایش عمق نیمه‌رسانا به صورت نمایی کاهش می‌یابد و می‌توان رابطه $\frac{dE}{dx} = G \cdot e^{-\alpha x}$ را بر آن قرار داد. در این رابطه، α عمق نفوذ ذرات بتا در نیمه‌رسانا و ضریب

جذب می‌باشد. برای بدست آوردن ضریب G مقدار انرژی ذخیره شده ناشی از گسیل بتا در نیمه‌رسانا با استفاده از مش تالی نوع ۳ در سلول‌هایی به ضخامت ۱ میکرومتر محاسبه شده و سپس منحنی نمایی فیت شده و ضریب G و α محاسبه شده است. در نهایت چگالی جریان مدار کوتاه از مجموع این سه چگالی جریان بدست می‌آید:

$$J_{SC} = J_E + J_B + J_D \quad (7)$$

با توجه به اینکه آهنگ ذخیره انرژی در نیمه‌رسانا به صورت نمایی با ضخامت ماده کاهش می‌یابد، هرچه ناحیه تهی نزدیک به چشمه باشد زوج الکترون-حفره بیشتری در تولید جریان نقش خواهند داشت، به همین دلیل کمینه عمق اتصال یعنی ۰/۰۵ میکرومتر در محاسبات در نظر گرفته شده است. همچنین ضخامت لایه (بستر) نیز ۲۰۰ میکرومتر در نظر گرفته شده است. همچنین، ولتاژ مدار باز که وابسته به چگالی جریان مدار کوتاه و جریان نشتی (J_0) است به صورت زیر بیان می‌شود:

$$V_{OC} = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{J_{SC}}{J_0} + 1 \right) \quad (8)$$

که در آن، J_0 از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$J_0 = q \frac{n_i^r D_n}{N_a L_n} \left[\frac{D_n \sinh \left(\frac{h}{L_n} \right) + S_n \cosh \left(\frac{x_j}{L_n} \right)}{D_n \cosh \left(\frac{x_j}{L_n} \right) + S_n \sinh \left(\frac{x_j}{L_n} \right)} \right] + q \frac{n_i^r D_p}{N_d L_p} \left[\frac{D_p \sinh \left(\frac{h}{L_p} \right) + S_p \cosh \left(\frac{h}{L_p} \right)}{D_p \cosh \left(\frac{h}{L_p} \right) + S_p \sinh \left(\frac{h}{L_p} \right)} \right] \quad (9)$$

بیشینه توان خروجی P_m نیز پارامتر مهمی برای ارزیابی عملکرد باتری بتا ولتائیک می‌باشد که تابعی از ولتاژ و چگالی جریان مدار کوتاه و فاکتور پرکننده (FF) است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$P_m = FF \times V_{OC} \times J_{SC} \quad (10)$$

همچنین، فاکتور پرکننده به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$FF = \frac{\frac{q}{kT} V_{OC} - \ln \left(\frac{q}{kT} V_{OC} + 0.72 \right)}{\frac{q}{kT} V_{OC} + 1} \quad (11)$$

پارامترهای مربوط به نیمه‌رساناهای متفاوت بکار رفته در محاسبات، در جدول (۱) آمده است.



جدول ۱ ویژگی‌های نیمه‌رساناهای متفاوت بررسی شده در این مطالعه.

S(cm/s)	$\alpha(\frac{1}{cm})$	G.($\mu W. \mu m^{-1}. cm^{-1}$)	ϵ_r	$n_i(\frac{1}{cm^3})$	$E_g(eV)$	
$1,00 \times 10^7$ [۲۳]	10^4 $0,16 \times$	۱۹,۵۰	۱۳,۱ [۲۳]	$2,25 \times 10^6$ [۲۳]	۱,۴۲ [۲۳]	GaAs
$1,00 \times 10^4$ [۳۰]	10^4 $0,19 \times$	۲۳,۳۹	۸,۹ [۲۹]	$3,26 \times 10^{-10}$ [۲۸]	۳,۳۹ [۲۷]	GaN
$1,00 \times 10^6$ [۳۴]	10^4 $0,08 \times$	۱۲,۳۶	۹,۸ [۳۳]	$8,20 \times 10^{-9}$ [۳۲]	۳,۲۳ [۳۱]	SiC
$1,00 \times 10^3$ [۳۸]	10^4 $0,08 \times$	۱۲,۸۲	۵,۶ [۳۷]	$1,00 \times 10^{-27}$ [۳۶]	۵,۷۸ [۳۵]	Diamond

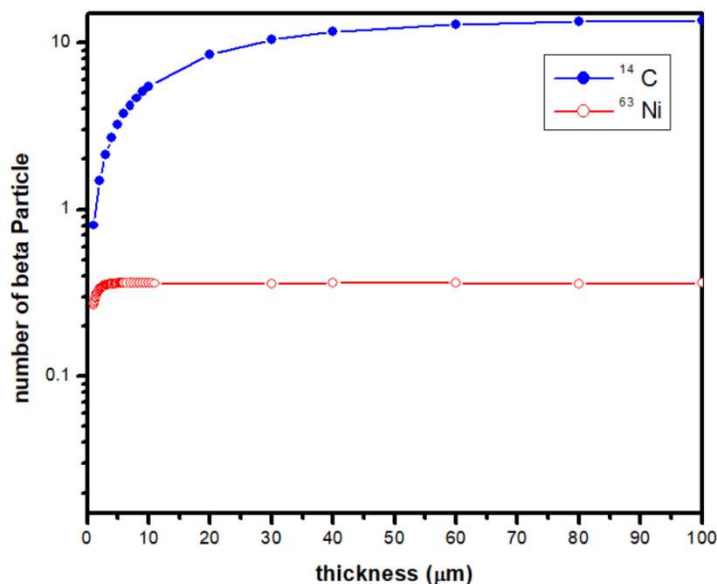
۳. نتایج و بحث

۱.۳ ضخامت اشباع چشمه بتازای ^{14}C

برای طراحی بهینه یک باتری بتاولتائیک لازم است مقدار بهینه‌ای از چشمه بتازا در ساخت باتری به کار گرفته شود. برای تعیین ضخامت بهینه چشمه ^{14}C ، تعداد ذرات بتای خروجی پس از ضخامت‌های مختلف چشمه ^{14}C در شکل (۳) رسم شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش ضخامت چشمه رادیوایزوتوپی ابتدا تعداد ذرات خروجی از ماده چشمه افزایش می‌یابد، اما پس از ضخامتی معین به دلیل اثر خودجذبی، روند افزایش شار ذرات خروجی متوقف شده و تعداد ذرات خروجی به اشباع می‌رسد. به صورتی که افزایش بیشتر ضخامت چشمه، موجب افزایش توان خروجی و بازده باتری نخواهد شد. با توجه به شکل (۳)، ضخامت ۳۰ میکرومتر از چشمه ^{14}C ، که در آن تعداد ذرات خروجی به ۸۰٪ مقدار اشباع رسیده است، به عنوان ضخامت اشباع در نظر گرفته شده است. همچنین برای اطمینان از درستی محاسبات انجام شده، ذرات بتا پس از ضخامت‌های مختلف چشمه ^{63}Ni نیز محاسبه و رسم شده است. با توجه به نتایج بدست آمده ملاحظه می‌شود که پس از ضخامت حدود ۳ میکرومتر شار بتای مربوط به چشمه ^{63}Ni به مقدار اشباع خود می‌رسد، که این مقدار در هماهنگی با مقدار گزارش شده توسط دیگر پژوهشگران است [۲۳].

لازم به یادآوری است که در ادامه‌ی شبیه‌سازی‌ها و برای محاسبه توزیع عمقی انرژی ذخیره شده ناشی از بتا در نیمه‌رساناهای متفاوت، چشمه ^{14}C با ضخامت اشباع ۳۰ میکرومتر در برنامه‌های ورودی MCNPX قرار داده شده است.



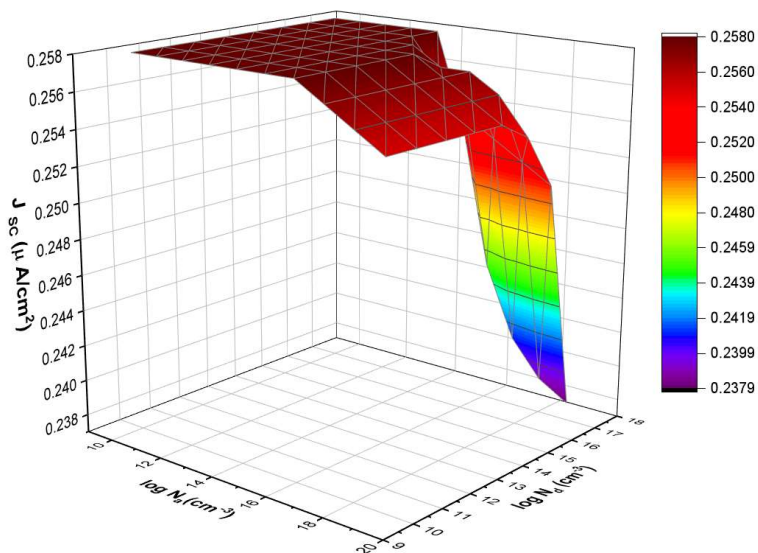


شکل ۳ شار بتای خروجی بر حسب ضخامت‌های مختلف چشمه ^{۱۴}C و ^{۶۳}Ni.

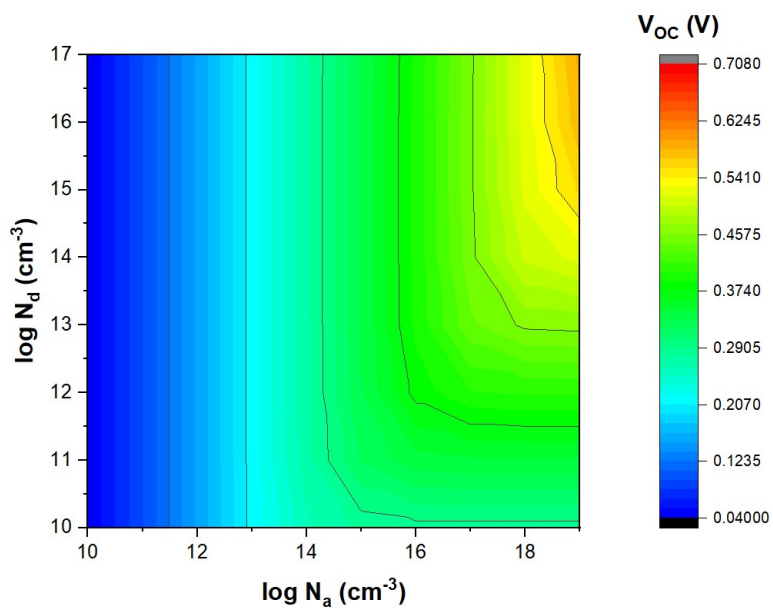
۲.۳ اعتبارسنجی محاسبات باتری بر پایه اتصال p-n و چشمه ^{۶۳}Ni

برای اعتبارسنجی محاسبات و شبیه‌سازی‌های انجام شده، ابتدا عملکرد باتری بتاولتائیک با نیمه‌رسانای GaAs و چشمه ^{۶۳}Ni بررسی شده و با مقادیر گزارش شده توسط دیگران مقایسه شده است. در شکل (۴)، چگالی جریان مدار کوتاه برای این باتری بر حسب چگالی اتم‌های ناخالصی N_d و N_a رسم شده است. ملاحظه می‌شود که چگالی جریان مدار کوتاه با کاهش چگالی اتم‌های ناخالصی افزایش می‌یابد. به صورت کلی، چگالی کمتر ناخالصی‌ها موجب افزایش پهنای ناحیه تهی شده و طول پخش حامل‌های بار افزایش می‌یابد که موجب بهبود بازده جمع‌آوری الکترون-حفره‌ها خواهد شد. زمانی که N_a کمتر از 10^{14} cm^{-3} یا N_d کمتر از 10^{16} cm^{-3} باشد، مقدار چگالی جریان مدار کوتاه به $0.258 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ نزدیک و به اشباع می‌رسد.

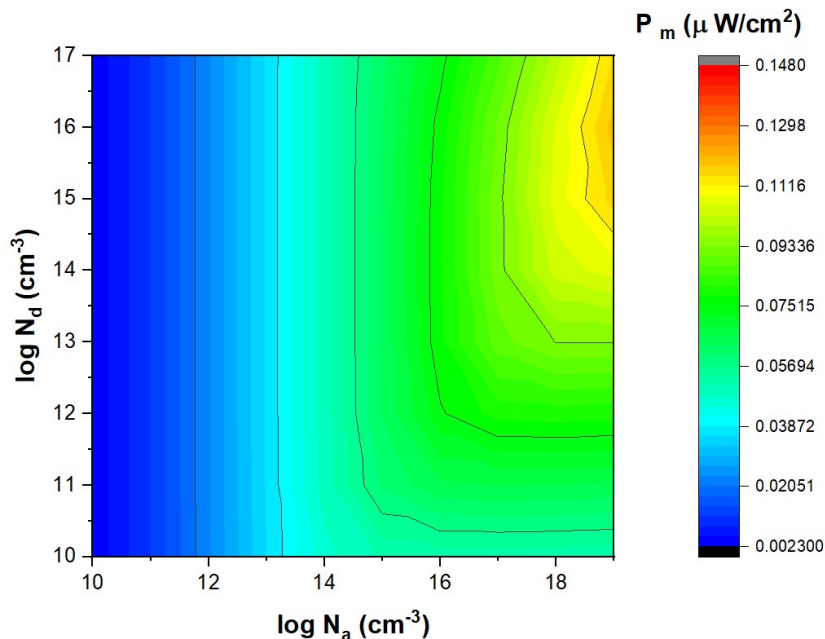




شکل ۴ چگالی جریان مدار کوتاه در باتری با نیمه رسانای GaAs و چشمه ^{63}Ni بر حسب N_d و N_a .



شکل ۵ ولتاژ مدار باز در باتری با نیمه رسانای GaAs و چشمه ^{63}Ni بر حسب N_d و N_a .



شکل ۶ چگالی توان خروجی باتری با نیمه‌رسانای GaAs با چشمه ^{63}Ni بر حسب N_d و N_a .

همچنین مقدار ولتاژ مدار باز که توسط مقادیر J_{SC} و J_0 مشخص می‌شود، با افزایش ناخالصی کاهش می‌یابد. اما بر اساس معادله (۸) مقدار J_0 با شدت بیشتری کاهش می‌یابد. به صورتی که محاسبات نشان می‌دهند، اگر $N_d = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ باشد و مقدار N_a از 10^{12} cm^{-3} تا 10^{18} cm^{-3} افزایش یابد، مقدار J_0 از $6.71 \times 10^{-6} \text{ μA/cm}^2$ تا $4.2 \times 10^{-10} \text{ μA/cm}^2$ کاهش می‌یابد. در حالی که اگر $N_a = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ باشد، با افزایش میزان N_d از 10^{12} cm^{-3} تا 10^{18} cm^{-3} ، مقدار J_0 از $6.72 \times 10^{-6} \text{ μA/cm}^2$ تا $6.71 \times 10^{-6} \text{ μA/cm}^2$ کاهش می‌یابد. به بیان دیگر، مقدار J_0 حساسیت بیشتری به تغییرات N_a دارد. بنابراین، همان‌طور که در شکل (۵) نشان داده شده، بیشینه ولتاژ مدار باز $5.88 \times 10^{-1} \text{ V}$ زمانی مشاهده می‌شود که نیمه‌رسانای نوع p چگالی N_a برابر با 10^{19} cm^{-3} داشته باشد.

در شکل (۶)، نتایج چگالی توان خروجی بر حسب چگالی اتم‌های ناخالصی رسم شده است. ملاحظه می‌شود که هرچه چگالی ناحیه نوع p بیشتر باشد، چگالی توان خروجی نیز افزایش می‌یابد. بر اساس گزارشات منتشر شده، برای آسیب نرسیدن به GaAs، چگالی نباید بیشتر از 10^{18} cm^{-3} باشد.



بنابراین اگر N_a برابر با 10^{18} cm^{-3} و N_d نیز برابر با 10^{15} cm^{-3} باشد، مقدار چگالی توان خروجی $1,07 \mu\text{W}/\text{cm}^2$ بدست می‌آید. در این حالت مقادیر V_{oc} ، J_{sc} و FF به ترتیب برابر با $0,517 \text{ V}$ ، $0,562 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ و $80,8\%$ خواهد بود. برای $N_d = N_a = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ مقادیر محاسبه شده در این مطالعه و گزارش Zheng در جدول (۲) مقایسه شده‌اند [۲۳]. بر اساس نتایج بدست آمده توافق خوبی بین محاسبات این مطالعه و منبع بیان شده وجود دارد.

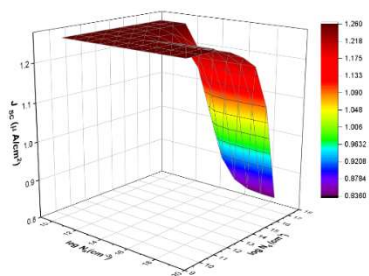
جدول ۲ مقایسه مقادیر جریان مدار کوتاه، ولتاژ مدار باز، توان خروجی و فاکتور پرکننده برای باتری بر پایه اتصال p-n با نیمه‌رسانای GaAs و چشمه ^{63}Ni .

FF (%)	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\mu\text{A}/\text{cm}^2$)	P_m ($\mu\text{W}/\text{cm}^2$)	
۸۰٫۹	۰٫۵۱۹	۰٫۲۵۵	۰٫۱۰۷	این مطالعه
۸۳٫۳	۰٫۶۳۸	۰٫۲۵۴	۰٫۱۳۵	Zheng et al.
۲٫۹	۱۸٫۶	۰٫۴	۲۰٫۷	تفاوت نسبی (%)

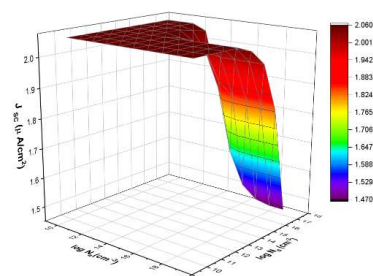
۳.۳ عملکرد باتری هسته‌ای با چشمه ^{14}C

۱.۳.۳ اثر نیمه‌رساناهای مختلف بر چگالی جریان مدار کوتاه

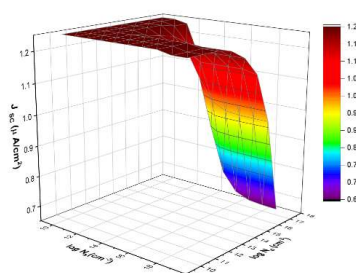
در شکل (۷) چگالی جریان مدار کوتاه برای نیمه‌رساناهای مختلف GaN، GaAs، SiC و الماس رسم شده است. مشاهده می‌شود با قرار دادن نیمه‌رسانای GaAs و GaN زمانی که N_a کمتر از 10^{14} cm^{-3} یا N_d کمتر از 10^{16} cm^{-3} باشد، مقدار چگالی جریان مدار کوتاه به ترتیب به مقدار $1,260 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ و $2,060 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ نزدیک و به اشباع می‌رسد. همچنین ملاحظه می‌گردد که اگر N_d و N_a کمتر از 10^{15} cm^{-3} باشد مقدار چگالی جریان مدار کوتاه در باتری با نیمه‌رسانای SiC و الماس به ترتیب به مقدار $1,250 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ و $2,55 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ نزدیک و به اشباع می‌رسد.



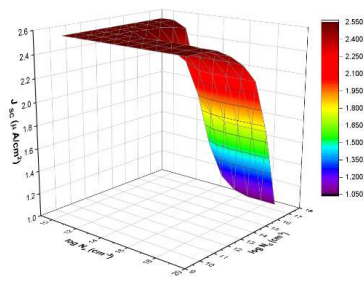
GaAs



GaN



SiC



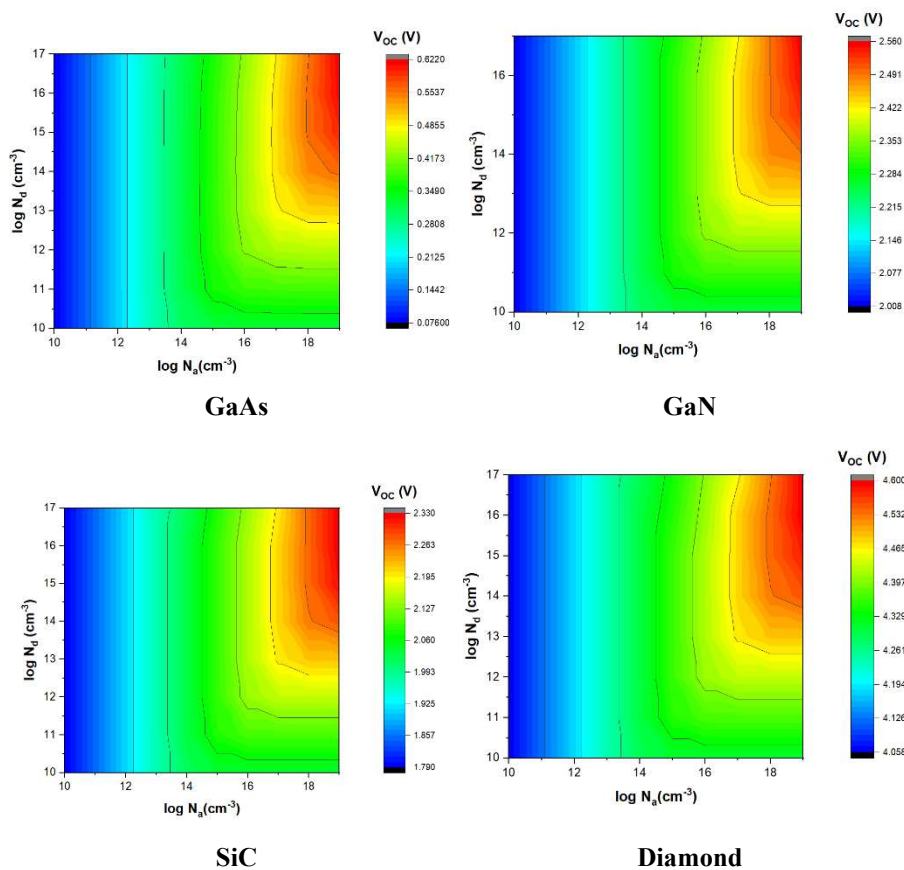
Diamond

شکل ۷ چگالی جریان مدار کوتاه در باتری با نیمه رساناهای مختلف بر حسب N_a و N_d .

۲.۳.۳ اثر نیمه رساناهای مختلف بر ولتاژ مدار باز

در شکل (۸) مقدار ولتاژ مدار باز برای نیمه رساناهای مختلف GaAs، GaN، SiC و الماس رسم شده است. با توجه به شکل مشاهده می شود که برای $N_d > 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ و $N_a > 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ولتاژ مدار باز مقدار بیشتری دارد. به صورتی که برای نیمه رسانای GaAs و GaN به ترتیب به بیشینه مقدار 0.622 V و 2.560 V رسیده است. همچنین ملاحظه می شود ولتاژ مدار باز با قرار دادن نیمه رسانای SiC در $N_d > 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ و $N_a > 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ مقدار بیشتری دارد و به بیشینه مقدار 2.330 V رسیده است. از طرفی مقدار این کمیت برای نیمه رسانای الماس در $N_d > 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ و $N_a > 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ به بیشینه مقدار 4.600 V رسیده است.



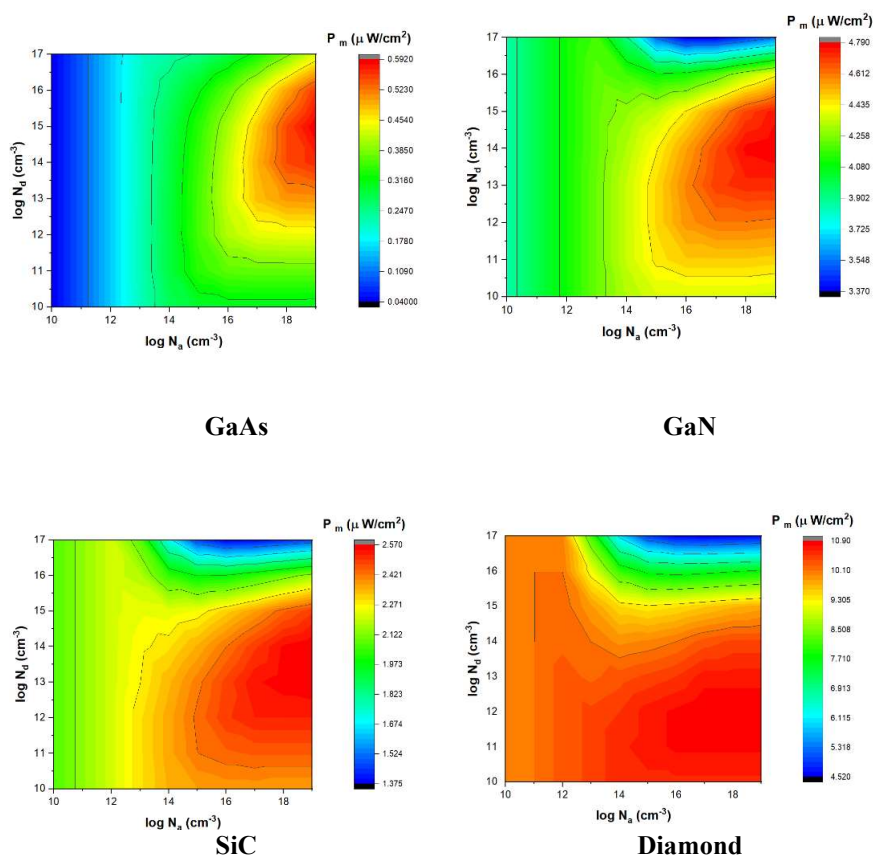


شکل ۸ ولتاژ مدار باز در باتری با نیمه رساناهای مختلف بر حسب N_d و N_a .

۳.۳.۳ اثر نیمه رساناهای مختلف بر توان خروجی باتری

در شکل (۹) مقدار چگالی توان خروجی باتری برای نیمه رساناهای مختلف GaAs, GaN, SiC و الماس رسم شده است. بر اساس نتایج رسم شده در این شکل مشاهده می شود که برای نیمه رسانای GaAs، در صورتی که $N_a > 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ و $N_d > 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ باشد، توان خروجی باتری دارای بیشینه مقدار $0,592 \mu\text{W}/\text{cm}^2$ می باشد. همچنین، توان خروجی برای نیمه رسانای GaN نیز برای $N_a > 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ و $N_d > 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ به بیشینه مقدار $4,790 \mu\text{W}/\text{cm}^2$ رسیده است. توان خروجی با قرار دادن نیمه رسانای SiC نیز برای $10^{14} < N_a < 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ و $N_d < 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ به مقدار اشباع $2,570 \mu\text{W}/\text{cm}^2$ رسیده است. همچنین بر اساس شکل

ملاحظه می‌گردد که توان خروجی باتری با نیمه‌رسانای الماس نیز برای $N_d < 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ دارای بیشینه مقدار $10/90 \mu\text{W/cm}^2$ است.



شکل ۹ توان خروجی باتری با نیمه‌رساناهای مختلف بر حسب N_d و N_a .

۴. نتیجه‌گیری

در این مطالعه، عملکرد باتری بتاولتائیک با چشمه رادیوایزوتوپی ^{14}C در ساختار اتصال p-n مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان دادند عملکرد باتری به نوع نیمه‌رسانا و مقدار چگالی ناخالصی‌های افزوده شده به شدت وابسته است. به صورتی که با توجه به نوع کاربرد باتری و توان خروجی مورد نیاز می‌توان نیمه‌رسانای مناسب را برای ساخت باتری با چشمه رادیوایزوتوپی ^{14}C انتخاب نمود. بر اساس نتایج بدست آمده در باتری با نیمه‌رسانای GaAs، در $N_a = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$



و $N_d = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ مقادیر J_0 ، J_{sc} ، V_{oc} ، FF و توان خروجی به ترتیب برابر با $1.2 \mu\text{A/cm}^2$ ، $5.19 \times 10^{-12} \mu\text{A/cm}^2$ ، 0.557 V ، 81.8% و $0.547 \mu\text{W/cm}^2$ است.

همچنین، اگر در این نوع باتری GaN به عنوان نیمه‌رسانا قرار داده شود، در $N_a = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ و $N_d = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ مقادیر J_0 ، J_{sc} ، V_{oc} ، FF و توان خروجی به ترتیب برابر با $1.99 \mu\text{A/cm}^2$ ، $2.66 \times 10^{-44} \mu\text{A/cm}^2$ ، 2.49 V ، 94.3% و $4.77 \mu\text{W/cm}^2$ است.

با استفاده از نیمه‌رسانای SiC، در $N_a = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ و $N_d = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ مقادیر J_0 ، J_{sc} ، V_{oc} ، FF و توان خروجی به ترتیب برابر با $1.15 \mu\text{A/cm}^2$ ، $6.9 \times 10^{-41} \mu\text{A/cm}^2$ ، 2.27 V ، 93.8% و $2.44 \mu\text{W/cm}^2$ است.

در نهایت اگر الماس به عنوان نیمه‌رسانا در ساخت باتری بکار برده شود، در $N_a = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ و $N_d = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ مقادیر J_0 ، J_{sc} ، V_{oc} و FF به ترتیب برابر با $2.21 \mu\text{A/cm}^2$ ، $1.03 \times 10^{-78} \mu\text{A/cm}^2$ ، 4.54 V ، 96.5% است. در این حالت بیشترین توان خروجی به میزان $9.68 \mu\text{W/cm}^2$ در بین نیمه‌رساناهای مورد بررسی قابل دستیابی است.

۵. تقدیر و تشکر

از حمایت‌های معاونت پژوهشی دانشگاه صنعتی سهند تبریز قدردانی و تشکر می‌گردد.

منابع

- [1] Prelas Mark A, Weaver Charles L, Watermann L Matthew, Lukosi Eric D, Schott Robert J, Wisniewski Denis A, "A review of nuclear batteries", *Progress in Nuclear Energy* **75**, 117-148, 2014. <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2014.04.007>.
- [2] Krasnov A A, Starkov V V, Legotin S A, Rabinovich O I, Didenko S I, Murashev V N, Cheverikin V V, Yakimov E B, Fedulova N A, Rogozev B I, Laryushkin A S, "Improvement of Si-betavoltaic batteries technology", *Advanced Materials Research* **1070**, 585-588, 2015. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.1070-1072.585>.
- [3] Da-Yong Q, Wei-Zheng Y, Peng G, Xian-Wang Y, Bo Z, Lin Z, Hui G, Hong-Jian Z, "Demonstration of a 4H SiC Betavoltaic Nuclear Battery Based on Schottky Barrier Diode", *Chinese Physics Letters* **25**, 3799-3800, 2008. <https://doi.org/10.1088/0256-307X/25/10/076>.
- [4] Xi S, Li H, Li L, Wu K, Huang G, Wang Z, Zhang Y, Zhou C, "Research on the Performance of Nuclear Battery with SiC-Schottky and GaN-PIN Structure", *Nuclear Technology* **208**, 1-13, 2021. <https://doi.org/10.1080/00295450.2021.1982361>.
- [5] Jahangiri MH, Tavakoli-Anbaran H, "Optimization and Minimization of Dimensions of Direct Charging Nuclear Battery Based on 90 Sr Radioactive Source for Use in MEMS", *Arabian Journal for Science and Engineering* **46**, 5921-5932, 2021. <https://doi.org/10.1007/s13369-020-05068-3>.



- [6] San H, Yao S, Wang X, Cheng Z, Chen X, "Design and simulation of GaN based Schottky betavoltaic nuclear micro-battery", *Applied Radiation and Isotopes* **80**, 17-22, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2013.05.010>.
- [7] Kovalev IV, Zelenkov PV, Brezitskaya VV, Lelekov AT, Karaseva MV, "On the analysis of semiconductor materials suitable for the development of a radiation-stimulated power supply based on the nickel-63 radio isotope", *Journal of Physics: Conference Series*, 2019. IOP Publishing. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1399/2/022040>.
- [8] Chandrashekhar MVS, Christopher I Thomas, Li Hui, Spencer M G, Lal Amit, "Demonstration of a 4H SiC betavoltaic cell", *Applied Physics Letters* **88**, 033506, 2006. <https://doi.org/10.1063/1.2166699>.
- [9] Wang Y, Lu J, Zheng R, Li X, Liu Y, Zhang X, Zhang Y, Chen Z, "Theoretical study of a high-efficiency GaP-Si heterojunction betavoltaic cell compared with metal-Si Schottky barrier betavoltaic cell", *AIP Advances* **11**, 065110, 2021. <https://doi.org/10.1063/5.0053917>.
- [10] Tsvetkova LA, Tsvetkova SL, Pustovalov AA, Verbetskiib VN, Baranovc NN, Mandrugind AA, "Radionuclides for Betavoltaic Nuclear Batteries: Micro Scale, Energy-Intensive Batteries with Long-Term Service Life", *Radiokhimiya* **64**, 281-288, 2022. <https://doi.org/10.1134/S1066362222030134>.
- [11] Akimchenko A, Chepurinov V, Dolgopolov M, Gurskaya A, Kuznetsov O, Mashnin A, Radenko V, Radenko A, Surnin O, Zanin G, "Betavoltaic device in por-SiC/Si C-Nuclear Energy Converter", *EPJ Web of Conferences* **158**, 06004, 2017. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201715806004>.
- [12] Kumar Katiyar N, Goel S, "Recent progress and perspective on batteries made from nuclear waste", *Nuclear Science and Techniques* **34**, 1-8, 2023. <https://doi.org/10.1007/s41365-023-01189-0>.
- [13] Petrovskaya AS, Surov SV, Kadkov AY, Tsyganov AB, "New Thermo-Plasma Technology for Selective 14C Isotope Extraction from Irradiated Reactor Graphite", *AIP Conference Proceedings* **2179**, 020020, 2019. <https://doi.org/10.1063/1.5135493>.
- [14] Bower KE, Barbanel YA, Shreter YG, Bohnert GW, Polymers, "Phosphors and Voltaics for Radioisotope Microbatteries", *CRC Press, Boca Raton* **352**, 27, 2002.
- [15] Wang H, Tang X B, Liu Y P, Xu Z H, Liu M, Chen D, "Temperature effect on betavoltaic microbatteries based on Si and GaAs under 63Ni and 147Pm irradiation", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **359**, 36-43, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2015.07.046>.
- [16] Gui G, Zhang K, Blanchard JP, Ma ZQ, "Prediction of 4H-SiC betavoltaic microbattery characteristics based on practical Ni-63 sources", *Applied Radiation and Isotopes* **107**, 272-7, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2015.11.001>.
- [17] Cheng ZJ, San HS, Li YF, Chen XY, "The design optimization for GaN-based betavoltaic microbattery", *IEEE 5th Int. Conf. on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems NEMS*, 582-6, 2010. <https://doi.org/10.1109/NEMS.2010.5592469>.
- [18] Cheng ZJ, San HS, Chen XY, Liu B, Feng ZH, "Demonstration of a high open-circuit voltage GaN betavoltaic microbattery", *Chinese Physics Letters* **28**, 078401, 2011. <https://doi.org/10.1088/0256-307X/28/7/078401>.
- [19] Lu M, Zhang GG, Fu K, Yu GH, Su D, Hu JF, "Gallium nitride Schottky betavoltaic nuclear batteries", *Energy Convers Manage* **52**, 1955-8, 2011. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2010.10.048>.
- [20] Liu YM, Lu JB, Li XY, Xu X, He R, Zheng RZ, Wei GD, "Theoretical prediction of diamond betavoltaic batteries performance using 63Ni", *Chinese Physics Letters* **35**, 072301, 2018. <https://doi.org/10.1088/0256-307X/35/7/072301>.
- [21] Liu YP, Tang XB, Xu ZH, Hong L, Wang H, Liu M, Chen D, "Influences of planar source thickness on betavoltaics with different semiconductors", *Radioanalytical and Nuclear chemistry* **304**, 517-25, 2015. <https://doi.org/10.1007/s10967-014-3879-2>.



- [22] Prelas MA, Weaver CL, Watermann ML, Lukosi ED, Schott RJ, Wisniewski DA, "A review of nuclear batteries", *Progress in Nuclear Energy* **75**, 117-48, 2014. <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2014.04.007>.
- [23] Zheng R, Lu J, Li X, Wang Y, Liu Y, Xu X, Chen Z, Zhang X, "Optimization design of GaAs-based betavoltaic batteries with p-n junction and Schottky barrier structures", *Journal of Physics D: Applied Physics* **55**, 1-11, 2022. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/ac526a>.
- [24] Zhang L, Cheng H, Hu X, Xu X, "Model and Optimal Design of 147Pm SiC-based Betavoltaic Cell", *Superlattices and Microstructures* **123**, 60-70, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2018.01.007>.
- [25] Pelowitz DB, MCNPXTM user's manual. version 2.6.0. Los Alamos National Laboratory Report LA-CP-07-1473. 2008.
- [26] Hao L, Yebing L, Rui H, Yuqing Y, Guanquan W, Zhengkun Z, Shunzhong L, "Simulations about self-absorption of tritium in titanium tritide and the energy deposition in a silicon Schottky barrier diode", *Applied Radiation and Isotopes* **70**, 2559-2563, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2012.07.012>.
- [27] Dong L, Yadav SK, Ramprasad R, Alpay SP, "Band gap tuning in GaN through equibiaxial in-plane strains", *Applied Physics Letters* **96**, 202106, 2010. <https://doi.org/10.1063/1.3431290>.
- [28] Gachovska TK, Hudgins J L, "SiC and GaN Power Semiconductor Devices", *Power Electronics Handbook, Fourth Edition*, 95-155, 2018.
- [29] Bougrov V, Levinshtein ME, Rumyantsev SL, Zubrilov A, "Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe", Eds. Levinshtein ME, Rumyantsev SL, Shur MS, *John Wiley & Sons, Inc.*, New York, 1-30, 2001.
- [30] Scajev P, Jarasiunas K, Okur S, Ozgur U Morkoc H, "Carrier dynamics in bulk GaN", *Journal of Applied Physics* **111**, 023702, 2012. <https://doi.org/10.1063/1.3673851>.
- [31] Bouzid F, Saeed MA, Carotenuto R, Pezzimenti F, "Design considerations on 4H-SiC-based p-n junction betavoltaic cells", *Applied Physics A* **128**, 2022. <https://doi.org/10.1007/s00339-022-05374-7>.
- [32] Harris GL, "Properties of SiC EMIS Data reviews Series, no. 13", *INSPEC, IEE, UK*, 1995.
- [33] Patrick L, Choyke WJ, "Static Dielectric Constant of SiC", *Physics Review B* **2**, 2255-2256, 1970. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.2.2255>.
- [34] Gulbinas K, Grivickas V, Mahabadi HP, Usman M, Hallen A, "Surface Recombination Investigation in Thin 4H-SiC Layers", *Materials Science* **17**, 119-124, 2011. <https://doi.org/10.5755/j01.ms.17.2.479>.
- [35] Kittel C, "Introduction to Solid State Physics", 8th Edition, *Wiley*, 2004.
- [36] Lawrence S, Don R K, "Diamond: Electronic Properties and Applications", *Springer New York, NY*, 1995.
- [37] Spear KE, Dismukes JP, "Synthetic Diamond: Emerging CVD Science and Technology", *John Wiley & Sons*, 1994.
- [38] Grivickas P, Scajev P, Kazuchits N, Mazanik A, Korolik O, Voss LF, Conway AM, Hall DL, Bora M, Subacius L, Bikbajevs V, Grivickas V, "Carrier recombination parameters in diamond after surface boron implantation and annealing", *Applied Physics* **127**, 245707, 2020. <https://doi.org/10.1063/5.0004881>.



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



بررسی رفتارهای خطی و غیرخطی نانوذرات اکسید نقره در محلول اکسید گرافین^۱

سعید میمنت‌آبادی^۲، حمید نجاری^{۳*} و رضا رسولی^۴

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۳/۲۴

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۰۶/۱۸

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۷/۱۰

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال سیزدهم، پیاپی ۳۵، زمستان ۱۴۰۲

صص ۱۱۲ - ۱۲۸

چکیده:

در این پژوهش ویژگی‌های اپتیکی خطی و غیرخطی نانو ذرات اکسید نقره در محیط اکسید گرافین بررسی شده است. ابتدا اکسید گرافین به روش بهبود یافته هامرز تهیه شده و سپس سنتز نانو ذرات اکسید نقره در محیط اکسید گرافین رقیق شده با آب دوبار یونیده، به روش قوس الکتریکی انجام می‌شود. قوس الکتریکی در ولتاژهای ۲۰۰، ۳۰۰، ۴۰۰ و ۵۰۰ ولت با تب‌های سه ثانیه‌ای به مدت یک دقیقه اعمال شده است. نتایج طیف سنجی مرئی فرابنفش نشان می‌دهد که محلول بدست آمده، شامل نانوذرات اکسید گرافین و اکسید نقره است. سپس برای مشخص نمودن جذب خطی از لیزر ۵۳۲ نانومتر با بیشینه توان ۳۰۰ میلی وات و برای مشخص نمودن ویژگی‌های غیرخطی نمونه‌ها از روش روبش استفاده شده است. پس از آنالیز نمودارها ضرایب شکست و جذب غیرخطی هر نمونه محاسبه شده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش ولتاژ، غلظت نانوذرات تولید شده در نمونه‌ها بیشتر شده و ضریب جذب خطی متناظر با آن افزایش یافته است. کمترین مقدار جذب خطی برابر $(1/31 \text{ cm}^{-1})$ است. همچنین، جذب غیرخطی برای تمام نمونه‌ها منفی و کمترین مقدار آن برابر با (10^{-3} cm/W) است. افزون بر این، ضریب شکست غیرخطی برای تمام نمونه‌ها منفی بوده و بیشترین مقدار آن برابر با $(10^{-14} \text{ cm}^2 / W)$ است. ضرایب ترموپتیکی هر یک از نمونه‌ها نیز بدست آمده است.

واژگان کلیدی: قوس الکتریکی، اکسید گرافین، نانوذرات اکسید نقره، ضرایب غیرخطی شکست، روش هامرز اصلاح شده.

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2023.44095.1332

^۲ دانش‌آموخته کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشگاه زنجان و دبیر آموزش و پرورش شهرستان قروه. Email: s.maymanat@yahoo.com

^۳ استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران. (نویسنده مسئول). Email: nadjari@znu.ac.ir

^۴ استاد، گروه فیزیک، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران. Email: r-rasuli@znu.ac.ir



۱. مقدمه

گرافین و اکسید گرافین از ویژگی‌های منحصر به فردی برخوردار هستند و به دلیل کاربردهای فراوانی که این دو ماده در شاخه‌های مختلف علوم دارند، در سنوات اخیر مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفته‌اند. در گرافین ساختار تک لایه‌ای اتم‌های کربن به صورت شش ضلعی در یک شبکه دو بعدی لانه زنبوری قرار گرفته است که خود اساس گرافیت سه بعدی و نانولوله‌های تک بعدی را تشکیل می‌دهد [۱-۵]. از مهمترین ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی گرافین می‌توان به رسانایی الکتریکی و گرمایی زیاد، عبور دهی اپتیکی بالا [۶-۸]، ضخامت بسیار ناچیز، سختی بالا و بروز و ظهور ابررسانایی در دمای بالا [۹] اشاره کرد. از طرف دیگر اکسید گرافین دارای ویژگی‌های غیرخطی کمابیش بزرگی است که کاربرد آن را به عنوان عدسی گرمایی و محدودکننده اپتیکی ممکن می‌سازد [۱۰-۱۱]. این ماده دارای نوار سریع جذب اشباع‌پذیر است که ناشی از تغییر نوار رسانش در اثر جذب تابش فرودی است [۱۲]. در حقیقت، یکی از دلایل بروز رفتار غیرخطی وجود جذب اشباع‌پذیر است. همچنین کاربردهایی چون چند برابر سازی بسامد و قفل‌شدگی مد برای این ماده گزارش شده است [۱۳]. متأسفانه با وجود مقالات فراوانی که در مورد ویژگی‌های اکسید گرافین ارائه شده است، تعداد کمی از آن‌ها رفتار غیرخطی این ماده را مورد مطالعه قرار داده‌اند.

در میان روش‌های آزمایشگاهی موجود برای بررسی ویژگی‌های غیرخطی مواد، روش روبش محوری یکی از معروف‌ترین و راحت‌ترین روش‌ها است که می‌توان بزرگی و علامت ضریب شکست را هم زمان اندازه‌گیری نمود. این روش که به روبش Z نیز معروف است روش تک باریکه‌ای مهمی برای تعیین ضرایب شکست و جذب غیرخطی نمونه‌ها به شمار می‌رود [۱۴-۱۶]. به تازگی ویژگی‌های غیرخطی محلول اکسید گرافین با روش روبش محوری مورد مطالعه قرار گرفته است [۱۷]. افزون بر اکسید گرافین، نانو ذرات فلزی نیز دارای ویژگی‌های غیرخطی قابل اندازه‌گیری هستند. به ویژه هنگامی که این نانو ذرات در محیط‌هایی قرار گیرند که محلول‌های کلئیدی تشکیل دهند. پیش از این در یک پژوهش جداگانه بزرگی عددی ضرایب غیرخطی برای نانو ذرات نقره و طلا در محیط آب گزارش شده که در آن از روش روبش محوری برای اندازه‌گیری کمیت‌های غیرخطی استفاده شده است [۱۸]. همچنین در گزارش دیگری به بررسی اثر اندازه نانو ذرات در تابع دی‌الکتریک و مشخص نمودن اندازه آن‌ها با استفاده از طیف مرئی-فرابنفش پرداخته شده است [۱۹]. در این مقاله، با استفاده از نانو ذرات اکسید نقره که در محلول اکسید گرافین تولید می‌شوند، به بررسی ویژگی‌های غیرخطی این محلول کلئیدی با استفاده از روش روبش محوری پرداخته شده

است. در حقیقت، این پژوهش شامل دو بخش اساسی تهیه و مشخصه‌یابی نمونه‌های دارای ویژگی - های غیرخطی و بررسی رفتار غیرخطی آن‌ها در چیدمان روبش محوری است.

۲. تهیه نمونه‌ها

اکسید گرافین بکار گرفته شده در این پژوهش به روش هامرز اصلاح شده که اساس آن اکسیداسیون گرافیت تهیه شده است [۲۰-۲۱]. ابتدا ۰/۱ گرم پودر گرافیت طبیعی را وزن شد. سپس ۱۵ میلی‌لیتر اسید سولفوریک ۹۸٪ به آن افزوده و در دمای ۲۵ درجه سلسیوس به مدت ۱۵ دقیقه هم‌زده شد. سپس ۰/۳ گرم پتاسیم پرمنگنات به محلول قرار داده شده در آب و یخ افزوده شد. برای رقیق شدن محلول ۶۰ میلی‌لیتر آب دوبار یونیده به آن افزوده شد. در مرحله‌ی بعد هیدروژن پروکساید به آن افزوده می‌گردد تا پرمنگنات موجود در محلول حذف شود. این عمل سبب تغییر رنگ محلول از قهوه‌ای تیره به قهوه‌ای روشن می‌شود و همچنین گاز تولید شده به صورت کامل از محلول خارج می‌گردد. در نهایت مخلوط ناهمگن (سوسپانسیون) فیلتر شده و کیک زرد رنگ جمع‌آوری شد و سپس به منظور اسید شویی و برطرف کردن سایر مواد شیمیایی این کیک سه بار با ۵۰ میلی‌لیتر آب دوبار یونیده شسته شد. در نهایت برای جداسازی ورقه‌های گرافین از دستگاه گریزانه (سانتریفوژ) استفاده کرده و اکسید گرافین جداسازی می‌شود. در آخرین مرحله ورقه‌های اکسید گرافیت با استفاده از امواج فراصوت (اولتراسونیک) از هم جدا شده و به اکسید گرافین تبدیل گردید. برای تهیه‌ی نانوذرات نقره از روش قوس‌الکتریکی استفاده شده است [۲۲]. به این منظور دستگاه انفجار الکتریکی سیم (EEW)^۱، ساخت شرکت نانو فناوریان پارس، استفاده شد. برای تهیه محلول از اکسید گرافین با غلظت ۰/۰۲ گرم بر لیتر حل شده در آب دوبار یونیده استفاده و این محلول برای اعمال قوس‌الکتریکی و تولید نانوذرات نقره مورد استفاده قرار گرفت. پس از آن برای اعمال قوس‌الکتریکی و تولید نانوذرات نقره محلول‌های تهیه شده در دستگاه EEW قرار داده شد. نقره‌ی بکار گرفته شده در این آزمایش، سیمی به ضخامت ۰/۲ میلی‌متر است که به عنوان آند درون دستگاه و محلول قرار می‌گیرد. طول قابل تنظیمی از سیم که به عنوان تغذیه^۲، به سیستم معرفی می‌شود، در قوس‌الکتریکی مورد استفاده قرار می‌گیرد. طول تغذیه سیم نقره‌ای در نمونه‌های تهیه شده ۲/۷ cm است. همچنین ولتاژ قوس در دستگاه از ۲۰۰ تا ۵۰۰ V متغیر و قابل تنظیم است، اگرچه مدت زمان اعمال تپ برای همه ولتاژهای انتخابی یک دقیقه است. ولتاژهای استفاده شده برای اعمال قوس

^۱ Electrical Explosion of Wire

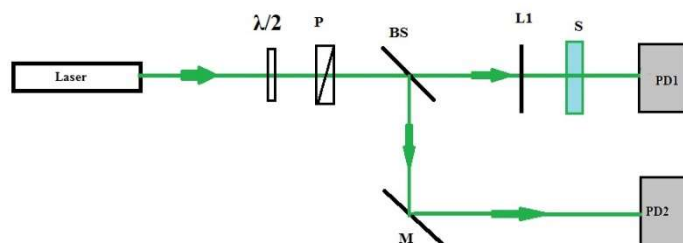
^۲ Feed



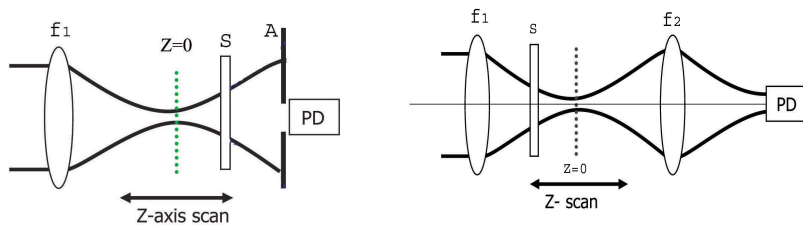
در نمونه‌های مورد نظر ما با گام ۱۰۰ ولتی در ولتاژهای ۲۰۰، ۳۰۰، ۴۰۰ و ۵۰۰ ولت انتخاب شدند. پس از تولید نانوذرات نقره، مقدار 60 mL از هر نمونه در ولتاژهای یاد شده نمونه‌برداری و روی هم رفته، 240 mL جهت انجام آزمایش جاروب Z تهیه و نگهداری می‌شوند. بلافاصله پس از آماده شدن نمونه‌ها طیف جذبی آن‌ها تهیه شد.

۳. چیدمان روبش محوری

شمای استاندارد برای اندازه‌گیری‌های روبش Z در شکل (۱) نشان داده شده است. در این روش، نمونه غیرخطی در راستای انتشار باریکه گاوسی (محور Z) حرکت داده می‌شود. به گونه‌ای که اغلب نمونه از فاصله‌های Z تا کانون یک لنز به فاصله کانونی f_1 و سپس تا فاصله Z حرکت داده می‌شود. توزیع شدت باریکه در داخل نمونه سبب تغییر ضریب شکست می‌گردد. این تغییرات به شعاع باریکه و فاصله از کانون بستگی دارد، به صورتی که $\Delta n(r, z) = n_p I(r, z)$ است و در آن n_p ضریب شکست غیرخطی است. این تغییرات در ضریب شکست سبب واگرایی یا همگرایی باریکه لیزری می‌شود که در نقاط دور (در محل آشکارساز) موجب تغییر در شدت برحسب تابعی از فاصله نمونه می‌گردد. با رسم تغییرات شدت برحسب مکان نمونه می‌توان علامت و بزرگی n_p را مشخص کرد. نمونه اغلب در ناحیه کمره باریکه حرکت داده می‌شود. در فاصله‌های به اندازه کافی دور از نمونه، روزنه که گشودگی آن روی محور قرار دارد و یک آشکارساز که تغییرات شدت را پشت روزنه ثبت می‌کند، قرار داده می‌شود. هنگامی که نمونه دور از کمره قرار دارد و شدت کم است، عبوردهی روزنه به واحد بهنجار می‌شود. به محض اینکه نمونه به کمره نزدیک می‌شود، جذب غیرخطی و شکست غیرخطی القا شده اثر قوی روی باریکه می‌گذارد و منحنی‌های عبوردهی بهنجار شده شکل مشخصه‌ای به خود می‌گیرد. خواص غیر خطی نمونه سبب بروز خود کانونی و یا خود واکانونی و در نتیجه تغییر پهنای باریکه عبوری از محیط شده و این اثر به نوبه خود عبوردهی را کم یا زیاد می‌کند. در شکل (۲) منحنی تغییرات عبوردهی بر حسب فاصله در یک آزمایش جاروب محوری نوعی نمایش داده شده است. زمانی که ضریب شکست غیرخطی محیط منفی است، یک منحنی مشخصه قلّه-دره بدست می‌آید. از طرف دیگر، زمانی که ضریب شکست غیر خطی محیط مثبت است، یک منحنی مشخصه دره-قلّه بدست می‌آید.



(الف)

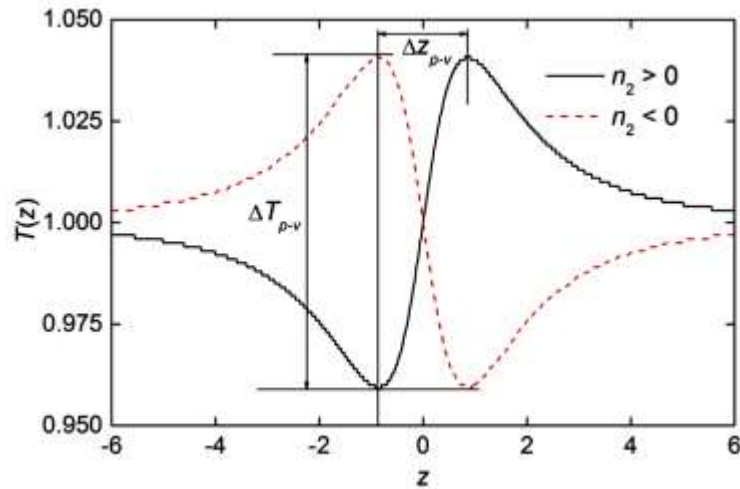


(ج)

(ب)

شکل ۱ - شمای چیدمان آزمایشگاهی برای اندازه‌گیری‌های روبش Z [۱۶] الف) عناصر اپتیکی شامل تیغه نیم موج $\lambda/2$ ، قطبشگر P، روزنه A، باریکه شکن BS، آینه M، عدسی کانونی کننده L_1 ، توان سنسور PD1، PD، PD2، نمونه S (ب) طرح در یچه بسته ج) طرح در یچه باز. f_1 عدسی اصلی، f_2 عدسی جمع آوری کننده.





شکل ۲- نحوه استخراج بزرگی ΔT_{p-v} از نمودار حاصل از داده های روبش z در نمونه های با ضریب شکست غیر خطی مثبت و منفی [۱۷]

در این پژوهش چیدمان جاروب z شامل یک ریل متصل به استپ موتور، یک آشکارساز، لیزر، عدسی همگرا با فاصله کانونی ۹ cm با ابیراهی کم، پایه و سلول (یا کویت) از جنس کوارتز استفاده شده است. لیزر نئودیموم یاگ مورد استفاده در این آزمایش یک لیزر پمپاژ دیودی حالت جامد با طول موج ۵۳۲ نانومتر و توان اسمی ۳۰۰ mW، ساخت شرکت Lasers Ultra کانادا، می باشد. آشکارساز مورد استفاده، یک آشکارساز سیلیکونی با قطر دریچه ی ۱ cm است که نور تابشی ورودی را به جریان الکتریکی تبدیل می کند. توان سنج نیز مدل 13PEM001 ساخت شرکت Melles- Griot است که از راه خروجی آنالوگ آن می توان بیشینه ی ولتاژی تا ۱ V ترا دریافت کرد. این خروجی توسط برد آردوینو به دیجیتال تبدیل شده و داده های آزمایشگاهی به رایانه هدایت می شود.

۱.۳ تنظیمات مربوط به هم محور کردن اجزای چیدمان

ابتدا باید قطعات چیدمان آزمایشگاهی در یک راستا قرار گیرند، برای این منظور لیزر را روی میز اپتیکی ثابت کرده، آنرا روشن می کنیم. سپس آشکارساز را در فاصله ی ۳۰ سانتی متری آن قرار می دهیم، به صورتی که نور لیزر وارد آن شده و توان را نشان دهد. دریچه (یا روزنه) پیش از

آشکارساز و در فاصله‌ی ۲ تا ۳ سانتی‌متری آن قرار داده می‌شود، به گونه‌ای که نور از آن عبور کرده و به آشکارساز برسد. سپس عدسی همگرا را جلوی لیزر و در فاصله‌ی ۳ سانتی‌متری آن قرار می‌دهیم. مجموعه‌ی ریل و سکوی مخصوص سلول به طول ۱۷ cm بین عدسی و دریچه قرار داده می‌شود، به شکلی که مرکز آن در کانون عدسی قرار گیرد. برای نگه‌داشتن نمونه‌ها، گیره‌ای روی ریل نصب شد و طوری تنظیم شد که باریکه لیزری پس از خروج از عدسی به نمونه بتابد.

۲.۳ روبش Z دریچه بسته

در شروع آزمایش، داده‌های مربوط به روبش Z دریچه بسته برای اندازه‌گیری ضریب شکست غیرخطی نمونه‌ها جمع‌آوری می‌شود. برای این منظور شعاع روزنه به گونه‌ای تنظیم می‌شود که نمودار قله-دره‌ی بهتری دریافت شود. مقداری از یکی از نمونه‌ها را داخل کووت ریخته آن را روی ریل قرار داده و شروع به اندازه‌گیری و ثبت داده‌های آن می‌کنیم. با کاهش نور محیط دستگاه را با نرم‌افزار مربوطه روی گام‌های ۲ mm و سپس ۴ mm تنظیم و اندازه‌گیری را انجام و در نهایت، نمودارهای مربوط به هر حالت ذخیره می‌شود. سپس با شست‌وشوی کووت با آب دیونیزه، نمونه‌ها یکی پس از دیگری داخل سلول ریخته و روی ریل قرار می‌گیرد و در نهایت، نمودار مربوط به هر نمونه در رایانه ذخیره می‌شود تا مورد بررسی قرار گیرد. در این مرحله رفتار قله-دره‌ای نمودارها به راحتی قابل مشاهده است.

۳.۳ روبش Z دریچه باز

پس از انجام آزمایش روبش Z دریچه بسته برای تمام نمونه‌ها، دستگاه برای انجام آزمایش روبش Z دریچه باز جهت اندازه‌گیری ضریب جذب غیرخطی نمونه‌ها آماده می‌شود. برای این کار روزنه را برداشته و این بار نیز اندازه‌گیری برای تمام نمونه‌ها با گام‌های ۲ mm و سپس ۴ mm انجام و نمودار مربوط به هر نمونه ذخیره می‌شود.

۴.۳ مباحث نظری روبش محوری

در حالت دریچه باز عبور دمی به هنجار بر حسب تابعی از مکان در راستای محور Z عبارت است از [۱۴-۱۸]:

$$T(z) = \sum_{m=0} \frac{[-q_0(z)]^m}{(m+1)^{3/2}} \quad \text{for } |q| < 1 \quad (1)$$



$$L_{eff} = \frac{1 - \exp(-\alpha L)}{\alpha} \quad (2)$$

$$q_0 = \beta \frac{I_0 L_{eff}}{[1 + (z/z_0)^2]} \quad (3)$$

$$Z_0 = \frac{\pi w_0^2}{\lambda} \quad (4)$$

که در آن، Z_0 طول پراش ریلی که در باریکه گاوسی از معادله (۴) بدست می‌آید، I_0 شدت باریکه در کانون، α و β ضرایب جذب خطی و غیرخطی در طول موج کاری، همچنین L و L_{eff} به ترتیب ضخامت‌های حقیقی و موثر نمونه هستند. برای محاسبه ضریب شکست غیرخطی n_2 روابط استاندارد زیر مورد استفاده قرار می‌گیرند:

$$\Delta T_{P-V} = 0.406(1 - S)^{0.25} |\Delta \Phi_0| \quad (5)$$

$$|\Delta \Phi_0| = k L_{eff} n_2 I_0 \quad (6)$$

که در آن، $\Delta \Phi_0$ جابه‌جایی فاز میدان غیرخطی باریکه گاوسی در محیط نسبت به خلأ می‌باشد. معادله (۶) تغییرات فاز را برحسب ضریب شکست غیرخطی و طول موثر محلول در سلول و شدت اولیه باریکه مشخص می‌کند. S کسر عبوری نور از روزنه است که از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$S = 1 - \exp\left(-\frac{2r_a^2}{\omega_a^2}\right) \quad (7)$$

در این معادله، r_a شعاع روزنه و ω_a شعاع باریکه در مکان روزنه می‌باشند. بزرگی S برای آزمایش‌های روزنه باز برابر ۱ است. از روی نمودارهای بدست آمده از روبش z نمودارهای قله-دره می‌توان ضریب شکست غیرخطی را محاسبه کرد. در شکل (۲)، نمودار بهنجار شده نوعی در یک آزمایش روبش z نمایش داده شده است. عبوردهی بیشینه در قله با TP ، در دره با TV و اختلاف این دو با ΔT_{P-V} نشان داده می‌شود و بزرگی آن از معادله (۵) بدست می‌آید. جذب غیرخطی ماده نیز از معادله زیر بدست می‌آید:

$$\alpha(I) = \alpha_0 + \beta I \quad (8)$$

بدیهی است که در معادلات (۱) تا (۸)، فرض‌ها و تقریب‌های ساده‌کننده‌ای در نظر گرفته شده است.

داده‌های یک آزمایش روبش z برای هر شکل باریکه و همچنین هر ضخامت پاسخگو نیست. به عنوان نمونه، می‌توان محیط را نازک و طول نمونه را به اندازه‌ای کوچک در نظر گرفت که بتوان

از تغییرات قطر پرتو در داخل نمونه به دلیل شکست غیرخطی و یا پراکندگی غیرخطی چشم‌پوشی کرد. معمولا شرط $L \ll Z_0$ برای اجتناب از پراش غیرخطی و همچنین شرط،

$$L \ll Z_0 / \Delta\phi_0 \quad (9)$$

برای شکست غیرخطی اعمال می‌شود. فاصله جاروب در راستای محور در شرط $Z < 5Z_0 < 5Z_0$ صدق می‌کند و فاصله روزنه تا کانون $20Z_0$ تا $100Z_0$ در نظر گرفته می‌شود.

۴. بحث و نتایج

در پژوهش حاضر، از روش قوس الکتریکی برای تولید نانو ذرات استفاده شده است. در کار پیشین، نمونه‌ها از روش کندوسوز لیزری تهیه شده بودند [۱۸]. از طرف دیگر محیط اکسید گرافین جایگزین آب شده است.

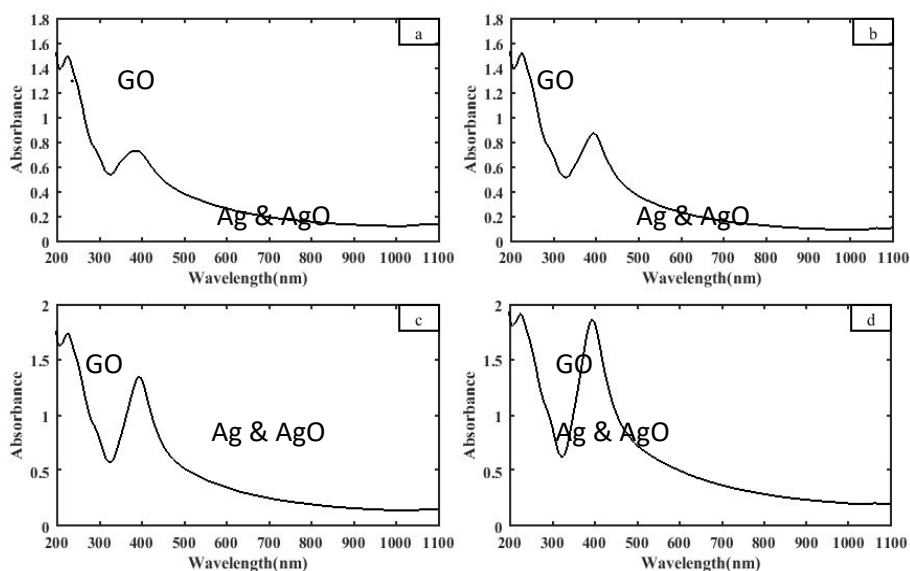
برای بررسی اولیه و مشخص شدن ترکیب نمونه‌ها از طیف سنجی مرئی - فرابنفش استفاده شده است (شکل (۳)). در طیف نمونه‌ها، قله‌ی مربوط به اکسید گرافین در 238 nm و قله‌ی مربوط به کلونید نقره در 396 nm مشاهده می‌شود. جذب نسبی در طول موج 238 nm اطراف $1/6$ بوده و در هر چهار نمونه مقدار کمایش ثابتی را نشان می‌دهد. اگرچه، در محل قله تشدید پلاسمونی نانوذرات نقره بزرگی جذب نسبی افزایش خطی نسبت به تغییرات ولتاژ را نشان می‌دهد. مقادیر بدست آمده از نمودار در جدول (۱) درج شده است. پیش از این نشان داده شده است، [۱۸ و ۱۹]، که جذب افزون بر سطح مقطع به تعداد ذرات در واحد حجم، چگالی نانوذرات نقره، غلظت گرافین و ضخامت سلول مورد استفاده در طیف‌سنجی بستگی دارد. همچنین نشان داده شده است، [۱۸ و ۱۹]، نمونه‌هایی که شعاع ذرات آن‌ها بین 20 نانومتر تا 60 نانومتر است، بیشترین جذب را داشته و با افزایش شعاع قله، تشدید پلاسمونی به سمت طول موج‌های بلندتر حرکت می‌کند. در شکل (۳) نیز حرکت قله از 396 nm شروع شده و تا 400 nm ادامه یافته است. در اینجا هدف بررسی ویژگی‌های غیرخطی است. توضیحات بیشتر در منبع [۱۹] آمده است.

جدول ۱- بزرگی جذب در محل قله نانوذرات نقره و ضریب جذب خطی α نمونه‌ها

نمونه‌ها	S ₁	S ₂	S ₃	S ₄
جذب در 400 نانومتر	۰/۷۸	۰/۸۸	۱/۴۴	۱/۹۲
α (1/cm)	۱/۳۴۰	۱/۴۳۸	۱/۵۲۹	۱/۸۳۹



توجه داریم که برای یافتن ضریب جذب خطی نمونه‌ها نیاز به توان بالا نیست. از این رو، برای محاسبه ضریب جذب خطی نمونه‌ها از یک صافی ND در چیدمان رویش Z استفاده شده است. آشکار ساز شدت باریکه لیزری را پیش از عبور از نمونه در توان‌های انتخابی ۱۰۰، ۱۵۰، ۲۰۰، ۲۵۰ و ۳۰۰ میلی وات ثبت نموده و سپس توان‌های خروجی از نمونه مشخص شده‌اند. قانون بیر و لامبرت به راحتی ضریب جذب خطی نمونه‌ها را مشخص می‌کند. مقادیر بدست آمده در جدول (۱) آمده است. همانطور که مشاهده می‌شود با افزایش ولتاژ، جذب مربوط به نانوذرات نقره افزایش می‌یابد. همچنین در جدول (۲)، پارامترها و شرایط اولیه برای انجام آزمایش رویش Z آمده است.



شکل ۳ - نمودار طیف های مرئی- فرابنفش نانو ذرات نقره که به روش قوس الکتریکی در محلول اکسید گرافن تهیه شده است. در این شکل a، b، c و d به ترتیب مربوط به نمونه های S₁، S₂، S₃ و S₄ می باشند.

جدول ۲- بزرگی پارامترهای مربوط به آزمایش روبش Z

ردیف	نوع پارامتر	بزرگی پارامتر	ردیف	نوع پارامتر	بزرگی پارامتر
۱	بیشینه توان لیزر	۳۰۰ (mW)	۶	گشودگی روزنه	۰/۳۳ (μm)
۲	طول موج (نانومتر)	۵۳۲ (nm)	۷	قطر لکه پس از لیزر	۱۲۰۰ (μm)
۳	بیشینه شدت تولیدی در کانون	۵۳۲ (W/cm ²)	۸	قطر لکه در کانون	۲۵۰ (μm)
۴	محدوده رایلی	۳۷ (cm)			
۵	فاصله کانونی عدسی محدب	۹ (cm)			

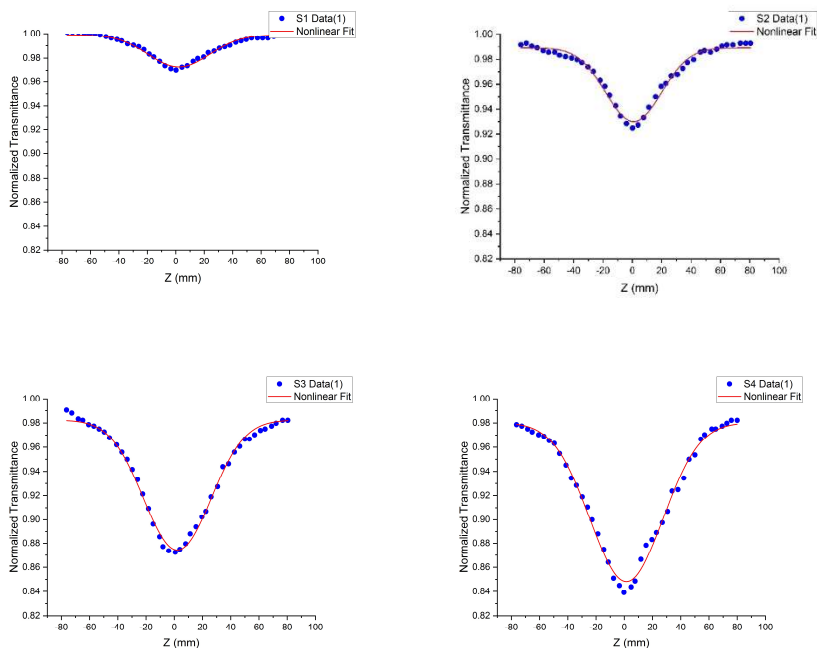
برای محاسبه‌ی ضریب شکست غیرخطی ابتدا باید عبوردهی خطی روزنه، k بر اساس با معادله (۶) بدست آید. در این آزمایش بهترین حالت عبور نور از روزنه‌ای به شعاع $0/9 \text{ mm}$ بوده و همچنین شعاع باریکه ω_a در محل روزنه برابر با 2 mm اندازه گیری شده است. بزرگی k در تمام نمونه‌ها عدد $0/33$ بدست آمده است. در شکل (۴)، نمودار بدست آمده از روبش دریچه باز نمایش داده شده است. نمودارهای شکل (۴)، همگی دارای دره می‌باشند و نشان می‌دهد، ضریب شکست غیرخطی نمونه‌ها منفی است. از معادلات (۱) تا (۳) برای برازش داده‌های تجربی جمع‌آوری شده و تعیین جذب غیرخطی استفاده می‌شود. ضرایب جذب غیرخطی نمونه‌های تولید شده عبارتند از:

$$10^{-3} \text{ cm/W}, \beta_1 = -8/23 * 10^{-3} \text{ cm/W}, \beta_1 = -7/86 * 10^{-3}$$

$$10^{-3} \text{ cm/W}, \beta_2 = -11/20 * 10^{-3} \text{ cm/W}, \beta_2 = -9/35 * 10^{-3}$$

داده‌های بالا نشان می‌دهند که با افزایش ولتاژ اعمالی جذب غیرخطی نمونه‌ها نیز به صورت خطی افزایش می‌یابند که می‌توان آن را به افزایش غلظت نانوذرات تولید شده نسبت داد.



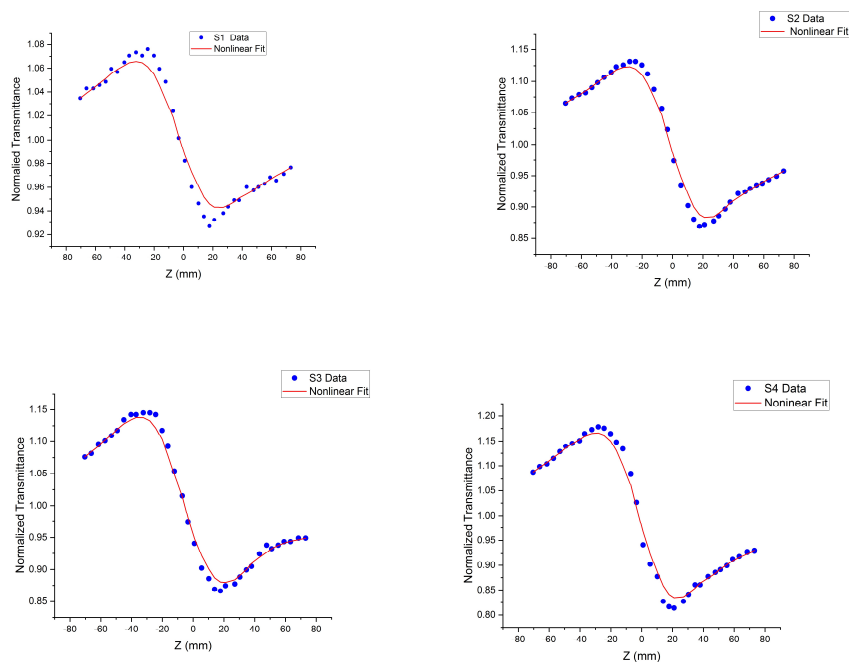


شکل ۴ - نمودار روبش دریچه باز برای نانو ذرات نقره در محلول اکسید گرافن. در این شکل سری های ۱، ۲، ۳ و ۴ به ترتیب مربوط به نمونه های S_1 ، S_2 ، S_3 و S_4 می باشند.

در شکل (۵)، منحنی تغییرات $T(Z)$ برحسب Z نمایش داده شده است. برای برازش داده‌ها در این دسته از داده گیری تجربی از معادله زیر استفاده می‌شود:

$$T(x) = 1 - \frac{4x}{(x^2+9)(x^2+1)} \Delta\Phi_0 \quad (10)$$

نمودارهای شکل (۵)، همگی مشخصه قله-دره را دارا می‌باشند، که نشان از منفی بودن ضریب شکست غیرخطی نمونه‌ها دارند. واکانونی گرمایی بیشترین تاثیر را در رفتار غیرخطی نمونه‌ها دارد. در جدول (۳) نتایج بدست آمده از روبش محوری برای چهار نمونه تولید شده آمده است.



شکل ۵ - نمودار روبش دریاچه بسته برای نانوذرات نقره در محلول اکسید گرافن. در این شکل a، b، c و d به ترتیب مربوط به نمونه های S_1 ، S_2 ، S_3 و S_4 می باشند.

جدول ۳- نتایج حاصل از اندازه گیری های روبش محوری برای چهار نمونه نانوذرات اکسید نقره در محلول

اکسید گرافن

نمونه ها	ΔT_{P-V}	$\Delta \Phi_0$	$n_2 (cm^2 / W) \times 10^{-7}$
S_1	۰/۰۶۲	۰/۱۷۰	$-۰/۴۷۰ \times 10^{-1۴}$
S_2	۰/۱۳۸	۰/۳۷۷	$-۱/۰۴۱ \times 10^{-1۴}$
S_3	۰/۱۶۳	۰/۴۴۶	$-۱/۲۳۸ \times 10^{-1۴}$
S_4	۰/۲۱۲	۰/۵۸۰	$-۱/۶۱۰ \times 10^{-1۴}$



۱.۴ اثرات ترمو اپتیکی

در اثر جذب نور توسط محیط و نانوذرات شامل آن به صورت کلی ضریب شکست محیط تغییر می کند. جذب منجر به تغییر دمای δT می شود که به نوبه خود منجر به تغییر در چگالی موضعی $\delta \rho$ می گردد. تغییر در چگالی منجر به تولید امواج صوتی می شود که به صورت موثر تنش های ناشی از تغییرات چگالی را کاهش می دهد. هر دو عامل δT و $\delta \rho$ منجر به تغییر در ضریب شکست می شوند.

$$\delta n = \left(\frac{\partial n}{\partial \rho}\right)_T \delta \rho + \left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)_\rho \delta T \quad (11)$$

در این جا، $\left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)_\rho$ تغییرات ضریب شکست مایع واکانونی شونده بر حسب دما در چگالی ثابت است که به آن ضریب ترمو اپتیکی گفته می شود. در تقریب اول، تغییر دما سهم غالب در غیر خطیتی حرارتی است. نکته مهم در اینجا محاسبه دمای حالت پایدار و در نتیجه بررسی تغییرات شعاعی ضریب شکست محیط است. در مورد تپ های لیزری کوتاه، فمتوثانیه، پیکوثانیه و یا نانوثانیه، توزیع اولیه ضریب شکست حرارتی القا شده اساساً انعکاس همان توزیع باریکه فرودی است. اگرچه، در مورد لیزرهای قفل شده ی مد و یا لیزرهای CW، اثرات تجمعی در مقیاس های زمانی میکروثانیه قابل مشاهده هستند. در این مرحله، اندازه، شکل و شرایط مرزی حرارتی نمونه در ایجاد رفتار حالت پایدار ضریب شکست مهم می شوند. در نتیجه از نمونه ای به نمونه دیگر، بر حسب هندسه و ساختار نانوذرات و محیط اطراف آن تغییر می کند. ضریب شکست غیر خطی که در اثر تغییرات گرمایی شدید ایجاد شده است، با آنالیز گرمایش غیریکنواخت در شرایط پایدار از رابطه (۱۱) به دست می آید. همچنین ΔT تغییرات دما در نقطه کانونی است که از رابطه زیر محاسبه می شود:

$$\Delta n = \left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)_\rho \Delta T = \left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)_\rho \frac{\alpha I_0 \omega_0^2}{4k} \quad (12)$$

در حالی که k ضریب رسانایی گرمایی محلول است. در جدول (۴) بیشینه تغییرات دمایی نمونه ها در کانون داده شده است، تغییرات ضریب شکست و ضریب ترمو اپتیکی نمونه ها نیز محاسبه و در این جدول درج شده است.

جدول ۴- نتایج حاصل از اندازه‌گیری‌های روبش محوری برای چهار نمونه نانوذرات اکسید نقره در محلول اکسید گرافن

نمونه‌ها	ΔT (K)	$\Delta n \times 10^{-8}$	$\left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)_p$ (K^{-1})
S _۱	۱۰/۲	۱/۴۳	$۱/۳۴ \times ۱۰^{-۹}$
S _۲	۱۱/۳	۳/۲	$۳/۰۰ \times ۱۰^{-۹}$
S _۳	۱۲/۲	۳/۷۸	$۳/۵۴ \times ۱۰^{-۹}$
S _۴	۱۴/۶	۴/۹۲	$۴/۶۱ \times ۱۰^{-۹}$

۵. نتیجه‌گیری

در این پژوهش نانوذرات اکسید نقره در محلول اکسید گرافین به روش قوس الکتریکی با موفقیت تهیه شده است. نتایج طیف‌سنجی مرئی-فرابنفش حکایت از تشکیل درست قله‌های تشدید پلاسمونی در بازه طول موجی ۳۹۶ nm تا ۴۰۰ nm مربوط به نانوذرات نقره و ۲۳۸ nm تا ۲۴۲ nm در نمونه‌های اکسید گرافین دارد. همچنین جذب خطی نمونه‌های تولید شده که در توان‌های کم با استفاده از لیزر ۵۳۲ نانومتر اندازه‌گیری شده، مقادیر قابل قبولی را نشان می‌دهد. نتایج روبش محوری نشان می‌دهد که علامت ضرایب جذب غیرخطی و ضریب شکست غیرخطی نمونه‌ها منفی است. از این رو، با توجه به شدت بالای باریکه‌های لیزری مهمترین روش حاکم بر این رفتار غیرخطی خود واکانونی گرمایی است. با افزایش ولتاژ دستگاه غلظت نانوذرات تولید شده افزایش یافته و ضرایب جذب خطی و غیرخطی متناظر با آن افزایش یافته‌اند.

۶. تقدیر و تشکر

نویسندگان از پژوهش سرای امام خمینی شهرستان قروه، به ویژه آقای جواد مرغزاری که در تهیه نمونه‌ها و طیف‌گیری مساعدت نمودند و همچنین آقای دکتر پیمان سلطانی مدیر عامل شرکت دانش بنیان پرتوافزار صنعت که در فرایند آزمایش‌های روبش محوری زحمات زیادی را متقبل شدند، نهایت قدردانی و تشکر را دارند.



منابع

- [1] Cai, X.; Sun, K.; Qiu, Y.; Jiao, X. , "Recent advances in graphene and conductive polymer composites for supercapacitor electrodes: A review", *Crystals*, **11**(8), 947, 2021. <https://doi.org/10.3390/cryst11080947>
- [2] Yu W., Sisi L. , Haiyan Y., Jie L. , "Progress in the functional modification of graphene/graphene oxide: a review", *RSC Adv.* , **10**, 15328-15345, 2020. <https://doi.org/10.1039/D0RA01068E>
- [3] Yusaf T , Mahamude ASF, Farhana K, Harun WSW, "A comprehensive review on graphene nanoparticles: Preparation, properties, and applications", *Sustainability* **14**, 12336, 2022. <https://doi.org/10.3390/su141912336>
- [4] Soldano Caterina, Mahmood Ather, Dujardin Erik; "Production, properties and potential of grapheme", *Carbon* **48**, 2127 , 2010 , <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2010.01.058>
- [5] S. Sajjad, S.A. Khan Leghari, and A. Iqbal, "Study of Graphene Oxide Structural Features for Catalytic, Antibacterial, Gas Sensing, and Metals Decontamination Environmental Applications", *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9**(50), 43393-43414, 2017. <https://doi.org/10.1021/acsami.7b08232>
- [6] Sang M. , Shin J., Kim K. , Yu K.), "Electronic and Thermal Properties of Graphene and Recent Advances in Graphene Based Electronics Applications", *Nanomaterials (Basel)* , **9** (3), 374, 2019. <https://doi.org/10.3390/nano9030374>
- [7] Schöche, S., Hong, N., Khorasaninejad, M., Ambrosio, A., Orabona, E., Maddalena, P. and Capasso, F., "Optical properties of graphene oxide and reduced graphene oxide determined by spectroscopic ellipsometry", *Applied Surface Science* , **421**(B1), 778-782, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.01.035>
- [8] Jingang Wang , Fengcai Ma , Wenjie Liang , Rongming Wang and Mengtao Sun , "Optical, photonic and optoelectronic properties of graphene, h-BN and their hybrid materials", *Nanophotonics* , **10**(5), 2017. <https://doi.org/10.1515/nanoph-2017-0015>
- [9] Cao Yuan , Fatemi Valla, Fang Shiang, Watanabe Kenji , Taniguchi Efthimios, Takashi Kaxiras , Jarillo-Herrero Pablo , "Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices", *Nature* , **556**, 43-50, 2018. <https://doi.org/10.1038/nature26160>
- [10] Zhibo Liu, Yan Wang, Xiaoliang Zhang, Yanfei Xu, Yongsheng Chen, and Jianguo Tian; "Nonlinear optical properties of graphene oxide in nanosecond and picosecond regimes", *Appl. Phys. Lett.*, **94**, 021902 , 2009. <https://doi.org/10.1063/1.3068498>
- [11] Dissanayake D.M.A.S., Cifuentes M. ,Humphrey M.G., "Optical limiting properties of (reduced) graphene oxide covalently functionalized by coordination complexes, Coordin", *Chem. Rev.*, **375**, 489-513, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2018.05.003>
- [12] Sun, Y.; Xia, H. , "Bi2Te3/Graphene Heterostructure as the Saturable Absorber for ~1.0 μm Passively Q-switched Solid State Pulsed Laser", *Crystals*, **12**(2), 222, 2022. <https://doi.org/10.3390/cryst12020222>
- [13] Z Sun, T Hasan, F Torrisi, D Popa, G Privitera, F Wang, "Graphene Mode-Locked Ultrafast Lase", *ACS Nano*, **4**(2), 803-810, 2010. <https://doi.org/10.1021/nn901703e>
- [14] Sheik-Bahae M., Said A.A., Van Stryland E.W., "High-sensitivity, Single-Beam n2 Measurements", *Opt. Lett.*, **14**, 955-957, 1989. <https://doi.org/10.1364/OL.14.000955>



- [15] Christodoulides D. N. , Khoo I. C. , Salamo G. J. , Stegeman G. I. , Van Stryland E. W. , "Nonlinear refraction and absorption: mechanisms and magnitudes", *Advances in Optics and Photonics* **2**(11), 60-200 , 2010. <https://doi.org/10.1364/AOP.2.000060>
- [16] Sheik-Bahae M., Said A.A., Wei A.A., Hagan D.J., Stryland E.W.V., "Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam", *IEEE J. Quantum Electron.*, **26**, 760-769, 1990. <https://doi.org/10.1109/3.53394>
- [17] Parra I. , Valbuena S., Racedo F J, "Measurement of nonlinear optical parameters in graphene oxide using the Z-scan Technique", *Spectrochimica Acta A*, **244**(5), 118833, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2020.118833>
- [18] Nadjari H. , Hajiesmaeilbaigi F., Motamedi A., "Thermo Optical Response and Optical Limiting in Ag and Au Nanocolloid Prepared by Laser Ablation", *Laser Physics*, **20**(4), 859 , 2010. <https://doi.org/10.1134/S1054660X1007025X>
- [19] Nadjari H., Movahedinejad H., Investigating the size effect in the dielectric function of spherical nano particles and determining their allowed radial interval for experimentally produced samples, *Iranian Journal of Physics Research*, **20**, 1 , 23-30, 2020,(In Persian)
<https://doi.org/10.47176/ijpr.20.1.38131>.
- [20] Zaaba N.I. , Foo K.L. , Hashim U. , Tan S.J. , Liu W.W., Voon C.H. , "Synthesis of Graphene Oxide using Modified Hummers Method: Solvent Influence Procedia Engineering", *Procedia Engineering*, **184**, 469-477, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2017.04.118>
- [21] Kovtyukhova, N. I. et al. , "Layer-by-layer assembly of ultrathin composite films from micron-sized graphite oxide sheets and polycations", *Chem. Mater.*, **11**, 771-778 , 1999. <https://doi.org/10.1021/cm981085u>
- [22] Yun G.S. , Bac L.H. , Kim J.S. , Kwon Y.S. , Choi H.S.,Kim J.C. , "Preparation and dispersive properties of Ag colloid by electrical explosion of wire", *J. All. & Comp.*, **509**, Supple. 1, S348-S352, 2011. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2011.01.142>



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



بررسی گذار فاز توپولوژی آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) از نیم فلز دیراک به نیم فلز وایل با استفاده از روش ابتدا به ساکن^۱

سمیرا سادات نوری زاده^۲ و امین الله واعظ^{۳*}

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۸/۱۱

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۱/۱۲/۲۶

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۲/۱۵

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال سیزدهم، پیاپی ۳۵، زمستان ۱۴۰۲

صص ۱۲۹ - ۱۴۳

چکیده:

نیم فلزهای وایل حالت‌های کوانتومی ویژه و بسیار جالبی از ماده را نشان می‌دهند که دارای ویژگی‌های توپولوژی غیربدهی بوده و کاربردهای یکتایی در صنعت اسپینترونیک دارند. یکی از روش‌های ساختن این مواد استفاده از روش آلیاژسازی است. در این مقاله آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) با استفاده از روش‌های ابتدا به ساکن ساخته شده‌اند و بعد از بررسی پایداری آن‌ها، ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و توپولوژی آن‌ها مورد مطالعه قرار گرفته است. برای بررسی ویژگی‌های ساختاری و الکترونی آلیاژها از برنامه محاسباتی وین، که بر اساس نظریه تابعی چگالی است، بهره گرفته شده است. همچنین، ویژگی‌های توپولوژی این آلیاژها با استفاده از برنامه محاسباتی واینرتولز، که بر اساس روش تنگ-بست است، محاسبه شده‌اند. محاسبه‌ها نشان دادند که آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) در نبود برهم‌کنش اسپین-مدار، دارای نقطه‌های برخوردی با تپه‌گنی چهارگانه و وارونی نواری هستند و در نتیجه نیم فلز توپولوژی دیراک می‌باشند. با در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین-مدار، مشاهده شد که آلیاژهایی با غلظت‌های $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$ با باز شدن شکاف انرژی تبدیل به نیم فلز معمولی می‌شوند؛ ولی آلیاژ با غلظت $x = 1$ به نیم فلز توپولوژی وایل با ۱۶ جفت فرمیون وایل تبدیل می‌شود. برای یافتن مکان نقطه‌های وایل کل منطقه اول بریلوئن جستجو شد. بررسی‌ها نشان داد که فرمیون‌های وایل با کایرالیته $+1$ یا -1 با تقارن مرکزی در منطقه اول بریلوئن پراکنده‌اند، ولی همگی دور از مسیرهای پرتقارن منطقه اول بریلوئن هستند. همچنین ویژگی حالت‌های سطحی، چون کمان‌های فرمی، برای نیم فلز وایل $NbSb$ با استفاده از برنامه محاسباتی واینرتولز محاسبه و بررسی شده است.

واژگان کلیدی: مواد توپولوژی، نیم فلز دیراک، نیم فلز وایل، نظریه تابعی چگالی، روش تنگ-بست.

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2023.42095.1305

^۲ دانشجوی دکترا، دانشکده فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان. Email: samirasadatnourizadeh@yahoo.com

^۳ استادیار، دانشکده فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان. (نویسنده مسئول). Email: vaez@phys.ui.ac.ir



۱. مقدمه

مطالعه نیم فلزهای وایل، همانند گرافن و نارساها های توپولوژی، عصری جدید را در علم مواد و فیزیک ماده چگال به روی دانشمندان گشوده است [۱]. در حقیقت، نیم فلزهای وایل نیم فلزهایی با فاز توپولوژی غیربدیهی می باشند. در این نوع از نیم فلزها، برانگیختگی های کم انرژی، فرمیون های وایل می باشند [۲]. این فرمیون ها نقش اساسی و مهمی در توسعه نظریه میدان کوانتومی و الگوی استاندارد داشته اند [۳]. فرمیون های وایل نخستین بار توسط هرمان وایل^۱ در سال ۱۹۲۹ از ساده سازی معادله های دیراک استخراج شدند، ولی شاهد تجربی برای وجود آن ها در سال ۲۰۱۵ در طبیعت مشاهده شد و در سال ۲۰۱۶ به این پژوهش ها جایزه نوبل فیزیک تعلق گرفت [۴، ۵]. ویژگی های توپولوژی در نیم فلزهای وایل سبب ایجاد ویژگی های متفاوتی از جمله مقاومت مغناطیسی منفی، نوسان های کوانتومی، نابهنجاری های کایرال، کمان های فرمی روی سطح و غیره می شود [۶]. این ویژگی نیم فلزهای وایل، منجر به ایجاد کاربردهای عملی گوناگونی از جمله کاربرد در رایانه های کوانتومی و در صنعت اسپینترونیک شده است [۷].

در بلورهایی که دارای تقارن وارونی زمانی یا تقارن وارونی مکانی هستند، فرمیون های وایل به صورت نقطه های ناشی از برخورد نوار رسانش و نوار ظرفیت در فضای اندازه حرکت ظاهر می شوند و به آن ها گره های وایل گفته می شود [۸]. یکی از ویژگی های یکتای فرمیون های وایل، کایرالیته آن ها است. فرمیون های وایل همچون تک قطبی های مغناطیسی برای انحنای بری هستند و کایرالیته آن ها همان علامت بارهای تک قطبی مغناطیسی است. کایرالیته گره های وایل به دلیل تقارن های بلوری و توپولوژی ساختار نواری محافظت می شوند [۹]. حضور فرمیون های وایل درون انبوهی ساختار بلوری منجر به ظهور حالت های سطحی یکتا در سطح ساختار مورد نظر می شود [۴]. این حالت های سطحی به صورت کمان هایی هستند که از تصویر گره های وایل درون انبوه روی سطح شروع و به تصویر گرهی وایل دیگری با کایرالیته مخالف روی سطح، پایان می یابند. با اعمال شرایط متفاوت، جفت گره های وایل با کایرالیته متفاوت می توانند از هم دور شوند و یا روی هم افتاده و تبدیل به گره دیراک شوند یا شکاف انرژی آن ها باز شده و تبدیل به نیم فلز عادی شوند.

نخستین پیشنهاد نظری برای بررسی نیم فلز وایل، پژوهش روی ترکیب پیروکلر $Rn_2Ir_2O_7$ بود [۱۰]. نشان داده شد که این ساختار بلوری دارای ۲۴ جفت گره وایل درون انبوه و حالت های سطحی یکتا روی سطح مورد بررسی است. ساختار بلوری بعدی که به صورت نظری مورد بررسی

^۱ Herman Weyl



قرار گرفت، بلور $HgCr_2Se_4$ بود که دارای ساختار به نسبت ساده تر و فاز فرومغناطیس بود [۱۱]. این ساختار به دلیل تبهگنی چهارگانه در تقاطع ساختار نواری، تنها دارای یک جفت فرمیون وایل دوتایی بود. در ادامه ساختارهای بسیاری به عنوان نیم فلز وایل با روش های محاسباتی و نظری مورد بررسی قرار گرفتند، ولی نخستین دسته ترکیب هایی که به صورت تجربی بررسی شدند، ترکیب های NbP ، $NbAs$ ، TaP و $TaAs$ بودند که با روش طیف سنجی نورگسیل وابسته به زاویه^۱ در آزمایشگاه مشاهده شدند و جایزه نوبل فیزیک هم به کسانی که این بررسی را انجام داده بودند اهدا شد. در این ترکیب ها ۱۲ جفت فرمیون وایل درون انبوهه و کمان های فرمی حالت سطحی روی سطح ظاهر شدند [۴، ۱۲، ۱۳]. به دلیل ویژگی های متمایز نیم فلز های وایل و کاربردهای گوناگون این ترکیب ها، پژوهشگران همواره به دنبال معرفی و بررسی آلیاژهایی هستند که بتوانند ویژگی های نیم فلز وایل را از خود بروز دهند. از جمله آلیاژهایی که دارای ویژگی نیم فلز وایل هستند و تاکنون مورد بررسی قرار گرفته اند می توان به آلیاژهایی از جمله $Bi_{1-x}Sb_x$ ، $Ge_{1-x}Sn_x$ و $MgTa_{2-x}Nb_xN_3$ اشاره کرد [۱۴-۱۸]. به عنوان نمونه، در ترکیب $Bi_{1-x}Sb_x$ بعد از محاسبه ویژگی های ساختاری و الکترونی، ویژگی های توپولوژی آلیاژ با برنامه وانیرتولز محاسبه شده و نشان داده شده است که آلیاژ برای دو مقدار $x = 0.5$ و $x = 0.87$ دارای فاز توپولوژی نیم فلز وایل است [۱۵].

با توجه به اهمیت بالای ترکیب هایی با ویژگی فاز توپولوژی نیم فلز وایل در دسته ترکیب های $TaAs$ ، NbP ، $NbAs$ و TaP ، هدف این پژوهش یافتن ترکیب هایی است که دارای فاز توپولوژی غیربدیهی باشند. به این منظور آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) با پنج غلظت متفاوت برای نخستین بار معرفی شده و برای یافتن ویژگی های توپولوژی فاز نیم فلز وایل، مورد بررسی قرار گرفته اند. این آلیاژها می توانند نامزدهایی برای نیم فلز دیراک و نیم فلز وایل باشند. به منظور بررسی ویژگی های ساختاری، الکترونی و توپولوژی این آلیاژها از برنامه محاسباتی وین^۲ [۱۹] بر مبنای نظریه تابعی چگالی^۳ [۲۰]، برنامه محاسباتی وانیر^۴ [۲۱] بر مبنای تابع های وانیر^۵ [۲۲] و برنامه وانیرتولز^۶ [۲۳] بر مبنای روش تنگ-بست استفاده شده است. برنامه محاسباتی وانیر^۶ کد محاسباتی منبع باز بر پایه حالت های

¹ Angle-Resolved Photo Emission Spectroscopy (ARPES)

² Wien2k

³ Density functional theory

⁴ Wannier90

⁵ Wannier function

⁶ Wanniertools



بلاخ برای محاسبه‌ی توابع بیشینه جایگزیده وانیر است. برنامه وانیر تولز نیز، کد محاسباتی منبع بازی است که براساس توابع به دست آمده از خروجی برنامه وانیر ۹۰ محاسبات مربوط به ویژگی‌های توپولوژی در حالت‌های حجمی و حالت‌های سطحی را انجام می‌دهد. در ادامه‌ی این مقاله در بخش ۲ روش انجام محاسبات بیان شده است. نتیجه محاسبات ساختاری و الکترونی در بخش ۳-۱ و محاسبات توپولوژی ساختارها در بخش ۳-۲ بیان شده‌اند. در نهایت در بخش ۴ نتیجه گیری کلی از روند پژوهش انجام شده است.

۲. روش محاسبات

آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) دارای ساختار سه میلی در گروه فضایی $1P_1$ هستند. برای بررسی ویژگی‌های ساختاری و الکترونی این آلیاژها از برنامه محاسباتی وین بر پایه نظریه‌ی تابعی چگالی استفاده شده است. در این برنامه محاسباتی، از روش حل موج‌های تخت بهبود یافته‌ی خطی با پتانسیل کامل^۱ که یکی از دقیق‌ترین روش‌های مطالعه‌ی ساختار نواری جامدها است، بهره گرفته شده است. برای بررسی ویژگی‌های ساختاری و الکترونی آلیاژها در این کد محاسباتی از تقریب شیب تعمیم یافته، برای تابعی تبادل - هم بستگی استفاده شده است [۲۴]. در تقریب شیب تعمیم یافته افزون بر چگالی، از شیب چگالی در نقطه‌ی مورد نظر هم استفاده می‌شود. در نتیجه، این تقریب روشی مناسب برای محاسبه‌ی ویژگی‌های فیزیکی بلورهاست. همچنین در کارهای انجام شده برای بررسی ویژگی‌های توپولوژی و ایل در دسته ترکیب‌های $NbAs$ ، که ساختاری مشابه با آلیاژهای بررسی شده در این مقاله دارد، از تقریب شیب تعمیم یافته استفاده شده است و نشان داده شده که محاسبه‌های مبتنی بر این تقریب سازگاری خوبی با داده‌های تجربی دارد [۴]. در تمام محاسبه‌ها، میزان همگرایی برای انرژی برابر با 10^{-5} (Ry) در نظر گرفته شده است. نخستین متغیر مهم در انجام این محاسبه‌ها، پارامتر $RMTK_{max}$ است، که در آن، RMT کوچک‌ترین شعاع کره‌ی مافین - تین اتم‌های ترکیب و K_{max} بیشینه بردار موج برای بسط تابع موج الکترون در ناحیه بین جایگاهی است. مقدار بهینه پارامتر $RMTK_{max}$ برابر با $10/5$ به دست آمد. کوچک‌ترین شعاع کره‌ی مافین - تین برای اتم‌های Nb ، Ta و Sb ، به ترتیب برابر با $2/35$ ، $2/37$ و $2/27$ آنگستروم به دست آمده‌اند. همچنین، مقدار بهینه‌ی بردار قطع بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه بین جایگاهی، یعنی G_{max} ، مقدار $(Ry)^{1/2}$ ۱۳ به دست آمد. تعداد بهینه نقطه‌ها در فضای وارون، K_{point} ، هم

¹ Full-Potential Linearized Augmented Planewave (FP-LAPW)



برابر با مقدار $2 \times 6 \times 6$ به دست آمد. انرژی جداسازی حالت‌های مغزه از ظرفیت برابر با $(Ry) - 6$ انتخاب شده است. تمامی محاسبه‌ها برای بررسی ویژگی‌های الکترونی در بود و نبود برهم کنش اسپین - مدار انجام شده است.

با استفاده از خروجی‌های محاسبه‌های برنامه‌ی وین و استفاده از برنامه‌ی وین-تو-وانیر^۱ به عنوان پل ارتباطی، ورودی برنامه وانیو ۹۰، که برپایه‌ی تابع‌های وانیو بیشینه جایگزیده است، آماده شد. بدین منظور براساس داده‌های خروجی از برنامه محاسباتی وین، تابع‌های وانیو بیشینه جایگزیده‌ی مورد نیاز برای اوربیتال‌های $Sb-4p$ و $Nb-5d, Ta-5d$ ساخته شدند. ویژگی‌های توپولوژی آلایزهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) با استفاده از برنامه وانیو ۹۰ و برنامه محاسباتی وانیو تولز محاسبه شدند. برنامه محاسباتی وانیو تولز، برپایه روش محاسباتی تنگ-بست، با محاسبه‌ی ساختار نواری، سطح فرمی، چگالی حالت‌ها و بررسی ویژگی‌های حالت‌های سطحی امکان مطالعه روی ترکیب‌های نارسانا و رسانا با ویژگی توپولوژی غیربدیهی را دارد. در این برنامه‌ی محاسباتی با محاسبه‌ی مرکزهای بار وانیو، شاخص توپولوژی Z_2 ، یا عدد چرن، می‌توان نارسانا‌های توپولوژی را بررسی کرد. همچنین، با استفاده از الگوریتم جست‌وجوی گره‌های شکاف بسته و محاسبه‌ی شکاف انرژی می‌توان ویژگی‌های رسانا‌های توپولوژی از جمله مکان نقطه‌های وایل و دیراک و یا خط‌های گره‌ایی را بررسی کرد. ورودی برنامه وانیو تولز با استفاده از هامیلتونی تنگ-بست، محاسبه شده با برنامه وانیو ۹۰، تولید شد. در نهایت با اجرای برنامه وانیو تولز، ویژگی‌های توپولوژی آلایزها از جمله مکان و کاپرالیته نقطه‌های وایل، پاشندگی خطی نوار انرژی در نزدیکی این نقطه‌ها و حالت‌های سطحی بر اساس روش تابع گرین بررسی شدند [۲۵].

۳. نتایج

۳.۱ ویژگی‌های ساختاری و الکترونی

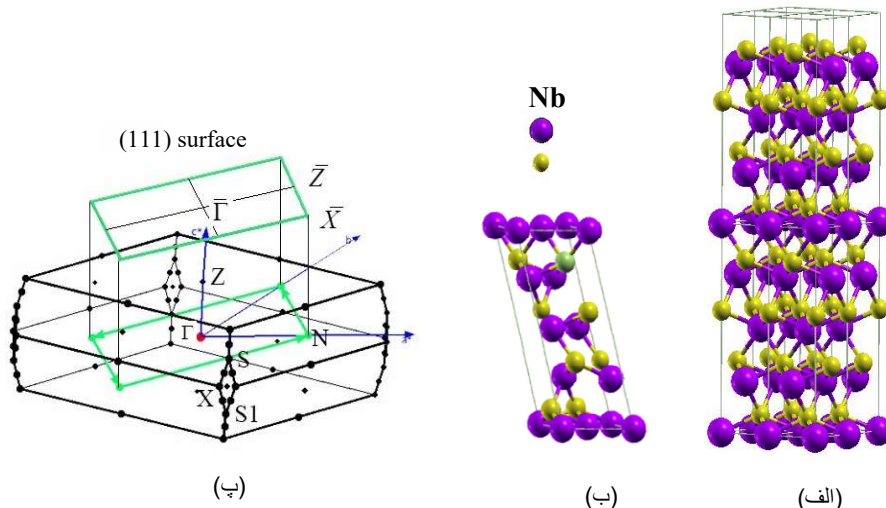
برای ساخت آلایزهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) ابریاخته‌ایی به ابعاد $2 \times 2 \times 2$ برابر یاخته‌ی یک‌ه‌ی ترکیب $TaSb$ با ساختار شبکه براوه‌ی چهارگوشی با گروه فضایی $I4_1md$ ساخته شد. این ابریاخته بعد از بهینه‌سازی به ساختار شبکه براوه‌ی سه‌میلی با گروه فضایی $1P_1$ تغییر پیدا کرد. ساختار سه‌میلی دارای کمترین تقارن در میان ۱۴ گروه فضایی براوه‌ی سه‌بعدی می‌باشد. این ساختار تنها دارای تقارن وارونی نسبت به مرکز است. برای آلایزهایی با غلظت‌های

¹ Wien2Wannier



متفاوت درصد مناسبی از اتم‌های Ta با اتم‌های Nb جایگزین می‌شوند. به صورت نمونه، یاخته‌ی قراردادی $2 \times 2 \times 2$ و یاخته‌ی یک‌ه‌ی ابریاخته برای غلظت $x=1$ در شکل (۱-الف) و (۱-ب) نمایش داده شده است. برای بهینه‌سازی پارامترهای شبکه از برنامه‌ی محاسباتی سازگار با برنامه‌ی وین استفاده شده است که با روش بسیار دقیق تمام الکترونی با پتانسیل کامل در برنامه وین اجرا می‌شود. در این برنامه، ابتدا بهترین نسبت پارامترهای شبکه و انرژی متناسب با حجم، به دست آمده و سپس معادله حالت برای حجم‌ها و انرژی‌های گوناگون به دست می‌آید. در نهایت پارامترهای شبکه برای حجم بهینه محاسبه می‌شود.

در شروع محاسبه‌ها، به منظور یافتن ویژگی‌های ساختاری آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) انرژی کل سامانه را بر حسب تغییر حجم در ساختارهای مختلف کمینه کرده و با استفاده از کمینه نمودارهای انرژی-حجم، مقدار بهینه برای پارامترهای شبکه را به دست آوردیم (جدول ۱).



شکل ۱ الف) یاخته‌ی قراردادی $2 \times 2 \times 2$ برای آلیاژ $NbSb$ با ساختار چهارگوشی، ب) یاخته‌ی یک‌ه‌ی با ساختار سه‌میلی برای آلیاژ $NbSb$ ، پ) منطقه‌ی اول بریلوئن در فضای وارون همراه با نمایش نقاط پرتقارن و صفحه‌ی (۱۱۱) برای نمایش حالت‌های سطحی.

برای بررسی پایداری آلیاژها یکی از پارامترهایی که مورد بررسی قرار گرفت محاسبه‌ی انرژی تشکیل، E_f ، بود. انرژی تشکیل برای این آلیاژها، بجز $x=0$ و $x=1$ ، به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۶]،



$$E_f(Nb_xTa_{1-x}Sb) = E_t(Nb_xTa_{1-x}Sb) - xE_t(NbSb) - (1-x)E_t(TaSb).$$

در این رابطه، $E_t(Nb_xTa_{1-x}Sb)$ انرژی کل آلیاژ برای غلظت x و $E_t(TaSb)$ و $E_t(NbSb)$ انرژی کل برای ترکیب‌های $TaSb$ و $NbSb$ است. مقدار انرژی تشکیل برای تمام غلظت‌های x محاسبه و دیده شد که مقدار آن برای تمام آلیاژها، منفی است. مقدار منفی انرژی تشکیل برای هر پنج غلظت x نشان می‌دهد که این آلیاژها پایدار هستند. انرژی تشکیل ترکیب $NbSb$ از سایر آلیاژها کمتر بود که نشان دهنده‌ی پایداری بیشتر این ترکیب نسبت به سایر آلیاژها است. این یافته با نتیجه‌ی ناشی از یافته‌های پژوهشگران پیشین در مورد پایداری این ترکیب سازگاری دارد [۲۷].

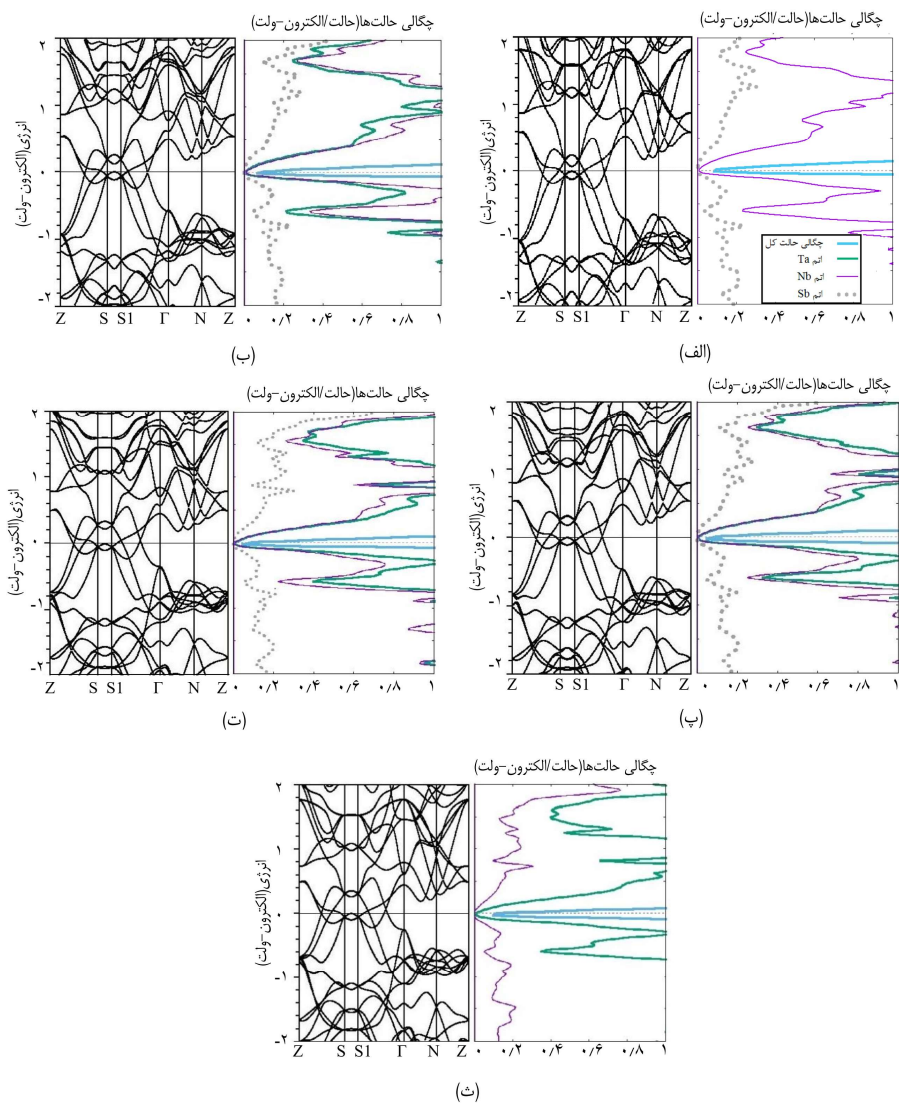
در ادامه محاسبه‌ها، برای بررسی ویژگی‌های الکترونی آلیاژها، نمودار چگالی حالت‌ها و ساختار نواری در مسیر پرتقارن منطقه‌ی اول بریلوئن (شکل ۱-پ) برای تمامی غلظت‌ها در نبود برهم‌کنش اسپین-مدار محاسبه شده و در شکل (۲) نمایش داده شدند. قطع شدن نوارهای انرژی به وسیله‌ی سطح فرمی و صفر نبودن چگالی حالت‌ها در انرژی فرمی نشان می‌دهد که تمام آلیاژهای مورد بررسی، دارای رفتار فلزی هستند. بررسی نمودارهای چگالی حالت‌ها برای غلظت‌های مختلف نشان می‌دهد که چگالی حالت‌ها در نزدیکی انرژی فرمی بیشتر ناشی از اوربیتال‌های $Ta-5d$ و $Nb-5d$ است. برای ساختارهای نواری در نبود برهم‌کنش اسپین-مدار برای هر پنج مقدار x در مسیر $ZSS\Gamma$ ، چهار نقطه‌ی تقاطع نواری مشاهده شدند که در نمودارهای شکل (۲) مشخص هستند. این نقطه‌های برخوردی ناشی از برخورد نوارهای رسانش و نوارهای ظرفیت هستند. به دلیل نبود برهم‌کنش اسپین-مدار، نوارهای رسانش و نوارهای ظرفیت دارای تبهگنی دوگانه هستند. از این رو، نقطه‌های برخوردی دارای تبهگنی چهارگانه می‌شوند. بررسی ویژگی‌های اوربیتالی نوارهای رسانش و نوارهای ظرفیت در مسیر پرتقارن مشخص شده، نشان می‌دهد که ویژگی وارونی نواری در کل محدوده‌ی SS_1 نیز وجود دارد. ویژگی وارونی نواری در ساختار نواری این آلیاژها بین اوربیتال‌های d_{xz} و d_{yz} یا d_{xz} در اتم‌های Nb و Ta است. در این حالت ترتیب اوربیتالی نوارهای انرژی با حالت معمولی متفاوت است. هم‌چنین با بررسی ساختار نواری مشاهده می‌شود که در نزدیکی نقطه‌های برخوردی، نوارهای انرژی رفتار پاشندگی خطی از خود نشان می‌دهند.

جدول ۱ ثابت‌های شبکه a و c ، زاویه‌های α و γ بین آن‌ها و انرژی کل E_t برای یاخته‌ی یکه آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) با ساختار سه‌میلی.

نام ترکیب	$a(\text{Å})$	$c(\text{Å})$	α	γ	$E_t(eV)$
$TaSb$	۵/۲۰	۱۲/۶۹	$۱۰۱/۴۲^\circ$	۹۰°	-۳۵۳۷۵۶/۰۶
$Nb_{0.25}Ta_{0.75}Sb$	۵/۲۰	۱۲/۷۲	$۱۰۱/۴۲^\circ$	۹۰°	-۳۰۶۵۳۳/۵۶
$Nb_{0.5}Ta_{0.5}Sb$	۵/۲۱	۱۲/۷۰	$۱۰۱/۴۲^\circ$	۹۰°	-۲۵۹۳۱۱/۰۵
$Nb_{0.75}Ta_{0.25}Sb$	۵/۲۱	۱۲/۷۱	$۱۰۱/۴۲^\circ$	۹۰°	-۲۱۲۰۸۸/۵۴
$NbSb$	۵/۲۱	۱۲/۷۲	$۱۰۱/۴۲^\circ$	۹۰°	-۱۶۴۸۶۶/۰۳

با توجه به این که در تمام آلیاژها، اوربیتال‌های $Ta-5d$ و $Nb-5d$ تأثیر زیادی در نزدیکی انرژی فرمی دارند، برای بررسی دقیق‌تر ویژگی‌های الکترونی باید چگالی حالت‌های الکترونی و ساختار نواری در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار هم محاسبه شود (شکل ۳). بعد از محاسبه ویژگی‌ها در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار مشاهده شد که برای تمام پنج مقدار غلظت x ، چگالی حالت‌ها در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار چون حالت بدون برهم‌کنش اسپین-مدار (شکل ۲) بیشتر تحت تأثیر اوربیتال‌های $Ta-5d$ و $Nb-5d$ هستند و اتم Sb در مقایسه با اتم‌های Ta و Nb تأثیر کمتری دارد. همچنین، قطع شدن نوارهای انرژی به وسیله‌ی سطح فرمی و صفر نبودن چگالی حالت‌ها در انرژی فرمی نشان می‌دهد که تمام آلیاژهای مورد بررسی در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار دارای رفتار فلزی‌اند. در مورد ساختارهای نواری نیز اعمال برهم‌کنش اسپین-مدار سبب باز شدن شکاف در مسیر $ZSS1\Gamma$ در غلظت‌های $x=0, 0/25, 0/5, 0/75$ شده است ولی در غلظت $x=1$ ساختار نواری هم‌چنان دارای شکاف بسته است. بررسی دقیق‌تر در کل منطقه‌ی اول بریلوئن هم نشان داد که تنها برای غلظت $x=1$ شکاف‌های بسته وجود دارد. به دلیل وجود برهم‌کنش اسپین-مدار نقطه‌های برخوردی دارای تبهگنی دوگانه می‌شوند، ولی بررسی ساختار نواری در نزدیکی نقطه‌های برخوردی نشان می‌دهد که نوارهای انرژی در نزدیکی این نقطه‌ها هم‌چنان دارای پاشندگی خطی هستند.

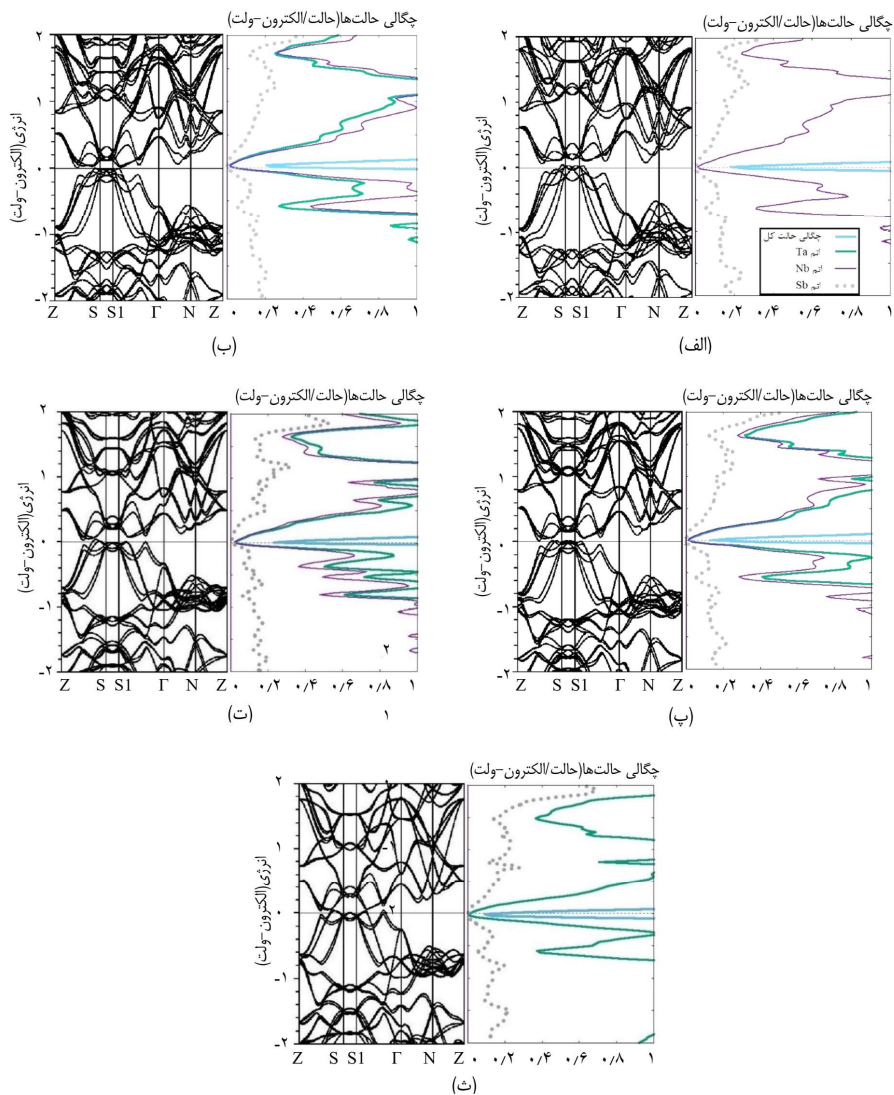




شکل ۲ ساختار نواری و نمودار چگالی حالت‌ها برای آلیاژهای

$Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) در نبود برهم کنش اسپین-مدار برای (الف) $x=0$

(ب) $x=0.25$ (پ) $x=0.5$ (ت) $x=0.75$ (ث) $x=1$.



شکل ۳ ساختار نواری و نمودار چگالی حالت‌ها برای آلیاژهای

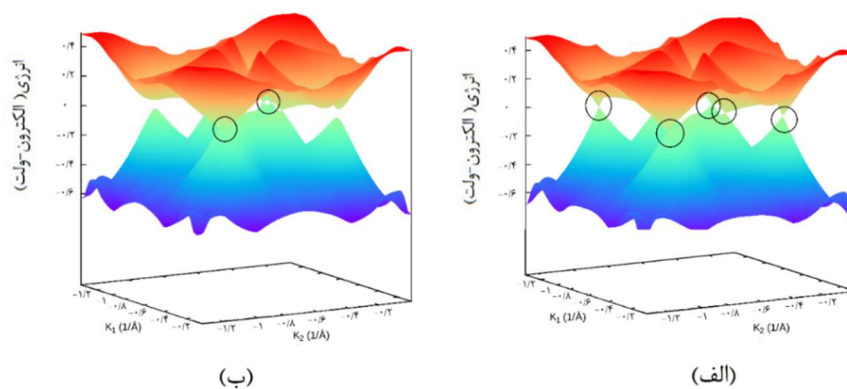
$Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) در حضور برهم کنش اسپین-مدار برای (الف) $x=0$

(ب) $x=0.25$ (پ) $x=0.5$ (ت) $x=0.75$ (ث) $x=1$.



۲.۳ ویژگی‌های توپولوژی

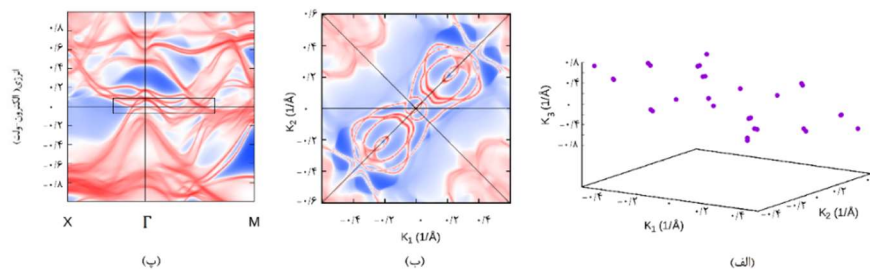
آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) به دلیل ساختار بلوری و گروه فضایی خود، دارای تقارن وارونی مکانی نیستند. همان‌گونه که در بررسی ساختار الکترونی این آلیاژها مشاهده شد، ساختار نواری این آلیاژها دارای ویژگی وارونی ناشی از اوربیتال‌های d_{z^2} و d_{xz} یا d_{yz} در اتم‌های Ta و Nb در کل مسیر SS_1 است. همچنین، این آلیاژها دارای تعدادی نقطه برخوردی در نزدیکی انرژی فرمی با ویژگی پاشندگی خطی و تبهگنی چندگانه هستند. این نقطه‌های برخوردی ناشی از برخورد نوارهای انرژی با اوربیتال‌های d_{z^2} و d_{xz} یا d_{yz} هستند که سبب ایجاد تبهگنی چهارگانه در نقطه‌ی برخورد می‌شوند. این آلیاژها در نبود برهم‌کنش اسپین-مدار، نامزد مناسبی برای فاز نیم‌فلز توپولوژی دیراک هستند. ساختار نواری سه بعدی این آلیاژها، که با برنامه‌ی محاسباتی واینر تولز محاسبه و رسم شده‌است، در نبود برهم‌کنش اسپین-مدار مخروط‌های دیراک و در رأس آن‌ها حضور فرمیون‌های دیراک را نمایش می‌دهد (شکل ۴-الف).



شکل ۴ ساختار نواری سه بعدی رسم شده برای آلیاژ $NbSb$ (الف) در نبود برهم‌کنش اسپین-مدار، (ب) در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار. نقطه‌های مشخص شده با دایره در شکل (الف) نشان دهنده‌ی فرمیون‌های دیراک و در شکل (ب) نشان دهنده‌ی جفت فرمیون‌های وایل هستند.

برای بررسی دقیق‌تر ویژگی‌های توپولوژی آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) تأثیر برهم‌کنش اسپین-مدار روی سامانه بررسی شده‌است. در این آلیاژها همان‌گونه که در ساختار نواری در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار نیز مشخص است، در حالت‌های $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$ فرمیون‌های دیراک با اعمال برهم‌کنش اسپین-مدار شکاف دار می‌شوند و فاز توپولوژی نیم‌فلز دیراک به فاز نیم‌فلز معمولی تبدیل می‌شوند.

اگرچه در حالت $x = 1$ شرایط متفاوت است. ساختار نواری سه بعدی که با استفاده از برنامه‌ی محاسباتی وانیرتولز و داده‌های برنامه‌ی وین برای این حالت ترسیم شده است، حضور جفت نقطه‌های برخوردی در نزدیکی انرژی فرمی را نمایش می‌دهد (شکل ۴-ب). در این حالت با اعمال برهم کنش اسپین-مدار آلیاژ با فاز توپولوژی نیم فلز دیراک به فاز توپولوژی نیم فلز وایل گذار فاز پیدا می‌کند. برای اطمینان از فاز نیم فلز توپولوژی وایل در غلظت $x = 1$ باید ناوردای توپولوژی را در نقطه‌های برخوردی بررسی کرد. این آلیاژ به دلیل گروه فضایی $1P_1$ بدون گروه‌های تقارنی و تنها دارای تقارن مرکزی است به همین دلیل ناوردهای توپولوژی چون پارته یا ناوردای توپولوژی آینه‌ایی و غیره برای بررسی آن قابل استفاده نیستند. ناوردای توپولوژی که با توجه به گروه فضایی این آلیاژها می‌توان مورد بررسی قرار داد، کایرالیته در نقطه‌های برخوردی است. با کمک برنامه‌ی محاسباتی وانیرتولز با مشخص شدن مکان دقیق فرمیون‌های وایل و محاسبه‌ی مرکزهای بار وانیر و حلقه‌های ویلسون، کایرالیته مربوط به این نقطه‌های برخوردی محاسبه شدند. محاسبه‌ها نشان دادند که کایرالیته نقطه‌های برخوردی $+1$ یا -1 هستند. فرمیون‌های وایل با کایرالیته $+1$ نمایان گر چشمه و با کایرالیته -1 نمایان گر چاهک برای انحنای بری هستند. مکان دقیق فرمیون‌های وایل در ترکیب $NbSb$ در شکل (۵-الف) نشان داده شده‌اند. تعداد این فرمیون‌ها ۱۶ جفت است و از آنجایی که آلیاژ مورد بررسی تنها دارای تقارن مرکزی است، بنابراین فرمیون‌های وایل در مکان \vec{k} با کایرالیته مشخص دارای تصویری در مکان $-\vec{k}$ با همان کایرالیته هستند.



شکل ۵ ویژگی‌های توپولوژی آلیاژ $NbSb$: (الف) مکان فرمیون‌های وایل درون منطقه‌ی اول بریلوئن، (ب) طیف حالت‌های سطحی برای سطح (۱۱۱) و (پ) ساختار نواری حالت سطحی برای سطح (۱۱۱).

از دیگر ویژگی‌های یکتای مرتبط با فاز توپولوژی نیم فلز وایل که در این مقاله بررسی شدند، حضور حالت‌های سطحی کمان فرمی روی سطح است. حضور نقطه‌های وایل با کایرالیته‌های مخالف



درون انبوهه سبب ایجاد کمان‌های فرمی حالت سطحی می‌شوند. برای بررسی حالت‌های سطحی، سطح (۱۱۱) در نظر گرفته شده است (شکل ۱-پ). تصویر نقطه‌های وایل روی این صفحه با کمان فرمی به هم متصل می‌شوند (شکل ۵-ب). در حقیقت فرمیون‌های وایل با کایرالیته‌های مخالف در ابتدا و انتهای کمان‌های فرمی قرار گرفته‌اند (شکل ۵-ب). از طرفی نقطه‌های وایل در ساختار نواری حالت سطحی، به شکل نقطه‌های برخورد نوارهای انرژی در نقطه‌ی Γ و اطراف آن مشخص می‌شوند (شکل ۵-پ). بررسی حضور کمان فرمی در نمودارهای طیف حالت سطحی و برخوردهای موجود در نوارهای انرژی حالت‌های سطحی، حضور نقطه‌های وایل درون انبوهه و وجود فاز توپولوژی نیم‌فلز وایل را در آلیاژ $NbSb$ تایید می‌کند.

۴. نتیجه‌گیری

در نیم‌فلزهای توپولوژی وایل حالت‌های کوانتومی دارای ویژگی‌های توپولوژی غیر بدیهی‌اند و کاربردهای قابل توجه‌ایی در صنعت اسپینترونیک دارند. به این منظور، مطالعه ترکیب‌هایی با فاز نیم‌فلز توپولوژی وایل می‌تواند اهمیت زیادی در فیزیک ماده چگال داشته باشد. بر این اساس با ساختن ترکیب‌ها با روش آلیاژسازی و مطالعه‌ی ویژگی‌های الکترونی و توپولوژی آن‌ها، می‌توان ساختارهایی را یافت که دارای این ویژگی یکتا و متمایز باشند. در این پژوهش آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) برای نخستین بار بررسی شدند. بخش اول این بررسی با استفاده از برنامه‌ی محاسباتی وین، که بر اساس روش تابعی چگالی است، انجام شدند. در این بخش بعد از محاسبه انرژی تشکیل و بررسی پایداری آلیاژها، ویژگی‌های ساختاری، چون پارامتر شبکه تعادلی و الکترونی و همچنین، چگالی حالت‌ها و ساختار نواری، آن‌ها مورد مطالعه قرار گرفته است. در بخش بعدی، ویژگی‌های توپولوژی این آلیاژها با استفاده از برنامه‌های واینر ۹۰ و واینرتولز، که بر اساس رهیافت تابع‌های واینر و روش تنگ‌بست هستند، محاسبه شدند. نتیجه محاسبه‌های ساختار نواری و برنامه‌های واینر ۹۰ و واینرتولز نشان دادند که آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) در نبود برهم‌کنش اسپین-مدار دارای ویژگی نیم‌فلز دیراک هستند. با اعمال برهم‌کنش اسپین-مدار نیم‌فلزهای دیراک در غلظت‌های ۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، $x = ۰$ به نیم‌فلزهای معمولی و در غلظت $x = ۱$ به نیم‌فلز وایل تغییر فاز می‌دهند. در حالت $x = ۱$ با بررسی کل منطقه‌ی اول بریلوئن مشاهده شد که آلیاژ دارای ۱۶ جفت فرمیون وایل با کایرالیته ۱+ و ۱- است. مکان تمام این نقطه‌های وایل محاسبه و نشان داده شد که همگی دور از

مسیرهای پر تقارن منطقه اول بریلونن هستند. همچنین طیف حالت‌های سطحی و کمان‌های فرمی آلیاژ با غلظت $x=1$ روی سطح (۱۱۱) محاسبه و رسم شدند.

منابع

- [1] Hasan. M. Z, Kane. C. L, "Colloquium: topological insulators", *Reviews of Modern Physics*, **82** , 3045-3067,2010.
- [2] Weyl. H, "Elektron und gravitation. I", *Zeitschrift für Physik*, **56** , 330-352,1929.
- [3] Gross. F, "Relativistic quantum mechanics and field theory", *John Wiley & Sons*,119-169, 2008.
- [4] Sun. Y, Wu. S.C, Yan. B, "Topological surface states and Fermi arcs of the noncentrosymmetric Weyl semimetals TaAs, TaP, NbAs, and NbP", *Physical Review B*, **92** , 335304-335328,2015.
- [5] Xu. S.Y, Alidous. N. t, Belopolski. I, Yuan. Z, Bian. G, Chang. T. R, Zheng. H, Strocov. V.N, Sanchez. D.S, Chang. G, "Discovery of a Weyl fermion state with Fermi arcs in niobium arsenide", *Nature Physics*, **11** , 748-754, 2015.
- [6] Chang. G, Wieder. B.J, Schindler. F, Sanchez. D.S, Belopolski. I, Huang. S. M, Singh. B, Wu. D, Chang. T. R, Neupert. T, Xu. S. Y, Lin. H, Hasan. M.Z, "Topological quantum properties of chiral crystals", *Nature Materials*, **17** , 978-985, 2018.
- [7] Wang. X, Zhang. M, "Layered topological semimetals for spintronics, in: Spintronic 2D Materials", *Elsevier*,**1**, 273-298, 2020.
- [8] Yan. B, Felser. C, "Topological materials: Weyl semimetals", *Annual Review of Condensed Matter Physics*, **8** , 337-354, 2017.
- [9] Chang. G, Wieder. B.J, Schindler. F, Sanchez. D.S, Belopolski. I, Huang. S.M, Singh. B, Wu. D, Chang. T. R, Neupert. T, Xu. S.Y, Lin. H, Hasan. M.Z, "Topological quantum properties of chiral crystals", *Nature Materials*, **17** , 978-985, 2018.
- [10] Wan. X, Turner. A.M, Vishwanath. A, Savrasov. S.Y, "Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates", *Physical Review B*, **83** , 205101-205110, 2011.
- [11] Xu. G, Weng. H, Wang. Z, Dai. X, Fang. Z, "Chern semimetal and the quantized anomalous Hall effect in HgCr_2Se_4 ", *Physical Review Letters*, **107** , 186806-186824, 2011.
- [12] Weng. H, Fang. C, Fang. Z, Bernevig. B.A, Dai. X, "Weyl Semimetal Phase in Noncentrosymmetric Transition-Metal Monophosphides", *Physical Review X*, **5** , 011029-011039, 2015
- [13] Lv. B, Weng. H, Fu. B, Wang. X.P, Miao. H, Ma. J, Richard. P, Huang. X, Zhao. L, Chen. G, "Experimental discovery of Weyl semimetal TaAs", *Physical Review X*, **5** , 217601-217606, 2015.
- [14] Dai. T, Li. Y, Zhao. L, Zhao. X, Zhong. J, Meng. L, "Alloying Driven Multifold Fermion-to-Weyl Semimetal Transition in $\text{CoSi}_{1-x}\text{A}_x$ (A= Ge, Sn)", *Physica Status Solidi (RRL)-Rapid Research Letters*, **16** , 2200115-2200123, 2022.
- [15] Su. Y.H, Shi. W, Felser. C, Sun. Y, "Topological Weyl semimetals in $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ alloys", *Physical Review B*, **97** ,155431-155439, 2018.
- [16] Huang. H, Jin. K. H, Liu. F, "Alloy engineering of topological semimetal phase transition in $\text{MgTa}_{2-x}\text{Nb}_x\text{N}_3$ ", *Physical Review Letters*, **120** , 136403-136410, 2018.
- [17] Kong. X, Li. L, Peeters. F.M, "Topological Dirac semimetal phase in Ge_xSn_y alloys", *Applied Physics Letters*, **112** , 251601-251609, 2018.



- [18] Kumar. P, Nagpal. V, Patnaik. S, "Chiral anomaly induced negative magnetoresistance and weak anti-localization in Weyl semimetal $Bi_{0.97}Sb_{0.03}$ alloy", *Journal of Physics: Condensed Matter*, **34**, 055601-055608, 2021.
- [19] Blaha. P, Schwarz. K, Tran. F, Laskowski. R, Madsen. G.K, Marks. L.D, "WIEN2k: An APW+ lo program for calculating the properties of solids", *The Journal of Chemical Physics*, **152**, 074101-074113, 2020.
- [20] Hohenberg. P, Kohn. W, "Density functional theory (DFT)", *Physical Review*, **136**, 864-871, 1964.
- [21] Mostofi. A.A, Yates. J.R, Lee. Y.S, Souza. I, Vanderbilt. D, Marzari. N, "wannier90: A tool for obtaining maximally-localised Wannier functions", *Computer Physics Communications*, **178**, 685-699, 2008.
- [22] Marzari. N, Mostofi. A.A, Yates. J.R, Souza. I, Vanderbilt. D, "Maximally localized Wannier functions: Theory and applications", *Reviews of Modern Physics*, **84**, 1419-1476, 2012.
- [23] Wu. Q, Zhang. S, Song. H.F, Troyer. M, Soluyanov. A.A, "WannierTools: An open-source software package for novel topological materials", *Computer Physics Communications*, **224**, 405-416, 2018.
- [24] Perdew. J.P, Burke. K, Ernzerhof. M, "Generalized gradient approximation made simple", *Physical Review Letters*, **77**, 3865-3868, 1996.
- [25] Smidstrup. S, Stradi. D, Wellendorff. J, Khomyakov. P.A, Vej-Hansen. U.G, Lee M.E, Ghosh. T, Jónsson. E, Jónsson. H, Stokbro. K, "First-principles Green's-function method for surface calculations: A pseudopotential localized basis set approach", *Physical Review B*, **96**, 195309-195326, 2017.
- [26] Brown. T.E, LeMay. H.E, Bursten. B.E, Murphy. C.J, Woodward. P.M, "Chemistry", *The central science*, **15**, Pearson Prentice Hall, 2021.
- [27] Lomnytska. Y.F, Kuz'ma. Y.B, "The Nb-Sb system", *Journal of Alloys and Compounds*, **413**, 114-117, 2006.



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



بررسی بهره‌وری سلول خورشیدی پروسکایتی با لایه‌ی فعال معدنی $RbGeBr_3$ و لایه‌های متفاوت جمع‌کننده الکترون و حفره^۱

شیمای ولی‌زاده^{۲*}، علی‌اصغر شکری^۳ و امیرعباس صبوری دودران^۴

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۱/۲۴

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۰۴/۱۹

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۶/۱۹

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال سیزدهم، پیاپی ۳۵، زمستان ۱۴۰۲

صص ۱۴۴ - ۱۶۱

چکیده:

امروزه سلول‌های خورشیدی پروسکایتی (PSCs)، در مقایسه با فناوری‌های فتوولتائیک موجود با سرعت قابل توجهی در حال پیشرفت است. در کار حاضر، تمرکز اصلی بر بررسی بهره‌وری دو ساختار متفاوت PSCs با لایه فعال پروسکایتی معدنی $RbGeBr_3$ است. محاسبات مبتنی بر الگوی اپتوالکترونیک سلول خورشیدی و حل معادلات پیوستگی چگالی بار و جریان با روش عددی المان محدود است. به منظور بهینه‌سازی بهره‌وری، ضخامت‌های لایه انتقال‌دهنده الکترون (ETL) و لایه فعال معدنی $RbGeBr_3$ تغییر داده شده است. نتایج محاسبات شبیه‌سازی شده برای سلول خورشیدی با ساختار اول $FTO/ITO/RbGeBr_3/PEDOT:PSS$ ، بالاترین بازدهی ۱۱/۳۷٪، با جریان مدار کوتاه $14/47 (mA/cm^2)$ و ولتاژ مدار باز ۰/۹۶ ولت و برای سلول خورشیدی با ساختار دوم $FTO/TiO_2/RbGeBr_3/Spiro-OMETAD/Au$ ، بهره‌وری ۱۰/۵۷٪ را نشان می‌دهد. در هر دو ساختار بیان شده، بالاترین بهره‌وری با در نظر گرفتن ضخامت‌ها برای لایه انتقال‌دهنده الکترون ۸۰ نانومتر و لایه فعال معدنی ۲۰۰ نانومتر است. نتایج این مقاله می‌تواند در طراحی سلول‌های خورشیدی نسل جدید مبتنی بر لایه‌های پروسکایتی معدنی مفید باشد.

واژگان کلیدی: سلول‌های خورشیدی پروسکایت، فتوولتائیک، ضریب جذب، بهره‌وری، ماده معدنی.

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.43433.1318

^۲ دانشجوی دکتری، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران (نویسنده مسئول). Email: shvalizadeh@student.pnu.ac.ir

^۳ استاد، گروه فیزیک نظری و نانو، دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا، تهران، ایران. Email: aashokri@alzahra.ac.ir

^۴ دانشیار، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران. Email: Sabouri@pnu.ac.ir

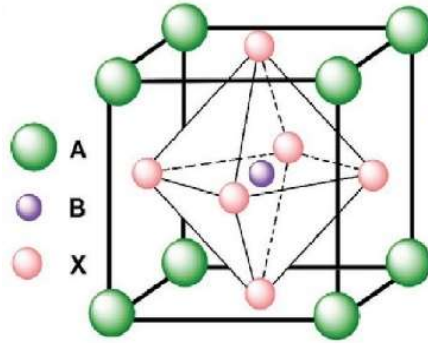


۱. مقدمه

امروزه نیاز به داشتن انرژی‌های پاک برای مصارف خانگی و صنعت چالشی بسیار مهم در علم و فناوری به شمار می‌رود. چرا که میزان مصرف انرژی جهان، در آینده‌ای نه چندان دور، بسیار بالا خواهد رفت، منابع شناخته شده انرژی چون نفت و زغال سنگ دیگر جوابگوی نیازهای بشر نخواهند بود و همزمان مسائل و مشکلات زیست محیطی نیز وجود خواهند داشت. از این رو، برای تأمین انرژی باید رویکردها را به سمت انرژی‌های پاک موجود در جهان هستی، تغییر دهیم. از جمله این انرژی‌ها، استفاده از انرژی گرمایی و نوری خورشیدی است، که به صورت رایگان، در اختیار ما قرار داده شده است (یک ساعت تابش خورشیدی، انرژی معادل $8/3 \times 10^{13}$ کیلووات تولید می‌کند) [۱]. در پی این رویکرد جدید، دانشمندان توانستند اولین بار در سال ۱۹۵۳ با استفاده از ماده سیلیکون تبدیل انرژی خورشیدی به انرژی الکتریکی را محقق سازند که اولین نسل سلول خورشیدی بوجود آمد [۲]. اگرچه استفاده از ماده سیلیکون خالص در صنعت هزینه‌بر است. این موضوع سبب شد که پژوهشگران در پی پیشرفت فناوری فتوولتائیک، در جهت استفاده هر چه بیشتر از انرژی خورشیدی، به همراه کاهش هزینه تولید و ساخت، حرکت نمایند. پیشرفت سریع نسل‌های بعدی این سلول‌ها که پا به عرصه فناوری فتوولتائیک گذاشتند، با وجود مزیت‌هایی که دارند، معایبی هم از خود نشان داده‌اند [۳-۹]. از سال ۲۰۱۴ سلول‌های خورشیدی پروسکایتی^۱ PSCs به دلیل سرعتی که در بالارفتن بازدهی در یک دهه اخیر از $3/8\%$ تا $25/5\%$ ، در مقایسه با دیگر نسل‌های فتوولتائیک قبلی به نمایش گذاشتند، مورد توجه بیشتر جوامع علمی قرار گرفتند [۶ و ۱۰]. این مواد دارای چندین مزیت چشمگیر هستند، که می‌توان به چند مورد از آن‌ها چون فراوانی بسیار در طبیعت، شکاف نواری مستقیم و مناسب، انرژی قیدی پایین اکسایتون، طبیعت بلوری با چگالی نقص پایین، تعادل انتقال الکترون-حفره با تحرک پذیری بالای بارها، ارزانی در تولید و ساخت و همچنین بازدهی بالای این سلول‌ها اشاره کرد [۱۱-۱۶]. اگرچه همچنان دارای معایبی چون ناپایداری در مقابل رطوبت و دما هستند [۱۷ و ۱۸]. پروسکایت‌ها در ترکیب‌های مختلف دارای ساختار مشابه هستند. شکل ۱، ساختار یک سلول واحد پروسکایت مکعبی با ترکیب ABX_3 (مانند $MAPbI_3$ ، $CsSnI_3$ ، $FAPbI_3$) را نشان می‌دهد که امروزه به عنوان یکی از بهترین مواد شناخته شده برای سلول‌های خورشیدی پروسکایتی است [۱۹ و ۲۰].

¹ Perovskite solar cells (PSCs)





شکل ۱ ساختار مکعبی یک پروسکایت با ترکیب ABX_3 [۱۹].

بیشترین سلول‌های خورشیدی پروسکایت ثبت شده در مقالات، سلول‌های آلنی- معدنی چون $MAPbI_3$ هستند که هنوز معایبی چون بی‌ثباتی ذاتی، ناپایداری دمایی و فوتوشیمیایی مؤلفه‌های آلنی را همراه دارند [۲۱-۲۵]. این معایب سبب شد توجه به سمت کاتیون‌های معدنی از قبیل K ، Rb و Cs به جای کاتیون‌های آلنی در یک سلول واحد پروسکایت در نظر گرفته شوند تا به توان یک سلول خورشیدی پروسکایتی کاملاً معدنی طراحی کرد که ویژگی‌های اپتوالکترونیک عالی‌تر و پایداری بهتری را از خود نشان دهند [۲۶]. در همین راستا با جایگزینی مواد معدنی چون سزیم بازدهی سلول‌های خورشیدی پروسکایت معدنی از ۲/۹٪ تا ۲۰/۸٪ در شش سال اخیر پیشرفت داشته است [۲۷ و ۲۸]. همچنین، آنالیزهای گرماسنجی حرارتی نشان می‌دهند که، پروسکایت‌هایی که شامل یک کاتیون آلنی می‌باشند، در دمای زیر ۱۲۵ سانتی‌گراد تجزیه می‌شوند، در حالی که تجزیه شدن پروسکایت معدنی در دمای بالای ۵۰۰ درجه سانتی‌گراد رخ می‌دهد [۲۹ و ۳۰]. نتایج بدست آمده دیگر، بیانگر این است که بیشتر مواد معدنی پروسکایتی پایین‌ترین رطوبت‌سنجی و بالاترین حالت دمایی و پایداری نوری را نسبت به مواد آلنی پروسکایت دارند [۳۱-۳۳]. در نهایت، با در نظر گرفتن اینکه، می‌توان ساختارهای پروسکایتی بسیاری تولید نمود و آن‌ها را در سلول‌های خورشیدی برای رسیدن به ساختارهایی با بهترین عملکرد استفاده کرد، هنوز راه زیادی پیش‌رو است.

در کار حاضر، ماده معدنی $RbGeBr_3$ به عنوان لایه فعال که جاذب نور است، در دو ساختار با لایه‌های متفاوت انتقال‌دهنده الکترون و انتقال‌دهنده حفره مورد بررسی قرار گرفته است. برای این ساختارها، با حل معادلات پیوستگی چگالی بار و جریان و با در نظر گرفتن ویژگی‌های اپتوالکترونیک مواد از راه شبیه‌سازی به روش عددی المان محدود با استفاده از نرم‌افزار کامسول،

چهار عامل مهم جریان مدار کوتاه^۱ (J_{sc})، ولتاژ مدار باز^۲ (V_{oc})، فاکتور پرشدگی^۳ (FF) و بازدهی (η_{max}) محاسبه شده و در نهایت با بدست آوردن بازدهی در هر دو ساختار، با هم مقایسه شده‌اند.

در بخش دوم، ابتدا طراحی و عملکرد کلی ساختار الکترواستاتیکی یک سلول خورشیدی پروسکایتی نشان داده شده‌است. در ادامه هر دو نوع ساختار با لایه فعال معدنی ($RbGeBr_3$) مطرح شده و سپس بر روش کار و محاسبات مروری انجام خواهد شد. در بخش سوم، روش انجام پژوهش و نتایج خروجی در هر دو ساختار و نمودارها آمده است. همچنین، در بخش چهارم به نتیجه‌گیری نهایی پرداخته می‌شود. نتایج این گزارش، برای مطالعه و ساخت سلول‌های خورشیدی پروسکایتی بر پایه مواد معدنی با ساختارهایی که بتوانند بازده بالاتری داشته باشند، داده‌های سودمندی را فراهم می‌سازد.

۲. طراحی ساختارهای متفاوت PSCs با لایه فعال معدنی $RbGeBr_3$

۲-۱ عملکرد کلی ساختار یک سلول خورشیدی پروسکایتی

شکل ۲، عملکرد ساختار الکترواستاتیکی یک سلول خورشیدی پروسکایتی را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، این ساختار از چندین لایه با مواد مختلف تشکیل شده است. لایه اول از یک ماده کاملاً شفاف (TCO) با شکاف نواری بزرگ (الکترو شفاف) تشکیل شده است [۳۴]. طیف نور خورشید پس از عبور از لایه شفاف، به لایه فعال می‌رسد، که خود متشکل از دو قسمت است: لایه انتقال‌دهنده الکترون^۴ (ETL) و لایه جاذب نور. لایه‌های فعال، از مواد نیم‌رسانا با شکاف‌های نواری مختلف تشکیل شده‌اند تا عبور و سپس جذب بیشترین دامنه طیفی نور خورشید در آن‌ها اتفاق بیافتد. نور با جذب شدن در لایه جاذب نور، حامل‌های بار آزاد را تولید می‌کند و سپس، حامل‌های بار آزاد تولید شده، به سمت لایه‌های انتقال‌دهنده الکترون حرکت می‌کنند. این الکترون‌ها از پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده^۵ (LUMO) لایه جاذب نور به پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده لایه ETL منتقل می‌شوند و حفره‌های تشکیل شده از بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده^۶ (HOMO) لایه جاذب نور به بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده

¹ Short circuit current (J_{sc})

² Open circuit voltage (V_{oc})

³ Filling factor (FF)

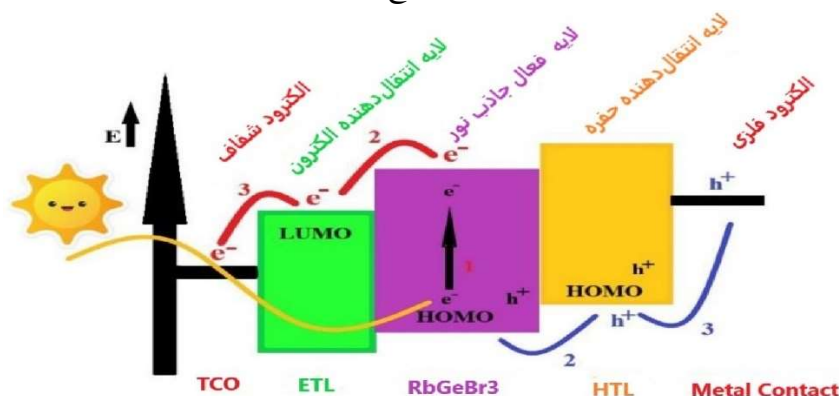
⁴ Electron transfer layer (ETL)

⁵ Lowest unoccupied molecular orbital (LUMO)

⁶ Highest occupied molecular orbital (HOMO)



لایه انتقال‌دهنده حفره^۱ (HTL) گذار می‌کند و در نهایت توسط الکترودهای جمع‌کننده، که اغلب فلزاتی از قبیل طلا، نقره و یا گرافن هستند، جمع‌آوری می‌شوند.



شکل ۲ عملکرد کلی ساختار الکترواستاتیکی یک سلول خورشیدی پروسکایتی PSCs.

۲-۲ طراحی دو نوع ساختار سلول خورشیدی پروسکایتی

امروزه، با توجه به اینکه کارهای کمتری در رابطه با سلول‌های خورشیدی کاملاً معدنی صورت گرفته شده است، فرصت بی‌شماری برای پژوهش در رابطه با سلول‌های خورشیدی بر پایه‌ی مواد پروسکایتی وجود دارد. به تازگی کارهایی در رابطه با Cs در ترکیبات ساختاری پروسکایت در PSCs انجام شده است و بازدهی این سلول‌ها در ساختارهای متفاوت از ۲٪/۹ تا ۲۰٪/۸ گزارش شده است [۲۶-۲۸]. این پژوهش‌ها ما را بر این داشت تا Rb را در ترکیب ساختاری یک سلول واحد مکعبی پروسکایت، $RbGeBr_3$ ، در ساختار سلول‌های خورشیدی پروسکایتی بررسی کنیم، تا ببینیم میزان تولید چگالی جریان و بازدهی نهایی آن به چه مقدار خواهد بود. در کار پیش‌رو، هدف بررسی ماده معدنی $RbGeBr_3$ به عنوان لایه جاذب نور، در دو ساختار متفاوت در یک سلول خورشیدی است. همچنین، مشخصات اولیه الکترونی و اپتیکی ترکیب $RbGeBr_3$ که در شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گرفته، از محاسبات نظریه تابعی چگالی^۲ (DFT) استخراج شده است [۳۵]. نظریه تابعی چگالی، نظریه‌ای در چارچوب مکانیک کوانتومی برای بررسی ساختار الکترونی مواد در سیستم‌های بس‌ذره‌ای است. همچنین در این نظریه با معرفی توابع انرژی و وردش‌گیری از آن‌ها، ویژگی‌های ساختاری، ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی ماده از قبیل، چگالی الکترون، ساختار و شکاف نواری ماده مورد نظر محاسبه می‌شود. در این پژوهش، دو ساختار مختلف با داشتن لایه

^۱ Hole transfer layer (HTL)

^۲ Density functional theory (DFT)

جاذب نور ثابت $RbGeBr_3$ در نظر گرفته شده است؛ که هر دو نوع ساختار PSCs مورد نظر، دارای ساختاری مشابه با شکل (۲) هستند. به صورتی که، در ساختار اول ETL ماده نیم رسانا ITO و HTL ماده آلی PEDOT:PSS و در ساختار دوم، ETL دارای ماده نیم رسانا TiO_2 و HTL شامل ماده آلی Spiro_MeOTAD است [۳۶].

چند لایه‌ای‌های مورد نظر به ترتیب در ساختار اول و ساختار دوم عبارتند از: FTO/ TiO_2 / $RbGeBr_3$ / Spiro- و FTO/ ITO/ $RbGeBr_3$ / PEDOT:PSS/ Au OMETAD/ Au. لایه جاذب نور، ماده پروسکایت معدنی، $RbGeBr_3$ ، دارای شکاف نواری مستقیم ۱/۴۹ الکترون ولت است. به صورتی که، می‌تواند ویژگی‌های اپتیکی خوبی را در گستره‌ی طیف نور مرئی نشان دهد. این ماده در صفحه بلوری (۱۰۰)، جرم مؤثر الکترونی ۱/۳۱ و جرم مؤثر حفره ۰/۱۸ را نسبت به جرم الکترون ساکن دارد [۳۵]. جرم‌های مؤثر، تأثیر مستقیمی بر روی تحرک پذیری الکترون‌ها و حفره‌ها دارند [۳۷]. کمیت‌های فیزیکی اولیه این مواد که به عنوان لایه‌های مختلف برای انجام این پژوهش مورد نیاز هستند در جدول (۱) آمده است: [۳۸] TiO_2 [۳۹]، [۴۰-۴۲] Spiro_MeOTAD [۴۳-۴۵]، PEDOT:PSS [۳۸] و [۴۶]. همچنین، در جدول (۱)، الکترون‌خواهی χ ، انرژی شکاف نواری E_g ، ثابت دی‌الکتریک ϵ_r ، چگالی نوار رسانش N_c ، چگالی نوار ظرفیت N_v ، چگالی دهنده الکترون N_a و چگالی پذیرنده الکترون N_d آمده است. همچنین μ_h و μ_e تحرک پذیری الکترون و حفره، و τ_h ، τ_e طول عمر الکترون‌ها و حفره‌ها هستند.

جدول ۱ مشخصات فیزیکی مواد لایه‌ها در ساختار سلول‌های خورشیدی پروسکایتی (PSCs).

	ETL	ETL	HTL	HTL
پارامترها	TiO_2	ITO	Spiro_MeOTAD	PEDOT: PSS
ضخامت لایه‌ها (nm)	۱۰۰	۱۰۰	۳۰۰	۳۰۰
χ (eV)	۴	۴/۸	۲/۴۵	۲/۹
E_g (eV)	۳/۲	۳/۶۵	۳	۲/۲۰
ϵ_r	۹	۸/۹	۳	۳
N_c (cm^{-3})	10^{19}	10^{18}	10^{20}	$2/2 \times 10^{15}$
N_v (cm^{-3})	10^{19}	10^{18}	10^{20}	$1/8 \times 10^{18}$



	ETL	ETL	HTL	HTL
$N_a (cm^{-3})$	-	-	3×10^{18}	3.7×10^{14}
$N_d (cm^{-3})$	5×10^{19}	10^{20}	-	-
$\mu_e \left(\frac{cm^2}{V.s} \right)$	۰/۰۲	۱۰	۲	2×10^{-2}
$\mu_h \left(\frac{cm^2}{V.s} \right)$	۲	۱۰	۰/۰۱	2×10^{-4}
$N_t (cm^{-3})$	10^{15}	10^{19}	10^{15}	10^{15}
$\tau_e, \tau_h (ns)$	۵،۲	۵،۲	۰/۱، ۰/۱	۰/۱، ۰/۱

۳-۲ روش محاسبات

با استفاده از الگوی اپتوالکترونیک در نیم‌رساناها و روش عددی المان محدود مبتنی بر شبیه‌سازی نرم افزار کامسول، نتایج مربوط به دو نوع ساختار PSCs را در اینجا بیان می‌کنیم. در الگوی اپتوالکترونیک رفتار ماده مورد نظر در برابر تابش نور فرودی از راه معادلات زیر بدست می‌آیند. در ابتدا باید ضریب جذب $\alpha(\omega)$ ماده که نشان‌دهنده جذب ماده در طول موج‌های مختلف طیف نور خورشید است را بدست آورد. ضریب جذب از رابطه زیر تعیین می‌شود [۴۷]:

$$\alpha(\omega) = \frac{2\pi\omega\sqrt{-\text{Re}(\omega) + |\varepsilon|}}{c\sqrt{2}} \quad (1)$$

در این رابطه، ω فرکانس طیف نور تابشی، $|\varepsilon|$ اندازه ثابت گذردهی محیط مادی و c سرعت نور را نشان می‌دهد. ضریب جذب طیف خورشید مواد پروسکایتی اغلب از مرتبه‌ی $[cm^{-1}] 10^5$ هستند. توجه به ضریب جذب مواد، برای بدست آوردن عمق نفوذ بسیار حائز اهمیت است؛ چرا که عمق نفوذ برابر با معکوس ضریب جذب می‌باشد. با بدست آوردن عمق نفوذ ماده مورد نظر، می‌توان کمینه ضخامت لازم را، برای جذب بیشترین طیف نوری محاسبه کرد. معادله (۲)، ضریب شکست کلی ماده را نشان می‌دهد که متشکل از ضریب شکست حقیقی $n(\omega)$ ، که بیانگر انعکاس نور از ماده است و قسمت موهومی $k(\omega)$ که عامل بسیار مهمی در شبیه‌سازی سلول‌های خورشیدی است و نقش جذب طیف نور خورشید در ماده را بر عهده دارد [۴۷]:

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \quad (2)$$

ضریب انعکاس $R(\omega)$ که مقدار انعکاس نور از سلول را مشخص می‌نماید [۴۷]:



$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (۳)$$

و در نهایت هدایت اپتیکی $\sigma(\omega)$ ماده نمایش داده می شود [۴۷]:

$$\sigma(\omega) = -\frac{i\omega}{4\pi} \varepsilon(\omega) \quad (۴)$$

با حل معادلات پیوستگی پواسون در مطالعه نیم رساناها و با در نظر گرفتن آمار فرمی-دیراک می توان خروجی های مورد نظر در رابطه با PSCs را محاسبه کرد. معادله (۵) معادله پیوستگی چگالی بار آزاد را بیان می کند [۳۸ و ۴۸]:

$$\nabla \cdot (-\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r \cdot \nabla V) = \rho \quad (۵)$$

که ε_r ضریب دی الکتریک ماده و ε_0 ثابت گذردهی خلا و پتانسیل الکترواستاتیکی را نشان می دهد. چگالی بار عبوری از یک سلول خورشیدی را می توان با استفاده از معادله (۶) محاسبه کرد [۳۸ و ۴۸]:

$$\rho_+ = q(p - n + N_d^+ - N_a^-) \quad (۶)$$

که در آن، q بار الکتریکی، p چگالی حفره ها، n چگالی الکترون ها، N_d^+ چگالی ناخالصی الکترون های یونیزه شده در سیستم توسط ماده دهنده الکترون ETL و N_a^- چگالی ناخالصی الکترون های یونیزه شده در سیستم به کمک ماده پذیرنده الکترون که در نقش ماده جاذب نور و HTL هستند را، نشان می دهد. چگالی حفره ها و الکترون ها را با استفاده از معادله (۷) می توان

$$n = N_c e^{\frac{-E_c - E_F}{k_B T}}, p = N_v e^{\frac{E_v - E_F}{k_B T}} \quad (۷)$$

محاسبه کرد. به صورتی که، k_B ثابت بولتزمن و T دمای سلول خورشیدی است، که اغلب ۳۰۰ کلوین در نظر گرفته می شود. E_F انرژی فرمی ماده مورد نظر و E_c و E_v انرژی های نوار رسانش و نوار ظرفیت هستند. افزون بر آن، چگالی حالات مؤثر نوار رسانش و نوار ظرفیت به ترتیب از عبارت های $N_p = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$ و $N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$ محاسبه می شود. با استفاده از روابط پیوستگی در حالت ایستا، چگالی جریان الکترون و حفره به ترتیب با $\nabla \cdot \vec{J}_p = 0$ و $\nabla \cdot \vec{J}_n = 0$ مشخص می شوند. با توجه به اثرات میدان الکتریکی، غلظت حامل ها و گرادیان دما می توان این چگالی ها را در یک سلول خورشیدی به صورت زیر محاسبه کرد [۴۸]:

$$\vec{J}_n = qn\mu_n \nabla E_c + qD_n \nabla n - qnD_n \nabla \ln(N_c) + qnD_{n,th} \nabla \ln(T) \quad (۸)$$

در عبارت اول، μ_n تحرک پذیری الکترون، ∇E_c گرادیان انرژی نوار رسانش ماده نیم رسانا، D_n ضریب رانشی الکترون و بیانگر جریان رانشی در سلول خورشیدی است. مجموع جملات دوم و سوم بیانگر جریان بدست آمده به دلیل گرادیان جمعیت الکترونی است و جمله آخر نیز جریان



پخش‌ی به دلیل تغییرات دما، در سلول را نشان می‌دهند. همچنین، رابطه مشابهی برای چگالی جریان حفره بر اساس معادله (۸) وجود دارد، با این تفاوت که در آن چگالی حفره p و تحرک‌پذیری حفره μ_p است [۴۸].

$$\vec{J}_p = qp \cdot \mu_p \cdot \nabla E_v + qD_p \nabla p - qpD_p \nabla \ln(Nv) + qpD_{p,th} \nabla \ln(T) \quad (۹)$$

در رابطه (۷)، $E_c = -(V + \chi_0)$ بیانگر انرژی نوار رسانش است؛ که به اندازه‌ی انرژی الکترون خواهی χ_0 از ولتاژ خلاء پایین‌تر است. $E_v = -(V + \chi_0 + E_{g,0})$ نیز انرژی نوار ظرفیت است؛ که با اندازه‌ی انرژی شکاف نوری ماده از انرژی نوار رسانش بالاتر است [۳۹ و ۴۸]. با در نظر گرفتن تمام معادلات بیان شده و حل معادلات پیوستگی در یک نیم‌رسانا و در نظر گرفتن ویژگی‌های اپتیکی مواد مورد استفاده در PSCs، معادلات زیر برای بدست آوردن نتایج نهایی شبیه‌سازی سلول خورشیدی پروسکایتی محاسبه می‌شوند [۴۹]:

$$I = I_{ph} - I_D = I_{ph} - I_0 \left[\exp \left[\frac{eV}{k_B T_c} \right] - 1 \right] \quad (۱۰)$$

که در آن، I بیانگر جریان خالص، از تفاوت بین جریان فوتونی و جریان ایده‌آل دیود I_D ، نتیجه می‌شود. I_0 ، جریان اشباع تاریکی است که بسیار به دما وابسته است. جریان تولید شده در یک سلول خورشیدی، بسیار به ولتاژ خارجی به کار رفته و مقدار جذب نور در سلول بستگی دارد. زمانی که در سلول ولتاژ صفر است؛ یعنی سلول معادل یک مدار کوتاه است، و چگالی جریان در بیشترین مقدار خود قرار دارد، که به آن چگالی جریان مدار کوتاه (J_{sc}) می‌گویند. زمانی که جریان عبوری در سلول خورشیدی صفر است، سلول معادل یک مدار باز است؛ یعنی ولتاژ در بیشترین مقدار خود قرار دارد که به آن، ولتاژ مدار باز می‌گویند. که ولتاژ مدار باز با استفاده از معادله (۱۱) بدست می‌آید [۴۹]:

$$V_{oc} = \left(\frac{k_B T}{q} \right) \ln \left(\frac{J_{sc}}{J_0} \right) \quad (۱۱)$$

J_0 برابر است با، اختلاف چگالی جریانی که به ولتاژ اعمال شده به سیستم وابسته است و چگالی جریانی که به این ولتاژ اعمالی وابسته نیست. در همین راستا، توان خروجی سلول خورشیدی، از حاصل ضرب بیشینه جریان و بیشینه ولتاژ تولید شده در سلول $P_{max} = I_{max} V_{max}$ و بیشینه جریان الکتریکی از رابطه $I_{max} = \frac{eV_{max}}{k_B T_c + eV_{max}} (I_{sc} + I_D)$ محاسبه می‌شوند. با این ملاحظات، بازدهی سلول را می‌توان از رابطه:

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} = \frac{I_{max} V_{max}}{P_{in}} \quad (۱۲)$$

تعیین کرد. که P_{in} توان ورودی نور به سلول خورشیدی است و در هر PSCs به ازاء یک سانتی‌متر مربع مقداری برابر ۱۰۰ میلی‌وات دارد [۴۹].



۳. روش کار و نتایج

در این مقاله هدف بدست آوردن بهینه‌ترین ساختار ممکن طراحی شده، برای رسیدن به بالاترین بازدهی از میان دو ساختار زیر است:

۱) $FTO/ITO/RbGeBr_3/PEDOT:PSS/Au$

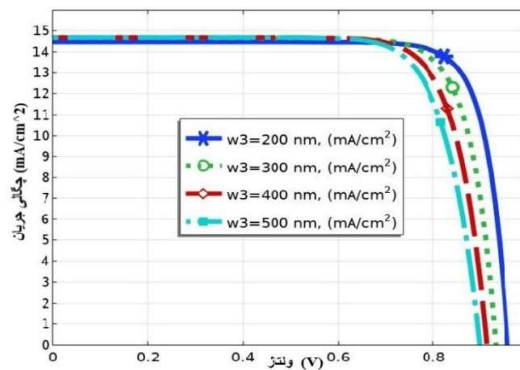
۲) $FTO/TiO_2/RbGeBr_3/Spiro-OMeTAD/Au$

برای بهینه کردن هر دو ساختار PSCs بیان شده، ضخامت لایه انتقال‌دهنده حفره روی ۳۰۰ نانومتر ثابت در نظر گرفته شده است. ضخامت لایه‌ی انتقال‌دهنده الکترون از ۸۰ تا ۱۱۰ نانومتر و ضخامت لایه فعال معدنی جاذب نور $RbGeBr_3$ از ۲۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر تغییر کرده است. همچنین، چهار عامل اصلی پارامترهای سلول‌های خورشیدی J_{SC} ، V_{OC} ، FF و PCE برای هر دو ساختار محاسبه شده‌اند. با استفاده از نتایج این چهار عامل اصلی می‌توان بازدهی نهایی هر دو ساختار را بدست آورده و در نهایت آن‌ها را با هم مقایسه کرد. نتایج محاسبات، در جدول‌های (۲) و (۳)، برای هر دو ساختار نشان داده شده است. در این مطالعه طول نفوذ الکترون‌ها و حفره‌ها مقدار ۱۰۰ نانومتر در نظر گرفته شده است [۳۶].

۳-۱ نتایج محاسبه شده برای هر ساختار

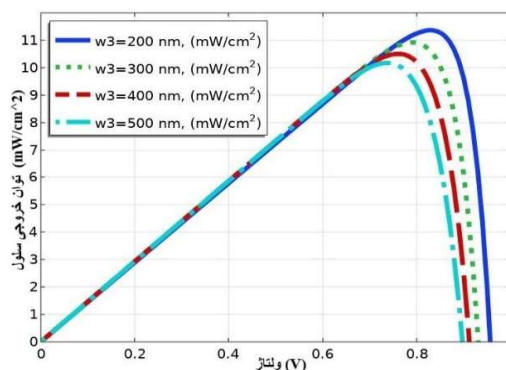
ساختار اول: $FTO/ITO/RbGeBr_3/PEDOT:PSS/Au$

در ساختار اول، ITO به عنوان لایه ETL و PEDOT:PSS نقش لایه HTL را دارند. در شبیه‌سازی، ضخامت لایه ETL از ۸۰ تا ۱۱۰ نانومتر و ضخامت لایه فعال جاذب نور از ۲۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر افزایش داده شده است. نتایج بدست آمده، در شکل (۳) و شکل (۴)، به صورت نمودارهای چگالی جریان_ولتاژ و توان_ولتاژ به ترتیب رسم شده‌اند.



شکل ۳ نمودار جریان - ولتاژ.





شکل ۴ نمودار توان-ولتاژ.

در شکل (۳) و شکل (۴)، ضخامت ۸۰ نانومتر برای لایه انتقال‌دهنده الکترون ITO ثابت نگه داشته شده و ضخامت لایه جاذب نور نیز از ۲۰۰ به ۵۰۰ نانومتر تغییر داشته است. در این شرایط، زمانی که ضخامت لایه جاذب نور ۲۰۰ نانومتر است: در شکل (۳)، سلول خورشیدی، چگالی جریان مدار کوتاه با مقدار $14/47 \left(\frac{mA}{cm^2}\right)$ را تولید کرده است، که بسیار به تابش نور و میزان جذب آن به کمک لایه جاذب نور وابسته است. این در شرایطی است که سلول معادل یک مدار کوتاه در نظر گرفته می‌شود که بیشترین مقدار جریان را تولید می‌کند. زمانی که مدار سلول باز است، هیچ جریانی در سلول تولید نمی‌شود و ولتاژ در بیشترین مقدار خود قرار می‌گیرد که در این شرایط، ولتاژ مدار باز در حدود $0/96 (V)$ است. زمانی که سلول مدار کوتاه و یا مدار باز است، توان تولیدی سلول خورشیدی (جریان در ولتاژ) صفر است. در حالی که وقتی سلول خورشیدی را معادل یک قطعه نوری که شامل مقاومت‌های سری و موازی و یک ولتاژ مثبت اعمال شده در آن را در نظر بگیریم، سلول دارای یک پیشینه توان است که برابر حاصل پیشینه جریان در پیشینه ولتاژ است.

با توجه به شکل (۴)، مشاهده می‌شود که بیشترین توان در حدود $11/3 \left(\frac{mW}{cm^2}\right)$ قرار دارد. در نتیجه، با در نظر گرفتن توان ورودی نور خورشید در هر سانتی‌متر مربع از یک سلول خورشیدی، بازدهی نهایی $11/37\%$ محاسبه شده است. در بقیه موارد با ثابت ماندن ضخامت لایه ETL در ۸۰ نانومتر و بیشتر شدن ضخامت لایه جاذب نور از ۲۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر، جریان مدار کوتاه، در حدود $\left(\frac{mA}{cm^2}\right)$ $0/2$ افزایش یافته و ولتاژ مدار باز کاهش بسیار کمی داشته است. در شکل (۴)، توان الکتریکی تولیدی سلول، کاهشی در بازه‌ی $1 \left(\frac{mW}{cm^2}\right)$ تا $2 \left(\frac{mW}{cm^2}\right)$ را نشان می‌دهد. همچنین، در حالتی که لایه ETL، ۸۰ نانومتر و لایه فعال جاذب نور ۵۰۰ نانومتر است، بازدهی نهایی به $10/17\%$ کاهش

می‌یابد. در ادامه محاسبات با افزایش ضخامت لایه ETL به ۹۰، ۱۰۰ و ۱۱۰ نانومتر، جریان مدار کوتاه کاهشی در بازه $(\frac{mA}{cm^2})$ ۲/۷ تا $(\frac{mA}{cm^2})$ ۲ را نشان می‌دهد، در حالی که کاهش ناچیزی در مقدار ولتاژ مدار باز مشاهده می‌شود (جدول (۲)). این کاهش جریان الکتریکی در سلول، به این دلیل است که با بیشتر شدن ضخامت لایه ETL، باز ترکیب بیشتری در فوتوالکترون‌های تولید شده در سطح مشترک بین لایه ETL و لایه معدنی جاذب نور رخ می‌دهد. با بالا رفتن ضخامت لایه ETL به ۱۱۰ نانومتر و لایه جاذب نور به ۵۰۰ نانومتر برای بهره‌وری، کاهشی در حدود ۵/۵ واحد محاسبه شده است.

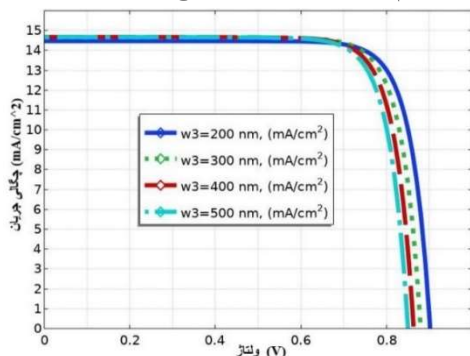
جدول ۲ عوامل قراردادی در PSCs محاسبه شده برای ساختار اول با ثابت نگه داشتن ضخامت لایه ETL در هر مرحله و تغییرات در ضخامت لایه HTL (از ۲۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر).

ضخامت لایه انتقال دهنده الکترون (نانومتر)	ضخامت لایه جاذب نور (نانومتر)	$J_{sc} (\frac{mA}{cm^2})$	$V_{oc} (V)$	FF	PCE (%)
۸۰	۲۰۰	۱۴/۴۷	۰/۹۶	۰/۸۱	۱۱/۳۷
۸۰	۳۰۰	۱۴/۶۶	۰/۹۳	۰/۸۰	۱۰/۹۲
۸۰	۴۰۰	۱۴/۶۷	۰/۹۱	۰/۷۸	۱۰/۵۰
۸۰	۵۰۰	۱۴/۶۷	۰/۸۹	۰/۷۷	۱۰/۱۷
۹۰	۲۰۰	۱۱/۶۸	۰/۹۶	۰/۸۱	۹/۱۶
۹۰	۳۰۰	۱۱/۸۳	۰/۹۲	۰/۸۰	۸/۸۱
۹۰	۴۰۰	۱۱/۸۴	۰/۹۰	۰/۷۹	۸/۴۸
۹۰	۵۰۰	۱۱/۸۴	۰/۸۹	۰/۷۷	۸/۲۱
۱۰۰	۲۰۰	۹/۴۳	۰/۹۵	۰/۸۲	۷/۳۷
۱۰۰	۳۰۰	۹/۵۴	۰/۹۲	۰/۸۰	۷/۱۰
۱۰۰	۴۰۰	۹/۵۵	۰/۹۰	۰/۷۹	۶/۸۴
۱۰۰	۵۰۰	۹/۵۶	۰/۸۹	۰/۷۷	۶/۶۳
۱۱۰	۲۰۰	۷/۶۱	۰/۹۵	۰/۸۲	۵/۹۴
۱۱۰	۳۰۰	۷/۷۰	۰/۹۱	۰/۸۱	۵/۷۲
۱۱۰	۴۰۰	۷/۷۱	۰/۸۹	۰/۸۰	۵/۵۱
۱۱۰	۵۰۰	۷/۷۲	۰/۸۹	۰/۷۷	۵/۳۵

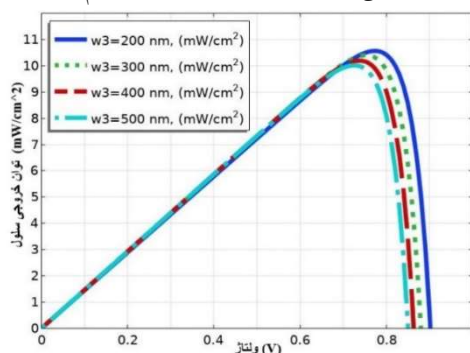
با توجه به نتایج بدست آمده (جدول (۲))، با ثابت ماندن ضخامت لایه ETL و افزایش ضخامت لایه جاذب نور، ولتاژ مدار باز و بازدهی نهایی کاهش می‌یابد، اگرچه جریان مدار کوتاه افزایش کمی را تجربه می‌نماید. این نتیجه، در تمام شبیه‌سازی‌های انجام شده در ساختار اول مشاهده می‌شود. از این رو، می‌توان این‌گونه نتیجه گرفت که، بیشترین بهره‌وری در شرایطی است که ETL دارای ضخامت ۸۰ نانومتر و لایه جاذب نور دارای ضخامت ۲۰۰ نانومتر است.

ساختار دوم: FTO/ TiO₂/ RbGeBr₃/ Spiro-OMeTAD/ Au

در ساختار دوم، لایه انتقال‌دهنده الکترون به TiO₂ و لایه انتقال‌دهنده حفره به Spiro_MeOTAD تغییر کرده‌اند. و در ادامه، دقیقاً مشابه با شبیه‌سازی ساختار اول، ضخامت لایه‌ی انتقال‌دهنده الکترون را از ۸۰ تا ۱۱۰ نانومتر و لایه فعال را از ۲۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر افزایش داده و محاسبات انجام شده است. نمودارهای خروجی چگالی جریان_ولتاژ (J-V) و توان_ولتاژ (P-) در شکل‌های (۵) و (۶) رسم شده‌اند. در نهایت، نتایج در جدول (۳)، گزارش شده‌اند.



شکل ۵ نمودار جریان-ولتاژ ساختار دوم.



شکل ۶ نمودار توان-ولتاژ ساختار دوم.



در ساختار دوم، شاهد کاهش چشمگیری در مقدار جریان مدار کوتاه نسبت به ساختار اول نبودیم. در حالی که، بیشینه بازدهی نهایی در این ساختار، ۱۰/۵۷٪ محاسبه شده است. در نمودارهای (۵) و (۶)، شبیه‌سازی با ضخامت ۸۰ نانومتر ثابت برای ETL و تغییر ضخامت لایه جاذب نور انجام شده است. در شرایطی که ضخامت لایه جاذب معدنی ۲۰۰ نانومتر است، مشاهده می‌شود که چگالی جریان مدار کوتاه برابر $(\frac{mA}{cm^2})$ ۱۴/۴۵ و ولتاژ مدار باز در بیشینه مقدار خود، حدود ۰/۹۰ ولت است. در همین راستا، در شکل (۶)، نمودار توان الکتریکی تولید شده توسط سلول را نشان می‌دهد که بیشینه توان در حدود $(\frac{mW}{cm^2})$ ۱۰/۵ و حاصل بیشینه جریان در بیشینه ولتاژ است. در بقیه موارد، با افزایش ضخامت لایه جاذب نور از ۲۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر، جریان مدار کوتاه در حدود $(\frac{mA}{cm^2})$ ۰/۱ افزایش داشته، اگرچه ولتاژ مدار باز تغییر بسیار ناچیزی داشته است. همچنین، در شکل ۶، توان الکتریکی تولیدی سلول، کاهشی در حدود $(\frac{mW}{cm^2})$ ۱/۲ را نشان می‌دهد. در نهایت بازدهی در شرایطی که ضخامت لایه ETL، ۸۰ نانومتر و ضخامت لایه فعال جاذب نور ۵۰۰ نانومتر است، به ۱۰/۰۱٪ کاهش یافته است. در جدول (۳)، تنها نتایج محاسبه شده برای بالاترین بازدهی ارائه شده است.

با توجه به نتایجی که در ساختار دوم محاسبه شد، در این ساختار هم با افزایش ضخامت لایه انتقال‌دهنده الکترون از ۸۰ نانومتر تا ۱۱۰ نانومتر و ضخامت لایه جاذب نور از ۲۰۰ نانومتر تا ۵۰۰ نانومتر، بازدهی نهایی کاهش یافته است. در نتیجه در این ساختار هم، بیشترین بازدهی مربوط به ضخامت ۸۰ نانومتر برای لایه ETL و ۲۰۰ نانومتر برای لایه جاذب نور است که، مقدار ۱۰/۵۷٪ محاسبه شد.

جدول ۳ نتایج محاسبه شده برای چهار عامل قراردادی در ساختار دوم با توجه به اینکه لایه ETL در ۸۰ نانومتر ثابت و ضخامت لایه جاذب نور از ۲۰۰ نانومتر تا ۵۰۰ نانومتر افزایش می‌یابد.

ضخامت لایه انتقال‌دهنده الکترون (نانومتر)	ضخامت لایه جاذب نور (نانومتر)	$J_{sc}(\frac{mA}{cm^2})$	$V_{oc}(V)$	FF	PCE (%)
۸۰	۲۰۰	۱۴/۴۵	۰/۹۰	۰/۸۱	۱۰/۵۷
۸۰	۳۰۰	۱۴/۵۴	۰/۸۸	۰/۸۱	۱۰/۴۰
۸۰	۴۰۰	۱۴/۵۷	۰/۸۷	۰/۸۰	۱۰/۱۹
۸۰	۵۰۰	۱۴/۵۷	۰/۸۶	۰/۷۹	۱۰/۰۱

۴. نتیجه‌گیری

هدف این پژوهش، بررسی ماده معدنی $RbGeBr_3$ ، به عنوان لایه فعال معدنی جاذب نور در یک سلول خورشیدی پروسکایتی بود تا با محاسبه چهار عامل جریان مدار کوتاه (J_{SC})، ولتاژ مدار باز (V_{OC})، فاکتور پرشدگی (FF) و بازدهی (η_{max}) در هر دو ساختار، عملکرد این سلول‌ها را بررسی و با هم مقایسه شوند. با مشاهده و مقایسه نتایج بدست آمده در هر دو ساختار بیان شده، نشان داده شد که ساختار اول با لایه‌های انتخابی $FTO/ITO/RbGeBr_3/PEDOT:PSS/Au$ دارای بیشینه بازدهی ۱۱/۳۷٪، جریان مدار کوتاه $14/47 \left(\frac{mA}{cm^2}\right)$ و ولتاژ مدار باز در حدود ۰/۹۶ ولت است. همچنین، ساختار دوم با جایگزینی مواد نیم‌رسانا متفاوت در نقش ETL و HTL طراحی شد، $FTO/ITO/RbGeBr_3/PEDOT:PSS/Au$ ، بازدهی در حدود ۱۰/۵۷٪ و جریان مدار کوتاه $14/45 \left(\frac{mA}{cm^2}\right)$ را نتیجه داد. این بیشینه بهره‌وری برای هر دو ساختار، در شرایطی که ضخامت ۸۰ نانومتر برای لایه ETL ، ۲۰۰ نانومتر برای لایه معدنی جاذب نور و ۳۰۰ نانومتر برای لایه HTL در نظر گرفته شدند، محاسبه شدند. همچنین، بازدهی نهایی هر دو ساختار بر پایه $RbGeBr_3$ ، در مقایسه با سلول‌های خورشیدی پروسکایتی با پایه CS ، چون $CsSnBr_3$ ، بازدهی در حدود ۱۰/۴۶٪، جریان مدار کوتاه $21/12 \left(\frac{mA}{cm^2}\right)$ و ولتاژ مدار باز ۰/۸۵ ولت را به صورت تجربی گزارش داده‌اند، قابل مقایسه می‌باشند [۲۸]. در نهایت می‌توان نتیجه گرفت که ساختار اول با ماده معدنی $RbGeBr_3$ به عنوان لایه جاذب نور نسبت به ساختار دوم مناسب‌تر است. این گزارش می‌تواند برای مطالعه بیشتر این ماده در سلول‌های پیچیده‌تر و بهینه‌تر برای افزایش بهره‌وری نهایی اینگونه سلول‌ها راهنما باشد.

منابع

- [1] Sum, T. C., Mathews, N., "Advancements in perovskite solar cells: photophysics behind the photovoltaics", *Energy & Environmental Science*, 7(8), 2518-2534, 2014.
- [2] Elangovan, N. K., & Arumugam, S., "Chayaver: Indian-traditional dye to modern dye-sensitized solar cells", *Materials Research Express*, 6(6), 066206, 2019.
- [3] Al-Ashouri, A., Köhnen, E., Li, B., et al., "Monolithic perovskite/silicon tandem solar cell with > 29% efficiency by enhanced hole extraction", *Science.Org*, 370(6522), 1300-1309, 2020. <https://doi.org/10.1126/science.abd4016>
- [4] Chung, J., Shin, S., et al., "Record-efficiency flexible perovskite solar cell and module enabled by a porous-planar structure as an electron transport layer", *Energy & Environmental Science*, 13(12), 4854-4861, 2020.
- [5] Lee, J., Jin, I., & Jung, J.W., "Binary-mixed organic electron transport layers for planar heterojunction perovskite solar cells with high efficiency and thermal reliability", *Chemical Engineering Journal*, 420, 129678, 2021.



- [6] Yao, H., Zhao, J., et al., "Research and progress of black metastable phase CsPbI₃ solar cells", *Materials Chemistry Frontiers*, 5(3), 1221-1235, 2021.
- [7] Chen, S., Xiao, X., Gu, H., et al., "Iodine reduction for reproducible and high-performance perovskite solar cells and modules", *Science Advances*, 7(10), eabe8130, 2021. <https://doi.org/10.1126/SCIADV.ABE8130>
- [8] Chen, Z., Cheng, Y., et al., "In-situ atmospheric-pressure dielectric barrier discharge plasma treated CH₃NH₃PbI₃ for perovskite solar cells in regular architecture", *Applied Surface Science*, 437, 468-475, 2019.
- [9] Li, Z., Gao, Y., et al., "cPCN-Regulated SnO₂ composites enables perovskite solar cell with efficiency beyond 23%", *Springer, Nano-micro letters*, 13, 1-16, 2021.
- [10] Wang, H., Dong, Z., Liu, et al., "Roles of Organic Molecules in Inorganic CsPbX₃ Perovskite Solar Cells", *Advanced Energy Materials*, 11(1), 2002940, 2021. <https://doi.org/10.1002/AENM.202002940>
- [11] Pham, H. D., Chien, T., et al., "Development of dopant-free organic hole transporting materials for perovskite solar cells", *Advanced Energy Materials*, 10(13), 1903326, 2020. <https://doi.org/10.1002/aenm.201903326>
- [12] Pham, H. D., Om, Wu, Z., et al., "Low-Cost Alternative High-Performance Hole-Transport Material for Perovskite Solar Cells and Its Comparative Study with Conventional SPIRO-OMeTAD", *Advanced Electronic Materials*, 3(8), 1700139, 2017. <https://doi.org/10.1002/aelm.201700139>
- [13] Manser, J., & Kamat, P. V., "Band filling with free charge carriers in organometal halide perovskites", *Nature Photonics*, 8(9), 737-743, 2014. <https://doi.org/10.1039/C4TA04994B>
- [14] De Wolf, S., Holovsky, J., et al., "Organometallic halide perovskites: sharp optical absorption edge and its relation to photovoltaic performance", *The journal of physical chemistry letters*, 5(6), 1035-1039, 2014.
- [15] Stranks, S. D., Eperon, G. E., et al., "Electron-hole diffusion lengths exceeding 1 micrometer in an organometal trihalide perovskite absorber", *Science*, 342(6156), 341-344, 2013. <https://doi.org/10.1126/SCIENCE.1243982>
- [16] D'innocenzo, V., Grancini, G., et al., "Excitons versus free charges in organo-lead trihalide perovskites", *Nature communication*, 5(1), 3586, 2014.
- [17] Sahare, S., Pham, H. D., et al., "Emerging Perovskite Solar Cell Technology: Remedial Actions for the Foremost Challenges", *Advanced Energy Materials*, 11(42), 2101085, 2021. <https://doi.org/10.1002/AENM.202101085>
- [18] Aharon, S., Dymshits, A., et al., "Temperature dependence of hole conductor free formamidinium lead iodide perovskite based solar cells", *Journal of Materials Chemistry A*, 3(17), 9171-9178, 2015.
- [19] Green, M. A., Ho-Baillie, A., & Snaith, H. J., "The emergence of perovskite solar cells", *Nature Photonics*, 8(7), 506-514, 2014. <https://doi.org/10.1038/NPHOTON.2014.134>
- [20] Egger, D. A., & Kronik, L., "Role of dispersive interactions in determining structural properties of organic-inorganic halide perovskites: Insights from first-principles calculations", *Journal of Physical Chemistry Letters*, 5(15), 2728-2733, 2014. <https://doi.org/10.1021/JZ5012934>
- [21] Choi, J., & Billinge, S. J., "Perovskites at the nanoscale: from fundamentals to applications", *Nanoscale*, 8(12), 6206-6208, 2016.
- [22] Seo, J., Noh, J. H., & Seok, S. I., "Rational Strategies for Efficient Perovskite Solar Cells", *Accounts of Chemical Research*, 49(3), 562-572, 2016. <https://doi.org/10.1021/ACS.ACCOUNTS.5B00444>
- [23] Green, M., Dunlop, E., & Yoshita, M., "Solar cell efficiency tables", *Progress in photovoltaics: research and applications*, 29(1), 3-15, 2014. <https://doi.org/10.1038/NPHOTON.2014.134>
- [24] Stranks, S. D., & Snaith, H. J., "Metal-halide perovskites for photovoltaic and light-emitting devices", *Nature Nanotechnology*, 10(5), 391-402, 2015.



- [25] Zhang, Y., Chen, S., et al., "Intrinsic instability of the hybrid halide perovskite semiconductor $CH_3NH_3PbI_3$ ", *Chinese Physics Letters*, 35(3), 036104, , 2018.
- [26] Luo, Y., Xie, F., Chen, J., et al., "Uniform stepped interfacial energy level structure boosts efficiency and stability of $CsPbI_2Br$ solar cells", *Advanced Functional Materials*, 31(34), 2103316, 2021.
- [27] Ye, T., Wang, X., et al., "Localized electron density engineering for stabilized B- γ $CsSnI_3$ -based perovskite solar cells with efficiencies > 10%", *ACS Energy Letters*, 6(4), 1480-1489, 2021.
- [28] Chen, L., Lee, C., et al., "Synthesis and optical properties of lead-free cesium tin halide perovskite quantum rods with high-performance solar cell application", *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 7(24), 5028-5035, 2016.
- [29] Kulbak, M., Gupta, S., et al., "Cesium enhances long-term stability of lead bromide perovskite-based solar cells", *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 7(1), 167-172, 2023.
- [30] Wang, R., Mujahid, M., et al., "A review of perovskites solar cell stability", *Advanced Functional Materials*, 29(47), 1808843, 2019. <https://doi.org/10.1002/adfm.201808843>.
- [31] Akbulatov, A., Luchkin, S., et al., "Probing the intrinsic thermal and photochemical stability of hybrid and inorganic lead halide perovskites", *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 8(6), 1211-1218, 2017.
- [32] Eperon, G., Paternò, G., et al., "Inorganic caesium lead iodide perovskite solar cells", *Journal of Materials Chemistry A*, 3(39), 19688-19695, 2015.
- [33] Zeng, Q., Zhang, X., et al., "Inorganic $CsPbI_2Br$ Perovskite Solar Cells: The Progress and Perspective", *Solar RRL*, 3(1), 1800239, 2019. <https://doi.org/10.1002/SOLR.201800239>
- [34] Chang, C. ; Fang, X. , et al., "Printable $CsPbI_3$ perovskite solar cells with PCE of 19% via an additive strategy", *Wiley Online Library*, 32(40), 2020. <https://doi.org/10.1002/adma.202001243>
- [35] Yu, Z., Ma, Q., Liu, B., et al., "Oriented tuning the photovoltaic properties of γ - $RbGeX_3$ by strain-induced electron effective mass mutation", *Journal of Physics D: Applied Physics*, 50(46), 465101, 2017.
- [36] Elangovan, N. K., & Sivaprakasam, A., "Investigation of parameters affecting the performance of Perovskite solar cells", *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 710(1), 66-73, 2020. <https://doi.org/10.1080/15421406.2020.1829425>
- [37] Siddiqui, H., "Lead-free perovskite quantum structures towards the efficient solar cell", *Materials Letters*, 249, 99-103, 2019. <https://doi.org/10.1016/J.MATLET.2019.04.051>
- [38] Azri, F., Meftah, A., Sengouga, N., "Electron and hole transport layers optimization by numerical simulation of a perovskite solar cell", *Solar Energy*, 181, 372-378, 2019.
- [39] Pandey, R., "Microstructures, Numerical simulations: Toward the design of 27.6% efficient four-terminal semi-transparent perovskite/ SiC passivated rear contact silicon tandem solar cell", *Superlattices and Microstructures*, 100, 656-666, 2016.
- [40] Minemoto, T., "Device modeling of perovskite solar cells based on structural similarity with thin film inorganic semiconductor solar cells", *Journal of Applied Physics*, 116(5), 2014.
- [41] Kavan, L., & Gratzel, M., "Highly efficient semiconducting TiO_2 photoelectrodes prepared by aerosol pyrolysis", *Electrochemical Acta*, 40(5), 643-652, 1995.
- [42] Agarwal, S., Seetharaman, M., et al., "On the uniqueness of ideality factor and voltage exponent of perovskite-based solar cells", *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 5(23), 4115-4121, 2014. <https://doi.org/10.1021/jz5021636>
- [43] Kim, H. S., & Park, N. G., "Parameters affecting I-V hysteresis of $CH_3NH_3PbI_3$ perovskite solar cells: Effects of perovskite crystal size and mesoporous TiO_2 layer",



- Journal of Physical Chemistry Letters*, 5(17), 2927–2934, 2014. <https://doi.org/10.1021/JZ501392M>
- [44] Snaith, H. J., & Grätzel, M., "Electron and hole transport through mesoporous TiO₂ infiltrated with spiro-MeOTAD", *Advanced Materials*, 19(21), 3643–3647, 2007. <https://doi.org/10.1002/ADMA.200602085>
- [45] Poplavskyy, D., & Nelson, J., "Nondispersive hole transport in amorphous films of methoxy-spirofluorene-arylamine organic compound", *Journal of Applied Physics*, 93(1), 341–346, 2003. <https://doi.org/10.1063/1.1525866>
- [46] Minemoto, T., & Murata, M., "Impact of work function of back contact of perovskite solar cells without hole transport material analyzed by device simulation", *Current Applied Physics*, 14(11), 1428–1433, 2014.
- [47] Houari, M., Bouadjemi, B., et al., "Semiconductor behavior of halide perovskites AGeX₃ (A = K, Rb and Cs; X = F, Cl and Br): first-principles calculations", *Indian Journal of Physics*, 94(4), 455–467, 2020. <https://doi.org/10.1007/S12648-019-01480-0>
- [48] Zandi, S., "Finite element simulation of perovskite solar cell: A study on efficiency improvement based on structural and material modification", *Solar Energy*, 179, 298–306, 2019.
- [49] Kalogirou S. A., "Solar Energy Engineering: Processes and Systems" - Elsevier, Google Books. Process, Syst, 1st ed. Biritish Library, 1-755, 2009. Retrieved September 3, 2023.



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



Abstracts of Papers



Research Paper

Investigating The Power Conversion Efficiency of Perovskite Solar Cells with The Inorganic Active Layer RbGeBr₃ and Various Electron and Hole Collecting Layers¹

Shima Valizadeh^{* 2}, Aliasghar Shokri³ and Amirabbas Sabouri Dodaran⁴

Received: 2023.04.13

Revised: 2023.07.10

Accepted: 2023.09.10

Abstract

Perovskite solar cells (PSCs) are advancing swiftly due to their remarkable increase in power conversion efficiency (PCE) compared to traditional photovoltaic technologies. The main purpose of this study is to investigate the efficiency of two distinct PSCS structures that use RbGeBr₃ as an inorganic perovskite active layer. The calculations are based on the optoelectronic model of the solar cell and the use of the finite element method to solve the continuity equations for current and charge density. Therefore, the layer thicknesses of different materials (as ETL and Active layer) are modified to find the better power conversion efficiency of these solar cells. The obtained results of simulation calculations illustrate that the first structure FTO/ITO/RbGeBr₃ /PEDOT: PSS/Au exhibits a maximum power conversion efficiency of 11.37%, with a short circuit current of 14.47 (mA/cm²) and an open circuit voltage of 0.96 (V) and while the FTO/TiO₂/RbGeBr₃/Spiro-OMETAD/Au structure shows a maximum power conversion efficiency of 10.57%. The greatest power conversion efficiency for the aforementioned designs is 80 nm for the electron transporting layer is 80 nm and 200 nm for the inorganic active layer, respectively. The results of this article can be useful in the design of new-generation solar cells based on inorganic perovskite layers.

Keywords: *Perovskite Solar Cell, Photovoltaic, Absorption Coefficient, Power Conversion Efficiency, Mineral Material.*

¹DOI: 10.22051/ijap.2023.43433.1318

² PhD Student, Department of Physics, Payam-e Noor University, Tehran, Iran (corresponding author)
Email: shvalizadeh@student.pnu.ac.ir

³ Professor, Department of Theoretical Physics and Nano, Faculty of physics, Alzahra University, Tehran, Iran. Email: aashokri@alzahra.ac.ir

⁴ Associate Professor, Department of Physics, Payam-e Noor University, Tehran, Iran. Email: Sabouri@pnu.ac.ir



Research Paper

Investigation of Topological Phase Transition of $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) Alloys from Dirac Semimetal to Weyl Semimetal using First-principles Approaches¹

Samira Sadat Nourizadeh² and Aminollah Vaez^{*3}

Received: 2022.11.02

Revised: 2023.03.17

Accepted: 2022.05.05

Abstract

Weyl semimetals show special quantum states of matter, which have nontrivial topological features and very interesting and unique applications in the spintronics industry. One method of making these materials is the use of alloying method. In this paper, the $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) alloys are constructed using the first-principles methods. After study of their stability, their structural, electronic, and topological properties have been studied. To study the structural and electronic properties of the alloys, the Wien2k package, based on density functional theory, has been used. Furthermore, the topological properties of the alloys have been calculated using the Wanniertools packages, based on the tight-binding method. Calculations show that the $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) alloys, in the absence of spin-orbit coupling, have crossing points with fourfold degeneracy and band inversion. Therefore, they are topological Dirac semimetal. Considering the spin-orbit coupling, it is seen that alloys with concentrations of $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$ change to the normal semimetal by opening the band gap; but, the alloy with $x = 1$ concentration changes to the topological Weyl semimetal with 16 Weyl fermions couple. The full area of the first Brillouin zone (FBZ) was scanned to find the positions of the Weyl points. The results show that the Weyl points, with chirality of either +1 or -1, were scattered in the FBZ with the central symmetry, but all of them are far from the high-symmetry paths of FBZ. Furthermore, the surface state properties, like Fermi arcs, were calculated and studied for the $NbSb$ Weyl semimetal using the Wanniertools computational packages. **Keywords:** *Topological Materials, Dirac Semimetal, Weyl Semimetal, Density Functional Theory, Tight-binding Method.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.42095.1305

² PhD Student, Faculty of Physics, University of Isfahan, Isfahan, Iran. Email: samirasadatnourizadeh@yahoo.com

³ Assistant Professor, Faculty of Physics, University of Isfahan, Isfahan, Iran. (Corresponding Author). Email: vaez@phys.ui.ac.ir

<https://jap.alzahra.ac.ir>



Review Paper

Investigation of Linear and Nonlinear Behaviors of Silver Oxide Nanoparticles in Graphene Oxide Solution¹

Saeed Maymanat Abady², Hamid Najari³ and Reza Rasuli⁴

Received: 2023.06.14

Revised: 2023.09.09

Accepted: 2023.10.02

Abstract

In this research, linear and non-linear optical properties of silver oxide nanoparticles in graphene oxide medium have been investigated. First, graphene oxide is prepared by the improved method of Hammers. Then the synthesis of silver oxide nanoparticles is carried out in the environment of graphene oxide diluted with deionized water, by the electric arc method. The electric arc was applied at 200, 300, 400, and 500 volts with a three-second pulse duration of one minute. The results of ultraviolet-visible spectroscopy show that the resulting solution contains nanoparticles of graphene oxide and silver oxide. Then, a CW 532 nm beam with a maximum power of 300 mW was used to determine the linear absorption of samples. Then, the z-scanning method was used to determine the nonlinear characteristics of the samples. After analyzing the graphs, the refraction and nonlinear absorption coefficients of each sample have been calculated. The results show that with increasing voltage, the concentration of nanoparticles produced in the samples increases and the linear absorption coefficient increases with it. The lowest value of linear absorbance is $1.31 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ and nonlinear absorbance is negative for all samples and its lowest value is $7.86 * 10^{-3}$. Also, the nonlinear refractive index is negative for all the samples and its maximum value is $1.61 * 10^{-14}$. The thermo-optical coefficients of each of the samples have also been obtained.

Keywords: *Electric Arc, GO, Silver Oxide Nanoparticles, Nonlinear Refractive Index, Improved Method of Hammers.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.44095.1332

² M. Sc. Graduated, Department of Physics, Zanjan University & Teacher of Education Ministry in Qorve. Email: s.maymanat@yahoo.com

³ Assistant Professor, Department of Physics, Zanjan University, Zanjan, Iran. (Corresponding Author) Email: najjari@znu.ac.ir

⁴ Professor, Department of Physics, Zanjan University, Zanjan, Iran. Email: r-rasuli@znu.ac.ir



Research Paper

Evaluation of Different Semiconductors Effect on Radio-Isotopic Battery Performance¹

Najmeh Mohammadi²

Received: 2023.05.23

Revised: 2023.08.20

Accepted: 2023.09.09

Abstract

This work aimed to theoretically investigate the operation of the beta voltaic battery with the ¹⁴C radio isotopic source and several semiconductors in the p-n junction structure. For this purpose, the saturated thickness of the ¹⁴C beta source and energy deposition distribution of beta particles emitted from this source is simulated and calculated in the various semiconductors including the GaAs, GaN, SiC, and diamond using the Monte Carlo code of MCNPX. Regarding the results obtained, the optimized ¹⁴C thickness was achieved by 30 micrometers. Then, applying the analytical and numerical model, the relationships between the doping concentration, short circuit current density, open circuit voltage, and output power density were evaluated. The results showed that with $N_a = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ and $N_d = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ with the diamond as semiconductor, the output power density of designed battery was increased to $9.68 \mu\text{W}/\text{cm}^2$ among the other considered semiconductors.

Keywords: *Beta-voltaic Battery, Semiconductor, ¹⁴C Source, p-n Junction.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.44175.1334

²Assistant Professor, Physics Department, Faculty of Science, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran. Email: n_mohammadi@sut.ac.ir

Research Paper

Optical Properties of Algae in Order to Design and Build a Device for Measuring the Amount of Chlorophyll in Water Reservoirs Using the Optical Fluorescence Emission Method¹

Ehsan Koushki*² and Eisa Kohan-Baghkheirati³

Received: 2023.05.12

Revised: 2023.07.06

Accepted: 2023.08.04

Abstract

In this article, we will first get acquainted with the absorption and emission optical properties of algae and types of chlorophylls, and then we will examine the optical setup for measuring the photoluminescence light produced by algae, which is the basis for the construction of chlorophyll concentration measuring devices. By examining algae samples in freshwater ponds in Iran and identifying the predominant type of algae in them, spectrometry and concentration measurement were carried out with the help of a hemocytometer or neobar lam method. An essential tool for measuring the concentration of algae is chlorophyll-a, which is present in all types of algae with different percentages and has the property of fluorescence. By measuring the red light resulting from photoluminescence, the amount of chlorophyll-a can be obtained. The main design of a device to measure the amount of chlorophyll-a based on the measurement of photoluminescence light is considered for this purpose, and it is used in terms of software and hardware. For this, the process and intensity of light in terms of density were done for calibration, and the disadvantages and advantages of the design were examined. Direct measurement of light, noises, high stability, and preparing a logical routine between the data can help to increase and improve the quality and this device becomes a precise tool for measuring chlorophyll and has commercialization capabilities. The stability, reproducibility, and high accuracy of the device are one of the advantages of emission (photoluminescence) test methods compared to absorbance methods.

Keywords: *Optical Properties of Algae, Chlorophyll-a, Photoluminescence, Emission Spectrum, Neobar Lam.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.43744.1324

² Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Razavi Khorasan, Iran. (Corresponding Author). Email: ehsan.koushki@hsu.ac.ir

³ Assistant Professor, Department of Biology, Faculty of Science, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Razavi Khorasan, Iran. Email: eisa_kohan@yahoo.com



Research Paper

2D PIC Simulation of Electron Acceleration in Interaction of Short Laser Pulse with Plasma Having a Density Ramp in Bubble Regime¹

Ameneh Kargarian²

Received: 2023.02.18

Revised: 2023.05.26

Accepted: 2023.06.27

Abstract

In this paper, using 2D PIC simulation, the electron acceleration in the bubble regime has been investigated in the interaction of a short high-power laser pulse with an underdense plasma with a density ramp. Due to the laser pondermotive force, a plasma wave and its corresponding electric field are formed in the plasma. The electrons injected in the focusing and acceleration region of the plasma wave field can get energy from the wave and are accelerated to high energies of the Giga-electron-Volt range. The simulation results show that with increasing the plasma density gradient, the phase speed of the generated plasma wave increases, and the corresponding wavelength decreases. This causes the displacement of the plasma wave focusing and acceleration region and ultimately increases the acceleration length in the acceleration process. Considering a laser pulse with dimensionless intensity amplitude $a_0 = 4$, pulse duration $c\tau = 5\mu m$, and plasma with density ramp length $L = 20$, the plasma wave accelerating electric field with amplitude $E_0 = 200 GeV / m$ was generated. The results of this work can be crucial in choosing an appropriate plasma profile to design the laser-plasma accelerator system for obtaining the Giga-electron-Volt energy gain in a short time.

Keywords: *2D PIC Simulation, Plasma Density Ramp, Wakefield.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.42964.1314

² Assistant Professor, Plasma and Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran. Email: akargarian@aeoi.org.ir

<https://jap.alzahra.ac.ir>



Research Paper

Solar Corona Flares and Its Effect on the Earth's Atmosphere¹

Sima Zeighami*², Ehsan Tavabi³ and Hedye Rostaii

Received: 2023.07.01

Revised: 2023.08.24

Accepted: 2023.09.21

Abstract

Solar winds result from the eruption of plasma streams from the solar corona. This plasma, which consists of proton particles, electrons, X-rays, and radio waves, penetrates the heliosphere and accelerates from the interplanetary space toward the Earth with high kinetic energy and thermal energy. In addition, if it collides with the Earth's atmosphere, it disrupts human life. But despite the Earth's magnetic field and the magnetic reconnection process in this area, the Earth's magnetosphere acts like a shield and prevents these substances from affecting the Earth. To obtain the necessary information to investigate all kinds of phenomena that happen around the Sun, the use of satellite data is the best and most reliable method in terms of accuracy and up-to-date data. The data from the Goes meteorological satellite, LASCO spacecraft, and the Solar Dynamic Observatory are the information that we use in this article to advance our goals. To check the correlation between solar eruptions and changes in the Earth's magnetosphere layer, we use the wavelet analysis method with Morlet's fundamental wave, which is an important tool for processing fluctuations. The results of accurate numerical calculations of this research showed that there is a strong correlation between the magnetic activities of the Sun and the characteristic indices of the Earth's magnetosphere layer, which can affect the Earth's atmosphere as well.

Keywords: *Solar Flare, Magnetic Field, Proton Particles, Electron Particles, X-ray.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.44254.1335

² Assistant Professor, Department of Physics, Tabriz Branch, Islamic Azad University, Tabriz, Iran. (Corresponding Author). Email: zeighami@iaut.ac.ir

³ Associate Professor, Physics Department, Payame Noor University (PNU), Tehran, Iran. Email: e_tavabi@pnu.ac.ir



Research Paper

Numerical Study of Electromagnetic Transitions in Proton Radiative Capture by $^{10}\text{B}^1$

Hassan Khalili^{*2} and Masoumeh Dalvand³

Received: 2023.04.04

Revised: 2023.06.02

Accepted: 2023.07.06

Abstract

Analyzing the electromagnetic transition strengths is one of the methods of studying the development of atomic nuclei the big-bang, and the fuel cycle of stars in nuclear astrophysics, nuclear synthesis and radiative capture. The study of nuclei with mass number $A=11$, for example, ^{11}B and ^{11}C , is significant which can be produced by radiative capture of protons by ^{10}B the dependence of the reduced transition probability related to electric quadrupole $B[E2]$ and magnetic dipole $B[M1]$ that occurs in proton radiative capture by ^{10}B nucleus has been investigated. It depends on the excitation energy and spin-parity of the states for the occurrence of $E2$ and $M1$ transitions. The theoretical framework of the calculations based On the Woods-Saxon potential model and double folding $M3Y$ has been used to create the ground and excited states of ^{11}C . The results obtained based on each of the mentioned potential models are in good agreement. It was found that $B(E2)$ increases with the increase of excited energy regardless of the spin of excited states. At the same time, $B(M1)$ is very sensitive to the spin of excited states, and also $(3/2)$ -excited states are independent of the energy.

Keywords: *Reduced transition probability, Woods-saxon Potential, Double-folding Potential, Electromagnetic Transition.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.43665.1322

² Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Arak University, Arak, Iran (Corresponding author) Email: h-khalilir@araku.ac.ir).

³ M. Sc. Graduated, Department of Physics, Faculty of Science, Arak University, Arak, Iran. Email: mass.dalvand@gmail.com

<https://jap.alzahra.ac.ir>



Research Paper

Design of Simple Plasmonic Sensors based on Graphene Circles in THZ Region¹

Fatemeh Mehdizadeh² and Mehdi Khazaei Nezhad^{*3}

Received: 2023.04.15

Revised: 2023.07.31

Accepted: 2023.09.04

Abstract

The design of optical sensors in the THz region for application in various fields of biological and medical sciences has significantly expanded in the last two decades. In this paper, we proposed an optical sensor using two dimensional and periodic structure of graphene rings on the dielectric substrate. The surface plasmon resonance mechanism was employed to design the refractive index sensor. First, by changing the geometric parameters of the structure, the optimal parameters for the sensor performance have been extracted. Then, the sensor's sensitivity has been checked regarding the change in the refractive index of the surrounding environment. The sensitivity of the proposed simple structure is $11.2 \mu\text{m}/\text{RIU}$ and is larger than previous works. Also, increasing the refractive index of the measured medium diminished the quality of sensor operation. The proposed sensor can be used to detect environmental air pollution by proper calibration. The Lumerical software which is based on the finite difference time domain method is used to this end.

Keywords: *Plasmonic Sensor, 2D Materials, FDTD, Sensitivity, Figure of Merit.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.43454.1319

² M. Sc. Graduated, Department of Physics, Faculty of Science, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran. Email: mehdizadeh304@gmail.com.

³ Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran. (Corresponding Author). Email: Khazaeinezhad@um.ac.ir.



<https://jap.alzahra.ac.ir>



Contents

Design of Simple Plasmonic Sensors based on Graphene Circles in THZ Region Fatemeh Mehdizadeh and Mehdi Khazaei Nezhad	7-19
Numerical Study of Electromagnetic Transitions in Proton Radiative Capture by ^{10}B Hassan Khalili and Masoumeh Dalvand	20-33
Solar Corona Flares and Its Effect on the Earth's Atmosphere Sima Zeighami, Ehsan Tavabi and Hedy Rostaii	34-56
2D PIC Simulation of Electron Acceleration in Interaction of Short Laser Pulse with Plasma Having a Density Ramp in Bubble Regime Ameneh Kargarian	57-69
Optical Properties of Algae in Order to Design and Build a Device for Measuring the Amount of Chlorophyll in Water Reservoirs Using the Optical Fluorescence Emission Method Ehsan Koushki and Eisa Kohan-Baghkheirati	70-92
Evaluation of Different Semiconductors Effect on Radio-Isotopic Battery Performance Najmeh Mohammadi	93-111
Investigation of Linear and Nonlinear Behaviors of Silver Oxide Nanoparticles in Graphene Oxide Solution Saeed Maymanat Abady, Hamid Najari and Reza Rasuli	112-128
Investigation of Topological Phase Transition of $\text{Nb}_x\text{Ta}_{1-x}\text{Sb}$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) Alloys from Dirac Semimetal to Weyl Semimetal using First-principles Approaches Samira Sadat Nourizadeh and Aminollah Vaez	129-143
Investigating The Power Conversion Efficiency of Perovskite Solar Cells with The Inorganic Active Layer RbGeBr_3 and Various Electron and Hole Collecting Layers Shima Valizadeh, Aliasghar Shokri and Amirabbas Sabouri Dodaran	144-161
Abstracts of Papers in English	IX-XVII



<https://jap.alzahra.ac.ir>



Waves and Shock Absorption, *Proceeding of 12th International Seminar on Polymer Science and Technology*, Islamic Azad University, Tehran, 2-5 November, 2016.

- **Thesis**

- Doddapaneni V., *The Polymer-Based Nanocomposites for Electrical Switching Applications*, PhD Thesis, School of Engineering Sciences, KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden, 2017.

- **Patent**

- Chin D.A. and Irvin D.J., Actuator Device Utilizing a Conductive Polymer Gel, *US Pat. 6,685,442*, 2004.

- **Website**

- Mauritz K., Sol-gel, <http://www.psrc.usm.edu/mauritz/solgel.htm>, Available in 13 February 2005.

- **Standards**

- Standard Test Method for Solidification Point of BPA, Annual Book of ASTM Standard, **06.04**, D 4493-94, 2000.



1. The article should be provided in Farsi (Persian) and in Microsoft Word with maximum 20 A4 pages.
2. The main text of the article should be set with the B Zar font/size 12 pt.
3. The title of the article should be inserted with a Bold B Zar font/size 16 pt and the names of the authors of the article with a B Zar font/size 12 pt.
4. The English abstract should be prepared with Times New Roman font/size 12 pt.
5. The line separating is 1.5 and all pages are numbered accordingly.
6. Margins are selected 2.5cm from each side of the paper.
7. The manuscript doesn't exceed 20 pages.
8. Keywords (3 to 5 items) are provided at the ends of Persian and English abstracts.

Figures and tables: ensure that each figure is numbered properly and any illustration has a caption below the figure. Please, submit tables as editable text and not as images. Prepare a concise and descriptive caption for each table with a proper number above the table.

References

Please, ensure that every reference, which is cited in the text, is also present in the reference list. The standard reference style of the references is described below (APA Style).

References are written at the end of the manuscript with Times New Romans Some examples are:

- **Book**

- Crano J.C. and Guglielmetti R.J., *Organic Photochromic and Thermochromic Compounds: Main Photochromic Families*, 1st ed. Kluwer Academic, Boston, **1**, 1-9, 2002.

- *Industrial Biofouling: Detection, Prevention and Control*, Walker J., Surman S. and Jass J. (Eds.), John Wiley and Sons, New York, 57-63, 2000.

- **Article**

- Keyvan Rad J., Mahdavian A.R., Salehi-Mobarakeh H., and Abdollahi A., FRET Phenomenon in Photoreversible Dual-Color Fluorescent Polymeric Nanoparticles Based on Azocarbazole/Spiropyran Derivatives, *Macromolecules*, **49**, 141-152, 2016, <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.5b02401>.

- **Proceedings**

- Khoubi-Arani Z. and Mohammadi N., Thermodynamically Controlled Assemblies of Hard/Soft Polymeric Nanoparticles for Mechanical

<https://jap.alzahra.ac.ir>



Guide for Authors

Ensure that the following items are present:

One author has been assigned as the corresponding author with contact details: Email address, full personal address.

All necessary files have been uploaded: the manuscript must be prepared in Microsoft office word format.

All authors' information, especially their affiliations, are provided in Persian and English.

Ethics in publishing

IJAP subscribes to the principles of ethical publishing statements. The publication of an article in a peer-reviewed journal is a direct reflection of the quality of work of the author(s) and the institutions that support them. It is therefore important to agree upon standards of expected ethical behavior for all participants in the activity of publishing. Below you will find the major ethical policies useful for author(s).

- The manuscript should not be published elsewhere unless in the form of a short report, an abstract or a lecture.
- It must not be submitted in another journal simultaneously.
- Authors avoid submitting the accepted manuscript to another Persian scientific journal. (MSRT permits the double publication of a Persian published manuscript in another language, provided that the published paper is cited clearly and mentioned in acknowledgement.)
- Authors should disclose any conflict of interest.
- All sources of financial support for the work should be disclosed.
- Authors should ensure that they have critical contribution in the reported work and that any contribution in the manuscript have been considered properly.
- Authors are expected to consider carefully the list of authors and their order before submitting their manuscript. Any addition, deletion or rearrangement of authors' names after acceptance of the manuscript is impossible.

Article structure

Manuscript should be prepared as described below.

Language

The manuscript should be prepared in Persian. The abstract and author name and affiliation must be written in Persian and English separately.

Typesetting





IRANIAN JOURNAL OF APPLIED PHYSICS

Volume 13, Serial No. 35, Quarterly, Winter 2024

Alzahra University – Vice Chancellery for Research

Director in Charge: S. Shoari Nejad, Associate Professor, Alzahra University

Editor in Chief: A. Shafiekhani, Professor, Alzahra University

Editorial Board

D. Dorrani, Plasma Physics, Professor, Islamic Azad University

M. Fattahi, Geophysics, Associate Professor, Tehran University

T. Kakavand, Nuclear Physics, Professor, Imam Khomeini International University

E. Mohajerani, Physics of Photonic, Professor, Shahid Beheshti University

A. Morteza Ali, Condensed Matter Physics, Professor, Alzahra University

M.R. Rohani, Plasma physics, Associate Professor, Alzahra University

Shafiekhahni, Nanophysics, Professor, Alzahra University

F. Shahshahani, Physics of Laser, Associate Professor, Alzahra University

F. Shojaei Baghini, Gravitational Physics, Professor, Tehran University

T. Vazifehshenas, Condensed Matter Physics, Associate Professor, Shahid Beheshti University

Publisher: **Alzahra University – Vice Chancellery for Research**

Executive Director: **M. Amirykhah**

Editor: **F. Rostamian**

Page Designer: **M. Amirykhah**

Publication Frequency: **Quarterly**

Address: Alzahra University - Vice Chancellery for Research, Vanak, Tehran, Iran.
1993893973

Email: aujap@alzahra.ac.ir

E-ISSN 2783-1051

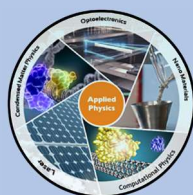
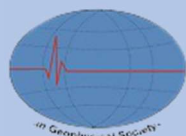
In the Name of God



Alzahra University

Iranian Journal of Applied Physics

Winter 2024, Vol 13, Number 35



IRANIAN JOURNAL OF APPLIED PHYSICS

Volume 13/ Serial No. 35/ Quarterly/ Winter 2024

Design of Simple Plasmonic Sensors based on Graphene Circles in THZ Region Fatemeh Mehdizadeh and Mehdi Khazaei Nezhad	7-19
Numerical Study of Electromagnetic Transitions in Proton Radiative Capture by ^{10}B Hassan Khalili and Masoumeh Dalvand	20-33
Solar Corona Flares and Its Effect on the Earth's Atmosphere Sima Zeighami, Ehsan Tavabi and Hedy Rostaii	34-56
2D PIC Simulation of Electron Acceleration in Interaction of Short Laser Pulse with Plasma Having a Density Ramp in Bubble Regime Ameneh Kargarian	57-69
Optical Properties of Algae in Order to Design and Build a Device for Measuring the Amount of Chlorophyll in Water Reservoirs Using the Optical Fluorescence Emission Method Ehsan Koushki and Eisa Kohan-Baghkheirati	70-92
Evaluation of Different Semiconductors Effect on Radio-Isotopic Battery Performance Najmeh Mohammadi	93-111
Investigation of Linear and Nonlinear Behaviors of Silver Oxide Nanoparticles in Graphene Oxide Solution Saeed Maymanat Abady, Hamid Najari and Reza Rasuli	112-128
Investigation of Topological Phase Transition of $\text{Nb}_x\text{Ta}_{1-x}\text{Sb}$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) Alloys from Dirac Semimetal to Weyl Semimetal using First-principles Approaches Samira Sadat Nourizadeh and Aminollah Vaez	129-143
Investigating The Power Conversion Efficiency of Perovskite Solar Cells with The Inorganic Active Layer RbGeBr_3 and Various Electron and Hole Collecting Layers Shima Valizadeh, Aliasghar Shokri and Amirabbas Sabouri Dodaran	144-161
Abstracts of Papers in English	IX-XVII