

فصلنامه علمی

فیزیک کاربردی ایران

سال دهم / پیاپی ۲۳ / فصلنامه / زمستان ۱۳۹۹

- ۵-۱۸ بهینه‌سازی دستگاه تشخیص فلزات کمیاب با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو
احسان تقی‌زاده طوسی
- ۱۹-۳۲ محاسبات و ارتباطات کوانتومی با اتم‌های ریدبرگی
محمد صادق خزعلی
- ۳۳-۴۳ سنتز و بررسی ویژگی‌های الکتریکی و مغناطیسی نانوکامپوزیت‌های Ag/Hf_3NiO_y
رضا قلی‌پور
- ۴۵-۵۴ بررسی پدیده اختلاط فازی در حضور میدان‌های مغناطیسی همگن و غیرهمگن در
برهم‌کنش لیزر پالسی فوق‌کوتاه با پلاسما با استفاده از شبیه‌سازی ذره‌ای دو بُعدی
آمنه کارگریان
- ۵۵-۶۶ تأثیر شرایط و روش لایه‌نشانی در خواص فیزیکی لایه‌های $MAPbI_3$ به منظور استفاده
در سلول خورشیدی پروسکایتی
نفیسه معماریان و رضا رجب بلوکات
- ۶۷-۷۸ بررسی سنج‌ه هندسی درهم‌تنیدگی تولیدشده توسط هامیلتونی پیچش تک‌محوری
در سامانه‌های اسپینی
آزیتا ناجی، محمود زهیری و مهرزاد اشرف‌پور
- ۷۹-۸۴ چکیده مقالات به انگلیسی

فصلنامه علمی

فیزیک کاربردی ایران

سال دهم، پیاپی ۲۳، زمستان ۱۳۹۹

صاحب امتیاز: معاونت پژوهشی دانشگاه الزهرا
مدیر مسئول: سعیده شعاری نژاد، دانشیار دانشگاه الزهرا
سردبیر: عزیزاله شفیع خانی، استاد دانشگاه الزهرا

اعضای هیأت تحریریه

داود درانیان، فیزیک پلاسما، استاد دانشگاه آزاد اسلامی
محمودرضا روحانی، فیزیک پلاسما، دانشیار دانشگاه الزهرا
فاطمه شجاعی باغینی، فیزیک گرانش، استاد دانشگاه تهران
عزیزاله شفیع خانی، نانوفیزیک، استاد دانشگاه الزهرا
فاطمه شهشهانی، فیزیک لیزر، دانشیار دانشگاه الزهرا
طیب کاکاوند، فیزیک هسته‌ای، استاد دانشگاه بین‌المللی امام خمینی قزوین
عطا... کوهیان، فیزیک لیزر، دانشیار دانشگاه تهران
عبدا... مرتضی علی، 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 امیری خواه

ویراستار فارسی و انگلیسی: محمد باقر فتحی، استادیار دانشگاه خوارزمی

صفحه‌آرایی، چاپ و صحافی: انتشارات فرگاهی / ۱۵۵۷۴-۲۶۱-۲۶۱-۰۲۱

ترتیب انتشار: فصلنامه

شمارگان: ۱۰ نسخه

قیمت: ۶۰۰۰ ریال

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

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

email: aujap@alzahra.ac.ir

شاپا چاپی: ۱۰۴۳ - ۲۷۸۳

شاپا الکترونیکی: ۱۰۵۱ - ۲۷۸۳

نحوه نگارش مقاله

۱. مقالات بایستی حاصل تحقیق اصیل در زمینه فیزیک کاربردی بوده و قبلاً در نشریه دیگری چاپ نشده و یا همزمان به نشریات دیگری ارسال نشده باشد.
۲. مسئولیت صحت و دقت نتایج علمی مقاله به عهده نویسنده (نویسندگان) است.
۳. در مقاله قواعد و دستور زبان فارسی و رسا بودن جملات مورد توجه ویژه قرار گیرد. مسئولیت ویرایش ادبی مقاله به عهده نویسنده (نویسندگان) است.
۴. مقاله‌ها باید دارای متن کامل فارسی و خلاصه انگلیسی باشند.
۵. متن مقاله با احتساب عنوان، نام نگارندگان و محل تحقیق در اندازه کاغذ A4 و تک ستونی تایپ گردد.
۶. مقاله با برنامۀ WORD، عنوان مقاله با قلم نازنین سیاه و پوینت ۱۶، خلاصه انگلیسی (Times, Bold, Pt.12)، اسم (اسامی) نگارنده (نگارندگان) با قلم نازنین سیاه و پوینت ۱۲ (در خلاصه انگلیسی (Times, Bold, Pt.12)) و محل تحقیق و متن مقاله با قلم نازنین معمولی و پوینت ۱۲ تایپ شود. فواصل خطوط در متن فارسی و متن انگلیسی ۱/۵ بوده و تمام صفحات مقاله پشت سر هم شماره‌گذاری شوند.
۷. عنوان مقاله باید کوتاه و رسا باشد و در بالا و وسط صفحه نوشته شود.
۸. زیر عنوان نام و نام خانوادگی نگارنده (نگارندگان) و آدرس آنها به طور جداگانه و محل تحقیق درج شود و مسئول مکاتبات با ستاره مشخص گردیده و در پاورقی درج گردد.
۹. چنانچه ارائه‌کننده مقاله دانشجوی باشد نام استاد راهنمای دانشجوی نیز می‌بایست ذکر گردد.
۱۰. مسئولیت صحت اطلاعات مقاله به عهده شخص ارسال‌کننده است و در صورت مشاهده مغایرت در هر مرحله، مجله حق تصمیم‌گیری مقتضی را دارد.
۱۱. مقاله باید نتیجه فعالیت گروه ارائه‌دهنده مقاله باشد و تمامی نویسندگان در جریان کار و ارسال مقاله به مجله باشند.
۱۲. چکیده فارسی و انگلیسی مقاله باید شامل مطالب مهم یافته‌های تحقیق باشد و حتی‌الامکان از ۱۵۰ کلمه (۱۰ سطر) تجاوز نکند. ضروری است نگارنده (نگارندگان) در پایان چکیده فارسی و انگلیسی، واژه‌های کلیدی (Keywords) را درج نمایند.
۱۳. متن مقاله دارای زیر عنوان‌های اصلی یعنی مقدمه، روش کار، نتایج و بحث، نتیجه‌گیری و منابع باشد. در صورتی که لازم باشد از شخص یا سازمانی تشکر شود این مطلب با زیر عنوان "سپاسگزاری" در متن مقاله بعد از نتیجه‌گیری آورده شود.
۱۴. ترجیحاً برای بیان اوزان و مقادیر از سیستم متریک استفاده گردد. در غیر این صورت این واحدها در آغاز مقاله بیابند و با حروف نوشته شوند.
۱۵. استفاده از جدول وقتی مجاز است که درج اطلاعات بدست آمده در متن به راحتی میسر نباشد. عنوان جدول در بالای جدول نوشته شده، باید گویا باشد، به نحوی که نیاز به مراجعه به متن مقاله نباشد، اختصارات و علائم متن جدول بایستی با زیرنویس مشخص گردند.
۱۶. عکس‌ها بایستی اصل، واضح و ترجیحاً سیاه و سفید باشند. توصیه می‌شود عکس‌های میکروسکوپ الکترونی به طور مجزا به صورت JPG تهیه و ارسال گردند.
۱۷. معادلات با فونت (Times, Pt.10) انگلیسی و به جای نماد بردارها و تانسورها حروف پررنگ (Bold) استفاده شود.
۱۸. منابع مقاله با قلم نازنین معمولی و پوینت ۱۲ بر اساس شماره و استفاده در متن و داخل آکلااد [] تایپ شود. نحوه نوشتن منابع طبق نمونه‌های زیر باشد:

[۱] هایزنبرگ، ورنر؛ «جزء و کل» مرکز نشر دانشگاهی؛ صفحه ۹۴ تا ۱۱۵.

[۲] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik; "Tables of Integrals, Series, and Products"; 5th edition, Academic Press. (1994) 547.

[۳] P. G. Debendetti and E. H. Stanley; "Supercooled and Glassy Water"; *Physics Today* 56, No. 3 (2003) 40-46.

[۴] صمیمی، جلال؛ «مروری مقدماتی بر روش‌های رصدی و دستاوردهای نجوم پرتو گاما»؛ مجله فیزیک، سال ۱۹، شماره ۱ و ۲، بهار

و تابستان ۱۳۸۰، صفحه ۳ تا ۲۴.

(اسم کتاب و اسم مجله با/یتالیک، شماره جلد مجله با پررنگ زده شود).

۱۹. وقتی مقاله‌ای به الفبای غیر انگلیسی چاپ شده است، لازم است عنوان مقاله به زبان انگلیسی ترجمه شود و بعد از قید شماره صفحات، زبان اصلی آن مانند روسی در پرانتز قید شود. مثال: (in Russian).....
۲۰. مقاله صرفاً از طریق سایت مجله به آدرس زیر توسط نویسنده باید ارسال گردد: <http://jap.alzahra.ac.ir/>

فهرست مطالب

- ۵-۱۸ بهینه‌سازی دستگاه تشخیص فلزات کمیاب با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو
احسان تقی‌زاده طوسی
- ۱۹-۳۲ محاسبات و ارتباطات کوانتومی با اتم‌های ریدبرگی
محمد صادق خزرعلی
- ۳۳-۴۳ سنتز و بررسی ویژگی‌های الکتریکی و مغناطیسی نانو کامپوزیت‌های $\text{Ag}/\text{Hf}_3\text{NiO}_y$
رضا قلی‌پور
- ۴۵-۵۴ بررسی پدیده اختلاط فازی در حضور میدان‌های مغناطیسی همگن و غیرهمگن در برهم‌کنش لیزر پالسی فوق‌کوتاه با پلاسما با استفاده از شبیه‌سازی ذره‌ای دو بُعدی
آمنه کارگریان
- ۵۵-۶۶ تأثیر شرایط و روش لایه‌نشانی در خواص فیزیکی لایه‌های MAPbI_3 به منظور استفاده در سلول خورشیدی پروسکایتی
نفیسه معماریان و رضا رجب بلوکات
- ۶۷-۷۸ بررسی سنج‌هندسی درهم‌تنیدگی تولیدشده توسط هامیلتونی پیچش تک‌محوری در سامانه‌های اسپینی
آریتا ناجی، محمود زهیری و مهرزاد اشرف‌پور
- ۷۹-۸۴ چکیده مقالات به انگلیسی

بهینه‌سازی دستگاه تشخیص فلزات کمیاب با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو^۱

احسان تقی‌زاده طوسی^۲

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۱۰/۰۱

تاریخ بازنگری: ۱۳۹۹/۱۱/۱۴

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۱/۱۵

چکیده

در این پژوهش، ابتدا یک سیستم طیف‌سنجی اشعه ایکس فلورسانس با هدف تشخیص و اندازه‌گیری عناصر کمیاب طراحی شد و سپس به روش مونت کارلو در نرم‌افزار MCNPX، شبیه‌سازی و توسعه داده شد. با توجه به نتایج اجراهای متفاوت کد شبیه‌سازی، بهترین عملکرد سیستم تشخیص عناصر کمیاب در فواصل حدود ۳cm و ۳۰cm، به ترتیب برای فاصله چشمه تا نمونه (SSD) و فاصله چشمه تا آشکارساز (SDD) تعیین شد. به علاوه، مقدار بیشینه شدت پرتوی اشعه ایکس وارد شده به آشکارساز برای موازی‌ساز به قطر ۳mm حاصل شد. همچنین نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که عدم حضور محافظ سربی در اطراف دیواره‌های فلزی خارجی آشکارساز، حتی با وجود استفاده از موازی‌ساز سربی در ورودی پنجره آشکارساز، باعث افزایش ورود پرتوهای زمینه به آشکارساز و در نتیجه کاهش دقت طیف‌سنجی در تشخیص عناصر

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2021.34487.1187

^۲ استادیار، گروه مهندسی صنایع و مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه تربت حیدریه، خراسان رضوی، ایران.

Email: e.taghizadeh@torbath.ac.ir

کمیاب خواهد شد. حد کمینه تشخیص غلظت فلزات زرنیخ، سرب، جیوه، روی، مس و آهن به ترتیب 0.17 mg/kg ، 0.40 ، $18/40$ ، $20/00$ ، $146/00$ و $266/67$ محاسبه شد. با توجه به غلظت و حد آلاینده‌گی این عناصر، دستگاه تشخیص فلزات کمیاب طراحی شده برای نمونه‌های تحقیقاتی و آموزشی، به ویژه در نمونه‌های محیط زیستی و کشاورزی، بسیار کاربردی و مفید خواهد بود.

واژگان کلیدی: شدت باریکه اشعه ایکس، حداقل حد تشخیص، فلزات کمیاب، مونت کارلو.

۱. مقدمه

طیف‌سنجی فلورسانس اشعه ایکس (XRF) روشی غیرمخرب و دقیق و سریع است که کاربردهای بسیاری در زمینه‌های علمی و عملی از جمله زمین‌شناسی، کانی‌شناسی، تجزیه و تحلیل مواد، بوم‌شناسی، محیط زیست، باستان‌شناسی، پزشکی و همچنین موارد صنعتی دارد [۱]. استفاده از XRF نسبت به روش‌های تجزیه و تحلیل دیگر مزیت‌های زیادی دارد. اول، بسیار سریع و جامع بوده و نیاز به تکرار آزمایش‌های متعدد ندارد. دوم، راه‌اندازی آن ساده و ارزان است. این سامانه شامل دو قسمت اصلی، چشمه تابش تحریک‌کننده و آشکارساز به عنوان سیستم تشخیص، است. در طراحی دستگاه XRF از برخی مؤلفه‌های دیگر نیز از جمله قسمت‌های الکترونیکی متصل به آشکارساز، برنامه تحلیل داده‌ها و محافظ‌های اطراف منبع و آشکارساز و نمونه استفاده می‌شود.

هدف اصلی استفاده از چشمه در دستگاه XRF، بمباران نمونه و ایجاد اشعه ایکس از نمونه برانگیخته است. منابع تابش در دستگاه XRF به دو دسته اصلی تقسیم می‌شود: ایزوتوپ رادیواکتیو و لوله اشعه ایکس [۲]. استفاده از چشمه پرتوزا، به دلیل کاربرد آسان و هزینه کم، بسیار رایج است. ذرات یا فوتون‌های اولیه ساطع شده از چشمه، می‌توانند نمونه را تحریک کرده و فوتون‌های پرتونگاری ثانویه از اتم‌های تحریک‌شده هدف، ایجاد کنند. طیف اشعه ایکس حاصل از نمونه تحریک‌شده توسط یک آشکارساز مناسب ثبت شده و بر اساس آن عناصر نمونه از نظر کمی و کیفی مشخص خواهند شد. از لحاظ نظری، این روش می‌تواند تقریباً هر عنصر در جدول تناوبی را اندازه‌گیری کند. با این همه، حساسیت و دقت این روش برای تشخیص همه عناصر یکسان نبوده و به عوامل متنوعی به ویژه طیف انرژی چشمه تحریک‌کننده و طراحی و حفاظ‌بندی سیستم بستگی دارد [۳].

انتخاب چشمه مناسب، اولین و مهم ترین بخش از طراحی هر سامانه XRF است. تابش ساطع شده از چشمه با انرژی بسیار کم، نمی تواند انرژی لازم برای تحریک نمونه و در نتیجه آزادسازی اشعه ایکس مشخصه عنصر مد نظر را فراهم کند. از طرف دیگر، چشمه با تابش بسیار پر انرژی باعث ایجاد پراکندگی های کامپتون و همدوسی می شود، که در آشکارساز جذب شده و در نتیجه طیف خروجی آشکارساز بسیار پیچیده و کم دقت خواهد شد [۴].

تابش ایکس حاصل از نمونه تحریک شده برای تشخیص عناصر کمیاب در مقایسه با تابش زمینه و اختلال ذاتی محیط، معمولاً بسیار ضعیف است. بنابراین، طراحی مناسب سامانه XRF با کاربری تشخیص عناصر کمیاب، به ویژه طراحی بهینه سپر و تعیین موقعیت مناسب چشمه پرتوزا، نمونه و آشکارساز، در بهبود عملکرد آن و افزایش ظرفیت تحلیلی آن و همچنین ایجاد توانایی تشخیص کم ترین غلظت هدف ممکن عناصر در نمونه، نقش بسیار مهم و ضروری دارد.

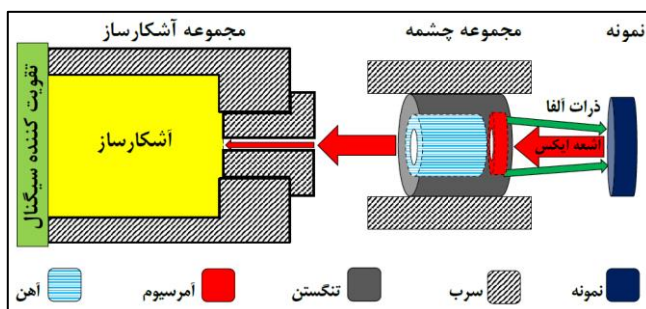
چشمه آمرسیوم (Am^{241}) به طور هم زمان ذرات آلفا و فوتون های گاما ساطع می کند. تابش آلفای چشمه آمرسیوم، با انرژی $5.53 MeV$ ، فقط برای استفاده در چشمه های ترکیبی نوترونی (مانند چشمه آمرسیوم-برلیوم) به کار می رود، زیرا ذرات آلفا در فواصل بسیار کوتاهی و ضخامت های بسیار کم نیز به راحتی جذب مواد دیگر از جمله هوا می شوند. در حالی که فوتون های چشمه آمرسیوم با طیف گسسته انرژی کم تر از $60 keV$ ، دارای کاربردهای تشخیصی و پرتونگاری است. لامپ اشعه ایکس در نمونه های تجاری دستگاه طیف سنج XRF، به عنوان چشمه پرتو در انرژی های متنوع کاربرد دارد. از لامپ اشعه ایکس با انرژی کم در تشخیص عناصر کمیاب استفاده می شود. برای نمونه، یکی از لامپ های تجاری اشعه ایکس در دستگاه های طیف سنجی تشخیصی XRF، لامپ X-123 است که دارای طیف انرژی کم تر از $50 keV$ است. بنابراین و با توجه به پژوهش های گذشته، یک چشمه حلقوی پرتوزای آمرسیوم با نیمه عمر بسیار زیاد (حدود ۴۰۰ سال)، دسترس پذیری، شار و قیمت مناسب، به عنوان چشمه پرتوزای لازم در دستگاه تشخیص عناصر کمیاب در این تحقیق انتخاب شد. با این که چشمه آمرسیوم بیشتر در دسته چشمه های آلفا تقسیم بندی شده، در دستگاه تشخیص عناصر کمیاب از فوتون های گامای آن استفاده خواهد شد، که پس از برخورد با اتم های نمونه و تحریک آن ها، باعث تولید فوتون های ثانویه ایکس از نمونه می شوند [۵-۸].

هدف اصلی این تحقیق، طراحی و شبیه سازی و بهینه سازی دستگاه تشخیص عناصر کمیاب برای مؤسسات آموزشی و پژوهشی است، که با استفاده از الگوبرداری از نمونه های اجرا شده [۵-۷] و با توجه به چشمه های پرتوزای ارزان و قابل دسترس، انجام شده است. برای این منظور، در

ابتدا قطعات سیستم در نرم‌افزار مهندسی سالی‌دورکز (Solidworks 2016 premium X64) طراحی و مونتاژ شده و پس از آن با استفاده از روش مونت کارلو در نرم‌افزار تخصصی هسته‌ای MCNPX، تحلیل و بررسی شد. همچنین، حداقل مقدار لازم فلزات کمیاب هدف برای تشخیص‌پذیری محاسبه شد.

۲. مواد و روش‌ها

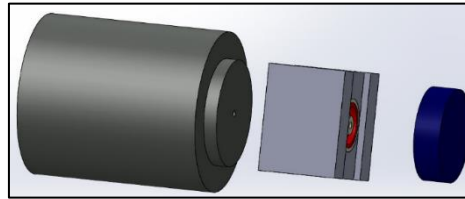
جلوگیری از ورود مستقیم پرتوهای ساطع شده از چشمه به آشکارساز، یکی از چالش‌های اصلی برای کاهش خطا و افزایش دقت نتایج طیف‌سنجی است. برای این منظور و بر اساس پژوهش‌های گذشته، چشمه آمرسیوم به شکل حلقوی و در مکانی مابین آشکارساز و نمونه در نظر گرفته شد. با انتخاب حفاظ مناسب بین چشمه و آشکارساز، میزان ورود مستقیم ذرات و فوتون‌های ساطع شده از چشمه به آشکارساز به شدت کاهش یافته، در حالی که پرتوهای گامای ساطع شده از نمونه می‌توانند از حفره وسط چشمه عبور کرده و وارد آشکارساز شوند. شکل ۱ ساختار کلی سیستم تشخیص عناصر کمیاب بر اساس طیف‌سنجی اشعه ایکس مشخصه عنصر را نشان می‌دهد [۷-۱۱].



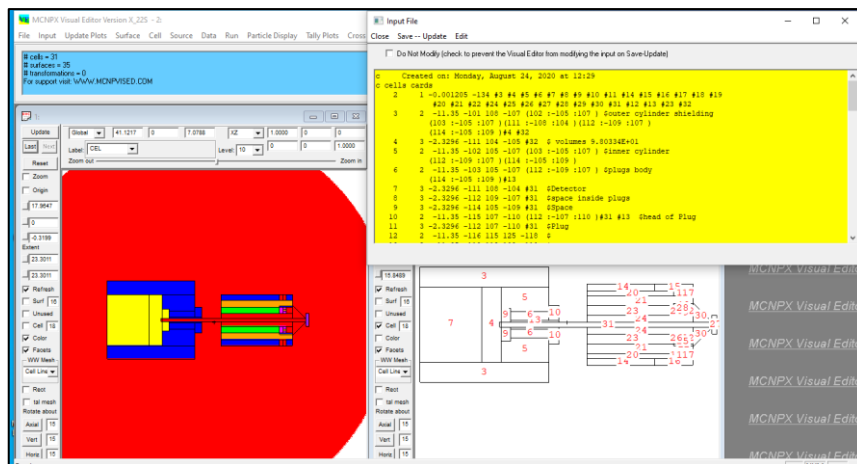
شکل ۱ ساختار کلی سیستم XRF تجربی.

شکل ۲ طراحی و ابعاد مجموعه چشمه آمرسیوم را نشان می‌دهد. برای کاهش خوانش پرتوهای پیش‌زمینه، تمرکز پرتوی ایکس ساطع شده از نمونه و در نتیجه افزایش دقت آشکارساز، از موازی‌ساز در ورودی آشکارساز استفاده می‌شود. آشکارساز گاما از نوع ژرمانیوم-سیلیکن کم‌انرژی (LEGe)، به دلیل دسترس‌پذیری، دقت و سرعت بالا و همچنین قیمت بسیار مناسب، در طراحی سیستم عناصر کمیاب انتخاب شد. بنابراین، از سرب به عنوان ماده سازنده موازی‌ساز، استفاده شد.

طرح و مونتاژ نهایی دستگاه تشخیص عناصر کمیاب شامل سه قسمت اصلی: الف) نمونه، ب) مجموعه چشمه، ج) مجموعه آشکارساز، در شکل ۴ نشان داده شده است. برای تشخیص و ردیابی اشعه ایکس مشخصه عناصر کمیاب نمونه توسط آشکارساز، خروجی نرم‌افزار MCNPX در حالت فوتون (Mode: P) در نظر گرفته شد. برای محاسبه شار انرژی انتقال یافته از فوتون‌های ورودی به آشکارساز، از شمارش گره‌های F2 (متوسط شار عبوری از سطح) و F4 (شار متوسط در یاخته) با واحد MeV.cm^{-2} ، در کد شبیه‌سازی استفاده شد. هندسه دستگاه در مختصات متعامد و متشکل از ۳۱ کارت سلولی است که توسط ۳۵ کارت سطحی در نرم‌افزار MCNPX شبیه‌سازی شده است. شکل ۵ هندسه شبیه‌سازی شده مسئله در محیط نرم‌افزار هسته‌ای MCNPX را نشان می‌دهد.



شکل ۴ مونتاژ دستگاه تشخیص عناصر کمیاب، از راست به چپ: نمونه، چشمه، آشکارساز.



شکل ۵ کد شبیه‌سازی تحقیق در محیط نرم‌افزار MCNPX.

آمرسیوم به عنوان یک چشمه گاما دارای طیف انرژی گسسته در محدوده کم‌تر از keV ۵۹/۵۴ است [۱۲]. بر اساس انرژی طیف اشعه ایکس ساطع شده از عناصر کمیاب، دامنه انرژی تشخیص پذیر توسط این آشکارساز در محدوده keV ۰/۱ تا keV ۶۰ در نظر گرفته شد.

آشکارسازهای واقعی شامل غلظت بسیار کمی از ناخالصی ژرمانیوم بوده که درصد وزنی آن تقریباً نزدیک صفر است و در شبیه‌سازی می‌توان از آن صرف‌نظر کرد. در این پژوهش، عناصر آهن، مس، روی، زرنیک، سرب و جیوه به عنوان عناصر کمیاب هدف در نظر گرفته شده که طیف انرژی اشعه ایکس ساطع شده در سری $K_{\alpha 1}$ این عناصر به ترتیب $6/40$ ، $8/05$ ، $8/67$ ، $10/54$ ، $21/18$ و $70/82$ (keV) است [۱۳]. انرژی آزادسازی اشعه ایکس سری $K_{\alpha 1}$ برای جیوه از بیشینه انرژی گامای ساطع شده از چشمه آمرسیوم بزرگ‌تر بوده و بنابراین برای تشخیص عنصر جیوه از اشعه ایکس مشخصه آن در سری $L_{\alpha 1}$ با انرژی $9/99$ keV استفاده خواهد شد [۱۴].

جنس نمونه در یاخته شماره ۶، بر اساس عناصر مد نظر در یک نمونه می‌تواند تغییر کند. فاصله مکانی چشمه حلقوی از نمونه (SSD^3) و همچنین از آشکارساز (SDD^4) به عنوان مجهول دیگر بررسی شد. انرژی فوتون‌های گامای ساطع شده از چشمه آمرسیوم، $13/5$ و $26/4$ و $59/5$ (keV) در نظر گرفته شد [۴]. در کد کامپیوتری MCNPX، ۱۰ آزمون آماری مونت کارلو برای سنجش دقت و صحت نتایج شبیه‌سازی قرار داده شده است. شکل ۶ نتایج این ۱۰ تست آماری را نشان می‌دهد، که بر اساس آن نتایج حاصل از شبیه‌سازی در این تحقیق دارای ضریب اطمینان زیادی است.

results of 10 statistical checks for the estimated answer for the tally fluctuation chart (tfc) bin of tally 4											
tfc bin behavior	--mean-- behavior		-----relative error-----			---variance of the variance---			--figure of merit--		-pdf- slope
	value	decrease	value	decrease	decrease rate	value	decrease	decrease rate	value	behavior	
desired	random	<0.10	yes	1/sqrt(nps)	<0.10	yes	1/nps	constant	random	>3.00	
observed	random	0.01	yes	yes	0.00	yes	yes	constant	random	10.00	
passed?	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	

شکل ۶ خروجی نرم‌افزار MCNPX برای ۱۰ آزمون آماری تأییدکننده در نتایج شبیه‌سازی مونت کارلو.

یکی از کمیت‌هایی که در دقت و صحت روش طیف‌سنجی تأثیر بسیار مهمی دارد، شدت تابش ورودی به آشکارساز است که به صورت شار سطحی انرژی انتقال یافته به آشکارساز توسط باریکه تابشی در واحد زاویه فضایی تعریف می‌شود. رابطه ۱ شدت تابش را نشان می‌دهد [۱۵]، که در آن I_{Ω} شدت تابش، $d\Phi$ شار سطحی انرژی انتقال یافته در واحد زمان [۱۶] و $d\Omega$ زاویه فضایی است،

$$I_{\Omega} = \frac{d\Phi}{d\Omega} \left(\frac{W}{Sr} \right) \quad (1)$$

³ SSD: Source-Sample Distance

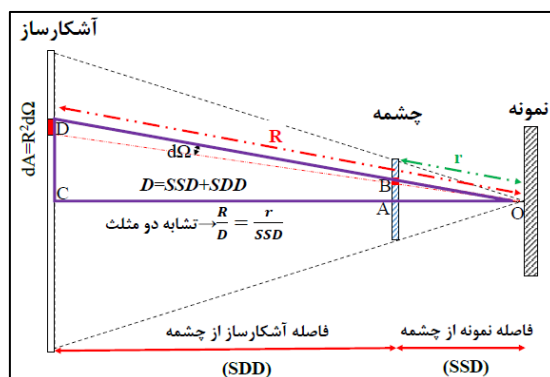
⁴ SDD: Source-Detector Distance

با توجه به تعریف شار سطحی انرژی و همچنین محاسبه مساحت المان سطحی بر سطح آشکارساز، رابطه شدت تابش به صورت رابطه ۲ بازنویسی می‌شود [۱۷]. در این رابطه dA سطحی از آشکارساز است که توسط زاویه فضایی $d\Omega$ محصور شده است. همچنین، E چگالی سطحی تابش ($\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$) بوده که برابر با انرژی انتقال یافته به واحد سطح آشکارساز در واحد زمان است. R فاصله سطح مد نظر بر روی آشکارساز تا مرکز نمونه است،

$$I_{\Omega} = \frac{EdA}{d\Omega} \xrightarrow{dA=R^2d\Omega} I_{\Omega} \propto R^2E \quad (2)$$

شکل ۷ نحوه تابش اشعه ایکس از نمونه به آشکارساز را نشان می‌دهد. با توجه به تشابه دو مثلث OAB و OCD، می‌توان رابطه شدت تابش را به صورت رابطه ۳ بازنویسی کرد، که در آن D و SSD به ترتیب فاصله نمونه تا آشکارساز و فاصله نمونه تا چشمه بوده و r وتر مثلث OAB است،

$$\frac{R}{D} = \frac{r}{SSD} \rightarrow R^2 \propto \frac{1}{SSD^2} \Rightarrow I_{\Omega} \propto \frac{E}{SSD^2} \quad (3)$$



شکل ۷ نمودار تجسمی برای ارزیابی شدت پرتو.

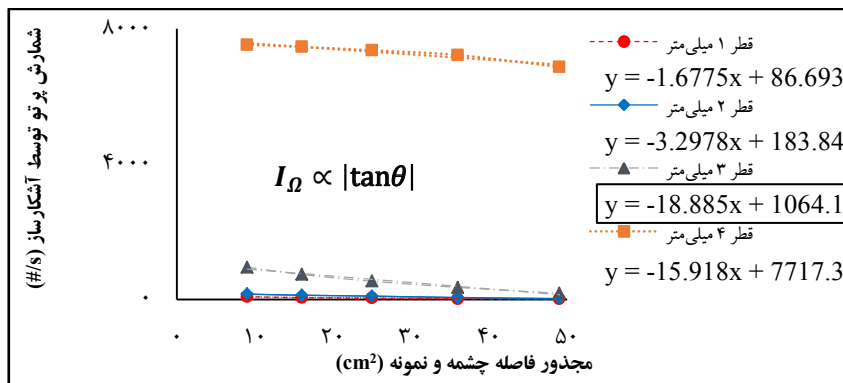
۳. نتایج و بحث

۳-۱ تعیین قطر بهینه پنجره موازی‌ساز

در ابتدا قطر پنجره ورودی موازی‌ساز برابر با ۱ mm انتخاب شده و کد رایانه‌ای آماده شده در نرم‌افزار MCNPX برای مقادیر SSD در محدوده ۳ تا ۷ (cm) و به صورت جداگانه، پنج مرتبه اجرا شد. این عمل برای قطرهای ۲ و ۳ و ۴ (mm) پنجره موازی‌ساز تکرار شد. برای تعیین قطر بهینه حفره موازی‌ساز، به جز فاصله نمونه از چشمه (SSD) و قطر موازی‌ساز (d)، تمامی اشکال و ابعاد هندسه در تمامی اجراهای کد نرم‌افزاری MCNPX، ثابت در نظر گرفته شد.

منحنی شمارش پرتو توسط آشکارساز (متناسب با چگالی تابش) نسبت به مجذور فاصله نمونه تا چشمه، بر اساس خروجی اجراهای شبیه‌سازی مونت کارلو، در شکل ۸ نشان داده شده است. بر اساس رابطه ۳، شیب این نمودارهای با شدت تابش پرتو ایکس ورودی به آشکارساز رابطه مستقیم دارد. نمودار مربوط به پنجره موازی‌ساز با قطر ۳ mm دارای بیشترین شیب بوده که نشان‌دهنده بیشترین شدت تابش اشعه ایکس نمونه در این قطر است. در نمودارهای مربوط به پنجره موازی‌ساز با قطر کم‌تر از ۳ mm، بیشتر میزان اشعه ایکس خروجی از نمونه قبل از ورود به آشکارساز، جذب موازی‌ساز شده و در نتیجه شدت تابش جذب‌شده در آشکارساز به شدت کاهش می‌یابد.

از طرف دیگر و بر اساس فاصله عرضی نمودارها در شکل ۸، در موازی‌سازهایی با قطر بزرگ‌تر از ۳ mm میزان بیشتری از تابش زمینه از موازی‌ساز عبور کرده و وارد آشکارساز می‌شود. همچنین، شیب نمودار برای $d > 3 \text{ mm}$ کاهش می‌یابد و در نتیجه شدت تابش و همچنین دقت طیف‌سنجی اشعه ایکس کاهش می‌یابد. بنابراین، برای افزایش شدت تابش ورودی به آشکارساز و در نتیجه بهبود دقت تشخیص سیستم طیف‌سنجی برای آشکارسازی با ورودی به قطر ۸ cm، پنجره ورودی موازی‌ساز با قطر ۳ mm پیشنهاد می‌شود.

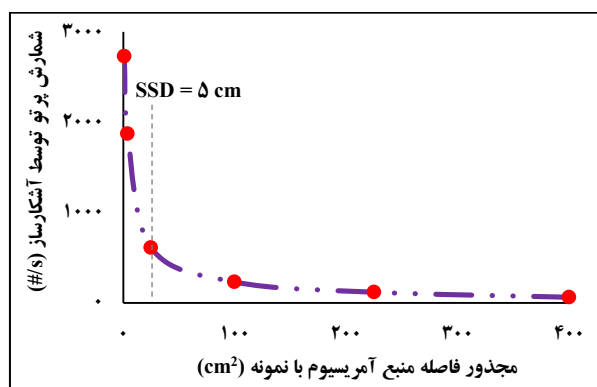


شکل ۸ نمودار شمارش آشکارساز با مجذور فاصله چشمه و نمونه در قطرهای مختلف حفره موازی‌ساز.

۲-۳ تأثیر فاصله چشمه آموریوم با نمونه در شدت تابش اشعه ایکس

یکی از مشخصات مهم در طراحی و بهینه‌سازی سیستم تشخیص عناصر کمیاب، تعیین فاصله مناسب چشمه تا نمونه است. برای این منظور تمامی پارامترهای هندسه سیستم، از جمله قطر موازی‌ساز (۳ mm) و فاصله چشمه تا آشکارساز (۱۵ cm)، ثابت در نظر گرفته شد. سپس، برای SSD مقادیر ۱، ۲، ۵، ۱۰، ۱۵ و ۲۰ (cm)، کد شبیه‌سازی به صورت جداگانه اجرا شد.

شکل ۹ نمودار شمارش پرتو در آشکارساز به نسبت مجذور فاصله چشمه تا نمونه را بر اساس نتایج ۶ اجرای کد شبیه‌سازی برای مقادیر مختلف SSD نشان می‌دهد. این نمودار از دو خط تقریباً راست در دو طرف $SSD = 5 \text{ cm}$ تشکیل شده است. بر اساس معادله ۳ و شکل ۸، شدت تابش به عنوان پارامتر اصلی در طیف‌سنجی در مقادیر SSD کمتر از 5 cm ، بسیار بیشتر و تقریباً ثابت (خط راست) است. بنابراین، فاصله بین چشمه و نمونه را می‌توان در محدوده نیم تا پنج سانتی‌متر انتخاب کرد. کمینه این محدوده به دلیل نوع و شکل طراحی حفاظ سربی چشمه است. زیرا برای کاهش پراکندگی باریکه گامای ساطع شده از چشمه در فضای آزمایشگاه، حفاظ سربی چشمه از جلو (در سمت نمونه) حدود 0.5 cm و از پشت (در جهت آشکارساز) حدود 5 cm از لبه چشمه حلقوی بیشتر پیش آمده است. در ادامه این تحقیق، مقدار بهینه $SSD = 3 \text{ cm}$ انتخاب شد.



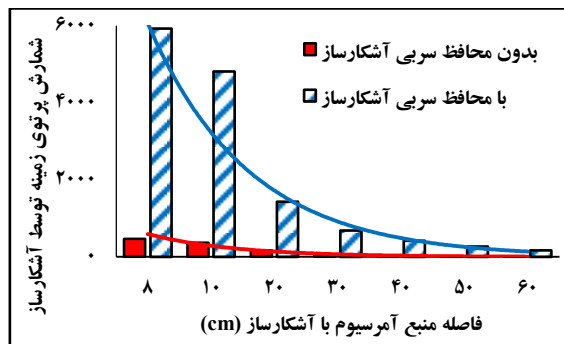
شکل ۹ نمودار شمارش آشکارساز به مجذور فاصله چشمه تا نمونه.

۳-۳ تأثیر حفاظ آشکارساز در شدت تابش اشعه ایکس

برای تعیین اثر حفاظ آشکارساز، نمونه را از جنس هوا در نظر گرفته و در ابتدا جنس سلول حفاظ آشکارساز نیز هوا انتخاب شده و تمامی هندسه سیستم ثابت در نظر گرفته شد. در این حالت کد نرم‌افزار MCNPX برای فاصله چشمه با آشکارساز (SDD) به اندازه ۸، ۱۰، ۲۰، ۳۰، ۴۰، ۵۰ و ۶۰ (cm) اجرا شد. همین عمل برای حفاظ آشکارساز از جنس سرب و برای SDD با اندازه‌های مشابه حالت قبل اجرا شد، که نتایج کد شبیه‌سازی در شکل ۱۰ نشان داده شده است.

حضور حفاظ سربی اطراف دیواره‌های خارجی آشکارساز باعث کاهش بسیار زیاد جذب تابش پس‌زمینه می‌شود. به عبارت بهتر، حتی با حضور موازی‌ساز در پنجره ورودی آشکارساز، استفاده از حفاظ اطراف دیواره‌های فلزی آشکارساز می‌تواند (به دلیل جذب این پرتوها و جلوگیری از پراکندگی ثانویه آنها توسط این دیواره‌ها)، باعث کاهش شدید ورود تابش

پس زمینه به آشکارساز و همچنین کمینگی قله پراکندگی و در نتیجه افزایش دقت نتایج طیف سنجی شود. در شکل ۱۰، برای فاصله SDD بزرگ تر از ۳۰ cm، شیب نمودارها تقریباً صفر است، که جذب کم ترین میزان پرتوی زمینه را نشان می دهد. به همین دلیل، در این تحقیق مقدار بهینه SDD برابر با ۳۰ cm انتخاب شد، تا با کم ترین میزان تابش پیش زمینه به آشکارساز، بیشینه شدت تابش ورودی را داشته باشد.

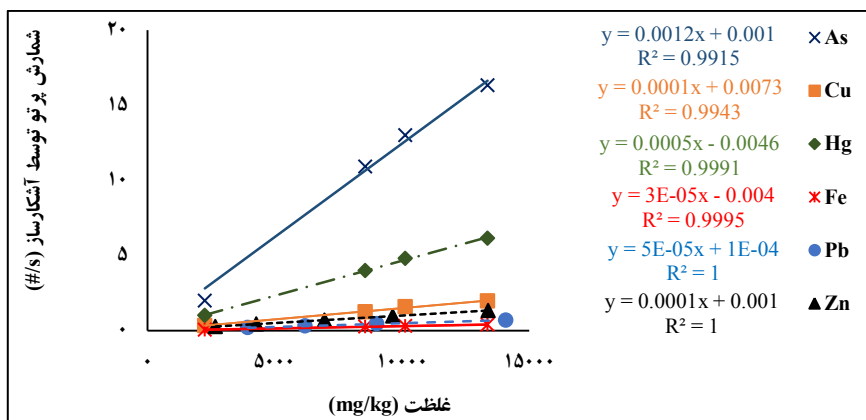


شکل ۱۰ نمودار شمارش پرتوی زمینه توسط آشکارساز به فاصله چشمه با آشکارساز (SDD) در دو حالت حضور و عدم حضور حفاظ آشکارساز.

۳-۴ محاسبه حداقل حد تشخیص غلظت عناصر هدف (MDL)

در هر دستگاه طیف سنجی، حداقل حد تشخیص غلظت برای یک عنصر خاص به صورت دو برابر نسبت عدم قطعیت غلظت عنصر مد نظر (در نمونه ای که حاوی آن عنصر نیست) به شیب نمودار کالیبراسیون آن عنصر تعریف می شود [۱۸]. بر اساس نتایج اجراهای کد شبیه سازی، مقادیر بهینه محاسبه شده برای فاصله چشمه تا آشکارساز، فاصله چشمه تا نمونه و قطر موازی ساز در پنجره ورودی آشکارساز، به ترتیب برابر با ۳۰ cm، ۳ cm و ۳ mm، انتخاب شد. همچنین دیواره های بیرونی آشکارساز نیز با یک حفاظ سربی محافظت شد. سپس کد شبیه سازی برای ۴ غلظت متفاوت از یک عنصر خاص در هندسه نمونه (یاخته شماره ۶) اجرا شد. شکل ۱۱ منحنی های کالیبراسیون عناصر زرنیخ، مس، جیوه، آهن، سرب و روی را بر اساس خروجی ۴ اجرا در غلظت های متفاوت از هر عنصر نشان می دهد.

همچنین، عدم قطعیت، شیب نمودار کالیبراسیون و حداقل میزان غلظت قابل تشخیص این ۶ عنصر در جدول ۱ نشان داده شده است. حداقل میزان تشخیص سه فلز سنگین زرنیخ، سرب و جیوه توسط دستگاه XRF شبیه سازی شده، به ترتیب ۰/۱۷، ۰/۴۰ و ۱۸/۴۰ (mg/kg) تخمین زده شد. این ۳ فلز سنگین برای سیستم های زنده بسیار مضرند.



شکل ۱۱ شیب نمودار کالیبراسیون غلظت زرنیخ، مس، جیوه، آهن، سرب و منگنز با استفاده از نرم‌افزار MCNPX.

جدول ۱ مختصات نمودار کالیبراسیون و حداقل حد تشخیص غلظت زرنیخ، مس، جیوه، آهن، سرب، منگنز.

عنصر	عدم قطعیت (δ) (mg/kg)	شیب نمودار (tan θ)	$MDL^1 = (2δ/\tan\theta)$ (mg/kg)
زرنیخ	۰/۰۰۰۱	۰/۰۰۱۲	۰/۱۷
سرب	۰/۰۰۰۰۱	۰/۰۰۰۰۵	۰/۴۰
جیوه	۰/۰۰۴۶	۰/۰۰۰۵	۱۸/۴۰
روی	۰/۰۰۱	۰/۰۰۰۱	۲۰/۰۰
مس	۰/۰۰۷۳	۰/۰۰۰۱	۱۴۶/۰۰
آهن	۰/۰۰۴	۰/۰۰۰۰۳	۲۶۶/۶۷

^۱ کمینه حد تشخیص غلظت

نتایج شبیه‌سازی حد تشخیص عنصر روی را 20 mg/kg تعیین کرد. روی از عناصر ضروری موجودات زنده است. با این حال به میزان بسیار اندکی نیاز است. بنابراین، دستگاه طراحی شده برای تشخیص عناصر زرنیخ، سرب، جیوه و روی در بسیاری از انواع نمونه‌ها، از جمله در علوم زیستی و پزشکی و مهندسی، قادر به تشخیص بوده و کاربرد خواهد داشت. دو فلز مس و آهن نیز به عنوان عناصر ضروری در حیات و محیط زیست دسته‌بندی می‌شود. مس و آهن در محدوده مقادیر درصدی (10000 mg/kg) در نمونه‌های محیطی یافت می‌شود. کمینه غلظت قابل تشخیص توسط سیستم XRF شبیه‌سازی شده برای فلزات مس و آهن، به ترتیب (mg/kg) $146/00$ و $266/67$ تعیین شده که از حد میزان غلظت و همچنین محدوده آلاینده‌گی این دو عنصر در بسیاری از انواع نمونه‌ها، به ویژه نمونه‌های زیستی کم‌تر است [۱۹].

برای ارزیابی اعتبار نتایج حاصل از شبیه‌سازی مونت کارلو، مقادیر کمینه حد تشخیص غلظت عناصر کمیاب حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی مقایسه شد. ال‌دروبی و همکاران با استفاده از سیستمی مشابه، غلظت عناصر جیوه و سرب را در نمونه‌های بیولوژیکی موی سر انسان به صورت تجربی اندازه‌گیری کردند. نتایج آنها با مقادیر شبیه‌سازی شده برای کمینه حد تشخیص غلظت عناصر کمیاب در این تحقیق، مطابقت کامل داشته و نشان می‌دهد که نتایج روش مونت کارلو برای طراحی و بهینه‌سازی سیستم تشخیص عناصر کمیاب معتبر است [۷].

۴. نتیجه‌گیری

ابتدا با استفاده از نرم‌افزار Solidworks مراحل کامل طراحی قطعات و مونتاژ سیستم تشخیص عناصر کمیاب بر اساس ردیابی اشعه ایکس مشخصه عناصر هدف در نمونه، ارائه شده و سپس در کد MCNPX شبیه‌سازی شد. بعد از اطمینان از درستی کد، با استفاده از روش مونت کارلو و با اجرای کد کامپیوتری در شرایط متنوع، مقدار بهینه اندازه قطر موازی‌ساز در ورودی آشکارساز (d) ۳mm، فاصله چشمه از هدف (SSD) کم‌تر از ۵cm و همچنین فاصله چشمه از آشکارساز (SDD) ۳۰cm تعیین شد. همچنین، با رسم نمودار کالیبراسیون برای عناصر هدف حداقل حد غلظت قابل تشخیص با سیستم طراحی شده برای عناصر زرنیخ، سرب، جیوه، روی، مس و آهن به ترتیب ۰/۱۷، ۰/۴۰، ۱۸/۴۰، ۲۰/۰۰، ۱۴۶/۰۰ و ۲۶۶/۶۷ (mg/kg) محاسبه شد. با توجه به غلظت و حد آلاینده‌گی این عناصر، دستگاه تشخیص فلزات کمیاب طراحی شده برای نمونه‌های تحقیقاتی و آموزشی، به ویژه در نمونه‌های محیط زیستی و کشاورزی، بسیار کاربردی و مفید خواهد بود.

۵. تقدیر و تشکر

این تحقیق توسط دانشگاه تربت حیدریه و با کد تحقیقاتی "UTH:۱۳۹۹/۰۶/۱۵۷۹" پشتیبانی مالی شده است. بنابراین، مؤلف این مقاله بر خود لازم می‌داند از همکاری صمیمانه معاونت محترم آموزشی و پژوهشی دانشگاه تربت حیدریه تشکر و قدردانی کند.

منابع

- [1] Tousi E. T., Firoozabadi M. M., and Shiva M., "Determination of the thorium potential in Shah-Kooh area in Iran by NAA and comparison with the results of ICP and XRF techniques", Measurement, **90**, 20-24 (2016).
- [2] Tousi E. T., et al., "Measurement of Percentage Depth Dose and Half Value Layer of the Rhizophora spp. Particleboard Bonded by Eremurus spp. to 60, 80 and 100 kVp Diagnostic X-rays", MAPAN, **33**(3), 321-328 (2018).

- [3] Pushie M. J., et al., "Elemental and chemically specific X-ray fluorescence imaging of biological systems", *Chemical Reviews*, **114**(17), 8499-8541 (2014).
- [4] Beckhoff B., et al., "Handbook of practical X-ray fluorescence analysis". Germany: Springer-Verlag GmbH, Heidelberg. 877 (2007).
- [5] Shakhreet B. Z., et al., "Mass attenuation coefficients of natural Rhizophora spp. wood for X-rays in the 15.77–25.27 keV range", *Radiation Protection Dosimetry*, **135**(1), 47-53 (2009).
- [6] Marashdeh M. W., et al., "Determining the mass attenuation coefficient, effective atomic number, and electron density of raw wood and binderless particleboards of Rhizophora spp. by using Monte Carlo simulation", *Results in Physics*, **5**, 228-234 (2015).
- [7] Aldroobi K. S. A., et al., "Determination of Arsenic and Mercury level in Scalp Hair from a Selected Population in Penang, Malaysia using XRF Technique", *Radiation Physics and Chemistry*, **91**, 9-14 (2013).
- [8] Tousi E. T., et al., "Measurement of mass attenuation coefficients of Eremurus-Rhizophora spp. particleboards for X-ray in the 16.63–25.30 keV energy range", *Radiation Physics and Chemistry*, **103**, 119-125 (2014).
- [9] Abuarra A., et al., "XRF Technique for the Evaluation of Gum Arabic Bonded Rhizophora spp. Particleboards as Tissue Equivalent Material", *International Journal of Applied Physics and Mathematics*, **4**(3), 201-204 (2014).
- [10] Tousi E. T., et al., "Evaluation of the mass attenuation coefficient and Effective Atomic Number of the Eremurus spp. Root in Mammography Energy Range", *IOSR Journal of Applied Physics*, **9**(1), 100-104 (2017).
- [11] Marashdeh M. W., "Effect of the LEGe detector collimators on K-series peaks and Compton scattering in XRF analysis using gamma rays", *Heliyon*, **4**(8), e00724 (2018).
- [12] Terada K., et al., "Measurements of gamma-ray emission probabilities of ²⁴¹Am and ²³⁹Np", *Journal of Nuclear Science and Technology*, **53**(11), 1881-1888 (2016).
- [13] Thompson A. C. and Vaughan D., "X-ray data booklet". Vol. 8, California: Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California Berkeley (2001).
- [14] Zschornack G., "X-Ray Emission Lines and Atomic Level Characteristics", in *Handbook of X-Ray Data*, Springer: Heidelberg, Germany. p. 179-609 (2007).
- [15] Franck H. and Franck D., in *Forensic Engineering Fundamentals*, CRC Press: Taylor & Francis Group: Boca Raton, Florida. p. 389 (2013).
- [16] Aarts M. P. J. and Rosemann A. L. P., "Towards a uniform specification of light therapy devices for the treatment of affective disorders and use for non-image forming effects: Radiant flux", *Journal of affective disorders*, **235**, 142-149 (2018).
- [17] Balanis C. A., "Antenna theory: analysis and design", John Wiley & Sons: New Jersey. p. 37 (2016).
- [18] O'Meara J. M., Börjesson J., and Chettle D. R., "Improving the in vivo X-ray fluorescence (XRF) measurement of renal mercury", *Applied Radiation and Isotopes*, **53**(4-5), 639-646 (2000).
- [19] Tousi E. T., "Evaluation of levels of some trace metals in Crocus sativus L. and their transfer trend from soil to saffron by using neutron activation analysis (In Persian)", *Saffron Agronomy and Technology*, **8**(3), 377-397 (2020).

محاسبات و ارتباطات کوانتمی با اتم‌های ریدبرگی^۱

محمد صادق خزعلی^۲

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۱۰/۰۲

تاریخ بازنگری: ۱۳۹۹/۱۲/۱۷

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۱/۱۵

چکیده

اتم‌های برانگیخته به ترازهای انرژی بالا که اتم‌های ریدبرگی نامیده می‌شوند، دارای دوقطبی‌های قوی هستند. امکان ایجاد برهم‌کنش قوی و تنظیم‌پذیر با برانگیختگی لیزری، اتم‌های ریدبرگی را به گزینه‌ای جذاب برای فناوری کوانتمی تبدیل کرده است. در این مقاله مروری، بعد از معرفی اتم‌های ریدبرگی و خواص آن‌ها، پیشرفت‌های حاصله در ساخت رایانه‌های کوانتمی ریدبرگی در شبکه اتمی بررسی می‌شود. سپس کاربرد اتم‌های ریدبرگی در اپتیک کوانتمی و بهره‌گیری از آن در تولید چشمه تک فوتون و گیت دو فوتونی ارائه می‌شود.

واژگان کلیدی: اتم‌های ریدبرگی، محاسبات کوانتمی، ارتباطات کوانتمی.

۱. مقدمه

محاسبات و ارتباطات کوانتمی چشم‌انداز روشنی از پیشرفت‌های علمی و فناوری نوید می‌دهد. رایانه‌های کوانتمی [۱] در زمینه‌های مختلفی مانند تجزیه به عوامل اول [۲] جستجو [۳] و

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2021.34445.1188

^۲ موسسه اپتیک کوانتومی و اطلاعات کوانتومی، اکادمی علوم اتریش، اینسبروک، اتریش؛
دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، ایران. Email: mskhazali@yahoo.com

شبه‌سازی کوانتومی [۶-۴]، بر رایانه‌های کلاسیک برتری دارند. تولید اینترنت کوانتومی [۹-۷] برای ایجاد خوشه‌هایی از رایانه‌های کوانتومی، رمزنگاری کوانتومی برای ارتباطات ایمن [۱۰]، همزمان‌سازی ساعت‌های اتمی [۱۱]، ایجاد شبکه‌ی همدوسی از تلسکوپ‌ها [۱۲] و کاربردهای گوناگون دیگر [۱۳-۱۶] در اولویت سرمایه‌گذاری روز دنیا قرار دارد.

مدل‌های محدودی از رایانه‌های کوانتومی در ساختارهای ابررسانایی، یونی، اتمی و فوتونی پیاده‌سازی شده‌اند [۱۷]. در رایانه‌های با مبنای اتمی، اتم‌های برانگیخته به ترازهای بالای انرژی (ترازهای ریدبرگی) دارای مزیت تنظیم‌پذیری عالی هستند [۱۸]. این قابلیت به دلیل امکان استفاده از برانگیختن لیزری اتم‌ها به‌عنوان وسیله‌ی تنظیم برهم‌کنش دوربرد و قوی دوقطبی-دوقطبی است [۱۹]. امکان روشن و خاموش کردن برهم‌کنش با تفاوت انرژی از مقیاس ۱۲ مرتبه‌ی بزرگی تنها منحصر به سامانه‌های ریدبرگی است. در مقام مقایسه‌ی سامانه‌های یونی، به دلیل حضور دائمی برهم‌کنش فوق‌قوی کولنی، امکان تکثیرپذیری کمتری نسبت به شبکه‌های اتمی دارند.

قابلیت ایجاد شبکه‌های بزرگ از اتم‌های فوق‌سرد [۲۰] و برانگیختن آن‌ها به تراز ریدبرگی، انقلابی در فناوری کوانتومی ایجاد کرده است. پیشرفت‌های متعاقب در برانگیختن ترازهای ریدبرگی اتم‌های داغ [۲۱] و همچنین اکسیژن‌ها [۲۲] در مواد بلوری امکان تولید انبوه این فناوری را نوید می‌دهد. اتم‌های ریدبرگی کاربردهای متنوعی در زمینه‌ی محاسبات کوانتومی [۲۳]، اپتیک کوانتومی غیرخطی [۲۴، ۲۵]، ایجاد درهم‌تنیدگی [۲۶، ۲۷]، شبه‌سازی کوانتومی سامانه‌های حالت جامد [۲۸] و تولید مواد کوانتومی [۲۹، ۳۰] دارد.

در این مقاله مروری بعد از معرفی اتم‌های ریدبرگی و خواص آن‌ها، پیشرفت‌های حاصل در ساخت رایانه‌های ریدبرگی در شبکه‌ی اتمی بررسی می‌شود. سپس کاربرد اتم‌های ریدبرگی در اپتیک کوانتومی و بهره‌گیری از آن در تولید چشمه‌ی تک فوتون و گیت دوفوتونی ارائه می‌شود.

۲. اتم‌های ریدبرگی و خواص آن‌ها

اتم‌های ریدبرگی، اتم‌هایی است که الکترون ظرفیت آن‌ها به ترازهای بالای انرژی برانگیخته شده است. این اتم‌ها خواصی غیرمتعارف در مقایسه با اتم‌های حالت پایه دارند. برای مثال در اتم هیدروژن اندازه‌ی اتم ریدبرگی $r \propto n^2$ برانگیخته به تراز 100S در حدود $1\mu\text{m}$ می‌باشد. برای مقایسه، این اتم ریدبرگی ۱۰۰۰۰ بار بزرگ‌تر از اتم حالت پایه است. گشتاور دوقطبی قوی تراز ریدبرگ به ترازهای ریدبرگی همسایه $\mu_{rr'} = \langle r | \mu | r' \rangle \propto n^2$ سبب ایجاد قطبش قوی در اتم‌های ریدبرگی می‌شود. وجود دوقطبی‌های قوی در کنار فاصله‌ی کم ترازهای انرژی $\Delta E_{rr'} \propto n^{-3}$ باعث ایجاد برهم‌کنش قوی دوقطبی-دوقطبی $\propto n^4$ و واندروالس $\propto n^{11}$ می‌شود.

از طرف دیگر کاهش همپوشانی تراز ریدبرگی و تراز پایه، باعث کاهش گشتاور دو قطبی جابه جایی میان حالت پایه و حالت اتمی $\mu_{rg} \propto n^{-3/2}$ و در نتیجه نواخت و انگیزختگی تراز ریدبرگی می شود. همین امر موجب طول عمر بالای اتم های ریدبرگی می شود. برای مثال، تراز $n=50$ طول عمری معادل $100\mu s$ دارد. برخی خواص اتم های ریدبرگی در جدول شماره ۱ آمده است.

جدول ۱ مقیاس خواص مهم اتم های ریدبرگی بر اساس عدد کوانتمی اصلی n .

خواص	تناسب
انرژی ترازها	n^{-2}
فاصله انرژی ترازها	n^{-3}
شعاع مداری	n^2
گشتاور دو قطبی μ_{rrr}	n^2
گشتاور دو قطبی μ_{gr}	$n^{-3/2}$
قطبش پذیری	n^7
طول عمر تابشی	n^3
طول عمر متأثر از برانگیختگی با تابش جسم سیاه	n^2
برهم کنش وان در والس	n^{11}
برهم کنش دو قطبی	n^4

ترازهای انرژی اتم های ریدبرگی مانند ترازهای انرژی اتم هیدروژن است. علت این پدیده در همپوشانی ناچیز الکترون ظرفیت ریدبرگی و هسته یونی است. تأثیرات هسته یونی با استفاده از پارامتر وابسته به حالت نقص کوانتمی δ_{nlj} در نظر گرفته می شود (برای اطلاعات بیشتر رک. جدول شماره ۲). ترازهای انرژی با رابطه زیر داده می شود

$$E_{nl} = -R/(n - \delta_{nlj})^2 \quad (1)$$

که در آن، $R = 13.61eV$ ثابت ریدبرگ و n عدد کوانتمی اصلی است. بر خلاف ترازهای اتم هیدروژن، ترازهای دارای عدد کوانتمی اربیتال l مختلف و n یکسان تبهگن نیستند. علت این پدیده را در نفوذ الکترون به هسته یونی در $l < 3$ و برهم کنش الکترون ظرفیت با الکترون های هسته یونی می توان یافت. لختی های زاویه ای بزرگ تر متناظر با اهای بزرگ تر باعث نیروی گریز از مرکز بزرگ تر می شود و تابع موج الکترون را از محدوده هسته یونی خارج می کند و در نتیجه انرژی حالت های با $l > 3$ تبهگن می شود. مقیاس انرژی ترازهای ریدبرگی و فاصله انرژی ترازهای همسایه ریدبرگی به ترتیب با $E_r \propto n^{-2}$ و $E_r - E_{r0} \propto n^{-3}$ داده می شود.

جدول ۲ پارامتر نقص کوانتومی با رابطه $\delta_{n,l,j} = b_1(l,j) + b_2(l,j)/(n - b_1(l,j))^2$ محاسبه می‌شود.

l	j	b ₁	b ₂
۰	۰/۵	۳/۱۳۱۱۸۰۴	۰/۱۷۸۴
۱	۰/۵	۲/۶۵۴۸۸۴۹	۰/۲۹۰۰
۱	۱/۵	۲/۶۴۱۶۷۳۷	۰/۲۹۵۰
۲	۱/۵	۱/۳۴۸۰۹۱۷۱	۰/۶۰۲۸۶
۲	۲/۵	۱/۳۴۶۴۶۵۷۲	۰/۵۹۶
۳	۲/۵	۰/۰۱۶۵۱۹۲	۰/۰۸۵
۳	۳/۵	۰/۰۱۶۵۴۳۷	۰/۰۸۶

طول عمر تراز ریدبرگی: عوامل اصلی اتلاف از تراز ریدبرگی اتلاف تابشی و اتلاف تابش سیاه است. طول عمر تراز ریدبرگی از رابطه $\tau_R = (\Gamma_r + \Gamma_{BBR})^{-1}$ به دست می‌آید. نواخت اتلاف تابشی از جمع نواخت و انگیزش تراز i به ترازهای دیگر f داده می‌شود [۲۸-۳۱]

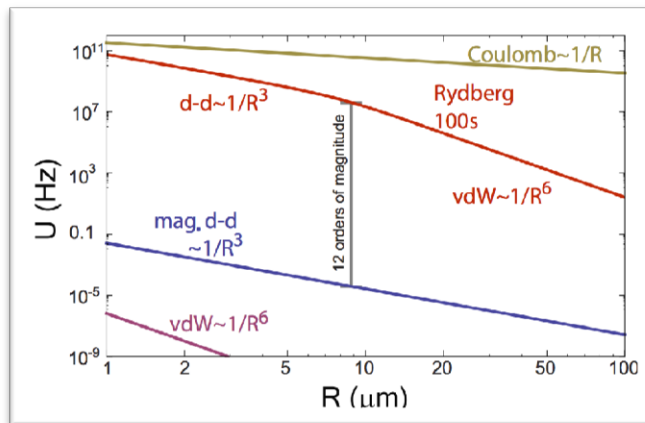
$$\Gamma_r = \sum_f A_{if} = \frac{2e^2}{3\epsilon_0 c^3 \hbar} \sum_{E_f < E_i} \omega_{if}^3 |\langle i | \mathbf{r} | f \rangle|^2 \quad (۲)$$

که A عامل انیشتن نام دارد. کانال غالب در نواخت اتلاف تابشی، کانالی است که بزرگ‌ترین فاصله انرژی ω_{if} را داشته باشد. در نتیجه طول عمر تابشی با مقیاس n^3 رابطه دارد. برهم کنش دو قطبی دو اتم ریدبرگی با رابطه C_3/r^3 داده می‌شود که در آن C_3 با توان دوم گشتاور جابه‌جایی دو قطبی میان دو زوج ریدبرگی رابطه دارد. در نتیجه برهم کنش دو قطبی با مقیاس n^4 رابطه دارد. در برهم کنش و اندر واللس C_6/R^6 ، برهم کنش غیرتشدیدی در مرتبه دوم تقریب بررسی می‌شود. از آن‌جا که C_6 با توان چهارم گشتاور جابه‌جایی دو قطبی تقسیم بر تفاوت انرژی دو زوج ریدبرگی رابطه دارد مقیاس آن با n^{11} داده می‌شود.

برانگیختن لیزری اتم‌های ریدبرگی نقش کلیدی در ایجاد برهم کنش قوی و کنترل‌پذیر اتمی ایفا می‌کند. امکان روشن و خاموش کردن سریع برهم کنش با استفاده از برانگیختن لیزری و هم‌چنین تمایز قدرت برهم کنش با ۱۲ مرتبه بزرگی (شکل ۱) باعث جذابیت اتم‌های ریدبرگی برای استفاده در فناوری کوانتومی شده است.

۳. رایانه‌های کوانتومی در شبکه اتم‌های ریدبرگی

در گیت‌های ریدبرگی، بیت کوانتومی (کیوبیت) در دو تراز فوق پایدار پایه اتمی ذخیره و به صورت $|0\rangle$ و $|1\rangle$ نام‌گذاری می‌شود. در گیت‌های دو کیوبیتی، حالت $|1\rangle$ هر دو اتم به



شکل ۱: برهم کنش دو اتم در تراز پایه (آبی)، تراز 100S ریدبرگی (قرمز) و دو یون (طلایی) بر حسب فاصله دو اتم. کنترل لیزری تراز اتمی به عنوان کلیدی برای روشن و خاموش کردن به اختیار برهم کنش با نفاذی از مرتبه ۱۲، اتم‌های ریدبرگی را نامزد جذابی برای آزمایش‌های کوانتومی می‌کند. قدرت برهم کنش در فاصله‌های کوتاه از نوع دوقطبی $\frac{C_3}{r^3}$ و در فاصله‌های بزرگ از نوع واندروالس $\frac{C_6}{r^6}$ است [۲۳].

تراز ریدبرگی برانگیخته می‌شود. در این جا بسته به قدرت برهم کنش دوقطبی دو نوع گیت برهم کنشی [۱۸، ۲۴، ۳۳] یا بلاکیدی [۳۴-۴۰] تعریف می‌شود. در گیت برهم کنشی هر دو اتم به تراز ریدبرگی برانگیخته و فاز π از برهم کنش دو اتم در طول زمان ایجاد می‌شود. انتقال همدوس ترازهای ریدبرگی به تراز $|11\rangle$ به انتقال فاز مذکور به فضای کیوبیتی می‌انجامد. در گیت‌های بلاکیدی، برهم کنش قوی، تراز ریدبرگی را از تشدید با لیزر خارج کرده و مانع از برانگیختگی هم‌زمان دو اتم می‌شود. در مدل بلاکیدی فاز مقید، از فرایند برانگیختگی لیزری ایجاد می‌شود. زمانی که اتم‌های خنثی در حالت پایه هستند کم‌ترین برهم کنش را با اتم‌های دیگر دارند که در نتیجه به طول عمر و همدوسی طولانی آن‌ها می‌انجامد. از طرف دیگر، برهم کنش ضعیف سبب سخت‌تر شدن تولید گیت‌های دو اتمی می‌شود. برای حل این مشکل از ادغام تله‌های اتمی و بهره‌گیری از برهم کنش اتم‌ها یا از روش‌های تداخلی استفاده می‌شود. راه حل بهتر برای ایجاد برهم کنش قوی و دوربرد برانگیزش اتم‌های خنثی به ترازهای ریدبرگی است. برهم کنش قوی دوقطبی سبب ایجاد فاصله ممنوعه (بلاکید) در اطراف اتم ریدبرگی می‌شود. در این فاصله اتم‌های اطراف از تشدید با لیزر خارج می‌شوند و در نتیجه امکان برانگیختگی آن‌ها وجود نخواهد داشت. این برانگیختگی مشروط، به عنوان منبع اصلی در تولید گیت‌های دو اتمی استفاده می‌شود. مانع اساسی در ساخت گیت‌های ریدبرگی با ماندگاری مطلوب، طول عمر کوتاه تراز ریدبرگی و برانگیختگی ناخواسته ترازهای همسایه است [۲۳، ۴۱]. استفاده از محیط برودتی [۴۲]

باعث کاهش اتلاف ناشی از تابش سیاه شده و طول عمر تراز ریدبرگی را زیاد می‌کند. برانگیختگی ناخواسته ترازهای همسایه با استفاده از مدل حالت تاریک تنظیم‌پذیر است [۴۳]. استفاده از مدل حالت تاریک، نامانستگی گیت ریدبرگی را تا مرتبه $1/00000$ کاهش می‌دهد. یکی دیگر از مشکلات تجربی از نوفه لیزرهای برانگیزنده ناشی می‌شود. تلاش‌های اخیر در استفاده از کاواک برای کاهش این نوفه‌ها سبب افزایش مانستگی برانگیختگی تا 97% شده است [۴۵]. پیشرفت‌های جدید در تولید شبکه‌های اتمی یک [۴۶، ۴۷] و دو [۴۸-۵۷] و سه [۵۸، ۵۹] بعدی با صدها اتم مقید، امکان محاسبات کوانتومی پیچیده به همراه اعمال دستورالعمل‌های تصحیح خطا را مهیا کرده است.

اتم‌های ریدبرگی به دلیل برهم‌کنش دوربرد و قوی خود جذابیت زیادی برای تولید گیت‌های چندکیوبیتی [۴۴، ۶۰] یا ایجاد درهم‌تنیدگی [۲۶، ۲۷، ۴۴] در ابعاد اتمی بالا را دارند. در حالی که تمامی عملیات‌های کوانتومی را با استفاده از مداری از گیت‌های تک کیوبیتی و دوکیوبیتی می‌توان پیاده‌سازی کرد، استفاده از برهم‌کنش چندذره‌ای برای پیاده‌سازی مستقیم الگوریتم‌های پیچیده کوانتومی باعث افزایش سرعت و دقت عملیاتی می‌شود. برای مثال، در تولید گیت توفولی C_k -NOT با $k > 5$ به $120-32k$ عدد گیت یک و دو کیوبیتی نیاز است [۶۱] که $2k+2$ عدد از آن‌ها گیت C-NOT است [۶۲]. با استفاده از برهم‌کنش دوربرد ریدبرگی در گیت حالت تاریک، تمامی عملیات گیت مستقل از تعداد کیوبیت‌ها k ، تنها با شش تپ لیزر انجام می‌شود [۴۴]. تولید گیت C -NOT $_k$ توسط اتم‌های ریدبرگی امکان تولید حالت GHZ یا گره شرویدینگر را در یک مرحله مهیا می‌کند [۶۳-۴۴، ۶۶]. همچنین تولید گیت توفولی C_k -NOT در دستورالعمل‌های اصلاح خطا [۶۷] و جستجوی کوانتومی [۶۸، ۶۹] کاربرد دارد.

۴. اپتیک کوانتومی با اتم‌های ریدبرگی

در اپتیک کوانتومی با اتم‌های ریدبرگی، ما به دنبال استفاده از برهم‌کنش قوی برای کنترل نور در ابعاد تک فوتون هستیم. در این زمینه تولید چشمه تک فوتون، ترانزیستورهای فوتونی و دروازه‌های فوتونی مد توجه قرار دارند. در این بخش، ابتدا به فیزیک انتشار فوتون‌ها در محیط ریدبرگی می‌پردازیم. برهم‌کنش فوتون‌ها و اتم‌ها برای ایجاد حافظه کوانتومی به طور گسترده‌ای بررسی شده است [۷۰-۷۳]. برای توضیح برهم‌کنش اتم‌ها و فوتون‌ها، محیط اتمی را مجموعه‌ای از اتم‌های دو ترازه با حالات پایه $|g\rangle$ و حالت برانگیخته ریدبرگی $|r\rangle$ در نظر می‌گیریم. تک فوتونی که در زمان $t = 0$ در محیط اتمی قرار می‌گیرد، موجب ایجاد برانگیختگی غیرمقید در سامانه می‌شود. این برانگیختگی به صورت زیر نمایش داده می‌شود

$$\sigma(z, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N c_j e^{ik \cdot z_j} |g_1 \dots r_j \dots g_N \rangle \quad (۳)$$

که در آن، N تعداد اتم‌ها و z_j مکان اتم j ام و c_j دامنه برانگیختگی اتم j ام است. در این تابع موج تنها یک اتم توسط تک‌فوتون برانگیخته شده است، اما این که کدام اتم برانگیخته است مشخص نیست. در این حالت برهم‌نهی اطلاعات فوتون در فاز و دامنه تابع موج ذخیره می‌شود تا در هنگام بازیافت فوتون در جهت اولیه خود تداخل سازنده داشته و بازیافت شود.

در اپتیک ریدبرگی، برای تولید شفافیت ناشی از القای الکترومغناطیسی (EIT)^۱، تراز برانگیخته ریدبرگی $|r\rangle$ توسط لیزر به تراز $|e\rangle$ با بسامد رابی Ω جفت می‌شود. همچنین، تراز $|e\rangle$ توسط تپ تک‌فوتون به تراز پایه با ضریب $g\sqrt{N}$ جفت می‌شود. ویژه حالت این سامانه پلاریتون نام دارد، که شبه‌ذره‌ای است تشکیل شده از فوتون و برانگیختگی ریدبرگی [۷۴]

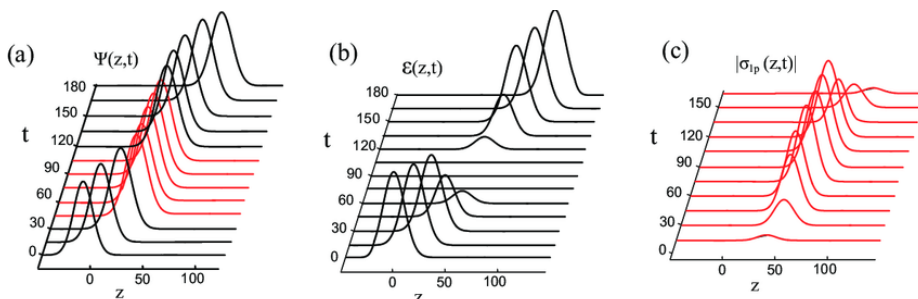
$$\widehat{\Psi}(z, t) = \cos \theta(t) \hat{\epsilon}(z, t) - \sin \theta(t) \sqrt{N} \hat{\sigma}(z, t) \quad (۴)$$

که طبیعت فوتونی یا اتمی این ذره و سرعت انتشار آن در محیط $c \cos^2 \theta$ با استفاده از شدت لیزر مهار می‌شود،

$$\cos \theta = \frac{\Omega(t)}{g\sqrt{N}} \quad (۵)$$

معادله حرکت شبه‌ذره پلاریتون با عبارت زیر داده می‌شود

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + c \cos^2 \theta(t) \frac{\partial}{\partial z} \right] \widehat{\Psi}(z, t) = 0 \quad (۶)$$



شکل ۲ (الف) پلاریتون شبه‌ذره‌ای است با دو ماهیت (ب) فوتونی و (س) اتمی [۷۴]. طبیعت این ذره و سرعت انتشار آن در محیط با استفاده از شدت لیزر کنترل می‌شود.

درحالی که فوتون‌ها با هم برهم‌کنشی ندارند، تبدیل آن‌ها به پلاریتون‌های ریدبرگی به برهم‌کنش قوی و اندروالس می‌انجامد. برای مثال، در صورتی که محیط اتمی از شعاع بلاکید

¹ Electromagnetically induced transparency (EIT)

کوچک تر باشد تنها یک برانگیختگی در محیط شکل می‌گیرد که به صورت تک فوتون از محیط اتمی خارج می‌شود [۷۸۷۵].

۵. چشمه تک فوتون

روش‌های متنوعی در تولید چشمه تک فوتون به کار رفته است [۷۹]. در مدل ریدبرگی چشمه تک فوتون با استفاده از روش فیلتر کردن یا برانگیختن تک تابشگر تولید می‌شود. در مدل فیلترینگ، تپ اپتیکی چند فوتونی با عبور از محیط اتمی تحت EIT ریدبرگی به دو طریق فیلتر می‌شود. در روش اول برهم کنش ریدبرگی در تپ غیر تک فوتون شفافیت القایی با میدان الکترومغناطیس را از بین برده و باعث کدر شدن محیط می‌شود [۸۰، ۸۱]. در مدل دوم برهم کنش وابسته به فاصله ریدبرگی C_6/r^6 اطلاعات فازی پلاریتون را بر هم زده [۸۲] و در نتیجه برهم‌کنش سازنده در رابطه (۳) از بین می‌رود.

در مدل تک تابشگر، محیط اتمی کوچک تر از شعاع بلاکید در نظر گرفته می‌شود. برانگیزش لیزری این محیط سبب تولید یک تابشگر ریدبرگی می‌شود [۷۸۷۵]. برای جدا کردن تک فوتون تولید شده از لیزر پمپاژ گسیلنده می‌توان از خاصیت پارسل^۱ استفاده کرد [۷۵]. در این روش با قرار دادن محیط درون کاواک احتمال تابش در راستای کاواک را افزایش می‌دهیم. راه دیگر استفاده از تفاوت طول موج در مدل ترکیب چهار موج^۲ است [۷۶]. در کاربردهای فناورانه، استفاده از اتم‌های فوق سرد مانع مقیاس‌پذیری^۳ چشمه تک فوتون می‌شود. از این رو تولید مدل‌های بالا در اتم‌های داغ [۷۶] و همچنین در اکسیژن‌ها [۷۵، ۸۳] دنبال شده است.

۶. گیت‌های فوتونی

عنصر اساسی دیگر در تولید شبکه فوتونی (اینترنت کوانتومی) [۹-۷]، گیت‌های فوتونی است. در این گیت‌ها، فوتون کنترل‌کننده باعث ایجاد فاز π در فوتون هدف می‌شود. نبود برهم کنش میان فوتون‌ها، تولید گیت غیر تصادفی دوفوتونی را برای مدت‌ها دست‌نیافتنی کرد، به طوری که در مجامع علمی تولید آن را غیرممکن می‌دانستند [۸۴، ۸۵]. تولید گیت دوفوتونی به کامل کردن مجموعه جامعی از گیت‌های کوانتومی^۴ می‌انجامد که با آن هر محاسبه‌ای را می‌توان انجام داد. به طور خاص گیت‌های دوفوتونی در افزایش بازده ایستگاه‌های تقویت تپ کوانتم^۵ برای ارتباطات

¹ Purcell effect

² Four wave mixing

³ Scalability

⁴ Universal quantum gates

⁵ Quantum repeaters

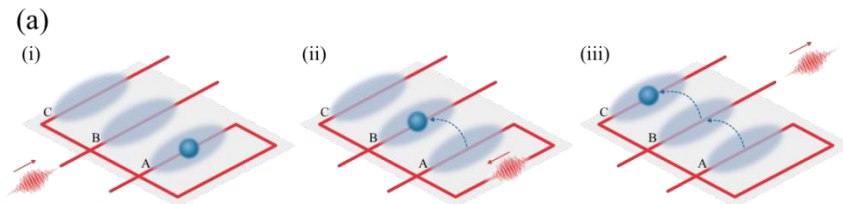
کوانتمی راه دور مؤثر هستند. گیت‌های دوفوتونی به دو دسته با کارکرد احتمالاتی و قطعی تقسیم می‌شوند. در مدل احتمالاتی، پروتوکل KLM [۸۶] با استفاده از اپتیک خطی و پساگزینش^۱ برهم‌کنش احتمالی مؤثری بین فوتون‌ها ایجاد می‌کند. هم‌چنین مدل محاسبات کوانتمی یک‌طرفه^۲ [۸۷، ۸۸] نیز معرفی شده است که در آن تولید شبکه فوتونی درهم‌تنیده اولیه به صورت احتمالاتی انجام می‌گیرد. در گیت‌های با کارکرد قطعی، از مدل پلاریتونی که در بالا توضیح داده شد استفاده می‌شود. برهم‌کنش ریدبرگی میان پلاریتون‌ها به شدت قوی بوده و به تولید گیت فوتونی موجبیتی می‌انجامد.

در تولید گیت‌های فوتونی ایجاد فاز π میان دو فوتون سبب تولید جدول منطقی گیت C-PHASE می‌شود. سه راه مختلف در تولید این فاز مشروط وجود دارد.

۱. این فاز را می‌توان از برانگیختگی دو پلاریتون به تراز ریدبرگی و برهم‌کنش آن‌ها در طول زمان به دست آورد [۲۴].

۲. فاز مورد نظر از فرایند برانگیختگی لیزری به وجود می‌آید. در این جا فاز مشروط از خاصیت بلاکید ایجاد می‌شود [۸۹]. در این حالت دو پلاریتون باید در فاصله نزدیک هم قرار گیرند.

۳. راه سوم در ایجاد گیت فوتونی بر اساس جابه‌جایی پلاریتون‌ها تعریف می‌شود [۲۵]. در این قسم جابه‌جایی برانگیختگی ریدبرگی بر اثر برهم‌کنش و اندرواللس، موجب تولید فاز $\pi/2$ شده و دو برخورد متعاقب مانند شکل ۳ فاز π مد نظر را ایجاد می‌کند.



شکل ۳ دو برخورد متعاقب پلاریتون‌ها سبب جابه‌جایی تراز ریدبرگی و ایجاد فاز π و در نتیجه گیت C-PHASE می‌شود [۲۵].

۷. نتیجه‌گیری و چشم‌انداز

در این مقاله، مروری بر خواص اتم‌های ریدبرگی و کاربرد آن‌ها در فناوری اطلاعات کوانتمی ارائه شد. برهم‌کنش دوربرد و قوی و تنظیم‌پذیر ریدبرگی می‌تواند ارزشمندی در پیاده‌سازی

¹ Post selection

² One way quantum computing

الگوریتم‌های پیچیده کوانتمی در مقایسه با مدل مداری به حساب می‌آید. ترازهای ریدبرگی و فیزیک ارائه شده در این مقاله، قابل بسط به هر سامانه الکترونی مقید نظیر تمامی اتم‌های جدول مندلیف، یون‌ها، ملکول‌ها و اکسیتون‌ها در نیم‌رساناهاست. برهم‌کنش ریدبرگی در زمینه‌های دیگر فناوری نظیر شبیه‌سازی کوانتمی، اندازه‌گیری و عکس‌برداری کوانتمی به‌طور گسترده‌ای به کار رفته است.

مانع اصلی تکثیرپذیری در پردازشگرهای ریدبرگی، طول عمر کوتاه این اتم‌هاست. در این راستا، برانگیختن و جداسازی ترازهای ریدبرگی دایره‌ای در حضور میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی، باعث دست‌یابی به ۲۰۰ ثانیه زمان همدوسی گردیده است [۹۰]. مانستگي گیت‌های آزموده در این سامانه از مرتبه گیت‌های پیشرو یونی است. در فناوری‌های مرتبط به ارتباطات کوانتمی، استفاده از اتم‌های فوق سرد مانع اصلی در تکثیرپذیری است. در حالی که اتم‌های فوق سرد نیاز به تأسیسات آزمایشگاهی بزرگ دارند، استفاده از مدل ریدبرگی در اتم‌های داغ یا اکسیتون‌ها امکان پیاده‌سازی سامانه در ابعاد کاربردی را فراهم می‌آورد.

برهم‌کنش دوربرد ریدبرگی و برانگیختگی لیزری اتم‌های دلخواه، امکان اعمال برنامه‌نویسی کوانتمی در شبکه اتمی را فراهم آورده است. توان لیزری و در نتیجه سرعت گیت تابعی از فاصله اتمی است. در مدل بلاکیدی توان لیزری دارای حد بالای برهم‌کنش ریدبرگی است. در نتیجه زمان طولانی برهم‌کنش در حضور اتلاف ریدبرگی، برد برهم‌کنش و گنجایش پردازشگرهای ریدبرگی را تعیین می‌کند.

۸. تقدیر و تشکر

مؤلف از حمایت مالی بنیاد ملی نخبگان از این پروژه تقدیر می‌کند.

منابع

- [1] Deutsch D., Proc. R. Soc. Lond. A 400, 97 (1985).
- [2] Sho P. W., SIAM J. Comput. 2, 1484 (1997).
- [3] Grove L. K., Phys. Rev. Lett. 7, 325 (1997).
- [4] Feynman R. P., Int. J. Theor. Phys. 21, 467 (1982).
- [5] Lloyd S., Science 273, 1073 (1996).
- [6] Brown K. L., W. J. Munro, and V. M. Kendon., Entropy 12, 2268 (2010).
- [7] Simon C., Nature Photonics 11, 678 (2017).
- [8] Wehner S., Elkouss D., Hanson R., Nature 362, 6412, (2018).
- [9] Meter V., Rodney Quantum Networking. Hoboken: Wiley, 127 (2014).
- [10] Bennett C. H. and Brassard G., Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing. In Proceedings of IEEE International Conference on Computers, Systems and Signal Processing, volume 175, 8 (1984).
- [11] Kómár, P., Kessler, E. M.; Bishof, M.; Jiang, L.; Sørensen, A. S.; Ye, J.; Lukin, M. D. "A quantum network of clocks". Nature Physics. 10, 582 (2014).

- [12] Gottesman D., Jennewein T., Croke S., "Longer-Baseline Telescopes Using Quantum Repeaters". *Physical Review Letters*. **109**, 070503 (2012).
- [13] Döscher C, Keyl M - *Fluctuation and Noise Letters* **2**, 125 (2002).
- [14] Bennett C. H.; Brassard, Gilles "Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing". *Theoretical Computer Science*, **560**, 7 (2014).
- [15] Lunghi, T., Kaniewski, J., Bussi eres, F., Houlmann, R., Tomamichel, M., Kent, A., Gisin, N., Wehner, S., Zbinden, H. "Experimental Bit Commitment Based on Quantum Communication and Special Relativity", *Physical Review Letters*. **111**, 18 (2013).
- [16] Wang, Ming-Qiang, Wang, Xue, Zhan, Tao "Unconditionally secure multi-party quantum commitment scheme" (PDF). *Quantum Information Processing*. **17**, 2 (2018).
- [17] Ladd T. D., Jelezko F., Laflamme R., Y. Nakamura, C. Monroe, and J. L. O'Brien. *Nature* **464**. 45 (2010);
- Kjaergaard M., et al. "Superconducting qubits: Current state of play." *Annual Review of Condensed Matter Physics* **11**, 369 (2020);
- B. Iulia, S. Ashhab, and F. Nori. "Natural and artificial atoms for quantum computation." *Reports on Progress in Physics* **74**, 104401(2011);
- Flamini, Fulvio, Nicolo Spagnolo, and Fabio Sciarrino. "Photonic quantum information processing: a review." *Reports on Progress in Physics* **82**, 016001(2018).
- [18] Jaksch D., Cirac J.I., Zoller P., Rolston S.L., R. Cote, and M.D. Lukin, *Phys. Rev. Lett.* **85**. 2208 (2000).
- [19] Saffman M., Walker T. G., and Mølmer K., *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2313 (2010).
- [20] Barredo D, Lienhard V, de Leseleuc S, Lahaye T and Browaeys A *Nature* **561**. 79 (2018).
- [21] Ripka F, Kubler H, Low R and Pfau T, *Science* **362**, 446 (2018).
- [22] Kazmierczuk T., et. al, *Nature* **514**, 343 (2014).
- [23] Saman M., Walker T. G., and Mølmer K., *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2313 (2010); Maller K. M., M. T. Lichtman, T. Xia, Y. Sun, M. J. Piotrowicz, A.W. Carr, L. Isenhower, and M. Saffman, Rydberg-Blockade Controlled-NOT Gate and Entanglement in a Two-Dimensional Array of Neutral-Atom Qubits, *Phys. Rev. A* **92**, 022336 (2015); T. M. Graham, M. Kwon, B. Grinkemeyer, Z. Marra, X. Jiang, M. T. Lichtman, Y. Sun, M. Ebert, and M. Saffman, Rydberg Mediated Entanglement in a Two-Dimensional Neutral Atom Qubit Array, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 230501 (2019); H. Levine, A. Keesling, G. Semeghini, A. Omran, T.T. Wang, S. Ebadi, H. Bernien, M. Greiner, V. Vuletic, H. Pichler, and M. D. Lukin, Parallel Implementation of High-Fidelity Multiqubit Gates with Neutral Atoms, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 170503 (2019).
- [24] Khazali M., Heshami K., Simon C., *Phys. Rev. A* **91**, 030301(R) (2015); Gorshkov A. V., Otterbach J., M. Fleischhauer, T. Pohl, and M. D. Lukin, Photon-Photon Interactions via Rydberg, Blockade, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 133602 (2011); D. Tiarks, S. Schmidt-Eberle, T. Stolz, G. Rempe, and S. Dürr, A Photon-Photon Quantum Gate Based on Rydberg, Interactions, *Nat. Phys.* **15**, 124 (2019); Busche H., P. Huillery, S. W. Ball, T. Ilieva, M. P. A. Jones, and C. S. Adams, Contactless Nonlinear Optics Mediated by Long-Range Rydberg Interactions, *Nat. Phys.* **13**, 655, (2017).
- [25] Khazali M., Murry C., Pohl T., *Phys. Rev. Lett.* **123**, 113605 (2019); Firstenberg O, Adams C S and Hofferberth S, *J. Phys. B* **49** 152003 (2016); B. He, A. V. Sharypov, J. Sheng, C. Simon, and M. Xiao, Two-Photon Dynamics in Coherent Rydberg Atomic Ensemble, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 133606 (2014); D. Paredes-Barato and C. S. Adams, All-Optical Quantum Information Processing Using Rydberg Gates, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 040501 (2014).
- [26] Khazali M., Lau H. W., Humeniuk A., Simon C., Large Energy Superpositions via Rydberg Dressing *Phys. Rev. A* **94**, 023408 (2016); Lienhard V., S. de Leseleuc, D. Barredo, T. Lahaye, A. Browaeys, M. Schuler, L.P. Henry, and A.M. Läuchli, Observing

- the Space- and Time-Dependent Growth of Correlations in Dynamically Tuned Synthetic Ising Models with Antiferromagnetic Interactions, *Phys. Rev. X* **8**, 021070 (2018); M. Saffman and K. Mølmer, Efficient Multiparticle Entanglement via Asymmetric Rydberg Blockade, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 240502 (2009).
- [27] Khazali M., *Phys. Rev. A* **98**, 043836 (2018).
- [28] Khazali M., Rydberg quantum simulator of topological insulators, *arXiv* 2101.11412 (2021); Peter D., Yao N. Y., N. Lang, S. D. Huber, M. D. Lukin, and H. P. Buchler, Topological bands with a chern number $c = 2$ by dipolar exchange interactions, *Phys. Rev. A* **91**, 053617 (2015); S. Weber, S. d. Leseleuc, V. Lienhard, D. Barredo, T. Lahaye, A. Browaeys, and H. P. Buchler, Topologically protected edge states in small Rydberg systems, *Quantum Sci. Technol.* **3**, 044001 (2018); Robin Cote, Alexander Russell, Edward E Eyler, and Phillip L Gould. Quantum random walk with rydberg atoms in an optical lattice. *New Journal of Physics*, **8**(8):156, 2006; Daniel Barredo, Henning Labuhn, Sylvain Ravets, Thierry Lahaye, Antoine Browaeys, and Charles S Adams. Coherent excitation transfer in a spin chain of three rydberg atoms. *Physical review letters*, **114**(11):113002, 2015; DW Schonleber, Alexander Eisfeld, Michael Genkin, S Whitlock, and Sebastian Wuster. Quantum simulation of energy transport with embedded rydberg aggregates. *Physical review letters*, **114**, 123005, (2015); A Pineiro Orioli, A Signoles, H Wildhagen, G Gunter, J Berges, S Whitlock, and M Weidemuller. Relaxation of an isolated dipolar-interacting rydberg quantum spin system. *Physical review letters*, **120**, 063601, 2018; G Gunter, H Schempp, M Robert-de Saint-Vincent, V Gavryusev, S Helmrich, CS Hofmann, S Whitlock, and M Weidemuller. Observing the dynamics of dipole-mediated energy transport by interaction-enhanced imaging. *Science* **342**, 954–956, 2013; H Schempp, G Gunter, S Wuster, M Weidemuller, and S Whitlock. Correlated exciton transport in rydberg-dressed-atom spin chains. *Physical review letters*, **115**, 093002, 2015; Fabian Letscher and David Petrosyan. Mobile bound states of rydberg excitations in a lattice. *Physical Review A* **97**, 043415, 2018; S Wuster, C Ates, A Eisfeld, and JM Rost. Excitation transport through rydberg dressing. *New Journal of Physics* **13**, 073044, 2011; Alexandre Dauphin, Markus Muller, and Miguel Angel Martin-Delgado. Quantum simulation of a topological mott insulator with rydberg atoms in a lieb lattice. *Physical Review A*, **93**, 043611, 2016.
- [29] Khazali M., Rydberg Noisy-Dressing and applications in making soliton-molecules and droplet quasi-crystals, *arXiv:2007.01039* (2020); Maucher F., Henkel N., Saffman M., W. Krlikowski, S. Skupin, and T. Pohl, Rydberg-induced solitons: three-dimensional self-trapping of matter waves, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 170401 (2011).
- [30] Henkel N., Cinti F., Jain P., Pupillo G., and Pohl T., Supersolid Vortex Crystals in Rydberg-Dressed Bose-Einstein Condensates, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 265301 (2012); I. Seydi, S. H. Abedinpour, R. E. Zillich, R. Asgari, B. Tanatar, Rotons and Bose condensation in Rydberg-dressed Bose Gases, *arXiv:1905.01643* (2019).
- [31] Khazali M., “Applications of Atomic Ensembles for Photonic Quantum Information Processing and Fundamental Tests of Quantum Physics”, Ph.D thesis, University of Calgary, (2016); I. I. Beterov, I. I. Ryabtsev, D. B. Tretyakov, and V. M. Entin, *Phys. Rev. A* **79**, 052504 (2009); R. Low et al., *J. Phys. B: Atom. Mole. Opt.* **45** (2012); C. Vaillant, PhD thesis, Durham University (2014).
- [32] Saman M. and Walker T. G., *Phys. Rev. A* **72**, 022347 (2005).
- [33] Jaksch D., J.I. Cirac, P. Zoller, S.L. Rolston, R. Cote, and M. D. Lukin, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2208 (2000).
- [34] Lukin M. D., Fleischhauer M., Cote R., L. M. Duan, D. Jaksch, J. I. Cirac, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 037901 (2001).
- [35] Muller M., Lesanovsky I., Weimer H., Buchler H. P., and Zoller P., *Phys. Rev. Lett.* **102**, 170502 (2009).
- [36] Isenhowe L., Saman M., and Mølmer K., *Quant. Info. Pro.* **10**, 755 (2011).
- [37] Saman M., T. G. Walker, and K. Mølmer, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2313 (2010).

- [38] Isenhower L. E. Urban, X. L. Zhang, A. T. Gill, T. Henage, T. A. Johnson, T. G. Walker, and M. Saffman, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 010503 (2010).
- [39] Wilk T., A. Gaetan, C. Evellin, J. Wolters, Y. Miroshnychenko, P. Grangier, and A. Browaeys, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 010502 (2010).
- [40] Saffman M, *J. Phys. B* **49** 202001(2016).
- [41] Beterov I I, Ryabtsev I I, Tretyakov D B and Entin V M *Phys. Rev. A* **79** 052504 (2009).
- [42] Petrosyan D., Motzoi F., M. Saffman, and K. Mølmer, *Phys. Rev. A* **96**, 042306 (2017).
- [43] Khazali M. and Mølmer K., *Phys. Rev. X* **10**, 021054 (2020).
- [44] Levine H., A. Keesling, A. Omran, H. Bernien, S. Schwartz, A. S Zibrov, M. Endres, M. Greiner, V. Vuletic, and M. D Lukin. *Physical review letters* **121**, 123603 (2018).
- [45] Bernien H., S. Schwartz, A. Keesling, H. Levine, A. Omran, H. Pichler, S. Choi, A. S. Zibrov, M. Endres, M. Greiner, V. Vuletić, and M. D. Lukin, Probing Many-Body Dynamics on a 51-Atom Quantum Simulator, *Nature* (London) **551**, 579 (2017).
- [46] Omran A. et al., Generation and Manipulation of Schrödinger Cat States in Rydberg Atom Arrays, *Science* **365**, 570 (2019).
- [47] Lienhard V., S. de Leseleuc, D. Barredo, T. Lahaye, A. Browaeys, M. Schuler, L. P. Henry, and A. M. Läuchli, Observing the Space- and Time-Dependent Growth of Correlations in Dynamically Tuned Synthetic Ising Models with Antiferromagnetic Interactions, *Phys. Rev. X* **8**, 021070 (2018).
- [48] Zhang S., F. Robicheaux, and M. Saffman, MagicWavelength Optical Traps for Rydberg Atoms, *Phys. Rev. A* **84**, 043408 (2011).
- [49] Piotrowicz M. J., M. Lichtman, K. Maller, G. Li, S. Zhang, L. Isenhower, and M. Saffman, Two-Dimensional Lattice of Blue-Detuned Atom Traps Using a Projected Gaussian Beam Array, *Phys. Rev. A* **88**, 013420 (2013).
- [50] Nogrette F., H. Labuhn, S. Ravets, D. Barredo, L. Beguin, A. Vernier, T. Lahaye, and A. Browaeys, Single-Atom Trapping in Holographic 2D Arrays of Microtraps with Arbitrary Geometries, *Phys. Rev. X* **4**, 021034 (2014).
- [51] Xia T., M. Lichtman, K. Maller, A. W. Carr, M. J. Piotrowicz, L. Isenhower, and M. Saffman, Randomized Benchmarking of Single-Qubit Gates in a 2D Array of Neutral-Atom Qubits, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 100503 (2015).
- [52] Zeiher J., R. van Bijnen, P. Schauß, S. Hild, J.-y. Choi, T. Pohl, I. Bloch, and C. Gross, Many-Body Interferometry of a Rydberg-Dressed Spin Lattice, *Nat. Phys.* **12**, 1095 (2016).
- [53] Cooper A., J. P. Covey, I. S. Madjarov, S. G. Porsev, M. S. Safronova, and M. Endres, Alkaline-Earth Atoms in Optical Tweezers, *Phys. Rev. X* **8**, 041055 (2018).
- [54] Norcia M. A., Young A. W., and A. M. Kaufman, Microscopic Control and Detection of Ultracold Strontium in Optical-Tweezer Arrays, *Phys. Rev. X* **8**, 041054 (2018).
- [55] Hollerith S., J. Zeiher, J. Rui, A. Rubio-Abadal, V. Walther, T. Pohl, D. M. Stamper-Kurn, I. Bloch, and C. Gross, Quantum Gas Microscopy of Rydberg Macrodimers, *Science* **364**, 664 (2019).
- [56] Saskin S., Wilson J. T., Grinkemeyer B., and Thompson J. D., Narrow-Line Cooling and Imaging of Ytterbium Atoms in an Optical Tweezer Array, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 143002 (2019).
- [57] Wang Y., Kumar A., Wu T. Y., and Weiss D. S., Single-Qubit Gates Based on Targeted Phase Shifts in a 3D Neutral Atom Array, *Science* **352**, 1562 (2016).
- [58] Barredo D., Lienhard V., de Leseleuc S., Lahaye T., and Browaeys A., Synthetic Three-Dimensional Atomic Structures Assembled Atom by Atom, *Nature* (London) **561**, 79 (2018).
- [59] Isenhower, L., Saffman, M. & Mølmer, K. "Multibit C kNOT quantum gates via Rydberg blockade." *Quantum Inf Process* **10**, 755 (2011).
- [60] Maslov D., Dueck G., *El. Lett.* **39**, 1790 (2003).

- [61] Shende V.V., Markov I.L., *Qu. Inf. Comput.* **9**, 0461 (2009).
- [62] Brion E., Mouritzen A. S., and Mølmer K., Conditional dynamics induced by new configurations for Rydberg dipole-dipole interactions. *Phys. Rev. A*. **76**:022334. (2007).
- [63] Saffman M. and Mølmer K., Efficient multiparticle entanglement via asymmetric Rydberg blockade. *Phys. Rev. Lett.*, **102**, 240502 (2009).
- [64] Muller M., Lesanovsky I., Weimer H., Buchler H. P., and Zoller P., Mesoscopic Rydberg gate based on electromagnetically induced transparency. *Phys. Rev. Lett.*, **102**:170502. (2009).
- [65] Opatrny T., and Mølmer K., Spin squeezing and Schrodinger-cat-state generation in atomic samples with Rydberg blockade. *Phys. Rev. A* **86**,02384 (2012).
- [66] Isenhower L., Saffman M., and Mølmer K. Multibit CkNOT quantum gates via Rydberg blockade. *Quant. Inf. Proc.* **10**,755 (2011).
- [67] Grover L. K., Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. *Phys. Rev. Lett.* **79** ,325 (1997).
- [68] Mølmer K, Isenhower L, and Saffman M. "Efficient Grover search with Rydberg blockade." *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **44**, 184016 (2011).
- [69] Lvovsky A.I, Sanders B.C., and Tittel W., *Nature Photonics* **3**, 706 (2009).
- [70] Hammerer K, Srensen A.S., Polzik E.S., *Rev. Mod. Phys* **82**, 1041 (2010).
- [71] Simon C., et al., *Eur. Phys. J. D* **58**, 1 (2010).
- [72] Kaviani H., Khazali M., Ghobadi R., Zahedinejad E., Heshami K. and Simon C., *New J. Phys.* 15 085029 (2013).
- [73] Fleischhauer M., and Lukin M. D., *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5094 (2000).
- [74] Khazali M., and Heshami K., and Simon C., *J. of Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **50**, 215301 (2017).
- [75] Bariani F, Dudin Y O, Kennedy T A B and Kuzmich A *Phys. Rev. Lett.* **108** 030501, (2012).
- [76] Dudin Y O and Kuzmich A, *Science* **336**, 887 (2012).
- [77] Ripka F., et al. "A room-temperature single-photon source based on strongly interacting Rydberg atoms." *Science* **362**, 6413 (2018).
- [78] Eisaman, Matthew D., et al. "Invited review article: Single-photon sources and detectors." *Review of scientific instruments* **82.7** (2011): 071101; Darquie B, Jones M P A, Dingjan J, Beugnon J, Bergamini S, Sortais Y, Messin G, Browaeys A and Grangier P, *Science* 309 454 (2005); Senellart P, Solomon G and White A, *Nature Nano.* **12** 1026 (2017).
- [79] Maxwell D, Szwer D J, Paredes-Barato D, Busche H, Pritchard J D, Gauguier A, Weatherill K J, Jones M P A and Adams C S, *Phys. Rev. Lett.* **110** 103001 (2013).
- [80] Peyronel T, Firstenberg O, Liang Q Y, Hofferberth S, Gorshkov A V, Pohl T, Lukin M D and Vuletic V *Nature* **488** 57 (2012).
- [81] Busche H., Huillery P., Ball SW, Ilieva T., Jones MPA, Adams CS, *Nature Physics* **13**, 655.
- [82] Walther V., Johne R, Pohl T., *Nature communications* **9**, 1 (2018).
- [83] Shapiro J. H., *Phys. Rev. A* **73**, 062305 (2006).
- [84] Gea-Banacloche J., *Phys. Rev. A* **81**, 043823 (2010).
- [85] Knill E., Laflamme R., Milburn G. J., *Nature* **409**, 46 (2001).
- [86] Raussendorf R., H.J. Briegel, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5188 (2001).
- [87] Nielsen MA., *Rep. Math. Phys.* **57**, 147 (2006).
- [88] Tiarks D, Schmidt-Eberle S, Stolz T, Rempe G and Durr S, *Nature Phys.* **15**, 124 (2019).
- [89] Nguyen, Thanh Long, et al. *Physical Review X* **8** .011032 (2018).

سنتر و بررسی ویژگی‌های الکتریکی و مغناطیسی نانوکامپوزیت‌های $\text{Ag}/\text{Hf}_3\text{NiO}_y$ ^۱

رضا قلی پور^۲

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۰۹/۲۲

تاریخ بازنگری: ۱۳۹۹/۱۰/۱۶

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۱/۱۵

چکیده

در این تحقیق، ویژگی‌های الکتریکی و مغناطیسی و ساختاری نانوکامپوزیت‌های $\text{Ag}/\text{Hf}_3\text{NiO}_y$ که با روش هم‌رسوبی سنتز شدند، مطالعه شد. به علت اینکه ساخت فراماده‌های منظم سخت و پیچیده است، در سال‌های اخیر تحقیق در زمینه فراماده‌های نامنظم با خواص جفت منفی بیشتر شده است. فرامواد ساختارهایی هستند که با هر دو مؤلفه نور برهمکنش می‌کنند و خواص ویژه‌ای پدید می‌آورند. کامپوزیت‌های کاتوره‌ای $\text{Ag}/\text{Hf}_3\text{NiO}_y$ به عنوان کامپوزیت‌های نفوذی، شامل نانوذرات رسانا هستند. زمانی که غلظت نانوذرات فلزی در کامپوزیت‌های نیمه پیوسته کمتر از آستانه نفوذ است، قسمت حقیقی ثابت دی‌الکتریک مثبت است. همچنین ثابت تراوایی و گذردهی را می‌توان با میدان الکترومغناطیسی خارجی کنترل کرد، به عبارتی این دو پارامتر تنظیم پذیر است. کاهش تراوایی و گذردهی در نمونه‌های دارای مقدار نقره بیشتر مشاهده شد. زمانی که مقدار نقره از آستانه نفوذ بیشتر شد، شبکه‌های نقره به علت تلفیق نانوذرات در نمونه‌ها تشکیل شدند. خواص مغناطیسی نمونه‌ها به علت تشدید مغناطیسی و جریان اِدی

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2021.34347.1184

^۲ استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه رازی، کرمانشاه، ایران. Email: r.gholipur@razi.ac.ir

نسبت به میدان الکترومغناطیسی اعمالی بودند. نوسان پلاسمای الکترون‌های رسانش در نمونه‌های با حالت فلزی به گذردهی منفی انجامید.
واژگان کلیدی: فراماده، نانوکامپوزیت، نقره-اکسید نیکل هافنیوم، گذردهی و تراوایی.

۱. مقدمه

ایجاد تحول در فرامواد از حوزه نانوکامپوزیت‌ها به علت ویژگی‌های منحصر به فرد آن‌ها اجتناب‌ناپذیر است. بسیاری از نواقص موجود در راه پیشبرد و ارتقاء خصوصیات حوزه ساخت فرامواد با ورود به عرصه نانوکامپوزیت مرتفع می‌شود. پیشرفت پژوهش‌های مربوط به کامپوزیت‌های فرامواد نامنظم در سال‌های اخیر، کاربرد این مواد کامپوزیتی در صنعت را میسر می‌سازد [۱]. همچنان که می‌دانیم پاسخ سیستم به میدان الکترومغناطیس با دو پارامتر ماکروسکوپی تراوایی مؤثر و گذردهی مؤثر تعیین می‌شود [۲]:

$$\varepsilon = \varepsilon' - i\varepsilon'', \mu = \mu' - i\mu'' \quad (1)$$

زمانی که ε' و μ' ماده قسمت‌های حقیقی منفی دارند، چنین ماده‌ای را فرامواد جفت منفی (DNG) و زمانی که یکی از این دو منفی باشد، فرامواد تک منفی (SNG) می‌نامند [۳-۶]. مواد DNG تحقیقات زیادی را در سال‌های اخیر به علت خواص الکترومغناطیسی منحصر به فرد و عملکرد ویژه‌شان به همراه داشته‌اند که می‌توان به سرعت فاز منفی [۷]، ضریب شکست منفی [۸]، پوشش‌های نامرئی‌کننده [۹] و عدسی‌های کامل [۱۰] اشاره کرد. مواد SNG که کمتر به آن‌ها توجه کرده‌اند، قابلیت خوبی در ساخت وسایل دارند [۱۱-۱۳]. برای مثال، مواد دارای گذردهی منفی را می‌توان در تصویربرداری میدان نزدیک^۱ [۱۴]، در عملکردهای انتقال توان بی‌سیم یا آنتن‌های بسامد رادیویی با کارایی مطلوب [۱۵]، استفاده کرد. امروزه ضروری است که از این مواد در صنعت استفاده شود. ساختار کلی فراماده‌ها شامل این‌هاست: (۱) ساختار با حلقه‌ها و سیم‌های فلزی دوره‌ای [۱۶] و (۲) ساختار با نانوذرات فلزی در محیط دی‌الکتریک [۱۷-۲۴].

واحدهای سازنده فرامواد منظم در شکل و اندازه متنوع تنظیم می‌شود، که پاسخ‌های الکتریکی و مغناطیسی را تنظیم‌پذیر می‌سازد. ساخت فرامواد منظم با روش‌های لایه‌نشانی بخار شیمیایی پرتو یون متمرکز [۲۵]، لیتوگرافی هولوگرافی سه‌بعدی [۲۶]، لیتوگرافی پرتو ایکس عمیق [۲۷] و

¹ Near field imaging

لیتوگرافی نانونقش‌های چندلایه‌ای^۱ [۲۸]، سخت و پیچیده و هزینه‌بر است. در مقابل، کامپوزیت‌های فلزیدی الکتریک کاتوره‌ای یا نامنظم را می‌توان با روش‌های تبخیر گرمایی، تبخیر پرتو-الکترون، کندوپاش^۲ و آبکاری^۳ [۲۹] ساخت. در سال ۲۰۱۳، توساک^۴ [۳۰] نشان داد مواد کامپوزیتی که شامل اجزاء رسانای کشیده و جهت‌دار هستند، با قرار گرفتن در محیط دی‌الکتریک خواص ویژه‌ای از خود نشان می‌دهند. تراوایی مؤثر محیط فلزیدی الکتریک که شامل دی‌الکتریکی با خواص مغناطیسی عالی، گذردهی زیاد، پایداری مطلوب گرمایی، کیفیت عالی سطح مشترک با نانوذرات است، در ناحیه میکروموج به مراتب نسبت به مواد دیگر بیشتر است. تشدید مغناطیسی با تشدیدهای مغناطیسی تحریک‌شده از جریان‌های اِدی و خواص مغناطیسی محیط به دست می‌آید. به دست آوردن تشدیدهای الکتریکی و مغناطیسی در یک محدوده یکسان بسامدی، سخت و مشکل است. یک راه حل ممکن برای این مسئله استفاده از ساختار مغناطیسی تشدید می‌همراه با ساختار فلزی/اکسیدی غیر تشدید می‌باشد، که پیش‌زمینه مربوط به گذردهی منفی را فراهم می‌کند. این عمل را می‌توان با فلزات نجیب مانند طلا و نقره که گذردهی منفی در بسامدهای اپتیکی و میکروموج دارند، به دست آورد. عنصرهایی مانند نیکل و آهن و نیکل هم به عنوان ساختارهای تشدید می‌شود. اتلاف برای الکترون‌های رسانش از برهمکنش‌های الکترون-الکترون و الکترون-فونون، پراکندگی به علت عیوب شبکه یا مرزخانه‌ها، پدید می‌آید. ثابت میرایی مجموع تمام نواخت‌های میرایی به علت پراکندگی الکترون-الکترون، الکترون-فونون و عیوب شبکه و پراکندگی مرزخانه‌هاست. در میان فلزات، نقره کمترین ثابت میرایی را دارد و بهترین انتخاب در بسامدهای کم است. طلا که ثابت میرایی بزرگ‌تری نسبت به نقره دارد در بسامدهای فرسوخ نزدیک استفاده می‌شود. در ادامه، روش سنتز نانوذرات نقره در محیط دی‌الکتریک اکسید هافنیوم تقویت‌شده با نیکل را شرح می‌دهیم و سپس خواص مغناطیسی، الکتریکی، ساختاری و اپتیکی آن را بررسی می‌کنیم و نشان می‌دهیم که این ترکیب به عنوان یک ماده SNG قابلیت DNG را نیز می‌تواند داشته باشد.

۲. روند آزمایش

۲-۱ سنتز دی‌الکتریک

سنتز نمونه‌های نانو ساختاری دی‌الکتریک اکسید نیکل هافنیوم با روش هم‌رسوبی انجام می‌گیرد. این روش از اصلی‌ترین و جزء اولین‌ها در میان روش‌های شیمیایی ساخت نانوذرات است. در این

¹ Multilayer nanoimprint lithography

² Sputtering

³ Electroplating

⁴ Tsutaoka

روش یک مادهٔ محلول در محیط به یک ساختار نامحلول تبدیل می‌شود. به طور کلی تشکیل محصولات کم محلول از حالت مایع اساس این روش است. فرایند رسوب‌گیری، مراحل هسته-زایی و رشد را به همراه دارد. با تنظیم این دو حالت می‌توان کیفیت محصول را بیشتر کرد. کلرید هافنیوم^۱ و کلرید نیکل (II) به عنوان پیش‌ماده استفاده می‌شود. محلولی با غلظت ۱ مولار از هافنیوم و نیکل به نسبت مولی ۳ به ۱ به دست می‌آوریم. سپس محلول آمونیم را برای جلوگیری از انباشتگی ذرات، قطره قطره به آن اضافه می‌کنیم. در ادامه، این محلول را در همزن مغناطیسی قوی در دمای اتاق قرار می‌دهیم که در نهایت دی‌الکتریکی با تخلخل عالی حاصل می‌شود. تخلخل سبب می‌شود که نانوذرات نقره در محیط دی‌الکتریک به راحتی قرار بگیرند.

۲-۲ رشد نانوذرات نقره

نانوذرات نقره با کاهش نترات نقره در اتیلن گلیکول به دست می‌آید. نانوذرات طلا با کاهش اسید کلروآئوریک در دی‌متیل فرمامید^۲ (DMF) که نقش دانه را دارد، به دست می‌آید. در رشد نقره از طلا به عنوان دانه استفاده می‌کنیم. دو دسته سنتز با دانه‌ها وجود دارد: (۱) رشد همگن و (۲) رشد ناهمگن. اگر دانه‌ها با فلز رشد‌کننده یکسان باشند یعنی دانه‌ها نقره باشند، این فرایند همگن است. در رشد ناهمگن، فلزی انتخاب می‌شود که ثابت شبکهٔ دانه و نقره نزدیک به هم باشد. اختلاف زیاد در ثابت شبکه سبب رشد غیرهمبافته^۳ می‌شود و ساختارهای نامطلوب به دست می‌آید. طلا را می‌توان به عنوان دانه استفاده کرد، چرا که ثابت شبکه‌ای مشابه با نقره دارد. اتلاف-های نقره به سختی سطح بستگی دارد. در ابتدا محلول اسید کلروآئوریک را با حل کردن ۱۰ میلی‌لیتر DMF در ۱ میلی‌لیتر محلول ۰/۰۰۵ مولار اسید کلروآئوریک به دست می‌آوریم. چهار دقیقه بعد، ۱۷۰ میلی‌گرم نترات نقره و ۱۷۰ میلی‌گرم PVP را که جداگانه در DMF حل شده بودند، به محلول اسید کلروآئوریک با نواخت تقریبی ۲ میلی‌لیتر در دقیقه اضافه می‌کنیم. برای بررسی اثر زمان در رشد نانوذرات، این محلول در دمای ۱۶۰ درجهٔ سلسیوس به مدت ۶۰ دقیقه تحت همزن مغناطیسی قرار می‌گیرد. شبکهٔ نانوذرات نقره شروع به رشد کردن در این مرحله می‌کنند و سپس محلول را با استون رقیق می‌کنیم و سپس آن را تحت سانتریفیوژ با ۲۰۰۰ دور در دقیقه به مدت ۲۰ دقیقه قرار می‌دهیم. باید توجه کرد که فشار اکسیژن نیز در محیط نباید خیلی زیاد باشد که باعث می‌شود به علت فرایند حکاکی^۴، نانومیلهٔ نقره تشکیل نشود. سپس نانوذرات

¹ Zirconyl chloride octahydrate

² N,N-dimethylformamide

³ Nonepitaxial

⁴ Etching process

نقره را به محلول هافنیوم/نیکل با نسبت‌های وزنی ۰، ۵، ۱۵، ۲۰ درصد اضافه می‌کنیم. سپس محلول حاصل را در همزن شدید مغناطیسی قرار می‌دهیم. در ادامه، محلول را تحت فراصوت به مدت ۶۰ دقیقه قرار می‌دهیم و سرانجام محلول نهایی را در دمای ۸۰ درجه سلسیوس به مدت ۲۴ ساعت خشک می‌کنیم. برای مطالعه نقش نقره در خواص الکتریکی و مغناطیسی دی‌الکتریک اکسید هافنیوم نیکل، یک نمونه خام بدون ذرات نقره نیز سنتز می‌کنیم، یعنی همه مراحل بالا را تکرار می‌کنیم و فقط مراحل مربوط به سنتز نقره را حذف می‌کنیم. نمونه‌های حاصل را AHNX با ۲۰، ۱۵، ۵، ۰ x نامگذاری می‌کنیم. تحلیل فازهای بلورک‌ها به کمک اندازه‌گیری‌های پراش پرتو ایکس با دستگاه MPD3000 صورت گرفت. تحلیل‌های مورفولوژی سطح و میکروسکوپی با میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) با دستگاه VEGA\TESCAN-XMU صورت گرفت. اندازه‌گیری‌های تراوایی و گذردهی به کمک نظریه‌های خازن و القایی به دست آمد. در روش خازنی ماده بین دو الکتروود قرار می‌گیرد که خازنی را تشکیل می‌دهند. در روش القایی ماده داخل یک وسیله شیشه‌ای گرد (چنبره) قرار می‌گیرد و سپس به کمک مولد فانکش، گذردهی و تراوایی ماده را با روابط زیر به دست می‌آوریم [۳۱]:

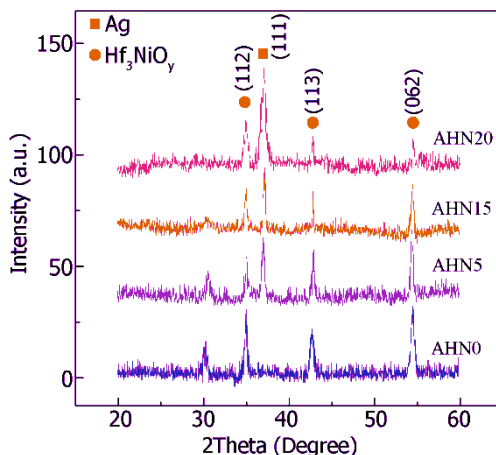
$$\varepsilon' = \frac{Cl}{\varepsilon_0 A}, \varepsilon'' = \frac{l}{RA\omega\varepsilon_0} \quad (2)$$

$$\mu = \frac{2\pi(L-L_0)}{N^2\mu_0 h \ln \frac{d}{c}} + 1, L = \frac{Z^*}{i\omega} \quad (3)$$

که در آن‌ها، l ضخامت نمونه، C ظرفیت، R مقاومت، A مساحت صفحه الکتروود، ε_0 گذردهی فضای آزاد، L خودالقای چنبره با ماده و L_0 خودالقای بدون ماده است. Z^* مقاومت ظاهری چنبره با نمونه، ω بسامد زاویه‌ای و μ_0 تراوایی فضای آزاد است. N تعداد حلقه، C قطر درونی، d قطر بیرونی و h ارتفاع است.

۳. نتایج حاصل و بحث

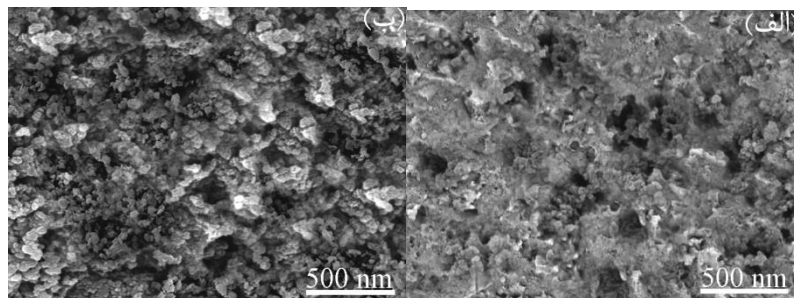
طیف‌های XRD نمونه‌ها در شکل ۱ نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که با تزریق نقره نمونه‌ها به صورت بلوری تشکیل شدند. چهار قله مربوط به دی‌الکتریک با کد مرجع (۰۷۳۳) - (۰۰۰۲۶) مشخص می‌شوند. با افزایش مقدار نقره شدت قله‌های مربوط به دی‌الکتریک در حال کاهش است.



شکل ۱ طیف‌های XRD مربوط به نمونه‌های با مقدار نقره ۰، ۵، ۱۵، ۲۰ درصد.

قله‌ای که در $2\theta = 30.085$ مشاهده می‌شود، مربوط به صفحه (۱۱۱) اکسید هافنیوم نیکل است که با افزایش مقدار نقره در نمونه AHN20 دیگر دیده نمی‌شود. با افزایش مقدار نقره شاهد جابه‌جایی قله نقره به سمت زاویه‌های کمتر هستیم. شدت قله نمونه ۲۰ نسبت به نمونه‌های دیگر بیشتر است، که انتظار این نیز می‌رفت. قله (۱۱۱) نقره با کد مرجع (۰۰-۰۰۱-۱۱۶۴) مشخص می‌شود.

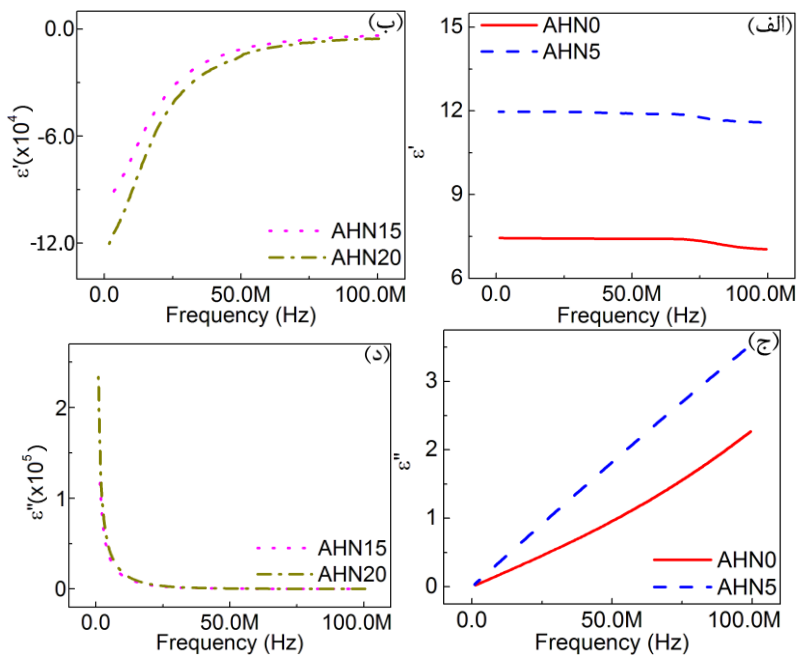
تصاویر SEM مربوط به نمونه‌های AHN0 و AHN20 در شکل ۲ آمده است. مشاهده می‌شود که با افزایش نقره محیط چگال‌تر و تخلخل محیط کمتر می‌شود، چرا که ذرات نقره این منفذها را پر می‌کنند. مورفولوژی نمونه ۲۰ به گونه‌ای است که به هم پیوستگی ذرات بیشتر است.



شکل ۲ تصاویر SEM مربوط به نمونه‌های با مقدار نقره (الف) ۰ و (ب) ۲۰ درصد.

وابستگی بسامدی گذردهی نمونه‌ها در شکل ۳ آمده است. مشاهده می‌شود که نمونه‌های زیر آستانه نفوذ یک پراکندگی عادی گذردهی دی‌الکتریک نشان می‌دهند. گذردهی مثبت است و با

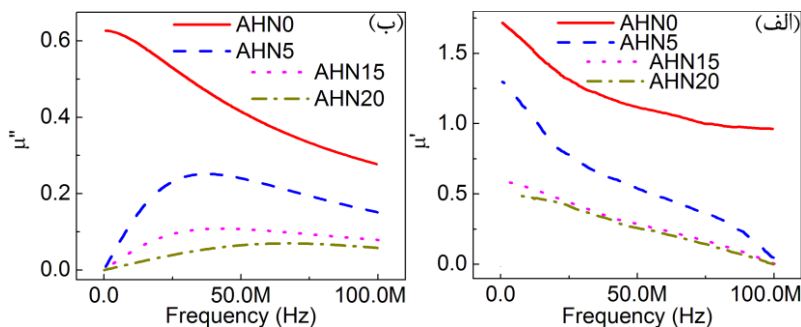
افزایش بسامد کاهش می یابد، که می توان آن را به قطبش الکترون های موضعی نسبت داد. قسمت موهومی ثابت دی الکتریک این نمونه ها از قسمت حقیقی آن کوچک تر است و از طرفی گذردهی حقیقی با افزایش مقدار نقره افزایش یافته است. زمانی که مقدار نقره ۱۵ و ۲۰ درصد می شود، ثابت دی الکتریک حقیقی منفی می شود. برای نمونه های ۱۵ و ۲۰، مقدار نقره از آستانه نفوذ تجاوز کرده است و رفتار القایی نشان می دهد. افزایش بیشتر نقره تا ۲۰ درصد باعث می شود که ثابت دی الکتریک منفی تر شود، چرا که در نمونه با نقره ۲۰ درصد، خاصیت دی الکتریکی کم شده است. گذردهی منفی نتیجه ای از تشکیل مسیرهای رسانای سه بعدی در کامپوزیت است. شبکه های نقره توسط ارتباط ذرات نقره تشکیل می شوند.



شکل ۳ تغییرات گذردهی (الف) و (ب) حقیقی، (ج) و (د) موهومی برحسب بسامد مربوط به نمونه های با مقدار نقره ۰، ۵، ۱۵ و ۲۰ درصد.

طیف تراوایی کامپوزیت در شکل ۴ ارائه شده است. مشاهده می شود که تراوایی حقیقی با افزایش مقدار نقره کاهش می یابد. علاوه بر این، منحنی تراوایی برحسب بسامد نوعی واهلش عادی هستند. با افزایش بسامد همچنین شاهد کاهش تراوایی به علت اثر جریان های ایدی و تشدید مغناطیسی هستیم، که چنانکه بحث کردیم، شبکه نقره که در نمونه ۲۰ تشکیل می شود تحت یک میدان الکترومغناطیسی قرار می گیرد. حلقه های جریان که در نمونه القا می شود باعث پدید آمدن

یک میدان الکترومغناطیسی اضافی می‌شود که بر خلاف میدان الکترومغناطیسی خارجی است. به محض اینکه میدان الکترومغناطیسی قوی القاشده توسط حلقه‌های جریان، میدان مغناطیسی ناشی از موج فرودی را حذف می‌کند، کاهش تراوایی پدید می‌آید. اگرچه تراوایی منفی در کامپوزیت‌ها پدید نمی‌آید، گرایش نمودارها در کاهش مستمر تراوایی برحسب بسامد مشهود است.



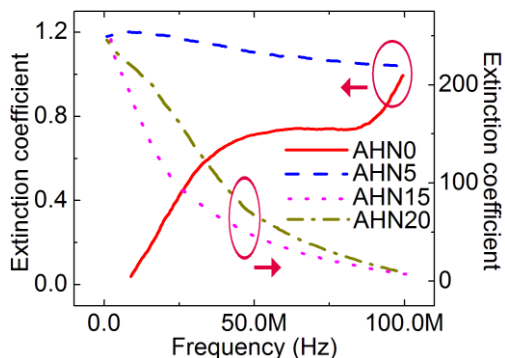
شکل ۴ تغییرات تراوایی (الف) حقیقی و (ب) موهومی برحسب بسامد مربوط به نمونه‌های با مقدار نقره ۰، ۵، ۱۵، ۲۰ درصد.

شکل ۵ ضریب خاموشی نمونه‌ها را نشان می‌دهد که از رابطه زیر به دست آمده است [۳۲]، (۴)

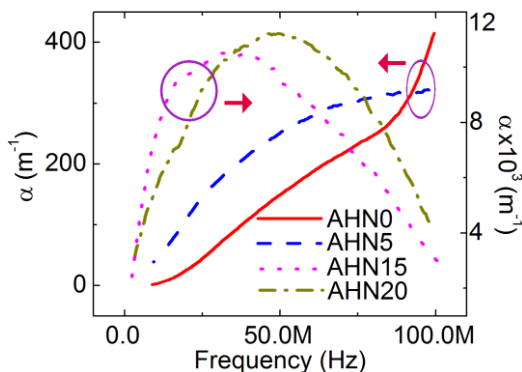
$$k = \frac{\mu''\epsilon' + \mu'\epsilon''}{\sqrt{2(|\epsilon||\mu| + \mu'\epsilon' - \mu''\epsilon'')^{1/2}}}$$

برای نمونه‌های ۵ و ۱۵ و ۲۰ ضریب خاموشی با افزایش بسامد کاهش می‌یابد. به علت اینکه ثابت دی‌الکتریک نمونه AHN20 منفی است، ایجاد یک قسمت موهومی ثابت دی‌الکتریک می‌کند. با افزایش مقدار نقره ضریب خاموشی نمونه ۲۰ نسبت به نمونه ۱۵ افزایش یافته است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش مقدار نقره تا ۵ درصد مقدار ضریب خاموشی بیشتر می‌شود که می‌توان آن را به رفتار خازنی نسبت داد، یعنی جذب بیشتر می‌شود. مشاهده شده است که ضریب خاموشی نمونه AHN20 نسبت به نمونه‌های دیگر بیشتر است که می‌تواند در نانوجاذب‌ها استفاده شود.

تغییرات ضریب جذب $\alpha = 2k\omega/c$ که در آن، c سرعت نور و ω بسامد میدان الکترومغناطیسی و k ضریب خاموشی است) برحسب بسامد در شکل ۶ نشان داده شده است. نمونه AHN5 نسبت به نمونه‌های دیگر، ضریب جذب کمتری دارد، اما در نواحی بالا ضریب جذب افزایش می‌یابد. برای نمونه ۲۰ نسبت به دیگر نمونه‌ها، ضریب جذب بیشتر شده است که تأییدی بر نتایج ضریب خاموشی است.



شکل ۵ تغییرات ضریب خاموشی برحسب بسامد مربوط به نمونه‌های با مقدار نقره ۰، ۵، ۱۵، ۲۰ درصد.



شکل ۶ تغییرات ضریب جذب برحسب بسامد مربوط به نمونه‌های با مقدار نقره ۰، ۵، ۱۵، ۲۰ درصد.

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله، خواص ساختاری، الکتریکی، مغناطیسی و اپتیکی نانو کامپوزیت نقره/اکسید هافنیوم نیکل را مطالعه کردیم. در این نانو کامپوزیت، فضای بین نانوذرات نقره با دی‌الکتریک اکسید هافنیوم نیکل پر شد. می‌توان برای بهتر شدن عملکرد از دی‌الکتریک با ثابت دی‌الکتریک بیشتر استفاده کرد، چرا که باعث می‌شود جریان جابه‌جایی بین نانوذرات بیشتر شود و مغناطش بهتری شکل بگیرد. همچنین می‌توان از دی‌الکتریک‌هایی استفاده کرد که شکل تزریقی برای بیشتر کردن خواص مغناطیسی نداشته باشد مانند اکسید گارنت. گذردهی و تراوایی این مواد به طور چشمگیری در پاسخ ماده تأثیر می‌گذارد. مزیت اصلی استفاده از اکسید هافنیوم نیکل، تخلخلی است که در سطح ایجاد می‌کند. برای بیشتر شدن این تخلخل استفاده از مواد متخلخل‌کننده به عنوان کمکی مفید است، مانند زئولیت‌ها، کربن‌های فعال‌شده، ترکیبات فلز-آلی، سرامیک،

سیلیکات، آبروژل و پلیمرها. با آستانه نفوذ کمتر، نمونه با مقدار کمتری از نقره به حالت فلزی می‌رسید. نمونه‌هایی که با مقدار کمتری از نقره به حالت فلزی می‌رسیدند قسمت موهومی گذردهی آن‌ها کمتر بود. به علت تشکیل گشتاورهای دوقطبی الکتریکی زیر آستانه نفوذ، ثابت دی‌الکتریک با افزایش مقدار نقره افزایش یافت. تغییرات ضریب خاموشی زیر آستانه نفوذ نسبت به نمونه‌های بالای آستانه نفوذ کمتر بود، که نشان می‌داد نمونه رفتاری خازنی دارد. حلقه‌های جریان ادی نقش مهمی در کاهش تراوایی داشتند. در ساختار منظم گشتاور مغناطیسی افزایش می‌یابد که طبق قانون لنز کاهش بیشتر تراوایی را شاهد هستیم. رفتار کاهشی تراوایی نمونه AHN20 به عنوان یک ماده SNG نشان می‌دهد که این ماده با مهیا شدن شرایط خواص ماده DNG را نیز از خود نشان می‌دهد.

منابع

- [1] Shalaev W. Cai, V., *Optical Metamaterials Fundamentals and Applications*, 1st Ed., Springer-Verlag, New York (2010).
- [2] Chui S. T., Hu L., Theoretical investigation on the possibility of preparing left-handed materials in metallic magnetic granular composites, *Phys. Rev. B* 65, 144407 (2002).
- [3] Sounas D. L., Kantartzis N. V., Systematic surface wave analysis of the interfaces of composite DNG/SNG media, *Optics Express* 17, 8513 (2009).
- [4] Smith D. R., Padilla W. J., Vier D. C., Nasser S. C. N., Schultz S., Composite Medium with Simultaneously Negative Permeability and Permittivity, *Phys. Rev. Lett.* 84, 4184 (2000).
- [5] Zhang Z. D., Fan R. H., Shi Z. C., Pan S. B., Yan K. L., Sun K. N., Zhang J. D., Liu X. F., Wang X. L., Dou S. X., Tunable negative permittivity behavior and conductor-insulator transition in dual composites prepared by selective reduction reaction, *J. Mater. Chem. C* 1, 79 (2013).
- [6] Zhu J. H., Wei S. Y., Haldolaarachchige N., He J., Young D. P., Guo Z. H., Very large magnetoresistive graphene disk with negative permittivity, *Nanoscale* 4, 152 (2014).
- [7] Zhao H., Kang L., Zhou J., Zhao Q., Li L., Peng L., Bai Y., Experimental demonstration of tunable negative phase velocity and negative refraction in a ferromagnetic/ferroelectric composite metamaterial, *Appl. Phys. Lett.* 93, 201106 (2008).
- [8] Houck A. A., Brock J. B., Chuang I. L., Experimental Observations of a Left-Handed Material That Obeys Snell's Law, *Phys. Rev. Lett.* 90, 137401 (2003).
- [9] Anantha Ramakrishna S., Physics of negative refractive index materials, *Rep. Prog. Phys.* 68, 449 (2005).
- [10] Fang N., Lee H., Sun C., Zhang X., Sub-Diffraction-Limited Optical Imaging with a Silver Superlens, *Science* 308, 534 (2005).
- [11] Hou Q., Yan K. L., Fan R. H., Zhang Z. D., Chen M., Sun K., Cheng C. B., Experimental realization of tunable negative permittivity in percolative Fe₇₈Si₉B₁₃/epoxy composites, *RSC Adv.* 5, 9472 (2015).
- [12] Zhu J. H., Wei S. Y., Zhang L., Mao Y. B., Ryu J., Mavinakuli P., Karki A. B., Young D. P., Guo Z. H., Conductive Polypyrrole/Tungsten Oxide Metacomposites with Negative Permittivity, *J. Phys. Chem. C* 114, 16335 (2010).
- [13] Liu C. D., Lee S. N., Ho C. H., Han J. L., Hsieh K. H., Electrical Properties of Well-Dispersed Nanopolyaniline/Epoxy Hybrids Prepared Using an Absorption-Transferring Process, *J. Phys. Chem. C* 112, 15956 (2008).

- [14] Li B., Sui G., Zhong W. H., Single Negative Metamaterials in Unstructured Polymer Nanocomposites toward Selectable and Controllable Negative Permittivity, *Adv. Mater.* 21, 4176 (2009).
- [15] Ziolkowski R. W., Erentok A., Metamaterial-based efficient electrically small antennas, *IEEE Trans. Antennas Propag.* 54, 2113 (2006).
- [16] Smith D. R., Padilla W. J., Vier D. C., Nemat-Nasser S. C., Schultz S., Composite Medium with Simultaneously Negative Permeability and Permittivity, *Phys. Rev. Lett.* 84, 4184 (2000).
- [17] Zhou J., Zhang L., Tuttle G., Koschny T., Soukoulis C. M., Negative index materials using simple short wire pairs, *Phys. Rev. B* 73, 041101R (2006).
- [18] Pendry J. B., Negative refraction makes a perfect lens, *Phys. Rev. Lett.* 85, 3966 (2000).
- [19] Pendry J. B., Schurig D., Smith D. R., Controlling electromagnetic fields, *Science* 312, 1780 (2006).
- [20] Parazzoli C. G., Greigor R. B., Li K., Koltenbah B. E. C., Tanielian M., Experimental verification and simulation of negative index of refraction using Snell's law, *Phys. Rev. Lett.* 90, 107401 (2003).
- [21] Shalaev V. M., Cai W. S., Chettiar U. K., Yuan H. K., Sarychev A. K., Drachev V. P., Kildishev A. V., Negative index of refraction in optical metamaterials, *Opt. Lett.* 30, 3356 (2005).
- [22] Zhang S., Fan W. J., Panoiu N. C., Malloy K. J., Osgood R. M., Brueck S. R. J., Experimental demonstration of near-infrared negative-index metamaterials, *Phys. Rev. Lett.* 95, 137404 (2005).
- [23] Tsakmakidis K. L., Hermann C., Klaedtke A., Jamois C., Hess O., Surface Plasmon polaritons in generalized slab heterostructures with negative permittivity and permeability, *Phys. Rev. B* 73, 085104 (2006).
- [24] He G., Wu R.-x., Poo Y., Chen P., Magnetically tunable double-negative material composed of ferrite-dielectric and metallic mesh, *J. Appl. Phys.* 107, 093522 (2010).
- [25] Morita T., Kondo K., Hoshino T., Kaito T., Fujita J., Ichihashi T., Ishida M., Ochiai Y., Tajima T., Matsui S., Nanomechanical switch fabrication by focused-ion-beam chemical vapor deposition, *J. Vac. Sci. Technol. B* 22, 3137 (2004).
- [26] Campbell M., Sharp D. N., Harrison M. T., Denning R. G., Turberfield A. J., Fabrication of photonic crystals for the visible spectrum by holographic lithography, *Nature* 404, 53 (2000).
- [27] Ehrfeld W., Lehr H., Deep X-ray-lithography for the production of 3-dimensional microstructures from metals, polymers and ceramics, *Radiat. Phys. Chem.* 45, 349 (1995).
- [28] Kehagias N., Reboud V., Chansin G., Zelsmann M., Jeppesen C., Schuster C., Kubenz M., Reuther F., Gruetzner G., Torres C. M. S., Reverse-contact UV nanoimprint lithography for multilayered structure fabrication, *Nanotechnology* 18, 175303 (2007).
- [29] Cai W., Shalaev V., *Optical Metamaterials Fundamentals and Applications*, first ed., Springer-Verlag, New York (2010).
- [30] Tsutaoka T., Kasagi T., Yamamoto S., Hatakeyama K., Low frequency plasmonic state and negative permittivity spectra of coagulated Cu granular composite materials in the percolation threshold. *Appl. Phys. Lett.*, 102, 181904-181907 (2013).
- [31] Yan K. L., Fan R. H., Shi Z. C., Chen M., Qian L., Wei Y. L., Sun K., Li J., Negative Permittivity Behavior and Magnetic Performance of Perovskite $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ at High-frequency, *J. Mater. Chem. C* 2, 1028 (2014).
- [32] Depine R. A., Lakhtakia A., A new condition to identify isotropic dielectric-magnetic materials displaying negative phase velocity, *Micro. and Opti. Techno. Lett.* 41, 315 (2004).

بررسی پدیده اختلاط فازی در حضور میدان‌های مغناطیسی همگن و غیرهمگن در برهم‌کنش لیزر پالسی فوق‌کوتاه با پلازما با استفاده از شبیه‌سازی ذره‌ای دو بُعدی^۱

آمنه کارگریان^۲

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۱۱/۱۰

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۰/۰۱/۰۶

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۱/۲۵

چکیده

بررسی مسئله گرمایش پلازما به دلیل کاربردهای گسترده آن از جمله پیش-گرمایش پلازما در حوزه گداخت محصورسازی لختی و گداخت محصورسازی مغناطیسی حائز اهمیت است. با عبور تپ لیزری پرشدت و فوق‌کوتاه از پلاسمای رقیق، بر اثر نیروی پاندرماتیو لیزری، موج پلاسمایی در پشت تپ لیزری و در راستای طولی ایجاد می‌شود. انرژی لیزر از طریق برهم‌کنش موج برانگیخته شده با ذرات پلازما به محیط پلازما انتقال داده می‌شود که به گرمایش پلازما می‌انجامد. با افزایش شدت لیزر و چگالی پلازما، پدیده شکست موج ایجاد شده و بیش‌ترین گرمایش پلازما در این دامنه اتفاق می‌افتد. در این مقاله، تأثیر اعمال میدان مغناطیسی همگن در دامنه‌های کمتر از دامنه شکست موج در امواج پلاسمای ناشی از انتشار تپ لیزری پرشدت و فوق‌کوتاه

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2021.34954.1194

^۲ استادیار، پژوهشکده پلازما و گداخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، ۱۴۳۹۹-۵۱۱۱۳، تهران، ایران.

Email: akargarian@aeoi.org.ir

در پلاسمای رقیق با روش شبیه‌سازی ذره‌ای دوبعدی بررسی می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که اعمال این میدان مغناطیسی سبب اعوجاج و شکست امواج پلازما بر اثر پدیده اختلاط فازی می‌شود. علاوه بر این، نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد با اعمال میدان مغناطیسی غیرهمگن اثرات شکست موج سریع‌تر از حالت همگن ظاهر می‌شوند. بنابراین، در شدت‌های متوسط لیزری و چگالی‌های پلاسمای کم، می‌توان با اعمال میدان‌های مغناطیسی همگن و غیرهمگن به بیشینه گرمایش پلازما دست یافت.

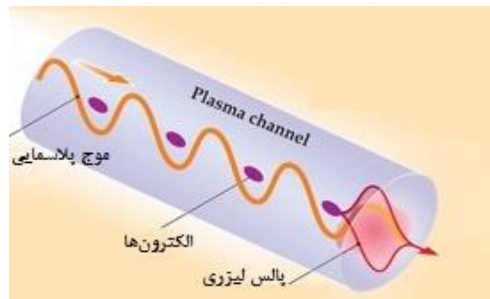
واژگان کلیدی: پدیده اختلاط فازی، میدان مغناطیسی غیرهمگن، گرمایش پلازما.

۱. مقدمه

در سیستم برهم‌کنش لیزر-پلازما، هنگامی که تب لیزری قوی در پلازما منتشر می‌شود، الکترون‌ها توسط نیروی پاندرماتیو شعاعی لیزر از مرکز دور شده و یک کانال یونی در پلازما شکل می‌دهند. همچنین، نیروی پاندرماتیو محوری لیزر با ایجاد اختلال در چگالی پلازما سبب تولید میدان‌های طولی و ایجاد موج دنباله پلاسمایی^۱ در راستای انتشار و در عقب تب لیزری می‌شود (شکل ۱) [۳-۱]. موج دنباله پلاسمایی گاهی بر اثر عبور پرتوی از ذرات پرانرژی از درون پلازما نیز به وجود می‌آید. در این حالت، میدان متناظر با پرتو، الکترون‌های پلازما را که سبک‌تر از یون‌ها می‌باشند از مرکز دور کرده و یک کانال یونی شکل می‌گیرد [۴]. این پدیده موجب ایجاد موج دنباله پلاسمایی بر اثر نیروی جدایی بار می‌شود. با تشکیل موج دنباله پلاسمایی در سیستم، ذراتی که دارای سرعت‌هایی نزدیک به سرعت فاز موج پلازما هستند، می‌توانند همراه با موج حرکت کرده و از آن انرژی بگیرند.

انتقال انرژی موج به ذرات به صورت گرمایش پلازما یا شتاب ذرات و ایجاد پرتو ذرات پرانرژی است. در دامنه نزدیک به دامنه شکست موج، بیشینه انتقال انرژی موج به ذرات یا به عبارتی بیشینه گرمایش پلازما اتفاق می‌افتد. در صورتی که پدیده اختلاط فازی در سیستم اتفاق بیفتد در کمتر از دامنه شکست موج، بیشینه گرمایش اتفاق می‌افتد. گرمایش پلازما در حوزه‌های مختلف از جمله پیش گرمایش پلازما در گداخت به روش محصورسازی لختی و محصورسازی مغناطیسی حائز اهمیت است.

^۱Plasma wakefield



شکل ۱ تشکیل کانال یونی و موج دنباله پلاسمایی در سیستم برهم کنش لیزر-پلازما.

در شدت‌های لیزری متوسط، اثرات خطی مانند میرایی لاندائو نقش مهمی در میرا شدن موج دنباله بازی می‌کند [۵]. این در حالی است که اثرات غیرخطی در شدت‌های لیزری زیاد باعث به هم ریختگی شکل منظم موج و نهایتاً پدیده شکست موج می‌شود [۸۶]. آستانه شکست موج به شدت لیزر فرودی و چگالی پلازما وابسته است. به‌طور فیزیکی، فراتر از این مقدار آستانه، نوسانگرهای مجاور که موج را تشکیل می‌دهند از یکدیگر عبور کرده و در نتیجه، این نوسانگرها حرکت همسانگرد خود را از دست داده و موج دچار شکست می‌شود [۹]. علاوه بر افزایش شدت لیزر و چگالی پلازما، فرایند فیزیکی دیگری نیز وجود دارد که می‌تواند سبب شکست موج دنباله پلاسمایی شود. این فرایند به عنوان اختلاط فازی^۱ شناخته می‌شود که در صورت بروز وابستگی فضایی فرکانس نوسانات به دلایل فیزیکی مانند ناهمگنی پلازما، اثرات جرم نسبی، چندیونی بودن پلازما و غیره اتفاق می‌افتد [۱۰]. در پدیده اختلاط فازی، به دلیل ایجاد وابستگی مکانی فرکانس مشخصه موج، نوسانگرهای مجاور به آرامی از فاز همدوس خود خارج می‌شوند که به نوبه خود به شکست موج پس از یک زمان مشخص می‌انجامد. انتقال انرژی لیزر به محیط پلازما از طریق اندرکنش موج طولی ایجاد شده با ذرات پلازما، در نزدیکی آستانه شکست موج دارای بیشترین مقدار خواهد بود. در این دامنه، بیشینه گرمایش لیزری برای محیط پلازما اتفاق می‌افتد. در سال‌های اخیر، مطالعات زیادی به صورت نظری و با استفاده از تقریب سیالی در این حوزه انجام شده است. برای مثال، پدیده اختلاط فازی در یک پلازما با چگالی غیرهمگن [۱۰] و پلاسمای چندیونی [۱۱] و پلاسمای مغناطیده همگن [۱۲، ۱۳] بررسی شده است. در این مقاله، پدیده اختلاط فازی در پلاسمای مغناطیده همگن و غیرهمگن با استفاده از کد شبیه‌سازی ذره‌ای (ذره در جعبه) دو بُعدی ارتقاء یافته بررسی می‌شود. نتایج حاصل از شبیه‌سازی دو بُعدی از پدیده اختلاط فازی در پلاسمای مغناطیده همگن، نتایج نظری به دست آمده به روش تقریب سیالی در

^۱Phase-mixing

مراجع [۱۲، ۱۳] را تأیید می‌کند. علاوه بر این، نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که پدیده اختلاط فازی در پلاسمای مغناطیده غیرهمگن در زمان کوتاه‌تری نسبت به پلاسمای مغناطیده همگن اتفاق می‌افتد. بخش دوم این مقاله، به بیان مدل و کد شبیه‌سازی ذره‌ای اختصاص داده شده است. در بخش سوم، نتایج حاصل از شبیه‌سازی ارائه شده است. بخش چهارم نیز شامل خلاصه و نتیجه‌گیری است.

۲. کد شبیه‌سازی ذره‌ای دو بُعدی

در این مقاله، از یک کد شبیه‌سازی ذره‌ای دو بُعدی ارتقاء یافته برای بررسی پدیده اختلاط فازی موج پلاسمایی ایجاد شده به دلیل انتشار تپ لیزر در محیط پلاسمای مغناطیده همگن و غیرهمگن استفاده شده است. در روش شبیه‌سازی ذره‌ای [۱۴، ۱۵]، چگالی ذرات در شبکه به طریق وزن‌دهی محاسبه می‌شوند. سپس میدان الکتریکی از حل معادله پواسون در نقاط شبکه به دست می‌آید. میدان الکتریکی شبکه از طریق درون‌یابی در محل ذرات محاسبه می‌شود. سپس، مکان و سرعت جدید ذرات با استفاده از معادله نیوتون-لورنتس نسبیستی و به روش بوریس و بیونمن محاسبه می‌شود. از محدودیت‌های اساسی این روش آن است که معمولاً تعداد ذرات به کاررفته در آن‌ها چندین مرتبه کوچک‌تر از پلاسماهای واقعی است. برای رفع این محدودیت از مفهوم ابرذره^۱ استفاده می‌شود. این ذرات دارای جرم و باری چند برابر ذرات واقعی هستند و در حقیقت نماینده تعداد زیادی ذره می‌باشند [۱۶، ۱۷]. در این روش، هر ذره مطابق با نیروی لورنتس اعمال شده توسط میدان‌های الکترومغناطیسی در موقعیت ذره و مطابق با رابطه (۱) حرکت می‌کند:

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

تحول میدان‌ها نیز بر طبق معادلات ماکسول انجام می‌شود:

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

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

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

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

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

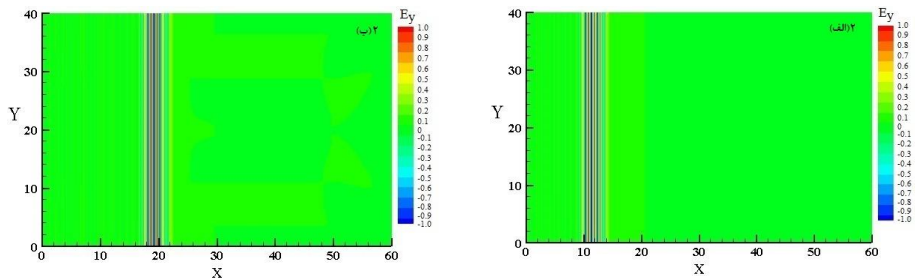
¹Macroparticle

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

پارامترهای استفاده شده در شبیه سازی به صورت زیر بی بُعد شده اند: مکان (x) به طول موج لیزر (λ_l)، زمان (T) به معکوس فرکانس لیزر (ω_l^{-1})، تکانه های عرضی و طولی (p_x, p_y) به $m_e c$ ، چگالی پلاسما (n) به چگالی بحرانی پلاسما (n_{cr})، میدان های الکتریکی عرضی و طولی (E_x, E_y) به $\omega_l m_e c / q_e$ ، و میدان مغناطیسی (B_z) به $\omega_l m_e / q_e$. در شبیه سازی، اندازه گام های مکانی و زمانی به ترتیب برابر با $0.1\lambda_l$ و $0.05 fs$ در نظر گرفته شده اند. در بخش بعدی مقاله، با استفاده از این روش شبیه سازی، پدیده اختلاط فازی با گذشت زمان در سیستم برهم کنش لیزر-پلاسما و در حضور میدان های مغناطیسی همگن و غیرهمگن بررسی شده است.

۳. نتایج شبیه سازی

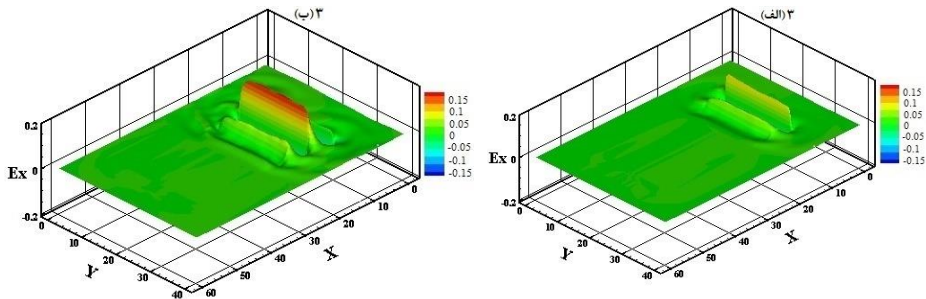
نتایج حاصل از شبیه سازی برای تپ لیزری با شکل سینوسی-گوسی دارای طول موج $\lambda = 1 \mu m$ و پهنای تپ $\tau = 40 fs$ و دامنه شدت بدون بُعد $a = 1$ که توسط رابطه $I = 1.37 \frac{a^2}{\lambda^2} \times 10^{18} \omega / cm^2$ با شدت لیزر (I) رابطه دارد، حاصل شده است. همچنین، پلاسما با چگالی $n_0 = 0.01 n_c$ (n_c چگالی بحرانی پلاسماست) و ابعاد $10\lambda \leq x \leq 50\lambda$ و $10\lambda \leq y \leq 30\lambda$ در نظر گرفته شده است. ابعاد جعبه شبیه سازی در فضای دو بُعدی نیز به صورت $0 \leq x \leq 60\lambda$ و $0 \leq y \leq 40\lambda$ هستند. در شکل ۲ الف و ب میدان الکتریکی عرضی تپ لیزری پر شدت و فوق کوتاه هنگام عبور از پلاسمای رقیق در دو زمان بی بُعد $T = 60$ و $T = 120$ نشان داده شده است.



شکل ۲ میدان الکتریکی عرضی تپ لیزر در زمان های (الف) $T = 60$ و (ب) $T = 120$.

۵۰ / بررسی پدیده اختلاط فازی در حضور میدان‌های مغناطیسی همگن و غیرهمگن در برهم‌کنش لیزر ...

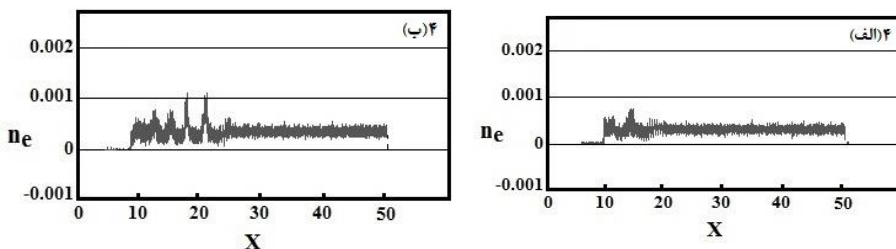
با عبور تپ لیزری پرشدت و فوق کوتاه از مرتبه فمتوثانیه از پلاسمای رقیق، موج پلاسمایی در راستای طولی ایجاد می‌شود. انتشار موج دنباله پلاسمایی ایجاد شده در پلاسمای رقیق غیرمغناطیده در دو زمان بی‌تعد $T=60$ و $T=120$ در شکل ۳ نمایش داده شده است.



شکل ۳ موج پلاسمایی ایجاد شده در پلاسمای رقیق غیرمغناطیده

در زمان‌های (الف) $T=60$ و (ب) $T=120$.

از جمله نشانه‌های پدیده شکست موج/ اختلاط فازی و گرمایش پلاسما، ظهور خطوط تیز^۱ و رشد آن‌ها در چگالی الکترون است، همان گونه که در مراجع [۱۰-۱۳] نیز این موضوع بررسی شده است. در شکل‌های ۴ الف و ب، نمودار چگالی الکترون به ترتیب در دو زمان بی‌تعد $T=60$ و $T=120$ نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌کنید، در غیاب میدان مغناطیسی، با گذشت زمان تعداد کمی از خطوط تیز در پروفایل چگالی مشاهده می‌شود.

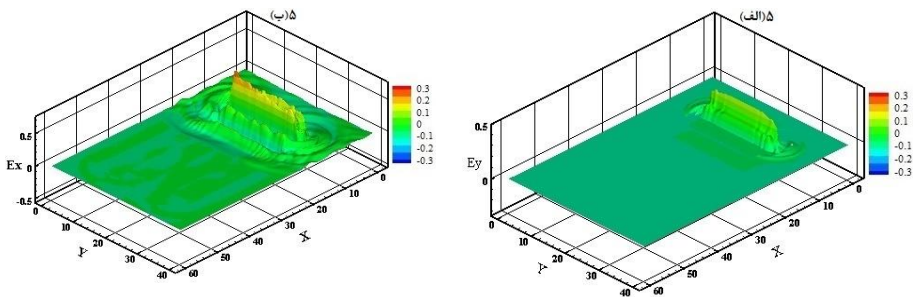


شکل ۴ چگالی الکترون در پلاسمای غیرمغناطیده در زمان‌های (الف) $T=60$ و (ب) $T=120$.

با در نظر گرفتن میدان مغناطیسی همگن $B = B_0 \hat{z}$ در راستای عمود بر انتشار موج، مشاهده می‌شود که موج دنباله ایجاد شده دچار اعوجاج شده و شکل منظم و نوسانی خود را از دست می-

¹Spikes

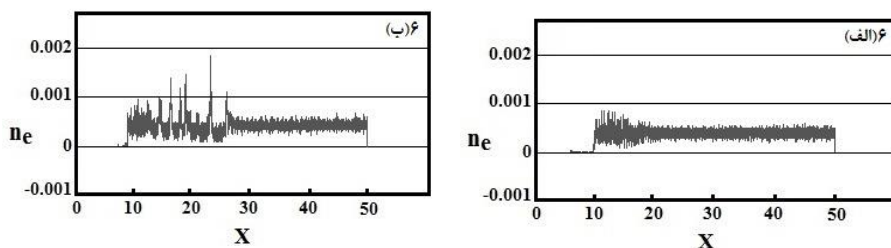
دهد. شکل ۵، انتشار موج دنباله ایجاد شده در پلاسمای رقیق مغناطیده همگن را در دو زمان بی‌بعد $T=60$ و $T=120$ نشان می‌دهد. الکترون‌های پلازما در حضور میدان مغناطیسی خارجی در سیستم برهم‌کنش لیزر-پلازما تحت تأثیر نیروی لورنتس قرار می‌گیرند که در مسیرهای الکترونی اثر خواهد گذاشت. در واقع، میدان الکتریکی موج هیبرید بالای^۱ نسبی تولید شده، الکترون‌ها را تحت تأثیر قرار می‌دهد. اثرات نسبی باعث می‌شود فرکانس مشخصه موج به دامنه و موقعیت موج بستگی پیدا کند. بنابراین، موج هیبرید بالای نسبی دیگر تناوبی نخواهد بود. از نظر فیزیکی، فرکانس وابسته به فضا باعث می‌شود المان‌های سیال الکترونی مختلف با فرکانس‌های موضعی متفاوت نوسان کنند که نشان‌دهنده پدیده شکست موج یا پدیده اختلاط فازی است. در مراجع [۱۲، ۱۳] با استفاده از توصیف سیالی پلاسمای مغناطیده، تحلیل نظری این مسئله را انجام داده‌اند. این مشاهدات بیانگر اختلاط سریع فاز نوسانات هیبرید بالایی به دلیل وجود نیروی لورنتس در حضور میدان مغناطیسی است.



شکل ۵ موج پلاسمایی ایجاد شده در پلاسمای رقیق مغناطیده همگن در زمان (الف) $T=60$ و (ب) $T=120$.

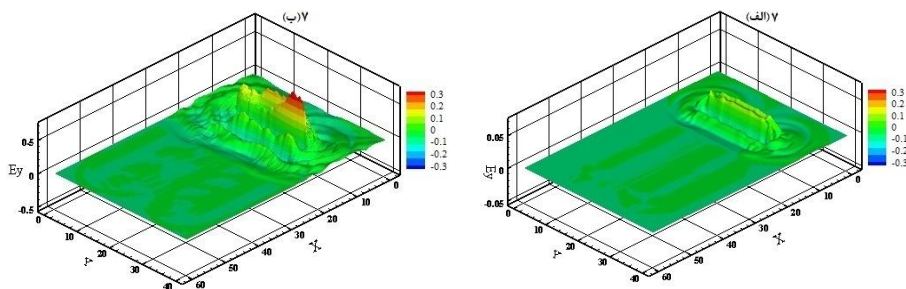
نمودار چگالی الکترون در دو زمان بی‌بعد $T=60$ و $T=120$ به ترتیب در شکل‌های ۶الف و ۶ب نشان داده شده است. از مقایسه این نمودارها با نمودارهای چگالی الکترون در غیاب میدان مغناطیسی (شکل ۴)، مشاهده می‌شود که در حضور میدان مغناطیسی همگن خطوط تیز در چگالی الکترون، با گذشت زمان، رشد می‌کنند. این رفتار نشان‌دهنده ظهور پدیده اختلاط فازی در حضور میدان مغناطیسی همگن است.

^۱Upper hybrid wave



شکل ۶ چگالی الکترون در حضور میدان مغناطیسی همگن در زمان‌های (الف) $T = 60$ و (ب) $T = 120$.

به منظور بررسی اثرات میدان مغناطیسی غیرهمگن در نوسانات موج برانگیخته شده، میدان مغناطیسی غیرهمگن به صورت $B = B_0 \cos(kx)\hat{z}$ در راستای عمود بر انتشار موج در نظر گرفته شده است. شکل ۷ انتشار موج دنباله پلاسمایی ایجاد شده در پلاسمای رقیق مغناطیسه غیرهمگن را در دو زمان بی‌بعد $T = 60$ و $T = 120$ نشان می‌دهد. شکل ۷ نشان می‌دهد که در زمان $T = 120$ ، میدان الکتریکی متناظر با موج ایجاد شده، شکل تناوبی خود را در حضور میدان مغناطیسی غیرهمگن به طرز چشمگیری از دست داده است. در نتیجه، پدیده اختلاط فاز در پلاسمای مغناطیسه غیرهمگن در زمان کوتاه‌تری نسبت به پلاسمای مغناطیسه همگن اتفاق می‌افتد. دلیل این رفتار، وابستگی مستقیم فرکانس مشخصه موج هیبرید بالا به مکان به دلیل غیرهمگن بودن میدان مغناطیسی است.

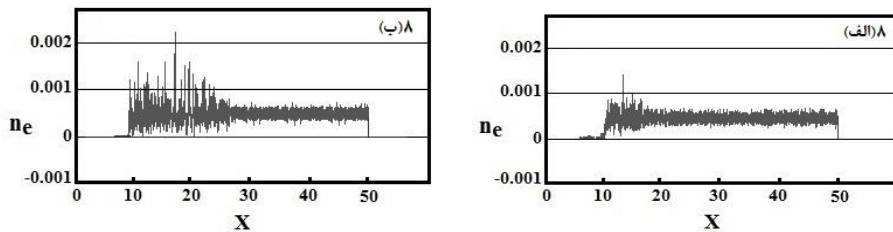


شکل ۷. موج پلاسمایی ایجاد شده در پلاسمای رقیق مغناطیسه غیرهمگن

در زمان‌های (الف) $T = 60$ و (ب) $T = 120$.

نمودار چگالی الکترون در دو زمان بی‌بعد $T = 60$ و $T = 120$ به ترتیب در شکل‌های ۸الف و ۸ب نشان داده شده است. همانگونه که مشاهده می‌کنید در زمان $T = 120$ خطوط تیز در چگالی الکترون در حضور میدان مغناطیسی غیرهمگن تا میزان شدیدی رشد کرده‌اند. این نتیجه

بیانگر کاهش زمان اختلاط فاز در پلاسمای مغناطیسه غیرهمگن نسبت به پلاسمای مغناطیسه همگن است.



شکل ۸ چگالی الکترون در حضور میدان مغناطیسی غیرهمگن در زمان‌های (الف) $T = 60$ و (ب) $T = 120$.

۴. نتیجه گیری

در این مقاله، امواج دنباله پلاسمایی ناشی از عبور تپ لیزر پرشدت و فوق کوتاه در محیط پلاسمای رقیق در حضور میدان‌های مغناطیسی همگن و غیرهمگن و پدیده اختلاط فازی با روش شبیه‌سازی ذره‌ای دوبعدی بررسی شده است. در شدت‌های بالای لیزری، اثرات غیرخطی موجب به هم ریختگی شکل منظم موج و پدیده شکست موج می‌شود. آستانه شکست موج به شدت لیزر فرودی و چگالی پلاسمای وابسته است. علاوه بر افزایش شدت لیزر و چگالی پلاسمای، فرایند فیزیکی دیگری به عنوان پدیده اختلاط فازی وجود دارد که می‌تواند به شکست موج پلاسمایی بیانجامد. این فرایند در صورت بروز وابستگی فضایی فرکانس نوسانات اتفاق می‌افتد. در این مقاله نشان داده شد که در حضور میدان مغناطیسی همگن، موج ایجاد شده با گذشت زمان شکل متناوب خود را از دست می‌دهد و همچنین خطوط تیز در چگالی الکترون که یکی از نشانه‌های پدیده اختلاط فازی است، شروع به رشد می‌کند. علاوه بر این، نتایج شبیه‌سازی نشان داد که با اعمال میدان مغناطیسی غیرهمگن به دلیل ایجاد وابستگی فرکانس مشخصه به مکان، پدیده اختلاط فازی سریع‌تر نسبت به اعمال میدان مغناطیسی همگن اتفاق می‌افتد.

منابع

- [1] Esarey E, Shadwick B. A., Catravas P., Leemans W.P. Synchrotron radiation from electron beams in plasma-focusing channels. *Physical Review E*, **65**.056505. 2002.
- [2] 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.
- [3] Arefiev A.V., Khudik V.N. and Schollmeier M. Enhancement of laser-driven electron acceleration in an ion channel. *Physics of plasmas*, **21**.033104. 2014.

- [4] Wang Z. Y., Tang C. J. and Peng X. D. Cherenkov electromagnetic instability excited by an oscillating relativistic electron beam in ion channel. *Physics of Plasmas*, **17**. 083114. 2010.
- [5] Ahedo E. and Sanmartin J.R. Resonant absorption in a plasma step profile. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, **29**.419.1987.
- [6] Modena A., Najmudin Z., Dangor A. E., Clayton C. E., Marsh K. A., Joshi C., Victor Malka *et al.* Electron acceleration from the breaking of relativistic plasma waves. *Nature*, **377** 606-608.1995.
- [7] Lobet M., Kando M., Koga J.K., Esirkepov T.Z., Nakamura T., Pirozhkov A.S. and Bulanov S.V. Controlling the generation of high frequency electromagnetic pulses with relativistic flying mirrors using an inhomogeneous plasma. *Physics Letters A*, **377**. 1114-1118. 2013.
- [8] Yampolsky N.A. and Fisch N.J. Effect of nonlinear Landau damping in plasma-based backward Raman amplifier. *Physics of Plasmas*, **16**.072105. 2009.
- [9] Bulanov Stepan S., Valery Yu Bychenkov, Vladimir Chvykov, Galina Kalinchenko, Dale William Litzenberg, Takeshi Matsuoka, Alexander GR Thomas *et al.* Generation of GeV protons from 1 PW laser interaction with near critical density targets. *Physics of plasmas*, **17**. 043105 2010.
- [10] Karmakar M., Maity C., Chakrabarti N. and Sengupta S. Phase-mixing of large amplitude electron oscillations in a cold inhomogeneous plasma. *Physics of Plasmas*. **25**. 022102. 2018.
- [11] Sourav P., Maity C., Chakrabarti N. Phase-mixing of ion plasma modes in pair-ion plasmas. *Physics of Plasmas* **22**, 052303. 2015.
- [12] Maity C., Sarkar A., Shukla P.K. and Chakrabarti N. Wave-breaking phenomena in a relativistic magnetized plasma. *Physical review letters*, **110**.215002.2013.
- [13] Karmakar M., Maity C. and Chakrabarti N. Wave-breaking amplitudes of relativistic upper-hybrid oscillations in a cold magnetized plasma. *Physics of Plasmas*, **23**.064503. 2016.
- [14] Kargarian A., Rouhani M. R and Hakimipajouh, H. One dimension PIC simulation of nonlinear ion-acoustic waves in plasma. *Iranian Journal of Physics Research*, **11**. 2011.
- [15] Rohani, M. R, and Kargariyan, A. Particle simulation of linear sound ions in plasma. *Iranian Journal of Applied Physics*, **4**. 57-63. 2014.
- [16] Hockney R.W, Estwood J.W. *Computer Simulation Using Particles*, McGraw-Hill, New York, 1981
- [17] Birdsall C.K. and Langdon A.B. *Plasma physics via computer simulation*, CRC Press,2004.

تأثیر شرایط و روش لایه‌نشانی در خواص فیزیکی لایه‌های MAPbI₃ به منظور استفاده در سلول خورشیدی پروسکایتی^۱

نقیسه معماریان^{۲*} و رضا رجب بلوکات^۳

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۱۰/۰۹

تاریخ بازنگری: ۱۳۹۹/۱۱/۱۱

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۱/۱۵

چکیده

در سال‌های اخیر سلول‌های خورشیدی با جاذب پروسکایت به دلیل افزایش فوق‌العاده بازده، شدیداً مورد توجه محققان قرار گرفته‌اند. در این پژوهش لایه‌های نازک پروسکایت متیل آمونیم سرب یدید (MAPbI₃) به روش رشد دومرحله‌ای تهیه شده است. دو روش چرخشی-چرخشی و چرخشی-غوطه‌وری شد و ویژگی‌های فیزیکی لایه‌های به دست آمده از این روش‌ها مقایسه شد. ویژگی‌های اپتیکی و ساختاری آن‌ها توسط روش‌های UV-VIS، XRD و FE-SEM بررسی شده است. نتایج حاصل از بررسی‌های ساختاری، فاز مکعبی را برای پروسکایت MAPbI₃ نشان داد. همچنین مورفولوژی سطح لایه‌ها در تصاویر FE-SEM مشخص شد، که تشکیل یک لایه منسجم، بدون هیچگونه ترک و ناپوستگی را تأیید می‌کند. نتایج نشان داد که گاف اپتیکی نمونه‌ها در

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2021.34610.1191

^۲ استادیار، دانشکده فیزیک، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران. (نویسنده مسئول).

Email: n.memarian@semnan.ac.ir

^۳ دانش آموخته کارشناسی ارشد، دانشکده فیزیک، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران.

Email: r.bolookat@gmail.com

۵۶ / تأثیر شرایط و روش لایه‌نشانی در خواص فیزیکی لایه‌های MAPbI_3 به منظور استفاده در سلول ...

بازه $1/59 - 1/54$ eV است. همچنین اثر تغییر غلظت ماده اولیه بر خواص فیزیکی لایه‌های MAPbI_3 تهیه شده به هر دو روش، مشخص شد. نتایج نشان داد که در هر دو روش با افزایش غلظت PbI_2 لایه‌های با ضخامت و جذب بیشتر ساخته می‌شود.

واژگان کلیدی: جاذب پروسکایت، متیل آمونیم سرب یدید، لایه نازک، لایه‌نشانی چرخشی، لایه‌نشانی غوطه‌وری.

۱. مقدمه

با توجه به رشد فزاینده جمعیت جهان تقاضا برای انرژی در حال افزایش است. در حال حاضر کاملاً مشخص است که سوخت‌های فسیلی قادر نخواهند بود نیاز انرژی بشر در آینده را تأمین کنند. همین نقص نیاز روزافزون به استفاده از منابع انرژی جدید و تجدیدپذیر را افزایش می‌دهد. یکی از منابع انرژی تجدیدپذیر، انرژی خورشیدی است که با استفاده از اثر فوتولتایی می‌تواند به صورت مستقیم انرژی تابشی خورشید را به انرژی الکتریکی تبدیل کند. در طی سال‌های گذشته دانشمندان تحقیقات گسترده‌ای بر سلول‌های خورشیدی انجام داده‌اند و سلول‌های خورشیدی با ساختارهای متفاوتی مطالعه و ساخته شده‌اند [۱، ۲]. سلول خورشیدی پروسکایت یکی از جدیدترین انواع سلول‌های خورشیدی است که امروزه مد توجه گسترده محققان قرار گرفته است. در این سلول‌ها یک لایه جاذب نور (ناحیه فعال سلول) وجود دارد که بر اساس نوع سلول متفاوت و یکی از انواع پلیمر یا ماده معدنی یا هیبرید آلی/معدنی است. این لایه وظیفه جذب نور خورشید و تولید زوج الکترون-حفره را بر عهده دارد. عموماً از پروسکایت‌های آلی/معدنی برای این لایه استفاده می‌شود [۳].

درک ساختار پروسکایت‌ها هم از نظر علمی و هم کاربردی یکی از مسائل چالش‌برانگیز فیزیک و شیمی حالت جامد است. این ترکیبات به دلیل داشتن خواص فیزیکی و ساختاری و شیمیایی فوق‌العاده از اهمیت ویژه‌ای برخوردارند. از این ترکیبات به دلیل داشتن خواص عالی از جمله ضریب جذب نوری عالی، تحرک حامل‌های بار مطلوب، قابلیت محلول‌سازی و همچنین خواص اپتیکی و الکتریکی مناسب، در ساخت سلول‌های خورشیدی پروسکایتی استفاده می‌شود. نوع عناصر تشکیل‌دهنده، اندازه و بار یونی و ساختار نهایی، خواص این ترکیبات را تعیین می‌کند [۴-۶].

ساختار شیمیایی پروسکایت‌ها را می‌توان به شکل AMX_3 توصیف کرد، که در این ترکیبات A نقش یک کاتیون آلی یا معدنی، M به عنوان یک یون فلزی و X نقش آنیون را ایفا می‌کند. معمولاً از هالوژن‌های (Cl Br I) به عنوان آنیون فلزی X و از فلزات دو ظرفیتی نظیر Pb^{2+}

Cu^{2+} ، Fe^{2+} ، Sn^{2+} و ... به عنوان کاتیون فلزی M استفاده می‌شود [۴]. در هالیدهای آلی-معدنی، کاتیون A معمولاً یک کاتیون کوچک انتخاب می‌شود و بیشتر کاتیون‌هایی مثل متیل آمونیم (CH_3NH_3^+)، اتیل آمونیم ($\text{C}_2\text{H}_5\text{NH}_3^+$) و فرمامیدینیوم ($\text{CH}(\text{NH}_2)_2^+$) استفاده می‌شود [۷، ۸]. در میان ترکیبات پروسکایت آلی-معدنی متیل آمونیم سرب یدید MAPbI_3 (با فرمول $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) به دلیل داشتن خواص اپتیکی و الکتریکی بسیار مناسب مورد توجه محققان در زمینه سلول‌های خورشیدی قرار گرفته است. در سال‌های اخیر تحقیقاتی بر ترکیبات پروسکایت اتیل آمونیم و مخصوصاً فرمامیدیم هم انجام شده است و حتی بر ترکیبات با کاتیون-های آلی دیگر هم بررسی‌هایی انجام شده است، اما بهترین سلول‌های خورشیدی با MAPbI_3 تهیه شده‌اند [۶، ۷].

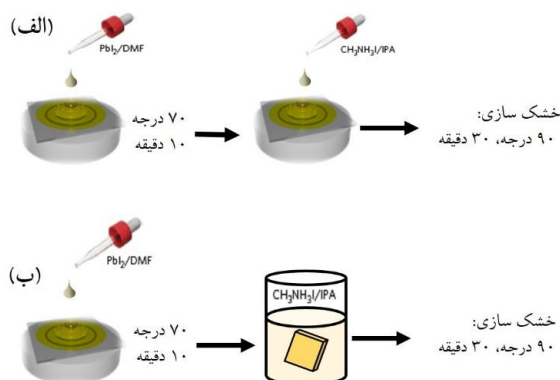
ترکیب MAPbI_3 در ساختارهای بلوری مکعبی، تتراگونال یا ارتورمبیک متبلور می‌شود [۹]. چندین روش برای لایه‌نشانی لایه‌های پروسکایتی گزارش شده است. یکی از روش‌هایی که به صورت گسترده در ساخت سلول‌های پروسکایت استفاده می‌شود، روش رشد تک‌مرحله‌ای از فاز محلول است. در این روش هر دو پیش‌ماده پروسکایت (برای مثال PbI_2 و MAI برای MAPbI_3) در یک حلال قوی حل شده سپس با روش چرخشی لایه‌نشانی می‌شود. اما نتایج نشان می‌دهد که لایه‌های به‌دست آمده با این روش یکنواخت نیست و بازده کمتری نسبت به نمونه‌های تهیه شده با روش‌های دومرحله‌ای دارند [۱۰، ۱۱]. همچنین لایه‌های نازک پروسکایت هالیدهای آلی-معدنی با روش لایه‌نشانی بخار در خلأ نیز تهیه شده‌اند. معمولاً این لایه‌نشانی با روش دو منبع [۱۲-۱۴] یا تک منبع [۱۵] انجام می‌شود. در حالت اول هر دو ماده به صورت بخار به ترتیب لایه‌نشانی می‌شوند اما در حالت دوم معمولاً PbI_2 به روش چرخشی و لایه بعدی به صورت بخار لایه‌نشانی می‌شود. روش دیگر لایه‌نشانی پی‌درپی از فاز محلول است که به دو دسته مهم چرخشی-چرخشی و چرخشی-غوطه‌وری انجام می‌شود. در روش اول (چرخشی-چرخشی) ابتدا پیش‌ماده سرب به روش چرخشی لایه‌نشانی می‌شود و پس از آن ترکیب آلی نیز به روش چرخشی بر روی آن لایه‌نشانی می‌شود. در روش چرخشی-غوطه‌وری ابتدا یک لایه از محلول داغ ماده معدنی مثل PbI_2 که در حلال DMF تهیه شده است به روش چرخشی نشانداده می‌شود و سپس با غوطه‌ور کردن این لایه در محلول آلی مثل CH_3NH_3 (MAI)، لایه پروسکایت یکنواختی تهیه می‌شود. با این روش سلول‌هایی با بازده ۱۵٪ به‌دست آمده است [۱۶]. امروزه بازده سلول‌های خورشیدی پروسکایتی به بیش از ۲۰٪ رسیده است [۱۴، ۱۷، ۱۸]. بنابراین پیدا کردن یک روش ساده و عملی و در عین حال کم هزینه، برای لایه‌نشانی لایه‌های نازک پروسکایت در ادامه راه تحقیقات سلول خورشیدی پروسکایتی حائز اهمیت است. در این پژوهش اثر غلظت ماده

اولیه PbI_2 بر خواص ساختاری و اپتیکی لایه‌های MAPbI_3 تهیه‌شده به دو روش چرخشی-چرخشی و چرخشی-غوطه‌وری بررسی و مقایسه شده است.

۲. بخش تجربی

در این پژوهش لایه‌های نازک پروسکایت MAPbI_3 به دو روش چرخشی-چرخشی و چرخشی-غوطه‌وری بر روی زیرلایه شیشه‌ای تهیه شد. ابتدا محلول PbI_2 در حلال DMF با سه غلظت ۲۵۰ و ۳۵۰ و ۴۵۰ میلی‌گرم در میلی‌لیتر تهیه شد. همچنین، محلول ۲۵ mg/ml از $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$ تهیه شد. لایه‌نشانی PbI_2 را با سرعت چرخش ۴۰۰۰ دور در دقیقه به مدت ۳۰S انجام دادیم. سپس، نمونه‌ها بر گرم‌کن در دمای ۷۰ درجه سلسیوس در مجاورت هوا به مدت ۱۰ دقیقه خشک شد. برای روش چرخشی-چرخشی لایه‌نشانی محلول MAI با سرعت ۲۰۰۰ rpm به مدت ۳۰S انجام گرفت و برای روش چرخشی-غوطه‌وری لایه‌نشانی MAI با روش غوطه‌وری در محلول به مدت ۳ دقیقه انجام شد. پس از آن لایه‌ها با حلال ۲-پروپانول شسته شد. در نهایت لایه‌ها در دمای ۹۰ درجه سلسیوس به مدت ۳۰ دقیقه داخل آون خشک شدند. شکل الف طرحی از مراحل کار به روش چرخشی-چرخشی و شکل ب مراحل کار برای روش چرخشی-غوطه‌وری را نمایش می‌دهد.

به منظور بررسی مشخصه‌های اپتیکی نمونه‌ها از لایه‌ها آنالیز UV-VIS با استفاده از دستگاه Perkin Elmer مدل Lambda 25 گرفته شد. همچنین پراش اشعه ایکس از نمونه‌ها (XRD) با استفاده از دستگاه Bruker D8 Advance PW 3810 با تابش $\text{CuK}\alpha$ بررسی شد. تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (FE-SEM) برای بررسی مورفولوژی سطحی و همچنین سطح مقطع نمونه‌ها توسط دستگاه SIGMA VP-500 از شرکت ZEISS گرفته شد.



شکل ۱ طرحی از مراحل کار (الف) روش چرخشی-چرخشی، (ب) روش چرخشی-غوطه‌وری.

۳. نتایج و بحث

از لایه‌های تهیه شده آنالیز پراش اشعه ایکس (XRD) گرفته شد. الگوی XRD نمونه‌های ساخته شده به روش چرخشی-چرخشی در شکل ۲ و نمودار XRD نمونه‌های ساخته شده به روش چرخشی-غوطه‌وری در شکل ۳ نمایش داده شده است. برای مقایسه دقیق تر الگوی پراش مربوط به PbI_2 نیز در شکل‌های فوق آورده شده است.

با توجه به شکل ۲، قله‌های اصلی پراش در زوایای $14/2^\circ$ و $28/5^\circ$ دیده می‌شود که با دسته صفحات (۱۰۰) و (۲۰۰) در فاز مکعبی با گروه فضایی $Pm-3m$ برای $MAPbI_3$ یکسان است [۱۹، ۲۰]. تشخیص فاز ساختار $MAPbI_3$ نیاز به دقت فراوانی دارد. حضور دو قله پراش مربوط به صفحات (۲۱۱) و (۲۱۳) که در زوایای $23/65^\circ$ و $31/01^\circ$ با تقارن مکعبی همخوانی ندارد و تنها در فاز تتراگونال این ماده دیده می‌شود، برای تشخیص فاز مکعبی از تتراگونال بسیار سودمند است [۲۰، ۲۱].

در نمودار مربوط به نمونه‌های 450 mg/ml و 350 mg/ml یک قله در زاویه $12,7^\circ$ درجه مشاهده می‌شود که مربوط به PbI_2 است که با افزایش غلظت PbI_2 افزایش یافته است. حضور این قله به دلیل آن است که در روش چرخشی-چرخشی وقتی محلول MAI بر سطح لایه‌نشانی می‌شود با لایه‌های سطحی PbI_2 واکنش می‌دهد و این لایه‌ها مانع واکنش بیشتر با لایه‌های داخلی PbI_2 می‌شود. بنابراین در نمودار مربوط به نمونه دارای غلظت 250 mg/ml چون غلظت کم است و لایه نازک تر است، همه PbI_2 واکنش داده و قله مربوط به آن در XRD دیده نمی‌شود اما در نمونه‌های بعدی با افزایش ضخامت مقدار این قله افزایش می‌یابد.

همچنین، دسته صفحاتی مثل (۱۱۰) و (۲۱۰) و (۱۱۱) که شدت ناچیزی دارند یا غایب هستند، با افزایش غلظت رشد کرده‌اند که نشان‌دهنده افزایش ضخامت و بلورینگی لایه است. با افزایش غلظت، پهنای قله‌ها در نیم ارتفاع بیشینه کاهش می‌یابد که به افزایش اندازه بلورک‌ها می‌انجامد. ثابت شبکه، اندازه بلورک (D)، کرنش شبکه (ε) و چگالی نقص‌ها (δ)، که از روابط زیر محاسبه شده است، در جدول ۱ آورده شده است [۲۲].

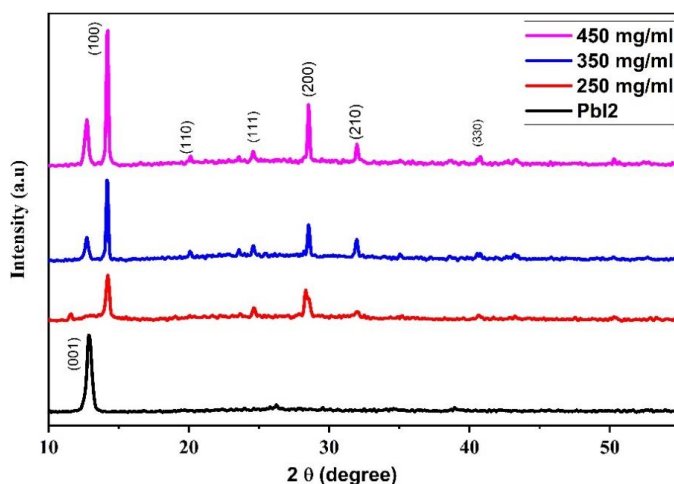
$$D = \frac{0.9\lambda}{\beta \cos \theta} \quad (1)$$

$$\epsilon = \frac{\beta \cos \theta}{4} \quad (2)$$

$$\delta = \frac{1}{D^2} \quad (3)$$

در این روابط، λ طول موج اشعه ایکس تابشی ($1/54 \text{ \AA}$)، β پهنای قله در نیم ارتفاع بیشینه (FWHM) و θ زاویه براگ مربوط به قله پراش است.

همانطور که در شکل ۳ مشاهده می‌شود، با توجه به نمودار پراش لایه‌ها، همانند روش لایه‌نشانی قبل، قله‌های اصلی در زوایای ۱۴/۲ و ۲۸/۵ درجه قرار دارند که با دسته‌صفحات (۱۰۰) و (۲۰۰) در فاز مکعبی با گروه فضایی pm-3m مطابقت دارد. قله‌های مربوط به PbI₂ با علامت ستاره مشخص شده‌اند. در نمودار مربوط به غلظت ۲۵۰ mg/ml تقریباً قله‌ای برای PbI₂ مشاهده نمی‌شود. زیرا به دلیل ضخامت کم لایه پروسکایت تقریباً تمام لایه PbI₂ به پروسکایت تبدیل شده است. ولی در نمودارهای بعدی به دلیل عدم پوشش لایه‌های عمیق‌تر PbI₂ به وسیله لایه‌های سطحی پروسکایت که ناشی از افزایش ضخامت است، شاهد افزایش شدت قله مربوط به PbI₂ هستیم [۲۳]. در جدول ۲ پارامترهای ساختاری نمونه‌های تهیه‌شده با روش چرخشی-غوطه‌وری آورده شده است. از مقایسه نتایج مربوط به دو دسته از نمونه‌ها مشاهده می‌کنیم که اندازه بلورک برای حالت لایه‌نشانی چرخشی-چرخشی بزرگ‌تر از حالت چرخشی-غوطه‌وری است. ثابت شبکه برای نمونه‌ها در بازه ۶/۲ تا ۶/۳ آنگستروم به دست آمد که با نتایج دیگر محققان همخوانی دارد [۲۴، ۲۱]. همچنین از جدول ۱ و ۲ مشاهده می‌شود که در هر دو روش لایه‌نشانی، با افزایش غلظت محلول PbI₂ ثابت شبکه کاهش یافته است که در سایر گزارش‌ها نیز چنین پدیده‌ای گزارش شده است [۲۵]. این تغییر در ثابت شبکه در خواص اپتیکی نمونه‌ها نظیر ضریب جذب و اندازه گاف آنها تأثیر می‌گذارد که در ادامه این موضوعات را تشریح می‌کنیم.

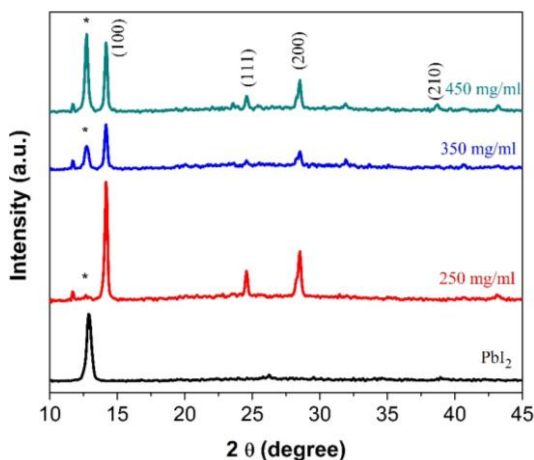


شکل ۲ الگوی پراش پرتو ایکس برای لایه‌های تهیه‌شده به روش چرخشی-چرخشی با غلظت‌های مختلف محلول PbI₂.

جدول ۱ اندازه بلورکها و کرنش و چگالی نقص برای غلظت‌های مختلف PbI_2

لایه‌نشانی شده به روش چرخشی-چرخشی.

غلظت mg/ml	ثابت شبکه (\AA)	اندازه ذرات (nm)	کرنش (10^{-4})	چگالی نقص $10^{15} m^{-2}$
۲۵۰	۶/۳۲۳	۳۱/۲۹	۱۱/۰۸	۱
۳۵۰	۶/۲۸۴	۴۱/۷	۸/۳۱	۰/۶
۴۵۰	۶/۲۷۶	۴۱/۷	۸/۳۱	۰/۶



شکل ۳ الگوی پراش پرتو ایکس برای لایه‌های تهیه شده به روش چرخشی-غوطه‌وری با غلظت‌های مختلف محلول PbI_2 .

جدول ۲ اندازه بلورکها و کرنش و چگالی نقص برای غلظت‌های مختلف PbI_2

لایه‌نشانی شده به روش چرخشی-غوطه‌وری.

غلظت mg/ml	ثابت شبکه (\AA)	اندازه ذرات (nm)	کرنش (10^{-4})	چگالی نقص $10^{15} m^{-2}$
۲۵۰	۶/۲۹۳	۳۳/۵۲	۱۰/۳۴	۰/۹
۳۵۰	۶/۲۸۹	۳۲/۱۶	۱۰/۷۷	۱
۴۵۰	۶/۲۸۳	۳۴/۲۹	۱۰/۱	۰/۸

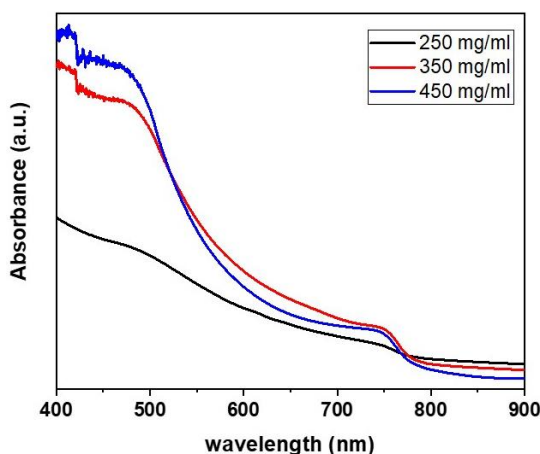
به منظور بررسی خواص اپتیکی نمونه‌ها، طیف جذب آن‌ها گرفته شد. شکل ۴ طیف جذب لایه‌های تهیه شده به روش چرخشی-چرخشی و شکل ۵ طیف جذب لایه‌های تهیه شده به روش چرخشی-غوطه‌وری را نمایش می‌دهد. مشاهده می‌شود که لایه‌ها در محدوده طیف مرئی نور خورشید یعنی طول موج 400 nm تا 800 nm دارای جذب عالی هستند و لبه جذب این نمونه‌ها در ناحیه مادون قرمز است.

۶۲ / تأثیر شرایط و روش لایه‌نشانی در خواص فیزیکی لایه‌های MAPbI₃ به منظور استفاده در سلول ...

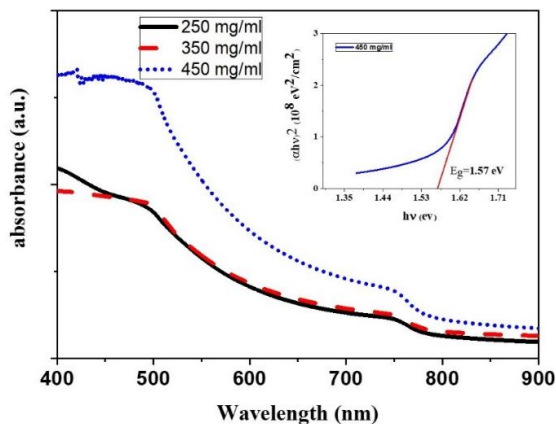
با افزایش غلظت Pbl₂ و افزایش ضخامت لایه‌ها کاملاً مشخص است که جذب نمونه‌ها افزایش یافته است. بنابراین برای جذب بهتر در سلول خورشیدی، لایه‌های دارای غلظت بیشتر مناسب‌تر است. با توجه به نمودارهای جذب می‌توان با استفاده از رابطهٔ تاک گاف نواری را برای لایه‌ها محاسبه کرد [۲۶].

$$(\alpha h\nu) = A (h\nu - E_g)^n \quad (۴)$$

در رابطهٔ بالا، $h\nu$ انرژی فوتون فرودی، n برای گاف مستقیم $\frac{1}{2}$ و برای گاف غیر مستقیم ۲، A ضریب تناسب و α ضریب جذب ماده است. با رسم نمودار $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب $h\nu$ می‌توان با برون‌یابی قسمت خطی نمودار و پیدا کردن محل تقاطع با محور X ، گاف نواری را محاسبه کرد که برای مثال برای نمونهٔ ۴۵۰ mg/ml درون شکل ۵ رسم شده است. با توجه به مطالعات تجربی [۱۴] و نظری [۲۷] انجام‌شده، گاف نواری این ترکیب مستقیم است، بنابراین برای محاسبه گاف اپتیکی نمونه‌ها $n = \frac{1}{2}$ در نظر گرفته شده است. گاف نواری محاسبه‌شده برای نمونه‌ها در جدول ۳ آورده شده است. اندازهٔ گاف برای نمونه‌ها در بازهٔ ۱/۵۹ - ۱/۵۴ eV به دست آمد که با مقدار گاف نواری برای MAPbI₃ تطابق خوبی دارد [۲۱]. همچنین از مقایسهٔ شکل‌های ۳ و ۴ مشاهده می‌شود که لایه‌های رشدیافته با روش چرخش-غوطه‌وری جذب بیشتری را نشان می‌دهد. این امر به دلیل ضخامت بیشتر این لایه‌هاست که در تصاویر FE-SEM مربوط به نمونه‌ها که در قسمت بعدی می‌آید، کاملاً مشخص است.



شکل ۴ طیف جذب لایه‌های پروسکایت با روش چرخشی-غوطه‌وری با غلظت‌های متفاوت.

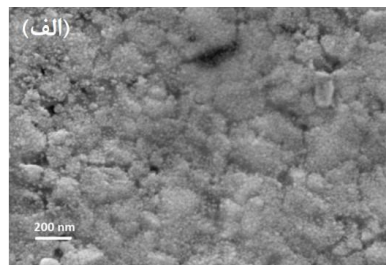
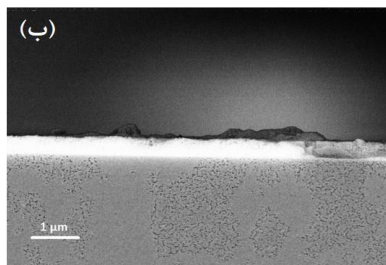


شکل ۵ طیف جذب لایه‌های پروسکایت با روش چرخشی-غوطه‌وری با غلظت‌های متفاوت.

جدول ۳ اندازه گاف انرژی برای لایه‌های MAPbI3 در شرایط مختلف.

روش لایه‌نشانی	چرخشی-چرخشی			چرخشی-غوطه‌وری		
غلظت pbI_2	۲۵۰ mg/ml	۳۵۰ mg/ml	۴۵۰ mg/ml	۲۵۰ mg/ml	۳۵۰ mg/ml	۴۵۰ mg/ml
E_g (eV)	۱/۵۴	۱/۵۹	۱/۵۹	۱/۵۶	۱/۵۷	۱/۵۷

مورفولوژی سطحی و ضخامت لایه‌ها با استفاده از فن FESEM بررسی شد. از نمونه‌های با غلظت ۴۵۰ mg/ml تصاویر FE-SEM گرفته شد که در شکل ۶ و ۷ به ترتیب برای روش چرخشی-چرخشی و چرخشی-غوطه‌وری آورده شده است. بر اساس شکل ۶ (الف) ساختار سطحی پروسکایت به صورت موزاییکی است. همچنین از شکل ۶ ب می‌توان ضخامت لایه را به دست آورد که این ضخامت برابر ۴۰۰ nm است. در تصویر عرضی می‌توان مشاهده کرد که لایه پروسکایت تنها بر سطح نمونه تشکیل شده است و این ساختار موزاییکی پروسکایت اجازه نفوذ محلول MAI را به لایه‌های درونی نمی‌دهد.

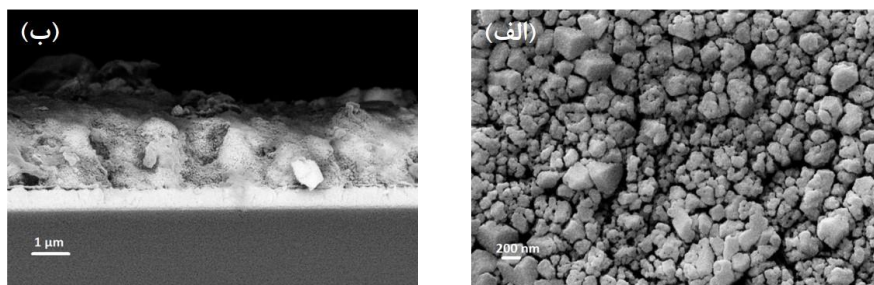


شکل ۶ تصاویر FESEM؛ (الف) سطحی

(ب) سطح مقطع از نمونه تهیه شده به روش چرخشی-چرخشی با غلظت ۴۵۰ mg/ml.

۶۴ / تأثیر شرایط و روش لایه‌نشانی در خواص فیزیکی لایه‌های MAPbI_3 به منظور استفاده در سلول ...

در تصویر ۷ الف که از سطح نمونه گرفته شده است، کاملاً مشخص است که در این روش لایه‌های پروسکایت به صورت نانو مکعب‌های MAPbI_3 بر روی شیشه لایه‌نشانی می‌شوند. برخلاف حالت لایه‌نشانی چرخشی-چرخشی که به صورت موزاییکی و صاف و فشرده بود. در برش عرضی (شکل ۷ ب) از نمونه، ضخامت لایه پروسکایت در حدود $2/5$ میکرومتر به دست می‌آید که به مراتب بیشتر از نمونه مشابه با روش لایه‌نشانی چرخشی-چرخشی است. این افزایش ضخامت را می‌توان به مدت زمان غوطه‌وری در محلول نسبت داد که زمان واکنش بین دو پیش ماده را نسبت به روش قبل افزایش می‌دهد.



شکل ۷ تصاویر FESM. (الف) سطحی (ب) سطح مقطع از نمونه تهیه شده به روش چرخشی-غوطه‌وری با غلظت 450 mg/ml .

۴. نتیجه‌گیری

با استفاده از دو روش لایه‌نشانی چرخشی-چرخشی و چرخشی-غوطه‌وری لایه‌های MAPbI_3 تهیه شد. همچنین اثر غلظت ماده اولیه PbI_2 بر خواص ساختاری و اپتیکی و مورفولوژی لایه‌های تهیه شده مطالعه شد. بر اساس نمودار جذب نمونه‌ها هرچه غلظت PbI_2 افزایش می‌یابد، لایه‌ها ضخیم‌تر شده در نتیجه مقدار جذب لایه افزایش می‌یابد. همچنین از مقایسه دو روش مشخص شد که لایه‌های رشدیافته با روش دوم به مراتب ضخیم‌تر از روش اول است و همچنین اندازه ذرات به دست آمده در این روش کوچک‌تر از حالت قبلی است و این ویژگی برای پر کردن لایه‌های متخلخل زیرین در ساختار سلول خورشیدی پروسکایتی بهتر است. در نتیجه استفاده از روش چرخشی-غوطه‌وری برای کاربرد این لایه‌ها به عنوان جاذب نور در سلول‌های خورشیدی مناسب است.

۵. تقدیر و تشکر

از معاونت محترم پژوهشی دانشگاه سمنان سپاسگزاری می‌شود.

منابع

- [1] Wang, P., Guo, Y., Yuan, S., Yan, C., Lin, J., Liu, Z., Lu, Y., Bai, C., Lu, Q., Dai, S. and Cai, C., 2016. Advances in the structure and materials of perovskite solar cells. *Research on Chemical Intermediates*, **42**, 625-639, (2016).
- [2] Zhang, W.H. and Cai, B., Organolead halide perovskites: a family of promising semiconductor materials for solar cells. *Chinese Science Bulletin*, **59**, 2092-2101, (2014).
- [3] Grätzel, M., The light and shade of perovskite solar cells. *Nature materials*, **13**, 838-842, (2014).
- [4] Wu, J., Lan, Z., Lin, J., Huang, M., Huang, Y., Fan, L. and Luo, G., Electrolytes in dye-sensitized solar cells. *Chemical reviews*, **115**, 2136-2173, (2015).
- [5] Park, N.G., Perovskite solar cells: an emerging photovoltaic technology. *Materials Today*, **18**, 65-72, (2015).
- [6] Boix, P.P., Nonomura, K., Mathews, N. and Mhaisalkar, S.G., Current progress and future perspectives for organic/inorganic perovskite solar cells. *Materials today*, **17**, 16-23, (2014).
- [7] Zhang, S., Lanty, G., Lauret, J.S., Deleporte, E., Audebert, P. and Galmiche, L., Synthesis and optical properties of novel organic-inorganic hybrid nanolayer structure semiconductors. *Acta Materialia*, **57**, 3301-3309, (2009).
- [8] Tanaka, K., Takahashi, T., Ban, T., Kondo, T., Uchida, K. and Miura, N., Comparative study on the excitons in lead-halide-based perovskite-type crystals $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ and $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$. *Solid state communications*, **127**, 619-623, (2003).
- [9] Luo, S. and Daoud, W.A., Crystal Structure Formation of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ -xClx Perovskite. *Materials*, **9**, 123, (2016).
- [10] Eperon, G.E., Burlakov, V.M., Docampo, P., Goriely, A. and Snaith, H.J., Morphological control for high performance, solution-processed planar heterojunction perovskite solar cells. *Advanced Functional Materials*, **24**, 151-157, (2014).
- [11] Bing, J., Huang, S., & Ho-Baillie, A. W. A review on halide perovskite film formation by sequential solution processing for solar cell applications. *Energy Technology*, **8**, 1901114, (2020).
- [12] Salau, A.M., Fundamental absorption edge in PbI_2 : KI alloys. *Solar Energy Materials*, **2**, 327-332, (1980).
- [13] Era, M., Hattori, T., Taira, T. and Tsutsui, T., Self-organized growth of PbI_2 -based layered perovskite quantum well by dual-source vapor deposition. *Chemistry of materials*, **9**, 8-10, (1997).
- [14] Kaya, Ismail C., Kassio PS Zanoni, Francisco Palazon, Michele Sessolo, Hasan Akyildiz, Savas Sonmezoglu, and Henk J. Bolink. "Crystal Reorientation and Amorphization Induced by Stressing Efficient and Stable P-I-N Vacuum-Processed MAPbI_3 Perovskite Solar Cells." *Advanced Energy and Sustainability Research*: 2000065, (2021).
- [15] Mitzi, D.B., Prikas, M.T. and Chondroudis, K., Thin Film Deposition of Organic-Inorganic Hybrid Materials Using a Single Source Thermal Ablation Technique. *Chemistry of materials*, **11**, 542-544, (1999).
- [16] Burschka, J., Pellet, N., Moon, S.J., Humphry-Baker, R., Gao, P., Nazeeruddin, M.K. and Grätzel, M., Sequential deposition as a route to high-performance perovskitesensitized solar cells. *Nature*, **499**, 316-319, (2013).
- [17] X. Zheng, Y. Hou, C. Bao, J. Yin, F. Yuan, Z. Huang, K. Song, J. Liu, J. Troughton, N. Gasparini, C. Zhou, Y. Lin, D.-J. Xue, B. Chen, A. K. Johnston, N. Wei, M. N. Hedhili, M. Wei, A. Y. Alsalloum, P. Maity, B. Turedi, C. Yang, D. Baran, T. D. Anthopoulos, Y. Han, Z.-H. Lu, O. F. Mohammed, F. Gao, E. H. Sargent, O. M. Bakr, *Nat. Energy*, **5**, 131 (2020).
- [18] Jung, Eui Hyuk, Nam Joong Jeon, Eun Young Park, Chan Su Moon, Tae Joo Shin, Tae-Youl Yang, Jun Hong Noh, and Jangwon Seo. "Efficient, stable and scalable perovskite solar cells using poly (3-hexylthiophene)." *Nature* **567**, 511-515, (2019).

- [19] Kong, W., Ye, Z., Qi, Z., Zhang, B., Wang, M., Rahimi-Iman, A. and Wu, H., Characterization of an abnormal photoluminescence behavior upon crystal-phase transition of perovskite CH₃NH₃PbI₃. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **17**, 16405-16411, (2015).
- [20] Baikie, T., Fang, Y., Kadro, J.M., Schreyer, M., Wei, F., Mhaisalkar, S.G., Graetzel, M. and White, T.J., Synthesis and crystal chemistry of the hybrid perovskite (CH₃NH₃)PbI₃ for solid-state sensitised solar cell applications. *Journal of Materials Chemistry A*, **1**, 5628-5641, (2013).
- [21] Takeo Oku, Kosyachenko, Leonid A., ed. *Solar Cells: New approaches and reviews*. BoD-Books on Demand, chapter 3, 2015.
- [22] Malliga, P., Pandiarajan, J., Prithivikumaran, N. and Neyvasagam, K., Influence of film thickness on structural and optical properties of sol-gel spin coated TiO₂ thin film. *J Appl Phys*, **6**, 22-28, (2014).
- [23] Liang, K., Mitzi, D. B., & Prikas, M. T. *Synthesis and Characterization of Organic-Inorganic Perovskite Thin Films Prepared Using a Versatile Two-Step Dipping Technique*. *Chemistry of Materials*, **10**, 403-411, (1998).
- [24] Yuji Ando, Yuya Ohishi, Kohei Suzuki, Atsushi Suzuki, and Takeo Oku, Rietveld refinement of the crystal structure of perovskite solar cells using CH₃NH₃PbI₃ and other compounds, *AIP Conference Proceedings* **1929**, 020003, (2018).
- [25] Fu, Kunwu, Swee Sien Lim, Yanan Fang, Pablo P. Boix, Nripan Mathews, Tze Chien Sum, Lydia H. Wong, and Subodh Mhaisalkar. "Modulating CH₃NH₃PbI₃ perovskite crystallization behavior through precursor concentration." *Nano: Brief Reports and Reviews*, **9**, 1440003, (2014).
- [26] Elangovan, E. and Ramamurthi, K., A study on low cost-high conducting fluorine and antimony-doped tin oxide thin films. *Applied Surface Science*, **249**, 183-196, (2005).
- [27] Jayan, K. Deepthi, and Varkey Sebastian. "A review on computational modelling of individual device components and interfaces of perovskite solar cells using DFT." In *AIP Conference Proceedings*, 2162, 020036, (2019).

بررسی سنجۀ هندسی درهم تنیدگی تولیدشده توسط هامیلتونی پیچش تک محوری در سامانه های اسپینی^۱

آزیتا ناجی^{۲*}، محمود زهیری^۳ و مهرزاد اشرف پور^۴

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۰۹/۰۳

تاریخ بازنگری: ۱۳۹۹/۱۱/۰۴

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۱/۱۵

چکیده

با توجه به کاربردهای فراوان حالت های درهم تنیده و ضرورت تعیین کمی میزان درهم تنیدگی، در این مقاله نحوه ایجاد درهم تنیدگی در حالت های دو کیوبیتی جدایی پذیر با اعمال هامیلتونی پیچش تک محوری، در غیاب یا حضور میدان مغناطیسی با معرفی سنجۀ هندسی مطالعه شده است. عبارت دقیقی برای سنجۀ هندسی درهم تنیدگی بدون محاسبه حالت سامانه در حال تحول، با استفاده از روش مقدار چشمداشتی اسپین، محاسبه شده است سپس با رسم نمودار آن سنجه نسبت به زمان عوامل مؤثر در بیشینه سازی درهم تنیدگی را مطالعه کرده ایم. نتایج نشان داد که برای به دست آوردن بیشینه درهم تنیدگی توسط

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2021.34065.1179

^۲ استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران. (نویسنده مسئول)

Email: az.naji56@gmail.com

^۳ دانش آموخته کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.

Email: zeheiry.m@gmail.com

^۴ استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.

Email: mehrzadashrafpour@yahoo.com

هامیلتونی پیچش تک‌محوری حول محور X در غیاب میدان مغناطیسی، باید حالت اولیه، ضرب تانسوری ویژه‌حالت‌های مؤلفه‌های Z یا Y بردار اسپین کل باشد. ویژه‌حالت مؤلفه X اسپین کل، تحت تأثیر هامیلتونی پیچش تک‌محوری حول محور Z در غیاب میدان مغناطیسی، درهم‌تنیده نیست اما تحت تأثیر هامیلتونی پیچش تک‌محوری حول محور X با حضور میدان مغناطیسی در راستای Z به بیشینه درهم‌تنیدگی می‌رسد. هم‌چنین برای همه حالت‌ها، بسامد درهم‌تنیدگی تابعی افزایشی از میدان مغناطیسی است.

واژگان کلیدی: درهم‌تنیدگی، سنجۀ هندسی، هامیلتونی پیچش تک‌محوری، مقادیر چشمداستی اسپین.

۱. مقدمه

درهم‌تنیدگی یکی از مفیدترین منابع در پردازش اطلاعات کوانتومی است [۱] و کاربردهای زیادی در نظریه اطلاعات کوانتومی و نظریه میدان‌های کوانتومی دارد [۲، ۳]. به‌همین دلیل، شناخت حالت‌های درهم‌تنیده و تعیین میزان درهم‌تنیدگی آن‌ها از اهمیت زیادی برخوردار است. برای تعیین مقدار درهم‌تنیدگی یا جدایی‌پذیر بودن حالت‌ها، معیارها و سنجه‌های متعددی تاکنون معرفی شده است [۴، ۵] که هر یک نقاط ضعف و قوت مخصوص به خود دارند.

یکی از سنجه‌های معرفی شده، جهت‌سنجش مقدار درهم‌تنیدگی، سنجۀ هندسی است [۶]. با استفاده از این سنجه، به روش مقادیر چشمداستی اسپین [۷]، درهم‌تنیدگی ایجادشده در حالت‌های جدایی‌پذیر تحت هامیلتونی پیچش تک‌محوری را در حضور و غیاب میدان مغناطیسی بررسی می‌کنیم. برای به‌دست آوردن مقدار سنجۀ هندسی، مقادیر چشمداستی مشاهده‌پذیرها و تابع مقدار درهم‌تنیدگی را به صورت تحلیلی محاسبه می‌کنیم. سپس با استفاده از نرم‌افزار متمتیکا نمودار مقدار درهم‌تنیدگی را برای حالت‌های مختلف ترسیم کرده و نتایج حاصل از آن را بررسی می‌کنیم.

۲. سنجۀ هندسی و مقادیر چشمداستی اسپین

سنجۀ هندسی اولین بار توسط شیمونی در سال ۱۹۹۵ معرفی شد [۶]. برای هر حالت خالص $|\psi\rangle$ ، سنجۀ هندسی بر اساس فاصله هندسی بین حالت خالص $|\psi\rangle$ و نزدیک‌ترین حالت خالص جدایی‌پذیر تعریف می‌شود [۶، ۸، ۹]،

$$E = 1 - \max \left| \langle \psi | \psi_0 \rangle \right|^2 = 1 - \Lambda_{\max}^2 \quad (1)$$

که در آن، $|\psi_s\rangle$ یک حالت خالص جدایی پذیر است.

همان طور که در رابطه (۱) دیده می شود، برای محاسبه مقدار سنجه، لازم است کمینه سازی شود و از آن جا که، کمینه سازی در این موارد کار دشواری است، محققان در جستجوی روشی آسان تر و عملیاتی تر جهت محاسبه مقدار درهم تنیدگی حالت ها، به ارتباط بین سنجه هندسی و مقادیر چشمداشتی اسپین به شکل زیر دست یافتند [۷]،

$$E = \frac{1}{2}(1 - |\langle\sigma\rangle|) \quad (۲)$$

در این روش علاوه بر این که از عملیات سخت کمینه سازی رهایی می یابیم، مقدار درهم تنیدگی را نیز آزمایش پذیر کرده ایم زیرا مقادیر چشمداشتی اسپین را می توانیم در آزمایشگاه به دست آوریم. درخور توجه است که برای حالت های کاملاً جدایی پذیر مانند $\langle 00 | \psi \rangle = 1$ به دست می آید و در نتیجه مقدار سنجه برابر صفر می شود و برای حالت های کاملاً درهم تنیده بل مانند $|\psi\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$ مقدار چشمداشتی اسپین اول (یا اسپین دوم) برابر با صفر و مقدار سنجه برابر $1/2$ می شود. بنابراین مقدار سنجه هندسی برای حالت های دو کیوبیتی، مقادیر بین 0 تا $1/2$ را خواهد داشت.

۳. تأثیر هامیلتونی پیچش تک محوری

سامانه ای شامل N اسپین $1/2$ را در نظر می گیریم؛ کمیت S_x برای کل سامانه برابر با مجموع تمام S_{ix} ها است [۱۰، ۱۱]:

$$S_x = \sum_{i=1}^N S_{ix} = \frac{\hbar}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_{ix} \quad (۳)$$

که در آن σ_{ix} مؤلفه x ماتریس های پائولی تأمین اسپین است.

هامیلتونی پیچش تک محوری حول محور x به صورت زیر تعریف می شود [۱۰، ۱۱]:

$$H = \chi S_x^2 \quad (۴)$$

که در آن S_x^2 طبق رابطه (۳) به دست می آید. این هامیلتونی موجب پیچش سامانه حول محور x می شود، که نتیجه آن ایجاد درهم تنیدگی در برخی سامانه های جدایی پذیر است.

حالت اولیه سامانه به صورت زیر تعریف می شود

$$|\psi_{t=0}\rangle = |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle\cdots|\psi_N\rangle \quad (۵)$$

که در آن

$$|\psi_j\rangle = a_j|0\rangle + b_j|1\rangle \quad (۶)$$

۷۰ / بررسی سنجۀ هندسی درهم‌تنیدگی تولیدشده توسط هامیلتونی پیچش تک‌محوری در سامانه‌های اسپینی

که این حالت جدایی‌پذیر است یعنی درهم‌تنیده نیست. عملگر تحول زمانی که $|\psi_{t=0}\rangle$ را به $|\psi_t\rangle$ تبدیل می‌کند، با استفاده از رابطه (۴)، به صورت زیر نوشته می‌شود

$$U = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = e^{-\frac{i\chi S_x^2 t}{\hbar}} \quad (۷)$$

با توجه به رابطه (۳)، مقدار S_x^2 برحسب عملگرهای پائولی برابر است با

$$S_x^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_{1x} + \sigma_{2x} + \dots + \sigma_{Nx})^2 = \frac{\hbar^2}{4} \left(NI + \sum_{l \neq k}^N \sigma_{lx} \sigma_{kx} \right) \quad (۸)$$

با جایگذاری رابطه فوق در رابطه (۷) داریم:

$$U = e^{-i\gamma t NI} e^{-i\gamma t \sum_{l \neq k}^N \sigma_{lx} \sigma_{kx}} \quad (۹)$$

که در آن، عبارت $\frac{\chi \hbar}{4}$ را برابر γ در نظر گرفته‌ایم.

برای محاسبه درهم‌تنیدگی ایجادشده بین اسپین اول و بقیه سامانه، ابتدا مقدار چشمداشتی σ_1 را برای حالت تحول‌یافته به دست می‌آوریم،

$$|\psi_t\rangle = e^{-\frac{i\chi S_x^2 t}{\hbar}} |\psi_{t=0}\rangle \quad (۱۰)$$

$$\langle \sigma_1 \rangle_t = \langle \psi(t) | \sigma_1 | \psi(t) \rangle \quad (۱۱)$$

$$\langle \sigma_{1x} \rangle_t = \langle \psi_1 | \langle \psi_2 | \dots \langle \psi_N | \left(e^{i\gamma N t} e^{2i\gamma t \sigma_{1x}} \left(\sum_{k=1}^N \sigma_{kx} \right) \sigma_{1x} e^{-i\gamma N t} e^{-2i\gamma t \sigma_{1x}} \left(\sum_{k=1}^N \sigma_{kx} \right) \right) | \psi_1 \rangle | \psi_2 \rangle \dots | \psi_N \rangle = \langle \sigma_{1x} \rangle_0 \quad (۱۲)$$

$$\langle \sigma_{1y} \rangle_t = \langle \psi_1 | \langle \psi_2 | \dots \langle \psi_N | \left(e^{i\gamma N t} e^{2i\gamma t \sigma_{1x}} \left(\sum_{k=1}^N \sigma_{kx} \right) \sigma_{1y} e^{-i\gamma N t} e^{-2i\gamma t \sigma_{1x}} \left(\sum_{k=1}^N \sigma_{kx} \right) \right) | \psi_1 \rangle | \psi_2 \rangle \dots | \psi_N \rangle \quad (۱۳)$$

با توجه به آن که عبارت $e^{-i\gamma N t}$ با σ_{1y} جابه‌جایی‌پذیر است، عبارت

$$B = e^{i\gamma N t} e^{2i\gamma t \sigma_{1x}} \left(\sum_{k=1}^N \sigma_{kx} \right) \sigma_{1y} e^{-i\gamma N t} e^{-2i\gamma t \sigma_{1x}} \left(\sum_{k=1}^N \sigma_{kx} \right) \quad (۱۴)$$

به صورت زیر خواهد شد:

$$B = e^{2i\gamma t \sigma_{1z}} \left(\sum_{k=1}^N \sigma_{ky} \right) \sigma_{1y} e^{-2i\gamma t \sigma_{1z}} \left(\sum_{k=1}^N \sigma_{kx} \right) \quad (15)$$

که با کمک لم بیکر-هاسدورف و با توجه به این که توان‌های زوج ماتریس‌های پائولی برابر I و توان‌های فرد آن‌ها برابر خودشان می‌شود، به شکلی ساده‌تر می‌نویسیم

$$B = \sigma_{1y} + 2i\gamma t \sum_{k=1}^N \sigma_{ky} [\sigma_{1z}, \sigma_{1y}] + \frac{\left(2i\gamma t \sum_{k=1}^N \sigma_{ky} \right)^2}{2} [\sigma_{1z}, [\sigma_{1z}, \sigma_{1y}]] \\ + \frac{\left(2i\gamma t \sum_{k=1}^N \sigma_{ky} \right)^3}{6} [\sigma_{1z}, [\sigma_{1z}, [\sigma_{1z}, \sigma_{1y}]]] + \dots \quad (16)$$

$$\Rightarrow B = \sigma_{1y} - 4\gamma t \sigma_{1z} \sum_{k=1}^N \sigma_{ky} - 8\gamma^2 t^2 \left(\sum_{k=1}^N \sigma_{ky} \right)^2 \sigma_{1y} + \frac{64\gamma^3 t^3 \left(\sum_{k=1}^N \sigma_{ky} \right)^3}{6} \sigma_{1z} + \dots \\ = \left(1 - 8\gamma^2 t^2 \left(\sum_{k=1}^N \sigma_{ky} \right)^2 + \dots \right) \sigma_{1y} - \left(4\gamma t \sum_{k=1}^N \sigma_{ky} - \frac{64\gamma^3 t^3 \left(\sum_{k=1}^N \sigma_{ky} \right)^3}{6} + \dots \right) \sigma_{1z} \quad (17)$$

$$\Rightarrow B = \sigma_{1y} \cos \left(4\gamma t \sum_{k=1}^N \sigma_{ky} \right) - \sigma_{1z} \sin \left(4\gamma t \sum_{k=1}^N \sigma_{ky} \right) \quad (18)$$

عبارت‌های $\left(\sum_{k=1}^N \sigma_{kx} \right)^2$ و $\left(\sum_{k=1}^N \sigma_{ky} \right)^3$ و توان‌های بالاتر را برای یک سیستم دو کیوبیتی محاسبه می‌کنیم تا از رابطه (۱۸) مقدار B را به دست آوریم،

$$\left(\sum_{k=1}^N \sigma_{kx} \right)^2 = \sigma_{2x}^2 = I \quad (19)$$

$$\left(\sum_{k=1}^N \sigma_{ky} \right)^3 = \sigma_{2x}^3 = \sigma_{2x} \quad (20)$$

۷۲ / بررسی سنجۀ هندسی درهم‌تنیدگی تولیدشده توسط هامیلتونی پیچش تک‌محوری در سامانه‌های اسپینی

به‌همین ترتیب توان‌های زوج و فرد با I و σ_{2x} برابر می‌شود. بنابراین،

$$\begin{aligned} I &= \sigma_{1y} - 4\gamma t \sigma_{1y} \sigma_{2z} - 8\gamma^2 t^2 \sigma_{1y} + \frac{64\gamma^3 t^3}{6} \sigma_{1y} \sigma_{2z} + \dots = (1 - 8\gamma^2 t^2 + \dots) \sigma_{1y} - \left(4\gamma t - \frac{64\gamma^3 t^3}{6} + \dots \right) \sigma_{1y} \sigma_{2z} \\ \Rightarrow B &= \sigma_{1y} \cos(4\gamma t) - \sigma_{1y} \sigma_{2z} \sin(4\gamma t) \end{aligned} \quad (21)$$

سپس با توجه به روابط (۱۳) و (۱۴) داریم:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{1y} \rangle_t &= \langle \psi_1 | \langle \psi_2 | (\sigma_{1y} \cos(4\gamma t) - \sigma_{1y} \sigma_{2z} \sin(4\gamma t)) | \psi_1 \rangle | \psi_2 \rangle \\ &= \langle \sigma_{1y} \rangle_0 \cos(4\gamma t) - \langle \sigma_{1z} \rangle_0 \langle \sigma_{2z} \rangle_0 \sin(4\gamma t) \end{aligned} \quad (22)$$

هم‌چنین برای محاسبۀ $\langle \sigma_{1z} \rangle_t$ داریم:

$$\langle \sigma_{1z} \rangle_t = \langle \psi_1 | \langle \psi_2 | \left(e^{2i\gamma It} e^{2i\gamma t \sigma_{1y} \sigma_{2z}} \sigma_{1z} e^{-2i\gamma It} e^{-2i\gamma t \sigma_{1y} \sigma_{2z}} \right) | \psi_1 \rangle | \psi_2 \rangle \quad (23)$$

برای محاسبۀ رابطه (۲۳)، با انتخاب عبارت

$$O = e^{2i\gamma t \sigma_{1y} \sigma_{2z}} \sigma_{1z} e^{-2i\gamma t \sigma_{1y} \sigma_{2z}} \quad (24)$$

و استفاده از لِم بیکرهاسدورف داریم:

$$\begin{aligned} O &= \sigma_{1z} + 2i\gamma t \sigma_{2z} [\sigma_{1y}, \sigma_{1z}] + \frac{(2i\gamma t \sigma_{2z})^2}{2} [\sigma_{1y}, [\sigma_{1y}, \sigma_{1z}]] \\ &\quad + \frac{(2i\gamma t \sigma_{2z})^3}{6} [\sigma_{1y}, [\sigma_{1y}, [\sigma_{1y}, \sigma_{1z}]]] + \dots \end{aligned} \quad (25)$$

$$O = \sigma_{1z} + 4\gamma t \sigma_{1y} \sigma_{2z} - 8\gamma^2 t^2 \sigma_{1z} - \frac{64\gamma^3 t^3}{6} \sigma_{1y} \sigma_{2z} + \dots = (1 - 8\gamma^2 t^2 + \dots) \sigma_{1z} + \left(4\gamma t - \frac{64\gamma^3 t^3}{6} + \dots \right) \sigma_{1y} \sigma_{2z}$$

$$\Rightarrow C = \sigma_{1z} \cos(4\gamma t) + \sigma_{1y} \sigma_{2z} \sin(4\gamma t) \quad (26)$$

با جایگذاری (۲۶) در رابطه (۲۳) داریم:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{1z} \rangle_t &= \langle \psi_1 | \langle \psi_2 | (\sigma_{1z} \cos(4\gamma t) + \sigma_{1y} \sigma_{2z} \sin(4\gamma t)) | \psi_1 \rangle | \psi_2 \rangle \\ &= \langle \sigma_{1z} \rangle_0 \cos(4\gamma t) + \langle \sigma_{1y} \rangle_0 \langle \sigma_{2z} \rangle_0 \sin(4\gamma t) \end{aligned} \quad (27)$$

با استفاده از روابط (۱۲)، (۲۲) و (۲۷) خواهیم داشت:

$$\langle \sigma_1 \rangle_t^2 = \langle \sigma_{1x} \rangle_0^2 + (\cos^2(4\gamma t) + \langle \sigma_{2z} \rangle_0^2 \sin^2(4\gamma t)) (\langle \sigma_{1y} \rangle_0^2 + \langle \sigma_{1z} \rangle_0^2) \quad (28)$$

سپس با جایگذاری رابطه بالا در رابطه (۲)، مقدار درهم تنیدگی به شکل زیر به دست می آید،

$$E(t) = \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{\langle \sigma_{1x} \rangle_0^2 + (\cos^2(4\gamma t) + \langle \sigma_{2z} \rangle_0^2 \sin^2(4\gamma t)) (\langle \sigma_{1y} \rangle_0^2 + \langle \sigma_{1z} \rangle_0^2)} \right) \quad (29)$$

با فرض $|\psi_1\rangle = a_1|0\rangle + b_1|1\rangle$ و $|\psi_2\rangle = a_2|0\rangle + b_2|1\rangle$ و حقیقی بودن ضرایب a_1, a_2, b_1 و b_2 رابطه (۲۹) برابر می شود با

$$E(t) = \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{4a_1^2 b_1^2 + (\cos^2(4\gamma t) + 4a_2^2 b_2^2 \sin^2(4\gamma t)) (1 - 4a_1^2 b_1^2)} \right) \quad (30)$$

در شکل (۱) منحنی $E(t)$ در رابطه (۳۰) را برای چند حالت اولیه که در روابط (۳۱)

تا (۳۵) معرفی شده اند، رسم کرده ایم.

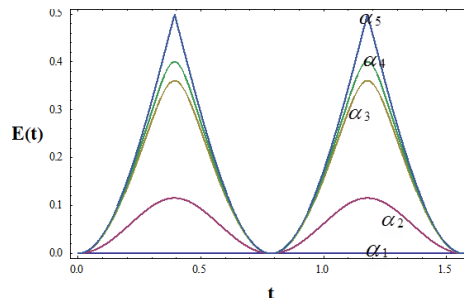
$$\alpha_1: a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, b_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, b_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \gamma = 1 \quad (31)$$

$$\alpha_2: a_1 = \frac{1}{\sqrt{10}}, b_1 = \frac{3}{\sqrt{10}}, a_2 = \frac{1}{\sqrt{10}}, b_2 = \frac{3}{\sqrt{10}}, \gamma = 1 \quad (32)$$

$$\alpha_3: a_1 = \frac{1}{10}, b_1 = \frac{\sqrt{99}}{10}, a_2 = \frac{1}{10}, b_2 = \frac{\sqrt{99}}{10}, \gamma = 1 \quad (33)$$

$$\alpha_4: a_1 = 1, b_1 = 0, a_2 = \frac{1}{10}, b_2 = \frac{\sqrt{99}}{10}, \gamma = 1 \quad (34)$$

$$\alpha_5: a_1 = 1, b_1 = 0, a_2 = 0, b_2 = 1, \gamma = 1 \quad (35)$$



شکل ۱ نمودار تغییرات $E(t)$ برای ۵ حالت معرفی شده در روابط (۳۱) تا (۳۵).

نتایج زیر حاصل می‌شود:

۱. حالتی که در آن $a_1^2 = b_1^2$ یا $a_2^2 = b_2^2$ باشد، به سبب این‌که از ضرب ویژه‌حالت‌های عملگر S_x ساخته شده است، تحت تأثیر هامیلتونی مورد بررسی درهم‌تنیده نخواهد شد.

۲. برای حالت‌های اولیه‌ای که با استفاده از ضرب ویژه‌حالت‌های عملگر S_z ساخته شده‌اند، رابطه (۳۰)، به صورت $E(t) = \frac{1}{2}[1 - \cos(4\gamma t)]$ خواهد شد. یعنی که این حالت‌ها، تحت تأثیر هامیلتونی پیچش تک‌محوری، پس از زمان $t = \frac{\pi}{8\gamma}$ ، به حالت‌های کاملاً درهم‌تنیده بل تبدیل خواهند شد.

اگر ضرایب a_1, a_2, b_1 و b_2 را مختلط در نظر بگیریم، نتیجه ۲ برای حالت‌های اولیه ضربی ساخته شده از عملگر S_y نیز صادق است.

باید ذکر کنیم که در مراجع [۱۲، ۱۳] نیز درهم‌تنیدگی ایجادشده توسط هامیلتونی پیچش دوماحوری در سامانه‌های اسپینی به صورت عددی بررسی شده است و نتایج مشابه به‌دست آمده است.

۴. تأثیر هامیلتونی پیچش تک‌محوری در حضور میدان مغناطیسی

میدان مغناطیسی را در راستای Z در نظر می‌گیریم. هامیلتونی پیچش تک‌محوری در حضور میدان مغناطیسی، به شکل زیر نوشته می‌شود [۱۱]،

$$H' = \chi S_x^2 + BS_z \quad (36)$$

بنابراین عملگر تحول زمانی، به صورت زیر است

$$U = e^{-2i\gamma t \sigma_{1z} \sigma_{2z}} e^{-i\eta t (\sigma_{1z} + \sigma_{2z})} \quad (37)$$

که در آن $\gamma = \frac{\hbar\chi}{4}$ و $\eta = \frac{B}{2}$ است.

مقادیر چشمداشتی مؤلفه‌های اسپین را نسبت به حالت تحول‌یافته با کمک رابطه (۳۷) با روشی مشابه قسمت قبل محاسبه می‌کنیم،

$$\langle \sigma_{1x} \rangle_t = \langle \sigma_{1x} \rangle_0 \cos(2\eta t) - \langle \sigma_{1y} \rangle_0 \sin(2\eta t) \quad (38)$$

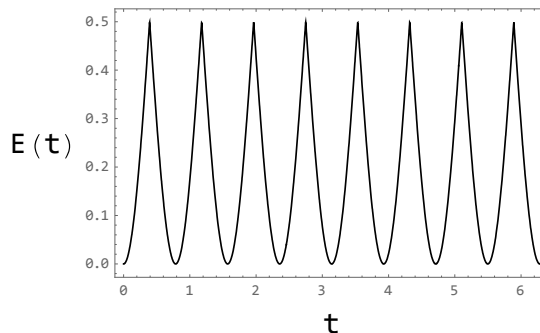
$$\langle \sigma_{1y} \rangle_t = (\langle \sigma_{1y} \rangle_0 \cos(4\gamma t) - \langle \sigma_{2x} \rangle_0 \langle \sigma_{1z} \rangle_0 \sin(4\gamma t)) \times \cos(2\eta t) + \langle \sigma_{1x} \rangle_0 \sin(2\eta t) \quad (39)$$

$$\langle \sigma_{1z} \rangle_t = \langle \sigma_{1z} \rangle_0 \cos(4\gamma t) + \langle \sigma_{1y} \rangle_0 \langle \sigma_{2x} \rangle_0 \sin(4\gamma t) \quad (40)$$

با استفاده از روابط (۳۸) و (۳۹) و (۴۰) مقدار چشمداشتی کیوبیت اول به دست می آید

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1 \rangle_t^2 = & (\langle \sigma_{1x} \rangle_0 \cos(2\eta t) - \langle \sigma_{1y} \rangle_0 \sin(2\eta t))^2 + (\langle \sigma_{1z} \rangle_0 \cos(4\gamma t) + \langle \sigma_{1y} \rangle_0 \langle \sigma_{2x} \rangle_0 \sin(4\gamma t))^2 \\ & + \{ (\langle \sigma_{1y} \rangle_0 \cos(4\gamma t) - \langle \sigma_{2x} \rangle_0 \langle \sigma_{1z} \rangle_0 \sin(4\gamma t)) \cos(2\eta t) + \langle \sigma_{1x} \rangle_0 \sin(2\eta t) \}^2 \end{aligned} \quad (41)$$

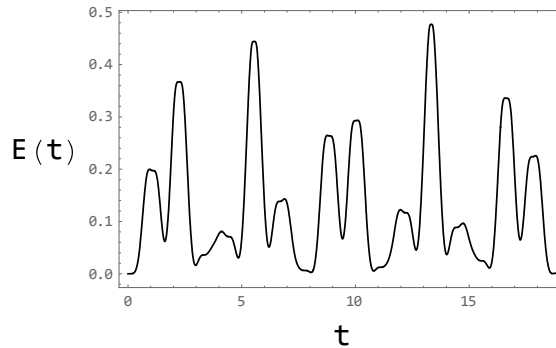
با جایگذاری رابطه بالا در رابطه (۲)، $E(t)$ را محاسبه می کنیم. در شکل (۲) منحنی $E(t)$ را برای حالت اولیه α_5 با فرض $\eta = 1$ رسم کرده ایم.



شکل ۲ نمودار تغییرات $E(t)$ با فرض $\eta = 1$ برای حالت α_5 .

همان طور که مشاهده می شود، نمودار شکل (۲) هیچ تفاوتی با نمودار α_5 شکل (۱) ندارد، زیرا حالت α_5 از ضرب ویژه حالت های عملگر S_z ساخته شده است. بنابراین اعمال میدان مغناطیسی در راستای Z تأثیری در ایجاد درهم تنیدگی ندارد. به علاوه، می بینیم که مقدار درهم تنیدگی با گذشت زمان رفتار نوسانی دارد و سامانه همیشه درهم تنیده است، مگر در بعضی نقاط گسسته که در آن ها مقدار درهم تنیدگی صفر می شود.

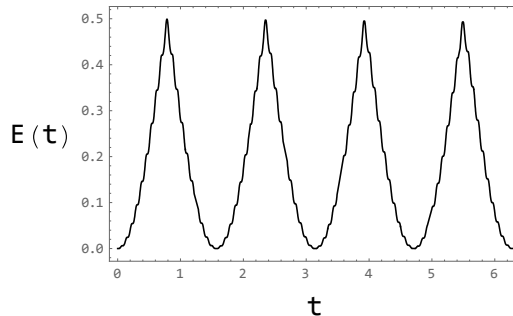
در شکل (۳) منحنی $E(t)$ را برای حالت اولیه α_1 ؛ که از ضرب ویژه‌حالت‌های عملگر S_x ساخته شده‌است، با فرض $\eta = 1$ رسم کرده‌ایم.



شکل ۳ نمودار تغییرات $E(t)$ با فرض $\eta = 1$ برای حالت α_1 .

شکل (۳) نشان می‌دهد که حضور میدان مغناطیسی باعث ایجاد درهم‌تنیدگی در این حالت شده‌است درحالی‌که مطابق شکل (۱) هامیلتونی پیچش تک‌محوری در غیاب میدان مغناطیسی، هیچ درهم‌تنیدگی در این حالت ایجاد نمی‌کند. هم‌چنین نمودار نشان می‌دهد که سامانه در حضور مقادیر کوچک میدان مغناطیسی، همیشه درهم‌تنیده‌است.

شکل (۴) نشان می‌دهد که با افزایش شدت میدان مغناطیسی، منحنی درهم‌تنیدگی نوسانی خواهد شد، طوری‌که در بازه‌های زمانی یکسان، درهم‌تنیدگی بیشینه می‌شود. نمودارها نشان می‌دهد که افزایش میدان مغناطیسی باعث افزایش بسامد ایجاد درهم‌تنیدگی می‌شود اما بیشینه درهم‌تنیدگی را کاهش می‌دهد.



شکل ۴ نمودار تغییرات $E(t)$ با فرض $\eta = 20$ برای حالت α_1 .

از آن‌جا که اعمال میدان مغناطیسی در راستای Z سبب چرخش حالت، حول محور Z می‌شود، مقدار چشمداشتی اسپین را بین راستاهای x و y با فرکانسی برابر با 2η تغییر می‌دهد، بنابراین

حالت اولیه‌ای که از ضرب ویژه حالت‌های عملگرهای S_x یا S_y ساخته شده است، توسط هامیلتونی پیچش تک‌محوری در حضور میدان مغناطیسی درهم‌تنیده می‌شود.

۵. بحث و نتیجه‌گیری

در این مقاله سنجه هندسی درهم‌تنیدگی را در سامانه‌های کیوبیتی با استفاده از مقادیر چشمداشتی اسپین مطالعه کردیم. با استفاده از این روش، دینامیک درهم‌تنیدگی حالت‌های جدایی‌پذیر را تحت تأثیر هامیلتونی پیچش تک‌محوری در غیاب و حضور میدان مغناطیسی خارجی در راستای Z بررسی کردیم. بدین ترتیب، توانستیم عبارت دقیقی برای سنجه هندسی بدون محاسبه حالت سامانه در حال تحول، با محاسبه مقادیر چشمداشتی اسپین به دست آوریم.

بررسی نمودارهای $E(t)$ نشان می‌دهد که تابع درهم‌تنیدگی یک تابع تناوبی است که بین صفر و یک مقدار بیشینه که به حالت اولیه بستگی دارد نوسان می‌کند. هامیلتونی پیچش تک‌محوری، بیشترین درهم‌تنیدگی را در حالت‌های اولیه‌ای که از ضرب تانسوری ویژه حالت‌های S_z یا S_y ساخته می‌شود، به وجود می‌آورد. کمترین درهم‌تنیدگی مربوط به حالت‌های اولیه‌ای است که حداقل یکی از کیوبیت‌های آن‌ها، ویژه حالت S_x باشد.

اثر هامیلتونی در حضور میدان مغناطیسی نیز با استفاده از سنجه هندسی محاسبه شد. مشاهده کردیم که حالت‌هایی که از ضرب ویژه حالت‌های S_x ساخته شده است، در حضور میدان مغناطیسی خارجی در راستای Z ، درهم‌تنیده می‌شود. هم‌چنین در همه حالت‌ها، افزایش میدان مغناطیسی خارجی باعث افزایش بسامد تابع $E(t)$ می‌شود.

۶. تقدیر و تشکر

این تحقیق توسط دانشگاه شهید چمران اهواز، ایران [GN: SCU.SP98.12469] پشتیبانی شد.

منابع

- [1] Sarkar D., "On measures of quantum entanglement", Int. J. Quantum Inf, 14 Issue 06, 1640024 (2016).
- [2] Naji A., Hamzeofi R. and Afshar D., "Entanglement teleportation via two qubits Heisenberg interaction in Jaynes-Cummings model under intrinsic decoherence", Iranian J. Phys. Res. 19, 03, 59-62 (2019).
- [3] Liu X. S., Long G. L., Tong D. M. and Li F., "General scheme for super dense coding between multi-parties", Phys. Rev. A 65, 022304-07 (2002).

- [4] Peres A., "Separability criterion for density matrices", *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1413-1415 (1996).
- [5] Hollands S. and Sanders K., "Entanglement measure and their properties in quantum field theory", arXiv:1702.04924 quant-ph (2017).
- [6] Shimony A., "Degree of entanglement", *Ann. N. Y. Acad. Sci.* **755**, 675-679 (1995).
- [7] Frydryszak A. M. and Tkachuk V. M., "Geometric measure of entanglement for pure states and mean value of spin", arXiv:1211.6472 quant-ph.
- [8] Wei T. C. and Goldbart P. M., "Geometric measure of entanglement and applications to bipartite and multipartite quantum states", *Phys. Rev. A* **68**, 042307-20 (2003).
- [9] Tamaryan L., Park D. K. and Tamaryan S., "Analytic expressions for geometric measure of three qubit states", *Phys. Rev. A* **77**, 022325-30 (2008).
- [10] Kitagawa M. and Ueda M., "Squeezed spin states", *Phys. Rev. A* **47**(6), 5138-5143 (1993).
- [11] Wang X. and Sanders B. C., "Spin squeezing and pairwise entanglement for symmetric multiqubit states", *Phys. Rev. A* **68**, 012101-6 (2003).
- [12] Jafarpour M. and Akhound A., "Entanglement and squeezing of multi-qubit systems using a two-axis counter-twisting Hamiltonian with an external field", *Phys. Lett. A* **372**, 2374-2379 (2008).
- [13] Naji A. and Jafarpour M., "Squeezing and entanglement in multi-qutrit systems", *Quant. Info. Process.* **12**, 2917-2933 (2013).

Research Paper

Study of Geometric Measure of Entanglement Produced by One-axis Counter Twisting Hamiltonian in Spin Systems¹

Azita Naji*², Mahmood Zeheiry³ and Mehrzad Ashrafpour⁴

Received: 2020.11.23

Revised: 2021.01.23

Accepted: 2021.04.04

Abstract

Generation of entanglement in separable two qubits states using the one-axis counter twisting Hamiltonian in the presence/absence of a magnetic field is studied by introducing the geometric measure of entanglement. The exact expression for the geometric measure is obtained without calculating the time evolution of the system state using the method of the expectation values of spin. The graphs of this measure as a function of time are plotted. The results show that in order to obtain the maximum entanglement under the influence of one-axis counter twisting Hamiltonian around x axis in absence of magnetic field, the system initially must be in a tensor product of S_z or S_y eigenstates. Also, the system initially in the S_x eigenstates under the influence of one-axis counter twisting Hamiltonian around x axis in absence of a magnetic field is not entangled, but, under the influence of one-axis counter twisting Hamiltonian around x axis in presence of a magnetic field in z direction the entanglement for this state becomes maximum. For all states, the frequency of entanglement is an increasing function of the magnetic field.

Keywords: *Entanglement, Geometric Measure, One-axis Counter Twisting Hamiltonian, Mean Value of Spin.*

¹ - DOI: [10.22051/ijap.2021.34065.1179](https://doi.org/10.22051/ijap.2021.34065.1179)

² - Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. (Corresponding Author). Email: az.naji56@gmail.com

³ - M. Sc. in Physics, Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. Email: zeheiry.m@gmail.com

⁴ - Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. Email: mehrzadashrafpour@yahoo.com

Research Paper

Effect of Deposition Condition and Method on Physical Properties of MAPbI₃ Layers for Perovskite Solar Cell Purpose¹

Nafiseh Memarian^{2*} and Reza Rajab Bolookat³

Received:2020.12.29

Revised:2021.01.30

Accepted:2021.04.04

Abstract

In recent years, solar cells with perovskite absorber have attracted considerable attention due to rapid increase in their efficiency. In this research, MAPbI₃ layers were coated by a two-step method. Spin-spin and spin-dip methods were studied and physical properties of prepared layers were compared. Their optical and structural properties were investigated by UV-VIS, XRD and FE-SEM techniques. The results of structural analysis showed the formation of cubic phase for MAPbI₃ perovskite. In addition, the surface morphology of the layers was determined by FE-SEM images, which confirmed the formation of a uniform and cohesive layer, without any cracks or discontinuities on the surface of layer. Results showed that the optical band gap of the samples are in the range of 1.54-1.59 eV. Furthermore, the effect of precursor concentration on the physical properties of MAPbI₃ layers prepared by both methods (spin-spin and spin-dip) was also investigated. The results showed that in both methods, with increasing PbI₂ concentration, thicker layers with higher adsorption can be prepared.

Key words: *Perovskite Absorber, Methylammonium Lead Iodide, Thin Film, Spin Coating, Dip Coating.*

¹ - DOI: [10.22051/ijap.2021.34610.1191](https://doi.org/10.22051/ijap.2021.34610.1191)

²- Assistant Professor, Faculty of Physics, Semnan University, Semnan, Iran. (Corresponding Author). Email: n.memarian@semnan.ac.ir.

³ - M.Sc. in Physics, Faculty of Physics, Semnan University, Semnan, Iran. Email: r.bolookat@gmail.com

Investigation of Phase-mixing Phenomenon in Presence of Homogeneous and Inhomogeneous Magnetic Fields in the Ultra-short Laser Pulse Interaction with Plasma Using 2D PIC Simulation¹

Ameneh Kargarian²

Received: 2021.01.29

Revised: 2021.03.26

Accepted: 2021.04.14

Abstract

Investigation of plasma heating is of crucial importance because of its extensive applications including plasma preheating in inertial confinement fusion and magnetic confinement fusion. By propagation of a high-power ultra-short laser pulse through the underdense plasma, the plasma wave is excited in the longitudinal direction behind the laser pulse due to the laser pondermotive force. The laser energy is transferred to the plasma environment via the laser plasma interaction with the particles, so leading to plasma heating. By increasing the laser intensity or plasma density, the wave-breaking phenomenon occurs. The maximum plasma heating occurs in the wave-breaking amplitude. In this paper, the effects of applying a homogenous magnetic field on the plasma wave excited by the propagation of high-power ultra-short laser pulse in the plasma in the amplitudes below the wave-breaking amplitude is investigated, using the 2D PIC simulation method. The results show that the application of this field causes the excited wave to distort and break due to the phase-mixing phenomenon. Moreover, the simulation results show that by applying an inhomogeneous magnetic field, the wave-breaking effects appear sooner than the homogenous one. Therefore, in the moderate laser intensities and low plasma densities, it is possible to gain the maximum heating of plasma by applying the homogenous and inhomogeneous magnetic fields.

Keywords: *Phase-mixing Phenomenon, Inhomogeneous Magnetic Field, Plasma Heating.*

¹ - DOI: [10.22051/ijap.2021.34954.1194](https://doi.org/10.22051/ijap.2021.34954.1194)

² - Assistant Professor, Plasma and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, 14399-51113, Tehran, Iran. Email: akargarian@aeoi.org.ir.

Research Paper

Synthesis and Investigation of Electrical and Magnetic Properties of Ag/Hf₃NiO_y Nanocomposites¹

Reza Gholipur²

Received:2020.12.12

Revised:2021.01.05

Accepted:2021.04.04

Abstract

In this research, the electric, magnetic and structural behaviors of the Ag/Hf₃NiO_y nanostructures fabricated using the co-precipitation technique were studied. Since, the fabrication of ordered metallic structure arrays is habitually complex, the mass production of these structures is being prevented. In recent years, researchers have begun to explore materials with inherent DNG property. Metamaterials allow both field components of light to couple to meta-atoms and thus they enable entirely new optical properties and exciting applications. Ag/Hf₃NiO_y disordered percolative composites contain conductive nanoparticles. When the concentration of metal nanoparticles in semi-continuous composites is less than the percolation threshold, the real part of the dielectric constant is positive. Also, the permeability constants can be controlled by silver content, meaning that this parameter is adjustable. Interestingly, decreased permeability was observed in samples with higher silver content. When the silver content exceeded the percolation threshold, silver networks were formed due to the interconnection of silver nanoparticles. The effective magnetic properties were due to the magnetic resonance and eddy current of the samples with an external magnetic field. The plasma oscillations of conduction electrons in the samples at a metallic state led to the negative permittivity.

Keywords: *Metamaterial, Nanocomposite, Ag/Hf₃NiO_y, Permittivity and Permeability.*

¹ - DOI: 10.22051/ijap.2021.34347.1184

² - Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Razi University, Kermanshah, Iran. Email: r.gholipur@razi.ac.ir

Review Paper

Quantum Information and Computation with Rydberg Atoms¹

Mohammadsadegh Khazali²

Received:2020.12.22

Revised:2021.03.07

Accepted:2021.04.04

Abstract

Highly excited Rydberg atoms are providing strong and controllable atomic interactions ideal for quantum technology with neutral atoms and photons. In this review article, the significant properties of Rydberg atoms and their scaling with principal numbers are discussed in detail. In addition, the application of laser-excited Rydberg atoms in neutral atom quantum computation is reviewed. This review article discusses, also, the application of Rydberg polaritons in quantum optics devices including single-photon sources, photonic gates, and transistors.

Keywords: *Rydberg Atoms, Quantum Information, Quantum Computation.*

¹ - DOI: 10.22051/ijap.2021.34445.1188

² - Institute for Quantum Optics and Quantum Information of the Austrian Academy of Sciences, Innsbruck, Austria, Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran, Iran. Email: mskhazali@yahoo.com

Research Paper

Optimization of Trace Metals' Detection Device Using Monte Carlo Simulation¹

Ehsan Taghizadeh Tousi²

Received:2020.12.21

Revised:2021.02.02

Accepted:2021.04.04

Abstract

In this study, a fluorescence X-ray spectroscopy system was designed by the Solidworks computer code to detect and measure trace metals. Then, the designed device was simulated and developed by the Monte Carlo method in MCNPX software. The most excellent performance of the trace element detection system was respectively found at 3 cm and 30 cm for source-to-sample distance (SSD) and source-to-detector distance (SDD), respectively. According to the results of different runs of the simulation code, the largest intensity of absorbed X-ray by the detector was obtained for the collimator's diameter of 3 mm. In addition, the absence of lead shielding around the surrounding metal walls of the detector, even with the use of a lead collimator at the entrance of the detector window, increases the entrance of background beams to the detector and so, it will cause the reduction of spectroscopic accuracy in detecting trace elements. The least amounts of concentration for detecting arsenic, lead, mercury, zinc, copper, and iron were calculated as 0.17 mg/kg, 0.40, 18.40, 20.00, 146.00, and 266.67 mg/kg, respectively. Due to the concentration and level of pollution of these elements, the rare metal detection device designed for research and educational samples, especially in environmental and agricultural samples, will be extremely practical and useful.

Keywords: *Intensity of X-ray, Minimum Detection Limit, Monte Carlo, Trace Metals.*

¹ - DOI: [10.22051/ijap.2021.34487.1187](https://doi.org/10.22051/ijap.2021.34487.1187)

² - Assistant Professor, Department of Industrial and Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, University of Torbat Heydariyeh, Torbat Heydariyeh, Khorasan Razavi, Iran. Email: e.taghizadeh@torbath.ac.ir

Contents

Optimization of Trace Metals' Detection Device Using Monte Carlo Simulation <i>Ehsan Taghizadeh Tousi</i>	5 - 18
Quantum Information and Computation with Rydberg Atoms <i>Mohammadsadegh Khazali</i>	19 - 32
Synthesis and Investigation of Electrical and Magnetic Properties of Ag/Hf₃NiO_y Nanocomposites <i>Reza Gholipur</i>	33 - 43
Investigation of Phase-mixing Phenomenon in Presence of Homogeneous and Inhomogeneous Magnetic Fields in the Ultra-short Laser Pulse Interaction with Plasma Using 2D PIC Simulation <i>Ameneh Kargarian</i>	45 - 54
Effect of Deposition Condition and Method on Physical Properties of MAPbI₃ Layers for Perovskite Solar Cell Purpose <i>Nafiseh Memarian and Reza Rajab Bolookat</i>	55 - 66
Study of Geometric Measure of Entanglement Produced by One-axis Counter Twisting Hamiltonian in Spin Systems <i>Azita Naji, Mahmood Zeheiry and Mehrzad Ashrafpour</i>	67 - 78
Abstracts of Papers in English	79 - 84

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

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

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 Nazanin font/size 12 pt.
3. The title of the article should be inserted with a Bold B Nazanin font/ size 16 pt and the names of the authors of the article with a B Nazanin font/size 12 pt.
4. The English abstract should be prepared with Times New Roman font/ size pt12.
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.

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.



IRANIAN JOURNAL OF APPLIED PHYSICS

Volume 10, Serial No. 23, Quarterly, Winter 2021

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 Boards

D. Dorrnian, *Plasma Physics, Professor, Islamic Azad University*

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

A. Kohian, *Physics of Laser, Associate Professor, Tehran 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*

A. 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. Amirikhah

Editor: M.B. Fathi, *Kharazmi University*

Printing and Binding: Fargahi Publication

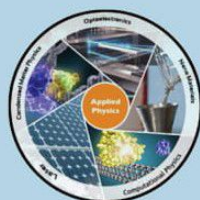
Publication Frequency: Quarterly

Circulation: 10 copies

Price: 6000 Rls

Address: Alzahra University - Vice Chancellery for Research, Vanak Sq.,
Tehran, 1993893973, Iran.
email: aujap@alzahra.ac.ir

ISSN 2783-1043
E-ISSN 2783-1051



IRANIAN JOURNAL OF APPLIED PHYSICS

Volume 10 / Serial No. 23 / Quarterly / Winter 2021

Optimization of Trace Metals' Detection Device Using Monte Carlo Simulation <i>Ehsan Taghizadeh Tousi</i>	5 - 18
Quantum Information and Computation with Rydberg Atoms <i>Mohammadsadegh Khazali</i>	19 - 32
Synthesis and Investigation of Electrical and Magnetic Properties of Ag/Hf₃NiOy Nanocomposites <i>Reza Gholipur</i>	33 - 43
Investigation of Phase-mixing Phenomenon in Presence of Homogeneous and Inhomogeneous Magnetic Fields in the Ultra-short Laser Pulse Interaction with Plasma Using 2D PIC Simulation <i>Ameneh Kargarian</i>	45 - 54
Effect of Deposition Condition and Method on Physical Properties of MAPbI₃ Layers for Perovskite Solar Cell Purpose <i>Nafiseh Memarian and Reza Rajab Bolookat</i>	55 - 66
Study of Geometric Measure of Entanglement Produced by One-axis Counter Twisting Hamiltonian in Spin Systems <i>Azita Naji, Mahmood Zeheiry and Mehrzad Ashrafpour</i>	67 - 78
Abstracts of Papers in English	79 - 84