وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه
گاوازنگ، زنجان

مقاله نامه

سی امین گردهمایی سالانه فیزیک ماده چگال

دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

۷ تا ۹ خرداد ۱۴۰۴

فهرست مقاله‌ها

استخراج امضای مغناطیسی یک مدل زیرسطحی ۱

تأثیر درجهٔ رأس بر دینامیک کاوش و تقلید در شبکه‌های پیچیده ۷

جاذب-لیزرزایی کامل همدوس در یک شبکه ی موجبری اپتیکی دو ماده‌ای دنباله اکتوناچی مرتبه هشتم دارای تقارن پاریته-زمان ۱۲

گذارفاز دینامیکی در یک مدل ساده از حرکت باکتری ۱۷

مطالعه ابتدا به ساکن خواص ترمودینامیکی و الکترونی ترکیب نیمه‌هوسلر CoVSb بر پایه نظریه تابعی چگالی و مدل‌های فونونی ۲۲

مدلسازی ساختار بلوری و پاسخ اپتیکی ترکیب CoVSb با استفاده از تقریب‌های تبادل- همبستگی GGA وmBJ ۲۷

بررسی تاثیر دوپینگ فسفر بر خواص اپتیکی وساختاری لایه های نازک دی سولفید تنگستن سنتز شده به روش رسوب دهی بخار شیمیایی ۳۲

بهبود خواص اپتوالکترونیکی در لایه‌های پروسکایتی با استفاده از لایه‌های پوششی دوبعدی ۳۷

گذار جایگزیدگی و پدیده های توپولوژیک در مدل اوبری-آندره ٤۲

اثر میان لایه آلومینا به عنوان واسطه نوسانی در رسانش گرمایی فصل مشترک کاتد و جدا کننده در باتری‌های لیتیومی ٤۷

همگامی سازوار و انفجاری در شبکه‌های پیچیده ۵۳

بررسی موازنه بودن سامانه‌های نورونی با نورون‌های تحریکی و مهاری ۵۸

تحلیل ویژگی‌های مؤثر در خوشه‌بندی مواد آنتی‌فرومغناطیس با رویکرد یادگیری ماشین ٦۳

اثر متقابل انتشار بیماری و پیدایش همکاری در اجتماع ۶۸

خواص مغناطو- ساختاری در آلیاژ هویسلر مستقیم Ni2PrBi ۷۳

اثر ناخالصی روی ترابرد اسپینی سیم ابرشبه‌هلیکال ۷۸

نگاشت مدل تپه های شنی BTW به شبکه پیچیده و تحلیل ویژگی‌های آن ۸۳

اثر انحنای شش گوشی بر تابع دی الکتریک عایق توپولوژیک ۸۸

انتقال حالت‌های کوانتومی در زنجیره‌های توپولوژیک با جفتشدگی‌های اسپین- مدار ۹۳

اثر تابش لیزر بر روی رشد جوانه در سلول‌های مخمر نان ۹۸

مقایسه‌ی آموزش شبکه عصبی همگشتی کوانتوم-کلاسیکی و شبکه عصبی کلاسیک در پیشبینی مغناطش سیستم اسپینی بلندبرد تصادفی ۱۰۳

تأثیر دسته‌شدن گونه‌های مهاجر بر دقت مسیریابی ۱۰۸

همگرایی سری چندقطبی برهم‌کنش کازیمیر بین کلوییدهای واقع در فصل مشترک سیال ۱۱۳

مطالعه‌ی امواج مغز با رویکرد مدل‌های انتشار بیماری در شبکه‌های مهاری ۱۱۸

تحلیل آکوستیک جریان آشفته حول سیلندر ۱۲۶

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اثر پوشش گرافنی بر کاهش آسیب‌های کاویتاسیون بر سطح فلزی ۱۳۱

مطالعه حالت پایه مدل زنجیره ای اسپین-XX۱/۲ با برهم‌کنش سه اسپینی ناهمسانگرد ۱۳۶

شناسایی نقاط گذار همگامی با استفاده از شبکه‌های عصبی عمیق ۱۴۱

تأثیر بازآرایی آنتی‌هب بر همگامی شبکه‌ی نوسانگرهای کوراموتو مرتبه دوم ۱۴۶

مطالعه گذار جهت‌بندی در سامانه‌های پیچیده: مدل تپه‌های شنی نوسانی ۱۵۱

بررسی حرکت سلول‌های کلامیدوموناس در میکرولوله‌های موئین تحت تابش با نور قطبیده ۱۵۶

نقض پاریته و دینامیک غیرتعادلی در ظهور دستیدگی حیات ۱۶۳

پیشبینی مبتنی بر یادگیری ماشین زبری سطح در نهشت دانهای با استفاده از ResNet ۱۶۹

کاهش بعد فضای مارکف فرایند موران در شبکه‌های دوبخشی ۱۷۶

نگاشت مدل حرکت تصادفی SLE به شبکه پیچیده و تحلیل ویژگیهای آن ۱۸۲

فرکانس طبیعی پایه در ارتعاشات عرضی B-DNA: شبیه سازی دینامیک مولکولی تحت شرایط فیزیولوژیکی ۱۸۷

نظریه بس‌ذره‌ای کوانتمی برای فرمیون‌ها و بوزون‌های q-دگرگون ۱۹۲

اثر نانوحفره‌ها بر انتقال حرارت گذرا در کانال ترانزیستور دوبعدی ایندیم سلنید ۱۹۷

شبیه‌سازی مدل کیتائف-ککوله بر روی شبکه مربعی-شش‌ضلعی-دوازده‌ضلعی با استفاده از شبکه‌های تانسوری ۲۰۱

مطالعه ترشوندگی سطوح آلوتروپ های فسفرن با قطره آب به روش دینامیک مولکولی ۲۰۶

مدل سازی و بررسی اثر افزودن یال بر فاصله میانگین در شبکه‌های دولایه حمل‌ونقل زمینی و هوایی ۲۱۱

استفاده از فرایند مارکوف برای بررسی تأثیر گروه‌های زن و مرد در جذب مشتریان جدید ۲۱۶

وابستگی ولتاژ های ورودی بر دینامیک جمعی نوریستور های گرمایی ۲۲۱

توسعه روش‌های دستکاری نوری با استفاده از توری چنگالی و باریکه‌های لاگر-گاوسی ۲۲۶

تأثیر انواع انعطاف پذیری بر تجمع دو ماکرومولکول پلیمری ۲۳۲

مایعِ ناهم‌تنیده‌یِ کوانتومیِ وارونه در نردبان اسپینی دو پا ۲۳۷

هندسه ترمودینامیکی دو اسپین کوپل‌شده از طریق همیلتونی‌های مختلف ایزینگ ۲۴۲

سیمای فاز توپولوژیک در سامانه هیبریدی مبتنی بر ابررسانای آهن‌پایه: رهیافت محاسبه عدد چرن در فضای حقیقی ۲۴۸

پذیرفتاری دینامیکی زنجیره سو-شریفر-هیگر: اثرات برهمکنش بلندبرد ۲۵۴

خواص ترموالکتریک شیشه‌های اسپینی فلزی ۲۶۰

تجزیه و تحلیل حالتهای الکترونی و توپولوژیک چارچوبهای آلی-فلزی دوبعدی بر پایه‌ی نیکل ۲۶۶

مطالعه اثردما بر دینامیک رمبش یک رشته پلیمر با استفاده از شبیه سازی دینامیک لانژوین ۲۷۲

بررسی تأثیر زمان لایه‌نشانی و عملیات حرارتی بر خواص الکتروشیمیایی الکترود اکسی‌هیدروکسید نیکل ۲۷۷

بررسی تجربی و عددی نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای تابش صوتی ۲۸۲

سازوکار کیبل-زورک در حضور نویز با رهیافت طیف توان ۲۸۷

تحول زمانی همدوسی کوانتومی اتم سه‌ترازه نوع-Λ داخل کاواک اتلافی ۲۹۲

ظرفیت کوانتومی، رفتار الکتریکی و مغناطیسی M_2XO_2 تحت کرنش برای ابرخازن‌های نسل جدید و کاربردهای فتوولتائیک کارآمد: یک مطالعهٔ DFT ۲۹۷

اثر فلزات واسطه آلاییدهشده در آهن هیدروکسید دولایه با میان‌لایه آب ۳۰۲

ارزیابی تأثیر کرنش بر عملکردحرارتی InSe بااستفاده از شبیه‌سازی مونته‌کارلومعادله انتقال بولتزمن ۳۰۸

بررسی قابلیت اطمینان ترانزیستورهای نسل جدید $ThSi_2N_4$ ۳۱۳

تاثیر تقارن‌های وارونی مکانی و زمانی بر روی برهمکنش RKKY درلایه نازک شبه فلزات وایل ۳۱۸

بررسی نظریه تابعی چگالی کمپلکس نانولوله بورون نیترید به منظور استفاده در درمان سرطان ۳۲۳

بررسی پایداری حرارتی نانوساختار(PhhGraphene) با استفاده از رویکرد دینامیک مولکولی ۳۲۷

بررسی اثر CNT بر روی رسانندگی لایه ابررسانا YBCO ساخته شده روی زیرلایه نقره **۳۳۳**

مدل کوراموتو مرتبه اول با اعمال نیروی میخکوبی و نوفه در شبکه جهان کوچک واتس استروگاتس **۳۳۹**

فهرست سخنرانی‌ها

انتقال حالت‌های کوانتومی در زنجیره‌های توپولوژیک با جفتشدگیهای اسپین- مدار (عارفه خوشخو) ۳۴۵

بررسی تاثیر دوپینگ فسفر بر خواص اپتیکی وساختاری لایه های نازک دی سولفید تنگستن سنتز شده به روش رسوب دهی بخار شیمیایی (الهام رحمانی) ۳۴۶

اثر متقابل انتشار بیماری و پیدایش همکاری در اجتماع (مهران نوری)..... ۳۴۷

نگاشت مدل تپه های شنی BTW به شبکه پیچیده و تحلیل ویژگی‌های آن (عباس شجاع)..... ۳۴۸

بررسی حرکت سلول‌های کلامیدوموناس در میکرولوله‌های موئین تحت تابش با نور قطبیده (سعیده موسی‌الرضایی)۳۴۹

سازوکار کیبل-زورک در حضور نویز با رهیافت طیف توان (عبدالله لنگری) ۳۵۰

پراکندگی الکترون‌ها از خوشه نقاط کوانتومی (میرفائز میری)..... ۳۵۱

کاربرد اثر مگنتوکالری در خنک سازی در دماهای فوق پایین (سید ایمان میرزایی) ۳۵۲

بازآرایی مغز از طریق شکل‌پذیری: بررسی سازوکارهای بنیادی و مداخلات عصبی (مجتبی مددی اصل) ۳۵۳

مواد دوبعدی؛ راه‌حلی نوین برای برداشت انرژی و بهینه‌سازی مدیریت حرارتی (زهرا شمالی) ۳۵۵

ویژگی‌های توپولوژیکی شبکه‌های دوپارش شده با ابعاد پایین (میروحید حسینی)..... ۳۵۷

سردسازی القایی مایکروویو در نقاط کوانتومی دوگانه: کاهش نویز حرارتی اطراف کیوبیت‌های اسپینی (جهانفر ابویی) ۳۵۸

بهینه سازی با یک الگوریتم تقویت شده ی کوانتومی (ابوالفضل رمضان‌پور)..... **۳٦۰**

مطالعه عوامل موثر بر دقت اندازه‌گیری فاز در حضور اتلاف با استفاده از مدار کوانتومی (شاهپور سعیدیان)..... **۳٦۱**

همگامی نوسانگرهای فاز چرخدار در مدل کوراموتوی مرتبه‌ی دو (فرهاد شهبازی)..... **۳٦۳**

استخراج امضای مغناطیسی یک مدل زیرسطحی

اسلامی فر، رضا[۱]؛ صفی خانی، محسن[۱]؛ مظفری، مرتضی[۱]

۱دانشکده فیزیک دانشگاه اصفهان ،اصفهان

چکیده

یکی از راه‌های شناسایی شناورها، آشفتگی مغناطیسی ایجاد شده توسط آن‌ها در میدان مغناطیسی زمین است. برای کاهش امضای مغناطیسی شناورها از روش‌های مغناطیس زدایی دی‌پرمینگ و دی‌گاوسینگ بهره می‌گیرند. برای بهینه کردن روش‌های مغناطیس زدایی استخراج امضای مغناطیسی شناورها اهمیت ویژه‌ای دارد. در این پژوهش یک استوانه فولادی به عنوان مدل زیرسطحی انتخاب و به کمک روش المان محدود امضای مغناطیسی ناشی از مغناطش القایی آن استخراج شد. هم‌چنین برای اعتبارسنجی نتایج به دست آمده از شبیه سازی، به کمک شبیه ساز میدان مغناطیسی زمین و آرایه‌ای از سنسورهای مغناطیسی، مولفه‌های امضای مغناطیسی ناشی از مغناطش القایی استوانه فولادی اندازه‌گیری شد. نتایج شبیه سازی و اندازه‌گیری تطابق آن‌ها را نشان داد.

واژه های کلیدی: *امضای مغناطیسی، مغناطش القایی، مغناطش دائم، دی‌پرمینگ، دی‌گاوسینگ.*

Extracting Magnetic Signature of a Submarine Model

Eslamifar, Reza[1]; Safikhani, Mohsen[1]; Mozaffari, Morteza[1]

1 Department of Physics, University of Isfahan, Isfahan.

Abstract

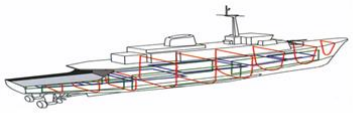
One method of detecting naval vessels is through the magnetic anomaly they create in the Earth's magnetic field. To reduce the magnetic signature of vessels, demagnetization methods such as deperming and degaussing are employed. Extracting the magnetic signature of vessels is of particular importance for optimizing demagnetization methods. In this research, a steel cylinder was selected as a submarine model, and its magnetic signature due to induced magnetization was extracted using the finite element method. Additionally, to validate the obtained simulation results, the components of the magnetic signature due to the induced magnetization of the steel cylinder were measured using an Earth's magnetic field simulator and an array of magnetic sensors. The simulation results and measurements demonstrated their consistency.

***Keywords**: Magnetic signature, Induced magnetization, Permanent magnetization, Deperming, Degauss*

مقدمه

شناورهای دریایی معمولا از مواد فرومغناطیس ساخته می‌شوند. مغناطشی در این شناورها به دلیل تنش‌های باقی‌مانده مکانیکی به هنگام ساخت باقی می‌ماند. از آن‌جا که مین‌های مغناطیسی میدان مغناطیسی مزاحم در میدان مغناطیسی زمین را شناسایی می‌کنند، پس لازم است این شناورها وامغناطیده شوند[۱]. یکی از راه‌کارهای کاهش این مغناطش در شناورها و زیرسطحی‌ها وامغناطیده کردن است که به آن درمان مغناطیسی نیز گفته می شود(۱). دو روش مهم برای وامغناطیده کردن شناورها وجود دارد که عبارتند از: دی‌پرمینگ[۱] و دی‌گاوسینگ[۲][۲]. در فرآیند دی‌پرمینگ مغناطش دائمی حاصل از تنش‌های مکانیکی و فرآیند ساخت شناور زدوده می‌شود، که یک روش غیرفعال[۳] است[۲]. پس از فرآیند دی‌پرمینگ یک شناور و با گذشت زمان، میدان مغناطیسی زمین باعث ایجاد یک مغناطش القایی اندک در بدنه شناور می‌شود که با کمک سیم‌پیچ‌هایی درون شناور این مغناطش القایی زدوده می‌شود. به این روش دی‌گاوسینگ گویند که در دسته‌ی روش‌های فعال[۴] قرار می‌گیرد[۳]. شکل ۱ چگونگی انجام فرآیندهای دی پرمینگ و دی‌گاوسینگ را روی شناورها نشان می‌دهد[۳].

(الف)



(ب)

شکل ۱: فرایندهای الف) دی‌پرمینگ و ب) دی‌گاوسینگ

انجام بهینه فرایند دی‌پرمینگ و دی‌گاوسینگ نیاز به اندازه گیری امضای مغناطیسی شناور در فاصله ویژه‌ای از بدنه آن است. برای این کار شناور در شبیه ساز میدان مغناطیسی زمین قرار می‌گیرد و امضای مغناطیسی ناشی از مغناطش دائم و القایی شناور به کمک سنسورهای مغناطیسی در کف دریا اندازه‌گیری شده و سپس فرایند دی‌پرمینگ برای از میان بردن مغناطش دائم بدنه انجام می‌شود (شکل۲).

شکل ۲: قرارگیری شناور در شبیه ساز میدان مغناطیسی زمین برای اندازه‌گیری امضای مغناطیسی.

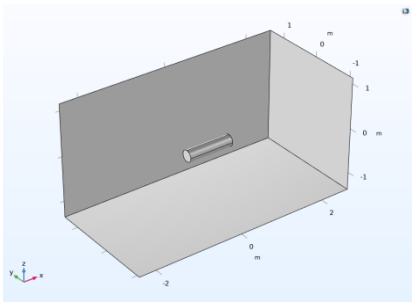
در این پژوهش یک استوانه فولادی از جنس فولاد ST37 به طول ۱۰۰ و قطر ۲۰ سانتی متر به عنوان یک مدل زیرسطحی انتخاب و سپس به کمک روش المان محدود امضای مغناطیسی آن به فاصله یک قطر از کف آن استخراج شد. همچنین در محیط آزمایشگاهی به

[1] Deperming
[2] Degaussing
[3] Passive
[4] Active

کمک شبیه ساز میدان مغناطیسی زمین امضای مغناطیسی استخراج شده اعتبارسنجی شد.

شبیه سازی امضای مغناطیسی

یک استوانه فولادی به طول ۱۰۰ و قطر ۲۰ سانتی متر و ضخامت ٤ میلی متر به عنوان مدل زیرسطحی انتخاب شد. برای شبیه‌سازی امضاهای مغناطیسی از نرم‌افزار COMSOL Multiphysics 6.2 بهره گرفته شد. از ماژول AC/DC، زیرماژول magnetic fields, no currents انتخاب شد. شکل ۳ هندسه به کار گرفته شده و استوانه سه بعدی رسم شده را نشان می‌دهد.



شکل ۳ : هندسه استوانه و محیط پیرامون آن در نرم افزار COMSOL.

در جایی که بار الکتریکی وجود ندارد داریم:

$$\nabla \times \vec{H} = 0 \qquad (۱)$$

پس می‌توان پتانسیل مغناطیسی اسکالر $\vec{V}_m$ را تعریف کرد. پس

$$\vec{H} = -\nabla \vec{V}_m \qquad (۲)$$

این مفهوم مشابه تعریف پتانسیل الکتریکی برای میدان‌های الکتریکی ساکن است. با کمک رابطه بنیادین میان چگالی شار مغناطیسی میدان مغناطیسی داریم:

$$\vec{B} = \mu_0 \mu_r \vec{H} \qquad (۳)$$

به کمک رابطه ۳ و رابطه $\nabla . \vec{B} = 0$ می‌توانیم رابطه $\vec{V}_m$ را داشته باشیم

$$-\nabla . \left(\mu_0 \mu_r \nabla \vec{V}_m \right) = 0 \qquad (٤)$$

در این مدل از رابطه میدان کاهش یافته بهره میگیریم، به این معنی که فقط برای پتانسیل $\vec{V}_m$ متناظر با میدان مختل شده حل می‌شود. پس داریم:

$$-\nabla . \left(\mu_0 \mu_r \nabla \vec{V}_m + \vec{B}_{ext} \right) = 0 \qquad (٥)$$

که در آن $\vec{B}_{ext}$ میدان پس زمینه است و در محیط آزمایشگاه محل کار برابر با میدان مغناطیسی زمین است.

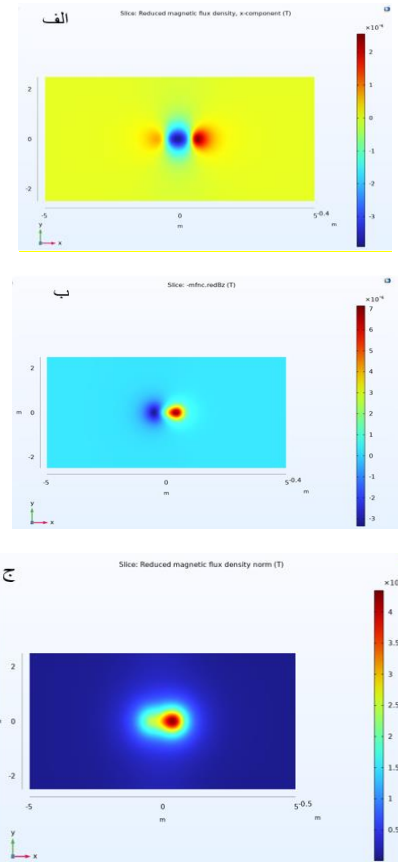
مرزهای خارجی برای میدان مغناطیسی کاهش یافته عایق در نظر گرفته شدند:

$$-\hat{n} . \vec{B} = 0 \qquad (٦)$$

همچنین از شرط مرزی magnetic shielding برای به کار بردن تراوایی مغناطیسی نمونه ST37 و ضخامت صفحه استوانه‌ای که ٤ میلی متر است بهره گرفته شد. تراوایی نسبی فولاد ST37 ۳۲۸ در نظر گرفته شد.

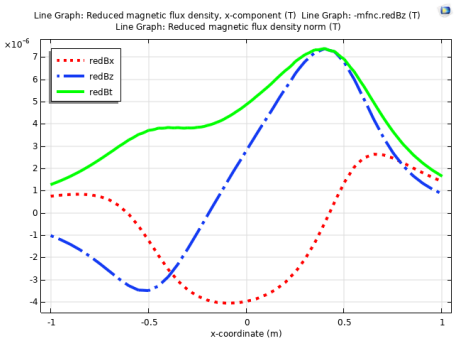
شکل ٤ پروفایل امضای مغناطیسی به دست آمده از شبیه سازی فولاد استوانه‌ای در فاصله ۲۰ سانتی متری از کف آن را برای مولفه‌های x، z و کل نشان می‌دهد. میدان مغناطیسی کاربستی به نمونه با اندازه گیری میدان مغناطیسی زمین در آزمایشگاه مربوطه با قرار گرفتن در راستای شمالی –جنوبی با یک سنسور مغناطیسی فلاکس گیت انجام شد که برابر است با

$$B_x = 37 \mu T \, , B_y = 0 \mu T \, , B_z = 33 \mu T$$



شکل ٤: پروفایل امضای مغناطیسی الف) در راستای x ب) در راستای z و ج) کل استوانه فولادی در صفحه‌ای به فاصله ۲۰ سانتی متر از کف آن.

همچنین نمودار یک بعدی سه مولفه امضای مغناطیسی استوانه در خطی به فاصله ۲۰ سانتی متر از کف آن رسم شد (شکل ۵).



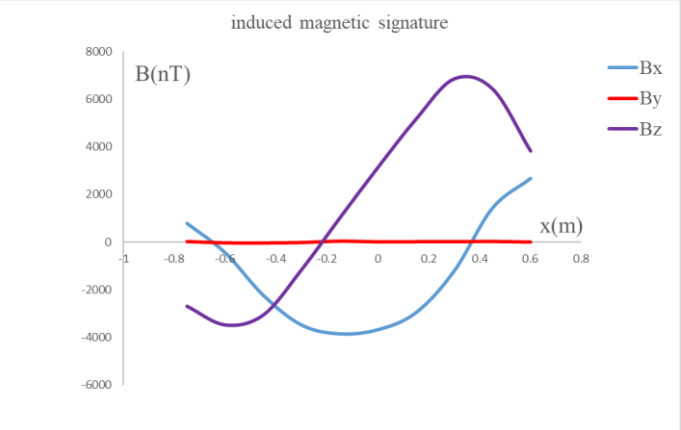
شکل ۵ امضاهای مغناطیسی استوانه در خطی به فاصله ۲۰ سانتی متر از کف آن.

اندازه‌گیری امضای مغناطیسی استوانه

برای اندازه گیری امضاهای مغناطیسی، استوانه فولادی از جنس ST37 به طول ۱۰۰ و قطر ۲۰ سانتی متر , ضخامت ٤ میلی متر ساخته شد و داخل یک جایگاه آزمایشگاهی در راستای شمالی-جنوبی قرار گرفت [٤] و آرایه سنسورهای مغناطیسی فلاکس گیت به فاصله ۲۰ سانتی متر از کف آن‌ها به صورت خطی قرار گرفت. جایگاه آزمایشگاهی یک شبیه ساز میدان مغناطیسی دو بعدی است که از مجموعه‌ای از پیچه‌های هلمهولتز در راستای طولی و عمودی تشکیل شده است شکل ٦ استوانه فولادی در شبیه ساز میدان مغناطیسی زمین را نشان می‌دهد.

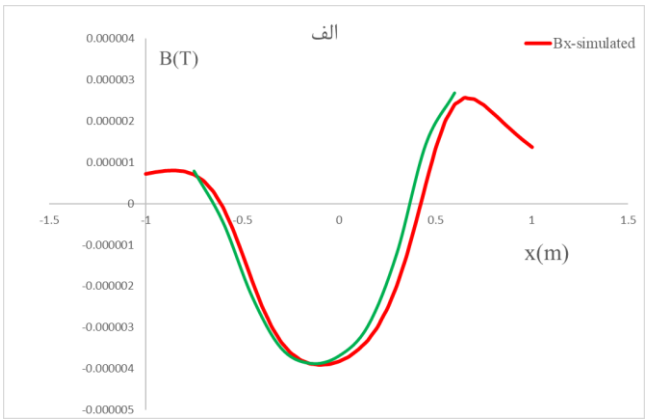
شکل ٦: استوانه فولادی در شبیه ساز میدان مغناطیسی زمین.

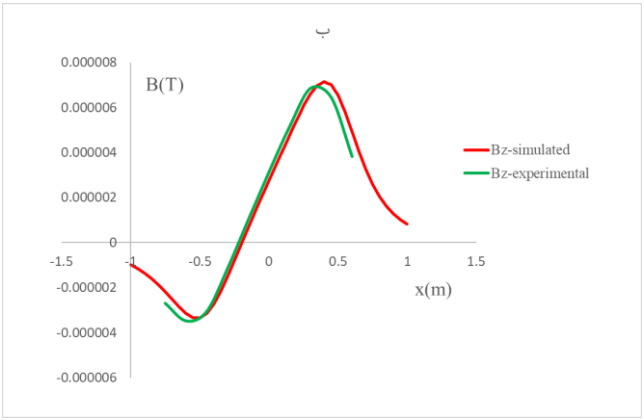
نخست در حضور میدان مغناطیسی زمین هنگامی که تمامی سیم‌پیچ‌های شبیه ساز میدان مغناطیسی زمین خاموش است امضاهای مغناطیسی (B_x,B_y,B_z) آن‌ها گرفته شد که برابر امضاهای مغناطیسی دائم و القایی است. پس از آن با روشن کردن سیم‌پیچ‌های x و z شبیه ساز میدان مغناطیسی زمین، میدان مغناطیسی کاربستی از سوی زمین به نمونه فولادی زدوده شد و در این حالت امضاهای مغناطیسی ناشی از مغناطش دائم استوانه ضبط شد. حال با کم کردن امضاهای مغناطیسی به دست آمده از حالت اول و حالت دوم مولفه‌های امضای مغناطیسی القایی به دست آمد(شکل ۷).

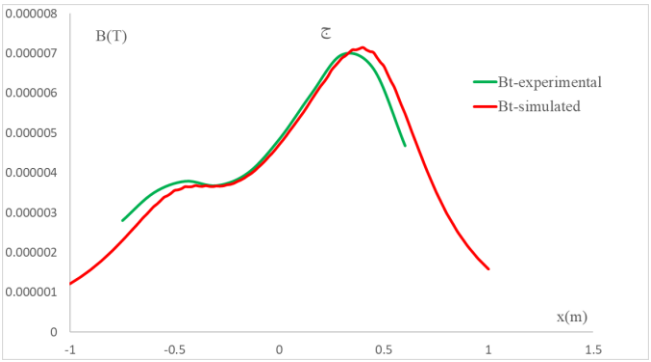


شکل۷: مولفه‌های امضای مغناطیسی ناشی از مغناطش القایی استوانه در فاصله ۲۰ سانتی متری از کف آن.

با مقایسه نمودارهای به دست آمده از شبیه سازی و اندازه‌گیری دیده می‌شود که خروجی‌های شبیه سازی با اندازه‌گیری در محیط آزمایشگاهی مطابقت خوبی دارد و اختلاف ناچیز میان آن‌ها به دلیل خطاهای حین اندازه‌گیری و کم بودن داده‌های اندازه‌گیری نسبت به شبیه سازی است. شکل ۸ مطابقت داده‌های شبیه سازی و اندازه‌گیری مولفه‌های امضای مغناطیسی ناشی از مغناطش القایی را نشان می‌دهد.







شکل۸: مقایسه مولفه‌های امضای مغناطیسی الف) X ب)Z ج) کل ناشی از مغناطش القایی به دست آمده از شبیه سازی و اندازه گیری.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش به کمک روش المان محدود امضای مغناطیسی ناشی از مغناطش القایی یک مدل زیرسطحی استخراج شد. هم‌چنین برای اعتبارسنجی نتایج به دست آمده، مدل زیرسطحی شبیه سازی شده در محیط آزمایشگاهی داخل یک شبیه ساز میدان مغناطیسی زمین قرار گرفت و سپس به کمک آرایه‌ای از سنسورهای مغناطیسی فلاکس گیت امضای مغناطیسی ناشی از میدان مغناطیسی زمین اندازه‌گیری شد. نتایج نشان داد که خروجی‌های شبیه سازی و اندازه گیری با یکدیگر تطابق دارند.

مرجع‌ها

[1] Chung H-J, Bae K-W, Yang C-S, Jung W-J. Magnetic Treatment Techniques for Magnetic Field Reduction of a Naval Ship without Degaussing Coil. Chinese Journal of Defense. 2018;28(2):41-2.

[2] Holmes JJ. Modeling a ship's ferromagnetic signatures. Synthesis Lectures on Computational Electromagnetics. 2007;2(1):1-75.

[3] Isa MC, Nain H, Yusoff NHN, Manap ARA, Slamatt R, Anuar MH. An overview of ship magnetic signature and silencing technologies. DEFENCE S AND T TECHNICAL BULLETIN. 2019;12(2):176-92.

[4] Eslamifar R, Safikhani M, Mozaffari M. Experimental Study of the Effect of Stress on the Magnetic Signatures of a Steel Sample. Iranian Journal of Applied Physics. 2024.

تأثیر درجهٔ رأس بر دینامیک کاوش و تقلید در شبکه‌های پیچیده

طباطبائی، محمد[۱] ؛ آقابابائی سامانی، کیوان [۱]

[۱]دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

در این پژوهش تأثیر درجهٔ رأس بر دینامیک کاوش- تقلید در شبکه‌های پیچیده بررسی شده است. در مدل ارائه‌شده، افراد به صورت همزمان به دو فرآیند تقلید نرم از همسایگان و کاوش استراتژی‌های جدید می‌پردازند. درجهٔ رأس، که نمایانگر میزان اتصال اجتماعی افراد است، در انتخاب الگوی تقلید و شدت تأثیرپذیری از آن الگو نقش دارد. این اثرات در شبکه‌هایی با ساختارهای مختلف شامل شبکه‌های کاملاً آمیخته؛ منظم تصادفی، تصادفی، بی‌مقیاس و جهان کوچک مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهد که درنظر گرفتن درجهٔ رأس در فرآیند تقلید، باعث کاهش پهنای توزیع استراتژی‌ها و افزایش همگرایی در رفتار جمعی می‌گردد. همچنین وابستگی شدت تقلید به درجهٔ رأس می‌تواند اثرات پیچیده و غیرخطی بر انتشار ایده‌ها در شبکه‌های اجتماعی ایجاد نماید که نیازمند بررسی‌های بیشتری در پژوهش‌های آتی است.

***واژگان کلیدی**: دینامیک کاوش-تقلید، درجهٔ رأس، شبکه‌های پیچیده، تقلید نرم، همگرایی رفتار جمعی*

Impact of Vertex Degree on Exploration-Imitation Dynamics in Complex Systems

Tabatabaei, Mohammad[1] ; Aghababaei Samani, Keivan[1]

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

Abstract

In this study, we investigate the impact of vertex degrees on exploration-imitation dynamics in complex networks. The proposed model considers individuals who simultaneously engage in soft imitation of neighbors and exploration of new strategies. Vertex degree, reflecting individuals' social connectivity, influence both the selection of imitation targets and the intensity of imitation. These effects are studied across various network structures, including well-mixed, random regular, random, scale-free, and small-world networks. Results demonstrate that incorporating vertex degree into imitation processes reduces the width of the strategy distribution, enhancing behavioral convergence. Moreover, dependence of imitation intensity on vertex degree can lead to complex, nonlinear effects on idea dissemination within social networks, suggesting directions for further research.

***Keywords**: Exploration-imitation dynamics, Vertex degree, Complex networks, Soft imitation, Behavioral convergence*

مقدمه

رفتارهای اجتماعی انسان‌ها در بستر پیچیده‌ای از تعاملات شکل می‌گیرد که در آن دو فرآیند اساسی تقلید و کاوش نقش تعیین‌کننده‌ای دارند. از یک سو، کاوش به افراد امکان می‌دهد تا با آزمودن راهکارهای نوین، فضای رفتاری خود را گسترش دهند و از سوی دیگر، تقلید موجب می‌شود افراد از راهکارهای اثبات‌شده دیگران بهره ببرند. تعادل میان این دو فرایند، محرک اصلی تحول رفتارهای جمعی و انتشار ایده‌ها در جوامع انسانی است [۲]. تقلید می‌تواند به نحوه‌های گوناگون صورت پذیرد، فرد می‌تواند رفتار الگویش را به طور کامل اتخاذ کند که تقلید محض نامیده می‌شود. فرد می‌تواند بخشی از رفتار خود را حفظ و بخشی از رفتار الگویش را اتخاذ کند که تقلید نرم نام‌گذاری شده است [۴،۱].

در این میان، ساختار شبکه‌های اجتماعی به عنوان چارچوبی تعیین‌کننده عمل می‌کند که در آن هر فرد تنها با زیرمجموعه‌ای محدود از جامعه در ارتباط است. این محدودیت ساختاری، اهمیت فرآیند انتخاب الگوهای تقلید را پررنگ می‌سازد. پرسش محوری این پژوهش آن است که معیارهای انتخاب الگوهای تقلید در چنین شبکه‌هایی چگونه تعیین می‌شوند؟

یکی از پارامترهای کلیدی در این انتخاب، جایگاه اجتماعی افراد است. مشاهدات تجربی نشان می‌دهد که افراد با اتصالات اجتماعی بیشتر (مانند رهبران فکری، اینفلوئنسرها و سلبریتی‌ها) هم به عنوان الگوهای مطلوب‌تری برای تقلید شناخته می‌شوند و هم تاثیر بیشتری در تغییر رفتار فرد مقلد دارند [۳].

در چارچوب نظریه شبکه‌ها، می‌توان این جایگاه اجتماعی را با معیارهای مختلفی از جمله تعداد ارتباطات فرد (درجهٔ رأس)، درجهٔ ورودی در شبکه‌های جهت‌دار و یا وزن یال‌ها در شبکه‌های وزن‌دار کمّی‌سازی کرد. این پژوهش با تکیه بر درجهٔ رأس، به تحلیل نظام‌مند فرآیند تقلید–کاوش در شبکه‌های اجتماعی می‌پردازد.

این موضوع منجر به طرح چند پرسش اساسی می‌شود:

آیا در نظر گرفتن درجهٔ رأس بر نحوه‌ی انتشار ایده‌ها تأثیر دارد؟ ساختار شبکه چگونه بر میزان همگرایی در جامعه تأثیر می‌گذارد؟

و در نهایت، چگونه تأثیر درجهٔ رأس بر شدت تقلید می‌تواند بر پایداری رفتارها اثرگذار باشد؟

برای پاسخ به این سوالات، در این پژوهش تأثیر درجهٔ رأس در فرایند تقلید–کاوش به دو شکل مختلف لحاظ شده است: یکی در احتمال انتخاب فرد الگو برای تقلید، و دیگری در شدت تقلید. سپس، مدل بر روی شبکه‌هایی با ساختارهای مختلف از جمله شبکه‌های کاملاً آمیخته، جهان‌کوچک، بی‌مقیاس، و منظم‌تصادفی اجرا شده و انحراف معیار توزیع استراتژی‌ها در طول زمان تحلیل می‌شود. نتایج نشان می‌دهند که در نظر گرفتن درجهٔ رأس در فرایند تقلید–کاوش منجر به همگرایی بیشتر در توزیع استراتژی‌ها می‌شود، در ادامه‌ی این مقاله، در بخش روش‌شناسی، مدل پیشنهادی و نحوه‌ی لحاظ کردن درجهٔ رأس در فرآیند تقلید معرفی می‌شود. در بخش نتیجه‌گیری، مدل بر روی شبکه‌های مختلف اجرا شده و تأثیر درجهٔ رأس بر احتمال و شدت تقلید بررسی خواهد شد. همچنین تحلیل‌هایی برای نمایش پویایی انتشار ایده‌ها و اثرات ساختار شبکه ارائه می‌شود. در بخش نتیجه‌گیری، یافته‌های اصلی مرور شده و پیشنهادهایی برای گسترش پژوهش در آینده مطرح خواهد شد.

روش‌شناسی

در این مطالعه، ابتدا شبکه ای با تعدادی افراد (گره) ساخته شده و سپس به هر یک از گره ها استراتژی انتخاب شده از یک توزیع یکنواخت (بین ۰و۱) اختصاص داده می‌شود. فرآیندهای کاوش و تقلید نرم می‌توانند به‌طور همزمان یا جداگانه بر پارامتر

استراتژی گره تأثیر بگذارند و موجب تغییرات دینامیکی در شبکه شوند [۵،۶].

تقلید نرم، که نشان‌دهنده‌ی تغییر تدریجی رفتار است، همراه با کاوش که تغییرات تصادفی را مدل‌سازی می‌کند، به‌صورت زیر فرمول‌بندی شده است [۴،۷] :

$$x_i(t+1) = \alpha x_i(t) + (1-\alpha)x_j(t) + \eta(t) \qquad (۱)$$

که در آن $x_i(t+1)$ استراتژی عامل i ام در یک گام زمانی پس از لحظه t، $x_i(t)$ استراتژی عامل i ام در لحظه t، $x_j(t)$ استراتژی عامل j ام در لحظه t، $\eta(t)$ نویز گاوسی با میانگین μ و انحراف معیار σ و α پارامتری است که میزان تأثیر استراتژی عامل j ام بر استراتژی عامل i ام را تعیین می‌کند (مقداری بین ۰ و ۱). کاوش باعث افزایش تنوع در استراتژی افراد و در نتیجه افزایش پهنای تابع توزیع استراتژی ها شده و بالعکس تقلید نرم باعث همگرایی استراتژی ها و در نتیجه کاهش پهنای تابع توزیع استراتژی ها می‌شود. در نتیجه انتظار می‌رود ترکیب این دو فرایند منجر به رسیدن پهنای تابع توزیع به یک مقدار ثابت شود [۴].

در این پژوهش، نحوه تاثیر درجهٔ رأس در انتخاب گره برای تقلید به دو صورت مورد بررسی قرار می‌گیرد. درجهٔ رأس می‌تواند میزان تقلید را تعیین کند و یا در انتخاب یک گره برای تقلید اثر بگذارد. میزان تقلید به صورت زیر فرمول‌بندی شده است :

$$\alpha = \frac{k_j}{k_i + k_j} \qquad (۲)$$

که در آن α میزان تقلید (تقریباً بین ۰و۱)، k_j درجهٔ رأس گره انتخاب شده برای تقلید و k_i درجهٔ رأس گره‌ای است که می‌خواهد تقلید کند.

احتمال انتخاب یک گره برای تقلید نیز به صورت زیر فرمول‌بندی شده است :

$$p_{ij} = \frac{k_j}{\sum_{l \epsilon N_i} k_l} \qquad (۳)$$

که در آن p_{ij} میزان احتمال انتخاب گره j برای تقلید توسط گره i، k_j درجهٔ رأس گره j ، N_i مجموعه همسایگان گره i است.

در این پژوهش به چهار طریق فرایند تقلید و کاوش مورد بررسی قرار می‌گیرد:

۱. مدل پایه (بدون در نظر گرفتن درجهٔ رأس)
۲. تأثیر درجهٔ رأس در انتخاب الگو
۳. تأثیر درجهٔ رأس در میزان تقلید
۴. ترکیب هر دو اثر درجهٔ رأس

سپس، فرایندها بر روی شبکه‌هایی با ساختارهای مختلف از جمله شبکه‌های کاملاً آمیخته، جهان‌کوچک، بی‌مقیاس، تصادفی‌منظم و تصادفی اجرا شده و انحراف معیار توزیع استراتژی‌ها در طول زمان تحلیل می‌شود.

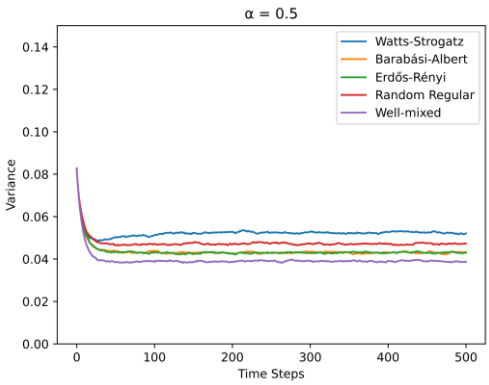
نتیجه‌گیری

در مدل اول که تقلید نرم و کاوش به‌صورت تصادفی و بدون وابستگی به درجهٔ رأس انجام می‌شود، برای همه‌ی شبکه‌ها با گذشت زمان واریانس کاهش یافته و سیستم به حالت پایدار می‌رسد. کاهش واریانس در شبکه‌ی واتس‌استروگاتز، برخلاف دیگر ساختارها، یکنواخت نیست؛ ابتدا کاهش سریعی مشاهده می‌شود، سپس مقدار آن افزایش می‌یابد و در نهایت به حالت پایدار می‌رسد (شکل ۱ الف).

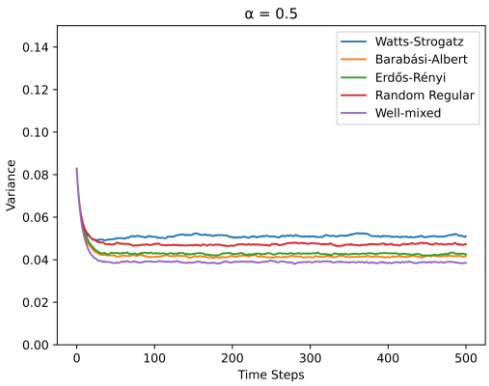
در مدل دوم که انتخاب الگو براساس احتمال وابسته به درجهٔ رأس انجام می‌شود، اما شدت تقلید هنوز مستقل از درجه

است، پهنای نهایی تابع توزیع استراتژی‌ها به طور جزئی برای همه‌ی شبکه‌ها کاهش یافته است. رفتار دینامیکی و روند کاهش واریانس

الف)



ب)



شکل ۱ : الف) شبیه‌سازی‌های مدل اول و ب) مدل دوم به طور مجزا با میانگین‌گیری از ۶۰ اجرای مستقل برای ۶۰ تحقق از شبکه‌های ساختار یافته‌ای با جمعیتی متشکل از ۱۰۰ عامل انجام شده‌اند. پارامترهای مرتبط به این شبیه‌سازی‌ها عبارتند از:

$$p = 0.1,\ k = 10,\ m = 5,\ d = 6,\ p_{er} = 0.1$$

نویز گاوسی با $\mu = 0$ و $\sigma = 0.1$ برای مدل‌سازی فرایند کاوش به سیستم اضافه شده است.

مشابه مدل اول باقی مانده (شکل ۱ ب)، و می‌توان نتیجه گرفت که صرفاً افزایش احتمال انتخاب گره‌های با درجهٔ بالاتر، در نبود وابستگی شدت تقلید، تأثیر جزئی بر همگرایی جمعیت دارد. دو مدل اول و دوم برای مقادیر مختلف α بررسی شد و α=۰.۵ که بیشترین همگرایی استراتژی‌ها را مابین مابقی داشت برای مقایسه انتخاب شد.

در مدل سوم که شدت تقلید به نسبت درجهٔ رأس بین فرد و همسایه‌ی انتخابی وابسته شده ولی انتخاب همسایه هنوز تصادفی است، کاهش در مقدار نهایی واریانس برای تمامی ساختارها نسبت به دو مدل قبلی مشاهده می‌شود. این کاهش برای همه‌ی ساختارهای شبکه برقرار است. نکته‌ی قابل‌توجه، از بین رفتن رفتار غیرخطی در شبکه‌ی واتس‌استروگاتز است (شکل ۲–الف).

در مدل چهارم، که هم انتخاب همسایه و هم شدت تقلید هر دو به درجهٔ رأس وابسته‌اند، تأثیرگذاری درجهٔ رأس به‌طور کامل در مدل وارد شده است. در این حالت نیز رفتار غیر خطی برای شبکه‌ی واتس‌استروگاتز مشاهده نمی‌شود (شکل ۲–ب). برای سایر ساختارها، تغییر چشم‌گیری در روند کاهش مشاهده نشده اما مقدار نهایی واریانس، مشابه مدل سوم، کاهش یافته است. تنها تفاوت قابل‌توجه، کاهش نسبی واریانس در باراباسی‌آلبرت نسبت به مدل

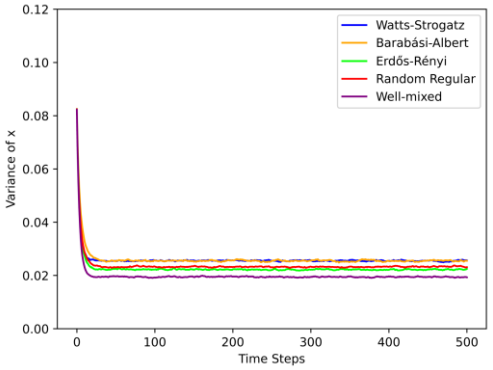
سوم است که بیانگر آن است که وابسته کردن هر دو مرحله‌ی انتخاب و شدت تقلید به درجهٔ رأس در این شبکه منجر به کاهش بیشتر ناهمگنی می‌گردد. مقادیر نهایی واریانس برای همه‌ی ساختارهای شبکه در چهار مدل مختلف در جدول ۱ گزارش شده است.

نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که تأثیر درجهٔ رأس بر فرایند تقلید نرم، بسته به نحوه‌ی دخالت آن و ساختار شبکه متفاوت است. در حالی که صرفاً افزایش احتمال انتخاب گره‌های پرارتباط به‌عنوان الگو، تأثیر قابل‌توجهی بر انتشار ایده‌ها ندارد، اعمال وابستگی شدت تقلید به درجهٔ رأس می‌تواند باعث کاهش واریانس نهایی جمعیت شود. همچنین، حذف کاهش اولیه‌ی واریانس در شبکه‌ی واتس‌استروگاتز در مدل سوم و چهارم، حاکی از آن است که درنظر گرفتن تأثیر درجهٔ رأس در شدت تقلید اثرات غیرخطی و پیچیده‌ای ایجاد می‌کند که نیازمند بررسی‌های عمیق‌تر در مطالعات آتی است.

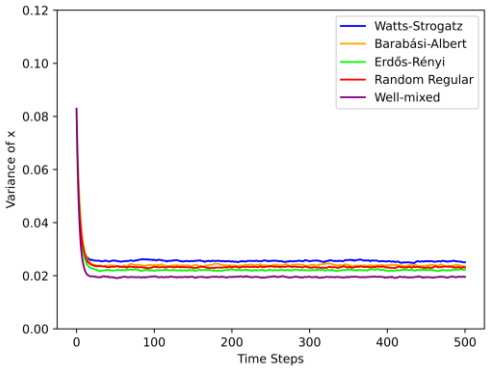
جدول۱: واریانس نهایی میانگین‌گیری شده بر روی ۱۰۰گام آخر

مدل	Well-mixed	Erdos-Renyi	Barabasi-Albert	Watts-strogatz	Random regular
اول α=۰.۵	۰.۰۳۹	۰.۰۴۳	۰.۰۴۲	۰.۰۵۲	۰.۰۴۷
دوم α=۰.۵	۰.۰۳۹	۰.۰۴۲	۰.۰۴۱	۰.۰۵۱	۰.۰۴۷
سوم	۰.۰۱۹	۰.۰۲۲	۰.۰۲۵	۰.۰۲۵	۰.۰۲۳
چهارم	۰.۰۱۹	۰.۰۲۲	۰.۰۲٤	۰.۰۲۵	۰.۰۲۳

الف)



ب)



شکل۲ : الف) شبیه‌سازی‌های مدل سوم و ب) مدل چهارم به طور مجزا با میانگین‌گیری از ٦٠ اجرای مستقل برای ٦٠ تحقق از شبکه‌های ساختار عامل انجام شده‌اند. پارامترهای مشترک و یافته‌ای با جمعیتی متشکل از ۱۰۰ مرتبط به این شبیه‌سازی‌ها عبارتند از:

$$p = 0.1,\ k = 10,\ m = 5,\ d = 6,\ p_{er} = 0.1$$

برای مدل‌سازی فرایند کاوش به $\sigma = 0.1$ و $\mu = 0$ نویز گاوسی با سیستم اضافه شده است.

مرجع‌ها

[1]Flynn, E. (2022). ‘Imitation Is the Sincerest Form of’ … Cultural Evolution, or Is It?. *Journal of Cognition and Culture*, *22*(5), 436-450. https://doi.org/10.1163/15685373-12340144

[2] Tang, J., Zhu, H., Lan, J. *et al.* Identifying influential nodes for influence maximization problem in social networks using an improved discrete particle swarm optimization. *Soc. Netw. Anal. Min.* 13, 94 (2023). https://doi.org/10.1007/s13278-023-01098-5

[3] Amaral, I. (2022). Computational Social Sciences. In: Schintler, L.A., McNeely, C.L. (eds) Encyclopedia of Big Data. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-319-32010-6_41

[4] Sara Sadat Veradi Isfahani and Keivan Aghababaei Samani

Phys. Rev. E 105, 054102 – Published 2 May 2022. Exploration-imitation competition in well-mixed and structured populations. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevE.105.054102

[5]Epstein, J. M. (2006). Generative Social Science: Studies in Agent-Based Computational Modeling. Princeton University Press.

[6]Castellano, Claudio, Santo Fortunato, and Vittorio Loreto. "Statistical physics of social dynamics." *Reviews of Modern Physics* 81.2 (2009).

[7] Traulsen, A., Nowak, M. A., & Pacheco, J. M. (2006). *Stochastic dynamics of invasion and fixation*. Physical Review E, 74(1), 011909.

جاذب-لیزرزایی کامل همدوس در یک شبکه ی موجبری اپتیکی دو ماده‌ای دنباله اکتوناچی مرتبه هشتم دارای تقارن پاریته-زمان

خلیفه، محمد جواد؛ بروستانی، جمال

دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز

چکیده

در این مقاله، پدیده جاذب-لیزرزایی کامل همدوس و همچنین نقاط استثنائی در یک شبکه ی موجبری اپتیکی مرتبه هشتم اکتوناچی دارای تقارن پاریته-زمان با استفاده از روش ماتریس انتقال و روش ویژه توابع تعمیم یافته مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات عددی نشان میدهد که شبکه موجبری مرتبه هشتم اکتوناچی، دارای نقاط استثنایی متنوع و همچنین دارای پدیده شفافیت یک طرفه و دو طرفه میباشد. در این مقاله یکی از نقاط استثنایی دارای جاذب-لیزرزایی کامل همدوس از این ساختار دارای تقارن پاریته-زمان مورد مطالعه قرار گرفته است.

واژه های کلیدی: *دنباله اکتوناچی، نقاط استثنا، جاذب-لیزرزایی کامل همدوس، ماتریس انتقال.*

The coherent perfect absorbing-lasing in a parity-time symmetric two-material optical waveguide network of eighth-order Octonacci sequence

Khalifeh, Mohammad Javad; Barvestani, Jamal

Faculty of physic, University of Tabriz, Tabriz

Abstract

In this article, the phenomenon of coherent perfect absorbing-lasing, as well as exceptional points, in an eighth-order optical waveguide network with parity-time symmetry, has been investigated using the transfer matrix method and the method of generalized eigenfunctions. Numerical calculations indicate that the eighth-order Octonacci waveguide network features a variety of exceptional points and exhibits unidirectional and bidirectional transparency phenomena. In this paper, one of the exceptional points exhibiting complete coherent perfect absorbing-lasing in this parity-time symmetric structure is studied.

Keywords*:Octonacci sequence, Exceptional point, coherent perfect absorbing-lasing, Transfer Matrix.*

مقدمه

ساختار های اپتیکی دارای تقارن پاریته–زمان که به محیط های اتلاف و بهره متکی هستند، با دارا بودن خواص اپتیکی منحصر به فردشان توجه زیادی را به خود جلب کرده است[۱]. ضریب شکست یک سیستم دارای تقارن پاریته-زمان (PT) به صورت $n(x)=n^*(-x)$ می باشد که بخش حقیقی ضریب شکست یک تابع زوج و بخش موهومی آن یک تابع فرد می باشد که تحت این شرایط می توان مدهای نوری را به صورت کنترل شده جذب و ایجاد کرد. سیستم های دارای تقارن PT اکثرا بر روی سیستم های لایه ای متمرکز هستند. هامیلتونی مکانیک کوانتومی که شرط تقارن پاریته–زمان را برآورده کند، دارای یک طیف کاملا حقیقی است، یعنی سیستم کاملا در حالت پایدار میباشد[۲]. به طور کلی سیستم هایی که تقارن پاریته–زمان را از خود نشان می دهند، دارای هامیلتونی غیر هرمیتی میباشند. در هامیلتونی غیر هرمیتی ساختارهای دارای تقارن پاریته–زمان، میتوان دو ویژه مقدار را در یک نقطه خاص به نام نقطهEP بر هم منطبق کرد و در نقاط EP بخش های حقیقی و موهومی ویژه مقادیر و ویژه بردار های ماتریس پراکندگی بر هم منطبق میشوند. در نقاط EP ساختارهای اپتیکی دارای تقارن پاریته–زمان می توان پدیده های عدم انعکاس و شفافیت و نامرئیت و جاذب–لیزرزایی کامل همدوس ساختار را مشاهده کرد. در نقاط استثناء یک تراگسیل کامل قابل مشاهده میباشد. در نقاط استثنایی یک تغییر فاز ناگهانی برای ضرایب انعکاس چپ و راست اتفاق می افتد. اکثر مطالعات در مورد ساختارهای دارای تقارن PT بر روی بلور های فوتونی تمرکز دارند ولی برای ساخت ساختارهای اپتیکی دارای تقارن پاریته–زمان، شبکه های موجبر اپتیکی مناسب هستند و در مقایسه با بلور های فوتونی، شبکه ی موجبری بسیار انعطاف پذیرتر میباشد. زیرا میتوان با تغییر طول بخش های موجبر، ساختار های متنوعی را در حالت های دوره ای و شبه دوره ای از جمله شبکه های موجبری اکتوناچی بوجود آورد. از آنجا که مقالات اخیر به بررسی خواص جاذب–لیزرزایی کامل همدوس شبکه های موجبر شبه دوره ای دو موادی دارای تقارن پاریته–زمان اکتوناچی نپرداخته اند، لذا در این کار، این خاصیت از یک شبکه موجبر اکتوناچی شبه دوره ای مرتبه هشتم مورد بررسی قرار گرفته است[۳].

مدل و روش محاسباتی

دنباله اکتوناچی به عنوان یک دنباله شبه‌دوره‌ای مهم، وسیع و شناخته شده میباشد. یک شبکه ی موجبر اپتیکی شبه دوره ای یک بعدی اکتوناچی را میتوان با استفاده از دنباله ی اکتوناچی که به صورت زیر میباشد را طراحی کرد.

$$S_n = S_{n-1}S_{n-2}S_{n-1}, (n \geq 3) \qquad (۱)$$

و با شروع از این دنباله، مرتبه‌های بالاتر به صورت زیر می‌باشد: S_1=A و S_2=B و S_3=BAB و S_4=BABBBAB و S_5=BABBBABBABBABBBAB می‌باشند که A و B به ترتیب عنصر اول و عنصر دوم شبکهِ موجبر اکتوناچی شبه دوره‌ای میباشند [٤].

در مورد شبکه موجبر اکتوناچی دارای تقارن پاریته–زمان، برای محاسبه ی طیف انتقال و طیف انعکاس از روش ویژه توابع تعمیم یافته استفاده شده است. در یک شبکه ی موجبر اپتیکی ساخته شده از خطوط موجبر یک بعدی، انتشار امواج الکترومغناطیسی درون خطوط به صورت ترکیب خطی از دو موج تخت، در نظر گرفته شده است و تابع موج، امواج الکترومغناطیسی با فرکانس زاویه‌ای ω در هر بخش بین گره‌های i و j به صورت ترکیب خطی از دو موج تخت که در خلاف جهت هم حرکت میکنند، در نظر گرفته شده است:

$$\Psi_{i,j}(x) = A_{ij}e^{ikx} + B_{ij}e^{-ikx} \qquad (۲)$$

که بردار موج k به صورت $k= \omega/c$ میباشد و c سرعت امواج الکترومغناطیسی در خلا میباشد. در این کار علاوه بر روش ویژه

توابع تعمیم یافته، برای تحلیل مسأله پراکندگی و تعیین انتقال و انعکاس از یک شبکه موجبر اکتوناچی یک بعدی، از روش ماتریس انتقال، استفاده شده است. ماتریس انتقال از یک عنصر دارای تقارن پاریته–زمان A به صورت زیر میباشد:

$$M_A = \begin{pmatrix} \frac{1}{t} & \frac{r_{A-R}}{t} \\ \frac{r_{A-L}}{-t} & \frac{1}{t} \end{pmatrix} \qquad (۳)$$

که t و r_{A-R} و r_{A-L} به ترتیب ضریب انتقال و ضریب انعکاس از راست و ضریب انعکاس از چپ میباشد. با این حال با جایگزینی عنصر B به جای عنصرA، ماتریس انتقال عتصرB بدست می آید و با استفاده از اصول ماتریس انتقال میتوانیم رابطه زیر را بدست آوریم:

$$\begin{pmatrix} E_T \\ E_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_I \\ E_R \end{pmatrix} \qquad (٤)$$

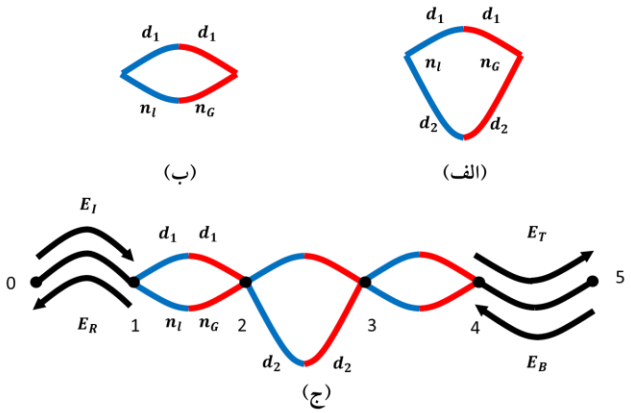
همچنین ماتریس پراکندگی، برای شبکه های موجبر اپتیکی را میتوان بشکل زیر نوشت:

$$\begin{pmatrix} E_T \\ E_R \end{pmatrix} = S(\omega) \begin{pmatrix} E_I \\ E_B \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} r_L & t \\ t & r_R \end{pmatrix} \qquad (۵)$$

که ویژه مقادیر ماتریس پراکندگی به صورت $\lambda_{1,2} = t \pm \sqrt{r_R r_L}$ می‌باشد. میدان‌های ورودی و خروجی با استفاده از معادلات گره استخراج می‌گردد[۵]. برای یک حالت لیزرزایی که هیچ موج ورودی به ساختار وجود ندارد، شرایط مرزی $(E_I = E_B = 0)$ برقرار می‌شود که منجر می شود که عناصر ماتریس انتقال M_{22} صفر گردد و این به معنای وجود تکینگی لیزرزایی میباشد. برای یک حالت جاذب کامل همدوس که هیچ موج خروجی از ساختار وجود ندارد، شرایط مرزی متفاوتی اعمال می‌شود $(E_R = E_T = 0)$ که نشان‌دهنده وجود تکینگی جذب است و منجر میشود که عناصر ماتریس انتقال M_{11} صفر گردد. در نتیجه، اگر این دو شرایط، یعنی جاذب کامل همدوس و لیزرزایی، به طور هم‌زمان در ساختار دارای تقارن PT رخ دهد، پدیده جالب جاذب–لیزرزایی کامل همدوس ظاهر میشود.

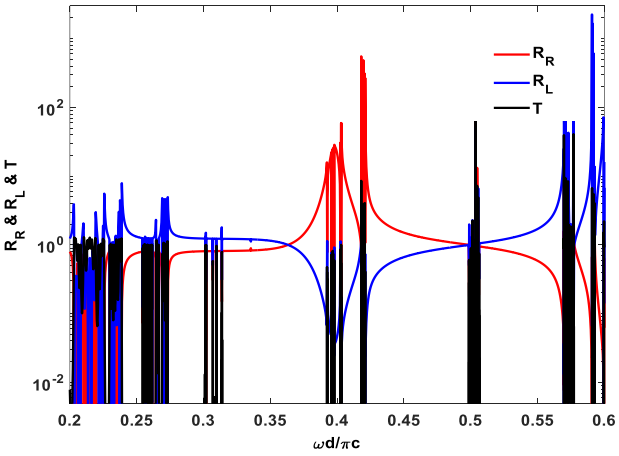
نتایج محاسبات

در شکل ۱، عنصر A و عنصر B از ساختار شبکه موجبر اکتوناچی و همچنین ساختار شبکه موجبر شبه دوره ای یک بعدی دارای تقارن پاریته–زمان اکتوناچی مرتبه سوم نشان داده شده است.



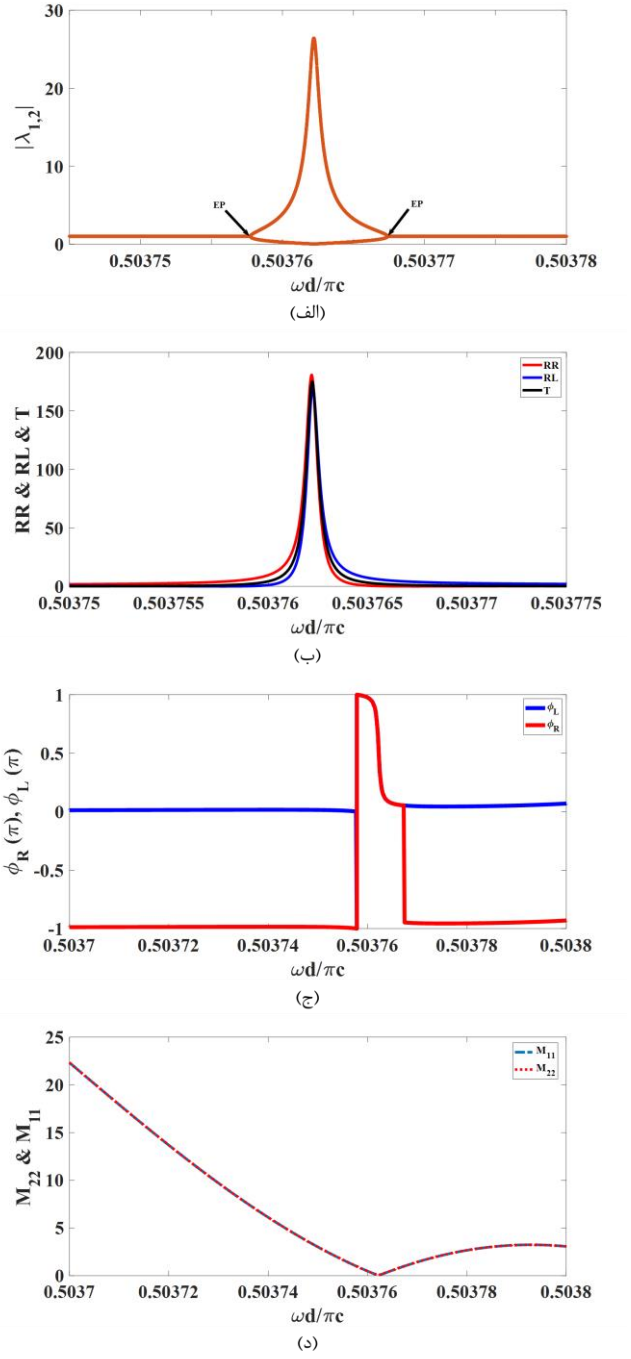
شکل ۱: (الف) عنصر A از شبکه موجبر اکتوناچی، (ب) عنصر B از شبکه موجبر اکتوناچی، (ج) شبکه موجبر اکتوناچی مرتبه سوم

عنصر A از دو بخش موجبر بالایی و پایینی تشکیل شده است که بخش موجبر بالایی از دو زیر بخش با طول های برابر d_1 و در عنصر A، خطوط آبی دارای ضریب شکست n_L میباشند. همچنین عنصر B دارای دو بخش موجبر بالایی و پایینی می‌باشد که دارای طول برابر هستند. در عنصر B خطوط آبی دارای ضریب شکست n_L و خطوط قرمز دارای ضریب شکست n_G می‌باشد.



شکل ۲: طیف انتقال و طیف انعکاس چپ و راست شبکه موجبری مرتبه هشتم اکتوناچی

همانطور که در شکل ۲ نشان داده شده است، با توجه به طیف انتقال و طیف انعکاس چپ و راست، شبکه موجبر اکتوناچی مرتبه هشتم، دارای پدیده شفافیت یک طرفه و دو طرفه گوناگونی در بازه فرکانسی $\omega=[0.2:0.6\pi c/d]$ میباشد.



شکل ۳: ویژگی های جاذب-لیزرزایی کامل همدوس شبکه موجبر اکتوناچی مرتبه هشتم (الف) ویژه مقادیر ماتریس پراکندگی (ب) طیف انتقال و طیف انعکاس چپ و راست (ج) طیف فاز انعکاس چپ و راست (د) عناصر قطر اصلی ماتریس انتقال.

در شکل ۳ ویژگی های جاذب–لیزرزایی کامل همدوس از شبکه ی موجبری اکتوناچی مرتبه هشتم نشان داده شده است. پانل (الف) ویژه مقادیر ماتریس پراکندگی ساختار مورد نظر می‌باشد که در بازه ی فرکانسی $\omega=[0.50375:0.50378\pi c/d]$ دو نقطه ی استثنائی وجود دارد. اولین نقطه استثنا در فرکانس $\omega=0.50376\pi c/d$ است و دومین نقطه استثنا در فرکانس $\omega=0.50377\pi c/d$ قرار دارد. در این دو نقاط استثنا، دو تغییر فاز ناگهانی π برای انعکاس چپ و راست اتفاق می افتد. باتوجه به پانل (الف) و پانل (ب)، در میان این دو نقاط استثنایی، ضریب انتقال وضریب انعکاس چپ و ضریب انعکاس راست از یک بیشتر هستند. علاوه بر این، شرط $M_{11} = M_{22} = 0$ برآورده می‌شود و عناصر قطر اصلی ماتریس انتقال برابر صفر میشود که نشان‌دهنده این است که این نقاط نمایانگر تکینگی‌های جاذب–لیزرزایی کامل همدوس هستند.

نتیجه گیری

در این کار، ساختار شبکه موجبر اکتوناچی مرتبه هشتم طراحی و خواص جاذب–لیزرزایی کامل همدوس بررسی شده است. تجزیه و تحلیل طیف های انتقال و انعکاس چپ و راست و طیف ویژه مقادیر ماتریس پراکندگی و همجنین طیف فاز انعکاس چپ و راست نشان میدهد که جاذب–لیزرزایی کامل همدوس در بازه فرکانسی $\omega=[0.50375:050378\pi c/d]$ ظاهر می‌گردد.

مرجع‌ها

[۱] Rüter, C.E., Makris, K.G., El-Ganainy, R., Christodoulides, D.N., Segev, M., Kip, D.: Observation of parity-time symmetry in optics. Nat. Phys. **6**(3), 192 (2010).

[۲] C.M. Bender, S. Boettcher, Real spectra in non-Hermitian Hamiltonians having PT symmetry, Phys. Rev. Lett. 80 (24) (1998) 5243.

[۳] Y.D. Chong, L. Ge, A.D. Stone, PT-symmetry breaking laser-absorber modes in optical scattering systems, Phys. Rev. Lett. 106 (9) (2011) 093902.

[۴] M. J. Khalifeh, J. Barvestani, B. Meshginqalam, Extraordinary optical characteristics in a one-dimensional parity-time symmetric structure of quasiperiodic two-material Octonacci optical waveguide network, Current Applied Physics 67 (2024) 75–84.

[۵] X. Wang, X. Yang, Y. Zhang, F. Tang, D. Deng, H. Liu, Z. Wei, Singular characteristics of one-dimensional Fibonacci optical waveguide networks composed of PT-symmetric elements, Physica E 135 (2022) 114992.

گذارفاز دینامیکی در یک مدل ساده از حرکت باکتری

نامور، مهرانگیز[1] ؛ جعفر پورهمدانی، فرهاد

[1]دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه بوعلی سینا ، همدان

چکیده

در این مقاله الگوهای حرکتی یک باکتری نوعی را در قالب یک مدل یک بعدی، که به مدل دویدن و چرخش معروف است، مدلسازی می کنیم. در ادامه با کمک نظریه انحراف بزرگ رفتار تابع چگالی احتمال جریان متحرک (جابجایی در واحد زمان)، به عنوان یک متغیر دینامیکی که روی مسیر حرکت متحرک تعریف می‌شود، مطالعه می‌گردد.

واژه های کلیدی: نظریه انحراف بزرگ، گذارفاز دینامیکی ، مدل دویدن و چرخش، فرآیندهای تصادفی .

Dynamical phase transition in a simple model of bacterial movement

Namvar, Mehrangiz[1]; Jafarpour Hamadani, Farhad

1 Faculty of Basic Sciences, Department of Physics, Bu Ali Sina University, Hamedan

Abstract

In this article, we model the movement patterns of a type of bacterium in the form of a one-dimensional model, known as the run and tumble model. Subsequently, with the help of large deviation theory, we study the behavior of the probability density function of the moving current (displacement per unit time) as a dynamic variable defined along the moving trajectory.

***Keywords**: Large deviation theory, Dynamical phase transition, Run and tumble model, Stochastic processes.*

مقدمه

باکتری‌ها به دلایل مختلفی در حرکت می‌باشند [۱]. یک نمونه از این باکتری تاژکدار متحرک می‌تواند E. coli باشد. ساده‌ترین مدل برای توصیف حرکت E. coli در دو مرحله یا در دو فاز صورت

می‌گیرد. در فاز دویدن، تاژکدار در مسیر نسبتا مستقیم حرکت می‌کند. پس از مدتی متحرک متوقف شده و فاز خود را تغییر می‌دهد. در فاز چرخش، تاژکدار بصورت تصادفی جهتگیری جدیدی انتخاب کرده و پس از قرارگیری مجدد در فاز دویدن، در مسیر جدید حرکت می‌کند. این فرآیند دو مرحله‌ای با نام مدل دویدن و چرخش شناخته می‌شود [۲]. از سوی دیگر توقف حرکت باکتری‌ها به دلایل مختلفی رخ می‌دهد. از این رو مطالعه دینامیک یک باکتری از ابتدای حرکت تا زمان توقف آن دارای اهمیت است. در این مقاله به مطالعه بخشی از دینامیک یک تاژکدار می‌پردازیم که در آن باکتری ابتدا رفتاری طبیعی مطابق با مدل دویدن و چرخش دارد اما در زمانهای طولانی به دلایلی تمایلی به حرکت در راستای مرجح ندارد. در این مقاله ما دینامیک ذره را مارکوف درنظر می‌گیریم.

مدلسازی حرکت باکتری

مدل ساده خود از حرکت باکتری را به این صورت تعریف می‌کنیم: در فاز دویدن متحرک در هر گام زمانی با احتمال r یک جهت مفروض، ترجیحا در راستای سر خود حرکت می‌کند. از این رو احتمال پرش متحرک در جهت مرجح (سمت سر یا در این حالت جهت مثبت محور x) را بصورت $(1+A/(t+1))/2$ و در جهت غیرمرجح (سمت دم، تاژک یا در این حالت جهت منفی محور x) را بصورت $(1-A/(t+1))/2$ درنظر می‌گیریم که در آن t زمان است که گسسته فرض شده است $t = 1,2,\dots$. از سوی دیگر در هر گام زمانی متحرک با احتمال $1-r$ جهت حرکت خود را تغییر می‌دهد (برای مثال در جهت منفی محور xها). در این حالت با احتمال بیشتری در جهت سر حرکت می‌کند تا در جهت دم یا تاژک. از این رو پس از چرخش، متحرک با احتمال $(1+A/(t+1))/2$ در جهت منفی محور xها و با احتمال $(1-A/(t+1))/2$ در جهت مثبت محور xها پرش می‌کند. خواننده متوجه شده است ما فاز چرخش را با معرفی احتمال r بصورت ضمنی در مسئله گنجانده‌ایم. این یک مسئله ولگشت بایاس خاص است که قبل و بعد از چرخش جهت ارجح پرش ولگشت همان جهت سر تاژکدار است. در تعاریف بالا برای آنکه این احتمالات مثبت باشند لازم است تا $-2 \le A \le 2$ باشد. فرض اساسی در این مدل آن است که احتمال پرشها در فاز دویدن تابع زمان هستند و نیز اینکه در زمان طولانی متحرک در فاز دویدن به یک ولگشت بدون بایاس تبدیل می‌شود. اگرچه حرکت متحرک در حالت کلی در سه بعد رخ میدهد. اما در بسیاری از موارد مطالعه حرکت یک بعدی ضمن سادگی اطلاعات بسیار مفیدی از رخداد هایی که در سه بعد رخ میدهند را در اختیار ما قرار میدهد. موضوعی که در این مقاله به دنبال بررسی آن هستیم بررسی انحرافات بزرگ در جابجایی ولگشت در واحد زمان، که گاهی از آن به جریان متحرک یاد خواهیم کرد، می‌باشد [۳]. نتایج محاسبات ما نشان می‌دهند که با تغییر r، تابع انحراف بزرگ این کمیت رفتار غیر تحلیلی از خود نشان می‌دهد که از آن به گذارفاز دینامیکی یاد می‌شود. جمع t متغیر تصادفی گسسته را بصورت زیر درنظر بگیرید (اگر t در اینجا زمان درنظر گرفته شود به X_t یک کمیت تجمیع‌شده زمانی گویند):

(۱)

$$X_t = \frac{1}{t}\sum_{i=1}^{t} x_i$$

ما به محاسبه تابع چگالی احتمال این میانگین زمانی علاقمند هستیم. مطابق اصل انحرافات بزرگ این تابع چگالی احتمال رفتار حدی زیر را دارد:

(۲)

$$P_{X_t}(x) \approx e^{-tI(x)}$$

در راستای محاسبه تابع نرخ می‌توان تابع مولد زیر را محاسبه کرد، با توجه به این مطلب که تابع چگالی احتمال $P_{X_t}(x)$ رفتار نمایی

دارد می‌توان نتیجه زیر را برای رفتار زمان بلند تابع مولد $G(s,t)$ بدست آورد:

(۳)

$$G(s,t) = \langle e^{s X_t} \rangle \approx e^{t\,\lambda(s)}$$

که در آن:

(۴)

$$\lambda(s) = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} ln\, G(s,t)$$

در نهایت مطابق قضیه گارتنر–الیس اگر $\lambda(s)$ مشتق‌پذیر باشد آنگاه تابع نرخ از تبدیل لژاندر–فنچل این تابع بدست می‌آید:

(۵)

$$I(x) = \max_s \big(sx - \lambda(s)\big)$$

تابع چگالی احتمال جریان متحرک

به منظور مطالعه رفتار بحرانی سامانه و بدست آوردن تابع چگالی احتمال جریان متحرک، ابتدا لازم است تا تابع مولد فرآیند دویدن و چرخش را بیابیم. در محاسبه تابع مولد این فرایند می‌توان از رهیافت استفاده شده در مقالات [٤,٥,٦] کمک گرفت. تبدیل لاپلاس گسسته تابع مولد ابرکانونیک مسئله را بصورت زیر می‌نویسیم:

(۶)

$$\tilde{G}(s,z) = \sum_{t=1}^{\infty} G(s,t)\, z^{-t} = \frac{\tilde{R}_1 + \tilde{R}_2 + 2\tilde{R}_1\,\tilde{R}_2}{1 - \tilde{R}_1\,\tilde{R}_2}$$

که در آن $\tilde{R}_1$ و $\tilde{R}_2$ به ترتیب تبدیلات لاپلاس گسسته برای دو زیر–فرآیند از فاز دویدن می‌باشند. پس از انجام محاسبات و ساده‌سازی نتایج بسته زیر بدست می‌آیند:

(۷)

$$\tilde{R}_1(s,z) = \frac{r\cosh s\,(۲ + A\,\tanh s)}{۲\,z} \times 2F1\left(1,۳ + A\,\tanh s; ۳; \frac{r\cosh s}{z}\right)$$

و نیز:

(۸)

$$\tilde{R}_۲(s,z) = \frac{(۱ - r)\cosh s\,(۲ - A\tanh s)}{۲\,z} \times 2F1\left(1,۳ - A\,\tanh s; ۳; \frac{(1-r)\cosh s}{z}\right)$$

در ادامه به بررسی جواب حقیقی معادله:

(۹)

$$\tilde{\mathrm{R}}_1(\mathrm{s},\mathrm{z}^*)\tilde{\mathrm{R}}_2(\mathrm{s},\mathrm{z}^*) = 1$$

یعنی $z^*(s)$ می‌پردازیم زیرا همانطور که اشاره شد لگاریتم آن $\lambda(s)$ را تعیین می‌کند. باید دقت کرد که ممکن است سری $\tilde{R}_1(s,z)$ و یا $\tilde{R}_2(s,z)$ به ازای مقداری از z که آن را z_c می‌نامیم، واگرا شود. در اینصورت دیگر $\lambda(s)$ از جواب معادله ذکر شده به دست نمی‌آید بلکه از لگاریتم شعاع همگرایی سری $\tilde{R}_1(s,z)$ و یا $\tilde{R}_2(s,z)$ (یعنی شعاع همگرایی آن سری که واگرا می‌شود) محاسبه می‌گردد. ما آن نقطه بحرانی که واگرایی سری در آن رخ می‌دهد را $z_c(s_c)$ می‌نامیم. دیده می‌شود که شعاع‌های همگرایی سری‌ها در $r = 1/2$ با یکدیگر برابراند. بطور خلاصه تابع $\lambda(s)$ در محدوده شعاع همگرایی $\tilde{R}_1(s,z)$ و $\tilde{R}_2(s,z)$ از لگاریتم جوابهای معادله $\tilde{R}_1(s,z^*)\,\tilde{R}_2(s,z^*) = 1$ بدست می‌آید و در خارج شعاع همگرایی هر یک از این سری‌ها، از لگاریتم شعاع همگرایی آن سری که واگرا می‌شود. مطابق با مقالات [٤,٥,٦]، گذارفاز در این سامانه‌ها به رفتار زمان بلند $R_1(s,t)$ و $R_۲(s,t)$ بستگی دارد. رفتار زمان بلند توابع $R_1(s,t)$ و $R_2(s,t)$ بصورت:

(۱۰)

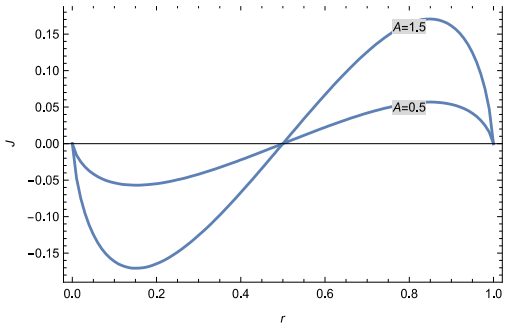
$$R_1(s,t) \approx \frac{A\tanh s + 3}{\Gamma(2 + A\tanh s)} \frac{(r\cosh s)^t}{\mathrm{t}^{-A\tanh s}}$$

(۱۱)

$$R_2(s,t) \approx \frac{A\tanh s - 3}{\Gamma(2 - A\tanh s)} \frac{\left((1-r)\cosh s\right)^t}{t^{+A\tanh s}}$$

می‌باشند که با مقایسه این رفتارها، می‌توان به این نتیجه رسید که امکان مشاهده گذارفاز دینامیکی در مدل وجود دارد. مشخص شده است درصورتی که $1< \pm A\tanh s_c \leq 2$ باشد گذار مرتبه دوم یا پیوسته و درصورتی که $\pm A\tanh s_c > 2$ باشد گذار مرتبه اول یا گسسته است. در ادامه ابتدا می‌بایست مقدار s_c را یافت. در قسمت نخست حالت $r > 1/2$ را بررسی می‌کنیم. با یک بررسی ساده می‌توان دریافت که حل تحلیلی معادله $\tilde{R}_1(s,z^*)\tilde{R}_2(s,z^*) = 1$ برای یافتن z^* ساده نیست از این رو به تحلیل جوابهای آن بصورت عددی می‌پردازیم. لگاریتم جوابهای این معادله به عنوان تابعی از متغیر s یعنی $\lambda(s) = ln\, z^*(s)$ بدون تردید از مبدا مختصات عبور می‌کنند. اما این منحنی تنها تا شعاع همگرایی $\tilde{R}_1$ ادامه می‌یابد و پس از آن، خواهیم داشت $\lambda(s) = ln(r\cosh s)$ یعنی لگاریتم شعاع همگرایی $\tilde{R}_1$. نکته مهم در اینجا آن است که روی شعاع همگرایی $\tilde{R}_1$، معادله $\tilde{R}_1(s_c,z(s_c))\tilde{R}_2(s_c,z(s_c)) = 1$ در حقیقت معادله‌ای برای $-A\tanh s_c$ است. این به معنای آن است که با مشخص کردن r بلافاصله مرتبه گذارفاز دینامیکی، که تنها تابع احتمال r است، بدست می‌آید. مشاهده می‌شود هنگامی که r تعیین می‌گردد، یک مقدار آستانه برای A وجود دارد که بصورت قطعی مقدار نقطه بحرانی s_c را مشخص می‌کند و در غیراینصورت هیچ نقطه بحرانی s_c و عملاً گذارفازی وجود نخواهد داشت. در ادامه بحث در مورد رفتارهای بحرانی مدل به ازای $r < 1/2$ به دلیل تقارن موجود در مدل، نتایج تفاوت اساسی با حالت قبل یعنی $r > 1/2$ نخواهند داشت به غیر از اینکه نقطه بحرانی s_c در قسمت مثبت محور s قرار می‌گیرد. این به معنای آن است که تابع انحراف بزرگ یک ناپیوستگی در جریانهای مثبت خواهد داشت ثانیا مرتبه گذار، همان مرتبه دوم است. در این حالت برای $s > s_c$ داریم $\lambda(s) = ln((1-r)\cosh s)$ یعنی لگاریتم شعاع همگرایی $\tilde{R}$. بخش دوم تابع انحراف بزرگ از تبدیل لژاندر–فنچل $\lambda(s)$ بدست می‌آید. به ازای $r < 1/2$ مقدار $+A\tanh s_c$ با افزایش r افزایش می‌یابد. همانند حالت $r > 1/2$ در این حالت نیز به ازای هر مقدار از r آستانه‌ای برای A وجود دارد که زیر آن مقدار نقطه بحرانی s_c وجود نخواهد داشت. در قسمت آخر این بخش لازم است یادآوری کنیم که به ازای $r = 1/2$ شعاع‌های همگرایی $\tilde{R}_1$ و $\tilde{R}_2$ با یکدیگر برابر می‌شوند. از طرف دیگر معادله $\tilde{R}_1(s_c,z(s_c))\tilde{R}_2(s_c,z(s_c)) = 1$ نیز جواب حقیقی ندارد. این به معنای آن است که به ازای این مقدار از r هیچ گذارفازی رخ نمی‌دهد. از طرفی به ازای مقادیر منفی A (یعنی در بازه $-2 \leq A \leq 0$) رفتارهای بحرانی مدل تغییر اساسی پیدا نخواهند کرد. انتخاب یک مقدار منفی برای A ضمن تبدیل r به $1-r$ معادل یک انعکاس آینه‌ای چپ–راست است لذا در این مقاله به بحث در مورد مقادیر منفی A نپرداخته‌ایم. در ادامه بر مقدار نوعی جریان متحرک J به عنوان تابعی از r که متناظر با محتملترین مسیرها در فضای مسیرهای ترمودینامیکی است، می‌پردازیم. مقدار جریان نوعی با $^{d}/_{ds}\ln(z^*)|_{s=0}$ یا ممان اول جریان داده می‌شود. نتایج محاسبات به ازای دو مقدار مثبت از کمیت A در شکل ۱ آمده است. به دلیل تقارن در دینامیک سامانه به ازای $r < 1/2$ و $r > 1/2$ نمودار جریان نوعی بصورت تابعی از r نسبت به نقطه $r = 1/2$ متقارن است و تنها تفاوت در علامت مقدار نوعی جریان است. به ازای $r > 1/2$ جریان نوعی دارای یک بیشینه و در $r = 1/2$ صرفنظر از مقدار A، جریان نوعی صفر است. زیرا در $r = 1/2$ متحرک با احتمال یکسان به چپ و راست می‌چرخد. اما بعد از چرخش به راست، به همان میزان که تمایل به حرکت به سمت راست دارد بعد از چرخش به چپ، تمایل به حرکت به سمت چپ دارد و درنتیجه متوسط جابجایی و درنتیجه

جریان نوعی صفر خواهد بود. با کاهش A مقدار نوعی جریان مستقل از احتمال چرخش به سمت صفر می‌رود. زیرا سامانه در $A = 0$ در عمل یک گشت تصادفی غیرمرجح است که بطور بدیهی جریان آن صفر است. از سوی دیگر با افزایش A و انتخاب یک مقدار متناهی از احتمال چرخش (برای مثال $r > 1/2$)، به دلیل وجود فاز چرخش، امکان افزایش نامتناهی جریان نوعی وجود ندارد. همچنین به ازای $r = 0$ و $r = 1$ متحرک به فاز چرخش وارد نمی‌شود. در این حالت دینامیک متحرک یک گشت تصادفی مرجح تنها به یک سمت است. این موضوع وجود بیشینه جریان نوعی در این حالت و وجود نقطه کمینه در حالت $r < 1/2$ را توجیه می‌کند.



شکل۱ : مقدار نوعی جریان برحسب احتمال چرخش برای دو مقدار از متغیر A که روی منحنی‌ها مشخص شده است.

نتیجه گیری

در این مقاله به مطالعه افت و خیزهای جریان یک ریزاندام تاژکدار تحت دینامیک دویدن و چرخش، که از آن به متحرک نام می‌بریم، با کمک رهیافت نظریه انحراف بزرگ پرداختیم. فرض کردیم که دینامیک متحرک در فضا و زمان گسسته رخ می‌دهد. در هر گام زمانی متحرک با احتمال r به سمت راست و با احتمال $1 - r$ به سمت چپ حرکت می‌کند. پس از انتخاب راستا، متحرک در این راستا یک گشت تصادفی بایاس انجام می‌دهد. با کمک رهیافت استفاده شده در بررسی گذار فازهای ترمودینامیکی واسرشت DNA که به مدل پولند–شراگا معروف است و نیز مطالعه گذار فازهای دینامیکی ناشی از بازنشانی در مدلهای غیرتعادلی زمان گسسته، می‌توان به بررسی افت و خیزهای جریان و گذار فازهای احتمالی این مدل پرداخت. محاسبات ما نشان می‌دهند که با تغییر r فرآیند دستخوش گذار فاز دینامیکی می‌گردد. این گذار فاز بطور متقارن هم برای $r < 1/2$ و هم برای $r > 1/2$ دیده می‌شود. نشان دادیم که گذارفاز در هر صورت پیوسته است. این پدیده در یک نسخه پیوسته از مدل دویدن و چرخش نیز دیده شده است [۷].

مرجع‌ها

[1] J. Adler, *Annu. Rev. Biochem.* **44** (1975) 341.

[2] H. C. Berg (ed.), "*E. coli in Motion Biological and Medical Physics Biomedical Engineering*", *Springer*, New York, (2004).

[3] H. Touchette, *Phys. Rep*. **478** (2009) 1.

[4] D. Poland and H. A. Scheraga, *J. Chem. Phys*. **45** (1966) 1456.

[5] D. Poland and H. A. Scheraga, *J. Chem. Phys.* **45** (1966) 1464.

[6] R. J. Harris and H. Touchette, *J. Phys. A: Math. Theor*. **50** (2017) 10LT01.

[7] G. Gradenigo and S. N. Majumdar, *J. Stat mech.* (2019) 053206.

مطالعه ابتدا به ساکن خواص ترمودینامیکی و الکترونی ترکیب نیمه‌هوسلر CoVSb بر پایه نظریه تابعی چگالی و مدل‌های فونونی

حاجی زاده، مائده[۱]؛ اکبری، حسین*[۱]؛ بهاری، عسل[۱]؛ ندائی-شکرآب، بشیر[۱]

۱ گروه فیزیک، واحد اردبیل، دانشگاه آزاد اسلامی، اردبیل، ایران

چکیده

در این مطالعه، خواص ساختاری، الکترونی و ترمودینامیکی ترکیب نیمه‌هوسلر CoVSb با استفاده از نظریه تابعی چگالی DFT و روش FP-LAPW در کد WIEN2k بررسی شد. بهینه‌سازی ساختار با تقریب GGA و پتانسیل اصلاحی mBJ انجام شد. نتایج نشان دادند که ترکیب مذکور رفتار نیمه‌فلزی با گاف انرژی در اسپین پایین دارد، در حالی‌که در اسپین بالا حالت فلزی مشاهده می‌شود. چگالی حالات نقش کلیدی اوربیتال‌های Co و Sb در تشکیل باندها را آشکار ساخت. تحلیل فونونی بیانگر افزایش سختی شبکه با فشار و افزایش ظرفیت گرمایی و آنتروپی با دما بود. این ویژگی‌ها، CoVSb را گزینه‌ای مناسب برای کاربردهای اسپینترونیکی معرفی می‌کند.

واژگان کلیدی: *نظریه تابعی چگالی، ترمودینامیک فونونی، WIEN2k، نیمه‌فلز، اسپینترونیک*

First-Principles Study of Thermodynamical and Electronic Properties of the Half-Heusler Compound CoVSb Based on Density Functional Theory and Phonon Models

Hajizadeh, Maede1; Akbari, Hossein1; Bahari, Asal1; Nedaei-Shakarab, Bashir1

[1] Department of Physics, Ard.C., Islamic Azad University, Ardabil, Iran

Abstract

The structural, electronic, and thermodynamic properties of the half-Heusler compound CoVSb were studied using DFT within the FP-LAPW method as implemented in WIEN2k. Structural optimization was carried out using the GGA approximation, with the mBJ potential applied for improved band gap accuracy. The results indicate that CoVSb is a half-metal, showing a finite band gap in the spin-down channel and metallic behavior in the spin-up channel. The density of states reveals strong contributions from Co and Sb orbitals to the band structure. Phonon analysis shows that pressure increases lattice stiffness, while heat capacity and entropy rise with temperature. These findings highlight the potential of CoVSb for spintronic applications.

Keywords*: Density Functional Theory, Phonon Thermodynamics, WIEN2k, Half-Metal, Spintronics*

مقدمه

در سال‌های اخیر، اسپینترونیک به‌عنوان شاخه‌ای نوظهور در فناوری الکترونیک، به‌دلیل بهره‌گیری هم‌زمان از بار و اسپین الکترون، توجه روزافزونی را به خود جلب کرده است. این فناوری توسعه سامانه‌هایی با کارایی بالا، مصرف انرژی پایین و پاسخ سریع را فراهم می‌کند [۳-۱].

در این میان، ترکیبات نیمه هوسلر به‌دلیل ساختار پایدار، خواص مغناطیسی قابل تنظیم و رفتار نیمه‌فلزی، به‌عنوان گزینه‌هایی ایده‌آل برای ادوات اسپینترونیکی از جمله اتصالات اسپینی، حافظه‌های مغناطیسی و ترانزیستورهای اسپینی شناخته می‌شوند [۵-۴].

ترکیب CoVSb، یکی از ترکیبات کمتر بررسی‌شده در این خانواده، با قطبش اسپینی بالا و ساختار نواری متمایز، پتانسیل بالایی برای مهندسی گاف انرژی و بهینه‌سازی عملکرد الکترونیکی و اپتیکی دارد [۸-۶]. در این پژوهش، با ا

FP-LAPW، خواص ساخ

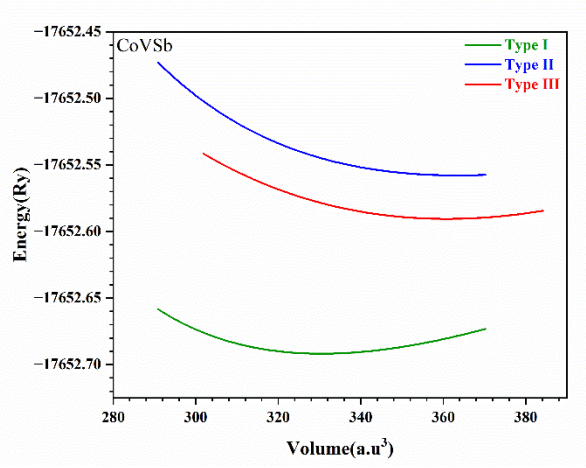
CoVSb بررسی می‌گردد. محاسبات در چارچوب نظریه تابع چگالی با استفاده از کد WIEN2k و پتانسیل کامل انجام شده است. برای در نظر گرفتن اثرات تبادل-همبستگی، از تقریب GGA به همراه پتانسیل اصلاحی mBJ بهره گرفته شد. برای بهینه‌سازی ساختار و تعیین ثابت شبکه، مش نقاط k=۱۰۰۰۰ در ناحیه اول بریلوئن در نظر گرفته شد. مقدار RK_{max} برابر با ۷ و همگرایی بار، ۰٫۰۰۰۱ e در نظر گرفته شدند. علاوه بر این، به‌منظور دقت بیشتر در محاسبات، جداسازی انرژی بین حالت‌های ظرفیت و هسته برابر با ۶.۰- ریدبرگ تنظیم گردید.

نتایج و بحث

برای تعیین خواص ساختاری، انرژی حالت پایه ترکیب، در حجم‌های مختلف اطراف حجم تعادلی محاسبه شد و نتایج با معادله حالت مورناگان برازش داده شد. نمودار انرژی - حجم ترکیب CoVSbدر شکل ۱ نشان داده شده است. در این معادله انرژی کل به صورت تابعی از حجم به صورت زیر بیان می‌شود:

$$E = E_0 + V\,\frac{B_0}{B_0'}\left[\frac{\left(\frac{V_0}{V}\right)^{B_0'}}{B_0'-1}+1\right]-\frac{B_0V_0}{B_0'-1} \qquad (1)$$

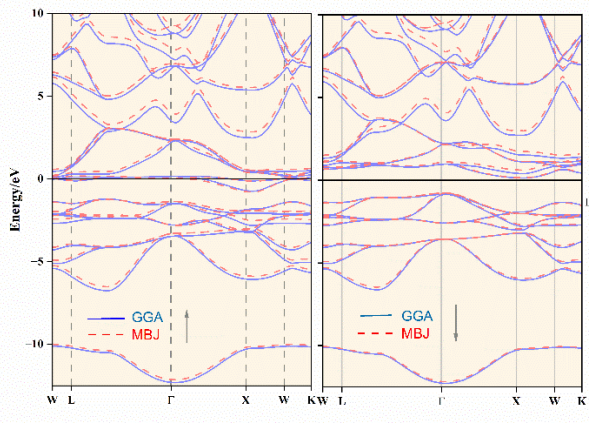
در این محاسبات، ابتدا وابستگی انرژی- حجم بررسی و سپس از طریق معادله، حجم سلول اولیه، انرژی پایه در دما و فشار صفر، مدول حجمی و مشتق آن با تقریب GGA استخراج گردید و مقادیر حجم اولیه، ۳۳۰.۵۰۱۴ مدول حجمی، ۱۵۱.۱۵۰۱ مشتق مدول حجمی، ۶.۳۵۵۱ انرژی تعادلی، ۱۷۶۵۲.۶۹۱۸۱۳- و ثابت شبکه، ۵.۸۰۷۸ بدست آمده است. مدول حجمی معکوس تراکم‌پذیری و یکی از شاخص‌های سنجش سختی بلور است؛ به‌گونه‌ای که با افزایش مدول حجمی، تراکم‌پذیری کاهش و استحکام شبکه افزایش می‌یابد. بنابراین، رابطه‌ای معکوس میان مدول حجمی و حجم تعادلی قابل مشاهده است.



شکل ۱ : نمودار انرژی- حجم ترکیب CoVSb در سه حالت (I, II, III)

نمودار ساختار نواری ترکیب CoVSb با تقریب‌های GGA و mBJ در دو حالت اسپینی بالا و پایین در شکل ۲ ارائه شده است که

تفاوت‌های آشکاری از خود نشان می‌دهند. نمودار نوار انرژی، در کانال اسپین بالا نشان می‌دهد که سطح فرمی (E_F)، نوار رسانش را قطع می‌کند که دلالت بر رفتار فلزی سیستم در این حالت دارد.

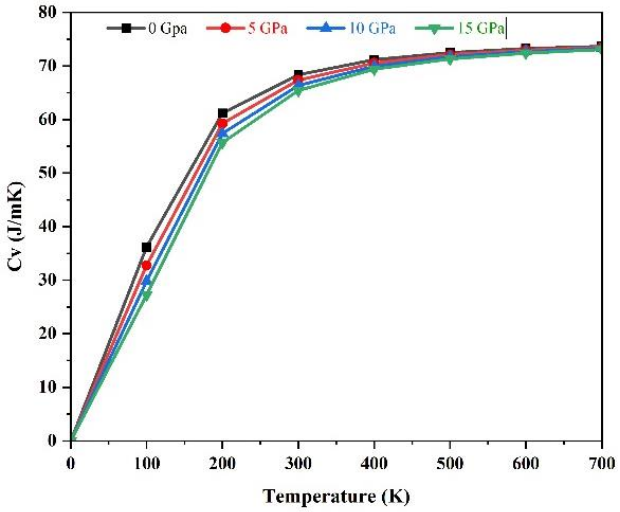


شکل ۲ : نمودار نوارهای انرژی CoVSb با تقریب GGA و mBJ

با اعمال تقریب mBJ، نوار رسانش به سمت سطوح انرژی بالاتر جابجا شده و فاصله آن از سطح فرمی افزایش می‌یابد؛ این تغییر ناشی از بهبود تفکیک نوارها بواسطه پتانسیل مؤثرتر mBJ نسبت به GGA است. با این حال، در اسپین بالا حتی با mBJ نیز گاف انرژی واضحی مشاهده نمی‌شود. در مقابل، در کانال اسپین پایین، سطح فرمی در ناحیه‌ی گاف انرژی قرار دارد و هیچ باندی در اطراف آن دیده نمی‌شود، که نشان‌دهنده رفتار نیمه‌رسانایی در این حالت است. این گاف در روش mBJ بزرگ‌تر و واضح‌تر از GGA ظاهر شده که دقت بیشتر این روش را در پیش‌بینی ساختار نواری تأیید می‌کند. نتایج نشان داد که اوربیتال‌های ۳d عنصر Co در ناحیه انرژی نزدیک سطح فرمی (حدود ۱± eV) با اوربیتال‌های ۵p عنصر Sb هیبرید شده و باندهای پیوندی و ضدپیوندی را ایجاد کرده‌اند که منشأ اصلی گاف انرژی در اسپین پایین محسوب می‌شود. این پیوند کووالانسی موجب گسترش باند ظرفیت و جدایش باندهای رسانش شده است. همچنین، اوربیتال‌های ۳d عنصر V عمدتاً در نواحی انرژی پایین‌تر فعال بوده و نقش کمتری در اطراف سطح فرمی دارند، اما ممکن است به‌صورت غیرمستقیم در شکل‌گیری ساختار باند مؤثر باشند.

مطالعه ویژگی‌های ترمودینامیکی مواد جامد تحت تأثیر دما و فشار، ابزاری کلیدی برای درک رفتار ساختاری و پایداری آن‌ها در شرایط مختلف محیطی به‌شمار می‌آید. افزایش دما منجر به تشدید ارتعاشات اتمی، افزایش حجم و کاهش پارامترهایی نظیر دمای دیبای می‌شود؛ در حالی‌که فشار با فشرده‌سازی شبکه بلوری، موجب کاهش حجم و افزایش سختی شبکه و در نتیجه افزایش دمای دیبای می‌گردد. این رفتارهای متضاد، تأثیرات عمیقی بر خواص دینامیکی و ترمودینامیکی مواد دارند. تحلیل دقیق کمیت‌هایی مانند ظرفیت گرمایی ویژه، انرژی داخلی، آنتروپی و انرژی آزاد فونونی در تابعی از دما و فشار، دید جامعی از پاسخ ماده به تحریکات حرارتی و مکانیکی فراهم می‌سازد.

شکل ۳ تغییرات ظرفیت گرمایی در حجم ثابت (C_v) را بر حسب دما را در فشارهای مختلف نشان می‌دهد.

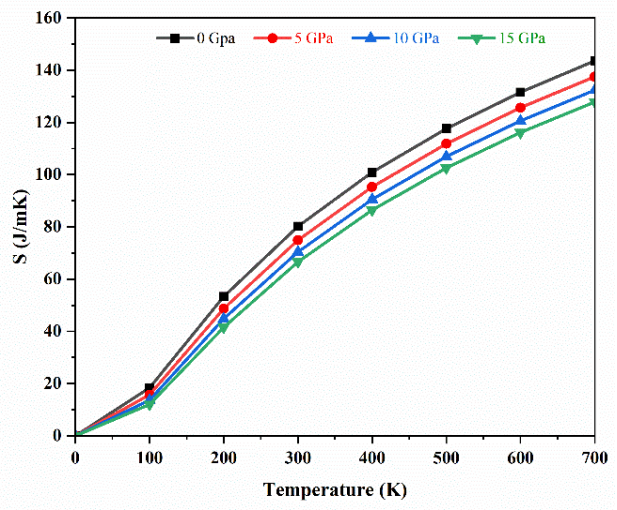


شکل۳ : ظرفیت گرمایی ویژه CoVSb برحسب دما در فشارهای مختلف

در دماهای پایین، C_v به‌سرعت افزایش می‌یابد که ناشی از فعال شدن حالت‌های ارتعاشی فونونی است. طبق مدل دبای، در ابتدا فقط فونون‌های کم‌انرژی مشارکت دارند و با افزایش دما، تعداد فونون‌های فعال بیشتر می‌شود. در دماهای بالا، C_v به حد کلاسیکی دولون–پتی نزدیک می‌شود. افزایش فشار موجب کاهش C_v در

دماهای پایین شده که به افزایش سختی شبکه و محدود شدن ارتعاشات نسبت داده می‌شود.

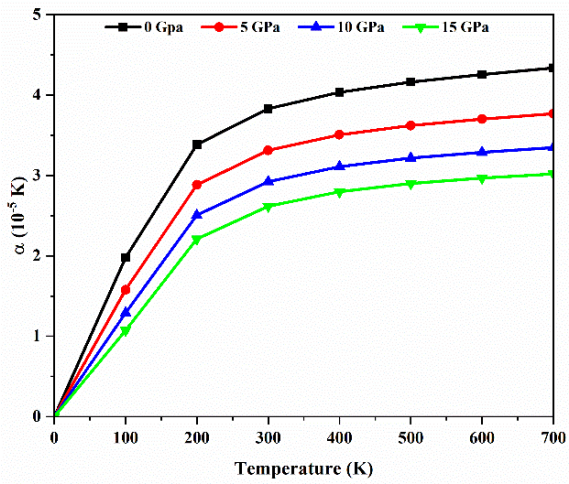
در شکل ٤ با افزایش دما، آنتروپی به‌دلیل افزایش حالت‌های ارتعاشی قابل دسترس در سطوح انرژی بالاتر، رشد می‌کند و بی‌نظمی سیستم افزایش می‌یابد.



شکل ٤ : رفتار آنتروپی CoVSb برحسب دما در فشارهای مختلف

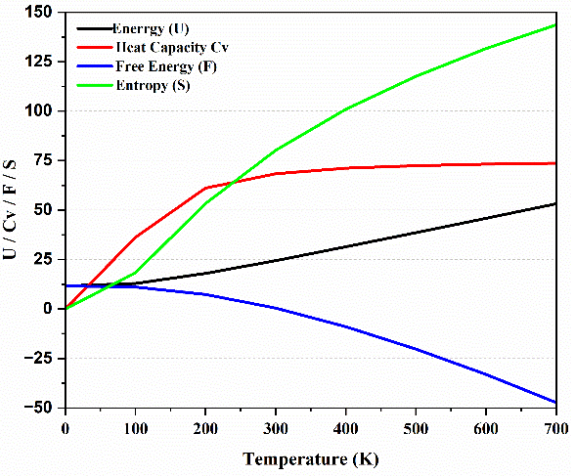
از سوی دیگر، افزایش فشار موجب کاهش آنتروپی در دماهای مختلف می‌شود؛ زیرا فشار با کاهش فاصله بین اتم‌ها و محدود کردن دامنه ارتعاشات، تعداد حالت‌های در دسترس برای فونون‌ها را محدود می‌کند.

شکل ٥ تغییرات ضریب انبساط حرارتی (α) را نسبت به دما در فشارهای مختلف به تصویر می‌کشد. در دماهای پایین، α به سرعت افزایش می‌یابد، که به افزایش شدت ارتعاشات شبکه و در نتیجه افزایش فاصله تعادلی بین اتم‌ها مربوط می‌شود. در دماهای بالا، α به مقدار نسبتاً ثابتی می‌رسد که نشان‌دهنده اشباع دامنه ارتعاشات است. افزایش فشار باعث کاهش چشمگیر مقدار α می‌شود، زیرا فشار دامنه ارتعاشات اتمی را محدود کرده و حرکت ارتعاشی را سخت‌تر می‌کند. این تغییرات دقیقاً قابل توجیه با مدل‌های فونونی و رفتار غیرخطی نیروهای بین‌اتمی در شبکه بلوری است.



شکل ٥ : ضریب انبساط حرارتی CoVSb برحسب دما در فشارهای مختلف

شکل ٦ نمایی جامع از تغییرات انرژی داخلی(U) ، ظرفیت گرمایی (C_v)، انرژی آزاد فونونی (F) و آنتروپی (S) را بر حسب دما ارائه می‌دهد



شکل ٦ : نمودار های ترمودینامیکی ترکیب CoVSb

مطابق نمودار، انرژی داخلی با افزایش دما افزایش می‌یابد، که ناشی از افزایش انرژی ارتعاشی فونون‌ها است. آنتروپی نیز با دما افزایش یافته و منعکس‌کننده افزایش بی‌نظمی و همینطور افزایش تعداد حالت‌های میکروسکوپی ممکن در سیستم است. در مقابل، انرژی آزاد فونونی با افزایش دما کاهش می‌یابد؛ زیرا بخش بزرگی از انرژی ورودی، به افزایش بی‌نظمی و برانگیختگی فونون‌ها اختصاص

می‌یابد، که کاهش انرژی آزاد را به دنبال دارد. ظرفیت گرمایی نیز مطابق انتظار در دماهای پایین به طور سریع افزایش یافته و در دماهای بالا به مقدار ثابتی دولون–پتی نزدیک می‌شود. این تغییرات به خوبی با مدل‌های فونونی استاندارد مانند مدل دبای و مدل اینشتین قابل تبیین هستند.

نتیجه گیری

نتایج نشان می‌دهد که ترکیب نیمه‌هوسلر CoVSb دارای ساختار پایدار، رفتار نیمه‌فلزی وابسته به اسپین و گاف انرژی قابل‌توجه در حالت اسپین پایین است. تحلیل ساختار نواری و چگالی حالات تأکید می‌کند که هیبریداسیون اوربیتال‌های Co و Sb نقش تعیین‌کننده‌ای در شکل‌گیری گاف انرژی دارد. از سوی دیگر، تحلیل خواص ترمودینامیکی نشان داد که پارامترهایی چون ظرفیت گرمایی، آنتروپی و ضریب انبساط حرارتی به‌طور معناداری با دما و فشار تغییر می‌کنند، که این موضوع با مدل‌های فونونی استاندارد سازگار است. فشار موجب افزایش سختی شبکه (از طریق افزایش دمای دیبای) و کاهش نوسانات فونونی می‌شود، در حالی که دما تمایل به افزایش بی‌نظمی و گسترش شبکه دارد. این ویژگی‌ها ترکیب CoVSb را به ماده‌ای مناسب در حوزه‌های اسپینترونیک و مواد با خواص حرارتی مهندسی‌شده تبدیل می‌کند.

مرجع‌ها

[1] T. Graf, C. Felser, S. S. P. Parkin; “Simple rules for the understanding of Heusler compounds”; Prog. Solid State Chem., 39, No. 1 (2020) 1–50.

[2] S. Chadov, X. Qi, J. Kübler, G. H. Fecher, C. Felser, S. C. Zhang; “Tunable multifunctional topological insulators in ternary Heusler compounds”; Nature Materials, 9, (2020) 541–545.

[3] M. Meinert; “Electronic and magnetic structure of Co-based Heusler compounds”; Phys. Rev. B, 102, No. 1 (2020) 014420.

[4] J. Ma et al.; “Computational Investigation of Half-Heusler Compounds for Spintronics Applications”; arXiv preprint arXiv:1610.02444 (2020).

[5] J. Nag et al.; “CoFeVSb: A Promising Candidate for Spin Valve and Thermoelectric Applications”; arXiv preprint arXiv:2111.14081 (2021).

[6] O. T. Uto et al.; “Electronic, Structural, Mechanical, and Thermodynamic Properties of CoYSb (Y = Cr, Mo, W) Half-Heusler Compounds as Potential Spintronic materials”; Solids, 3, No. 1 (2022)

[7] H. Yu, Y. Zhang, Z. Lin, S. Chen, X. Wang; “Enhanced thermoelectric performance in Co-based Heusler alloys”; J. Mater. Chem. C, 11, (2023) 512–520.

[8] F. M. Schindler et al.; “Topological thermoelectrics in CoVSb and related half-Heuslers”; Adv. Mater., 34, No. 5 (2022) 2107935.

مدلسازی ساختار بلوری و پاسخ اپتیکی ترکیب CoVSb با استفاده از تقریب‌های تبادل- همبستگی GGA و mBJ

بهاری، عسل[۱]؛ اکبری، حسین*[۱]؛ حاجی زاده، مائده[۱]؛ ندائی-شکرآب، بشیر[۱]

[۱]گروه فیزیک، واحد اردبیل، دانشگاه آزاد اسلامی، اردبیل، ایران

چکیده

در این پژوهش، خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی ترکیب نیمه‌هویسلر CoVSb با استفاده از محاسبات مبتنی بر نظریه تابع چگالی و به کارگیری تقریب‌های GGA و mBJ مورد بررسی قرار گرفت. ساختار بلوری ترکیب با گروه فضایی (F-43m) ۲۱۶ مدل‌سازی شده و با برازش معادله حالت مورناگون، پارامترهای ساختاری از جمله ثابت شبکه، مدول حجمی و مشتق مدول حجمی تعیین گردید. نتایج چگالی حالات کلی و جزئی نشان دادند که ترکیب دارای گاف انرژی غیرمستقیم در حدود ۱.۲ eV است که تقریب mBJ مقدار بزرگ‌تری را پیش‌بینی می‌کند. بررسی رفتار اپتیکی ترکیب آشکار ساخت، تقریب mBJ در پیش‌بینی پاسخ نوری، انرژی‌های پلاسمونی و ویژگی‌های بین‌نواری دقت بالاتری دارد

واژگان کلیدی: *نیمه‌هویسلر، نظریه تابع چگالی، تقریب mBJ و GGA، خواص اپتیکی، گاف انرژی*

Modeling the Crystal Structure and Optical Response of CoVSb Compound Using GGA and mBJ Exchange–Correlation Approximations

Bahari, Asal[1]; Akbari, Hossein[1]; Hajizadeh, Maede[1]; Nedaei-Shakarab, Bashir[1]

[1] Department of Physics, Ard.C., Islamic Azad University, Ardabil, Iran

Abstract

The structural, electronic, and optical properties of the half-Heusler compound CoVSb were studied using DFT with GGA and mBJ exchange-correlation approximations. The crystal structure (space group 216, F-43m) was modeled, and structural parameters were obtained via the Murnaghan equation of state. DOS analysis indicated an indirect band gap of ~1.2 eV, with mBJ predicting a larger value. Optical results showed that mBJ provides more accurate predictions of interband transitions and plasmonic energies, confirming its advantage over GGA in describing the optical behavior of CoVSb.

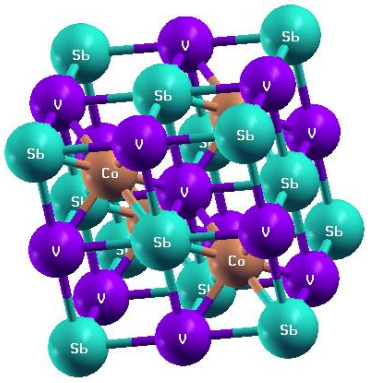
Keywords*: Half-Heusler, Density Functional Theory (DFT), mBJ and GGA approximations, optical properties,*

مقدمه

ترکیبات نیمه هویسلر به عنوان یکی از مواد پیشرفته در حوزه فیزیک ماده چگال و مهندسی مواد، به دلیل پایداری حرارتی بالا، استحکام مکانیکی، خواص الکترونیکی متنوع، کاربردهای گسترده‌ای در ترموالکتریک، اسپینترونیک، و ذخیره‌سازی انرژی پیدا کرده‌اند. این ترکیبات با فرمول XYZ تعریف می‌شوند که در آن X و Y فلزات واسطه و Z عنصری از بلوک P جدول تناوبی است [۳-۱]. در میان این ترکیبات، CoVSb به دلیل ویژگی‌های الکترونی و ترموالکتریکی خاص خود، توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است [۵-۴]. این ترکیب نه‌تنها به‌عنوان یک نیمه‌رسانای بالقوه در فناوری‌های ترموالکتریک مطرح است، بلکه مطالعه دقیق آن می‌تواند مسیرهای جدیدی را برای بهبود عملکرد مواد در کاربردهای مرتبط با انرژی باز کند [۸-۶]. در این پژوهش محاسبات در چارچوب نظریه تابع چگالی، کد WIEN2k و پتانسیل کامل انجام شده است. برای در نظر گرفتن اثرات تبادل-همبستگی، از تقریب GGA به همراه mBJ بهره گرفته شد. برای بهینه‌سازی ساختار و تعیین ثابت شبکه، مش نقاط k=۱۰۰۰۰ در ناحیه اول بریلوئن در نظر گرفته شد. مقدار RK_{max} برابر ۷ و همگرایی بار، e ۰.۰۰۰۱ در نظر گرفته شدند. علاوه بر این، به‌منظور دقت بیشتر، جداسازی انرژی بین حالت‌های ظرفیت و هسته برابر با Ry ۶.۰- ریدبرگ تنظیم گردید.

نتایج و بحث

ساختار بلوری ترکیب CoVSb با گروه فضایی (F-۴۳m) ۲۱۶ در شکل (۱) نمایش داده شده است.



شکل ۱ : ساختار کریستالی ترکیب CoVSb

نمودار انرژی - حجم ترکیب شامل نکات بسیار مهمی نظیر ثابت شبکه، مدول حجمی و مشتق مدول حجمی می باشد. خواص ساختاری ترکیب با برازش معادله حالت مورناگون بدست می آید:

$$E = E_0 + V\frac{B_0}{B_0^{'}}\left[\frac{\left(\frac{V_0}{V}\right)^{B^{'}}}{B_0^{'}-1}+1\right]-\frac{B_0V_0}{B_0^{'}-1} \qquad (1)$$

در این معادله V_0 حجم تعادلی، E_0 انرژی حالت پایه در دما و فشار صفر، B_0 مدول حجمی و B' مشتق مدول حجمی است. از کمینه این نمودار، می توان پارامترهای جدول (۱) را بدست آورد.

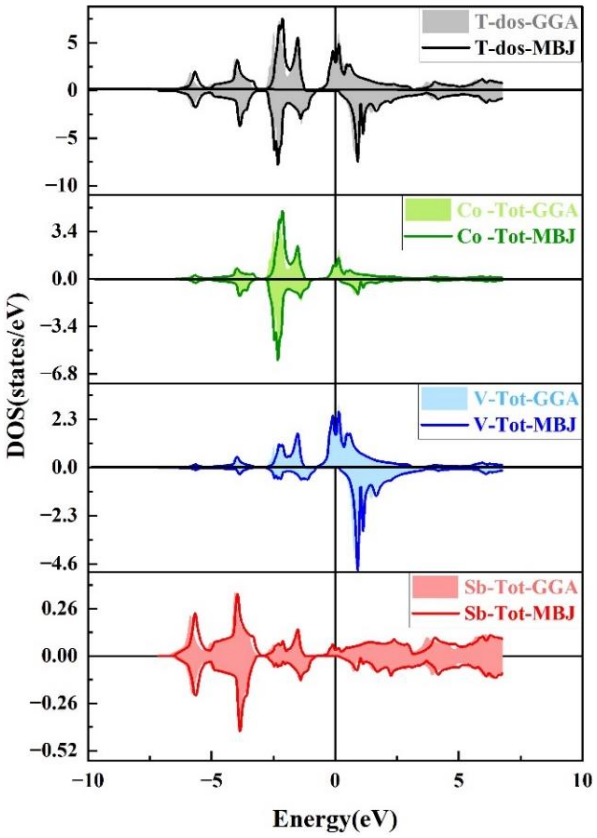
جدول ۱ : پارامترهای بهینه ساختار CoVSb

شبکه ثابت (Å)	تعادلی انرژی (Ry)	مدول مشتق حجمی	حجمی مدول (GPa)	اولیه حجم (Å³)
5.8078	-17652.691813	6.3551	151.1501	330.5014

مدول حجمی عکس تراکم پذیری و معیاری از سختی بلور است، هرچه مدول حجمی یک بلور بیشتر باشد، آن بلور تراکم پذیری کمتری خواهد داشت و در نتیجه استحکام بلور بیشتر است.

شکل (۲) چگالی حالات کلی (T-DOS) و جزئی (P-DOS) ترکیب CoVSbرا نشان می دهد که با دو تقریب GGA و mBJ محاسبه شده است. با بررسی چگالی حالات کلی(T-DOS)، مشاهده می‌شود که در اسپین پایین در نزدیکی سطح فرمی، گاف انرژی در حدود ۱.۲

eV ایجاد شده است. این گاف انرژی با تقریب mBJ مقدار بزرگ‌تری را پیش‌بینی می‌کنند. منشاء گاف انرژی عمدتاً ناشی از کاهش چگالی حالات در اطراف سطح فرمی در ترکیب عناصر فلز Co و V است.

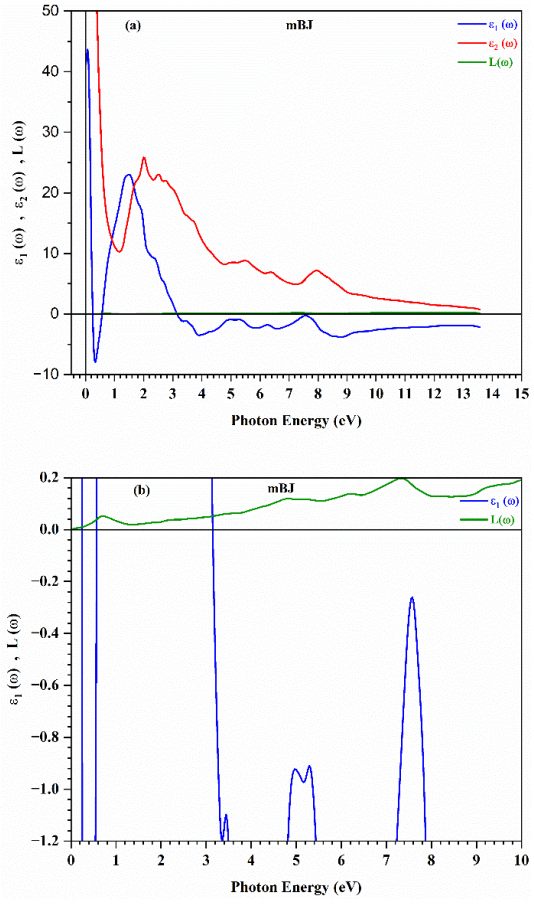


شکل ۲ : چگالی حالات ترکیب CoVSb در تقریب های GGA و mBJ

بر اساس چگالی حالت جزئی، اتم کبالت (Co) سهم غالب در تشکیل گاف انرژی دارد؛ چراکه در اطراف سطح فرمی چگالی حالت اسپینی آن کاهش چشمگیری دارد. اتم Co با ساختار الکترونی $3d^7 4s^2$ اوربیتال‌های d پرشده‌ایی در محدوده انرژی نزدیک به سطح فرمی دارد که به صورت مستقیم در ایجاد گاف نقش دارند، همچنین پیک‌هایی در محدوده انرژی مشابه برای اتم V مشاهده می‌شود بیانگر هیبریداسیون Co(3d) ↔ V(3d) است. با وجود اینکه چگالی حالت مربوط به Sb در نزدیکی سطح فرمی تقریباً صفر است، این اتم نیز نقش مهم و غیرمستقیمی در تشکیل ساختار باند ایفا می‌کند:

اوربیتال‌های p-Sb (بویژه 5p) در انرژی‌های پایین‌تر با اوربیتال‌های dفلزات وارد هیبریداسیون p–d می‌شوند. این هیبریداسیون در ایجاد پهنای باند ظرفیت نقش داشته و به تفکیک باندها کمک می‌کند.

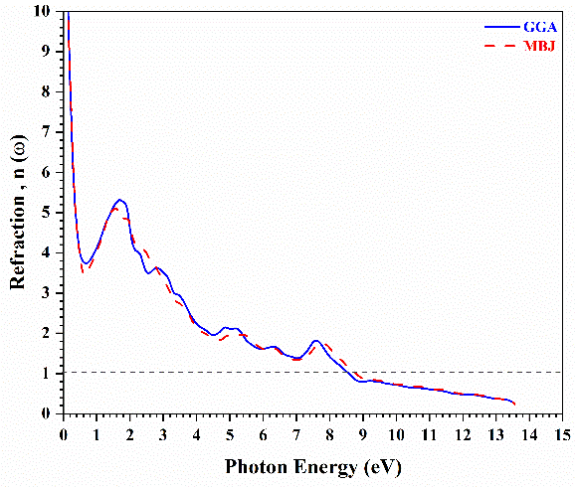
تابع دی‌الکتریک، پاسخ یک ماده به موج الکترومغناطیسی است. این تابع کمیتی مختلط به‌صورت $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ می باشد؛ که در آن، $\varepsilon_1(\omega)$ سهم حقیقی و $\varepsilon_2(\omega)$ سهم موهومی هستند. در این بخش مطابق با شکل (۳a-۳b)، تغییرات قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک و همچنین تابع اتلاف انرژی L(ω) ترکیب CoVSb بر اساس نتایج حاصل از تقریب‌هایGGA و mBJ مورد تحلیل و مقایسه قرار گرفته‌اند. (نمودار تقریب GGA بدلیل محدودیت صفحات مقاله نمایش داده نشده است).



شکل ۳ : تابع دی الکتریک و اتلاف انرژی ترکیب CoVSb با تقریب mBJ

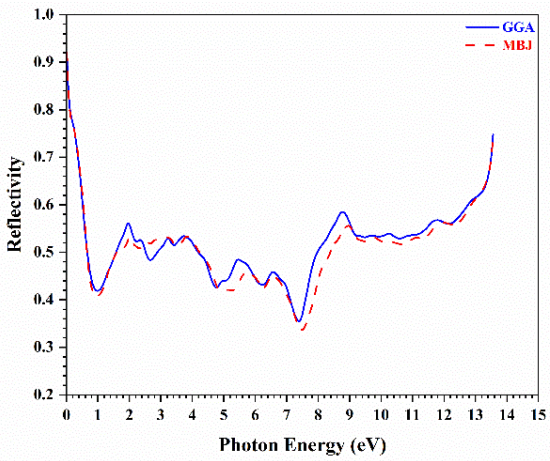
در انرژی‌های پایین، $\varepsilon_1(\omega)$ مقادیر منفی و $\varepsilon_2(\omega)$ مقادیر مثبت دارد. مقادیر منفی $\varepsilon_1(\omega)$ نشان‌دهنده ماهیت فلزی ترکیب و مشخصه‌های انتقال درون نواری در فلزات است که ناشی از مکانیزم الکترون‌های آزاد است این رفتار در تقریب mBJ بارزتر از GGA است، در هر دو تقریب، ریشه‌های تابع $\varepsilon_1(\omega)$ در نقاط خاصی ظاهر می‌شوند (ریشه اول در ۰.۲۳ eV به صفر می‌رسد) که متناظر با قله‌های تابع اتلاف انرژی L(ω) هستند (شکل۳b)، و این نقاط به عنوان انرژی‌های پلاسمونی ماده تفسیر می‌شوند. ریشه‌های بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک از لحاظ فیزیکی اهمیت زیادی دارند. به این مفهوم در بازه انرژی‌ایی که $\varepsilon_1(\omega)$ منفی است، امواج الکترومغناطیسی در ماده انتشار نمی یابند و فرآیندهای جذب و بازتاب غالب هستند، در حالیکه مقادیر مثبت برای $\varepsilon_2(\omega)$ معمولاً با انتقال‌های بین‌نواری الکترون‌های پیوندی مرتبط بوده و رفتاری مشابه یک دی‌الکتریک از خود نشان می‌دهد. شکل ۳b، تابع L(ω) را نشان می‌دهد که از رابطه $L(\omega) = \mathrm{Im}[-1/\varepsilon(\omega)]$ محاسبه شده است. در این نمودار، قله‌های مشخصی در هر دو تقریب در محدوده انرژی ۰.۲۳ eV، ۰.۵۰ eV، ۳.۵ eV، ۴.۸ eV و ۷.۵ eV دیده می‌شوند. محل قله‌ها با انرژی‌هایی که $\varepsilon_1(\omega)$ به صفر می‌رسد در شکل (۳a) تطابق دارد و این تطابق، صحت تفسیر انرژی پلاسمون‌ها را تأیید می‌کند. شدت قله‌ها در تقریب mBJ اندکی بیشتر است که نشان دهنده پاسخ پویاتر تقریب mBJ به تحریکات الکترومغناطیسی است.

در شکل ٤، ضریب شکست n(ω) ترکیب CoVSb تحت تقریب های GGA و mBJ مورد بررسی قرار گرفته است.



شکل ٤ : ضریب شکست ترکیب CoVSb با تقریب GGA و mBJ

در انرژی‌های پایین، مقدار n(ω) بالا بوده که به‌دلیل حضور الکترون‌های آزاد است. با افزایش انرژی، n(ω) کاهش یافته و در انرژی نزدیک به پلاسمون حجمی (محدوده۸ eV)، به کمترین مقدار می‌رسد. تطابق این رفتار با محل قله تابع L(ω) در شکل (۳b)، تأییدی بر نقش نوسانات جمعی الکترون‌ها در پاسخ اپتیکی سیستم است. در تقریب mBJ، مکان و دامنه تغییرات n(ω) با دقت بیشتری به بازه‌های فیزیکی مشاهده شده در محاسبات اپتیکی نزدیک‌است. در شکل ۵، بازتابندگی ترکیب CoVSb به‌عنوان تابعی از انرژی فوتون نشان داده شده است.



شکل ۵ : بازتاب ترکیب CoVSb با تقریب GGA و mBJ

نمودار بیانگر این است که در انرژی‌های پایین، ماده تقریباً بازتابنده کامل است. با افزایش انرژی، بازتاب کاهش می‌یابد این کاهش بازتاب در تقریب mBJ، تندتر و محل افت آن به انرژی بالاتری منتقل شده است، که می‌تواند ناشی از بهبود موقعیت نوارها و فاصله باند نوری در این تقریب باشد.

در نهایت، مروری بر همبستگی میان خواص اپتیکی مختلف نشان می‌دهد چگونه تغییرات در یک تابع، رفتار سایر خواص نوری را تحت تأثیر قرار می‌دهد. این همبستگی، تصویری جامع از پاسخ اپتیکی ترکیب CoVSb تحت دو تقریب GGA و mBJ را فراهم می‌سازد. در مجموع، تقریب mBJ نسبت به GGA نتایج دقیق‌تر و سازگارتر با واقعیت تجربی ارائه می‌دهد، به‌ویژه در تعیین انرژی‌های پلاسمونی و پیش‌بینی رفتار بازتاب و عبور نوری در نواحی انرژی متوسط و بالا. این یافته‌ها می‌توانند مبنایی برای طراحی مواد اپتوالکترونیکی و کاربردهای مرتبط قرار گیرند.

نتیجه گیری

نتایج

حاصل از بررسی ترکیب CoVSb در چارچوب نظریه تابع چگالی و با استفاده از تقریب‌های GGA و mBJ نشان می‌دهد که این ترکیب نیمه‌هویسلر دارای پایداری ساختاری مطلوب، مدول حجمی بالا و گاف انرژی قابل توجهی است که آن را برای کاربردهای ترموالکتریک و اپتوالکترونیک مناسب می‌سازد. تحلیل دقیق چگالی حالات کلی و جزئی نشان داد که هیبریداسیون میان اوربیتال‌های d فلزات Co و V با اوربیتال‌های p عنصر Sb نقش کلیدی در شکل‌گیری باند انرژی دارد. همچنین، بررسی خواص اپتیکی نشان داد که تقریب mBJ نه‌تنها پیش‌بینی بهتری از گاف انرژی ارائه می‌دهد، بلکه رفتار دی‌الکتریک، نقاط پلاسمونی و ضریب شکست را با دقت بیشتری مدل‌سازی می‌کند. این مطالعه اهمیت انتخاب تقریب مناسب در محاسبات نظری و پتانسیل بالای CoVSb برای استفاده در فناوری‌های نوین را برجسته می‌سازد.

مرجع‌ها

[1] T. Graf, C. Felser, S. S. P. Parkin; “Simple rules for the understanding of Heusler compounds”; Prog. Solid State Chem., 39, No. 1 (2020) 1–50.

[2] S. Chadov, X. Qi, J. Kübler, G. H. Fecher, C. Felser, S. C. Zhang; “Tunable multifunctional topological insulators in ternary Heusler compounds”; Nature Materials, 9, (2020) 541–545.

[3] M. Meinert; “Electronic and magnetic structure of Co-based Heusler compounds”; Phys. Rev. B, 102, No. 1 (2020) 014420.

[4] J. Ma et al.; “Computational Investigation of Half-Heusler Compounds for Spintronics Applications”; arXiv preprint arXiv:1610.02444 (2020).

[5] J. Nag et al.; “CoFeVSb: A Promising Candidate for Spin Valve and Thermoelectric Applications”; arXiv preprint arXiv:2111.14081 (2021).

[6] O. T. Uto et al.; “Electronic, Structural, Mechanical, and Thermodynamic Properties of CoYSb (Y = Cr, Mo, W) Half-Heusler Compounds as Potential Spintronic materials”; Solids, 3, No. 1 (2022)

[7] H. Yu, Y. Zhang, Z. Lin, S. Chen, X. Wang; “Enhanced thermoelectric performance in Co-based Heusler alloys”; J. Mater. Chem. C, 11, (2023) 512–520.

[8] F. M. Schindler et al.; “Topological thermoelectrics in CoVSb and related half-Heuslers”; Adv. Mater., 34, No. 5 (2022) 2107935.

بررسی تاثیر دوپینگ فسفر بر خواص اپتیکی وساختاری لایه های نازک دی سولفید تنگستن سنتز شده به روش رسوب دهی بخار شیمیایی

رحمانی، الهام[۱]؛ ریحانی، علی[۱]؛ خانلری،محمدرضا[۱]؛ مرتضوی، سیده زهرا[۱و۲]؛ محمدی، محمدرضا[۳]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه بین المللی امام خمینی قزوین، قزوین

[۲] گروه فیزیک دانشگاه صنعتی امیرکبیر ، تهران

[۳] گروه فیزیک دانشگاه سیستان و بلوچستان ، زاهدان

چکیده

در سال های اخیر سنتز وآلایش لایه های نازک دی سولفید تنگستن(WS2) به علت مزایای فراوان آنها مورد توجه قرار گرفته است. در این پژوهش ، لایه های نازک WS2 و WS2 دوپینگ شده بافسفرروی زیرلایه های SiO2 با استفاده از کلرید سدیم وگاز هیدروژن به عنوان کاتالیزور، با روش رسوب دهی بخار شیمیایی رشد داده شده اند. تصاویر میکروسکوپی و میکروسکوپ الکترونی روبشی کیفیت بالا، یکنواختی و پیوستگی و ساختار مثلثی لایه های نازک را نشان دادند. طیف XRD وجود فسفر درشبکه بلوری را نشان دادو اینکه صفحات WS2 دارای رشد ترجیحی در راستای (۰ ۰ ۲) می باشند. حضور پیک واحد و بلند در طیف فوتولومینسانس تعداد لایه های کم وکیفیت بالای نانوساختارها را تایید می کند. همچنین آنالیز ها نشان دادند که دوپینگ فسفرویژگی های ساختاری و اپتیکی WS2 راتغییر می دهند. طیف جذب نیز تغییرات مکان پیک های جذب را براثر دوپینگ فسفر نشان داد.

واژگان کلیدی: *لایه های نازک، دی سولفید تنگستن، دوپینگ فسفر، طیف فوتولومینسانس، رسوب دهی بخار شیمیایی*

The effect of phosphorus doping on the optical and structural properties of WS_2 few-layers prepared by CVD

Rahmani, Elham[1]; Reyhani, Ali[1] ; Khanlary, Mohammad Reza[1]; Mortazavi, Seyedeh Zahra[1,2]; Mohammadi, Mohammad Reza[3]

[1] *Physics Dept., Faculty of Science, Imam Khomeini International University, P.O. Box 34149-16818, Qazvin, Iran*

[2] *Physics Department, Amirkabir University of Technology, P. O. Box 15875-4413, Tehran, Iran*

[3] *Department of Physics, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, 98167-45845, Iran*

Abstract

In recent years, the synthesis and doping of tungsten disulfide (WS_2) thin films have attracted attention due to their numerous advantages. In this study, WS_2 thin films and phosphorus-doped WS_2 were grown on SiO_2 substrates using chemical vapor deposition with sodium chloride and hydrogen gas as catalysts. Optical microscopy and scanning electron microscopy images demonstrated the High-quality, uniformity, continuity, and triangular structure of the

thin films. XRD spectra confirmed the presence of phosphorus in the crystal lattice and showed that the WS_2 planes exhibit preferential growth along the (0 0 2) direction. The presence of a sharp and strong peak in the photoluminescence spectrum confirmed a low number of layers and high quality of the nanostructures. Additionally, analyses showed that phosphorus doping alters the structural and optical properties of WS_2. The absorption spectra also indicated shifts in the positions of absorption peaks resulting from phosphorus doping.

***Keywords**: thin film, tungsten disulfide, phosphorus doping, photoluminescence spectrum, chemical vapor deposition*

مقدمه

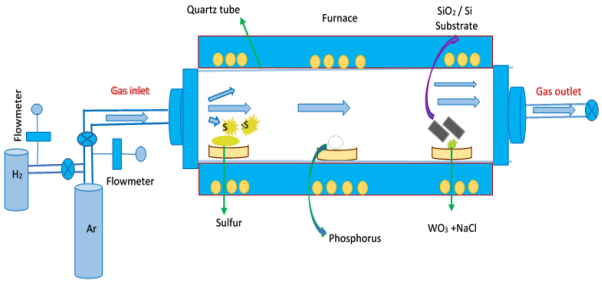
درسال های اخیر دی کالکوژنیدهای فلزات انتقالی (TMDCs) به دلیل خصوصیات فیزیکی نوین مانند تبدیل باندگپ غیرمستقیم به مستقیم، جفت شدگی اسپین مدارقوی واثرهای اکسیتونی غنی زمانی که ضخامت آنها به تک لایه تغییر می کند توجه زیادی رابه خود جلب کرده اند [۱]. به عنوان یک نمونه ازTMDCs ، تک لایه ی دی سولفیدتنگستن (WS_2) دارای تابش فوتولومینسانس قوی تری در دمای اتاق وجدایش اسپین بزرگتر نسبت به دی سولفید مولیبدن (MoS_2) است که آن را به یکی از امیدوارکننده ترین گزینه ها برای کاربردهای الکترونیکی ونوری تبدیل کرده است [۲]. علاوه براین ، WS_2 دارای ساختار لایه ای شبیه گرافیت می باشد که این ویژگی تعدادزیادی سایت های فعال فراهم می کند و درنتیجه فعالیت کاتالیزوری را تسریع می کند [۳]. WS_2 حجیم دارای یک نوار انرژی غیرمستقیم به مقدار تقریبا ۱/٤ الکترون ولت است ، درحالی که لایه منفرد انرژی مستقیمی به مقدار۱/۹ الکترون ولت را نشان می دهد [٤]. دوپینگ بافسفر(P) سبب می شود که فسفر در نانولایه S-W-S گنجانده شود، که سدانتقال الکترونیکی را کاهش می دهد وسبب افزایش تعداد حامل های بار(الکترون ها) در WS_2 می شود

که به بهبود هدایت الکتریکی آن منجرخواهد شد وهمچنین، درواقع فسفر سایت های فعال جدید ایجاد می کندکه فعالیت کاتالیستی را افزایش می دهد [٥]. روش رسوب دهی بخارشیمیایی(CVD) به علت کارایی بالا، هزینه کم وکیفیت خوب سنتز یکی از تکنیک های امیدوارکننده برای تهیه در مقیاس بزرگ به حساب می آید. برای کاهش دمای سنتز لایه های نازک WS_2 ازکلریدسدیم (NaCl) و برای دستیابی به کیفیت بالا از گاز هیدروژن ترکیب شده با آرگون در حینCVD استفاده می شود [٦, ۷]. دراین کار ما ساختارهای لایه ای WS_2 با کیفیت بالا(یکنواخت و پیوسته)، که اکثر قسمت های آن لایه های کمتر دیده شده است را با استفاده ازNaCl به عنوان یک کاتالیزور رشدوCVD سنتز کرده ایم. البته لایه های نازک WS_2 دوپینگ شده با فسفرنیز از طریق فرایند CVD یک مرحله ای باتبخیر همزمان WO_3، گوگرد و فسفر تولید شدند.

مواد و روش ها

سیلیکون نوع p با ابعاد $۱۰cm^2$ ×۲/٥ به عنوان زیرلایه استفاده شد. SiO_2 به ضخامت ٦۰ نانومتر روی زیرلایه مورد نظر لایه نشانی شد. سنتز لایه های نازک WS_2 دوپینگ شده بافسفر توسط کوره الکتریکی که یک لوله کوارتز باقطرcm٥ درون آن به عنوان محفظه واکنش قرارداشت با سه ناحیه دمایی متفاوت به روش CVD انجام شد. گوگرد (۲۰۰۰میلی گرم)، فسفر(۱۰یا ۲۰ میلی گرم) و WO_3(۱۰۰میلی گرم) ترکیب شده با NaCl (٦میلی گرم)، هرکدام دربوته هایی ازجنس آلومینا ریخته شدند وسپس به ترتیب درناحیه های اول ، دوم وسوم کوره گذاشته شدند. دوزیرلایه روی بوته مربوط به WO_3 ترکیب شده با NaCl قرار داده شدند. برای خارج کردن گازهای داخل محفظه، گازآرگون به مدت ۳۰ دقیقه وارد محفظه شد. سپس دمای ناحیه اول به ۲۲۰°C افزایش یافت درحالی

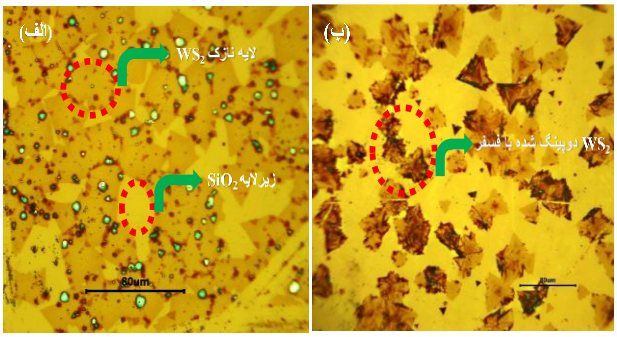
که ناحیه وسط به ۲۱۰°C وناحیه سوم به۸۵۰°C رسید. کوره طوری تنظیم شد که بعد ۲۰ دقیقه هر سه ناحیه به دماهای مورد نظر رسیدند. سنتز لایه های نازک WS_2 دوپینگ شده با فسفردرفضای گاز آرگون بافلوی ۳۰ Sccm وگاز هیدروژن با فلوی ۱۵ Sccm به مدت ۱۰ دقیقه به طول انجامید. درنهایت بعدازخاموش کردن کوره، ۵دقیقه گاز آرگون وارد کوره شد. بعد از فرایند سنتز اجازه داده شد تا کوره به آرامی به دمای محیط برسد. پس از رسیدن به دمای محیط نمونه ها از محفظه خارج شدند. مشاهدات اولیه نشان دهنده تشکیل ساختار لایه های مورد نظر باضخامت بسیار کم می باشند. طرحواره دستگاه مورد استفاده در این پژوهش در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱: طرحواره دستگاه سنتزWS_2 دوپینگ شده با فسفربه روش رسوبدهی بخار شیمیایی.

نتایج و بحث

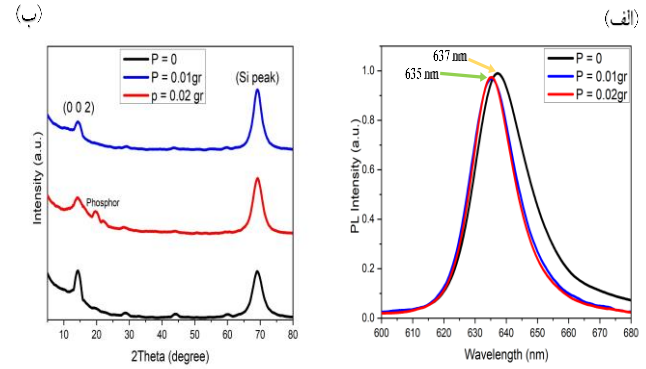
تصاویر میکروسکوپی WS_2 وWS_2 دوپینگ شده با فسفربه ترتیب در شکل۲الف و۲ب نشان داده شده اند. ساختار مثلثی درتصاویر قابل مشاهده است که رشد موفق لایه های نازک را نشان می دهد. همچنین شکل ۲الف رشد WS_2 با تعداد لایه های کم به صورت یکنواخت، پیوسته و با کیفیت بالا تایید می کند. البته با توجه به شکل۲ب دوپینگ فسفر یکنواختی ساختار را کاهش می دهد.



شکل۲: تصایر میکروسکوپی (الف) WS_2 و (ب) WS_2 دوپینگ شده بافسفر.

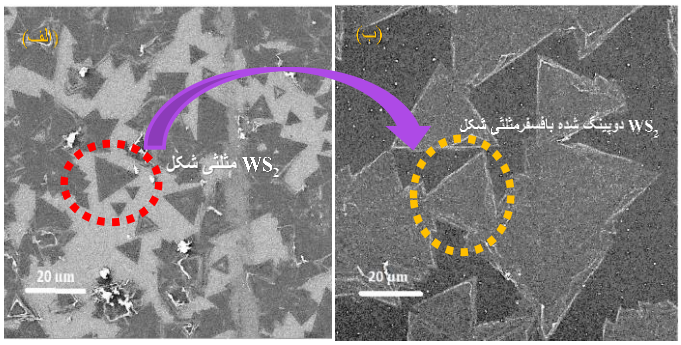
باتوجه به شکل۳الف، در طیف سنجی فوتولومینسانس لایه های نازک سنتزشده، یک پیک بلند و واحد در حدود ۶۳۷ نانومتر برای WS_2 و۶۳۵ نانومتر برای WS_2 دوپینگ شده بافسفر مشاهده می شود. این طول موج ها تقریبا با مقادیر گزارش شده برای تک لایه و چندلایه WS_2 سنتز شده با CVD مطابقت دارند [۸]. همچنین انتقال از باندگپ غیرمستقیم به مستقیم کاملا واضح می باشد. علاوه براین مقدار پهنای پیک در نصف بیشینه (FWHM) کمتر از ۲۴/۸ نانومتر کیفیت بالای نانوساختار رانشان می دهد که براساس طیف فوتولومینسانس FWHM مربوط بهWS_2 با P=0، ۲۲/۳ نانومتر ، با P= 0.01gr ، ۱۹.۲ نانومتر و P= 0.02gr، ۱۸/۱ نانومتر می باشد [۹-۱۱]. برای بررسی ساختارکریستالی از آنالیز XRD استفاده کردیم. شکل ۳ب ، طیف XRD مربوط به نمونه ها، وجود فسفردر شبکه بلوری را نشان می دهد. به دلیل شعاع های اتمی مشابه گوگرد و فسفر، این دوپینگ تغییرات بسیارکمی در پارامتر شبکه ایجاد می کند. پیک های مشاهده شده در حدود° ۱۴/۴۳ با صفحه (۰ ۰ ۲) ساختارهای WS_2 مطابقت دارند. یک پیک در° ۱۹/۷ =۲Θبه فسفر نسبت داده می شود [۱۲]. کاهش شدت پیک درحدود ۱۴/۴۳در مقایسه با شدت پیک سیلیکون و همچنین افزایش FWHM پس از دوپینگ فسفر، کاهش همگنی ساختارWS_2 را نشان می دهد.

شکل۴ مورفولوژی سطحی نانوساختار هارا نشان می دهد. تصاویر



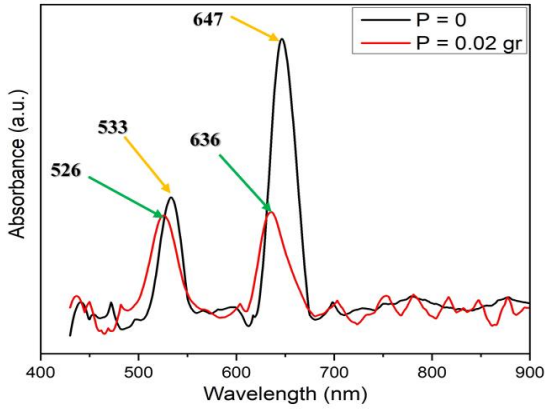
شکل۳: الف) طیف فوتولومینسانس و ب) طیف XRD مربوط به WS_2 بامقادیرفسفر متفاوت.

میکروسکوپ الکترونی روبشی SEM نشان می دهند که هم WS_2وهم WS_2 دوپینگ شده بافسفر به طور یکنواخت روی زیزلایه رشد کرده اند و ساختار مثلثی دارند [۱۳]. علاوه بر این، تصاویر SEMنشان می‌دهند که اندازه مثلث‌ها بعد از دوپینگ با فسفر به‌طور خفیفی افزایش می‌یابد، که ممکن است سطح ویژه بالاتری را فراهم کرده و مکان‌های واکنشی بیشتری برای کاتالیز ارائه دهد [۱۴].



شکل۴: تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از الف) WS_2 و ب)WS_2 دوپینگ شده بافسفر۰.۰۱ گرم .

طیف جذب نورمرئی-فرابنفش درمحدوده ۴۰۰-۹۰۰ نانومتر برای بررسی خواص اپتیکی نانوساختارها به کاربرده شد. باتوجه به شکل۵، برایWS_2 ، پیک های جذب در ۵۳۳ نانومتر و ۶۴۷ نانومتر قرارداردند که به ترتیب مربوط به انتقال از نوار ظرفیت به نوار رسانش وانتقال نوع d-d درمرکزمنطقه بریلوئن می باشند [۱۵, ۱۶]. با دوپینگ فسفر ، این پیک های جذب یک جابجایی به سمت طول موج های آبی دارندکه پیک ها به ۵۲۶ نانومتر و ۶۳۶ نانومتر منتقل شدند. این جابجایی که به محصورکردن کوانتومی مربوط **است،**



شکل۵: طیف جذب مرئی-فرابنفشWS_2 وWS_2 دوپینگ شده بافسفر.

نشان دهنده تغییر ساختار الکترونیکی درWS_2 دوپینگ شده با فسفر می باشد [۱۷]. علاوه براین با دوپینگ فسفر شدت پیک ها به طور قابل توجهی کاهش می یابند که این کاهش را می توان به احتمال انتقال پایین تر به دلیل وجود اتم های فسفر در شبکه نسبت داد.

نتیجه گیری

WS_2 به عنوان یکی از گزینه های امیدوارکننده برای کاربردهای الکترونیکی و نوری شناخته می شود. در این پژوهش تکنیک های جدید برای سنتز WS_2 دوپینگ شده با فسفر با کیفیت بالا به روش رسوبدهی بخار شیمیایی وبه صورت تک مرحله ای به کار برده شد. نتایج، نشان دهنده ساختارهای یکنواخت و پیوسته ای است که الگوی مثلثی را نشان می دهند. پیک بلند و واحد در طیف فوتولومینسانس در ۶۳۷ نانومتر برای WS_2 و۶۳۵ نانومتر برای

WS_2 دوپینگ شده با فسفر با FWHM کمتر از ۲۴/۸ نانومتر کیفیت بالای نانوساختار هارا تایید می کند. همچنین آنالیزهای XRD و تصاویر الکترونی روبشی به نشان دادن منسجم بودن ساختار نانوساختارها و اثر دوپینگ بر مورفولوژی آنها کمک کرد. در نهایت تغییرات قابل توجهی در طیف جذب نور مرئی–فرابنفش WS_2 دوپینگ شده با فسفرکه ناشی از تغییر در ساختار الکترونیکی این نانوساختارها است، مشاهده شده است. این نتایج نشان دهنده پتانسیل بالای WS_2 دوپینگ شده با فسفر در زمینه های کاربردی مختلف از جمله الکترونیک و کاتالیست ها می باشد.

مرجع‌ها

[۱]J. Shi, et al., Physical properties and potential applications of two-dimensional metallic transition metal dichalcogenides. Coordination Chemistry Reviews, 2018. **376**: p. 1-19.

[۲]N. Peimyoo, et al., Nonblinking, Intense Two-Dimensional Light Emitter: Monolayer WS_2 Triangles. ACS Nano, 2013. **7**(12): p. 10985-10994.

[۳]K. Maslana, et al., High catalytic performance of tungsten disulphide rodes in oxygen evolution reactions in alkaline solutions. Applied Catalysis B: Environmental, 2020. **266**: p. 118575.

[۴]H. Song, et al., Modification of WS_2 nanosheets with controllable layers via oxygen ion irradiation. Applied Surface Science, 2018. **439**: p. 240-245.

[۵]D. Paudel, et al., Fe and P Doped 1 T- Phase Enriched WS_2 3D-Dendritic Nanostructures for Efficient Overall Water Splitting. Applied Catalysis B: Environmental, 2021. **286**: p. 119897.

[۶]B. Shi, et al., High-efficiency synthesis of large-area monolayer WS_2 crystals on SiO_2/Si substrate via NaCl-assisted atmospheric pressure chemical vapor deposition. Applied Surface Science, 2020. **533**: p. 147479.

[۷]X. Li, et al., Role of hydrogen in the chemical vapor deposition growth of MoS_2 atomic layers. Nanoscale, 2015. **7**(18): p. 8398-8404.

[۸]B. Madenoğlu, et al., CVD growth of monolayer WS_2 through controlled seed formation and vapor density. Materials Science in Semiconductor Processing, 2019. **93**: p. 158-163.

[۹]S.Z.Mortazavi,etal.,Micro-Photoluminescence spectroscopy of two distinct types of WS_2 monolayers using fs-Ti: Sapphire laser under vacuum and ambient conditions and multivariate calibration models. Journal of Luminescence, 2023. **263**: p. 119988.

[۱۰]K. Li and W. Wang, Effects of substrates on the optical properties of monolayer WS_2. Journal of Crystal Growth, 2020. **540**: p. 125645.

[۱۱]K.M. McCreary, et al., Synthesis of Large-Area WS_2 monolayers with Exceptional Photoluminescence. Sci Rep, 2016. **6**: p. 19159.

[۱۲]V. Lisitsyn, et al., Nanodefects in YAG:Ce-Based Phosphor Microcrystals. Crystals, 2019. **9**: p. 476.

[۱۳]N. Stand, C.D. Mendoza, and F.L. Freire, Synthesis of WS2 by Chemical Vapor Deposition: Role of the Alumina Crucible. Crystals, 2022. **12**(6): p. 835.

[۱۴]F. Wang, et al., Phosphorus incorporation activates the basal plane of tungsten disulfide for efficient hydrogen evolution catalysis. Nano Research, 2022. **15**(4): p. 2855-2861.

[۱۵]A. Ghorai, et al., Highly Luminescent WS_2 Quantum Dots/ZnO Heterojunctions for Light Emitting Devices. ACS Appl Mater Interfaces, 2017. **9**(1): p. 558-565.

[۱۶]a. Bora Seo, Gwan Yeong Jung,b, Jae Hyung Kim,b Tae Joo Shin,c Hu Young Jeong,c Sang and b.a.S.H.J. Kyu Kwak Electronic Supplementary Information (ESI) for Preferential Horizontal Growth of Tungsten Sulfide on Carbon and Insight into Active Sulfur Site for the Hydrogen Evolution Reaction

.۲۰ .۲۰۱۸

[۱۷]S.J. Hazarika and D. Mohanta, Exfoliated WS_2 nanosheets: optical, photocatalytic and nitrogen-adsorption/desorption characteristics. Bulletin of Materials Science, 2018. **41**(6): p. 163.

بهبود خواص اپتوالکترونیکی در لایه‌های پروسکایتی با استفاده از لایه‌های پوششی دوبعدی

صمدپور، محمود[1]

[1] *دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی*

چکیده

در سالهای اخیر ترکیب لایه‌های پروسکایت دوبعدی با پروسکایت‌های فلز-هالید سه‌بعدی متداول، به عنوان رویکردی نویدبخش برای بهبود عملکرد دستگاه‌های اپتوالکترونیکی مطرح شده است. در این مطالعه، انواع کاتیون‌های آلی به منظور ایجاد لایه‌های سطحی دوبعدی بر روی فیلم‌های پروسکایت سه بعدی مورد بررسی قرار گرفته اند. از طریق تحلیل ویژگی‌های جذب نوری و طیف فتولومینسانس در نمونه‌های تازه‌ساخته و نمونه‌های قرار گرفته در شرایط محیطی، تفاوت‌های که با گذر زمان در ویژگیهای اپتیکی و الکتریکی نمونه ها ایجاد میشود شناسایی شدند. یافته‌های ما بر نقش حیاتی لایه های پوششی دوبعدی در کاهش مسیرهای بازترکیب غیرتابشی تأکید دارد، که نقشی کلیدی در تعیین بازدهی ادوات اپتوالکترونیکی مبتنی بر پروسکایت، از جمله سلول‌های خورشیدی و دیودهای نشردهنده نور ایفا می‌کنند. این تحقیق، درک عمیق‌تری از تأثیر فرآیند پیرشدگی برویژگیهای اپتوالکترونیکی میکرون مقیاس در سیستم‌های ترکیبی پروسکایت دوبعدی /سه بعدی ارائه می‌دهد و راهکارهایی برای بهبود دوام و عملکرد آن‌ها فراهم می‌آورد.

واژگان کلیدی: *پروسکایت، دوبعدی، فتولومینسانس*

Improving the optoelectronical properties in perovskite films by two dimensional capping layers

Mahmoud Samadpour [1]

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

Abstract

The combination of two-dimensional (2D) perovskite layers with conventional three-dimensional (3D) metal halide perovskites has emerged as a promising strategy to enhance device performance in optoelectronics. In this study, we explore various organic cations to fabricate 2D surface layers on top of 3D perovskite films. Through a comparative analysis of the optical absorption characteristics and photoluminescence (PL) mapping in both freshly and aged samples, we identify clear differences that evolve over time. Our findings highlight the essential function of the 2D overlayer in minimizing non-radiative recombination pathways, which play a critical role in determining the efficiency of perovskite-based devices, including photovoltaic cells and light-emitting diodes. This work offers a deeper understanding of how aging influences the micron scale optoelectronic landscape of hybrid 3D/2D perovskite systems, informing future strategies for improving their durability and performance.

مقدمه

در سال‌های اخیر، دستگاه‌های نیمه‌هادی مبتنی بر پروسکایت، از جمله سلول‌های خورشیدی، دیودهای ساطع‌کننده نور و آشکارسازهای نوری، به دلیل ویژگی‌های نوری و الکتریکی منحصربه‌فرد لایه‌های پروسکایتی، توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند. با این حال، با وجود پیشرفت‌های چشمگیر، یکی از موانع اصلی در مسیر تجاری‌سازی این فناوری‌ها، ناپایداری ذاتی مواد پروسکایتی است. این ناپایداری عمدتاً ناشی از تخریب در حضور رطوبت، مهاجرت یونی و جدایش فازی در ترکیب‌های هالیدی مخلوط است. از این‌رو، تلاش‌های گسترده‌ای برای بهبود پایداری بلندمدت این دستگاه‌ها از طریق مهندسی ترکیب، بهینه‌سازی ساختار، و غیرفعال سازی نقصها صورت گرفته است. به عنوان مثال، استفاده از ترکیب‌های چندکاتیونی توانسته است از جدایش فازی جلوگیری کرده و بلورینگی فیلم‌ها را بهبود دهد، که به پایداری بیشتر سلول‌های خورشیدی پروسکایتی منجر می‌شود [۱]. همچنین، تنظیم نسبت هالیدها، مانند نسبت Br/I ، می‌تواند به طور مؤثری مهاجرت یون‌ها و جدایش فازی را مهار کند. در میان این راهکارها، استفاده از لایه‌های پوششی پروسکایتی با بُعد پایین به عنوان روشی مؤثر برای بهبود هم‌زمان پایداری و خواص اپتوالکترونیکی شناخته شده است.

برای نمونه، تسای و همکاران نشان دادند که پروسکایت‌های شبه دوبعدی نقش سد رطوبتی را ایفا کرده و عمر عملیاتی سلول‌های خورشیدی را افزایش می‌دهند [۲]. در مطالعه‌ای دیگر، کان و همکاران خواص ساختاری و نوری پروسکایت‌های دیون–ژاکوبسن و رادلسدن–پوپر را که به روش اسلات–دای پوشش داده شده بودند، بررسی کردند و پایداری نوری بالاتری را در ساختارهای دیون–ژاکوبسن گزارش کردند [۳]. پژوهش‌های بیشتر نیز نشان داده‌اند که لایه‌های کم بعدی نقش کلیدی در کاهش مهاجرت یونی ایفا کرده و با کاهش هیسترزیس، پایداری عملکردی دستگاه را تحت تابش مداوم بهبود می‌بخشند. مطالعاتی که با استفاده از فتولومینسانس و فتولومینسانس وابسته به زمان انجام شده‌اند، کاهش بازترکیب و افزایش طول عمر حامل‌های بار را در حضور لایه‌های کم بعدی نشان داده‌اند. این بهبودها، با وجود ناهمگنی‌های ساختاری و ترکیبی قابل توجه در لایه‌های کم بعدی، اهمیت تحلیل‌های ساختاری و اپتوالکترونیکی در مقیاسهای کوچک نانو و میکرو را در فیلم‌های پروسکایتی برجسته می‌سازد.

در پاسخ به این نیاز، تلاش‌های پژوهشی زیادی به‌کار گرفته شده‌اند. به عنوان مثال، توزیع باندگپ جانبی در فیلم $CsPbIBr_2$ از طریق تصویربرداری کاتدولومینسانس طیفی و فضایی تعیین شد. به‌تازگی، مجموعه‌ای از ابزارهای میکروسکوپی چندحالته معرفی شده‌اند که توزیع‌های میکرومتری ترکیب، بازترکیب و انتقال بار را آشکار کرده و نقش تعیین‌کننده‌ی آن‌ها را در عملکرد و پایداری دستگاه‌های پروسکایتی نشان داده‌اند.

با وجود این پیشرفت‌ها، بررسی خواص موضعی پروسکایت‌های با بُعد پایین، به‌ویژه تحت شرایط پیرشدگی، هنوز به‌طور کامل انجام نشده است. در این مطالعه، مجموعه‌ای از کاتیون‌های آلی برای ساخت لایه‌های کم بعدی بررسی شده و تأثیر آن‌ها از طریق روش‌های مشخصه‌یابی در مقیاس میکرونی تحلیل شده است. به‌ویژه، از نقشه‌برداری نورتابی (PL Mapping) برای پیگیری تغییرات موضعی در رفتار اپتوالکترونیکی استفاده شده که الگوهای تخریب و توزیع عیوب را آشکار می‌سازد؛ مواردی که در اندازه‌گیری‌های مرسوم اغلب نادیده گرفته می‌شوند. نتایج ما نشان می‌دهد که افزودن لایه‌های کم بعدی موجب افزایش شدت نورتابی و افزایش طول عمر حامل‌ها می‌شود. این یافته‌ها شواهد مستقیمی از نقش لایه‌های پوششی دوبعدی در تنظیم بی‌نظمی انرژی و پایداری پروسکایت در مقیاس میکرونی ارائه می‌دهد و می تواند

راهنمایی برای طراحی مواد پایدارتر و دستگاه‌های کارآمدتر در آینده باشد.

بخش تجربی

لایه‌نشانی لایه پروسکایت

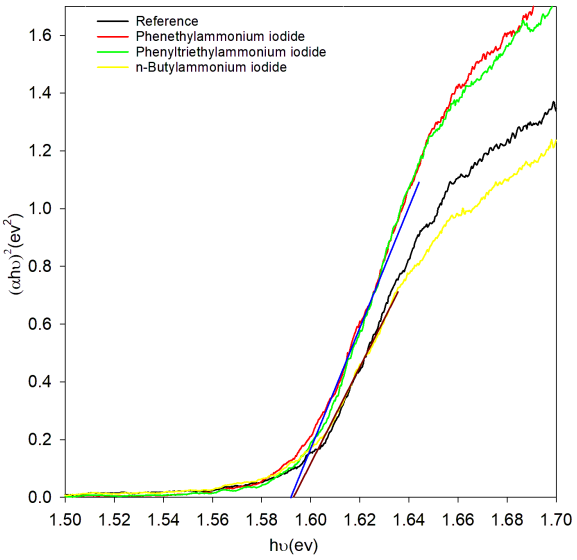
در اینجا، یک لایه پروسکایت با ترکیب کاتیونی مخلوط $Cs_{0.08}FA_{0.8}MA_{0.12}Pb(I_{0.88}Br_{0.12})_3$ روی زیرلایه‌های شیشه‌ای پوشش داده شده با اکسید قلع آلاییده با فلوئور (FTO) لایه‌نشانی شد [٤]. زیرلایه‌های FTO ابتدا با محلول رقیق‌شده هیپوکلریت سدیم به‌طور کامل شسته شدند. سپس فرایند تمیزکاری آلتراسونیک در آب دی‌یونیزه، استون، ایزوپروپانول و اتانول، هر کدام به مدت ۱۰ دقیقه انجام شد. پس از شست‌وشو، زیرلایه‌ها به مدت یک ساعت در دمای ۵۰۰ درجه سانتی‌گراد حرارت داده شدند تا هرگونه ناخالصی آلی باقی‌مانده حذف شود. محلول حاوی پیش ماده های پروسکایت (٤٥ میکرولیتر) با استفاده از فرآیند لایه نشانی چرخشی دومرحله‌ای روی لایه FTO آماده‌شده اعمال شد: (i) ۱۰۰۰ دور در دقیقه به مدت ۱۰ ثانیه و (ii) ٦۰۰۰ دور در دقیقه به مدت ۲۵ ثانیه. در مرحله دوم، ۲۵۰ میکرولیتر کلروبنزن به‌عنوان ضدحلال، ۵ ثانیه پیش از پایان چرخش، روی فیلم چکانده شد. فیلم نهایی به مدت ٤٥ دقیقه در دمای ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد پخت حرارتی شد و لایه پروسکایت قهوه‌ای تیره حاصل شد. برای لایه‌نشانی لایه‌های دوبعدی، محلول پیش ماده های فنیل اتیل آمونیوم یداید، فنیل تری اتیل آمونیوم یداید و بوتیل آمونیوم یداید با غلظت ۵ میلی‌گرم بر میلی‌لیتر در ایزوپروپانول الکل، به میزان ۱۰۰ میکرولیتر، از طریق لایه نشانی چرخشی با سرعت ٤۰۰۰ دور در دقیقه به مدت ۳۰ ثانیه، روی لایه پروسکایت سه‌بعدی اعمال شد. فیلم حاصل به مدت ۱۰ دقیقه در دمای ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد پخت حرارتی گردید.

روش‌های مشخصه‌یابی

طیف‌های فتوولومینسانس در حالت پایدار با استفاده از یک طیف‌سنج با وضوح بالا (Kymera 193i)، ساخت شرکت Oxford Instruments و یک لیزر با طول موج ٤٧٣ نانومتر (Coherent OBIS LX 473 nm) به‌عنوان منبع تحریک اندازه‌گیری شدند. طیف جذب فیلم‌ها نیز با استفاده از همان طیف‌سنج و یک منبع نور پایدار تنگستن–هالوژن (SLS201L) از شرکت Thorlabsبه‌دست آمد. نقشه‌های فتوولومینسانس با استفاده از دستگاه HORIBA LabRAm و با منبع تحریک ٤۰۵ نانومتر ثبت شدند. برای تحلیل پایداری محیطی، از اتاقک شرایط اقلیمی BINDER، مدل KMF 240 جهت شبیه‌سازی شرایط محیطی خاص (دما و رطوبت نسبی) استفاده گردید.

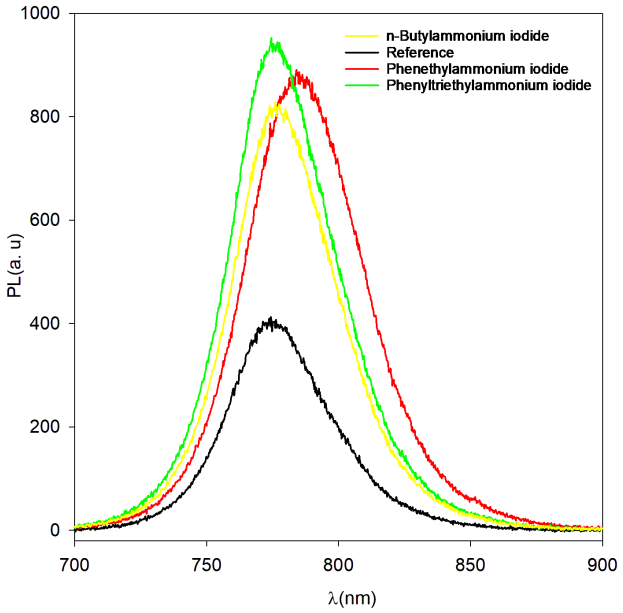
نتایج

به منظور بررسی تاثیر لایه های دوبعدی بر خواص نوری لایه های سه بعدی، اندازه‌گیری طیف جذب فرابنفش–مرئی و فتوولومینسانس روی لایه‌های پروسکایت سه بعدی و ترکیبی سه بعدی/ دوبعدی انجام شد. شکل ۱ نمودار Tauc به دست آمده از طیف جذب فرابنفش–مرئی لایه‌های سه بعدی و لایه های سه بعدی/ دوبعدی را نشان می دهد. مطابق شکل، تفاوت اندکی در جذب اپتیکی لایه‌های سه بعدی/ دوبعدی نسبت به لایه های سه بعدی $Cs_{0.08}FA_{0.8}MA_{0.12}Pb(I_{0.88}Br_{0.12})_3$ مشاهده می‌شود. همچنین طبق نمودار Tauc گاف نواری ساختارها تقریباً برابر و در حدود ۱٫۵۹ الکترون‌ولت هستند.

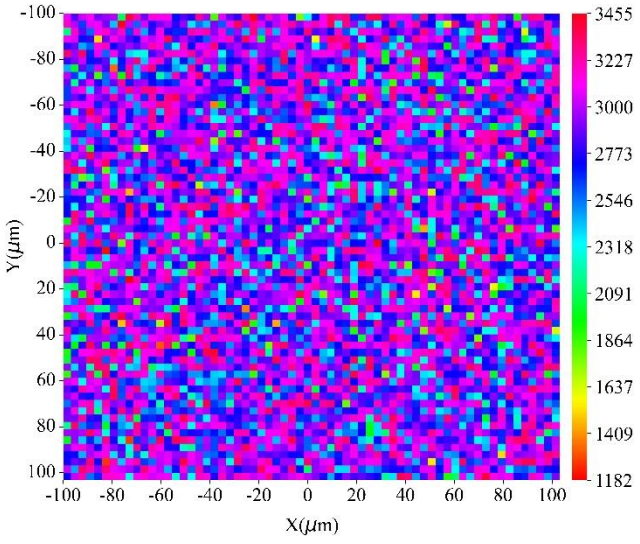


شکل ۱: نمودار Tauc به دست آمده از طیف جذب فرابنفش–مرئی لایه‌های سه بعدی و لایه های سه بعدی/ دوبعدی

شکل دو طیف فتولومینسانس نمونه های مرجع و نمونه های پوشش داده شده با لایه های دوبعدی را نشان میدهد. همان طور که مشاهده می شود شدت پیک‌های PL پس از پوشش دهی لایه‌های کم بعدی به‌طور قابل توجهی افزایش یافته که می‌تواند ناشی از بهبود بلورینگی لایه‌ها مطابق آنالیز پراش اشعه ایکس می باشد، (طیف پراش در اینجا نیامده است). برای بررسی اثر ساختارهای کم‌بعدی بر پایداری لایه‌های سه بعدی، ساختارهای سه و دو بعدی روی زیرلایه FTO تهیه شده و تحت شرایط ۷۰٪ رطوبت نسبی و دمای ۳۵ درجه سلسیوس به مدت یک هفته در تاریکی قرار داده شدند. نقشه‌های PL از نمونه‌های تازه و قرار گرفته تحت شرایط محیطی در ابعاد ۲۰۰×۲۰۰ میکرون (۴۰۹۶ پیکسل) ثبت شده و طیف‌های PL مربوطه بررسی گردید (شکل ۳ یک تصویر نوعی از طیف های به دست آمده است). نتایج بررسیها نشان داد که شدت پیک‌های PL پس از پیرسازی در ساختارهای سه بعدی به شدت کاهش یافته و پهنا در نصف پیک مربوط به حداکثر شدت (FWHM) به‌طور محسوسی افزایش یافته است. در مقابل، لایه‌های کم بعدی که روی لایه‌های سه بعدی نشانده شده‌اند باعث حفظ شدت و FWHM مشابه با نمونه‌های تازه شده‌اند.



شکل ۲: طیف فتولومینسانس نمونه های مرجع و نمونه های پوشش داده شده با لایه های دوبعدی



شکل ۳: نمونه نقشه شدت فتولومینسانس از نمونه ها، میله نشانگر شدت نسبی نورتابی میباشد.

برای تحلیل اثر پیرسازی بر تغییرات تراز شبه‌فرمی، از معادله Lasher-Stern-Würfel (LSW) استفاده شد:

$$I_{PL}(E) = \frac{1}{4\pi^2\hbar^3C^2}a(E)E^2\left[\exp\left(\frac{E-\Delta\mu}{K_BT}\right)-1\right]^{-1}$$

.

نتایج نشان داد که میزان تغییرات تراز شبه فرمی در نمونه‌های دارای لایه کم بعدی تقریباً نصف مقدار لایه‌های سه بعدی خالص است که نشان‌دهنده بهبود یکنواختی دینامیک حامل‌های بار و غیرفعال سازی نقص‌ها توسط لایه‌های کم‌بعدی است. همچنین تحلیل آماری روی تصاویر میکروسکوپ نیروی اتمی از لایه‌های پروسکایت سه بعدی و سه بعدی/دوبعدی نشان داد که هیچ گونه همبستگی مکانی بین PL و توپوگرافی وجود ندارد. این نتایج نقش واضح لایه‌های کم بعدی در کاهش نوسانات موضعی تراز شبه‌فرمی ،مستقل از ویژگی‌های توپوگرافی را تأیید می‌کند.

نتیجه گیری

در این مطالعه، ما به بررسی انواع کاتیون‌های آلی برای ساخت لایه‌های پروسکایت دوبعدی بر روی لایه‌های پروسکایت سه‌کاتیونه با هالیدهای ترکیبی پرداختیم. این لایه‌های دوبعدی منجر به بهبود تبلور و افزایش شدت PL در لایه‌های پروسکایت شدند، در حالی که طیف جذب نوری بدون تغییر باقی ماند. اندازه‌گیری‌ها نشان داد که طول عمر حامل‌های بار در ساختارهای سه بعدی /دوبعدی نسبت به لایه‌های پروسکایت اولیه افزایش یافته است، که نقش لایه‌های دوبعدی را در کاهش تلفات غیرتابشی نشان می‌دهد. بررسی تراز شبه فرمی در مقیاس میکرون نشان داد که لایه پروسکایت کم‌بعدی، یکنواختی دینامیک حامل‌های بار را تحت شرایط پیرشدگی بهبود می‌بخشد. در مجموع، نتایج ما بینش‌های ارزشمندی در زمینه توسعه مواد پایدار نوین برای کاربردهای عملی فراهم می‌کند.

مرجع‌ها

[۱] Saliba, M., Matsui, T., Seo, J. Y., Domanski, K., Correa-Baena, J. P., Nazeeruddin, M. K., Grätzel, M. (2016). Cesium-containing triple cation perovskite solar cells: improved stability, reproducibility and high efficiency. *Energy & environmental science*, **9(6)**, 1989-1997.

[۲] Tsai, H., Nie, W., Blancon, J. C., Stoumpos, C. C., Asadpour, R., Harutyunyan, B., Mohite, A. D. (2016). High-efficiency two-dimensional Ruddlesden–Popper perovskite solar cells. *Nature*, **536**(7616), 312-316.

[۳] Sun, K., Guo, R., Liu, S., Guo, D., Jiang, X., Huber, L. F., Müller-Buschbaum, P. (2024). Deciphering Structure and Charge Carrier Behavior in Reduced-Dimensional Perovskites. *Advanced Functional Materials*, **34**(52), 2411153.

[۴] Samadpour, M., Golchini, A., Abdizadeh, K., Heydari, M., Forouzandeh, M., Saki, Z., Taghavinia, N. (2020). Modified antisolvent method for improving the performance and stability of triple-cation perovskite solar cells. *ACS omega*, **6**(1), 172-179.

گذار جایگزیدگی و پدیده های توپولوژیک در مدل اوبری-آندره

آهنگری رستمی، علی [۱]؛ پورانوری، محمد[۲] ؛صادقی، علی [۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی تهران، تهران

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه مازندران، بابلسر

چکیده

در این مطالعه، ما به بررسی سناریوهای مختلف از مدل غیر هرمیتی اوبری_آندره در یک بعد پرداختیم. نتایج در مورد گذار جایگزیدگی و گذار فاز توپولوژیک برای سناریوهای ارایه شده در بعضی موارد در هماهنگی و انطباق با جایگزیدگی اندرسون بوده است. اما بعضی نتایج جالب برای اولین بار در این مطالعه مشاهده شده است.

واژگان کلیدی: *جایگزیدگی اندرسون، مدل ابری_آندره، سیستم غیرهرمیتی، گذار فاز توپولوژیک، نرخ توزیع وارون، عدد چرخش.*

Localization Transition and Topological Phenomena in Non-Hermitian Aubry-Andr*é*′ Models

Ali Ahangari Rostami [1]; Mohammad Pouranvari[2]; Ali Sadeghi[1]

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

[2] *Department of Physics, University of Mazandaran, Babolsar*

Abstract

In this study, we investigated various scenarios of the non-Hermitian Aubry-André model in one dimension. The results regarding the localization transition and topological phase transition for the presented scenarios were, in some cases, in agreement with Anderson localization. However, some interesting results were observed for the first time in this study.

Keywords: *Anderson localization, Aubry-André model, non-Hermitian system, topological phase transition, inverse participation ratio, winding number*

مقدمه

جایگزیدگی اندرسون، مفهومی بنیادی در فیزیک ماده چگال می باشد که از زمان کار هوشمندانه اندرسون در سال ۱۹۵۸ به طور گسترده مورد مطالعه قرار گرفته است[1]. این پدیده چگونگی تأثیر بی‌نظمی بر ایجاد دو فاز متمایز متمرکز می‌شود: فاز گسترده و فاز جایگزیده، که بی‌نظمی تابع موج را به ناحیه‌ای کوچک محدود کرده و از انتقال کارآمد جلوگیری می‌کند. بُعد نقش کلیدی در جایگزیدگی اندرسون ایفا می‌کند. در سیستم-های یک‌بعدی و دوبعدی، حتی بی‌نظمی بینهایت کوچک برای جایگزیدگی کامل ویژه‌حالتهای سامانه کافی است. برخی مدل‌های بی-

نظمی همبسته استثناهایی ایجاد می‌کنند که در آنها حالت‌های گسترده می‌توانند باقی بمانند[2,3,4,5]. نمونه بارز چنین مدل‌هایی، مدل اوبری‌آندره (AA) است که با اعمال مدولاسیون شبه‌دوره‌ای در انرژی برجایگاه یک هامیلتونی تنگ‌بست، در سیستم‌های دوره‌ای و کاملاً بی‌نظم در شبه‌بلورها، امکان وجود گذارهای جایگزیدگی در سیستم‌های یک بعدی را بررسی می‌کند[6]. در سالهای اخیر، علاقه به سیستم‌های کوانتومی غیرهرمیتی به دلیل توانایی‌شان در توصیف سیستم‌های کوانتومی باز واقعی، انتقال نامتقارن و تحول ورود–خروج ذره و انرژی به سیستمی که در برهم‌کنش با محیط می‌باشد در بین افراد زیادی افزایش یافته‌است[7,8,9]. گسترش غیرهرمیتی مدل اوبری–آندره با معرفی پدیده‌های نوظهوری مانند لبه‌های تحرک (نشانگر گذار بین حالت‌های جایگزیده و گسترده)، فازهای توپولوژیک جدیدی را بررسی و مطالعه می‌کند[10,11,12].

هدف اصلی این مطالعه، تبیین چگونگی تغییر گذارهای جایگزیدگی و ویژگی‌های توپولوژیک در سیستم‌های شبه‌دوره‌ای با در نظر گرفتن غیرهرمیتی بودن سیستم خواهد بود. ما به دنبال فهم ارتباط بین پتانسیل های برجایگاه مختلط، دامنه پرش نامتقارن و تأثیر آنها بر خواص جایگزیدگی و انتقال هستیم. تأثیر غیرهرمیتی بودن بر شبه‌بلورها در زمینه‌های مختلفی بررسی شده است. این پژوهش نیز پیامدهای مستقیمی برای فوتونیک، پردازش اطلاعات کوانتومی و مواد توپولوژیک دارد. در این کار، سه سناریوی کلیدی در مدل غیرهرمیتی AA را به‌طور سیستماتیک بررسی می‌کنیم: اولین سناریو، تأثیر پتانسیل برجایگاه مختلط است. اثرات پرش نامتقارن را در مورد دوم بررسی می‌کنیم. در سناریوی سوم، تأثیر ترکیبی آنها، که در آن پرش نامتقارن و انرژی برجایگاه مختلط همزیستی داشته و منجر به دینامیک انتقال پیچیده خواهند شد. یافته‌های ما نشان می‌دهند که غیرهرمیتی بودن، ویژگی‌های جایگزیدگی و فازهای توپولوژیک در مدل اوبری–آندره را به‌طور اساسی تغییر می‌دهد. این نتایج بینش عمیقی درباره سیستم‌های کوانتومی غیرهرمیتی ارائه داده و راه را برای پیاده‌سازی‌های تجربی در پلتفرم‌های فوتونیک و اتم‌های سرد هموار می‌کند.

مدل

در ابتدا به معرفی کلی مدل AA در سیستم‌های غیرهرمیتی یک بعدی می‌پردازیم که

$$H = -t\sum_{n}(c_{n+1}^{\dagger}c_n + H.C.) + \sum_{n}\lambda_n c_n^{\dagger}c_n \qquad (۱)$$

که در آن t دامنه پرش و $(c_n)c_n^{\dagger}$ نیز عملگرهای خلق و فنا می‌باشند. λ_n نیز پتانسیل برجایگاه شبکه است که در مدل AA به صورت زیر تعریف می شود:

$$\lambda_n = 2\lambda\cos(2\pi\beta n + \varphi) \qquad (۲)$$

λ دامنه پتانسیل و φ فاز سیستم و β نیز عددی گنگ است که اصولا برابر نسبت طلایی ($\frac{1+\sqrt{5}}{2}$) در نظر گرفته می‌شود. گذار فاز از حالت جایگزیده به حالت گسترده در مقادیر بحرانی $\lambda = 2t$ رخ خواهد داد. که در مورد $\lambda > 2t$ تمام حالات سیستم جایگزیده اند و در مورد $\lambda < 2t$ نیز تمام حالات سیستم گسترده خواهند بود.

گذار فاز توپولوژیک نیز ممکن است در هر یک از سه سناریو معرفی شده رخ دهد.

در سناریوی اول که پتانسیل برجایگاه مختلط است:

$$\boldsymbol{\lambda_n = 2i\lambda\cos(2\pi\beta n)} \qquad (۳)$$

جملات پرش هر جایگاه به چپ و راست به ترتیب با $t_L = te^{\delta}$ و $t_R = te^{-\delta}$ معرفی می شود. δ مقداری مشخص و غیرتصادفی است.

در سناریوی دوم نیز پتانسیل برجایگاه به صورت زیر خواهد بود:

$$\boldsymbol{\lambda_n = 2\lambda\cos(2\pi\beta n)} \qquad (۴)$$

و برای سناریوی سوم، که ترکیبی از تاثیرات پرش نامتقارن و پتانسیل برجایگاه مختلط است:

$$H = \sum_{n} -te^{-\delta}c_{n+1}^{\dagger}c_n - te^{\delta}c_n^{\dagger}c_{n+1} + 2\lambda\cos(2\pi\beta n + i\gamma)c_n^{\dagger}c_n \qquad (۵)$$

کمیت γ به عنوان فاز مختلط کننده پتانسیل برجایگاه معرفی می‌شود. هامیلتونی های غیرهرمیتی معرفی شده، دارای ویژه مقادیر مختلط و ویژه توابع چپ و راست هستند. اگر هر یک از هامیلتونی های بالا با تقارن های

پاریته و وارون زمانی (PT) جابجا شوند، ویژه مقادیر این پتانسیل های غیر هرمیتی، حقیقی خواهند بود.

روش ها

کمیت ها و مشخصه های زیادی برای مشاهده گذار جایگزیدگی و گذار فاز توپولوژیک در یک سیستم معرفی شده اند.

الف. یکی از مهمترین کمیت‌ها نرخ وارون توزیع(Inverse Participation Ratio) است.

$$\mathbf{IPR} = \sum_j |\langle j|\psi_m\rangle|^4 \qquad (۶)$$

که در آن

$$\mathrm{H}|\psi_\mathrm{m}\rangle = \mathrm{E_m}|\psi_\mathrm{m}\rangle \qquad (۷)$$

هرگاه IPR از مرتبه واحد یا نزدیک آن باشد سیستم جایگزیده است و هرگاه که IPR از مرتبه صفر یا نزدیک آن باشد، سیستم در حالت گسترده خواهد بود. برای بیشینه و کمینه IPR تعاریف زیر را در نظر می‌گیریم.

$$\max(\mathrm{IPR}) = \max_{j\in\{1,\dots,L\}}(\mathrm{IPR}_j) \qquad (۸)$$
$$\min(\mathrm{IPR}) = \min_{j\in\{1,\dots,L\}}(\mathrm{IPR}_j)$$

به طور حتم هرگاه بیشینه IPR از مقدار صفر شروع به افزایش کند و کمینه IPR نزدیک صفر باقی بماند، سیستم شروع به جایگزیده شدن خواهد کرد و بالعکس. اما در این مسیرجایگزیدگی، سیستم به ترتیب حالات گسترده، حالات بحرانی که هم شامل حالات گسترده و هم شامل حالات جایگزیده خواهد بود و در نهایت حالات جایگزیده را تجربه می کند و بالعکس.

ب. عدد چرخش (Winding Number) کمیتی است که با آن می توانیم گذار فاز توپوژیک سیستم را بررسی کنیم.

$$\mathrm{w} = \lim_{\mathrm{L}\to\infty}\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\,\theta\;\partial_\theta\log\left[\det\left(\mathrm{H}\left(\frac{\theta}{\mathrm{L}}\right)-\mathrm{E_B}\right)\right] \qquad (۹)$$

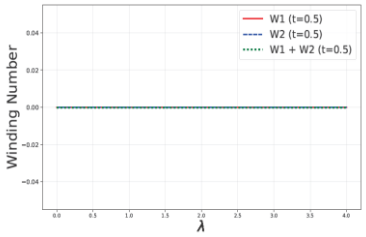
این کمیت، تعداد دورهایی که هر عضو از مجموعه طیف هامیلتونی حول پارامتری به نام انرژی پایه (E_B) می‌چرخد را محاسبه می‌کند.

اگر سیستم در فاز توپولوژیک نباشد، هیچ چرخشی صورت نمی‌گیرد و عدد چرخش برابر صفر خواهد شد. چنانچه سیستم در فاز توپولوژیک باشد عدد چرخش مقداری غیر صفر و صحیح خواهد بود. در این مطالعه، عدد چرخش برای هریک از سناریوهای سه گانه برای هامیلتونی معرفی شده، مورد بررسی قرار گرفته است.

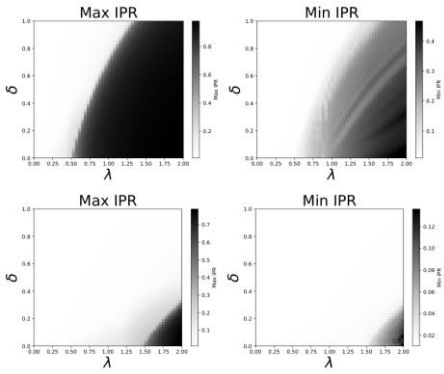
نتایج عددی

در این بخش، پارامترهای بیشینه و کمینه‌ی IPR و عدد چرخش را برای هر سه بخش از مدل معرفی شده نمایش می‌دهیم.

الف. پتانسیل برجایگاه مختلط

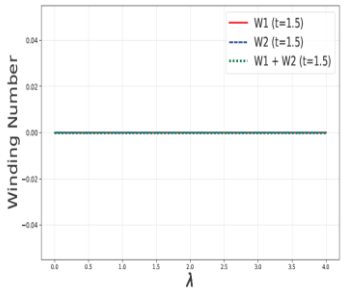


شکل ۱. این شکل عدد چرخش را برای اولین مورد از مدل رابطه(۳) نشان می دهد . به ازای دو مقدار ۳ و ۳- برای انرژی پایه و برای تعداد ۱۰۰۰ برجایگاه عدد چرخش رسم شده است.

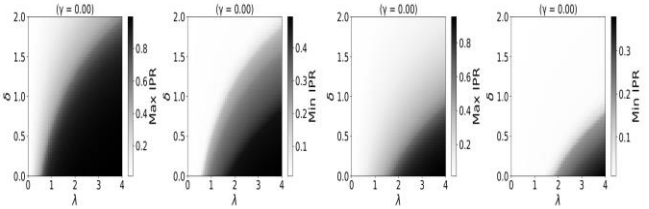


شکل۲. سطر اول به ازای مقدار t=0.5 بیشینه و کمینه IPR را برای دو پارامتر از هامیلتونی رابطه (۱) را نشان می‌دهد که تغییرات به وضوح گذار جایگزیدگی را نمایش می‌دهد. سطر دوم نیز به ازای مقدار t=1.5 رسم شده است.

ب. پرش نامتقارن:

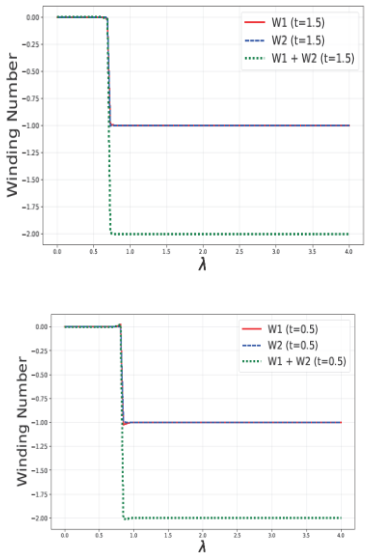


شکل۳. این شکل عدد چرخش را برای دومین مورد از مدل رابطه(٤) نشان می دهد عدد چرخش مقدار صفر دارد که مبین حالت غیر توپولوژیک برای آن است.

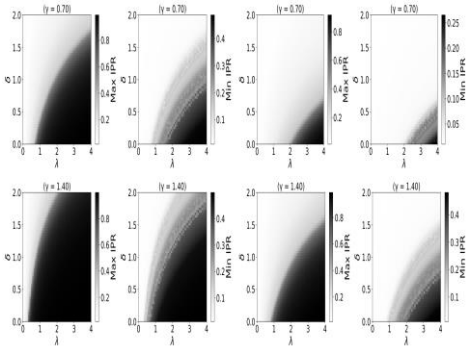


شکل ٤ بیشینه و کمینه IPR را برای دو مقدار متفاوت t=0.5 برای دو شکل سمت چپ و t=1.5برای دو شکل سمت راست نشان می‌دهد. جایگزیدگی در هر دو مورد برای سیستم حاصل می‌شود.

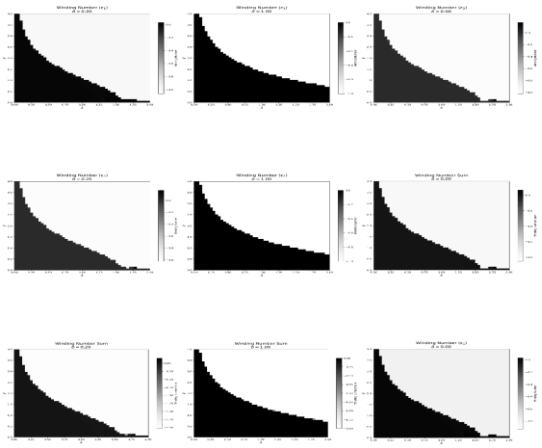
ج. پتانسیل مختلط برجایگاه و پرش نامتقارن



شکل ۵.نمودارهای بالا و پایین تغییرات عدد چرخش را در هر دو مقدار t=0.5 و t=1.5 را برای سناریوی سوم معادله(۵) نشان می‌دهد. تغییرات این پارامتر نشان دهنده وجود فاز توپولوژیک سیستم است.



شکل ٦.مقادیر کمینه و بیشینه IPR. را برای پارامترهای مختلفی از هامیلتونی سیستم نمایش می‌دهد. که تاثیر مقدار δبر رخداد گذار جایگزیدگی قابل توجه است.



شکل۷. عدد چرخش را برای پارامترهای مختلفی از هامیلتونی سیستم به ازای دو مقدار $t=0.5$, $t=1.5$ *نمایش می‌دهد. که تاثیر مقدار* δ *بر تغییر عدد چرخش و گذار فاز توپولوژیک قابل توجه است.*

نتیجه گیری

برای سه سناریوی متفاوت از مدل AA ارایه شده، گذار فاز اندرسون برای هر سه مشاهده می شود و تاثیر پارامتر δ بر نقاط بحرانی گذار فاز واضح است. اما گذار فاز توپولوژیک فقط در سناریوی سوم مشاهده می‌شود. این گذار فاز با تغییرات عدد چرخش برای مقادیر مختلف دامنه پرش ($t=0.5$, $t=1.5$) و به ازای پارامترهای هامیلتونی تبیین می‌شود.

مرجع‌ها

[1] P. W. Anderson, Absence of diffusion in certain random lattices, Phys. Rev. 109, 1492 (1958).

[2] T. Giamarchi and H. J. Schulz, Anderson localization and interactions in one-dimensional metals, Phys. Rev. B 37, 325 (1988).

[3] A. McGurn, K. Christensen, F. Mueller, and A. Maradudin, Anderson localization in one-dimensional randomly disordered optical systems that are periodic on average, Physical Review B 47, 13120 (1993).

[4] P. A. Lee and D. S. Fisher, Anderson localization in two dimensions, Phys. Rev. Lett. 47, 882 (1981).

[5] A. Furusaki, Anderson localization due to a random magnetic field in two dimensions, Physical review letters 82, 604 (1999).

[6] S. Aubry and G. André, Analyticity breaking and anderson localization in incommensurate lattices, (1980).

[7] J. Biddle and S. Das Sarma, Predicted mobility edges in one-dimensional incommensurate optical lattices: An exactly solvable model of anderson localization, Phys. Rev. Lett. 104, 070601 (2010).

[8] G. Roati, C. D'Errico, L. Fallani, M. Fattori, C. Fort, M. Zaccanti, G. Modugno, M. Modugno, and M. Inguscio, Anderson localization of a non-interacting bose–einstein condensate, Nature 453, 895 (2008).

[9] W. R. McGehee, S. S. Kondov, W. Xu, J. J. Zirbel, and B. DeMarco, Three-dimensional anderson localization in variable scale disorder, Phys. Rev. Lett. 111, 145303 (2013)

[10] W. Chen, S. Cheng, J. Lin, R. Asgari, and G. Xianlong, Breakdown of the correspondence between the real-complex and delocalization-localization transitions in non-hermitian quasicrystals, Phys. Rev. B 106, 144208 (2022).

[11] S. Longhi, Probing non-hermitian skin effect and nonbloch phase transitions, Phys. Rev. Res. 1, 023013 (2019).

[12] K. Kawabata, M. Sato, and K. Shiozaki, Higher-order non-hermitian skin effect, Phys. Rev. B 102, 205118 (2020).

[13] N. Okuma, K. Kawabata, K. Shiozaki, and M. Sato, Topological origin of non-hermitian skin effects, Phys. Rev. Lett. 124, 086801 (2020).

اثر میان لایه آلومینا به عنوان واسطه نوسانی در رسانش گرمایی فصل مشترک کاتد و جدا کننده در باتریهای لیتیومی

هادی زاده خیرخواه، عارفه السادات[۱]؛ اسفندیار، علی[2] ؛ اجتهادی، رضا[۲]

[۱] پژوهشکده جامع علوم و فناوری های همگرا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

چکیده

باتری های لیتیومی به دلیل کاربردهای گسترده ای که در دستگاه های الکترونیکی، خودروهای الکتریکی و سیستم های ذخیره سازی انرژی دارند، اهمیت زیادی پیدا کرده اند. یکی از چالش های اصلی در این باتری ها، مدیریت حرارتی آنها به ویژه در فصل مشترک کاتد و جداکننده است. در این مطالعه، به اثر نانولایه اکسید آلومینیوم (آلومینا) به عنوان واسطه نوسانی دربهبود رسانش گرمایی در فصل مشترک کاتد (اکسید لیتیوم کبالت) و جداکننده (پلی اتیلن آمورف) در باتری های لیتیومی با الکترولیت مایع به روش دینامیک مولکولی غیرتعادلی معکوس پرداخته خواهد شد. نتایج نشان میدهند که وجود یک میان لایه آلومینا با ضخامت ۱ نانومتر، رسانش گرمایی در فصل مشترک کاتد و جداکننده را حدود ۱۰۰٪ افزایش می دهد. برای شبیه سازی سیستم، از میدان نیروی CVFF استفاده شده و شبیه سازی ها با استفاده از بسته نرم افزری LAMMPS انجام گردیده است.

واژگان کلیدی: *باتری لیتیومی، کاتد، رسانش گرمایی، فصل مشترک، واسطه نوسانی، شبیه سازی دینامیک مولکولی*

Effect of Aluminum Oxide Interlayer on the Thermal Conductance at the Cathode-Separator Interface in Lithium-Ion Batteries

Hadizadeh Kheirkhah, Arefesadat[1]; Esfandiar, Ali[2]; Ejtehadi, Reza[2]

[1] *Inistitute for Convergence Science & Technology, Sharif University of Technology, Tehran*

[2] *Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran*

Abstract

Lithium-ion batteries (LIBs) have gained significant importance due to their widespread applications in electronic devices, electric vehicles, and energy storage systems. A major challenge in these batteries is thermal management, particularly at the cathode (lithium cobalt oxide, LCO)-separator (amorphous polyethylene) interface. This study investigates the effect of an aluminum oxide (alumina) nanolayer as an intermediate layer on enhancing thermal conductivity at this interface in liquid-electrolyte LIBs using reverse non-equilibrium molecular dynamics (RNEMD) simulations. The results reveal that a 1-nm-thick alumina interlayer improves the interfacial thermal conductivity by

approximately 100%. For the simulations, the CVFF (Consistent Valence Force Field) was employed, and all calculations were performed using the LAMMPS software package.

Keywords: *Lithium-ion battery, Cathode, Thermal conductivity, Interface, Vibrational Mediator, Molecular dynamics simulation*

مقدمه

باتری‌های لیتیوم-یونی به دلیل بازده بالا، چگالی انرژی مناسب و طول عمر سیکلی قابل قبول، به فناوری غالب در حوزه ذخیره سازی انرژی تبدیل شده‌اند. با وجود مزایای متعدد، یکی از چالش‌های اساسی این باتری‌ها افزایش دما حین کارکرد است. فرایند تبدیل انرژی الکتریکی به شیمیایی و برعکس باعث ایجاد گرما در سلول باتری می شود. واکنش های گرما زایی که در سلول انجام می شود موجب افزایش دمای سلول می شود. ازاین‌رو، توسعه راهکارهای مؤثر برای مدیریت حرارتی در باتری‌های لیتیوم-یونی به‌منظور افزایش ایمنی و بهبود عملکرد آن‌ها از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است.[۱,۲]

ویشواکارما[۱] و همکاران نشان دادند که مقاومت گرمایی کلی سلول بیشتر تحت تاثیر مقاومت گرمایی فصل مشترک فصل مشترک کاتد و جدا کننده است تا مقاومت گرمایی هر کدام از مواد تشکیل دهنده سلول باتری لیتیومی[۳]. آنها نشان دادند که مقاومت گرمایی در فصل مشترک کاتد و جدا کننده ۸۸ درصد از کل مقاومت گرمایی سلول را تشکیل می دهد و رسانش گرمایی ضعیف در فصل مشترک سلول باتری لیتیومی با وجود رسانش گرمایی بالای مواد تشکیل دهنده سلول موجب گرم شدن سلول باتری لیتیومی می شود. بنابراین پرداختن به فصل مشترک و افزایش رسانش گرمایی در فصل مشترک می تواند منجر به بهبود رسانش گرمایی در سلول باتری لیتیومی و بهبود عملکرد باتری لیتیومی شود. آنها علت این مقاومت گرمایی بالا در فصل مشترک را چسبندگی ضعیف بین کاتد و جدا کننده می دانند. در نتیجه به منظور بهبود رسانش گرمایی در فصل مشترک و کاهش مقاومت گرمایی باید بر روی فصل مشترک در سلول باتری لیتیومی متمرکز شد.

تحقیقات متعددی برای بهینه‌سازی فصل مشترک کاتد-الکترولیت با هدف بهبود افزایش رسانش گرمایی در فصل مشترک انجام گرفته است. یکی از رویکردهای مورد توجه در این زمینه، استفاده از لایه‌های خودآراسته[۲] (SAMs) است که به‌عنوان واسطه‌های نوسانی عمل کرده و برهم‌کنش‌های ارتعاشی میان مواد را کنترل می‌کنند. این لایه‌ها می‌توانند موجب افزایش رسانش گرمایی شوند. ویشواکارما و همکاران به طور تجربی از آمینو سیلان ها بر روی کاتد استفاده کرده اند و توانسته اند که مقاومت گرمایی فصل مشترک را تا حدود ٤ برابر کاهش دهند. شبیه سازی های مشابهی به کمک دینامیک مولکولی توسط دهاکان[۳] و همکاران و همچنین هی[٤] و همکاران انجام گرفته است که به افزایش رسانش گرمایی در فصل مشترک منجر شده است.

علاوه بر SAMها، پوشش‌های سرامیکی نازک مانند اکسید آلومینیوم (Al_2O_3) یا آلومینا نیز به‌عنوان یک راهکار مؤثر برای بهبود پایداری

---

[۱] Vishwakarma

[۲] Self-Assembled Monolayers

[۳] Dhakan

[٤] He

سطحی الکترودها پیشنهاد شده‌اند[٤]. مطالعات پیشین نشان داده‌اند که این پوشش می‌تواند از تجزیه الکترولیت، نفوذ یون‌های ناخواسته و تخریب ساختاری الکترود جلوگیری کند. بااین‌حال، بررسی‌های محدودی در خصوص تأثیر مستقیم این پوشش‌ها بر رسانش گرمایی فصل مشترک الکترود–الکترولیت انجام شده است و مکانیزم دقیق اثرگذاری آن بر فرآیندهای انتقال حرارت همچنان نیازمند پژوهش‌های بیشتر است.

درحالی‌که پوشش‌های Al_2O_3 عمدتاً به‌عنوان یک لایه محافظ برای کاهش واکنش‌های تخریبی در سطح الکترود شناخته می‌شوند، این مطالعه بر بررسی نقش آن‌ها در بهبود رسانش گرمایی فصل مشترک تمرکز دارد. برخلاف تحقیقات پیشین که بیشتر به پایداری الکتروشیمیایی این پوشش‌ها پرداخته‌اند، هدف این پژوهش بررسی اثر Al_2O_3 بر مکانیزم‌های انتقال حرارت و مدیریت دمای باتری است. برای انجام این بررسی، از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی[۱] استفاده شده است که به‌عنوان یک روش کارآمد برای مطالعه فرآیندهای انتقال گرما در مقیاس نانومتری شناخته می‌شود. در این مطالعه، مدل‌سازی دقیقی از فصل مشترک کاتد–الکترولیت با پوشش Al_2O_3 و بدون آن انجام شده و تأثیر این پوشش بر رسانش گرمایی مورد تجزیه وتحلیل قرار گرفته است.

شبیه سازی دینامیک مولکولی

در این مطالعه، از میدان نیروی CVFF[2] برای مدل‌سازی اکسید لیتیوم کبالت استفاده شده است[۵]. ابتدا یک سوپرسل کوچک از اکسید لیتیوم کبالت با استفاده از نرم افزار متریالز استودیو[۳] تولید می شود. در این مدل، نوع اتم‌ها، بارهای اتمی، پارامترهای پیوندی و ضرایب لنارد–جونز برای تمام اتم‌ها مشخص می‌گردد. به‌منظور راستی‌آزمایی ساختار تولیدشده، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای اندازه گیری چگالی ساختار مدل‌شده اجرا می شود. تمامی شبیه‌سازی‌ها با استفاده از بسته نرم‌افزاری LAMMPS انجام شده است. علاوه بر اکسید لیتیوم کبالت، میدان نیروی CVFF همچنین برای مدلسازی پلی‌اتیلن آمورف نیز به‌کار رفته است. برای ساخت ساختار اکسید لیتیوم کبالت و پلی‌اتیلن آمورف، ابتدا ساختار اکسید لیتیوم کبالت با ابعادی معادل ۴۰×۳۳×۷۰ آنگستروم در نرم‌افزار متریالز استودیو تولید شده است. سپس پلی‌اتیلن آمورف با ۳۰ زنجیره که هرکدام شامل ۵۰ مونومر هستند، با ابعادی مشابه با سایز اکسید لیتیوم کبالت ساخته شده است.

برای انجام شبیه سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی، ابتدا ، انرژی ساختار کمینه و سپس ریلکس شده است. برای محاسبه رسانش گرمایی فصل مشترک از روش دینامیک مولکولی غیر تعادلی معکوس استفاده شده است. رسانش گرمایی در فصل مشترک با استفاده از رابطه $h=q/2A\Delta T$ محاسبه شده است که در آن q نرخ شار گرمایی عبوری از فصل مشترک با مساحت A و ΔT افت دمای ایجاد شده در فصل مشترک است. سه پیکربندی مختلف از سیستم که هر کدام دارای سرعت های اولیه متفاوتی هستند ایجاد می شود و محاسباتی که در ادامه می آید، روی هر سه پیکربندی انجام می شود و در نهایت میانگین گیری می شود.

در مرحله بعد از آلومینا در فصل مشترک پلی اتیلن آمورف و اکسید لیتیم کبالت به منظور افزایش رسانش گرمایی فصل مشترک استفاده شده است. در پژوهش حاضر ساختار به گونه ای طراحی شده که

---

۱ Molecular Dynamics

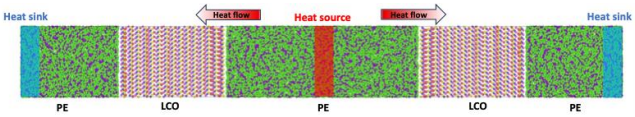
2 Consistent Valence Force Field

۳ Materials Studio

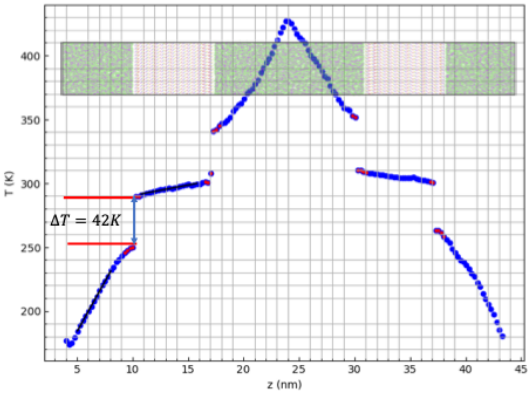
پس از تشکیل لایه ی آمورف آلومینا، لایه ای از پلی اتیلن آمورف بر روی آن قرار میگیرد. پس از تکمیل مراحل بازپخت[۱]، شار گرمایی به ساختار اعمال شده است تا رسانش گرمایی در فصل مشترک کاتد و جداکننده اندازه گیری شود.

نتایج

به‌منظور اعتبارسنجی میدان نیروی مورد استفاده، چگالی اکسید لیتیوم کبالت (LCO) اندازه‌گیری و نتایج آن با داده‌های تجربی مقایسه گردید. چگالی LCO با استفاده از میدان نیروی CVFF مقدار ۵/۰۵g/cm³ به دست آمده است، در حالی که چگالی پلی‌اتیلن (PE) مقدار g/cm³ ۰/۸ به‌دست آمده است که با نتایج تجربی موجود هم‌خوانی دارد[6]. برای اندازه‌گیری رسانش گرمایی، از روش مولر پلت[۲] یا RNEMD[3] استفاده شده است[۷]. در این پژوهش مقادیر به‌دست‌آمده برای رسانش گرمایی به ترتیب ۱/۶۷ W/(m·K) برای LCO و ۰/۲۶ W/(m·K) برای PE بوده که با نتایج تجربی موجود تطابق دارد[8,9]. به‌منظور محاسبه رسانش گرمایی در فصل مشترک کاتد و جداکننده، ساختار مربوطه مطابق با ۱ طراحی و شبیه‌سازی شده است



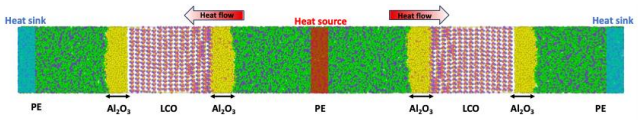
شکل ۱: شبیه سازی تمام اتم برای محاسبه رسانش گرمایی در فصل مشترک اکسید لیتیوم کبالت (LCO) و پلی اتیلن (PE) با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی غیرتعادلی معکوس (RNEMD) با شرایط مرزی دوره‌ای که در سه جهت اعمال می‌شود.



شکل۲ : پروفیل دمایی به دست آمده از روش RNEMD که ΔT نشان دهنده افت دما در فصل مشترک اکسید لیتیوم کبالت (LCO) و پلی اتیلن (PE) است.

شکل ۲ پروفیل دمای ساختار شبیه سازی در جهت طولی z را نشان می دهد. برای اندازه گیری دما، ساختار به بخش هایی به ضخامت ۲.۵ انگسترم تقسیم و دمای میانگین هر بخش روی زمان شبیه سازی با استفاده از تئوری انرژی جنبشی اندازه گیری شده است. ΔT افت دما در فصل مشترک را نشان می دهد که در پروفیل دما مشخص شده است. رسانش گرمایی در فصل مشترک کاتد و جدا کننده در حدود 97.68 MW/(m².K) اندازه گیری شده است.

به منظور محاسبه رسانش گرمایی در فصل مشترک کاتد و جدا کننده که شامل آلومینا در فصل مشترک نیز هست، ساختار مورد مطالعه در شکل ۳ نشان داده شده است.



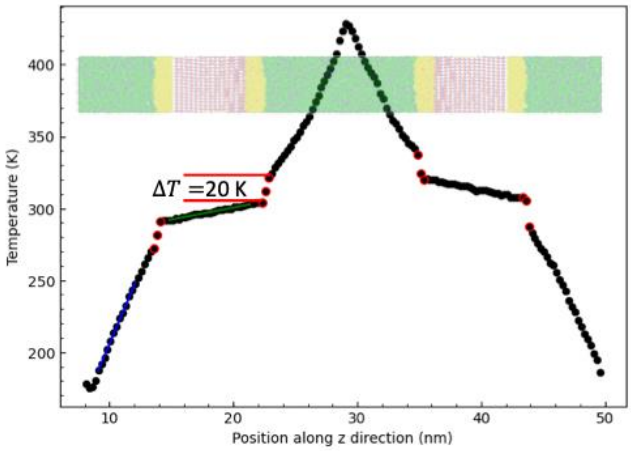
[۱] Annealing

[۲] Müller-Plathe

[3] Reverse Non-Equilibrium Molecular Dynamics

شکل ۳: : شبیه سازی تمام اتم برای محاسبه رسانش گرمایی در فصل مشترک اکسید لیتیوم کبالت (LCO) و پلی اتیلن (PE) با استفاده از ایجاد لایه آلومینا به صورت آمورف و به کاربردن روش شبیه سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی(RNEMD) و اعمال شرایط مرزی دوره ای در سه جهت.

شکل ٤ پروفیل دمای ساختار شبیه سازی در جهت طولی z را نشان می دهد. ΔT افت دما در فصل مشترک را نشان می دهد که در پروفیل دما مشخص شده است. در این حالت که شامل آلومینا در فصل مشترک است، رسانش گرمایی فصل مشترک به مقدار ۲۰٦/ ٦٥ $MW/(m^2.K)$ افزایش می یابد. نتایج نشان می دهد که وجود آلومینا به بهبود رسانش گرمایی فصل مشترک تا بیش از ۱۰۰ درصد کمک کرده است.



شکل۲ : پروفیل دمایی به دست آمده از روش RNEMD که ΔT نشان دهنده افت دما در فصل مشترک اکسید لیتیوم کبالت (LCO) و پلی اتیلن (PE) است.

نتیجه گیری

نتایج این تحقیق نشان می‌دهد که مدیریت حرارتی در باتری‌های لیتیومی اهمیت زیادی در بهبود عملکرد و ایمنی آنها دارد. با بررسی رسانش گرمایی در فصل مشترک کاتد و جداکننده در باتری‌های لیتیومی، مشخص شد که مقاومت گرمایی در این ناحیه تأثیر زیادی در کل عملکرد سلول دارد. استفاده از آلومینا در فصل مشترک به افزایش رسانش گرمایی در فصل مشترک و عملکرد بهتر باتری کمک می‌کند و این امر می‌تواند منجر به طراحی بهینه‌تری از باتری‌ها با عملکرد و ایمنی بالاتر شود. این یافته‌ها، پتانسیل استفاده از آلومینا را در باتری‌های لیتیومی به عنوان یک راهکار برای بهبود مدیریت حرارتی و ایمنی این باتری‌ها تأیید می‌کنند و می‌توانند راهگشای توسعه فناوری‌های باتری‌های جدید با کارایی بهتر و ایمنی بیشتر باشند.

مرجع‌ها

[1] M. Murugan, P. V. Elumalai, K. Vijayakumar, M. Babu, K. Suresh Kumar, M. Ganesh, L. Kuang, S. Prabhakar, A Comprehensive Review of Thermal Management Methods and Ideal System Design for Improved Electric Vehicle Battery Pack Performance and Safety, *Energy Sci Eng* **13** (2025) 1011–1036. https://doi.org/10.1002/ese3.2081.

[2] R. Çakır, J. Mammadli, A.F. Şeker, T.E. Koca, B. Şahin, A COMPREHENSIVE REVIEW ON BATTERY THERMAL MANAGEMENT AND MODELING, *Heat Transf Res* (2025). https://doi.org/10.1615/HeatTransRes.2025053111.

[3] V. Vishwakarma, C. Waghela, Z. Wei, R. Prasher, S.C. Nagpure, J. Li, F. Liu, C. Daniel, A. Jain, Heat transfer enhancement in a lithium-ion cell through improved material-level thermal transport, *J Power Sources* **300** (2015) 123–131. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2015.09.028.

[4] J.A. Nguyen, A. Becker, K. Kanhaiya, H. Heinz, A.W. Weimer, Analyzing the Li–Al–O Interphase of Atomic Layer-Deposited Al_2O_3 Films on Layered Oxide Cathodes Using Atomistic Simulations, *ACS Appl Mater Interfaces* **16** (2024) 1861–1875. https://doi.org/10.1021/acsami.3c15080.

[5] J.R. Maple, M. -J. Hwang, T.P. Stockfisch, U. Dinur, M. Waldman, C.S. Ewig, A.T. Hagler, Derivation of class II force fields. I. Methodology and quantum force field for the alkyl functional group and alkane molecules, *J Comput Chem* **15** (1994) 162–182. https://doi.org/10.1002/jcc.540150207.

[6] X. Zhuang, S. Zhou, Molecular Dynamics Study of an Amorphous Polyethylene/Silica Interface with Shear Tests, *Materials* **11** (2018) 929. https://doi.org/10.3390/ma11060929.

[7] F. Müller-Plathe, A simple nonequilibrium molecular dynamics method for calculating the thermal conductivity, *J Chem Phys* **106** (1997) 6082–6085. https://doi.org/10.1063/1.473271.

[8] S.C. Chen, C.C. Wan, Y.Y. Wang, Thermal analysis of lithium-ion batteries, *J Power Sources* **140** (2005) 111–124. https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2004.05.064.

[9] T. Zhang, T. Luo, Role of Chain Morphology and Stiffness in Thermal Conductivity of Amorphous Polymers, *J Phys Chem B* **120** (2016) 803–812. https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.5b09955.

همگامی سازوار و انفجاری در شبکه‌های پیچیده

سلیمانی فر، سحر؛ شهبازی، فرهاد

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان

چکیده

پدیده‌ی هم‌نوسانی یکی از رفتارهای جمعی رایج در سامانه‌های پیچیده است که در طیف گسترده‌ای از حوزه‌های علمی، از جمله علوم اعصاب، سامانه‌های قدرت و تعاملات اجتماعی، مورد توجه قرار گرفته است. مدل کوراموتوبه عنوان یکی از چارچوب‌های نظری پرکاربرد در تحلیل هم‌نوسانی، بستر مناسبی برای بررسی گذار از وضعیت ناهماهنگ به وضعیت هماهنگ فراهم می‌سازد. در این مقاله، مدلی را بررسی می‌شود که در آن بخشی از نوسان‌گرها به‌صورت تطبیقی و متأثر از رفتار کلی سامانه با یکدیگر تعامل دارند. برخلاف بسیاری از پژوهش‌های پیشین که بر ساختارهای کاملاً متصل تمرکز داشته‌اند، در این تحقیق ساختار شبکه‌ای سامانه به‌صورت جهان‌کوچک در نظر گرفته شده است. نتایج اولیه نشان می‌دهد که این نوع توپولوژی می‌تواند مسیرهای متفاوت و گاه پیچیده‌ای برای رسیدن به هم‌نوسانی ایجاد کند که بررسی دقیق‌تر آن می‌تواند به شناخت بهتر پویایی سامانه‌های واقعی کمک کند.

واژه‌های کلیدی:مدل کوراموتو، همگام‌سازی انفجاری، پارامتر نظم

Adaptive and Explosive Synchronization in Complex Networks

Soleimanifar, Sahar; Shahbazi Farhad

Department of Physics, University of Isfahan, Isfahan,

Abstract

Synchronization is one of the common collective behaviors observed in complex systems and has drawn considerable attention across various scientific domains, including neuroscience, power grids, and social dynamics. The Kuramoto model, as one of the widely used theoretical frameworks for analyzing synchronization, provides a suitable foundation for examining the transition from incoherence to coherence among coupled oscillators. In this study, we investigate a model in which a subset of oscillators interact adaptively, influenced by the overall collective behavior of the system. Unlike many previous studies that have focused on fully connected network structures, the present work considers a small-world network topology. Preliminary results suggest that such a structure can give rise to distinct and sometimes intricate pathways toward synchronization, highlighting the importance of further analysis in understanding the dynamics of more realistic systems.

مقدمه

هم‌زمانی پدیده‌ای فراگیر در سامانه‌های پیچیده است، جایی که مجموعه‌ای از نوسان‌گرها یا مؤلفه‌های پویا، با وجود تفاوت‌های فردی، رفتار جمعی منسجمی از خود بروز می‌دهند. از ضربان قلب و فعالیت نورون‌ها گرفته تا شبکه‌های برق و رفتار جمعی پرندگان، هم‌زمانی نقشی اساسی در پایداری و کارکرد مؤثر این سامانه‌ها دارد[۱] .مدل کوراموتو به عنوان یکی از مدل‌های مرجع در مطالعه هم‌زمانی، تعامل میان نوسان‌گرها را به‌صورت تابعی از اختلاف فاز و با فرض اتصال کامل میان اجزا در نظر می‌گیرد[۲]. با این حال، ساختار بسیاری از سامانه‌های واقعی با این فرض تطابق ندارد و اغلب دارای ساختاری هستند که در آن تعاملات محلی با شدت بالا در کنار پیوندهایی با برد بلند، تعادل میان انسجام موضعی و ارتباط‌پذیری جهانی را برقرار می‌سازند، ویژگی‌ای که آن‌ها را در زمره‌ی شبکه‌های جهان‌کوچک قرار می‌دهد.علاوه بر ساختار شبکه، نوع برهم‌کنش میان نوسان‌گرها نیز تأثیر بسزایی بر دینامیک جمعی دارد. در سال‌های اخیر، توجه ویژه‌ای به مدل‌های کوپلینگ تطبیقی معطوف شده است که در آن شدت تعامل بین نوسان‌گرها نه ثابت، بلکه تابعی از میزان هم‌زمانی کلی سامانه است. چنین سازوکارهایی، که از بازخورد میان پارامتر نظم و قدرت جفت شدگیناشی می‌شوند، قادر به ایجاد گذارهای غیرخطی و ناگهانی موسوم به هم‌زمانی انفجاری هستند[۳]. در این پژوهش، رفتار مدل کوراموتو با کوپلینگ تطبیقی جزئی در بستر شبکه‌ای از نوع جهان‌کوچک مورد بررسی قرار گرفته است. در این چارچوب، تنها بخشی از نوسان‌گرها به‌صورت تطبیقی با دیگر اجزا تعامل دارند و ساختار شبکه نیز به‌گونه‌ای طراحی شده که ترکیبی از نظم موضعی و تصادف جهانی را بازنمایی می‌کند. نتایج اولیه نشان می‌دهد که حتی در حضور چنین محدودیت‌های ساختاری، سازوکار تطبیقی نقش کلیدی در تعیین مسیر و نوع گذار به هم‌زمانی ایفا می‌کند و می‌تواند به بروز پدیده‌هایی با ویژگی‌های دینامیکی قابل توجه منجر شود.

روش های محاسباتی

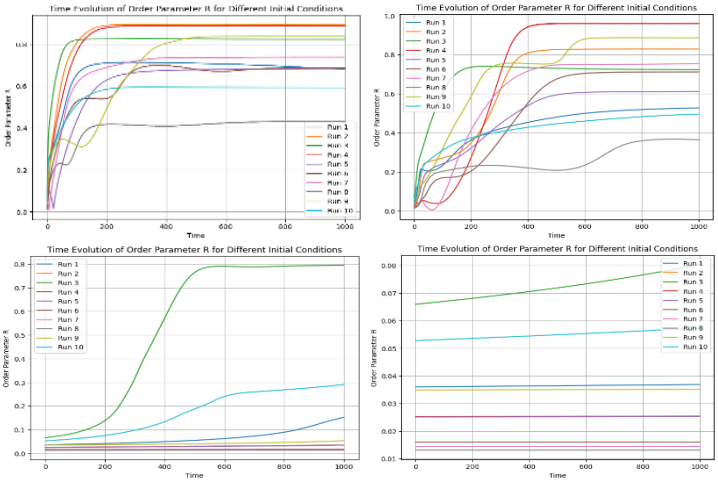
مدلی تعمیم‌یافته از مدل کوراموتو را در نظر گرفته می‌شود که شامل کوپلینگ (برهم‌کنش) تطبیقی است. این مدل یک سامانه از نوسان‌گرهای فازی است که توسط معادله‌ی دیفرانسیل زیر توصیف می‌شود:

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \omega_i + \frac{K}{N}(\alpha + \beta R^{\gamma-1}) \sum_{j=1}^{N} \sin(\theta_j - \theta_i) \qquad (۱)$$

این معادله تحول فاز برای یک نوسانگر iام را نشان می‌دهد، در این سامانه N نوسانگر فاز کوراموتو موجود است. ω_i فرکانس ذاتی هر نوسانگر است که در محاسبات ما در ابتدا برای سادگی صفر در نظرگرفته شده‌است. در اینجا این معادله به روش عددی روش رانگ–کوتا مرتبه ۸ حساب می‌شود. قدرت کلی این برهمکنش توسط ضریب K کنترل می شود. تعامل بین نوسانگرها از طریق ترکیبی از دو نوع کوپلینگ صورت میگیرد: بخشی از آن ثابت است که وزن آن با پارامتر α مشخص می شود و مستقل از وضعیت کلی سامانه عمل می کند، و بخش دیگر تطبیقی است که وزن آن برابر $\beta=1-\alpha$ است و مقدار آن به شکل توانی از پارامتر نظم R بستگی دارد. پارامتر R بیانگر میزان هم‌نوسانی کلی در سامانه است . از اندازه میانگین بردارهای فاز نوسانگرها به دست می آید. توان γ نیز مشخص می‌کند که کوپلینگ تطبیقی تا چه اندازه به سطح هم‌نوسانی حساس است.این ترکیب باعث می‌شود مدل قادر به بازتولید انواع مختلفی از گذارهای هم‌نوسانی، از جمله گذارهای تدریجی یا ناگهانی، بسته به پارامتر تنظیمی باشد.

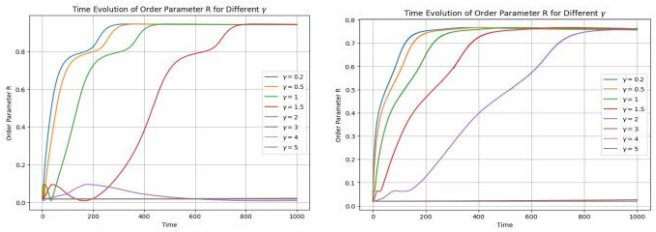
نتایج و بحث

به‌دلیل پیچیدگی ذاتی شبکه‌های جهان‌کوچک و تأثیر متقابل بالقوه میان پارامترهای ساختاری و دینامیکی، در گام نخست، مدل مورد نظر تحت شرایط ساده‌تر و کنترل‌شده‌تری مورد بررسی قرار گرفت. این رویکرد امکان ارزیابی دقیق‌تر رفتار سیستم و اطمینان از اعتبار نتایج اولیه را فراهم می‌سازد، پیش از آن که تحلیل به ساختارهای پیچیده‌تر گسترش یابد. در گام نخست از شبیه‌سازی، به‌منظور ساده‌سازی شرایط اولیه و تمرکز بر تأثیر ساختار شبکه، مقدار فرکانس طبیعی تمامی نوسان‌گرها صفر در نظر گرفته شد. همچنین، قدرت کوپلینگ در این مرحله ثابت فرض شده است تا بتوان اثر تغییر پارامتر γ را به‌صورت مجزا برای ده شرایط اولیه متفاوت بررسی کرد. تعداد نوسان‌گرها برابر با ۱۰۰۰ انتخاب شد و نتایج حاصل از این تنظیمات در شکل ۱ ارائه شده است. نتایج شبیه سازی نشان می دهند که برای $\gamma<1$، به دلیل وجود بازخورد منفی تطبیقی، کوپلینگ با افزایش نظم تضعیف می شود، اما سیستم با وجود این ، تقریبا بی درنگ به همگام سازی می رسد.

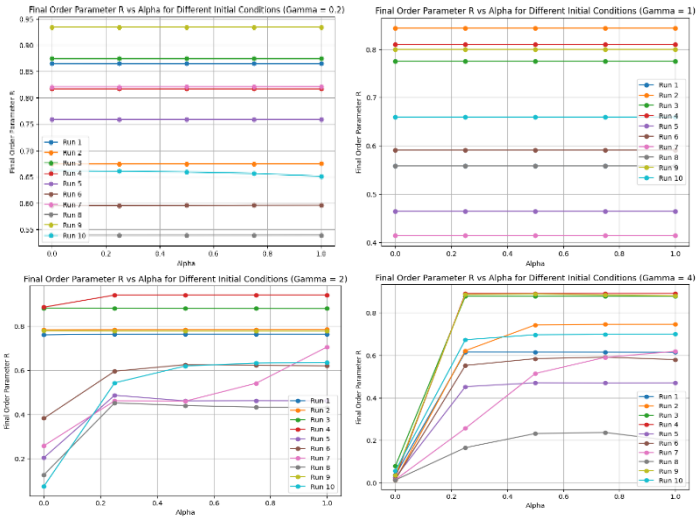


شکل ۱.تغییرات پارامتر نظم بر حسب زمان برای شرایط اولیه مختلف، در شبکه‌ی جهان‌کوچک با n=1000 و فرکانس طبیعی صفر. شبیه سازی برای مقادیر مختلف نمای تطبیقی گاما انجام شده است: λ =0.5,1.5,3,4

در مقابل، برای $\gamma>1$ یک مقاومت در برابر همگام سازی وجود دارد و تنها در صورت بزرگ بودن پارامتر کوپلینگ یا نسبت مناسب بتا به الفا، سیستم وارد فاز همگام می شود. در ادامه‌ی تحلیل مدل، برای بررسی پایداری نتایج و ارزیابی تأثیر شرایط اولیه برگذار به هم‌نوسانی، شبیه‌سازی‌هایی با دومقدار مختلف seed انجام شد که در شکل ۲ نشان داده شده است. در تمامی این شبیه‌سازی‌ها، تعداد نوسان‌گرها برابر با ۱۰۰۰، احتمال بازپیوند۰.۰۳ و قدرت کوپلینگ ۱ فرض شده اند وشبیه سازی برای مجموعه ای از مقادیر مختلف نمای تطبیقی در بازه [۰.۲,۵] صورت گرفته است.شکل ۲ روند تکامل زمانی پارامتر نظم را برای مقادیر مختلفγ و تحت شرایط اولیه متفاوت نشان می دهد. مشاهده می‌شود که برای مقادیر کوچک گاما (مانند ۰.۲، ۰.۵ و ۱)، سیستم بدون وابستگی محسوس به شرایط اولیه به سرعت وارد فاز هم‌نوسانی می‌شود. این پدیده را می‌توان به



شکل ۲.بررسی گذار به هم‌نوسانی در سه شرایط اولیه ی متفاوت، نشان داده شده‌است.



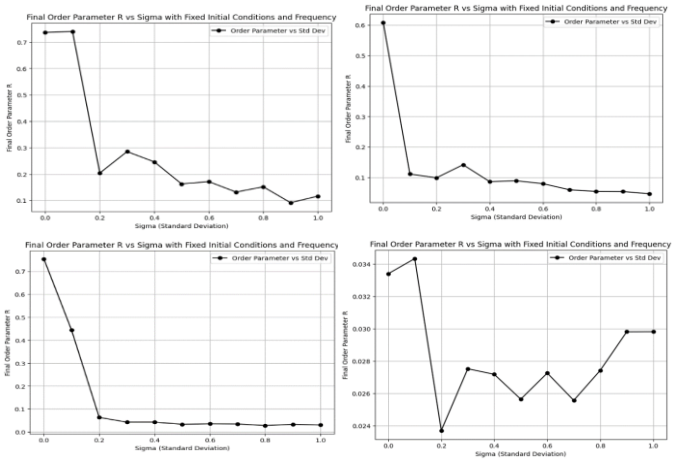
شـــکل۳. مقدار نهایی پارامتر نظم R به عنوان تابعی از α برای مقادیر مختلف گاما، با هدف بررسی تاثیر سهم نسبی کوپلینگ تطبیقی و شرایط اولیه بر پایداری هم نوسانی

نقش تنظیم‌کننده‌ی منفی کوپلینگ تطبیقی نسبت داد، به‌گونه‌ای که با

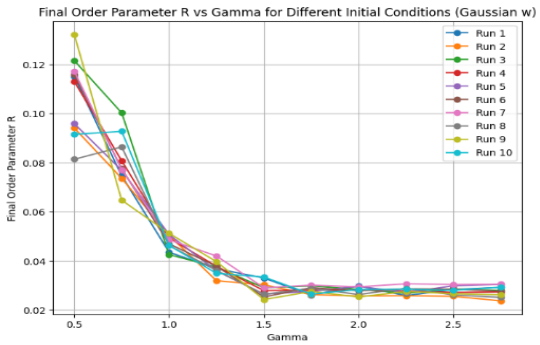
افزایش هم‌نظمی، گرادیان برهم‌کنش‌ها کاهش می‌یابد، اما این کاهش نه تنها مانعی برای شکل‌گیری هم‌نوسانی نیست، بلکه در مقادیر پایین γ، موجب تسهیل آن نیز میگردد. در مقابل برای مقادیر بزرگ γ، بخصوص $\gamma \geq 3$ پارامتر نظم در مقادیر پایین باقی می‌ماند یا تنها در برخی از seed ها رشد می‌کند. این رفتار می‌تواند نشانه‌ای از وجود چندپایداری در سیستم باشد، به این معنا که گذار به هم‌نوسانی وابسته به شرایط اولیه است و سامانه ممکن است در فاز ناهماهنگ پایدار باقی بماند. بنابراین، می‌توان نتیجه گرفت که در ناحیه‌ی فرابحرانی، سیستم برای ورود به فاز هم‌نوسانی نیازمند کوپلینگ قوی‌تر یا شرایط اولیه مناسب‌تر است.
در مجموع، این دو مجموعه نمودار مکمل یکدیگر هستند: نمودار نخست چگونگی وابستگی فرآیند هم‌نوسانی به پارامتر γ را نشان می‌دهد، در حالی که نمودار دوم میزان حساسیت این گذار نسبت به شرایط اولیه را آشکار می‌سازد.

به‌منظور بررسی دقیق‌تر نقش کوپلینگ تطبیقی و نحوه ترکیب آن با کوپلینگ ثابت، تحلیل‌هایی بر مبنای پارامتر α به‌عنوان وزنی برای سهم کوپلینگ غیرتطبیقی (ثابت) انجام شد. در حالی که α از ۰ تا ۱ تغییر داده شده است . این رویکرد امکان ارزیابی پدیده‌هایی همچون چندپایداری، گذارهای ناگهانی، و حساسیت به حالت اولیه را در بازه‌های مختلف α فراهم می‌سازد. نتایج نشان می دهندکه برای γ <۱ هم نوسانی تقریبا مستقل از α و پایدار نسبت به شرایط اولیه رخ می‌دهد. در مقابل، برای γ بزرگ سیستم به شدت نسبت به α و حالت اولیه حساس شده و گذارهای ناگهانی از فاز ناهماهنگ به هم‌نوسانی دیده می‌شود که امکان هم‌نوسانی انفجاری را دارد. بررسی روند تغییر پارامترنظم نهایی بر حسب انحراف معیار اولیه‌ی فاز یا فرکانس‌ها نشان می‌دهد که سامانه نسبت به پراکندگی اولیه به شدت حساس است. به گونه ای که حتی افزایش اندک در زیگما منجر به افت چشمگیر در مقدار پارامتر نظم می گردد. این رفتار نشان دهنده‌ی شکنندگی وضعیت هم‌نوسانی در برابر ناهمگونی اولیه است، به خصوص در مقادیر بالاتر γ که نقش تطبیقی جفت‌شدگی برجسته‌تر است. در مقادیر بزرگتر زیگما نوسانگرها به دلیل تفاوت های قابل توجه در مقادیر اولیه، توانایی کمتری در هم فازشدن دارند و در نتیجه سامانه در حالت ناهماهنگ باقی می‌ماند. این اثر در نمودار مربوط به $\gamma=3$ به وضوح قابل مشاهده است، جایی که حتی در حضور کوپلینگ تطبیقی نیز مقدار R به مقادیر بسیار پایین محدود می شود. این موضوع حاکی از آن است که در رژیم های با γ بالا، کوپلینگ تطبیقی به تنهایی قادر به حفظ هم‌نظمی در حضور ناهمگونی های اولیه نخواهد بود، و پایداری فاز هماهنگ به طور جدی تضعیف می گردد.

در نهایت برای بررسی اثر ناهمگونی دینامیکی در سامانه، در این مرحله فرکانس طبیعی هر نوسان‌گر از یک توزیع گاوسی با میانگین صفر و انحراف معیار یک، نمونه‌برداری شده است. این تنظیمات با هدف شبیه‌سازی شرایط واقع‌بینانه‌تر انجام شده‌اند، جایی که تفاوت‌های ذاتی میان عناصر سامانه (نظیر نورون‌ها یا واحدهای نوسان‌گر در شبکه‌های پیچیده) وجود دارد. نتایج نشان می‌دهد که با وجود ناهمگونی فرکانس‌ها، توانایی سامانه در هم‌نوسانی به‌شدت تضعیف شده و تنها برای مقادیر بسیار پایین γ ، مقدار نظم به سطح قابل توجهی می‌رسد. با افزایش γ ، سیستم به سرعت وارد فاز ناهماهنگ می‌شود و مقدار R در تمامی اجراها در سطح بسیار پایین باقی می‌ماند. این رفتار بیانگر آن است که وجود تفاوت‌های ذاتی در فرکانس نوسان‌گرها، حتی بدون حافظه زمانی واقعی، می‌تواند مانعی جدی برای شکل‌گیری و پایداری هم‌نوسانی باشد.



شـکل ٤.مقدار نهایی پارامتر نظم R بر حسـب انحراف معیار اولیه ی زیگما برای چهار مقدار γ ، به ترتیب راست به چپ:0.5, 1, 1.5, 3



شکل ٥ :تغییرات مقدار نهایی Rبر حسب γ در حضور فرکانس‌های طبیعی گاوسی، برای ده اجرای مستقل.

نتیجه‌گیری

ما در این مقاله نشان دادیم که در مدل کوراموتو با کوپلینگ تطبیقی جزئیف مقدار γ نقش کلیدی در تعیین نوع و پایداری گذار به هم نوسانی دارد. برای γ کوچک، سیستم بدون نیاز به آستانه بحرانی هم‌نوسان می‌شود، در حالی که برای γهای بزرگ‌تر، وقوع هم‌نوسانی تنها تحت شرایط خاص و در حضور کوپلینگ قوی یا تنظیمات اولیه‌ی مناسب امکان‌پذیر است. همچنین، نتایج بیانگر آن بود که ناهمگونی اولیه در فاز یا فرکانس، به‌ویژه در حضور توزیع گاوسی برای فرکانس‌ها، موجب افت شدید نظم جمعی می‌شود، و سامانه تنها در ناحیه‌ی زیر بحرانی موفق به هم‌نوسانی شد در ادامه، هدف توسعه مدلی کامل‌تر است که به‌طور هم‌زمان شامل ساختار شبکه، کوپلینگ تطبیقی، ناهمگونی فرکانس‌ها و **حافظه زمانی واقعی** باشد تا بتوان پویایی‌های پیچیده‌تری را تحلیل کرد.

مراجع

[1]Exact explosive synchronization transitions in Kuramoto oscillators with time-delayed coupling

H Wu, L Kang, Z Liu, M Dhamala - Scientific Reports, 2018 - nature.com

[2] Synchronization transitions in phase oscillator populations with partial adaptive coupling

Z Chen, Z Zheng, C Xu - Chaos: An Interdisciplinary Journal of …, 2024 - pubs.aip.org

[3] Self-organized explosive synchronization in complex networks: Emergence of synchronization bombs

L Arola-Fernández, S Faci-Lázaro, PS Skardal… - arXiv preprint arXiv …, 2022

بررسی موازنه بودن سامانه‌های نورونی با نورون‌های تحریکی و مهاری

عطاللهی، سارا[۱]؛ شهبازی، فرهاد[۱] ولی زاده،علیرضا[۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

[۲] دانشکده فیزیک، تحصیلات تکمیلی علوم پایه، زنجان

چکیده

مطالعه‌ی سیستم‌های عصبی به ویژه نورون‌ها و مدارهای عصبی به دلیل ویژگی‌های منحصر به فردی که از خود نشان می‌دهند در سال‌های اخیر توجه محققان را به خود معطوف کرده‌اند و مطالعاتی بر روی آن‌ها انجام شده است. در این مقاله با در نظر گرفتن دینامیک غیرخطی برای نورون‌ها (مدل RTM و WB) و همچنین انتخاب سیناپس شیمیایی برای شبکه، موازنه بودن سیستم را بررسی کردیم. در نهایت، آنتروپی شانون و جمع جریان‌های سیناپسی خروجی از نورون‌های تحریکی و مهاری و سایر کمیت‌هایی که برای بررسی شبکه‌ی موازنه، موثر هستند را به دست آوردیم.

واژه های کلیدی: *مدل RTM و WB ، آنتروپی شانون، جریان‌های سیناپسی.*

Investigation of critical behavior in neuronal systems with excitatory and inhibitory neurons

Ataollahi, Sarah[1]; Shahbazi, Farhad[1]

Valizade, Alireza[2]

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

[2] *Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences, Zanjan*

Abstract

The study of nervous systems, especially neurons and neural circuits, have attracted the attention of researchers in recent years due to their unique characteristics. We investigated the system balance by considering the nonlinear dynamics for neurons (RTM and WB model) and also the choice of chemical synapse for the network. In this regard, we obtained the probability density function of the size and duration of avalanches, the output synaptic currents from the excitatory and inhibitory neurons and other quantities that are effective for investigating the system balance in the network.

***Keywords**: RTM and WB model, shannon entropy, output synaptic currents.*

مقدمه

مطالعه سیستم‌های عصبی به ویژه نورون‌ها و مدارهای عصبی شاخه‌ای از علوم اعصاب است که در سال‌های اخیر توجه زیادی را به خود معطوف کرده است.[۲] آزمایشات انجام شده بر روی مغز حاکی از آن است که مغز عملکرد بحرانی دارد.[۱] در سیستم‌های بحرانی افت وخیزها بسیار مهم هستند و نمی‌توان از آن‌ها صرف نظر کرد و به همین دلیل این سیستم‌ها پیش‌بینی پذیر نیستند. از این رو می‌توان عملکرد مغز را مشابه یک سیستم پیچیده تعبیر کرد. سیستم پیچیده در حالت کلی به سیستم‌هایی اطلاق می‌شود که دارای اجزاء زیاد و متفاوتی هستند که اجزاء با هم درارتباط هستند. از دیگر مشخصه‌های این سیستم‌ها می‌توان به برهم‌کنش کوتاه‌برد و همبستگی بلندبرد که منجر به ایجاد حالت‌های همگام در شبکه می‌شود اشاره کرد. این سیستم‌ها از پایداری بالایی برخوردار هستند. چنین سیستم‌هایی می‌توانند رفتار بحرانی، زیر بحرانی و فرابحرانی از خود نشان دهند، اما این سیستم‌ها به گونه ای خود را تنظیم میکنند که در ناحیه ی بحرانی قرار گیرند. همچنین بی مقیاس بودن و رفتار فرکتالی نشان از سلسله مراتبی بودن این سیستم‌ها دارد.

مطالعات علمی و آزمایش‌های انجام شده در دو دهه‌ی اخیر، هم نشان داد که سیستم‌های عصبی از خود رفتار بحرانی نشان می‌دهند[۴]. منظور از بحرانی بودن یعنی سیستم نه به طور کامل منظم و نه به طور کامل بی‌نظم است بلکه همواره تعادلی میان این دو حالت برقرار است. در این حالت هست است که عملکرد آن بهینه می‌شود.

در این مقاله به مطالعه‌ی یک سامانه‌ی نورونی و بررسی رفتار بحرانی برای مقادیر مختلف از قدرت سیناپس شبکه با تغییر احتمال اتصال شبکه پرداختیم. در این سامانه‌ها توزیع سایز و دوره بهمن‌ها حائز اهمیت است. منظور از سایز بهمن تعداد نورونی است که در محدوده‌ی بین دو زمان خاموشی، تیزه تولید کرده‌اند که این مدت زمان، دوره‌ی بهمن شناخته می شود. لازم به ذکر است گام‌های زمانی که هیچ نورونی تیزه تولید نکرده باشد، زمان خاموشی نامیده می‌شود.

روش‌های محاسباتی

برای انجام محاسبات ابتدا شبکه‌ای را در نظر گرفتیم با ۲۵۰ گره(نورون‌ها) که به صورت تصادفی با احتمال اتصال p با هم در ارتباط باشند. یال ها (سیناپس) جهت‌دار هستند که بسته به نوع نورون‌ها دارای قدرت‌های متفاوتی هستند. دینامیک در نظر گرفته شده برای نورون‌های تحریکی مدل RTM(reduced_trab_miles) و برای نورون‌های مهاری مدل WB(wang_buzsaki) در نظر گرفته شد. این مدل‌ها همانند مدل هاچکین هاکسلی هستند که مقداری ساده تر شده اند. دینامیک در نظر گرفته شده به این صورت است[۳و۴]:

$$C\frac{dv}{dt} = I_{Na} + I_K + I_L + I_{ext} + I_{syn} \qquad (1)$$

در این رابطه v پتانسیل نورون‌ها و I_{Na} و I_K به ترتیب جریان‌های یونی هستند که از کانال‌ها عبور می‌کنند. I_L جریان نشتی (پخشی) از غشا می‌باشد. این جریان‌ها به صورت زیر تعریف می‌شوند[۲]:

$$I_{Na} = g_{Na}(v_{Na} - v)$$
$$I_K = g_K(v_K - v) \qquad (2)$$
$$I_L = g_L(v_L - v)$$

رسانندگی کانال ها به پتانسیل و زمان وابسته هستند که این وابستگی در پارامتر های m و h هست.

$$g_{Na} = \bar{g}_{Na}\,(m^3h)$$
$$g_K = \bar{g}_K\,(n^4) \qquad (3)$$
$$g_L = \bar{g}_L$$

پارامتر ها به صورت زیر به زمان و پتانسیل غشا بستگی دارند.

$$x(t) = x_0 - [(x_0 - x_\infty)(\ - e^{-t/\tau})] \qquad (4)$$

$$x = m, n, h$$

در رابطه ۱، I_{ext} معرف جریان خارجی است که فقط به نورون‌های تحریکی وارد می‌شود. I_{syn} جریان سیناپسی وارد به هر نورون است که به صورت زیر در نظر گرفته شده است[۷]:

$$I_{syn}[i] = g\, s[j]\, (v_{rev} - v[i]) \qquad (5)$$

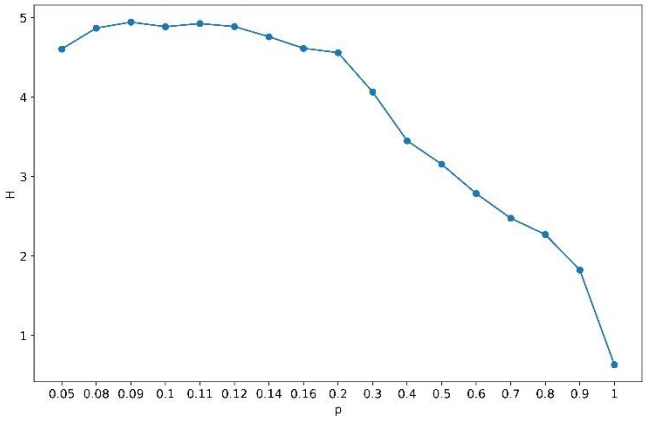
در این رابطه g قدرت سیناپس وS کسری از رسپتورها را نشان می‌دهد که در این جریان شرکت داشته‌اند. خاطر نشان می‌سازد که S به پتانسیل نورون و زمان بستگی دارد. اطلاعات میان نورون‌ها به صورت سیگنال از نورون پیش‌سیناپسی به نورون پس‌سیناپسی منتقل می‌شود. از این رو پتانسیل نورون پس‌سیناپسی افزایش می‌یابد و نورون شلیک شده و تیزه شکل می‌گیرد.

بحث و بررسی

در مقاله ی قبلی سیستم با ۲۰ درصد نورون مهاری در احتمال اتصال های ۰.۰۵ تا ۱ مورد بررسی قرار گرفت. آنتروپی شانون یکی از کمیت‌هایی هست که مورد بررسی قرار گرفته بود. فرمول ریاضی آنتروپی شانون به صورت زیر است:

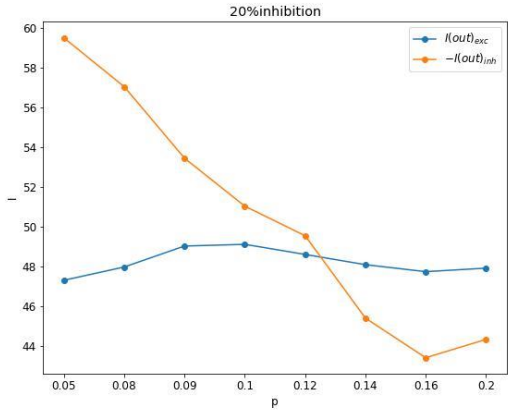
$$H = -\sum P_i \log P_i \qquad (6)$$

که در آن P_i احتمال تیزه‌ها را نشان می‌دهد. شکل ۱ آنتروپی شانون را نشان می‌دهد. که در محدوده‌ی ۰.۰۹ تا ۰.۱۲ آنتروپی، مقدار بیشینه دارد.



شکل۱: آنتروپی شانون شبکه برای احتمال اتصال های مختلف برای ۲۵۰ نورون با ۲۰ درصد نورون مهاری.

یکی از کمیت های مورد توجه جمع جریان‌های سیناپسی خروجی از نورون‌ها است. با مقایسه جمع جریان‌های سیناپسی خروجی از نورون‌های تحریکی و جمع جریان‌های سیناپسی خروجی از نورون‌های مهاری به این نتیجه رسیدیم که این جریان‌ها در محدوده‌ی ۰.۱ و۰.۱۲ نزدیک به هم هستند، که موازنه بودن شبکه را نشان می دهد.(شکل ۲)



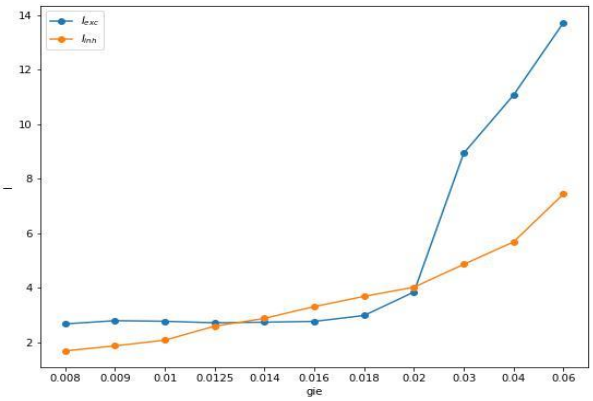
شکل۲: جمع جریان سیناپسی های خروجی از نورون های تحریکی و مهاری برای احتمال اتصال های مختلف برای ۲۵۰ نورون با ۲۰ درصد نورون مهاری.

به همین منظور با درنظرگرفتن احتمال اتصال ۰.۱ به بررسی سایر کمیت ها پرداختیم.

همان طور که در رابطه‌ی ۵ مشاهده می‌شود قدرت سیناپس‌ها را با کمیت g نشان دادیم. این کمیت دارای چهار مقدار متمایز می‌باشد. g_{ee} که قدرت سیناپس از نورون تحریکی به تحریکی، g_{ie} که قدرت سیناپس از نورون تحریکی به مهاری، g_{ei} که قدرت سیناپس از نورون مهاری به تحریکی و g_{ii} که قدرت سیناپس از نورون مهاری به مهاری را نشان می‌دهد. این سوال مطرح است که آیا با

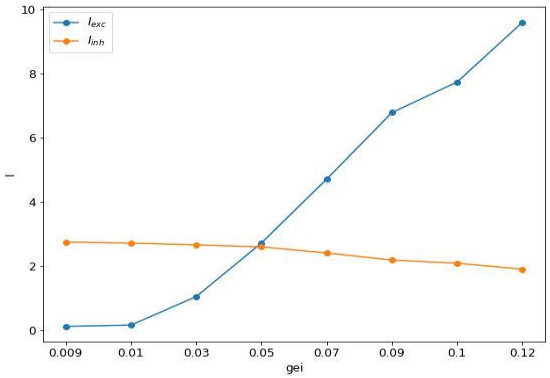
تغییرهرکدام از این کمیت‌ها به طور جداگانه سیستم از حالت موازنه خارج می‌شود یا نه؟ به همین منظور تغییرهر یک از این کمیت‌ها به طور جداگانه مورد بررسی قرار گرفته‌اند.

در ابتدا به بررسی قدرت سیناپس از نورون تحریکی به مهاری می‌پردازیم و مقدار آن را بین محدوده‌ی ۰.۰۰۸ تا ۰.۰۹ تغییر می‌دهیم.



شکل۲: جمع جریان سیناپسی های خروجی از نورون های تحریکی و مهاری برای قدرت سیناپس‌های مختلف از نورون تحریکی به نورون مهاری.

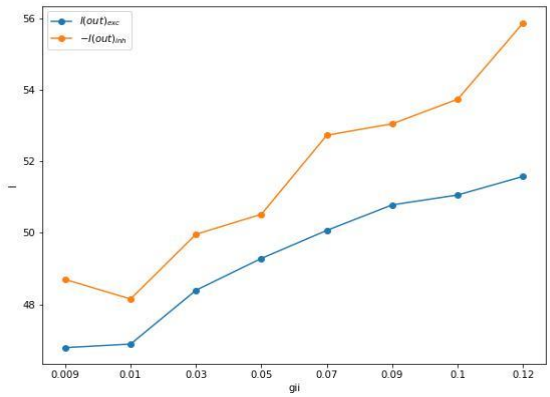
در ادامه به بررسی قدرت سیناپس از نورون مهاری به تحریکی می‌پردازیم و مقدار آن را بین محدوده‌ی ۰.۰۰۹ تا ۰.۱۲ تغییر می‌دهیم. با مقایسه جمع جریان‌های سیناپسی خروجی از نورون‌ها به این نتیجه رسیدیم که این جریان‌ها در ۰.۰۵ برابر هستند، که موازنه بودن شبکه را نشان می دهد.(شکل۳)



شکل۳: جمع جریان سیناپسی های خروجی از نورون های تحریکی و مهاری برای قدرت سیناپس‌های مختلف از نورون مهاری به نورون تحریکی.

در مرحله‌ی بعد به بررسی قدرت سیناپس از نورون مهاری به مهاری می‌پردازیم و مقدار آن را بین محدوده‌ی ۰.۰۰۹ تا ۰.۱۲ تغییر می‌دهیم.

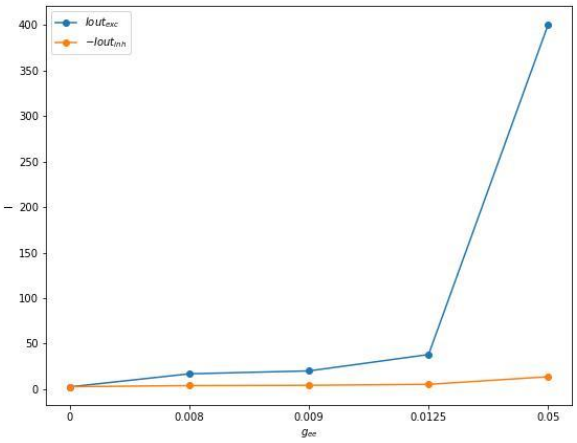
با مقایسه جمع جریان‌های سیناپسی خروجی از نورون‌های تحریکی و جمع جریان‌های سیناپسی خروجی از نورون‌های مهاری به این نتیجه رسیدیم که این جریان‌ها در محدوده‌ی نزدیک ۰.۰۵ تقریبا برابر هستند، که موازنه بودن شبکه را نشان می‌دهد.(شکل٤)



شکل٤: جمع جریان سیناپسی های خروجی از نورون های تحریکی و مهاری برای قدرت سیناپس‌های مختلف از نورون مهاری به نورون مهاری.

درآخر به بررسی قدرت سیناپس از نورون تحریکی به تحریکی می‌پردازیم و مقدار آن را بین محدوده‌ی ۰ تا ۰.۰۱۲۵ تغییر می‌دهیم.

با مقایسه جمع جریان‌های سیناپسی خروجی از نورون‌های تحریکی و جمع جریان‌های سیناپسی خروجی از نورون‌های مهاری به این نتیجه رسیدیم که این جریان‌ها در مقدار صفر برابر هستند، که موازنه بودن شبکه را نشان می دهد.(شکل ۵)



شکل۵: جمع جریان سیناپسی های خروجی از نورون های تحریکی و مهاری برای قدرت سیناپس‌های مختلف از نورون تحریکی به نورون تحریکی.

نتیجه گیری

در این مقاله شبکه با تعداد ۲۵۰ نورون برای احتمال اتصال ۰.۱ با فرض دینامیک غیرخطی حاکم بر رفتار نورون‌ها می‌توان ازنتایج حاصل از جمع جریان سیناپسی‌های خروجی از نورون‌ها نشان داد که شبکه‌ی موازنه در نزدیک ۰.۰۱۲۵ برای قدرت سیناپس تحریکی به مهاری، در نزدیک ۰.۰۵ برای قدرت سیناپس مهاری به تحریکی، در نزدیک ۰.۰۵ برای قدرت سیناپس مهاری به مهاری و در نزدیک ۰ برای قدرت سیناپس تحریکی به تحریکی دیده می‌شود.

مرجع‌ها

[1] John M.Beggs and Dietmar Plenz. *Neuronal avalanches in neocortical circuits*. *Labo- ratory of Syste Neuroscience*, December 3, 2003.

[2] M. Bear, B. Connors, and M.A. Paradiso. *Neuroscience: Exploring the Brain, EnhancedEdition: Exploring the Brain, Enhanced Edition*. Jones & Bartlett Learning, 2020..

[3] Christoph Borgers. *An Introduction to Modeling Neuronal Dynamics*. Springer, Cham, 2018.

[4] C. B¨orgers, Chemical synapses, in An Introduction to Modeling Neuronal Dynamics (Springer International Publishing, Cham, 2017) pp. 153–164.

[5] A. L. Hodgkin and A. F. Huxley. *A quantitative description of current and its application to conduction and excitation in nerve. J Physiol*, 28 August 1952.

[6] Antonio J. Fontenele, Nivaldo A. P. de Vasconcelos, Thais Feliciano, Leandro A. A. Aguiar, Carina Soares-Cunha, Barbara Coimbra, Leonardo Dalla Porta, Sidarta Ribeiro,Ana Joao Rodrigues, Nuno Sousa, Pedro V. Carelli, and Mauro Copelli. *Criticality between cortical states*. *bioRxiv*, 2018.

[7] X.-J. Wang, Synaptic basis of cortical persistent activity: the importance of nmda receptors to working memory, Journal of Neuroscience 19, 9587 (1999), https://www.jneurosci.org/content/19/21/9587.full.pdf.

تحلیل ویژگی‌های مؤثر در خوشه‌بندی مواد آنتی‌فرومغناطیس با رویکرد یادگیری ماشین

شریفی حقیقی، مهسا[۱]؛ بنی‌نجاریان، سمیرا[۱]؛ هاشمی‌فر، سید جواد[۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

در این پژوهش، خوشه‌بندی ۹۸۰ ماده آنتی‌فرومغناطیس با استفاده از رویکرد یادگیری ماشین انجام شد. ابتدا ۷۳۸ ویژگی اتمی استخراج گردید که با بهره‌گیری از مهندسی ویژگی به ۲۸ ویژگی کلیدی کاهش یافت. این فرایند بهینه‌سازی، منجر به بهبود چشمگیر شاخص سیلوئت شد. تحلیل خوشه‌های نهایی، چهار گروه مجزا را آشکار کرد که با تمرکز بر ویژگی‌های فیزیکیِ تأثیرگذار، تفسیر شدند.

واژگان کلیدی: *مواد آنتی‌فرومغناطیس، خوشه‌بندی، یادگیری ماشین، انتخاب ویژگی، شاخص سیلوئت*

Analysis of Influential Features in the Clustering of Antiferromagnetic Materials Using a Machine Learning Approach

Sharifi Haghighi, Mahsa [1]; Baninajarian, Samira[1]; Hashemifar, Seyed Javad[1]

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

Abstract

In this study, clustering of 980 antiferromagnetic materials was conducted using a machine learning approach. Initially, 738 atomic features were extracted and subsequently reduced to 28 key features through advanced feature engineering techniques. This optimization process led to a significant enhancement in the silhouette score, highlighting the efficacy of dimensionality reduction. Analysis of the resultant clusters revealed four distinct groups, which were rigorously interpreted by focusing on influential physical properties that govern antiferromagnetic behavior.

Keywords*: Antiferromagnetic materials, clustering, machine learning, Feature Selection, Silhouette Score*

مقدمه

خوشه‌بندی[15] یکی از روش‌های پیشرفته در یادگیری ماشین بدون نظارت است که ابزاری توانمند برای تحلیل داده‌های پیچیده و چندبعدی محسوب می‌شود. این روش، با سازماندهی داده‌ها بر اساس شباهت‌های ذاتی، علاوه بر آشکارسازی الگوهای پنهان، روابط بنیادین میان ویژگی‌های سیستم‌های فیزیکی را نیز تبیین می‌نماید [1]. مواد آنتی‌فرومغناطیس، به دلیل نظم اسپینی منحصربه‌فرد و قابلیت‌های ارزشمند در فناوری‌های نوظهور نظیر اسپین‌ترونیک و حافظه‌های مغناطیسی، به کانون توجه پژوهش‌های معاصر تبدیل شده‌اند. از آنجا که پیچیدگی فازهای مغناطیسی این مواد چالش‌های قابل توجهی را در تحلیل و پیش‌بینی رفتار آن‌ها ایجاد می‌کند، بهره‌گیری از روش‌های مبتنی بر خوشه‌بندی می‌تواند در شناسایی گذارهای فازی، پیش‌بینی خواص بحرانی و بهینه‌سازی عملکرد این مواد برای کاربردهای فناورانه، نقشی کلیدی ایفا کند [2]. در این پژوهش، با بهره‌گیری از مجموعه داده‌های گردآوری شده از منابع معتبر علمی، الگوریتم خوشه‌بندی K-Means به منظور استخراج الگوهای نهفته از داده‌های پیچیده مواد آنتی‌فرومغناطیس مورد استفاده قرار گرفته است. با سنجش عملکرد این الگوریتم از منظر دقت خوشه‌بندی و پایداری نتایج، تحلیلی بر روابط میان ویژگی‌های میان مواد آنتی‌فرومغناطیس و خوشه‌های حاصل ارائه می‌گردد. یافته‌های این مطالعه، بر نقش کلیدی انتخاب ویژگی در ارتقای کیفیت خوشه‌بندی تأکید دارد و با تلفیق خوشه‌بندی و تحلیل‌های داده‌محور، گامی مؤثر در راستای بهره‌گیری از ظرفیت‌های نهان مواد آنتی‌فرومغناطیس در فناوری‌های آینده برمی‌دارد.

روش‌های محاسباتی

مجموعه داده مورد بررسی در این پژوهش، شامل ۹۸۰ ماده آنتی‌فرومغناطیس[16] است که از پایگاه داده MagnData[17] گردآوری شده‌اند. در انتخاب داده‌ها، صرفاً موادی مدنظر قرار گرفته‌اند که حالت پایه آنتی‌فرومغناطیسی و دمای نیل[18] آن‌ها به‌صورت آزمایشگاهی در منابع معتبر گزارش شده است. این انتخاب مبتنی بر نقش کلیدی دمای نیل به عنوان شاخص تعیین‌کننده رفتار مغناطیسی در مواد آنتی‌فرومغناطیس است که امکان تحلیل خوشه‌بندی معنادار و تفسیر فیزیکی نتایج را فراهم می‌سازد. برای استخراج ویژگی‌ها، از بسته پایتونی MatFeaLib[19]، بهره گرفته شد که شامل مجموعه‌ای از ویژگی‌های اتمی مرسوم و محاسبات مبتنی بر توابع چگالی DFT-HSE و DFT-HSE-Spin است. این مجموعه‌ها امکان محاسبه و گردآوری ویژگی‌های متنوع از منابع معتبر را فراهم می‌کنند. ویژگی‌های استخراج شده شامل ویژگی‌های عمومی عناصر، خصوصیات اندازه گیری شده هر اتم و خواص فیزیکی آن‌ها در فاز خالص می‌باشد. برای محاسبه ویژگی‌های اتمی، تأثیر عدد استوکیومتری مواد، با به‌کارگیری معیارهای آماری مختلف شامل کمینه، بیشینه، انحراف معیار و نظیر آن لحاظ شده است. هدف از این محاسبات، ثبت دقیق تنوع و توزیع خواص مؤثر بر رفتار آنتی‌فرومغناطیسی داده‌ها و بهینه‌سازی فرایند خوشه‌بندی بوده است.

با توجه به ماهیت آزمایشگاهی داده‌ها و عدم دسترسی به اطلاعات ساختاری هر ماده، ویژگی‌های مرتبط با ساختار بلوری در این مطالعه مورد بررسی قرار نگرفته‌اند. در فرایند خوشه‌بندی مجموعه داده به

15 - Clustering
16 - Antiferromagnetism (AFM)
17 - https://www.cryst.ehu.es/magndata/
18 - Néel Temperature
19 - https://matfealib.readthedocs.io

گروه‌هایی تقسیم می‌شود که در آن‌ها، ناهمگنی درون‌خوشه‌ای[20] کمینه و ناهمگنی بین‌خوشه‌ای[21] بیشینه می‌شود.

در این پژوهش، پس از پیش‌پردازش داده‌ها از الگوریتم K-Means به دلیل سادگی، کارایی محاسباتی بالا و قابلیت تفسیرپذیری نتایج، به عنوان روشی مناسب برای خوشه‌بندی مواد آنتی‌فرومغناطیس و تحلیل داده‌های مورد مطالعه، انتخاب شد.

الگوریتم K-Means با محاسبه مجموع مربعات فاصله اقلیدسی بین نقاط داده تلاش می کند فاصله بین نقاط داده و مرکز خوشه کمینه شود. در این الگوریتم برای تعیین تعداد بهینه خوشه‌ها (K)، از دو روش ارزیابی استفاده می‌شود: روش آرنج[22] و امتیاز سیلوئت[23]. با محاسبه و بررسی نمودار امتیازهای سیلوئت برای مقادیر K از ۲ تا ۱۰ نشان داده شد که K=4 بهترین تعادل را بین کیفیت خوشه‌بندی و قابلیت تفسیر نتایج فراهم می‌کند [3].

در یادگیری بدون نظارت، از آنجا که هدف، پیش‌بینی یا طبقه‌بندی صریح یک کمیت مشخص نیست، گزینش ویژگی‌های مؤثر به منظور آشکارسازی الگوهای نهفته در داده‌ها، ضرورت اجتناب‌ناپذیری است که ذاتاً با چالش‌های پیچیده‌ای همراه می‌باشد. بنابراین، به‌منظور ارتقاء کیفیت خوشه‌بندی و کاهش پیچیدگی محاسباتی در تحلیل مواد آنتی‌فرومغناطیس، رویکرد انتخاب ویژگی مبتنی بر شاخص سیلوئت[24] پیاده‌سازی شد. در این رویکرد، هدف شناسایی ویژگی‌هایی است که بیشترین تأثیر را در تفکیک و پایداری خوشه‌ها داشته باشند. شاخص سیلوئت، معیاری کمّی برای ارزیابی کیفیت خوشه‌بندی است که به‌صورت همزمان میزان انسجام درون‌خوشه‌ای و جدایی بین‌خوشه‌ای را اندازه‌گیری می‌کند. مقادیر این شاخص در بازه [۱- و ۱+] قرار دارند، به‌طوری که مقادیر نزدیک به ۱ نشانگر کیفیت بالای خوشه‌بندی هستند [4].

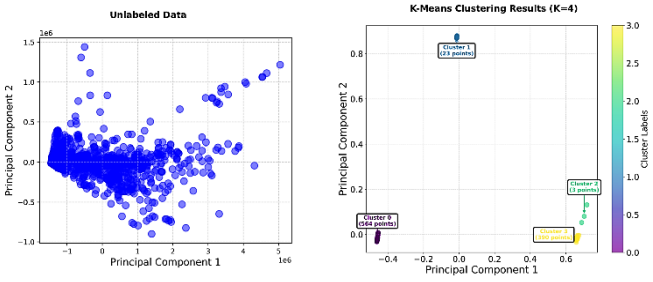
فرایند انتخاب ویژگی به‌صورت افزایشی و مبتنی بر بیشینه‌سازی امتیاز سیلوئت (با آستانه بهبود ≤۰/۰۱) انجام شد و ویژگی‌هایی با امتیاز کمتر از ۰/۶ حذف گردیدند. درنهایت، زیرمجموعه‌ای بهینه از ویژگی‌ها انتخاب می‌شود که ضمن دستیابی به بالاترین میانگین امتیاز سیلوئت، کارایی محاسباتی الگوریتم را نیز بهبود می‌بخشد. نتایج حاصل از این فرایند، چارچوبی تحلیلی برای بررسی ارتباط میان ویژگی‌های منتخب و دمای نیل فراهم می‌سازد.

تحلیل و بررسی نتایج

در گام نخست، فرایند انتخاب ویژگی با مجموعه داده اولیه متشکل از ۷۳۸ ویژگی استخراج‌شده از چهار زیرمجموعه مجزا حاوی خواص اتمی، الکترونی و مغناطیسی آغاز شد. هر زیرمجموعه به‌طور جداگانه ارزیابی گردید. تلفیق نتایج این چهار زیرمجموعه منجر به استخراج ۱۲۷ ویژگی شد که افزایش شاخص سیلوئت از ۰/۱۸ (در حالت اولیه با ۷۳۸ ویژگی) به ۰/۴۰ را همراه داشت. در گام دوم و با اعمال مجدد فرایند انتخاب ویژگی بر روی مجموعه منتخب، تعداد ویژگی‌ها به ۵۲ ویژگی کاهش یافت و شاخص سیلوئت به ۰/۸۹ ارتقاء یافت (معادل ٪۳۹۵ رشد نسبی). در مرحله نهایی و به‌منظور بهبود تفسیرپذیری فیزیکی با اعمال تحلیل همبستگی پیرسون به منظور حذف ویژگی‌هایی با ضریب همبستگی بیش از ۰/۹۵، مواردی که دارای واریانس کمتر بودند حذف گردیدند. و تعداد ۲۸ ویژگی انتخاب شده در این مرحله شاخص سیلوئت را تا ۰/۹۲ بهبود بخشید. این روند پیوسته در شاخص سیلوئت نشان می دهد ویژگی‌های نهایی منتخب توانسته‌اند ساختار

[20] - Intra-cluster heterogeneity
[21] - Inter-cluster heterogeneity
[22] - Elbow Method
[23] - Silhouette Score
[24] - Silhouette-based Feature Selection – SFS

داده‌ها را به شکل معنادارتری منعکس کنند و این امر از منظر آماری و تفسیرپذیری فیزیکی، کیفیت خوشه‌بندی را به مراتب ارتقاء داده است(شکل ۱).



شکل ۱ : نقاط داده قبل و بعد از خوشه‌بندی

برای درک بهتر تأثیر فرایند انتخاب ویژگی، سنجه‌های مختلف خوشه‌بندی قبل و بعد از اعمال روش‌های انتخاب ویژگی در جدول ۱ به‌طور خلاصه ارائه شده‌اند.

جدول۱ : سنجه‌های خوشه‌بندی طی فرایند انتخاب ویژگی

مرحله	تعداد ویژگی	امتیاز سیلوئت	دیویس–بولدین (DBI)	کالینسکی–هاراباز (CHI)	اینرسی (WCSS)
بدون انتخاب ویژگی	۷۳۸	۰/۱۸۵	۱/۷۲۳	۲۴۵	۱۴۹۷۱
انتخاب ویژگی (گام اول)	۱۲۷	۰/۴۰۶	۱/۰۴۰	۵۹۸	۶۷۷
انتخاب ویژگی (گام دوم)	۵۲	۰/۸۹۷	۰/۳۲۰	۶۳۵۷	۳۵
انتخاب نهایی	۲۸	۰/۹۲۱	۰/۲۸۳	۱۰۳۴۵	۸

در نهایت، رویکرد انتخاب ویژگی مبتنی بر شاخص سیلوئت، چارچوبی کارآمد برای تحلیل داده‌های بدون برچسب در علم مواد ارائه می‌دهد. این روش از پتانسیل برای به‌کارگیری در طراحی مواد مغناطیسی نوین با خواص کنترل‌پذیر برخوردار است.

تحلیل خوشه‌ها

الگوریتم خوشه‌بندی موفق شد ۹۸۰ ماده آنتی‌فرومغناطیس را به چهار خوشه مجزا با اندازه‌های ۵۶۴، ۲۳، ۳ و ۳۹۰ تقسیم کند. این تقسیم‌بندی به شکل معناداری مبتنی بر ویژگی‌های الکترونی (مانند تعداد الکترون‌های ظرفیت و خواص مغناطیسی) و ویژگی‌های فیزیکی (از جمله رسانندگی گرمایی و نقطه ذوب) انجام شد. نتایج نشان می‌دهد مواد درون هر خوشه، اشتراکات ساختاری چشمگیری دارند، در حالی که تفاوت‌های معناداری بین خوشه‌ها مشاهده می‌شود که حاکی از تفاوت‌های بنیادین در ساختار الکترونی و رفتار فیزیکی آن‌هاست.

خوشه اول به‌عنوان بزرگ‌ترین و متنوع‌ترین خوشه، شامل ترکیبات بسیار گوناگونی است. بسیاری از مواد، اکسیدهایی هستند که فلزات قلیایی خاکی را با فلزات واسطه یا عناصر خاکی کمیاب ترکیب می‌کنند. حضور فلزات واسطه با زیرلایه d نیمه‌پر و عناصر خاکی کمیاب با زیرلایه f پرنشده، نشانگر برهم‌کنش‌های تبادلی قوی بین گشتاورهای مغناطیسی است. زیرلایه نیمه‌پر d در فلزات واسطه، هم‌پوشانی مؤثر اوربیتالی با اتم‌های اکسیژن ایجاد می‌کنند که مسیرهای تبادلی مستقیم[۲۵] را تسهیل می‌نماید. این پدیده، عامل اصلی تقویت برهم‌کنش‌های آنتی‌فرومغناطیسی و افزایش دمای نیل در این مواد است. خوشه دوم شامل ۲۳ ترکیب حاوی پالادیوم به همراه عناصر خاکی کمیاب و عناصر گروه‌های III و IV جدول تناوبی است. عنصر پالادیوم به‌دلیل برخورداری از زیرلایه d کاملا پر، برهم‌کنش‌های ضعیفی ایجاد می‌کند که موجب تضعیف اثرات مغناطیسی عناصر دارای زیرلایه‌ی ٤f پرنشده می‌شود. افزون بر این،

[25] - superexchange

حضور عناصر گروه p با ایجاد ناخالصی ساختاری در شبکه بلوری، مسیرهای تبادلی غیرمستقیم را مختل می‌نماید. این اختلال، دامنه همبستگی مغناطیسی را کاهش داده و دمای نیل را پایین می‌آورد. خوشه سوم، کوچکترین گروه شناسایی شده، شامل سه ترکیب میان‌فلزی است که عنصر خاکی کمیاب Tb را با فلزات نجیب نقره و طلا، و همچنین عناصر آلومینیوم و سیلیسیوم ترکیب می‌کند. در این خوشه مقدار میانگین رسانایی گرمایی و نقطه ذوب بسیار بالا هستند که ناشی از پیوندهای فلزی قوی و ساختار بلوری منظم در ترکیبات میان‌فلزی می‌باشد. این خوشه پایین‌ترین مقدار میانگین دمای نیل را دارد که نشانگر برهم‌کنش آنتی‌فرومغناطیسی ضعیف است که عمدتا به دلیل ماهیت موضعی اوربیتال‌های پرنشده 4f در Tb و اثر پوشش الکترونی فلزات نجیب است. خوشه نهایی متنوع‌ترین گروه را تشکیل می‌دهد و اکسیدهایی با ترکیبات پیچیده‌تر با عناصر سبک را شامل می‌شود. فلزات واسطه با زیرلایه d نیمه‌پر به وفور در این خوشه حضور داشته و عمدتاً در ساختارهای اکسیدی یا بلورهای پیچیده چندجزئی یافت می‌شوند. حضور همزمان فلزات قلیایی و عناصر سبک، حاکی از ترکیبی از اکسیدهای معدنی و برخی ترکیبات هیبریدی آلی- معدنی است که علی‌رغم پیچیدگی ساختاری، خاصیت آنتی‌فرومغناطیسی را حفظ می‌کنند. مقدار میانگین بالای دمای نیل در این خوشه و وجود عناصر مغناطیسی قوی مانند کروم، منجر به برهم‌کنش‌های تبادلی قوی و تقویت رفتار آنتی‌فرومغناطیسی می‌شود.

نتایج فوق در جدول ۲ به‌طور خلاصه بیان شده است.

جدول۲ : خصوصیات خوشه‌های حاصل از خوشه‌بندی مواد آنتی‌فرومغناطیس

خوشه	تعداد مواد	عناصر کلیدی	میانگین دمای نیل	کاربردها
۰	۵۶۴	فلزات واسطه، خاکی کمیاب، اکسیژن	۱۱۳ بالا	اسپینترونیک، حسگر مغناطیسی
۱	۲۳	Pd ، خاکی Pکمیاب، عناصر	۵۲ پایین	کاتالیزور، الکترونیک کم‌مصرف
۲	۳	Tb ، فلزات Au, نجیب (Ag(	۱۶ بسیار پایین	پوشش‌های هوافضا، قدرت
۳	۳۹۰	فلزات واسطه، اکسیژن، فلزات قلیایی	۹۴ متوسط	سیستم‌های مغناطیسی پیشرفته

نتیجه گیری

این پژوهش با بهره‌گیری از روش انتخاب ویژگی مبتنی بر شاخص سیلوئت، ابعاد داده‌ها را از ۷۳۸ به ۲۸ ویژگی کاهش داد که بهبود ۵۱۰ درصدی در شاخص سیلوئت (از ۰.۱۸ به ۰.۹۲) و کاهش ۹۵ درصدی زمان محاسباتی الگوریتم K-Means را به همراه داشت. بر این اساس، ۹۸۰ ماده آنتی‌فرومغناطیس به چهار خوشه متمایز دسته‌بندی شدند.

نتایج نشان داد پرشدگی زیرلایه d در فلزات واسطه و هم‌پوشانی اوربیتالی با اکسیژن، نقش اصلی در تقویت برهم‌کنش‌های تبادلی و افزایش دمای نیل دارند. این مطالعه چارچوبی نوین برای طراحی مواد آنتی‌فرومغناطیس با خواص کنترل‌پذیر ارائه می‌دهد. این رویکرد، درک بنیادین از مواد مغناطیسی را تعمیق و اکتشاف مواد پیشرفته در حوزه‌های انرژی و فناوری کوانتومی را تسریع می‌کند.

مرجع‌ها

[1] S. Acevedo, M. Arlego, and C. A. Lamas, “Phase diagram study of a two-dimensional frustrated antiferromagnet via unsupervised machine learning,” *Phys. Rev. B*, vol. 103, no. 13, p. 134422, 2021.

[2] T. Jungwirth, X. Marti, P. Wadley, and J. Wunderlich, “Antiferromagnetic spintronics,” *Nat. Nanotechnol.*, vol. 11, no. 3, pp. 231–241, 2016.

[3] K. P. Sinaga and M.-S. Yang, “Unsupervised K-means clustering algorithm,” *IEEE access*, vol. 8, pp. 80716–80727, 2020.

اثر متقابل انتشار بیماری و پیدایش همکاری در اجتماع

نوری، مهران[۱]؛ عظیمی، ناهید[۱]؛ سلحشور، محمد[۲]

[۱] *دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی زنجان، زنجان*

[۲] *مرکز مطالعات پیشرفته رفتار جمعی، دانشگاه کنستانتس، کنستانتس، آلمان*

چکیده

همکاری افراد در اتخاذ تدابیر حفاظتی در کنترل بیماری موثر است و ایمنی جمعی را به عنوان یک کالای عمومی ایجاد می کند. در مقابل، وجود اپیدمی یک عامل محرک برای پیدایش و تقویت همکاری در جامعه است. در این کار تلفیق دو مدل انتشار بیماری و بازی کالای عمومی را در نظر گرفته و اثر متقابل این دو دینامیک را بر یکدیگر مطالعه می کنیم. نشان می دهیم در حالی که اثر محافظت خودمحور باعث تقویت همکاری می شود در مقابل ویژگی نوع دوستی با اثر کاهش انتقال بیماری سود حاصل از همکاری را کاهش می دهد.

The interplay between disease spreading and the emergence of cooperation in society

Noori, Mehran[1]; Azimi, Nahid[1]; Salahshour, Mohammad[2]

[1] *Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan*

[2] *Max Planck Institute of Animal Behavior, Konstanz, Germany*

Abstract

Individual cooperation in adopting protective measures plays an important role in controlling diseases and creates herd immunity as a public good. Conversely, the presence of an epidemic acts as a driving force for the emergence and strengthening of cooperation within society. In this study, we consider the integration of two models — disease spreading and the public goods game — and investigate the mutual influence of these two dynamics on each other. We show that while self-interested protective behavior promotes cooperation, altruistic behavior, by reducing disease transmission, can diminish the benefits of cooperation.

مقدمه

یکی از اهداف اساسی پژوهش‌های علمی در زمینه دینامیک همه‌گیری، دستیابی به درک بهتر از سازوکارهایی است که از طریق آن‌ها می‌توان شیوع بیماری‌های همه‌گیر را کنترل کرد [۱].

واکنش‌های رفتاری افراد نسبت به گسترش بیماری، مانند اتخاذ اقدامات پیشگیرانه نظیر واکسیناسیون [۲] و فاصله‌گذاری اجتماعی [۳]، می‌تواند در کنترل انتشار بیماری مؤثر باشد. اقدامات پیشگیرانه هزینه‌های اجتماعی و مالی دارند، اما به نفع جامعه هستند و ایمنی جمعی یک دستاورد عمومی محسوب می شود. از این رو می توان مساله را در قالب نظریه بازی های تکاملی و با استفاده از بازی کلای عمومی مطالعه کرد [۴،۵]. یکی از نقاط کانونی مورد علاقه در این زمینه، چرخه بازخورد بین تصمیم‌گیری‌های فردی و گسترش فرد با احتمال τ در بازی کالای عمومی (PGG) شرکت می‌کند و با احتمال $1-\tau$ در معرض بیماری طبق مدل سالم–بیمار–سالم SIS قرار دارد. در دینامیک بازی کالای عمومی، افراد در گروه‌هایی با اندازه g در بازی شرکت می‌کنند. در این بازی دو استراتژی وجود دارد، افراد یا همکار (C) هستند یا موج‌سوار (D). همکاران هزینه‌ای به میزان c_G برای سرمایه‌گذاری در کالای عمومی می‌پردازند، در حالی که موج‌سواران هیچ هزینه‌ای پرداخت نمی‌کنند. مجموع سرمایه‌گذاری‌ها در کالای عمومی در ضریب هم‌افزایی r ضرب شده و سپس به‌طور مساوی میان تمامی اعضای گروه تقسیم می‌شود. در دینامیک انتشار بیماری افراد سالم (S) با احتمال α_0 ممکن است از همسایگان بیمار (I) آلوده شوند و با نرخ μ بهبود یابند. بنابراین افراد به چهار گروه SC (سالم همکاری کننده) , SD (سالم موج سوار) IC (بیمار همکاری کننده) و ID(بیمار موج سوار) تقسیم می شوند. برای در نظر گرفتن تأثیر همکاری بر کاهش انتقال بیماری، دو پارامتر معرفی می‌شوند: α_t که کاهش انتقال از بیماری که خود مراقبتی را انجام می دهد (بیمار همکاری کننده) را نشان می‌دهد، و α_r که کاهش ابتلای فرد سالمی که خودمراقبتی را انجام می دهد (سالم همکاری کننده) را بیان می‌کند. بر این اساس، نرخ انتقال بیماری بسته به نوع رابطه بین فرد سالم و بیمار (همکار یا موج‌سوار) متفاوت است و به صورت ترکیبی از این پارامترها تعریف می‌شود.

$$\mathrm{SD+ID} \xrightarrow{\alpha_0} \mathrm{ID+ID},$$

همه‌گیری است که می‌تواند به دینامیک‌های پیچیده رفتار افراد و گسترش بیماری منجر شود [۶]. این مقاله به بررسی تعامل بین گسترش همه‌گیری و تکامل همکاری از طریق مدل جفت شده بازی کالاهای عمومی و مدل انتشار سالم–بیمار–سالم می‌پردازد.

روش‌های محاسباتی

در این مطالعه، جمعیتی با N فرد در نظر گرفته می‌شود که هر

$$\begin{aligned}
&\mathrm{SD+IC} \xrightarrow{\alpha_0\alpha_t} \mathrm{ID+IC},\\
&\mathrm{SC+IC} \xrightarrow{\alpha_0\alpha_t\alpha_r} \mathrm{IC+IC},\\
&\mathrm{SC+ID} \xrightarrow{\alpha_0\alpha_r} \mathrm{IC+ID}.
\end{aligned} \qquad (۱)$$

همچنین فرض می‌کنیم که افراد بیمار هزینه‌ای به نام *هزینه ابتلا* (c_I) پرداخت می‌کنند، که این هزینه می‌تواند مرتبط با درمان ناشی از بیماری باشد. بنابراین، پاداش خالص هر فرد در یک گروه g با G عضو، به‌صورت زیر قابل محاسبه است:

$$\begin{aligned}
\pi^{g}_{IC} &= rc_G\frac{N_C+1}{G}-c_G-c_I,\\
\pi^{g}_{ID} &= rc_G\frac{N_C}{G}-c_G,\\
\pi^{g}_{SC} &= rc_G\frac{N_C+1}{G}-c_G-c_I,\\
\pi^{g}_{SD} &= rc_G\frac{N_C}{G}.
\end{aligned} \qquad (۲)$$

در اینجا، N_C تعداد همکاران در گروه فرد مرکزی مورد نظر است . برای دینامیک بازی کالای عمومی، در یک جمعیت ساختارمند[1]، افراد انتخاب‌شده در n بازی کالای عمومی شرکت می‌کنند که هر کدام حول یکی از همسایگان و خودشان شکل می‌گیرد. پاداش فرد x، برابر با مجموع پاداش‌هایی است که از تمامی گروه‌هایی که در آن‌ها شرکت داشته، کسب کرده است و با Π_x نشان داده می‌شود. سپس، یک فرد دیگر y به‌صورت تصادفی از بین همسایگان x انتخاب شده و پاداش او نیز به همان روش محاسبه می‌شود. فرد x

سپس استراتژی خود را با مقایسه با استراتژی فرد y، با استفاده از احتمال فرمی[۲] به‌روزرسانی می‌کند:

$$W(s_x \leftarrow s_y)=\frac{1}{1+\exp](\Pi_x-\Pi_y)/K[}\ , \qquad (۳)$$

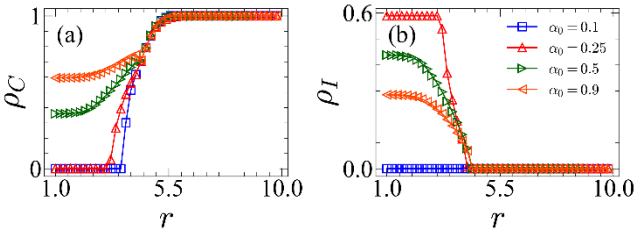
که در آن، پارامتر K میزان عدم قطعیت در فرآیند به‌روزرسانی استراتژی را کنترل می‌کند و s_x استراتژی گره i ام است.

هر N بار انتخاب و مشارکت افراد یک گام کامل مونت‌کارلو را تشکیل می‌دهد، که به‌طور میانگین به هر گره یک‌بار فرصت به‌روزرسانی می‌دهد. این فرایند تا رسیدن به وضعیت پایدار ادامه می‌یابد.

در فرایند انتشار بیماری، ابتدا گره‌ی انتخاب‌شده x بررسی می‌شود؛ اگر بیمار باشد، با احتمال μ به حالت سالم بازمی‌گردد. در غیر این صورت (اگر سالم باشد)، ممکن است با توجه به استراتژی خود، استراتژی همسایه‌ی بیمار، و طبق رابطه (۱)، از یکی از همسایگان بیمار خود آلوده شود.

نتایج

شبیه‌سازی عددی برای شبکه مربعی با $L^2=100\times100$ گره و شرایط مرزی دوره‌ای انجام می‌شود. شرایط اولیه شامل نسبت $\rho_{0c}=۰,۵$ برای همکاران و $\rho_{0I}=۰,۰۱$ برای افراد بیمار است که به‌صورت تصادفی در جمعیت توزیع شده‌اند. در تمامی شبیه‌سازی‌ها، نرخ بهبودی و عدم قطعیت به‌ترتیب $\mu = 0.3$ و $K=0.5$ در نظر گرفته شده‌اند. پارامترها در جایی که تغییر نمی‌کنند به صورت ثابت $\alpha_r=\alpha_t=۰,۰۱$، $c_I=10$، $c_G=1$، $r=3$ و $\alpha_0=۰,۵$ در نظر گرفته شده‌اند. نتایج عددی از میانگین‌گیری روی ۲۰ تکرار به‌دست آمده‌اند. همچنین، در تمام شبیه‌سازی‌ها فرض



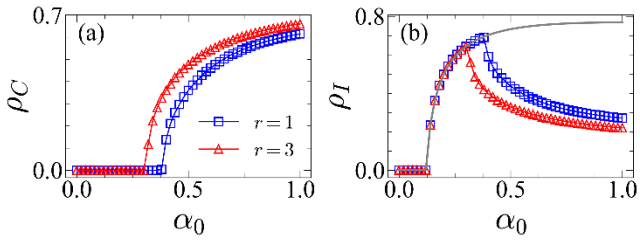
شکل ۱: مقادیر پایای کسر افراد همکاری کننده ρ_C و افراد بیمار ρ_I به عنوان تابعی از ضریب هم‌افزایی r، برای مقادیر مختلف نرخ انتشار بیماری α_0 در یک شبکه مربعی.

می‌شود که به‌روزرسانی استراتژی‌ها کندتر از گسترش اپیدمی انجام می‌شود، یعنی $\tau\ll1$ ومقدار آن $\tau=۰,۱$ است. شبکه مربعی ساختارمند و یکنواخت است. در این حالت، گره‌ها در گروه‌هایی با اندازه $G=5$ قرار دارند که با یکدیگر همپوشانی دارند؛ به طوری که هر بازیکن هم در بازی خود به‌عنوان گره کانونی و هم در بازی همسایگانش شرکت می‌کند. پرداخت کل بر اساس مشارکت در این گروه‌ها محاسبه می‌شود.

هدف این مطالعه بررسی رابطه دوسویه بین همکاری و گسترش بیماری است. متغیرهای اصلی نسبت کل افراد آلوده $\rho_I\equiv\rho_{IC}+\rho_{ID}$ و همکاری کننده $\rho_C\equiv\rho_{IC}+\rho_{SC}$ هستند.

برای بررسی تأثیر بیماری بر همکاری، ضریب هم‌افزایی r در محدوده‌ای انتخاب می‌شود که در آن، در بازی کالای عمومی، همکاری شکل نمی‌گیرد. به‌طور مشابه، پارامترهای دینامیک اپیدمی در محدوده‌ای تنظیم می‌شوند که در مدل استاندارد SIS، شیوع بیماری تضمین شود. شکل ۱ نسبت همکاران و افراد آلوده را در حالت پایا به‌عنوان تابعی از ضریب هم‌افزایی بازی کالای عمومی برای مقادیر مختلف α_0 را نشان می‌دهد. برخلاف دینامیک جداگانه مدل SIS، افزایش نرخ انتقال α_0 منجر به افزایش نسبت افراد آلوده نمی‌شود؛ بلکه موجب افزایش سطح همکاری شده و در نتیجه، سرکوب مؤثرتری از اپیدمی را به دنبال دارد. برای مقادیر بسیار کوچک α_0 ، بیماری انتشار نمی‌یابد و بنابراین تکامل همکاری صرفاً

تحت تأثیر دینامیک بازی کالای عمومی قرار دارد. با افزایش α_0، هزینه ابتلا به بیماری می‌تواند حتی در مقادیر پایین‌تر r—که در غیاب اپیدمی همکاری پدید نمی‌آید—منجر به شکل‌گیری همکاری شود. برای مقادیر r بزرگ‌تر از نقطه گذار فاز در بازی کالای عمومی استاندارد، رفتار سامانه هم‌تکاملی عمدتاً تحت تاثیر دینامیک بازی

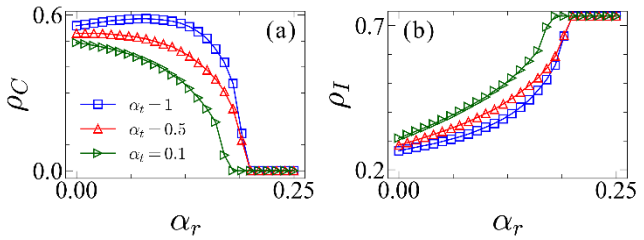


شکل ۲: مقادیر پایاس کسر افراد همکار ρ_C و افراد بیمار ρ_I به عنوان تابعی از نرخ انتشار بیماری α_0، برای مقادیر مختلف ضریب هم‌افزایی r در یک شبکه مربعی. خط خاکستریِ پیوسته نشان‌دهنده‌ی کسر افراد آلوده در مدل استاندارد SIS است.

قرار می‌گیرد، که این امر باعث کاهش اپیدمی در مقادیر بالای r می‌شود.

به‌منظور درک بهتر تأثیر تکامل همکاری بر گسترش اپیدمی در شکل۲ نسبت افراد همکاری کننده و افراد بیمار را به‌عنوان تابعی از α_0 نمایش می‌دهیم. در هر دو حالت، برای مقادیر بسیار پایین α_0، بیماری گسترش نمی‌یابد و در نتیجه، همکاری نیز شکل نمی‌گیرد. با افزایش α_0 ،یک گذار فاز به حالت بیمار در یک مقدار بحرانی در شکل۲(b) مشاهده می‌شود. پس از آغاز گسترش بیماری، افراد می‌توانند با اتخاذ راهبرد همکاری، پاداش خود را بهبود بخشند. بنابراین، در نقطه‌ی بحرانی دومی در شکل۲(a)، همکاری شکل می‌گیرد. افزایش بیشتر α_0 فراتر از نقطه‌ی بحرانی دوم، منجر به کاهش در نسبت افراد آلوده می‌شود. میزان این کاهش در شیوع بیماری نسبت به چگالی افراد آلوده در مدل استاندارد SIS که با خط خاکستریِ پیوسته نمایش داده شده است، نشان داده شده است.

یکی از پرسش‌های کلیدی این پژوهش، شناسایی عوامل مؤثر بر تکامل همکاری در مواجهه با اپیدمی است. در مدل ما، همکاری از دو مسیر اثرگذار است: کاهش خطر ابتلا از طریق ترجیح شخصی (α_r) و کاهش انتقال بیماری به دیگران از طریق نوع‌دوستی (α_t). شکل۳ نشان می‌دهد که همکاری زمانی شکل می‌گیرد که محافظت خودمحور کارآمد باشد (مقادیر پایین α_r).در این حالت، همکاری افزایش یافته و انتقال بیماری کاهش می‌یابد. اما برخلاف انتظار، افزایش کارایی محافظت نوع‌دوستانه (مقادیر پایین α_t) موجب کاهش همکاری و افزایش آلودگی می‌شود، زیرا با سالم‌تر شدن



شکل ۳: چگالی همکاری کنندگان ρ_C و افراد بیمار ρ_I به‌عنوان تابعی از اثر محافظت خودمحور α_r در شبکه مربعی، نمایش داده شده‌اند. منحنی‌های مختلف مربوط به مقادیر متفاوتی از اثر محافظت نوع‌دوستانه α_t هستند.

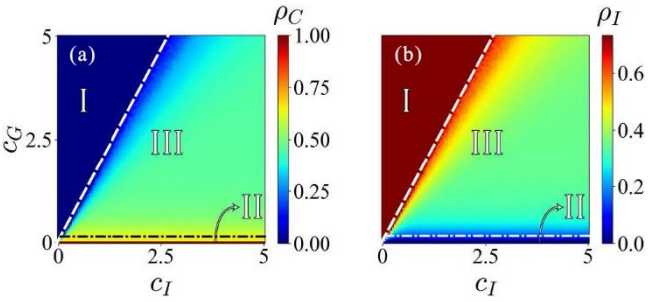
محیط، انگیزه فردی برای همکاری کاهش می‌یابد. بنابراین، برخلاف تصور رایج، همکاری همواره به مهار بیماری نمی‌انجامد.

یکی دیگر از پارامترهای مهم مدل، هزینه‌ی ابتلا به بیماری c_I است که با تغییر دادن پاداش‌های فردی وابسته به وضعیت ابتلا، بر دینامیک تلفیقی اپیدمی و همکاری تاثیر می گذارد. مقادیر ρ_C و ρ_I به‌عنوان تابعی از هزینه‌ی ابتلا و هزینه همکاری در شکل ٤ نمایش داده شده‌اند. در این نمودار می‌توان سه ناحیه مختلف مشاهده کرد: حالت بدون همکاری (I)، حالت بدون بیماری (II) و حالتی که اپیدمی و همکاری همزمان وجود دارند. بر اساس شکل ٤، برای آنکه همکاری در سیستم شکل بگیرد، هزینه ابتلا به بیماری (c_I) باید بزرگ‌تر از هزینه همکاری (c_G) باشد. همچنین مشاهده می‌شود که با افزایش هزینه ابتلا به بیماری، میزان شیوع بیماری کاهش

می‌یابد. در شرایطی که c_G تقریباً صفر باشد، میزان همکاری به حداکثر می‌رسد و بیماری به طور کامل ریشه‌کن می‌شود.

نتیجه‌گیری

در این مطالعه، به بررسی تعامل بین مدل اپیدمی و بازی کالای عمومی پرداختیم؛ مشاهده کردیم که همکاری در انجام اقدامات محافظتی می‌تواند خطر ابتلا به بیماری را کاهش می‌دهد و بیماری نیز با تحمیل هزینه بر افراد آلوده، بر رفتار محافظتی تأثیر می‌گذارد. نتایج نشان می‌دهند که وجود بیماری می‌تواند همکاری را در شرایطی که به طور معمول سودی ندارد تقویت کند. همچنین محافظت خودمحور باعث افزایش همکاری می‌شود و انتقال بیماری



شکل ٤: چگالی همکاری کنندگان ρ_C و افراد بیمار ρ_I به‌عنوان تابعی از هزینه بیماری c_I و هزینه همکاری c_G نمایش داده شده‌اند.

را کاهش می‌دهد. وجود هزینه بیماری نیز در صورتی که بیشتر از هزینه همکاری در اقدامات محافظتی باشد عامل مثبتی برای افزایش همکاری و کاهش انتشار بیماری است.

مرجع‌ها

[1] M. Boguá, R. Pastor-Satorras, and A. Vespignani, "Epidemic spreading in complex networks with degree correlations, in Statistical Mechanics of Complex Networks", *Springer*, *Berlin*, (2003).
[2] Z. Wang, C. T. Bauch, S. Bhattacharyya, A. d'Onofrio, P. Manfredi, M. Perc, N. Perra, M. Salathé, and D. Zhao, "Statistical physics of vaccination", *Phys. Rep.* **664**, 1 (2016).
[3] M. Gosak, M. U. G. Kraemer, H. H. Nax, M. Perc, and B. S. R. Pradelski, "Endogenous social distancing and its underappreciated impact on the epidemic curve", *Sci. Rep.* **11**, 3093 (2021).
[4] R. H. Dees, "Public health and normative public goods", *Public Health Ethics* **11**, 20 (2018).
[5] S. L. Chang, M. Piraveenan, *et al.*, "Game theoretic modelling of infectious disease dynamics and intervention methods: A review", *J. Biol. Dyn.* **14**, 57 (2020).
[6] Z. Wang and C. Xia, "Co-evolution spreading of multiple information and epidemics on two-layered networks under the influence of mass media", *Nonlinear Dyn*. **102**, 3039 (2020).

خواص مغناطو- ساختاری در آلیاژ هویسلر مستقیم Ni2PrBi

شهبازی گنجگاه، ساناز؛ توانا، علی

آزمایشگاه مدل سازی اتمی و شبیه سازی مواد پیشرفته، گروه فیزیک، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل

چکیده

در این مقاله اثرات متقابل مغناطیس و ساختاربلوری را در آلیاژ هویسلر مستقیم Ni_2PrBi، براساس نظریه‌ی تابعی چگالی بررسی می‌کنیم. بررسی تغییرات انرژی بر حسب حجم نشان می‌دهد این ساختار بلوری، برخلاف ساختار وارون آن، پایدار و دارای گشتاور مغناطیسی 1.73 به ازای هر سلول واحد اولیه است. بهم ریختگی تتراگونالی در ساختار بلوری با تغییرات گشتاورهای مغناطیسی اتم‌های تشکیل دهنده همراه است و یک ناهنجاری در مقدار $\Delta c/a = 2\%$ مشاهده می‌شود که نسبت به بهم‌ریختگی تتراگونالی مورد انتظار در $\Delta c/a = 6\%$ انرژی کمتری دارد. همچنین یک کمینه انرژی دیگر برای بهم‌ریختگی تتراگونالی وارون $\Delta c/a = -1\%$ بدون شکل گیری هیچ سد انرژی دیده می‌شود. گشتاورهای مغناطیسی Pr سهم عمده در گشتاور کل بلوری داشته و با گشتاورهای نیکل در خلاف جهت هم هستند. نتایج نشان دهنده‌ی تمایل ذاتی ساختار به بهم‌ریختگی تتراگونالی است و تبادل منفی الکترون‌های جایگزیده بر روی اتم‌های نیکل با الکترون‌های سیار و نیز با هم دیگر، عامل مهمی در انرژی بلوری است.

واژگان کلیدی: *نظریه‌ی تابعی چگالی، آلیاژهای هویسلر، مغناطیس، ساختار بلوری.*

Magneto-structural properties of Ni_2PrBi direct Heusler Alloy

Shahbazi Ganjgah, Sanaz; Tavana, Ali

AMDAM Lab., Department of Physics, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil

Abstract

In this paper, we investigate the interrelation between magnetism and crystal structure in the direct Heusler alloy Ni_2PrBi, based on density functional theory. The energy variation with volume shows that this crystal structure, unlike its inverse structure, is stable and has a magnetic moment of 1.73 per primitive unit cell. The tetragonal disorder in the crystal structure is accompanied by changes in the magnetic moments of the constituent atoms, and an anomaly is observed at $\Delta c/a$=2%, which is lower in energy than the expected tetragonal disorder at $\Delta c/a$=6%. Also, another energy minimum is observed for the reverse tetragonal disorder $\Delta c/a$=-1% without the formation of any energy barrier. The Pr magnetic moments have the most significant contribution to the total crystal magnetic moment and are in the opposite direction to the nickel moments. The results indicate an inherent tendency of the structure towards tetragonal disorder, and the negative exchange of electrons localized on nickel atoms with itinerant electrons and with each other is an important factor in the crystal energy.

Keywords*: Density functional theory, Heusler alloys, Magnetism, crystal structure.*

مقدمه

ترکیبات هویسلر دسته‌ی مهمی از آلیاژها هستند که به دو گروه هویسلر کامل با فرمول شیمیایی X_2YZ و نیمه هویسلر با فرمول شیمیایی XYZ تقسیم بندی می‌شوند که در آن X و Y فلزات واسطه یا عناصر نادر زمین و Z معمولا یک عنصر فلزی ضعیف از گروه‌های اصلی جدول تناوبی است. اولین آلیاژ هویسلر یعنی Cu_2MnSn ، در سال ۱۹۰۳ توسط فردریک هویسلر کشف شد. این نوع سه تایی از آلیاژها به دلیل فرومغناطیس بودنشان، بدون داشتن هیچ عنصر فرومغناطیسی بسیار مورد توجه قرار گرفتند. [۱,۲]

این مواد دارای خواص متنوع فیزیکی از جمله رفتار نیم فلزی، اثر حافظه شکلی مغناطیسی و غیر مغناطیسی، چندفروئیک بودن، خواص غیر بدیهی توپولوژیکی با پتانسیل بالا برای کاربردی‌های اسپینترونیکی، ابررسانایی و... هستند. [۳] در عمل سه کاربرد عمده‌ی آلیاژهای هویسلر، خواص اسپینترونیک، ترموالکتریک و حافظه‌ی شکلی آن‌ها است. [٤] در واقع، در ترکیبات هویسلر ارتباط قوی بین نظم ساختاری، نظم مغناطیسی و ترکیب شیمیایی و ساختار الکترونی وجود دارد.

پیشتر خواص الکترونی، ترابردی و فونون‌ها در ترکیبات هویسلر حاوی عناصر نیکل، پروسدمیوم و بیسموت، مطالعه شده‌اند [٥]. همچنین اثر حافظه شکلی در آلیاژهای هویسلر را می‌توان به روش ابتدا به ساکن مورد بررسی قرار داد. [٦] اثر حافظه شکلی مغناطیسی در آلیاژهای هویسلر به ارتباط خواص ساختاری و مغناطیسی مربوط می‌شود. خواص مغناطیسی در آلیاژهای هویسلر به نوع اتم‌ها و ترکیب شیمیایی بستگی دارد. علت وجود نظم مغناطیسی در آلیاژهای هویسلر، حضور فلزات واسطه و عناصر نادر زمین در این ترکیبات است. پژوهش‌های قبلی نشان می‌دهد که این ترکیبات ساختار شبکه‌ی غیرهارمونیک دارند. در این مقاله اثرات متقابل مغناطیس و ساختار را در ترکیب Ni_2PrBi که یک آلیاژ هویسلر مستقیم است، به روش ابتدا به ساکن مورد بررسی قرار می‌دهیم.

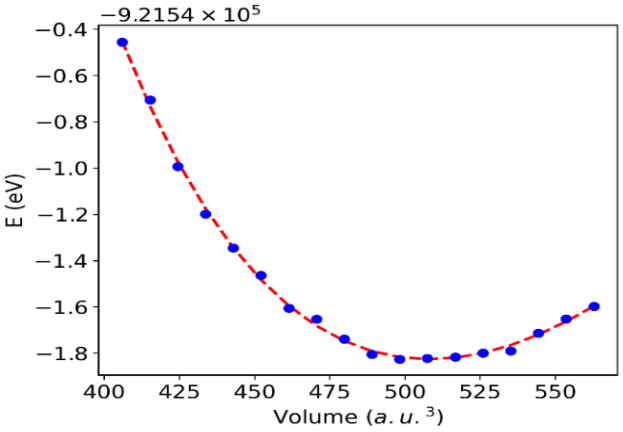
روش انجام محاسبات

به منظور مطالعه‌ی خواص ساختاری و مغناطیسی در ترکیب Ni_2PrBi از رهیافت ابتدا به ساکن نظریه‌ی تابعی چگالی استفاده شده است. [۷] در این محاسبات پتانسیل به صورت کامل و توابع پایه نیز به روش امواج تخت الحاقی خطی شده (LAPW) یا امواج تخت الحاقی به همراه اوربیتال‌های جایگزیده (APW+lo)، در نظر گرفته شده است. همچنین از تقریب شیب تعمیم یافته در نسخه‌ی PBE96 برای پتانسیل‌های همبستگی- تعادلی استفاده شده است[۸].

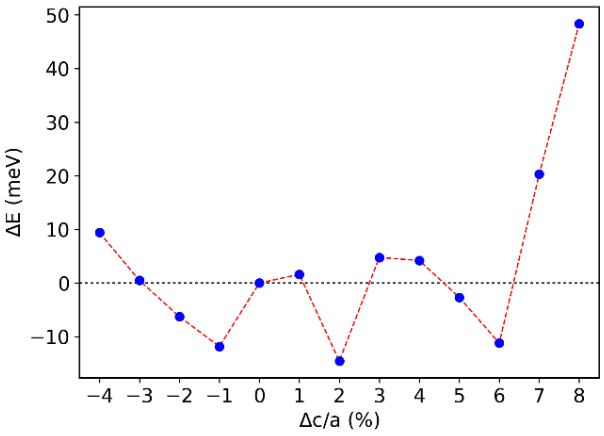
برای محاسبه‌ی انرژی حالت پایه، انتگرال گیری در منطقه‌ی بریلوین بر روی 300 نقطه‌ی k انجام شده است که معادل یک شبکه‌ی 6.7×6.7×6.7 در روش مونخورست-پک است. معیار همگرایی برای انرژی کل و بار به ترتیب 0.1 mRy و 0.01 e انتخاب شده اند. همچنین مقدار قطع برای بسط توابع موج (RK_{max}) برابر 7 و برای انرژی جنبشی برابر 12 Ry انتخاب شده است. شعاع کرات مافین تین برای هر سه اتم به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که نتایج همگرا شود و در هنگام بهم ریختگی‌های ساختاری در هم فرو رفتگی نداشته باشند.

خواص ساختاری

آلیاژهای هویسلر مستقیم دارای ساختار بلوری از نوع $L2_1$ هستند. در شکل ۱، این ساختار بلوری برای ترکیب Ni_2PrBi ترسیم شده است. اتم Ni در مکان X، اتم Pr در مکان Y و اتم Bi در مکان Z قرار دارند. در این ساختار، همه‌ی اتم‌های یکسان از موقعیت بلوری مشابه برخوردار بوده و هم ارز هستند.

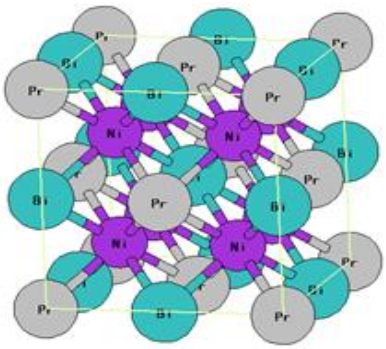


در شکل ۲، نمودار انرژی بر حسب حجم برای این ترکیب ترسیم شده است. با توجه به این‌که هنوز این ترکیب در تجربه ساخته نشده است، مقادیر اولیه‌ی پارامترهای شبکه در مقایسه با ترکیب‌های مشابه انتخاب و در اطراف آن بهینه سازی شده‌است. در این محاسبات قطبش اسپینی نیز لحاظ شده است و همان‌گونه که در شکل دیده می‌شود، نمودار به دست آمده دارای یک کمینه‌ی انرژی است که بیانگر پایدار بودن این ساختار بلوری در حالت قطبیده‌ی اسپینی است. انرژی‌های به دست آمده توسط معادله‌ی حالت مورناگان

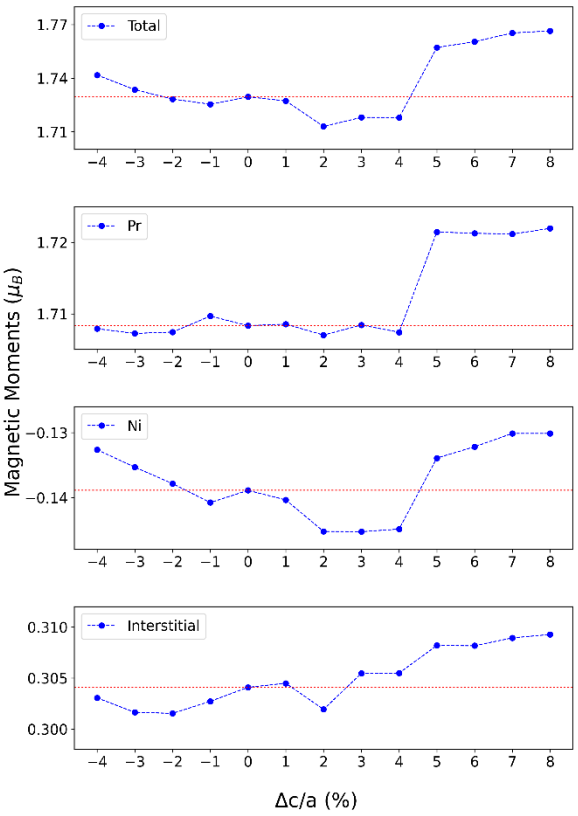


برازش، و در نهایت پارامتر و حجم شبکه‌ی تعادلی دست به می‌آیند که به ترتیب برابر 12.66 a.u. و 507.27 a.u.^{3} هستند. با توجه به این‌که سیستم‌های مغناطیس دارای حالت‌های متعدد مغناطیسی با انرژی بسیار نزدیک به حالت پایه هستند، تطابق نقاط محاسبه شده با معادله‌ی حالت برازش شده، بیانگر همگرایی مناسب محاسبات است.

برای حالت تعادلی، گشتاور کل مغناطیسی سلول واحد برابر $1.73\mu_B$ به دست آمده است که سهم عمده‌ی آن مربوط به اتم Pr است. گشتاور مغناطیسی اتم‌های نیکل در خلاف جهت اتم‌های Pr بوده و از نظر بزرگی نیز نسبت به آن‌ها کوچکتر هستند.



شکل ۱ : ساختار بلوری Ni_2PrBi .



شکل۲ : انرژی برحسب حجم ترکیب Ni_2PrBi در حالت قطبیده‌ی اسپینی. خط چین، برازش با تابع حالت مورناگان را نشان می‌دهد.

شکل۳ : انرژی بر حسب بهم ریختگی تتراگونالی برای ساختار منظم Ni_2PrBiدر حالت مغناطیسی.

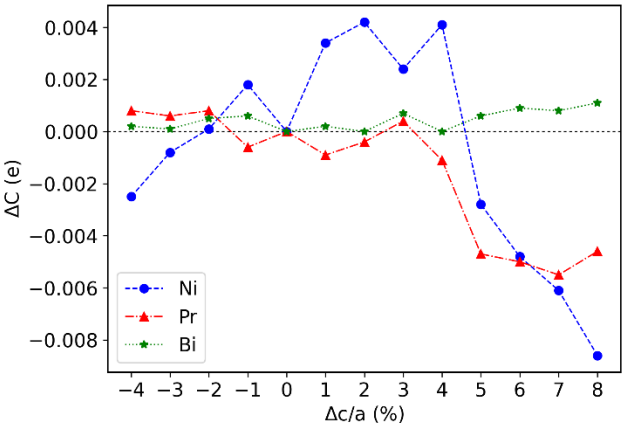
برای ساختار هویسلر معکوس با همین ترکیب، که در آن اتم Pr جایگزین یکی از اتم‌های Ni می‌شود، نمودار انرژی برحسب حجم کمینه‌ای ندارد که نشان دهنده‌ی ناپایداری آن است.

برای بررسی تمایل ساختار مورد نظر به گذار فاز ساختاری مارتنزایت–آستنایت، نمودارانرژی برحسب بهم‌ریختگی تتراگونالی، $\Delta c/a$، در حجم ثابت، برای ساختار مستقیم در حالت قطبیده اسپینی، در شکل ۳ رسم شده‌است. به طور کلی مشاهده می‌شود همانند دیگر هویسلرهایی که گذارفاز مذکور را تجربه می‌کنند. با کشیدن ساختار، در ابتدا انرژی افزایش و سپس کاهش یافته و به یک کمینه‌ی انرژی به ازای $\Delta c/a = 6\%$ می‌رسد و پس از آن انرژی افزایش می یابد. تنها یک نابهنجاری به ازای $\Delta c/a = 2\%$ در نمودار دیده می‌شود

شکل ٤: گشتاورهای مغناطیسی کل و اتم‌های Pr، Ni و الکترون‌های نواحی بینابینی، به ترتیب از بالا به پایین، بر حسب تغییرات بهم ریختگی تتراگونالی برای ساختار منظم Ni_2PrBi .

که نتیجه‌ی تاثیر متقابل خواص مغناطیسی و ساختار بلوری است. از طرفی، با فشردن بلور در یک راستا، انرژی بلافاصله شروع به کاهش یافتن می‌نماید که نمایانگر تمایل ذاتی بلور به بهم ریختگی تتراگونالی است. کمینه‌ی انرژی مربوطه در مقدار $\Delta c/a = -1\%$ به دست آمده‌است.

برای بررسی جزیی‌تر تعامل خواص مغناطیسی با ساختار بلوری، در شکل ٤ گشتاورهای مغناطیسی در ساختار به ازای مقادیر مختلف بهم ریختگی تتراگونالی ترسیم شده است. به دلیل ناچیز بودن، گشتاورهای مغناطیسی بیسموت ترسیم نشده‌اند. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، سهم عمده‌ی گشتاورهای مغناطیسی بلوری ناشی از اتم Pr است. نکته‌ی قابل توجه این است که هر دوی این گشتاورهای مغناطیسی و نیز کمیت‌های مربوطه برای Ni و الکترون‌های بینابینی نیز در $\Delta c/a = 2\%$ کمینه‌ی عمومی یا موضعی دارند که همزمان با کاهش شدید انرژی بلوری است.



شکل۵ : تغییرات چگالی بار بر حسب تغییرات بهم ریختگی تتراگونالی برای ساختار منظم Ni_2PrBi در حالت مغناطیسی.

در $\Delta c/a = -1\%$ مشاهده می‌شود که گشتاور مغناطیسی بلوری مقداری کاهش می‌یابد در حالی که گشتاور مغناطیسی Pr اندکی افزایش یافته است. در نتیجه گشتاورهای بینابینی و اتم‌های Ni نیز کاهش یافته‌اند. برای $\Delta c/a \geq 5\%$ عملا گشتاورهای مغناطیسی به اشباع رسیده و به نظر می‌رسد با افزایش بهم‌ریختگی تتراگونالی خواص مغناطیسی تغییر نمی یابند. تغییرات در انرژی تبادلی در اثر افزایش گشتاورهای مغناطیسی به نظر می‌رسد در ابتدا به خوبی اثرات کشیده شدن پیوندها را جبران نموده و انرژی را کاهش می‌دهند، ولی برای کشیدگی‌های بیشتر با ثابت ماندن گشتاورها انرژی‌های پیوندی غالب می‌شوند.

نکته‌ی دیگری که در شکل ٤ دیده می‌شود، نقش قابل ملاحظه‌ی الکترون‌ها در نواحی بینابینی، الکترون‌های سیار، در خواص مغناطیسی بلور است که عملا گشتاورهای مغناطیسی نیکل را جبران کرده و با توجه به علامت، یک تبادل منفی با آن‌ها دارد.

برای مطالعه‌ی دقیق‌تر سازوکار تغییرات گشتاورهای مغناطیسی، در شکل ۵ نمودار تغییرات چگالی بار الکترونی در داخل کرات مافین-تین به ازای مقادیر مختلف بهم‌ریختگی تتراگونالی برای اتم‌های مختلف ترسیم شده است. براساس شکل مشخص می‌شود که افزایش بار الکترونی یا جایگزیده‌تر شدن الکترون‌ها بر روی اتم Ni، با کاهش انرژی همراه است که از تبادل منفی گشتاورهای مغناطیسی نیکل با گشتاور مغناطیسی الکترون‌های سیار قابل فهم است و به نظر می‌رسد یک عامل مهم در انرژی کل بلور است. با کشیده شدن بلور، چگالی الکترونی به شدت بر روی اتم‌های نیکل و پروسدمیوم کاهش می‌یابد که همراه با افزایش شدید انرژی بلوری است که بیانگر آن است که این الکترون‌ها در واقع در پیوندهای بین اتمی‌ای جایگزیده بوده‌اند که اولا تغییر تعداد آن‌ها چندان تغییری در گشتاورهای مغناطیسی ایجاد ننموده و ثانیا افزوده شدن آن‌ها به نواحی بینابینی سبب افزایش انرژی بلوری شده است.

در مجموع به رغم بزرگتر بودن گشتاورهای مغناطیسی اتم Pr انرژی تبادل منفی اتم‌های نیکل و برهمکنش تک-سایتی الکترون-الکترون در اوربیتال‌های Ni-d، سهم قابل ملاحظه‌ای در انرژی‌های مغناطیسی و بلوری ایفا می‌کنند.

نتیجه گیری

در این مطالعه خواص مغناطو-ساختاری بلور مستقیم هویسلر Ni_2PrBi به روش نظریه‌ی تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج نشان دهنده تمایل ذاتی ساختار به بهم‌ریختگی تتراگونالی است و تبادل منفی الکترون‌های جایگزیده بر روی اتم‌های نیکل با الکترون‌های سیار و نیز با هم دیگر، عامل مهمی در انرژی بلوری است.

مرجع‌ها

[۱] F. Heusler, W. Starck, E. Haupt, Verh. DPG; “Magnetisch-chemische Studien”; vol. **5**, (*Springer, Berlin*, 1903) p. 220.

[۲] F. Heusler, Verh. DPG; “Über magnetische Mn-Al-Legierungen”; vol. **5**, (*Springer, Berlin*, 1903) p. 219.

[۳] C. Felser and A. Hirohata, Eds; “*Heusler Alloys: Properties, Growth, Applications*”; Springer 2016.

[٤] L. Mikaeilzadeh, A. Tavana, F. khoeini; “Electronic structure of the PrNiBi half-Heusler system based on the σGGA+ U method ”; *Scientific Reports* **9,** No.20075 (2019).

[٥] M. Fathi, L.Mikaeilzadeh, A. Tavana; “Electronic Structure And Thermoelectric Properties In Bulk And Thin-Film Structures Of The Pr-Bi-Ni Semi-Heusler Alloy Based On First Principles And Boltzmann Semi Classical Approach”; *Electronics Industries* **11**, No. 4 (2021) 15-24.

[٦] A. Tavana, L. Mikaeilzadeh; “A first principles study of iron doping in Ni2CoGa magnetic shap memory alloy” *AIP Advances* **5,** No. 11 (2015).

[۷] P. Blaha, K. Schwarz, G. KH. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz; “Wien2k”; *An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties* **60**, No. 1 (2001) 155-169.

[۸] J. P. Perdew, K. Burke, M. Emzerhof; “Generalized gradient approximation made simple”; *Phys. Rev. Lett* **18**, No. 77 (1996) 3865.

اثر ناخالصی روی ترابرد اسپینی سیم ابرشبه‌هلیکال

بخشی‌پور، زینب[1*]؛ حسینی، میروحید[1]

[1] گروه فیزیک، دانشگاه زنجان، زنجان

چکیده

در این کار، ما یک سیم هلیکال تحت میدان مغناطیسی زیمن را در مجاورت یک ابررسانای نوع s درنظرمی‌گیریم. این سیستم یک بعدی برهم‌کنشی یک ابررسانای توپولوژیک را شکل می‌دهد و شامل هر دو نوع گاف زیمن و ابررسانا خواهد بود که رسانندگی اسپینی حامل‌های با قفل‌شدگی اسپین-تکانه را تحت تأثیر قرار می‌دهد. ما در چارچوب بوزونش کار کردیم و از ابزار تحلیلی آنالیز گروه بازبهنجارش و تابع حافظه استفاده نمودیم. همچنین ما دریافتیم که فعل و انفعال بین میدان زیمن و ابررسانایی در حضور برهم‌کنش‌ها و ناخالصیِ از نوع بار و اسپین، نتایج جالب توجّهی در پی دارد. ترم زیمن در برهم‌کنش‌های الکترونی جاذبه، ضریب جفت‌شدگی ابررسانایی را مؤثرتر می‌کند. ناخالصی‌ها در محدوده‌های مختلف زیمن، ابررسانایی و برهم‌کنش‌ها، تصحیحات مهمّی را به رسانندگی تحمیل می‌کنند. این نتایج می‌تواند تصوّر دستکاری اسپین این سیستم‌های کوانتومی را برای مهندسی نمونه‌های دلخواه، به واقعیّت نزدیک‌تر کند.

واژگان کلیدی: *ابررسانای توپولوژیک، بوزونش، آنالیز گروه بازبهنجارش، تابع حافظه، ناخالصی، رسانندگی اسپین.*

Effect of impurity on the spin transport in the super-quasihelical wire

Bakhshipour, Zeinab[1*]; Hosseini, Mir Vahid[1]

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

Abstract

In this work, we consider a helical wire under a Zeeman magnetic field in the vicinity of an s-wave superconductor. This interacting one-dimensional system forms a topological superconductor and contains both Zeeman and superconducting gaps, which will affect the spin conductance of spin-momentum locked carriers. We worked within the Bosonization framework and used analytical tools such as the Renormalization Group Analysis and the Memory function. We also found that the interplays between the Zeeman field and superconductivity in the presence of interactions and charge-spin impurities has interesting consequences. The Zeeman term in the attractive interactions makes the superconducting coupling coefficient more relevant. Impurities impose significant corrections to the conductance in different ranges of Zeeman, superconductivity, and interactions. These results could bring the idea of manipulating the spin of these quantum systems to engineer arbitrary patterns closer to reality.

Keywords*: Topological superconductor, Bosonization, Renormalization Group Analysis, Memory function, Impurity, Conductance.*

مقدمه

یکی از دستاوردهای نوین و جذّاب در حوزه‌ی فیزیک ماده چگال پدیده‌ی فیلترینگ اسپینی در سطوح یا لبه‌های عایق‌های توپولوژیک سه یا دو بعدی می‌باشد که کاربردهای مهمی را در اسپینترونیک[1] و محاسبات کوانتومی توپولوژیک[2] دارد. منشأ چنین پدیده‌ای در طی درنظرگرفتن برهم‌کنش بین اسپین حامل‌ها، درجات آزادی مداری آنها و خصوصیّات مغناطیسی مواد شکل می‌گیرد. یکی از این اثرات وابسته به اسپین، برهم‌کنش اسپین–مدار[3] در سیستم‌های هال کوانتومی اسپینی[4] است که به موجب آن سیستم، ناوردای وارون زمان خواهد شد و حامل‌ها یک ترابرد بدون اتلاف را تجربه می‌کنند. در یک بعد، لبه‌های این سیستم‌های هال کوانتومی اسپینی، حالتهای لبه‌ی هلیکال نام دارند که در مقابل انواع ناخالصی‌ها مقاوم هستند. وقتی حالتهای هلیکال در معرض یک میدان مغناطیسی قرار می‌گیرند، ترابرد فیلترشده‌ی اسپینی ایده‌آل‌شان به دلیل آمیختگی جزئی حالتهای اسپینی در نزدیکی‌های نقطه‌ی صفر تکانه، تا حدّی مختل می‌شود. این رویداد، تقارن وارونی زمان را می‌شکند و یک سیم شبه‌هلیکال ایجاد خواهد کرد[5]. علاوه بر آن، مجاورت چنین حالت لبه‌ای شبه‌هلیکال با یک ابررسانای نوع s مرسوم، سیستم را به یک ابررسانای توپولوژیک مبدّل می‌کند که از ویژگی‌های بارز آن تشکیل حالتهای صفر مایورانا[6] در دو انتهای آن است. از طرفی، شکست تقارن وارونی زمان، ویژگی منحصر به فرد حالتهای هلیکال که مصون بودن از پراکندگی‌های برگشتی ناشی از برهم‌کنش‌ها و ناخالصی‌ها می‌باشد را سست و شکننده می‌کند. این شبه‌فیلترینگ اسپینی ناشی از اعمال میدان مغناطیسی و تحمیل بی‌نظمی توسط ناخالصی‌ها، سرنوشت ترابرد ابرحامل‌های همبسته‌ی قوی ما را به گونه‌ی متفاوتی رقم خواهد زد. این موضوع، ما را بر آن داشت تا تأثیر ناخالصی بار و اسپین را در همیلتونی شبه‌هلیکال که در شعاع تأثیر یک ابرسانا قرار دارد، بررسی نمائیم.

مدل و محاسبات تحلیلی

ما یک مجموعه شامل یک لبه‌ی شبه‌هلیکال ناشی از میدان مغناطیسی در تماس با یک ابررسانای مرسوم را درنظرمی‌گیریم. سپس با اضافه کردن موانع ناخالصی بار و اسپین، یک سیستم ابرشبه‌هلیکال واقعی‌تر را مجسّم می‌کنیم. ازآنجائیکه فیزیک یک بعدی برهم‌کنشی چنین مجموعه‌ای در چارچوب نظریه‌ی مایع لاتینجر قرار می‌گیرد، ما تکنیک‌های محاسباتی بوزونش و آنالیز گروه بازبهنجارش[7] را جهت توصیف همیلتونی سیستم و ردگیری برهم‌کنش‌های الکترون–الکترون و همچنین گاف ناشی از ورود میدان زیمن، ابرسانایی و ناخالصی‌ها و تأثیر متقابل آنها به خدمت می‌گیریم. فرم بوزونیزه‌ی همیلتونی ابرشبه‌هلیکال

$$H_{\sup-qhel}=\frac{v}{2}\left[\frac{1}{K}\left(\partial_x\Phi\right)^2+K\left(\partial_x\Theta\right)^2\right] \\ +\frac{\Delta_s}{\pi a_0}\sin\left(2\theta_{k_F}\right)\cos\left(\sqrt{4\pi}\Theta\right) \qquad (۱)$$

که در آن v و K به ترتیب سرعت مد دسته‌جمعی و پارامتر بدون بعد لاتینجر هستند و اطلاعات برهم‌کنش‌های الکترونی و گاف زیمن را در خود گنجانده‌اند.

$$K^{-1}=\sqrt{\frac{v'_F-g_{fb}/8\pi+g_4/8\pi}{v'_F+g_{fb}/8\pi+g_4/8\pi}} \qquad (۲)$$

$$v=\sqrt{(v'_F+g_4/8\pi)^2-(g_{fb}/8\pi)^2} \qquad (۳)$$

که g_4 و g_{fb} به ترتیب قدرت برهم‌کنش از نوع پراکندگی پاشش‌گرا و نوع مؤثر و ترکیبی پراکندگی رو به جلو و برگشت به عقب را معرّفی می‌کنند. این دو در اینجا معادل هم فرض شدند. ما تأثیر زیمن (Δ_z) را به طور مؤثر در میدان‌های تک ذره‌ی فرمیونی درنظرگرفتیم، به نحوی که این ترم سرعت فرمی را در بردار موج $k=0$ به شکل $v'_F=v_F\sqrt{1-\left(\Delta_z/\varepsilon_F\right)^2}$ تغییر می‌دهد که در آن

v_F و ε_F به ترتیب سرعت و انرژی فرمی هستند. Φ و Θ میدان‌های بوزونی، Δ_s ضریب جفت‌شدگی ابررسانا و $\theta_{k_F}=(1/2)\,\mathrm{Arctan}\left(-\Delta_z/k_F v_F\right)$ (مبیّن آمیختگی حالتهای اسپینی) می‌باشند.

تأثیر ناخالصی‌ها در یک بعد، بدلیل محدودیّت فضایی موجود بسیار تأمل برانگیز است. در چنین سیستم‌هایی نقص‌ها و ناخالصی‌ها می‌توانند اثرات جالب توجّهی را روی ترابرد موجودات دسته‌جمعی بوزونی داشته باشند. در کار حاضر، ما با قرار دادن ناخالصی از جنس بار و اسپین، سعی می‌کنیم یک نسخه‌ی واقعی‌تر را ارائه دهیم. علاوه بر آن، یک چنین سیستمی مستعّد دستکاری‌های بار و اسپین هم خواهد بود. به‌طوریکه می‌توان نوید مهندسی‌های نوآورانه‌تری را هم در ذهن پرورش داد. برای این هدف، ما یک ناخالصی واحد را در مبدأ درنظرگرفته و هر بار نوع این ناخالصی را تغییر می‌دهیم. این ناخالصی به شکل پتانسیل دلتاگونه‌ی زیر است

$$V_{imp-c,s}=V_i\,\delta(x) \qquad i=(0,0x,0y,0z) \qquad (٤)$$

که V_i نشان دهنده‌ی قدرت ناخالصی و $\delta(x)$ تابع دلتا دیراک می‌باشد. به این ترتیب فرم بوزونیزه‌ی ترم ناخالصی بار و مؤلفه‌های مختلف ناخالصی اسپین به شکل زیر معرفی می‌گردند

$$H_{imp-c}=\frac{V_0\sin\left(2\theta_{k_F}\right)}{\pi a_0}\cos\left(\sqrt{4\pi}\Phi(0)\right) \qquad (٥)$$

$$H^{x}_{imp-s}=\frac{V_{0x}\cos\left(2\theta_{k_F}\right)}{\sqrt{4\pi}}\left(\partial_x\Theta(0)\right) \qquad (٦)$$

$$H^{y}_{imp-s}=\frac{V_{0y}}{\pi a_0}\cos\left(\sqrt{4\pi}\Phi(0)\right) \qquad (٧)$$

$$H^{z}_{imp-s}=\frac{V_{0z}\cos\left(2\theta_{k_F}\right)}{\pi a_0}\sin\left(\sqrt{4\pi}\Phi(0)\right) \qquad (٨)$$

در ملاحظه‌ی اول ، علاوه بر ترم‌های گرادیان که یک پراکندگی رو به جلو را نشان می‌دهند، ترم‌های پراکندگی برگشت به عقب به شکل میدان‌های گاف دار ساین-گوردون نظیر ترم ابررسانایی به چشم می‌خورد. با یک آنالیز دقیق‌تر، ما علاوه بر تحلیل تأثیر برهم‌کنش‌ها روی همه‌ی میدان‌های گاف‌دار، اثرات اختلال ایجادشده توسط موانع مذکور را مطالعه می‌نمائیم. به‌طور تحلیلی، آنالیز گروه بازبهنجارش توانایی چنین ارزیابی را به ما می‌دهد، به‌طوریکه با یک محاسبه بر پایه توابع همبستگی خواهیم داشت

$$\frac{dy(l)}{dl}=(2-K^{-1})y(l) \qquad (٩)$$

$$\frac{dK^{-1}(l)}{dl}=-\frac{1}{4}y^{2}(l)K^{-2}(l) \qquad (١٠)$$

در اینجا $y(l)=\dfrac{4\Delta_s(l)\sin\left(2\theta_{k_F}\right)}{v}$ است. علاوه بر آن معادلات مربوط به ناخالصی‌ها توسط یک محاسبه‌ی تغییر مقیاس به صورت زیر بدست می‌آیند

$$\frac{dV_i(l)}{dl}=(1-K)V_i(l) \qquad i=(0,0y,0z) \qquad (١١)$$

توجه می‌کنیم که قدرت ناخالصی اسپین در راستای x بدلیل نداشتن رفتار قانون توانی، بازبهنجار نمی‌شود. طبق معادله‌ی (۷)، برای $K^{-1}<2$ ضریب ابررسانایی وارد رژیم مؤثر خود شده و یک گاف را به دنبال دارد. با وجود برهم‌کنش دافعه‌ی الکترونی با مقادیر $0<g_{fb}<1/2$، وارون پارامتر لاتینجر از مرز ۲ افت می‌کند و رژیم مؤثر گاف ابررسانایی، خودنمایی خواهد کرد. در این حالت اگر قدرت میدان زیمن را افزایش دهیم، K^{-1} افزایش یافته و سیستم به ازای مقادیر برهم‌کنشی کوچکتر از ۱/۲ وارد رژیم مؤثر می‌شود. در مقابل، وقتی برهم‌کنش‌ها از جنس جاذبه هستند، افزایش مقدار زیمن، گاف ابررسانایی را قوی‌تر می‌کند، به‌طوریکه حتی برهم‌کنش‌های جاذبه‌ی ضعیفتر هم می‌توانند گاف ابرسانایی خوبی ایجاد نمایند.

رسانندگی اسپین سیم ابرشبه‌هلیکال

رسانندگی اسپین حالتهای لبه‌ی برهم‌کنشی ابرشبه‌هلیکال می‌تواند با توجه به مجموع مقاومتهای خودِ سیم و مقاومت تماسی بین سیم و لیدهای غیربرهم‌کنشی که عهده‌دار محدود کردن طول سیم (L) هستند، ارزیابی شود. در حالت کلی، مقاومت سیم به شکل $R_{wire}=\rho L$ و مقاومت تماسی $R_{contact}=1$ معادل یک کوانتوم وارون رسانندگی درنظرگرفته می‌شوند. نتیجه برای رسانندگی به شکل زیر خواهد بود

$$G_s=\frac{1}{R_{wire}+R_{contact}}\approx 1-R_{wire} \qquad (۱۲)$$

در اینجا مقاومت سیم شامل هردو بخش بدون ناخالصی و در حضور آن است. توجه می کنیم که تقریب بالا برای R_{wire} کوچک معتبر می‌باشد. رسانندگی اسپین کل، فرم توصیف‌پذیرتر زیر را می‌گیرد

$$G_s=1-G_{\sup-qhel}-G_{imp} \qquad (۱۳)$$

یک تقریب اختلالی کارساز برای محاسبات مربوط به رسانندگی استفاده از تکنیک تابع حافظه[7] می‌باشد که در اینجا به‌کار گرفته شد. این روش مبتنی بر معادلات کوبو برای رسانش است. طبق محاسبات، نتایج بخش عاری از ناخالصی و تصحیحی که ترم‌های ناخالصی بار و اسپین به رسانندگی اصلی وارد می‌کنند به شکل زیر بدست می‌آیند

$$G_{\sup-qhel}\propto 1-\Delta_s\sin^2(2\theta_{k_F})T^{2K^{-1}-3}A'(1-\frac{B'}{T^2}) \qquad (۱۴)$$

$$G_{imp-c}\propto \Delta_s^2 V_0^{\,2}\sin^4(2\theta_{k_F})\left(\frac{\hbar v}{a_0k_BT}\right)^{3-K-K^{-1}} \qquad (۱۵)$$

$$G^{x}_{imp-s}\propto \Delta_s^2 V_{0x}^{\,2}\sin^2(4\theta_{k_F})\left(\frac{\hbar v}{a_0k_BT}\right)^{2-K^{-1}} \qquad (۱۶)$$

$$G^{y}_{imp-s}\propto \Delta_s^2 V_{0y}^{\,2}\sin^2(2\theta_{k_F})\left(\frac{\hbar v}{a_0k_BT}\right)^{3-K-K^{-1}} \qquad (۱۷)$$

$$G^{z}_{imp-s}\propto \Delta_s^2 V_{0z}^{\,2}\sin^2(4\theta_{k_F})\left(\frac{\hbar v}{a_0k_BT}\right)^{3-K-K^{-1}} \qquad (۱۸)$$

که A' و B' ضرایب وابسته به پارامتر لاتینجر هستند. در مرحله‌ی آخر محاسبات، نتایج‌مان را توسط آنالیز گروه بازبهنجارش معتبر نمودیم به‌طوریکه به جای ضرایب جفت‌شدگی ساده‌ی $\Delta_s(l)$ و $V_0(l)$ از نمونه‌ی بازبهنجارشده‌ی آنها به‌صورت

$$\Delta_s(l^*)=\Delta_s(l=0)\left(\hbar v/a_0k_BT\right)^{2-K^{-1}} \qquad (۱۹)$$

$$V_{0x}(l^*)=V_{0x}(l=0) \qquad (۲۰)$$

$$V_{0,0y,0z}(l^*)=V_{0,0y,0z}(l=0)\left(\hbar v/a_0k_BT\right)^{1-K} \qquad (۲۱)$$

بر طبق معادله‌ی (۱۴) در غیاب ناخالصی، وقتی $K^{-1}>3/2$ کاهش دما باعث کاهش تأثیر ترم ابررسانایی روی رسانندگی می‌شود و موقعی که $K^{-1}<3/2$ ترم ابررسانایی در رژیم مؤثر خود عمیق‌تر می‌شود که در این حالت، کاهش دما موجب افزایش اثر این ترم روی رسانندگی خواهد شد. علاوه بر آن، با توجه به مباحث مطرح شده در بخش قبل، افزایش میدان مغناطیسی در حضور برهم‌کنش‌های الکترونی جاذبه، تأثیر بیشتری روی کاهش رسانندگی دارد. همچنین توجه می‌کنیم که مؤلفه‌ی x ضریب ناخالصی تحت گروه بازبهنجارش تغییر نمی‌کند، درحالیکه سایر ضرایب بازبهنجار می‌شوند. مشاهده می‌شود که یک پتانسیل ضعیف در راستای موازی با سیم (راستای x) با تولید یک ترم پراکندگی رو به جلو، صرفاً تا حدّ یک ضریب که قدرت ناخالصی است، روی رسانندگی آن تأثیرگذار است. با این توضیح که رفتار توانی ترم ابررسانایی در این تصحیح کارساز است. در مقابل، ناخالصی بار در بازه‌ای که ابررسانا مؤثر می‌شود می‌تواند مورد ارزیابی قرار گیرد. زمانیکه $1/2<K<1$، هر دوی ابررسانایی و ناخالصی مؤثرند و در این حالت ترم ناخالصی، تصحیح جالب توجّهی را به رسانندگی سیم ابرشبه‌هلیکال وارد می‌کند. حتی وقتی $K>1$، که عملاً ناخالصی مقدار ناچیزی دارد، وجود ضریب ابررسانایی مؤثر در این تصحیح،

با افت ضعیف‌تر نسبت به حالت قبل، همچنان رسانندگی را تحت تأثیر قرار می‌دهد. مؤلفه‌های y و z ناخالصی نیز سهمی مشابه ناخالصی بار اما با ضرایب متفاوت در تصحیح رسانندگی دارند.

نتیجه گیری

ما یک سیم ابررسانای توپولوژیک شبه‌هلیکال که توسط لبه‌های هلیکال عایق توپولوژیک دو بعدی در معرض میدان زیمن و ابررسانایی مرسوم ایجاد می‌شود را در حضور ناخالصی‌های بار و اسپین بررسی کردیم و اثرات برهم‌کنش‌های الکترونی را مطالعه نمودیم. در غیاب ناخالصی، برهم‌کنش‌های دافعه‌ی ضعیف‌تر، گاف ابررسانایی را تقویت می‌کنند که البته با افزایش میدان زیمن، محدوده‌ی برهم‌کنش‌های مؤثر، ضعیف‌تر هم می‌شود. در مقابل، برهم‌کنش‌های جاذبه‌ی قوی‌تر، به ضریب جفت‌شدگی ابررسانایی قوّت بیشتری می‌بخشند و در این حالت، ارتقای میدان زیمن، باعث تقویت ابررسانایی حتی در جاذبه‌های ضعیف‌تر می‌شود. وقتی ناخالصی بار در موضع x=0 قرار می‌گیرد، تصحیح ناشی از آن با کاهش دما، رسانندگی اسپینی را کاهش می‌دهد. یک ناخالصی اسپین در راستای y یا z نیز چنین رفتاری را با ضرایب متفاوت، نمایش می‌دهند. مؤلفه‌ی x ناخالصی اسپین، تحت برهم‌کنش‌ها و میدان زیمن بازبهنجار نمی‌شود و صرفاً به اندازه‌ی یک ضریب در تصحیح رسانندگی نقش دارد. اما این تصحیح، شامل بخش افت توانی ناشی از گاف ابررسانایی هم می‌شود که در $K^{-1}<2$ شروع به رشد می‌کند.

مرجع‌ها

[۱] S. Wolf, D. Awschalom, R. Buhrman, J. Daughton, V. von Molnár, M. Roukes, A. Chtchelkanova, and D. Treger, “Spintronics: a spin-based electronics vision for the future”, *science*, **294**, No.5546 (2001) 1488–1495.

[۲] C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. D. Sarma, “Non-abelian anyons and topological quantum computation”, *Rev. Mod. Phys.* **80**, (2008) 1083–1159.

[۳] M. Hasan and C. Kane, “Colloquium: topological insulators”, *Rev. Mod. Phys*. **82**, No.4 (2010) 3045–3067.

[٤] B. Bernevig and S. Zhang, “Quantum spin hall effect”, *Phys. Rev. Lett*. **96**, No.10 (2006) 10680.

[٥] Z. Bakhshipour and M. V. Hosseini, “Electron-electron interactions in partially mixed helical states,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, **36**, No.39 (2024) 395601.

[٦] J. Alicea, *Rep. Prog. Phys*. **75**, (2012) 076501.

[٧] T. Giamarchi, “*Quantum physics in one dimension*”, Oxford university press, Oxford, (2004).

نگاشت مدل تپه های شنی BTW به شبکه پیچیده و تحلیل ویژگی‌های آن

شجاع، عباس[1]؛ نطاق-نجفی، مرتضی[1]؛ سپهری-جوان، ناصر[1]

[1] گروه فیزیک، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل

چکیده

این مقاله به بررسی ارتباط بین سامانه‌های بحرانی خودسازمان‌یافته (SOC) و شبکه‌های پیچیده می‌پردازد. با استفاده از یک تابع انتقال مبتنی بر شباهت فعالیت‌های محلی و فرآیند فیلتراسیون با پارامترهای $\mathcal{R}=(r_1,r_2)$، مدل تپه های شنی BTW به شبکه نگاشته می‌شود. توزیع درجات شبکه حاصل، از نوع گامای عمومی (GGD) است که تحت شرایطی خاص به قانون توان تبدیل می‌شود. پارامترهای GGD به $\mathcal{R}$ وابسته‌اند و r_2 تأثیر بیشتری بر چگالی شبکه نسبت به r_1 دارد. آنتروپی شانون با افزایش r_2 به صورت خطی کاهش می‌یابد و با r_1 به‌طور ملایم تغییر می‌کند. ساختار شبکه با ضریب خوشه‌بندی، مرکزیت ویژه، مرکزیت نزدیکی و مرکزیت بینابینی مورد تحلیل قرار گرفته که اغلب این معیارها توزیعی دارای قله دارند، در حالی که مرکزیت بینابینی از قانون توان در بازه‌ای از درجات پیروی می‌کند.

واژگان کلیدی: مدل تپه شنی BTW ، شبکه پیچیده ، توزیع درجه ، معیارهای مرکزیت

Mapping the BTW Sandpile Model to a Complex Network and Analyzing Its Features

Shoja, Abbas [1]; Nattagh-Najafi, Morteza[1]; Sepehri-Javan, Nasser[1]

[1] Department of Physics, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil

Abstract

This paper examines the relationship between self-organized critical (SOC) systems and complex networks. Using a transfer function based on the similarity of local activities and a filtration process with parameters $\mathcal{R} = (r_1, r_2)$, the BTW sandpile model is mapped to a network. The degree distribution of the resulting network follows a generalized Gamma distribution (GGD), which under certain conditions, transforms into a power law. The parameters of the GGD are dependent on $\mathcal{R}$, and r_2 has a greater impact on network density compared to r_1. Shannon entropy decreases linearly with increasing r_2 and changes mildly with r_1. The network structure is analyzed using clustering coefficient, eigenvector centrality, closeness centrality, and betweenness centrality, where most of these measures exhibit peak distributions, while betweenness centrality follows a power law within a range of degrees.

***Keywords**: BTW Sandpile Model, Complex Network, Degree Distribution, Centrality Features*

مقدمه

مدل تپه‌های شنی (BTW) که در سال ۱۹۸۷ توسط بک، تنگ و ویزنفلد معرفی شد، نمونه‌ی بنیادی از پدیده‌ی خودسازمان‌یافته بحرانی (SOC) است[۱]. در این مدل، با اضافه شدن تدریجی انرژی، ریزش‌هایی (بهمن هایی) در سیستم ایجاد می‌شود که اندازه‌های آن‌ها از توزیع قانون توانی پیروی می‌کند[۲]. مدل تپه‌های شنی بر روی بسترهای مختلفی همچون شبکه‌های بدون مقیاس، شبکه‌های تصادفی و شبکه‌های با برهم‌کنش‌های دوربرد مطالعه شده است[۳]. نظریه‌ی میدان متوسط نیز در تحلیل این سیستم‌ها، خصوصاً در شبکه‌های با تعداد زیاد ارتباط محلی، به کار رفته است[٤]. همچنین شباهت‌هایی بین دینامیک مدل تپه‌های شنی و فعالیت عصبی در مغز مشاهده شده است[٥].

ادغام مدل‌های تپه‌های شنی با شبکه‌های پیچیده پیشرفت مهمی در پژوهش‌های پدیده‌های بحرانی خودسازمان‌یافته به شمار می‌رود، چرا که با بهره‌گیری از ویژگی‌های توپولوژیکی و آماری شبکه‌های پیچیده، به آشکارسازی دینامیک‌های پنهان این سامانه‌ها کمک می‌کند. این روش در زمینه‌هایی چون زیست‌بوم‌ها، تعاملات اجتماعی، زیرساخت‌های فناورانه و شبکه‌های اطلاعاتی کاربرد دارد[٦]. پژوهش‌ها نشان داده‌اند که ویژگی‌های شبکه‌ای مانند درجه گره‌ها، خوشه‌بندی و مقیاس‌پذیری جهان – کوچک، تأثیر زیادی بر پایداری و رفتار بهمنی در مدل‌های SOC دارند. نگاشت مدل‌های تپه شنی به شبکه‌های پیچیده، ابعاد جدیدی از پدیده‌های بحرانی و پایداری سامانه‌ها را آشکار کرده است، به ویژه در حوزه‌هایی مانند زمین‌لرزه‌ها و شبکه‌های عصبی. با این حال، چگونگی ارتباط دادن دقیق گره‌ها و اثر آستانه‌گذاری بر توپولوژی شبکه هنوز یکی از چالش های اساسی در این حوزه می باشد[۷].

در این مقاله، روشی سیستماتیک برای نگاشت مدل‌های تپه‌های شنی به شبکه‌های پیچیده معرفی شده است. تمرکز بر فرآیند آستانه‌گذاری و تأثیر آن بر ویژگی‌های شبکه، به ما اجازه می‌دهد چارچوبی عمومی برای تحلیل سیستم‌های SOC ارائه کنیم.

مدل

در این پژوهش، دینامیک مدل تپه‌ماسه‌ی بک–تنگ–ویزنفلد روی شبکه مربعی ۱۰۰ در ۱۰۰ بررسی شده است. در این مدل، هر سایت تعداد مشخصی دانه‌ی شن را نگه می‌دارد و با عبور از ارتفاع بحرانی دچار فروریزش می‌شود و دانه‌ها را به هر ٤ همسایه (بالا، پایین، راست و چپ) خود منتقل می‌کند. فرآیند ریزش دانه‌ها که منجر به وقوع بهمن می شود تا رسیدن به حالت پایدار ادامه دارد. در هر بهمن با ثبت تعداد فرویزش‌ها در هر سایت، ماتریس فروریزش ساخته شده و بر مبنای آن شبکه‌های پیچیده وزن‌دار ایجاد شده‌اند. نگاشت ماتریس فروریزش به شبکه‌های پیچیده از طریق رابطه‌ی (۱) انجام شده است.

$$w_{ij} = \log\left(\frac{L}{d_{ij}}\right) * \exp\left(-r_1 * \frac{|n_i - n_j|}{n_{max}}\right) \qquad (۱)$$

که در آن w_{ij} وزن اتصال بین گره‌های i و j بر اساس فاصله اقلیدسی بین گره ها (d_{ij}) و شباهت فعالیت سایت ها (تفاضل تعداد فروریزش سایت ها) تعیین می‌شود. در رابطه فوق L طول شبکه، n_i و n_j تعداد فروریزش‌های مربوط به سایت i و j ، n_{max} ماکزیمم تعداد فروریزش مربوط به یک سایت در کل شبکه مربعی و r_1 پرامتر کنترل است.

برای تبدیل شبکه وزن دار به شبکه بدون وزن و همچنین استخراج ساختاری معنادار از شبکه‌های ایجادشده، یک فرآیند فیلتراسیون تعریف شده است که اتصالات ضعیف‌تر را حذف می‌کند. آستانه‌ی فیلتر با رابطه (۲) مشخص می‌شود.

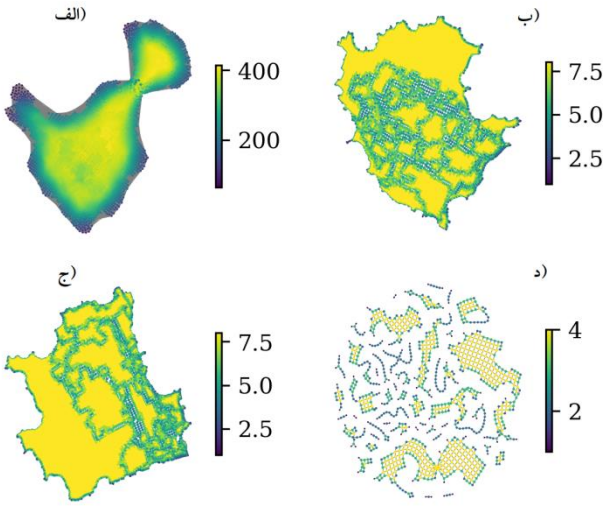
$$w_{th}(r_2) = r_2 * w_{max} + (1 - r_2) * w_{avg} \quad (۲)$$

که در آن r_2 پارامتری برای کنترل شدت فیلتراسیون، w_{max} ماکزیمم وزن و w_{avg} میانگین وزن در ماتریس فروریزش است. در نهایت، شبکه‌های به دست آمده با زوج پارامتر $\mathcal{R} = (r_1, r_2)$ مشخص می‌شوند.

ساختار شبکه

ساختار شبکه‌های بدست آمده برای اندازه‌های مختلف درجه، مقادیر متفاوت پارامتر $\mathcal{R} = (r_1, r_2)$ در شکل (۱) نمایش داده شده است. با توجه به شکل‌های ۱- الف و ۱- ب، با ثابت نگه داشتن r_1 مشاهده می‌شود که با افزایش r_2، شبکه اسپارس‌تر شده و میانگین درجه گره‌ها کاهش می‌یابد. مثلا در حالت $r_2 = 0.3$ بیشینه درجه حدود ۳۱۶ است ولی در $r_2 = 0.9$ به عدد ۸ می‌رسد.

همچنین، با ثابت بودن r_2 و افزایش r_1، در شکل‌های ۱- ج و ۱-د، روند مشابهی دیده می‌شود. افزایش r_1 باعث اسپارس‌تر شدن شبکه می‌شود. یکی از ویژگی‌های جالب این گراف‌ها، ظهور خوشه‌های مجزا و رگه‌های کم‌فعال است؛ یعنی مسیرهایی از گره‌ها که درجه فعالیت کمتری دارند. مثلا در شکل ۱- ب، گره‌هایی با درجه ۷ در میان گره‌های فعال‌تر (درجه ۸) دیده می‌شود. این رگه‌های کم‌فعال در اثر فرایند فیلتراسیون (sparsification) ایجاد شده‌اند.



شکل ۱: گراف شبکه BTW برای الف) $\mathcal{R}$ = (0.1, 0.3)، تعداد گره های ٤١٦٥، میانگین درجه ۳۱٦ ب) $\mathcal{R}$ = (0.1 , 0.9)، تعداد گره های ۷٤۱۲، میانگین درجه ٥٤ ج) $\mathcal{R}$ = (0.3 , 0.9)، تعداد گره های ۳۱٦٥، میانگین درجه ٤ د) $\mathcal{R}$ = (0.9 , 0.9)، تعداد گره های ۱۰۸۷، میانگین درجه ۳.

ویژگی‌های شبکه – تابع توزیع درجه

درجه گره‌ها در یک شبکه پیچیده بینش‌های مهمی در مورد مرکزیت گره‌ها فراهم می‌آورد، که به‌عنوان فرکانس استفاده از یک گره خاص در دینامیک‌های شبکه تفسیر می‌شود. درجه یک گره به‌عنوان مجموع تعداد یال‌های متصل به آن تعریف می‌شود که نشان‌دهنده تعداد تعاملات مستقیم گره است. مرکزیت درجه به‌عنوان یکی از مهم‌ترین معیارها در تحلیل شبکه‌های پیچیده شناخته می‌شود که ویژگی‌های ساختاری و اتصال شبکه را منعکس می‌کند.

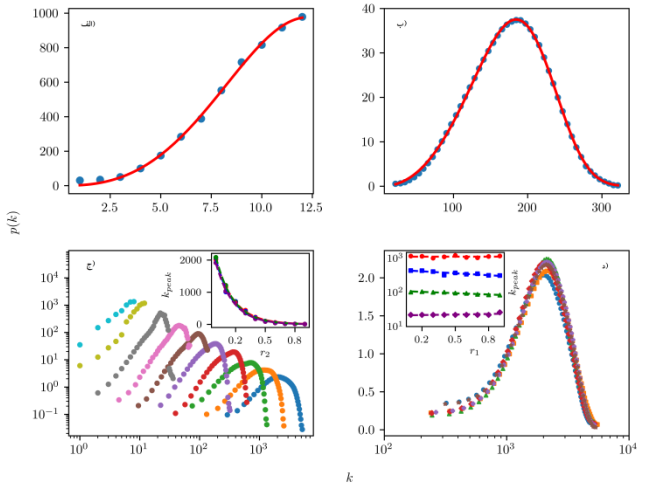
توزیع درجه $p(k)$ برای مقادیر مختلف $\mathcal{R}$ در شکل ۲ نشان داده شده است. در این شکل، حالت‌های اسپارس در تصویر الف و متراکم در تصویر ب نشان داده شده است. توزیع‌های درجه اضافی برای مقادیر مختلف $\mathcal{R}$ به صورت تابعی از r_2 در شکل ۲- ج و تابعی از r_1 در شکل ۲- د نشان داده شده‌اند. با توجه به شکل ۲، به‌طوری‌که با کاهش r_2، اوج $p(k)$ به سمت راست جابجا می‌شود که نشان‌دهنده مقادیر بالاتر درجه (k) در فاز متراکم است. علاوه بر

این، نمودارها با کاهش r_2 پهن‌تر می‌شوند که به معنای افزایش ناهمگنی شبکه است. این اثرات برای r_1 کمتر مشهود است، همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، جایی که نمودارهای توزیع درجه با کاهش r_1 کمی به سمت راست جابجا می‌شوند. گراف‌های داخلی (ج) و (د) در شکل۲ تغییرات موقعیت پیک را نسبت به r_2 و r_1 به‌طور جداگانه نشان می‌دهند. همان‌طور که مشاهده می‌شود، تغییرات با r_2 به‌صورت نمایی و با r_1 به‌صورت خطی رفتار می‌کنند. کاهش r_1 باعث متراکم‌تر شدن شبکه می‌شود، اما موقعیت پیک عمدتاً ثابت باقی می‌ماند.

جهت برازش بهترین تابع برای توزیع درجه، ما از یک روش دو مرحله‌ای استفاده کردیم. ابتدا از یک الگوریتم ژنتیک برای تعیین پارامترهای اولیه بهینه استفاده شد. سپس برازش با استفاده از تابع curve-fit از کتابخانه scipy.optimize در پایتون مورد استفاده قرار گرفت تا به دقت بیشتری برسد. خطوط قرمز رنگ در شکل‌های ۲ (الف) و (ب) و تحلیل‌ها در مقادیر مختلف $\mathcal{R}$ نشان می‌دهند که p(k) به‌خوبی با توزیع گاما عمومی (GGD) تطبیق دارد که به‌صورت رابطه (۳) تعریف می‌شود.

$$G_{\alpha,\beta,\gamma}(k) = A(\alpha,\beta,\gamma).k^{\alpha}.\exp\left[-\frac{1}{\beta}\left(\frac{k}{\bar{k}}\right)^{\gamma}\right] \qquad (۳)$$

که در آن α، β و γ نمایه‌هایی هستند که شکل تابع را تعیین می‌کنند و $A(\alpha,\beta,\gamma)$ یک عامل نرمال‌سازی است. توزیع گاما عمومی (GGD)به توزیع‌های دیگری مانند توزیع‌های پایدار لِوی، مفسر گاما عمومی و فرآیندهای لِوی نزدیک است. در زمینه سیستم‌های دینامیکی، ظهور GGD در سری‌های زمانی را می‌توان به همبستگی‌های بلندمدت یا اثرات حافظه نسبت داد، که متغیر موردنظر در یک زمان خاص تحت تأثیر تعاملات یا وابستگی‌های تجمعی در چندین گام زمانی قبلی است.



شکل ۲: در این شکل، تابع توزیع مرکزیت درجه P(k) نمایش داده شده است. در (الف) فاز اسپارس با $\mathcal{R}$ = (0.7 , 0.8) نشان داده شده که با تابع گامای تعمیم‌یافته برازش شده است. (ب) مربوط به فاز متراکم با $\mathcal{R}$ = (0.5 , 0.4) است که برازش بسیار دقیقی دارد. در (ج) و (د)، تغییرات P(k) بر حسب r_1 و r_2 به ترتیب بررسی شده که در آن‌ها r_1 و r_2 به صورت یکنواخت با گام‌های مشخص تغییر می‌کنند. نمودارهای کوچک داخلی، تغییرات نمادها با پارامترها را نشان می‌دهند.

پارامترهای α، β و γ به‌طور غیرخطی وابسته به r_1 و r_2 هستند، که این وابستگی‌ها به‌ویژه در رابطه با r_2 برجسته است. برای مقادیر بزرگتر r_2 ، پارامترهای α، β و γ تغییرات قابل توجهی نشان می‌دهند. این پارامترها تأثیر زیادی بر ویژگی‌های ساختاری شبکه دارند و می‌توانند ویژگی‌های شبکه را از متراکم به پراکنده تغییر دهند.

سایر ویژگی های شبکه

برای تفسیر دقیق‌تر شبکه، شاخص‌های آماری دیگری هم مورد ارزیابی قرار گرفتند که در ادامه بطور مختصر به تحلیل آنها پرداخته شده است.

آنتروپی شانون که میزان تنوع و عدم قطعیت اتصال گره‌ها را اندازه می‌گیرد، نشان داد که با افزایش r_2 به طور خطی کاهش و با افزایش

r_1 افزایش می‌یابد، به طوری که افزایش هر دو پارامتر موجب کاهش اطلاعات و افزایش عدم قطعیت شبکه می‌شود. ضریب خوشه‌بندی، که بیانگر تمایل گره‌ها به تشکیل خوشه‌های محلی است، با افزایش r_2 کاهش و با افزایش r_1 افزایش نشان داد، که بیانگر شکل‌گیری خوشه‌های فشرده‌تر است. مرکزیت ویژه، که معیاری برای سنجش میزان نفوذ گره‌ها است، نشان داد که با پراکندگی شبکه، تعداد گره‌های با مرکزیت ویژه پایین، افزایش می‌یابد و تعداد گره‌های با مرکزیت بالا در خوشه‌های کوچک‌تر متمرکز می‌شوند. مرکزیت نزدیکی که میزان دسترسی گره‌ها به یکدیگر را بیان می‌کند، با افزایش r_2 کاهش و پراکندگی بیشتری یافت، و در برخی شرایط همبستگی منفی بین این مرکزیت و درجه گره‌ها مشاهده شد. در نهایت، مرکزیت بینابینی که اهمیت گره‌ها در اتصال مسیرهای کوتاه را می‌سنجد، توزیعی با دم ضخیم داشت که در برخی شرایط به قانون توان نزدیک شد، نشان‌دهنده نقش کلیدی برخی گره‌ها در ساختار شبکه بود.

نتیجه گیری

این مقاله به یک چالش دیرینه در سیستم‌های پیچیده پرداخته است. نگاشت تپه‌های شنی به شبکه‌های پیچیده، چارچوبی که ویژگی‌ها و پویایی‌های پنهان سیستم اصلی را روشن می‌کند. روش‌های پیشنهادی ما نه تنها برای این نگاشت مؤثر هستند بلکه پتانسیل کاربرد در سایر سیستم‌های SOC با پویایی‌های بهمن‌گونه را نیز دارند. نگاشت به دو پارامتر کنترلی $\mathcal{R} = (r_1, r_2)$ بستگی دارد که شکل‌دهنده شبکه حاصل هستند. نتایج ما نشان می‌دهند که چگالی شبکه بیشتر تحت تأثیر r_2 قرار دارد، در حالی که r_1 نقش ظریفی در تنظیم هندسه شبکه ایفا می‌کند. تحلیل‌های ما نشان می‌دهند که توزیع درجه از توزیع گاما عمومی پیروی می‌کند و این فرمولاسیون برای مطالعه سیستم مناسب ارزیابی شد.

مرجع‌ها

[1] P. Bak, C. Tang, K. Wiesenfeld, “Self-organized criticality: An explanation of the 1/f noise.” *Phys. review letters* **59**, 381, (1987).

[2] L. P. Kadanoff, S. R. Nagel, L. Wu, S. Zhou, “Scaling and universality in avalanches.” *Phys. Rev. A,* **39**, 6524, (1989).

[3] A. A. Saberi, “Recent advances in percolation theory and its applications.” *Phys. Reports* **578**, 1–32, (2015).

[4] A. L. Barabási, R. Albert, H. Jeong, “Mean-field theory for scale-free random networks.” *Phys. A*., **272**, 173–187, (1999).

[5] M. Rahimi-Majd, M. Seifi, L. de Arcangelis, M. Najafi, “Role of anaxonic local neurons in the crossover to continuously varying exponents for avalanche activity.” *Phys. Rev. E,* **103**, 042402, (2021).

[6] S. H. Strogatz, “Exploring complex networks.” *Nature,* **410**, 268–276, (2001).

[7] A. Corral, “Long-term clustering, scaling, and universality in the temporal occurrence of earthquakes.” *Phys. Rev. Lett*. **92**, 108501, (2004).

اثر انحنای شش گوشی بر تابع دی الکتریک عایق توپولوژیک

شیخانی، امید[۱]؛ فصیحیانی فرد، فاطمه[۲]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی، تهران

[۲] دانشکده ریاضی، دانشگاه صنعتی اصفهان ، اصفهان

چکیده

اثر انحنای شش گوشی به‌طور مستقیم عامل به وجود آورنده یک ناهمسانگردی در نوار انرژی یک عایق توپولوژیک می‌شود. در این مقاله اثر این عامل را در سطح عایق توپولوژیک بر تابع قطبش سیستم بررسی می‌کنیم. محاسبات نشان می دهد که در حضور اثر انحنای شش گوشی تابع قطبش سیستم نه تنها به اندازه بردار موج بلکه به جهت آن نیز بستگی دارد. همچنین نتیجه می‌شود که با افزایش قدرت انحنای شش گوشی و با افزایش زاویه، قله‌های تابع قطبش به سمت مقادیر بزرگتر بردار موج جابجا می‌شود.

واژگان کلیدی: *عایق توپولوژیک، انحنای شش گوشی، تابع قطبش*

The effects of Hexagonal Warping on the Dielectric Function of Topological Insulator

Sheykhani, Omid [1] ; Fasihianifard, Fatemeh[2]

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

[2]Department of mathematics ,Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

Hexagonal warping directly provides an anisotropy in the energy band of a topological insulator. In this article, we studied the effect of this factor on the polarization function of the topological insulator, on the surface. The results show that in the presence of hexagonal warping, the polarization function depends not only on the magnitude of the momentum but also on its direction. On the other hand, it is concluded that as the strength of hexagonal warping increases and the angle grows, the peaks of the polarization function move towards larger values of the wave vector.

Keywords*: Topological Insulator, Hexagonal Warping, Polarization function*

عایق توپولوژیک

عایق‌های توپولوژیکی دسته‌ای از مواد هستند که برروی سطح رسانا و در حجم خود عایق می‌باشند. این مواد درون عمق خود یک گاف انرژی دارند و بنابراین رفتار مشابه عایق ها دارند ولی در روی سطح دارای حالت‌های سطحی بدون گاف انرژی و خاصیت رسانایی دارند[۱]. وجود حالت‌های فلزی وبدون گاف در سطوح میتوانند به خواص غیرعادی در هدایت الکترونی منجرشود. طبق آزمایشات طیف سنجی نورگسیل با تفکیک زاویه ای بر روی عایق های توپولوژی مشاهده شده است که سطح مقطع فرمی در حالت های الکترونیکی و توپولوژیکی محافظت شده در این مواد می تواند با افزایش انرژی فرمی بالای نقطه ی دیراک از حالت دایروی به شکل دانه برف تغییر کند. به‌عبارت دیگر در عایق‌های توپولوژیکی مشاهده شد که قوس فرمی با افزایش انرژی فرمی از حالت دایروی به شکل شش گوش تغییر پیدا می‌کند[۲]. پیش بینی جمله‌ی انحنای شش گوشی، رفتار مشاهده شده در تجربه را بصورت تحلیلی در هامیلتونی وارد نمود.

هامیلتونی

در ادامه به توصیف جمله انحنای شش گوشی و اثرات این جمله بر حالات سطحی عایق‌های توپولوژیک می‌پردازیم. از آنجایی که عایق توپولوژیک در عمق خود یک عایق است علاوه‌بر جمله مربوط به فرمیون های دیراک، یک گاف(Δ) در هامیلتونی وجود دارد اما از آن جایی که ما تنها حالت های سطحی را برسی می کنیم این جمله در هامیلتونی وجود نخواهد داشت. همچنین یک جمله درجه دوم برحسب بردار موج شرودینگر که عامل یک عدم تقارن در نوار انرژی است و یک عبارت انحنای شش گوشی که تابع درجه سوم با قدرت λ است و به طور مستقیم عامل به وجود آورنده یک ناهمسانگردی در نوار انرژی می‌شود، نیز در هامیلتونی حضور دارند[۳]:

$$H=\hbar v\left(k_x\sigma_y-k_y\sigma_x\right)+\frac{\lambda}{2}\left(k_+^3-k_-^3\right)+E_0\,(k) \qquad (۱)$$

که در آن $\boldsymbol{\delta_x}$ و $\boldsymbol{\delta_y}$ و $\boldsymbol{\delta_z}$ ماتریس‌های پاولی و ν سرعت عامل‌های دیراک هستند. در اینجا ما مواردی را بررسی می‌کنیم که در ان جمله دیراک در هامیلتونی غالب و E_0 به نسبت آن قابل صرف نظر است.ویژه مقادیر همیلتونی به شکل زیر بدست می‌ایند:

$$E_s(\mathbf{k})=+s\sqrt{(\hbar vk)^2+(\lambda k^3\cos 3\theta_{\mathbf{k}})^2} \qquad (۲)$$

که در آن $\theta_{\boldsymbol{k}}$ زاویه قطبی بردار $\mathbf{k}$ است. به همین ترتیب ویژه بردارها بدست می‌آیند:

(۳)

$$\psi(\mathbf{k}.s)=\hbar vk\times$$
$$\left[\frac{\left(1\,.\,\frac{1}{\hbar vk^2}\left[(\lambda k^3\cos 3\theta_{\mathbf{k}})-s\sqrt{(\hbar vk)^2+(\lambda k^3\cos 3\theta_{\mathbf{k}})^2}\right]\right)ik_x+k_y()}{\sqrt{(\hbar vk)^2+(\lambda k^3\cos 3\theta_{\mathbf{k}}-s\sqrt{(\hbar vk)^2+(\lambda k^3\cos 3\theta_{\mathbf{k}})^2})^2}}\right]^T$$

همانطور که مشخص است ویژه مقادیر و ویژه بردارهای هامیلتونی نه تنها به اندازه بردار موج بلکه به زاویه آن بستگی دارند که این به‌خاطر حضور جمله مربوط به انحنای شش گوشی در هامیلتونی است.

$$\int \frac{kdk}{2\pi}\int \frac{d\theta}{2\pi}\frac{f(E_+(\mathbf{k+q}))-f(E_+(\mathbf{k}))}{(E_+(\mathbf{k+q})-E_+(\mathbf{k}))^2-\omega^2}(E_+(\mathbf{k+q})-E_+(\mathbf{k}))$$

تابع قطبش

ابتدا تابع قطبش غیر برهمکنشی را براساس هامیلتونی ارائه شده معرفی می‌کنیم:

$$\Pi^0(\mathbf{q},\omega)=\sum_{ss'}\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}\left[f(E_s(\mathbf{k}))-f(E_{s'}(\mathbf{k+q}))\right] \quad (۴)$$
$$\times\left|\langle\psi(\mathbf{k}.s)|\psi(\mathbf{k+q}.s')\rangle\right|^2\left[\frac{1}{\omega+E_s(\mathbf{k})-E_{s'}(\mathbf{k+q})+i\gamma}\right]$$

یک جمله ماتریس همپوشانی وجود دارد که پراکندگی سیستم از حالت $|\mathbf{k}.s\rangle$ به حالت $|\mathbf{k}+\mathbf{q}.s'\rangle$ را نشان می‌دهد. در اینجا تابع قطبش به عنوان تابعی از بردار موج و انرژی (ω) است که در آن $f(E_s(\boldsymbol{k}))$ تابع فرمی است.

تقریب مرتبه دوم در حد طول موج های بلند

در حد طول موج های بلند $(q\to 0)$ پلاسمون‌های دمای پایین تنها به گذار درون نواری بستگی دارد $(s=s'=+1)$. در نتیجه قسمت حقیقی تابع قطبش به شکل زیر در می آید[٤] :

$$Re\Pi^0(\mathbf{q},\omega)= \quad (۵)$$

همچنین در تقریب طول موج های بلند تا تقریب مرتبه دوم داریم :

$$E_+(\mathbf{k+q})-E_+(\mathbf{k})= \quad (۶)$$

$$\mathbf{q}\cdot\frac{\partial E_+}{\partial \mathbf{k}}+\frac{1}{2}\left(\mathbf{q}\cdot\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}}\right)^2 E_+ +\left(\mathbf{q}\cdot\frac{\partial E_+}{\partial \mathbf{k}}\right)^2+o(\mathbf{q}^3)$$

با جایگذاری این رابطه در بخش حقیقی تابع قطبش داریم:

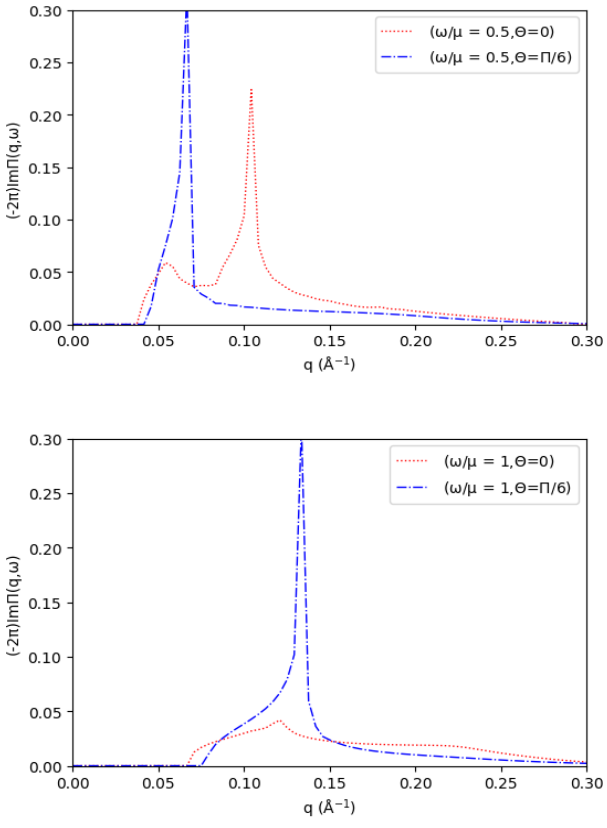
$$Re\,\Pi(\mathbf{q},\omega)= \quad (۷)$$

$$\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{q}{\omega^2}\int d\theta\ \frac{k_c(\theta)\,\beta}{(dE_+(\mathbf{k})/dk\ )_{k_c}(\theta)}[(\mathbf{q}\cdot\partial/\partial\mathbf{k})E_+ +\frac{1}{2}(\mathbf{q}\cdot\partial/\partial\mathbf{k})^2E_+]$$

نمودارتابع قطبش در دمای صفر

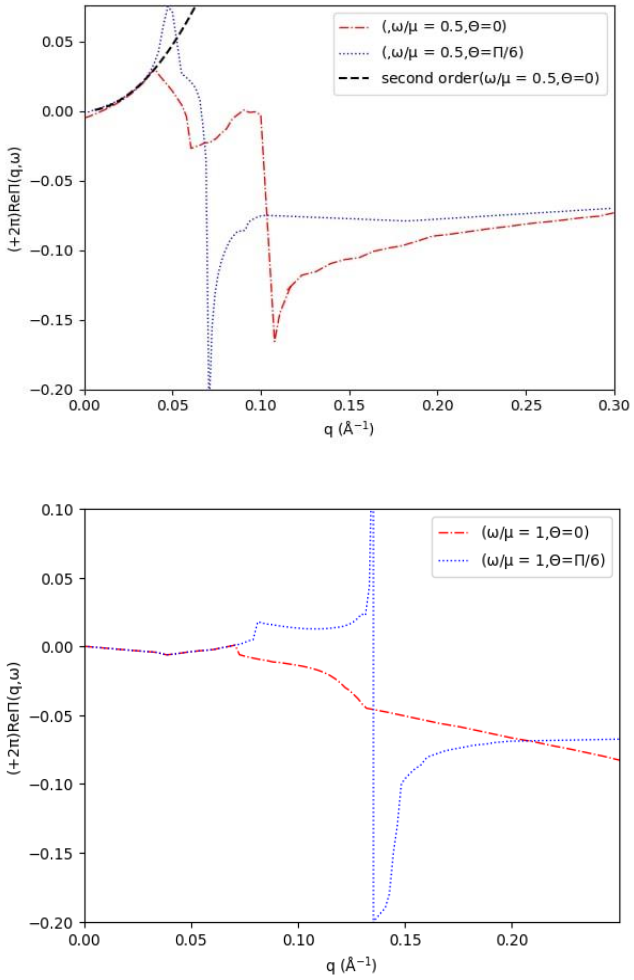
در این مقاله برای محاسبات تابع قطبش از سرعت فرمی عایق توپولوژیک Bi_2Te_3 استفاده نموده ایم. در این حالت سرعت فرمی را برابر $v=2.8\times10^5$ m/s در نظر گرفتیم.در این مورد محاسبات تابع قطبش را برای الکترون هاس سطحی انجام می دهیم و در نتیجه مقدار گاف نواری برابر صفر درنظر گرفته می شود $(\Delta=0)$. از طرفی دیگر در این مقاله مواردی برای ما قابل توجه است که در آن جمله درجه دوم برحسب تکانه شرودینگرنسبت به جمله دیراک در هامیلتونی اثر کمتری دارد. و قابل صرف نظراست. برای بررسی تابع قطبش عایق توپولوژیک، به تحلیل نتایج حاصل از محاسبات عددی معادله (٤) می‌پردازیم. در این جا اثر انحنای شش گوشی را در قسمت موهومی تابع قطبش در شکل (۱) نمایش داده‌ایم. به دلیل اثر ناهمسانگردی، تابع قطبش نه تنها به اندازه تکانه بلکه به

زاویه آن نیز بستگی دارد. نمودارها را در دو زاویه مختلف رسم نمودیم. همانطور که در شکل دیده می‌گردد اگرچه در q های کوچک اختلافی بین نمودارها دیده نمی‌شود اما با افزایش بردار موج، اختلاف بین آنها نیزافزایش قابل توجهی می‌یابد. در کمترین مقدار $\frac{\omega}{\mu}$ یعنی در $\frac{\omega}{\mu}=0.5$ و در زاویه $\theta_q=\frac{\pi}{6}$ ویک قله در حوالی $q\approx 0.05\frac{1}{\AA}$ وجود دارد، اما برای حالت $\theta_q=0$ نمودار به دو قله تقسیم می‌شود که به سمت q های بزرگتر حرکت می‌کنند. این موضوع به وضوح تنها در $\frac{\omega}{\mu}$ های کوچک دیده می‌شود. همچنین درمورد $\frac{\omega}{\mu}=1$ و همچنان در $\theta_q=\frac{\pi}{6}$ یک قله وجود دارد و در مقایسه با $\frac{\omega}{\mu}=0.5$ به سمت مقادیر بزرگتر بردار موج حرکت کرده است.



شکل ۱: نمودار بخش موهومی تابع قطبش عایق توپولوژیک Bi_2Te_3 برای $\lambda = 50\ meVA^3$

پس از رسم بخش موهومی تابع قطبش عایق توپولوژیک اکنون به محاسبه بخش حقیقی تابع قطبش می پردازیم. بخش حقیقی تابع قطبش در حضور انحنای گوشی و بدون وجود گاف رسم شده است. در اینجا نیز نمودارها در q های کوچک نتایج تقریبا یکسانی را نشان می‌دهند و با افزایش مقادیربردار موج، این رفتار دیگر مشاهده نمی شود. برای $\frac{\omega}{\mu}=0.5$ در زاویه $\theta_q=0$ از یک تقریب مرتبه دوم هم برای استفاده کردیم نمودار مربوطه به خوبی نشان می‌دهد تا حدود $q\approx 0.05\frac{1}{\AA}$ جواب های تابع اصلی و تقریب مرتبه دوم، همخوانی خوبی دارند ولی بعد از آن تقریب مرتبه دوم رفتار متفاوتی نمایش می‌دهد. همانند آنچه در بخش موهومی تابع قطبش دیدیم در نسبت $\frac{\omega}{\mu}=0.5$ در زاویه $\theta_q=0$ تابع قطبش به دو قله تبدیل می‌شود که در مقادیر بزرگتر q اتفاق می‌افتد.



شکل ۲: نمودار بخش حقیقی تابع قطبش عایق توپولوژیک Bi_2Te_3 برای $\lambda = 50\ meVA^3$

نتیجه گیری

در این پژوهش به رسم منحنی حقیقی و موهومی تابع قطبش در عایق توپولوژیک Bi_2Te_3 پرداختیم. همچنین با معرفی یک جمله مربوط به اثر قدرت انحنای شش گوش در هامیلتونی که به طور مستقیم عامل یک ناهمسانگردی است به برسی اثر این عامل در زوایای مختلف بر تابع قطبش پرداختیم. نشان دادیم که تغییر زاویه باعث شکسته شدن نمودار به دو قله و همچنین جابجایی آن به سمت بردار موج های بزرگتر می شود. همچنین با معرفی یک تقریب مرتبه دوم از تابع قطبش نشان دادیم که در حد طول موج های بلند نتایج تقریبا یکسانی را با تابع قطبش اصلی میتوانمشاهده کرد.

مرجع‌ها

[۱] Fu, L. Hexagonal warping effects in the surface states of the topological insulator bi2te3. Physical Review Letters, 103:266801,(2009).

[۲] P. Di Pietro, M. Ortolani, O. Limaj, A. Di Gaspare,V. Giliberti, F. Giorgianni, M. Brahlek, N. Bansal,N. Koirala, S. Oh, P. Calvani, and S. Lupi, Nature Nano.8, 556 (2013).

[۳] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. Phys. Rev. Lett., 95:226801, (2005).

[۴] J. P. F. LeBlanc and J. P. Carbotte Phys. Rev. B 89, 035419 Published 15January (2014).

انتقال حالت‌های کوانتومی در زنجیره‌های توپولوژیک با جفت‌شدگی‌های اسپین- مدار

خوشخو، عارفه ؛ ابویی، جهانفر

دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، زنجان

چکیده

یکی از اهداف مهم در فناوریهای کوانتومی انتقال کیوبیت‌ها بدون از دست رفتن همدوسی آنهاست. لذا ایجاد فرآیندهایی که به حفظ همدوسی کیوبیت‌ها در حین انتقال کمک کند بسیار حایز اهمیت است. یکی از سیستم‌هایی که برای انتقال حالت‌های کوانتومی بطور امن و با دقت بالا مورد استفاده قرار می‌گیرد زنجیره‌های توپولوژیک سو- شریفر-هیگر (اس‌اس‌اچ) است. فاز توپولوژیک این زنجیره در این فرآیند نقش بسیار مهمی دارد. در این مقاله نشان می‌دهیم که حضور پرش‌های اسپین-وارون (پرش‌هایی که در آنها اسپین ذره وارون می‌شود) سبب ایجاد کانالی می‌شود که در آن یک کیوبیت می‌تواند از یک طرف زنجیره به طرف دیگر آن منتقل شود. این پرش‌ها به دلیل وجود جفت‌شدگی اسپین-مدار در سیستم بوجود می‌آیند. با بررسی تغییرات زمانی همانندی (فیدلیتی) حالت منتقل شده و حالت‌های ایده‌آل مورد نظر، در زنجیره‌های زوج و فرد، شرایط انتقال حالت‌های مختلف کوانتومی در داخل زنجیره را بررسی می‌کنیم. مطالعات ما می‌تواند از لحاظ آزمایشگاهی نیز مورد بهره‌برداری قرار گیرد.

واژگان کلیدی: *جفت‌شدگی اسپین- مدار، مدل سو-شریفر- هیگر، انتقال حالت کوانتومی*

Quantum State Transfer in Topological Chains with Spin-Orbit Couplings

Khoshkhou, Arefeh; Abouie, Jahanfar

Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences (IASBS), Zanjan

Abstract

One of the primary objectives in quantum technology is the reliable transfer of quantum states without loss of coherence. Developing processes that preserve state coherence during transfer is essential. The topological Su-Schrieffer-Heeger (SSH) chain is a prominent system used for high-fidelity quantum state transfer, with its topological phase playing a crucial role in facilitating this process. In this work, we demonstrate that the presence of spin-flip hopping terms creates a pathway enabling the transfer of a qubit from one edge of the chain to the other. These spin-flip hoppings arise due to spin-orbit coupling within the system. By analyzing the time evolution of the fidelity of the transferred state, as well as our target states, in both odd and even chains, we identify conditions that enable high-fidelity state transfer.

Keywords*: Spin-orbit coupling, Su-Schrieffer-Heeger model, Quantum state transfer*

مقدمه

در سال‌های اخیر، فناوری‌های کوانتومی با هدف دستیابی به روش‌های کارآمد برای پردازش و انتقال اطلاعات کوانتومی توسعه یافته‌اند. یکی از چالش‌های اساسی در این زمینه، انتقال کیوبیت‌ها بدون تخریب همدوسی کوانتومی آنهاست، چرا که هرگونه اختلال در سیستم می‌تواند منجر به از دست رفتن اطلاعات کوانتومی شود. در این راستا، سیستم‌های توپولوژیک به دلیل داشتن حالت‌های مرزی محافظت‌شده در برابر اختلالات، گزینه‌ای ایده‌آل برای انتقال ایمن حالت‌های کوانتومی محسوب می‌شوند [1-5].

زنجیره‌های سو–شریفر–هیگر (اس‌اس‌اچ) به عنوان یک مدل توپولوژیک ساده اما کاربردی، به دلیل پشتیبانی از حالت‌های لبه‌ای رسانا قادر به حمل اطلاعات کوانتومی بوده و توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند. از ویژگی‌های آنها این است که بسته به زوج یا فرد بودن طول زنجیره، نحوه ایجاد کانال انتقال حالت و پردازش اطلاعات متفاوت است [1,2]. از طرفی انتقال کارآمد کیوبیت‌ها در این زنجیره‌ها نیازمند سازوکارهایی است که همدوسی کوانتومی را در طول انتقال حفظ کنند. یکی از این سازوکارها ایجاد پرش‌های مختلف اعم از درون–سلولی و بیرون–سلولی در داخل زنجیره است.

در این مقاله برای حفظ همدوسی کیوبیت‌ها پرش‌های اسپین–وارون (پرش‌هایی که در طی آن اسپین ذره وارون می‌شود) را به زنجیره اعمال می‌کنیم. این پرش‌ها در زنجیره‌ها ناشی از جفت‌شدگی اسپین–مدار است که می‌توانند کیفیت انتقال را از طریق کاهش تخریب همدوسی بهبود بخشند. با تحلیل تغییرات زمانی فیدلیتی انتقال، نشان می‌دهیم که چگونه این پرش‌ها بر انتقال حالت کوانتومی از طریق کانال ایجاد شده در زنجیره اثر می‌گذارند. برای بررسی کمّی این انتقال، حالت اولیه سیستم را به صورت $|\psi_i\rangle = a^{\dagger}_{n\sigma}|0\rangle$ در نظر می‌گیریم که یعنی یک ذره با اسپین σ در جایگاه nام زنجیره قرار دارد. تحول زمانی این حالت از طریق عملگر تکامل زمانی $\mathcal{U}(t,t_0)$ به حالت نهایی $|\psi\rangle_f = \mathcal{U}(t,t_0)|\psi\rangle_i$ منجر می‌شود. با تعریف حالت ایده‌آل مورد نظر به صورت $|\phi_i\rangle$، می‌توان کیفیت انتقال را از طریق محاسبه فیدلیتی $\mathcal{F} = |\langle\phi_i|\psi\rangle_f|$ ارزیابی کرد که معیاری برای سنجش همدوسی حفظ شده در طول انتقال است [6]. همچنین، تفاوت‌های انتقال در زنجیره‌های با طول زوج و فرد را مورد مطالعه قرار داده و شرایط مناسب برای انتقال حالت‌های مختلف کوانتومی را تعیین می‌کنیم. یافته‌های این پژوهش می‌تواند راهگشای طراحی سیستم‌های کوانتومی توپولوژیک با قابلیت انتقال ایمن و پایدار اطلاعات باشد.

در ادامه همچنین تأثیر پارامترهای دیگری مانند پرش همسایه سوم را بر کانال انتقال حالت اسپینی مطالعه می‌کنیم. نتایج ما نشان می‌دهد که در برخی موارد، حضور این پرش‌ها شرط لازم برای امکان‌پذیر شدن انتقال حالت اسپینی است.

انتقال حالت کوانتومی در زنجیره زوج

یک زنجیره اس‌اس‌اچ به طول $L = 12$ در حضور جفت‌شدگی اسپین–مدار را در نظر بگیرید. در این زنجیره انتقال حالت اسپینی فقط در حضور پتانسیل درون‌جایگاهی که به طور دوره‌ای با زمان تغییر می‌کند امکان‌پذیر است. براین اساس زنجیره‌ای با هامیلتونی زیر در نظر می‌گیریم:

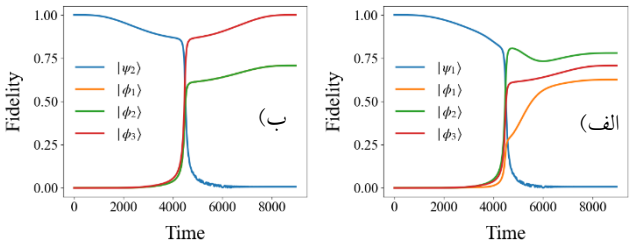
$$H = \sum_{\sigma}\sum_{n=1}^{N}[(V_a\, a^{\dagger}_{n,\sigma}a_{n,\sigma} + V_b\, b^{\dagger}_{n,\sigma}b_{n,\sigma} + j_1\, a^{\dagger}_{n,\sigma}b_{n,\sigma} + j_2\, a^{\dagger}_{n+1,\sigma}b_{n,\sigma} + \lambda\, a^{\dagger}_{n,\sigma}b_{n+1,-\sigma} - \lambda'\, a^{\dagger}_{n+1,\sigma}b_{n,-\sigma}) + H.c] \quad (1)$$

که $V_a = -V_b = sin\,\theta$ پتانسیل درون‌جایگاهی دوره‌ای، $j_1 = 1 - cos\,\theta$ و $j_2 = 1 + cos\,\theta$ جملات پرش نزدیکترین همسایه و λ و λ' دامنه‌های جفت‌شدگی اسپین–مدار هستند. دامنه‌های پرش

و پتانسیل‌ها با زاویه θ که در بازه $[0, 2\pi]$ است تغییر می‌کنند. این زاویه را به صورت $\theta = \Omega t$ تعریف می‌کنیم که در آن Ω سرعت زاویه‌ای تغییرات پارامترهای هامیلتونی است. حضور پتانسیل دوره‌ای سبب رفع تبهگنی و جدا شدن حالت‌های مرزی چپ و راست زنجیره می‌شود.

در ابتدا سیستم را به ازای $\lambda = 0$ و $\lambda' = 4$ مطالعه می‌کنیم. در شکل ۱-الف، حالت اولیه $|\psi_1\rangle = a_{1\uparrow}^{\dagger}|0\rangle$ را در نظر گرفته و همانندی حالت انتقال یافته به سمت راست زنجیره و سه حالت $|\phi_1\rangle = b_{6\uparrow}^{\dagger}|0\rangle$، $|\phi_2\rangle = b_{6\downarrow}^{\dagger}|0\rangle$ و $|\phi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(b_{6\uparrow}^{\dagger} + b_{6\downarrow}^{\dagger})|0\rangle$ را رسم کرده‌ایم. این حالت‌ها به ترتیب بیانگر انتقال ذره بدون تغییر اسپین، انتقال ذره با وارونی اسپین، و انتقال ذره با ایجاد یک همدوسی هستند. همانطور که نمودارها نشان می‌دهند همانندی حالت منتقل شده با تمامی این حالت‌ها مخالف صفر است و بیشترین همانندی مربوط به $|\phi_2\rangle$ است، به این معنی که زنجیره مورد نظر در انتقال ذره از سمت چپ به راست، با همانندی ۰.۷۸ اسپین آن را وارون می‌سازد. این یکی از اثرات جملات اسپین-مدار است که سبب پرش اسپین-وارون ذرات بین جایگاه‌ها می‌شود.

در شکل ۱-ب انتقال یک حالت همدوس (انتقال یک کیوبیت) از سمت چپ به راست زنجیره را بررسی کرده‌ایم. به ازای حالت اولیه $|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{1\uparrow}^{\dagger} + a_{1\downarrow}^{\dagger})|0\rangle$، نمودار نشان می‌دهد که حالت نهایی $|\phi_3\rangle$ همانندی نزدیک به یک (۰.۹۹) دارد. این یک نتیجه بسیار مهم در تکنولوژی کوانتومی است. زنجیره مورد نظر بصورت سیستمی عمل می‌کند که یک کیوبیت را از یک نقطه به نقطه دیگر هدایت می‌کند بدون اینکه همدوسی آن تغییر کند.



شکل ۱: تغییرات زمانیِ همانندیِ حالت منتقل شده از سمت چپ به راست در یک زنجیره اس‌اس‌اچ زوج به طول $L = 12$، که با هامیلتونین (۱) توصیف می‌شود، به ازای $\lambda = 0$ و $\lambda' = 4$. در (الف) حالت اولیه قبل از تحول $|\psi_1\rangle$ در نظر گرفته شده است و در (ب) $|\psi_2\rangle$. حالتهایی که همانندی حالت تحول یافته با آنها رسم شده است عبارتند از: $|\phi_1\rangle$ (خط نارنجی)، $|\phi_2\rangle$ (خط سبز) و $|\phi_3\rangle$ (خط قرمز). خط آبی تغییرات زمانی همانندی حالت تحول یافته و حالت اولیه را نشان می‌دهد. در رسم این نمودارها $\Omega = 0.0007$ در نظر گرفته شده است. در (ب) خطوط سبز و نارنجی برهم منطبق شده‌اند.

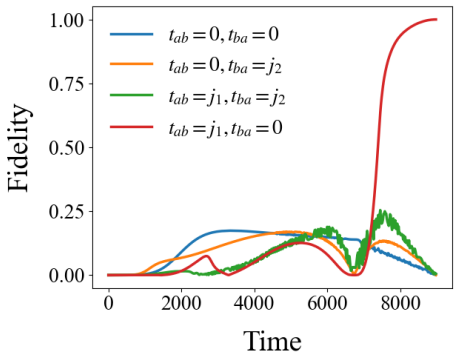
در ادامه به ازای شدت‌های مختلفی از جفت‌شدگی اسپین- مدار نیز تغییرات زمانی همانندی را بررسی کرده‌ایم. نتایج ما نشان می‌دهد که در مواردی تنها با حضور پارامترهای دیگر در هامیلتونی، انتقال حالت اسپینی امکان‌پذیر می‌شود. بطور مثال جفت‌شدگی اسپین-مدار را همانند پتانسیل درون‌جایگاهی $\lambda = -\lambda' = sin(\Omega t)$ وابسته به زمان در نظر می‌گیریم. در این حالت تنها زمانی انتقال کیوبیت بین دو جایگاه مرزی ممکن است که پرش‌های همسایه سوم به زنجیره اعمال شوند. در حضور پرش‌های همسایه سوم هامیلتونی زیر به هامیلتونی (۱) اضافه می شود:

$$H_3 = \sum_{\sigma} \sum_{n=1}^{N} [(t_{ab}\, a_{n,\sigma}^{\dagger} b_{n+1,\sigma} + t_{ba}\, b_{n,\sigma}^{\dagger} a_{n+2,\sigma}) + H.c].$$

(۲)

که t_{ab} و t_{ba} دامنه‌های پرش همسایه سوم هستند. در شکل ۲ همانندی را به ازای مقادیر مختلف پرش همسایه سوم رسم کرده‌ایم. در صورتی که جفت‌شدگی اسپین-مدار با زمان نوسان کند، در غیاب پرش‌های همسایه سوم همانندی حالت تحول‌یافته و حالت همدوس $|\phi_3\rangle$ صفر است، به این معنا که کیوبیت بطور کامل همدوسی خود

را از دست می‌دهد. اما در حضور پرش‌های همسایه سوم همانندی با مقدار ۰.۹۹ به یک نزدیک می‌شود (خط قرمز).



شکل ۲: همانندیِ حالت منتقل شده و $|\phi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(b_{6\uparrow}^{\dagger} + b_{6\downarrow}^{\dagger})|0\rangle$ بر حسب زمان در زنجیره اس‌اس‌اچ زوج به طول $L = 12$ با جفت‌شدگی اسپین-مدار نوسانی $\lambda = -\lambda' = sin(\Omega t)$ در اینجا حالت اولیه $|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{1\uparrow}^{\dagger} + a_{1\downarrow}^{\dagger})|0\rangle$ در نظر گرفته شده است و $\Omega = 0.0007$.

انتقال حالت کوانتومی در زنجیره فرد

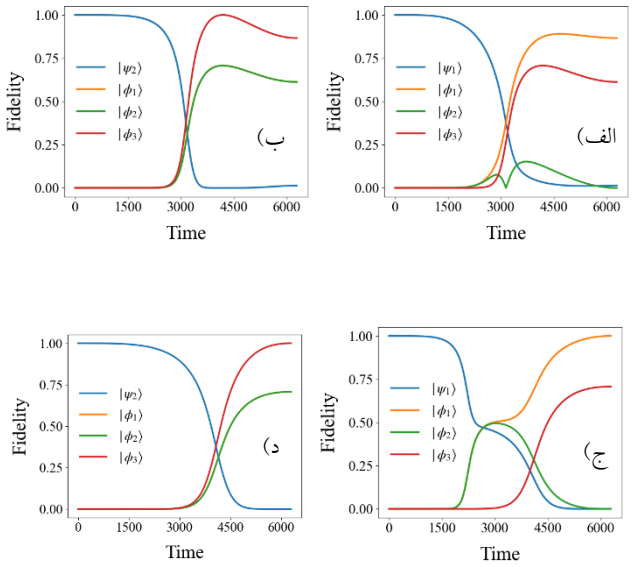
حال می‌خواهیم انتقال حالت‌ها را در زنجیره اس‌اس‌اچ فرد با طول $L = 13$ در حضور جفت‌شدگی اسپین-مدار بررسی کنیم. هامیلتونی زیر را در نظر می‌گیریم:

$$H = \sum_{\sigma}\sum_{n=1}^{N}[(j_1\, a_{n,\sigma}^{\dagger}b_{n,\sigma} + j_2\, a_{n+1,\sigma}^{\dagger}b_{n,\sigma} + \lambda\, a_{n,\sigma}^{\dagger}b_{n+1,-\sigma} - \lambda'\, a_{n+1,\sigma}^{\dagger}b_{n,-\sigma}) + H.c] \quad (۳)$$

همانند قبل $j_1 = 1 + cos\theta$ و $j_2 = 1 - cos\theta$ است، با این تفاوت که θ پارامتری دوره‌ای در بازه $[0, \pi]$ است. مشاهدات ما نشان می‌دهد که به ازای مقادیر ثابتِ λ و λ' هیچگونه انتقال حالتی در زنجیره فرد صورت نمی‌گیرد. به عبارت دیگر، کانال انتقال حالت موجود در زنجیره، در حضور جفت‌شدگی با دامنه ثابت نسبت به زمان به طور کامل از بین می‌رود. اما نتایج به ازای دامنه‌های متغیر با زمان متفاوت است.

در شکل ۳، تغییرات زمانی همانندی برای دو حالت $\lambda = cos\theta$ و $\lambda' = 0$ و $\lambda = sin\theta$ و $\lambda' = 0$ بررسی شده است. حالت‌های اولیه را $|\psi_1\rangle = a_{7\uparrow}^{\dagger}|0\rangle$ و $|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{7\uparrow}^{\dagger} + a_{7\downarrow}^{\dagger})|0\rangle$ در نظر گرفته‌ایم. در این شکل همانندی حالت نهایی انتقال‌یافته از این حالت‌ها و حالت‌های $|\phi_1\rangle = a_{1\uparrow}^{\dagger}|0\rangle$، $|\phi_2\rangle = a_{1\downarrow}^{\dagger}|0\rangle$ و $|\phi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{1\uparrow}^{\dagger} + a_{1\downarrow}^{\dagger})|0\rangle$ رسم شده‌اند. به ازای حالت اولیه $|\psi_1\rangle$، حالت انتقال‌یافته بیشترین همانندی را با حالت نهایی $|\phi_1\rangle$ دارد. این همانندی به ازای $\lambda = sin\theta$ و $\lambda' = 0$ به یک نیز می‌رسد (شکل ۳-الف و ج). این نتایج گویای این است که اگر بار با اسپین بالا در جایگاه مرزی a_7 قرار داشته باشد، پس از تحول زمانی سیستم با حفظ جهت اسپین خود و با ایمنی مناسبی به جایگاه a_1 منتقل می‌شود. همچنین به ازای حالت اولیه $|\psi_2\rangle$ بیشترین همانندی با $|\phi_3\rangle$ دیده می‌شود. در این صورت یک کیوبیت می‌تواند با کمترین خطا از مرز راست زنجیره به مرز چپ زنجیره منتقل شود (شکل ۳-ب و د).

اشاره به این مطلب نیز حائز اهمیت است که اعمال پارامترهایی نظیر پرش همسایه دوم و پرش بلندبرد در حضور جفت‌شدگی اسپین مدار در شرایطی امکان القای مسیریاب‌های توپولوژیکی جدید و انتقال بزرگ مقیاس حالت‌های اسپینی را در زنجیره اس‌اس‌اچ فرد فراهم می‌کند. نتایج بدست آمده حاکی از آن است که هر یک از این مسیریاب‌ها قادر به انتقال کیوبیت از یک ورودی به چندین خروجی با ایمنی بالا و خطای کم هستند.



شکل ۳: تغییرات زمانیِ همانندیِ حالت منتقل شده از سمت راست به چپ در یک زنجیره اس‌اس‌اچ فرد به طول $L = 13$، که با هامیلتونی (۳) توصیف می‌شود، به ازای $\lambda = cos\theta$ و $\lambda' = 0$ (الف و ب) و $\lambda = sin\theta$ و $\lambda' = 0$ (ج و د). در (ب و د) حالت اولیه قبل از تحول $|\psi_1\rangle$ در نظر گرفته شده است و در (الف و ج) $|\psi_2\rangle$. حالت‌هایی که همانندی حالت تحول‌یافته با آنها رسم شده است عبارتند از: $|\phi_1\rangle$ (خط نارنجی)، $|\phi_2\rangle$ (خط سبز) و $|\phi_3\rangle$ (خط قرمز). خط آبی تغییرات زمانی همانندی حالت تحول‌یافته و حالت اولیه را نشان می‌دهد. در رسم این نمودارها $\Omega = 0.0005$ در نظر گرفته شده است.

نتیجه گیری

در این مقاله انتقال کیوبیت‌ها در زنجیره‌های اس‌اس‌اچ را در حضور پرش‌های اسپین-وارون ناشی از جفت‌شدگی اسپین-مدار مطالعه کردیم و نشان دادیم که چگونه کانال‌هایی کاربردی جهت انتقال حالت‌های اسپینی ایجاد می‌شوند. نتایج ما نشان می‌دهد فاز توپولوژیک سیستم نقش محوری در حفظ ایمنی اطلاعات کوانتومی ایفا می‌کند، به‌گونه‌ای که حالت‌های مرزی توپولوژیک به عنوان حامل‌های امن اطلاعات کوانتومی عمل می‌کنند. بررسی اثر پارامترهای مختلف سیستم از جمله پرش‌های همسایه سوم نیز نشان می‌دهد که این برهم‌کنش‌ها می‌توانند به‌طور قابل‌توجهی شرایط انتقال را تحت تأثیر قرار دهند. تفاوت‌های مشاهده شده در عملکرد زنجیره‌های زوج و فرد نیز راهکارهای ارزشمندی برای طراحی سیستم‌های انتقال کوانتومی ارائه می‌دهد. یافته‌های این مطالعه نه‌تنها درک ما را از انتقال اطلاعات در سیستم‌های توپولوژیک ارتقا می‌بخشد، بلکه راه‌های جدیدی برای طراحی سیستم‌های کوانتومی مقاوم در برابر اختلالات پیشنهاد می‌کند. توسعه این پژوهش می‌تواند با در نظر گرفتن اثرات محیطی و بی‌نظمی‌ها، مدل را به شرایط آزمایشگاهی نزدیکتر کند.

مرجع‌ها

[1] Qi, L., Yan Y. Xing Y. Zhao X. D. Liu S. Cui W. X. ... & Wang H. F. *"Topological router induced via long-range hopping in a Su-Schrieffer-Heeger chain"*; Physical Review Research, 3(2), 023037, 2021.

[2] L. Qi, G. L. Wang, S. Liu S. Zhang & H. F. Wang. *"Engineering of topological state transfer and topological beam splitter in an even-size Su-Schrieer-Heeger chain"*; Physical Review A, 102(2), 022404, 2020.

[3] Hasan, M. Z., & Kane C. L. *"Topological Insulators"*; Reviews of modern physics, 82(4), 3045-3067, 2010.

[4] Qi, X. L., & Zhang S. C. *"Topological insulators and superconductors"*; Reviews of modern physics, 83(4), 1057-1110, 2011.

[5] Bansil, A., Lin H. & Das T. *"Colloquium: Topological Band Theory"*; Reviews of Modern Physics, 88(2), 021004, 2016.

[6] Liang, Y. C., Yeh Y. H. Mendonça P. E. Teh R. Y. Reid M. D. & Drummond P. D. *"Quantum Fidelity measures for mixed states"*; Reports on Progress in Physics,82(7), 076001, 2019.

اثر تابش لیزر بر روی رشد جوانه در سلول‌های مخمر نان

رضائی، فاطمه[۱] ؛ محمدرفیعی، فرشید[۲]؛ حاجی‌زاده، فائقه[۳]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، گاوازنگ بلوار پرفسور یوسف ثبوتی

چکیده

سلول مخمر به دلیل در دسترس بودن یک مدل زیستی کاربردی و محبوب بین سلول‌های یوکاریوتی است و گونه‌های مختلف این سلول برای مطالعاتی نظیر تغییر و دستکاری ژنتیکی مورد استفاده قرار می‌گیرد. تا کنون مطالعات زیادی در رابطه با تاثیر عوامل آزمایشگاهی مانند انبرک نوری بر رشد و تکثیر سلول‌های مخمر انجام شده است. هدف ما در این پژوهش بررسی رشد جوانه سلول مخمر نان تحت تابش لیزر فروسرخ است. برای این هدف سلول های مخمر به مدت ۱۵ دقیقه در چهار سطح توان مختلف ۷، ۲۸، ۴۳ و ۸۵ میلی‌وات، درون تله نوری قرار گرفتند. سپس تصاویر سلول برای تجزیه و تحلیل نرخ رشد ناشی از تابش لیزر ثبت شدند. نتایج نشان‌دهنده تاثیر مخرب لیزر در توان‌های بالا و کاهش سرعت رشد جوانه است. همچنین، تاثیر تابش لیزر بر مکان جوانه سلول مخمر توسط تله خط شکل، مورد بررسی قرار گرفت. برای این هدف، تصاویر رشد سلول به مدت ۸ ساعت درون تله ثبت شد. مشاهده شد که تابش لیزر کانونی شده تا حد زیادی بر جهت‌گیری رشد جوانه تاثیر دارد و جوانه در راستای تله نوری خط شکل، از سلول مادر سر درآورده و رشد می‌کند.

واژه‌های کلیدی: *مخمر نان، انبرک نوری، تله نوری خط شکل*

The Impact of Laser Radiation on Bud Growth in Baker’s Yeast Cells

Rezaei, Fateme[1]; Mohammad Rafiee, Farshid[2]; Hajizadeh, Faegheh[3]

[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences, Zanjan

Abstract

Yeast cells are a widely used and practical eukaryotic model organism, particularly for genetic modification studies. Many studies have investigated the impact of laboratory factors, such as optical tweezers, on yeast cell growth and proliferation. Our research investigates yeast bud growth under infrared laser radiation. Yeast cells were optically trapped for 15 minutes at power levels of 7, 28, 43, and 85 milliwatts. The results demonstrate the damaging impact of high-power focused lasers, which reduce the budding growth rate. Additionally, Line optical tweezers were employed to investigate how localized heating from absorption at the focal point influences the direction of yeast bud growth. Cell growth within the line optical trap was recorded over 8 hours, revealing that the focused laser significantly directed bud growth toward the optical trap.

***Keywords**: Baker's yeast, Optical tweezers, Line optical tweezers*

مقدمه

مخمر ساکارومایسس سرویزیه[۲۶] یک ارگانیسم تک سلولی یوکاریوتی است و به قلمرو قارچ‌ها تعلق دارد. اندازه سلول مخمر در گونه‌های مختلف و تحت تاثیر محیط اطراف، می‌تواند متفاوت باشد؛ برخی از انواع مخمر توانایی رشد تا ۴۰ میکرومتر را دارند [۱]. اندازه سلول مخمر نان، بین ۱۰ الی ۱۲ میکرومتر است. این سلول به‌عنوان یک ارگانیسم مدل در تحقیقات زیست‌شناسی سلولی استفاده می‌شود، زیرا ساختار ژنتیکی آن شبیه به موجودات پیچیده‌تر است.

بررسی رشد سلول‌های مخمر به روش‌های مختلفی انجام شده است. برای مثال، می‌توان به مطالعه نمایه زمانی رشد سلولی در مخمر فیشن[۲۷] و معیارهای انتخاب مدل اشاره کرد که در آن پژوهش، افزایش طول سلول مخمر فیشن اندازه‌گیری شده و مدل‌های ریاضی مختلفی بر نمودار رشد این سلول، برازش شده است تا یک الگوی مناسب برای رشد این سویه مخمر بیابند [۲].

مخمر مورد مطالعه در این پژوهش، که مخمر نان نام دارد، یک مدل ارگانیسم یوکاریوتی تک سلولی بسیار محبوب است که به‌طور گسترده با روش‌های مختلف مورد مطالعه قرار گرفته و توالی ژنوم آن به‌طور کامل مشخص شده‌است [۳].

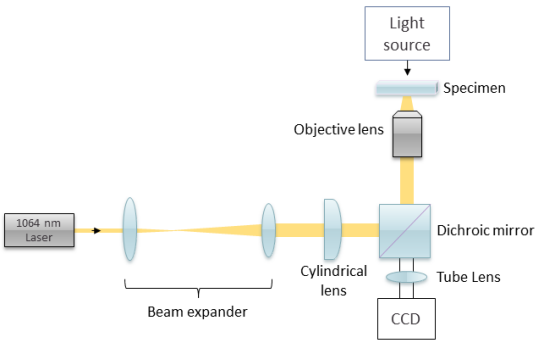
در این بررسی سرعت رشد جوانه سلول مخمر، در حالتی که مدت زمان مشخصی درون تله نوری فروسرخ قرار گرفته، بررسی شده است. در ادامه نیز به بررسی تاثیر تابش لیزر بر مکان رشد جوانه سلول مخمر نان پرداخته‌ایم. برای این کار از یک تله نوری خط شکل برای تله‌اندازی سلول مخمر استفاده کرده و رشد سجوانه‌های سلول را به مدت ۸ ساعت ثبت کردیم که در ادامه به بررسی تجربی و نتایج آزمایش می‌پردازیم.

بررسی تجربی

مخمر مورد استفاده در این پژوهش، مخمر نانی است که در مصرف خانگی مورد استفاده قرار می‌گیرد. برای کشت سلول مخمر نان از محیط کشت اختصاصی مخمر به‌نام YPD استفاده کردیم که متشکل است از ۲۰٪ عصاره مخمر، ۴۰٪ پپتون[۲۸] و ۴۰٪ دکستروز[۲۹]. ۵۰ گرم از مواد را در ۱ لیتر آب مقطر حل کرده و برای داشتن محیط کشت جامد، ۱/۵٪ ژل آگار به محلول فوق اضافه می‌کنیم. سلول را بر روی محیط جامد کشت داده و به مدت ۳ روز درون انکوباتور جامد قرار می‌دهیم تا رشد کند. پیش از شروع آزمایش، به‌وسیله لوپ[۳۰] مقداری از سلول کشت داده شده را برداشته و به مدت ۲ ساعت درون محیط کشت مایع قرار می‌دهیم. چمبر را با استفاده از یک لام و لامل ساخته و نمونه را برای ثبت تصاویر رشد، داخل آن تزریق کرده و زیر میکروسکوپ قرار می‌دهیم. سپس سلول‌هایی که در مرحله تلوفاز از چرخه تقسیم سلولی قرار دارند را انتخاب کرده و به مدت ۱۵ دقیقه درون تله نوری با چهار توان مختلف ۷، ۲۸، ۴۳ و ۸۵ میلی‌وات قرار دادیم. سپس لیزر را خاموش کرده و رشد سلول‌ها به مدت ۱۵۰ دقیقه ثبت شدند. در ساده‌ترین چیدمان، انبرک نوری که در شکل ۱ نشان داده شده است، باریکه لیزر کانونی شده توسط عدسی شیئی با گشودگی عددی بالا است که به دلیل وجود گرادیان شدت در ناحیه کانونی باعث به تله افتادن ذرات نزدیک به کانون می‌شود [۴]. در این چیدمان، از یک لیزر با طول‌موج ۱۰۶۴ نانومتر استفاده شده است که علت انتخاب این طول‌موج، جذب پایین آن توسط آب و

[26] Saccharomyces cerevisiae
[27] Fission
[28] Peptone
[29] Dextrose
[30] Loop

سلول‌های زیستی است. باریکه توسط دو عدسی پهن شده، به آینه دو فام می‌رسد و توسط آن به سمت عدسی شیئی هدایت می‌شود تا باریکه را کانونی کند. با جابه‌جا کردن نمونه توسط جابجاگر پیزو، می‌توان سلول را در کانون لیزر قرار داد.



شکل ۱. طرحواره چیدمان انبرک نوری که قسمت زرد رنگ، مسیر مربوط به تله‌اندازی را نشان می‌دهد. لنز استوانه‌ای تنها در صورت نیاز به تله خط شکل در مسیر باریکه لیزر قرار می‌گیرد.

برای تصویر برداری از جوانه در حال رشد، از میکروسکوپ نوری میدان روشن استفاده می‌کنیم. در شکل ۲ تصاویر رشد جوانه سلول نشان داده شده است. برای به‌دست آوردن نرخ رشد به‌عنوان تابعی از زمان، مساحت سلول‌ها را با استفاده از برنامه ImageJ اندازه‌گیری می‌کنیم. این کار برای ۲۵ سلول انجام شده و در هر سطح توان و بدون احتساب سلول‌های مرده، چهار سلول را مورد بررسی قرار دادیم. از آنجا که اندازه سلول‌ها با یکدیگر متفاوت است، برای نرمال کردن مساحت از رابطه زیر استفاده می‌کنیم:

$$CAI = \frac{NoP(t)}{NoP(t_0)} \qquad (۱)$$

در این رابطه کمیت به‌دست آمده CAI شاخص مساحت سلول، NoP(t) تعداد پیکسل‌های تصویر سلول که با خطوط زرد مشخص شده اند در زمان t و $NoP(t_0)$ تعداد پیکسل‌ها در شروع آزمایش است.

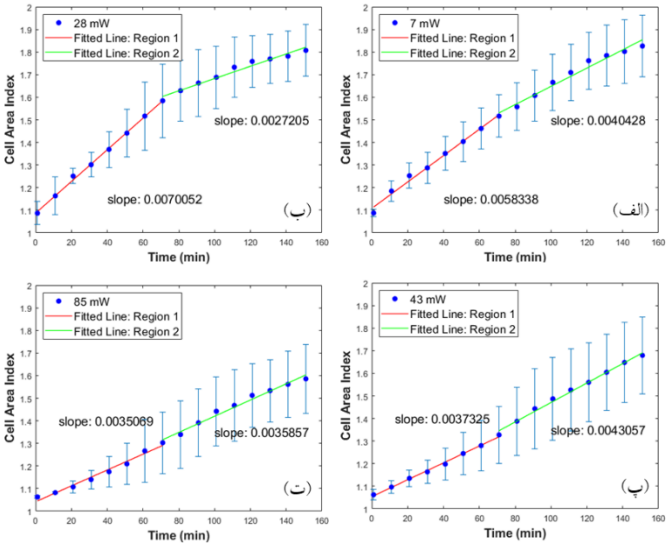
شکل ۲. اندازه‌گیری مساحت سلول‌های مخمر نان. مساحت سلول‌ها با خطوط زرد رنگ مشخص و با استفاده از برنامه ImageJ اندازه‌گیری شده است. تصویر (الف) ۱۰ دقیقه، (ب) ۴۰ دقیقه و (پ) ۱۰۰ دقیقه بعد از رشد را نشان می‌دهد.

نمودار رشد سلول مخمر و تغییرات مساحت آن در طی زمان، در شکل ۳ نشان داده شده‌است. برای بررسی دقیق، نمودارها را به دوناحیه تقسیم می‌کنیم که ناحیه اول از زمان شروع تا دقیقه ۸۰ و ناحیه دوم از دقیقه ۸۰ تا دقیقه ۱۵۰ در نظر گرفته شده است. رشد سلول در دو ناحیه با تقریب خوبی خطی است، بنابراین یک خط بر نمودار برازش می‌کنیم و با داشتن شیب خط برازش شده، سرعت رشد جوانه مخمر را در توان‌های مختلف بررسی می‌کنیم. شیب خطوط برازش شده بر نمودار رشد در جدول ۱ آمده است.

جدول ۱. شیب خطوط برازش شده بر نمودار رشد جوانه سلول مخمر.

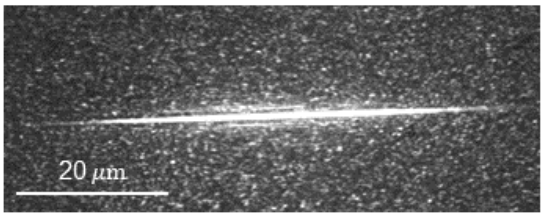
توان لیزر (mW)	شیب در ناحیه اول $(\frac{1}{min})$	شیب در ناحیه دوم $(\frac{1}{min})$
۰	۰/۰۰۷۲	۰/۰۰۶۰
۷	۰/۰۰۵۸	۰/۰۰۴۰
۲۸	۰/۰۰۷۰	۰/۰۰۲۷
۴۳	۰/۰۰۳۷	۰/۰۰۴۳
۸۵	۰/۰۰۳۵	۰/۰۰۳۶

با بررسی این نمودارها مشاهده می‌شود با افزایش توان لیزر، شیب نمودار و سرعت رشد جوانه سلول در هر دو ناحیه کاهش می‌یابد.



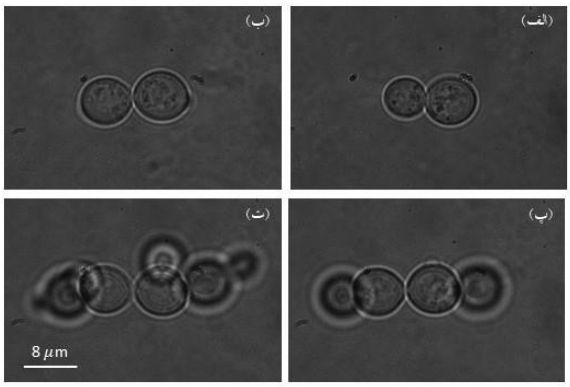
شکل ۳. نمودار شاخص مساحت سلول مخمر نان در حالتی که به‌مدت ۱۵ دقیقه درون تله نوری با توان (الف) ۷ میلی‌وات، (ب) ۲۸ میلی‌وات، (پ) ۴۳ میلی‌وات و (ت) ۸۵ میلی‌وات قرار گرفته است. میله خطا نشان دهنده‌ی میانگین خطای استاندارد است.

برای بررسی اثر تابش لیزر بر جهت و مکان رشد سلول مخمر نیز از چیدمان انبرک نوری شکل ۱ استفاده شده است، با این تفاوت که برای داشتن یک تله خطی شکل، یک لنز استوانه‌ای در مسیر باریکه لیزر به‌طوری قرار می‌گیرد که آن را در صفحه کانونی پشت عدسی شیئی کانونی کند. در شکل ٤، طرح شدت باریکه لیزر خط شکل نشان داده شده است.



شکل ٤. تصویر میکروسکوپ نوری بازتاب طرح شدت نور کانونی شده توسط لنز استوانه‌ای با فاصله کانونی ۳۰ سانتی‌متر از سطح لامل.

در این قسمت از آزمایش، یک سلول مخمر را به مدت ۸ ساعت درون تله خط شکل قرار داده و تصاویر رشد سلول را ثبت کردیم. در شکل ۵، تصاویر رشد مخمر درون تله خط شکل نشان داده شده است. در این حالت توان لیزر برابر با ٥٤ میلی‌وات است. با توجه به تصاویر رشد، قابل مشاهده است که ۵ جوانه در طول ۸ ساعت در راستای تله خط شکل رشد کرده اند.



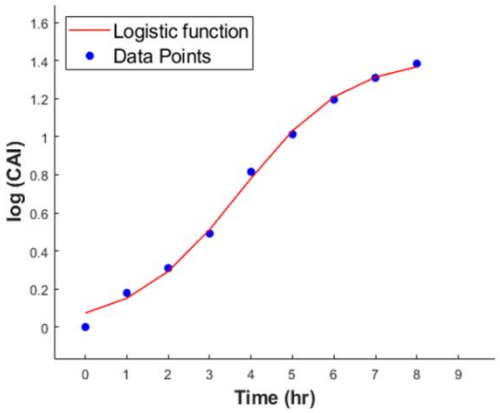
شکل ۵. تصاویر رشد سلول مخمر درون تله نوری خط شکل که (الف) ۲ ساعت، (ب) ٤ ساعت، (پ) ٦ ساعت و (ت) ۸ ساعت پس از رشد را نشان می‌دهد.

همچنین برای بررسی الگوی رشد سلول، با محاسبه شاخص مساحت سلول و رسم نمودار آن بر حسب زمان، تابع لاجستیک را که مدلی مناسب برای نمایش الگوی رشد سلول مخمر در داخل تله خطی است را بر نمودار رشد برازش کرده‌ایم که در شکل ۵ نشان داده شده است [۵]. این تابع یک منحنی رایج در زیست‌شناسی است که رشد تصاعدی جمعیت را مدل می‌کند و با توجه به خطای کمتر برازش این مدل نسبت به مدل‌های دیگر، برای منحنی رشد سلول

مخمر مورد بررسی در این آزمایش الگوی مناسبی است. تابع لاجستیک در معادله ۲ نشان داده شده است [۵].

$$\log(CAI) = \frac{A}{1 + exp\{(4\mu/A)(\lambda - t) + 2\}} \qquad (۲)$$

در این رابطه A حداکثر مقدار رشد، μ حداکثر نرخ رشد در زمان تاخیر و λ زمان تاخیر است. از تابع لاجستیک می‌توانیم پارامترهای زیستی را از منحنی رشد استخراج کنیم که A=1.416، μ=0275 و λ=69.48 min به‌دست می‌آید. نتایج این آزمایش با مدل ارائه شده در مقالات قبلی هم‌خوانی دارد.



شکل ٦. منحنی رشد سلول مخمر درون تله نوری خط شکل، برازش شده توسط تابع لاجستیک.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش به تاثیر تابش لیزر کانونی شده فروسرخ بر سرعت رشد جوانه در سلول‌های مخمر نان و همچنین تاثیر تله خط شکل بر جهت و مکان رشد جوانه پرداختیم. مشاهده شد که اگرچه به دلیل کاربرد گسترده انبرک نوری در زیست‌شناسی، برای جلوگیری از آسیب دیدن نمونه‌های زیستی از لیزر با طول موج در ناحیه فروسرخ در این ابزار استفاده می‌شود، اما همچنان با افزایش توان لیزر و تاباندن آن به نمونه زیستی، سلول زنده آسیب می‌بیند و در توان‌های بالاتر تعداد مرگ و میر نیز افزایش می‌یابد. همچنین دیدیم که تله نوری خط شکل در جهت‌گیری و مکان رشد جوانه سلول مخمر تاثیر دارد و تابع لاجستیک مدلی مناسب برای نشان دادن الگوی رشد سلول مخمر نان داخل تله نوری است.

مراجع

[1] Schwarz D. S., Blower M. D. The endoplasmic reticulum: structure, function and response to cellular signaling. *Cellular and molecular life sciences*, pp. 79–94, 2016.

[2] P. Buchwald and A. Sveiczer. The time-profile of cell growth in fission yeast: model selection criteria favoring bilinear models over exponential ones. *Theoretical Biology and Medical Modelling*, (3):1–10, 2006.

[3] Pilát Z., Jonáš A., Ježek J. and P. Zemánek. Effects of infrared optical trapping on saccharomyces cerevisiae in a microfluidic system. *Sensors*, 2640(17):1–11, November 2017.

[4] Williams, Mark C. Optical Tweezers: Measuring Piconewton Forces. *Biophysics Textbook Online: http://www. biophysics. org/btol*, 2002.

[5] Charrunchon S., Limtrakul J., Chattham N. Growth Pattern of Yeast Cells Studied under Line Optical Tweezers. *International Journal of Applied Physics and Mathematics*, 3(3), May 2013.

مقایسه‌ی آموزش شبکه عصبی همگشتی کوانتوم-کلاسیکی و شبکه عصبی کلاسیک در پیشبینی مغناطش سیستم اسپینی بلندبرد تصادفی

علوی، شکوفه؛ فضیله، فرهاد

دانشکده‌ی فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

در این مقاله، یک شبکه عصبی همگشتی کوانتوم-کلاسیکی (QCCNN)[31] برای پیش‌بینی مغناطش در سامانه‌های اسپینی با برهم‌کنش بلندبرد تصادفی ارائه شده است. داده‌های آموزشی از شبیه‌سازی سامانه‌ی اسپینی با استفاده از روش قطری‌سازی دقیق به دست آمده‌اند. شبکه‌ی پیشنهادی از قابلیت‌های یادگیری ماشین کوانتومی و کلاسیکی بهره می‌برد تا دقت و سرعت پیش‌بینی را بهبود بخشد. عملکرد این شبکه با شبکه‌ی عصبی کلاسیک (NN)[32] مقایسه شده و نشان داده شده است که شبکه عصبی همگشتی کوانتوم-کلاسیکی در شرایط خاصی در دوره‌های آموزشی کمتر، به خطای کمتری دست می‌یابد.

واژگان کلیدی: یادگیری ماشین کوانتومی، شبکه‌ی عصبی همگشتی، سامانه‌های اسپینی، مغناطش، سامانه‌های بس ذره ای کوانتومی.

Comparison of Quantum-Classical Convolutional Neural Network Training and Classical Neural Network in Predicting the Magnetization of a Random Long-Range Spin System

Alavi, Shekoufeh; Fazileh, Farhad

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

This paper proposes a quantum-classical convolutional neural network to predict magnetization in spin systems with random long-range interactions. The training data is obtained from the simulation of the spin system using the exact diagonalization method. The proposed network utilizes the capabilities of quantum and classical machine learning to improve the accuracy and speed of prediction. The performance of this network is compared with the classical neural network, and it is shown that quantum-classical convolutional neural network achieves lower errors in fewer training cycles under certain conditions.

***Keywords**: Quantum Machine Learning, Convolutional Neural Network, Spin Systems, Magnetization, Quantum Many-body Systems.*

[31] Quantum-Classical Neural Network
[32] Neural Network

مقدمه

شبکه‌های عصبی کوانتومی به عنوان یک ابزار قدرتمند برای تحلیل سامانه‌های پیچیده فیزیکی مطرح شده‌اند. در این مقاله، ترکیب یک شبکه‌ی عصبی کلاسیک و یک مدار کوانتومی در چارچوب یک شبکه‌ی عصبی همگشتی کوانتوم-کلاسیکی بررسی می‌شود. هدف این مدل، پیش‌بینی مغناطش یک سامانه‌ی اسپینی در حالت پایه است. از داده‌های حاصل از شبیه‌سازی دقیق هامیلتونی تصادفی سامانه به این منظور استفاده شده است. این شبکه‌های عصبی ترکیبی از معماری‌های کوانتومی و کلاسیکی هستند که با بهره‌گیری از مزایای محاسبات کوانتومی در کنار روش‌های یادگیری ماشین کلاسیک، قابلیت یادگیری و پردازش داده‌ها را افزایش می‌دهند [۱]. طراحی شبکه‌ی عصبی همگشتی کوانتوم-کلاسیکی با بهره‌گیری از درهم‌تنیدگی‌ها و خواص کوانتومی ممکن است برتری‌ای در مطالعه‌ی سامانه‌های اسپینی کوانتومی را نسبت به شبکه‌های عصبی کلاسیک نتیجه دهد. این امکان در ادامه بررسی خواهد شد [۲].

آماده‌سازی داده‌های آموزش

برای ایجاد مجموعه‌ی داده‌ی آموزشی، یک سامانه‌ی اسپینی با برهم‌کنش بلندبرد تصادفی به روش قطری‌سازی دقیق شبیه‌سازی شده است [۳]. هامیلتونی این سامانه به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$H = \sum_{i,j}^{N} \left(J_{ij}\sigma_i^z\sigma_j^z + K_{ij}\sigma_i^x\sigma_j^x \right) + \sum_{i}^{N} \left(g_i\sigma_i^x + h\,\sigma_i^z \right)$$

ضرایب هامیلتونی J_{ij} ، K_{ij} ، g_i و h_i به طور تصادفی به ترتیب از بازه‌های (۰ , ۱−)، (۱, ۱−)، (۶ , ۶−) و (۰.۰۴ , ۰.۰۴−) و با توزیع یکنواخت انتخاب شده‌اند. همچنین $\sigma_i^z, \sigma_j^z, \sigma_i^x, \sigma_j^x$ مولفه های x و z عملگر برداری پائولی هستند. پیاده‌سازی کد شبیه‌سازی با استفاده از کتابخانه‌ی Numpy در پایتون انجام شده و برای بهبود سرعت، پردازش موازی مورد استفاده قرار گرفته است. قطری‌سازی هامیلتونی‌ها نیز با ابزار موجود در کتابخانه ی Numpy صورت گرفت و مغناطش هر پیکربندی هامیلتونی، با استفاده از حالت پایه‌ی مربوط به هر پیکربندی محاسبه شد. داده‌ی ورودی شامل بردارهای پایه‌ی پیکربندی‌های مختلف هامیلتونی و مغناطش متناظر با هر پیکربندی بعنوان برچسب‌های آموزش با نظارت شبکه‌ی عصبی است. شبکه‌ی عصبی باید مغناطش کل سامانه اسپینی را در هر پیکربندی بر اساس بردار حالت پایه‌ی آن پیش‌بینی کند.

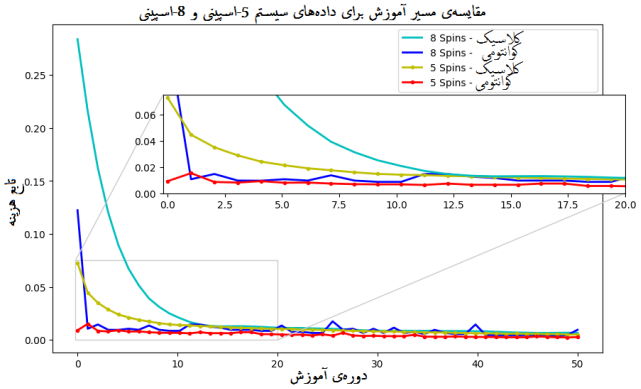
شبکه‌ی عصبی همگشتی کوانتوم-کلاسیکی

برای پیاده‌سازی شبکه‌ی عصبی کوانتوم-کلاسیکی، از کتابخانه‌ی Pennylane استفاده شده است که به کاربر امکان می‌دهد مدارهای کوانتومی را به‌عنوان تابعی در لایه‌های شبکه‌ی عصبی کلاسیک که با مدل Keras پیاده‌سازی شده است، وارد کند. این رویکرد باعث می‌شود که کاربران بتوانند از ویژگی‌های محاسبات کوانتومی در یادگیری ماشین بهره ببرند، بدون آن‌که نیاز به پیاده‌سازی مستقیم مدارهای کوانتومی پیچیده داشته باشند. بدین ترتیب، مدل همگشتی کوانتوم-کلاسیکی از طریق یکپارچه‌سازی روش‌های یادگیری عمیق و مدارهای کوانتومی توسعه می‌یابد. در این روش، یک لایه‌ی ترکیبی کوانتوم-کلاسیکی که دارای یک مدار وردشی کوانتومی بعنوان فیلتر کوانتومی است، با شبکه‌ی عصبی همگشتی کلاسیک ترکیب شده است [۴] و [۵]. در لایه‌ی همگشتی کوانتومی ابتدا المان‌های بردار داده‌ی ورودی بعنوان زوایای دوران کیوبیت‌ها روی آن‌ها اعمال می‌شود. وزن‌های فیلتر نیز بعنوان گیت‌های پارامتری در یک

الگوریتم وردشی روی کیوبیت‌ها اثر می‌کنند و نهایتا با بهینه‌سازی مدار در کامپیوتر کلاسیک، به بهترین عملکرد شبکه‌ی عصبی برای استخراج ویژگی‌ها می‌رسیم. این فرآیند مشابه عملکرد یک فیلتر در شبکه‌ی عصبی همگشتی است که ویژگی‌های مختلف داده‌ها را جاروب کرده و با استفاده از به‌روزرسانی وزن‌ها، فرآیند یادگیری را تکمیل می‌کند. همچنین، به‌منظور مقایسه‌ی عملکرد شبکه‌ی عصبی کوانتومی، یک مدل یادگیری کلاسیک تک‌لایه‌ای با هشت نورون نیز آموزش داده شده است تا عملکرد QCCNN را با آن مقایسه کنیم. بنابراین شبکه‌ی عصبی یک لایه‌ای کوانتومی با شبکه‌ی عصبی یک لایه‌ای کلاسیک مقایسه شده است.

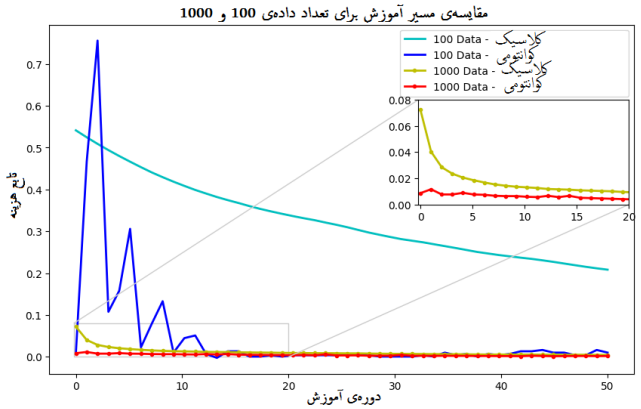
نتایج و تحلیل عملکرد

برای ارزیابی کارایی این مدل ترکیبی، چندین سناریوی آموزشی طراحی و بررسی شد. در اولین مرحله، تأثیر افزایش تعداد اسپین‌های سامانه مغناطیسی که داده‌های آموزشی از آن استخراج شده‌اند، مورد تحلیل قرار گرفت. QCCNN در سامانه‌های ۵–اسپینی عملکرد بهتری نسبت به NN دارد. در سامانه ۸–اسپینی ، خطای پیش‌بینی اولیه‌ی QCCNN افزایش می‌یابد، اما همچنان در دوره‌های آموزشی کمتری به کمترین مقدار خطا و بهترین پیش‌بینی خود می‌رسد. نتایج نشان دادند که برای سامانه‌های کوچک‌ترمدل QCCNN در همان دوره‌های اولیه‌ی آموزش به خطای بسیار کمی دست یافت و دقت پیش‌بینی مغناطش سامانه را نسبت به مدل‌های کلاسیک بهبود بخشید. همانطور که در شکل ۱ دیده می‌شود، با افزایش ابعاد سامانه میزان خطای پیش‌بینی در دوره‌های ابتدایی آموزش افزایش یافت، اما این شبکه همچنان در دوره‌های کمتر، به کمترین میزان خطا دست می‌یافت.



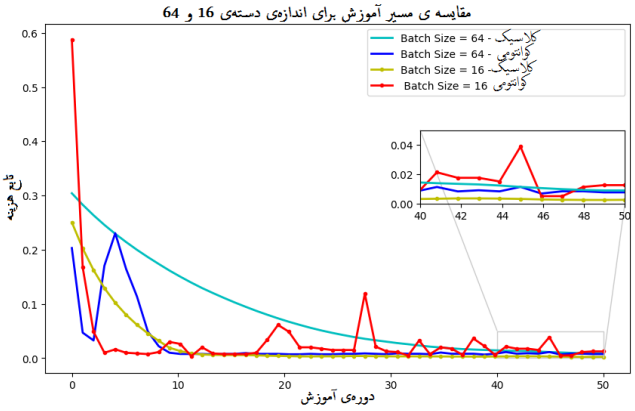
شکل ۲ مقایسه ی مسیر کاهش تابع هزینه‌ی آموزش شبکه‌های عصبی کلاسیک و همگشتی کوانتوم–کلاسیکی برای داده‌ی مربوط به سامانه‌های ۵–اسپینی و ۸–اسپینی .

در مقایسه‌ی دوم، تأثیر تعداد داده‌های آموزشی بررسی شد. برای این منظور، داده‌های آموزشی در اندازه‌های ۱۰۰ و ۱۰۰۰ نمونه انتخاب شدند. نتایج برای ۱۰۰ داده نشان دادند اگرچه QCCNN در دوره‌های اولیه خطای بالایی داشت. اما پس از چند دوره‌ی آموزشی، مقدار تابع هزینه کاهش یافت و مدل به نتایج قابل قبولی دست یافت و حتی با داده ی بسیار کم توانست به نتایج مطلوبی برسد. این در حالی بود که NN حتی با افزایش دوره‌های آموزشی موفق به یادگیری بهینه نشد. همانطور که در شکل۲ دیده می‌شود، با افزایش تعداد داده‌ها به ۱۰۰۰ داده، هر دو مدل عملکرد بهتری نشان دادند، اما QCCNN علی‌رغم افت و خیز مسیر آموزش، همچنان در تعداد دوره‌های آموزشی کمتر به دقت بالاتری دست یافت.



شکل ۳مقای‌سه ی مسیر کاهش تابع هزینه‌ی آموزش شبکه‌های عصبی کلاسیک و همگشتی کوانتوم–کلاسیکی برای تعداد داده‌ی آموزش ۱۰۰ و ۱۰۰۰.

مقایسه‌ی سوم به تغییر اندازه‌ی دسته‌هایی می‌پردازد که هر بار برای یادگیری به شبکه‌های عصبی داده می‌شوند. در آموزش شبکه‌ی عصبی، داده ها به دسته‌هایی با تعداد اعضای مشخص تقسیم می‌شوند و بهینه‌سازی روی هر دسته جداگانه صورت می‌گیرد و نهایتاً برای هر دوره‌ی آموزش، همه‌ی دسته‌ها آموزش می‌بینند. با افزایش اندازه‌ی دسته‌های داده‌ها، نیاز به حافظه‌ی دسترسی تصادفی بیشتری خواهد بود. همانطور که در شکل۳ دیده می‌شود، QCCNN با ۱۶ دسته‌ی آموزش که تعداد کمی است، در دوره‌های کمتری (حدود ۵ دوره) به کمترین میزان خطای خود دست می‌یابد، در حالیکه با افزایش تعداد دسته‌ها از ۱۶ به ۶۴ ، تا ۱۰ دوره‌ی آموزش هنوز به کاهش معنی‌داری در میزان خطای QCCNN نرسیده‌ایم. همچنین، افزایش اندازه‌ی دسته‌ها باعث کاهش افت و خیز خطای پیش‌بینی QCCNN می‌شود و مسیر آموزش هموارتر طی می‌شود.



شکل ۴ مقایسه ی مسیر کاهش تابع هزینه‌ی آموزش شبکه‌های عصبی کلاسیک و همگشتی کوانتوم-کلاسیکی برای اندازه دسته‌ی آموزش ۱۶ و ۶۴

نتیجه گیری

این پژوهش نشان داد که ترکیب مدل‌های یادگیری ماشین کلاسیک و کوانتومی در قالب شبکه‌ی عصبی همگشتی کوانتوم-کلاسیکی می‌تواند در پیش‌بینی مغناطش سامانه‌های اسپینی عملکرد بهتری نسبت به شبکه‌های کلاسیک داشته باشد. به ویژه، این مدل در سامانه‌های مغناطیسی کوچک، دقت بیشتری در پیش‌بینی نتایج داشته و فرآیند یادگیری را سریع‌تر تکمیل می‌کنند. با افزایش ابعاد سامانه‌های مغناطیسی، خطای مدل کوانتومی در دوره‌های اولیه‌ی یادگیری افزایش می‌یابد، اما همچنان در تعداد دوره‌های کمتر، به کمترین میزان خطای ممکن می‌رسد. همچنین، افزایش تعداد کیوبیت‌ها، اگرچه باعث بهبود عملکرد مدل شد، اما موجب افزایش نوسانات در فرآیند یادگیری نیز گردید. علاوه‌براین، مقایسه‌ی نتایج نشان داد که اندازه‌ی دسته‌های داده تأثیر مهمی بر همگرایی شبکه دارد، اما بالتبع انتخاب بیش از حد بزرگ برای این مقدار باعث افزایش نیاز به حافظه‌ی محاسباتی بدون بهبود چشمگیر در دقت مدل می‌شود. بنابراین، درکل با اطمینان می‌توان گفت که شبکه عصبی همگشتی کوانتوم-کلاسیکی برتری قطعی در یادگیری سامانه‌های با تعداد داده‌ی کم دارد و یادگیری خود را در باقی شرایط عموما بسیار سریعتر از شبکه‌ی عصبی کلاسیک تکمیل می‌کند.

سپاسگزاری

صمیمانه از همکاری آقای دکتر فرهاد فضیله سپاس گزارم که در تمامی مراحل راهنمایی و پشتیبانی علمی این پروژه را به عهده گرفتند.

مرجع‌ها

[۱] Biamonte, J., Wittek, P., Pancotti, N., Rebentrost, P., Wiebe, N., and Lloyd, S “Quantum machine learning”, *Nature*, Vol. **549**, No. 7671, pp. 195–202, 2017.

[۲] Sander, Leon C., et al. "Quantum Convolutional Neural Network for Phase Recognition in Two Dimensions." *arXiv preprint* arXiv:**2407.04114** (2024).

[۳] Shen, H., Zhang, P., You, Y.-Z., and Zhai, H., “Information scrambling in quantum neural networks”, *Physical Review Letters*, Vol. **124**, No. 20, p. 200504, 2020.

[٤] Liu, J., Lim, K. H., Wood, K. L., Huang, W., Guo, C., and Huang, H.-L., "Hybrid quantum-classical convolutional neural networks", Science China Physics, *Mechanics & Astronomy*, Vol. **64**, No. 9, p. 290311, 2021.

[٥] Henderson, Shakya, P.-. C., "Quanvolutional neural networks: Powering image recognition with quantum circuits", *https://arxiv.org/abs/**1904.04767***, 2020.

تأثیر دسته‌شدن گونه‌های مهاجر بر دقت مسیریابی

برنج‌کار دریاسری، نگین[1]؛ پاینده، فاطمه[1]؛ دهقان نیری، محمد[1]

[1] دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، زنجان

چکیده

حرکت دسته‌ای نقش بسزایی در امن‌تر شدن زندگی یک گونه در مقابل مخاطرات طبیعی دارد. مهاجرت جانداران نیز تأثیر مهمی در حیات گونه و حفظ سلامت زیست‌بوم دارد. از این رو مطالعه‌ی مهاجرت گونه‌ها و عوامل مؤثر در آن از اهمیت زیادی برخوردار است. در این پژوهش برای شبیه‌سازی مسیریابی یک گونه به سمت مقصد که ضمن مهاجرت تمایل به حرکت دسته‌ای هم دارند از مدل کازین استفاده می‌کنیم. ما برای بررسی نقش حرکت دسته‌ای در بهبود مسیریابی مدل کازین را تعمیم داده‌ایم و خطای تصادفی در هدف‌یابی به سمت مقصد را به آن اضافه کرده‌ایم. نتایج نشان می‌دهند که عملکرد دسته در مسیریابی به موازنه‌ی بین تمایل به حرکت دسته‌ای و جهت‌یابی انفرادی بستگی دارد و در یک وزن خاص بهینه می‌شود.

واژگان کلیدی: *مدل کازین، حرکت دسته‌ای، مسیریابی*

The Impact of Flocking of Migratory Species on Navigation Accuracy

Berenjkar Daryasari, Negeen [1]; Payandeh, Fatemeh[1]; D. Niry, M.[1]

[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences (IASBS), Zanjan

Abstract

Flocking plays a significant role in making a species' life safer from natural threats. Similarly, the migration of species also has an important impact on the survival of them and maintaining the health of the ecosystem. Therefore, studying species migration and the factors affecting it is important. In this study, we use the Couzin model to simulate the navigation of a species toward a destination that tends to flock while migrating. To investigate the role of flocking in improving navigation, we have extended the Couzin model and added random error in orientation to the goal. The results demonstrate that the performance of the group in navigation depends on the balance between the tendency to flock and individual navigation, which is optimized at a specific weight.

Keywords*: Couzin model, Flocking, Navigation*

مقدمه

همه ساله گونه‌های مختلفی از انواع جانداران، شامل پرندگان، پستانداران، ماهی‌ها، حشرات و ... با اهداف متفاوت مهاجرت

می‌کنند [۱]. مهاجرت این موجودات گاه می‌تواند در مسافت‌های بسیار طولانی رخ دهد و روزها به طول انجامد. مسئله‌ای که توجه پژوهشگران را به خود جلب کرده است، چگونگی موفقیت این جانداران در مسیریابی در طی سفرهای طولانی است [۲].

تاکنون راهنماهای متفاوتی برای مسیریابی و جهت‌یابی موجودات مانند جهت خورشید و قطبش نور (در طول روز)، موقعیت ستارگان (در طول شب) و شدت و جهت میدان مغناطیسی شناسایی شده‌اند [۳]. از بین این راهنماها تنها شدت و جهت میدان مغناطیسی زمین همواره در دسترس است و عواملی مانند ابری بودن هوا، شرایط بد جوی و ... بر روی آن تأثیرگذار نیستند.

سازوکارهایی مانند جفت‌رادیکال، نانو ذرات مغناطیسی و القای الکترومغناطیسی در بدن برخی جانداران منجر به دریافت[1] (حس) مغناطیسی می‌شوند. دریافت مغناطیسی برای تشخیص شدت یا جهت میدان مغناطیسی زمین به این موجودات کمک می‌کند. اما پژوهش‌های انجام‌شده در این زمینه بیانگر آنند که حس دریافت مغناطیسی نسبت به سایر حواس، مانند بینایی، خطای به مراتب بیشتری دارد [٤]. پس این سؤال مطرح می‌شود که چگونه موجودات در مهاجرت‌های طولانی، با وجود انواع عوامل پیرامونی که سبب خطا می‌شوند، باز تا این حد موفق عمل می‌کنند.

یکی از پاسخ‌های احتمالی این پرسش می‌تواند در دسته‌شدن این موجودات نهفته باشد [٥، ٦]. همانطور که در طبیعت مشاهده می‌شود، جانداران زیادی از انواع چارپایان، پرندگان، ماهی‌ها و ... به‌صورت گروهی مهاجرت می‌کنند.

مدل کازین

تاکنون مدل‌هایی نظیر مدل ویچک[2]، رینولدز[3] و کازین[4]، برای شبیه‌سازی حرکت دسته‌ای موجودات معرفی شده‌اند [٦–٨]. این مدل‌های عامل‌محور با تعریف قوانین ساده برای حرکت هر عامل، سعی در شبیه‌سازی حرکت دسته‌ای دارند. در مدل‌هایی مانند رینولدز و کازین این قوانین به شرح زیر اند [٨]:

۱. جدایی (پرهیز از نزدیکی خیلی زیاد به همسایه‌ها و دوری کردن از خطر برخورد)،
۲. هم‌جهت شدن (تمایل به همسویی و هم‌جهت شدن با همسایه‌های نزدیک)،
۳. همدوسی (تمایل به حرکت نزدیک با دیگر اعضای گروه، یا به عبارتی جدا نشدن از دسته).

مدل کازین یکی از مدل‌هایی است که علاوه بر حرکت دسته‌ای، عامل‌ها (که از این پس آن‌ها را اشیاء پرنده‌گونه یا بُوید می‌نامیم) تمایل به حرکت به سمت یک جهت مرجح دارند. در این مدل حول هر بُوید دو شعاع تعریف می‌کنیم. یکی شعاع جدایی که آن را با r_s نشان می‌دهیم و دیگری شعاعی بزرگ‌تر به نام شعاع بینایی (r_v). زمانی که همسایه‌ای در شعاع بینایی یک بُوید قرار می‌گیرد، قانون جدایی حکم می‌کند که بُوید در قدم بعدی از همسایه‌های نزدیک فاصله بگیرد [٦]،

$$\mathbf{d}_i(t+\Delta t) = -\sum_{j\neq i} \left.\frac{\mathbf{r}_j(t)-\mathbf{r}_i(t)}{\left|\mathbf{r}_j(t)-\mathbf{r}_i(t)\right|}\right|_{|\mathbf{r}_j(t)-\mathbf{r}_i(t)|<r_s} . \qquad (۱)$$

$\mathbf{r}_i$ بردار مکان بُوید iام است و $\hat{\mathbf{d}}_i$ بردار یکه مربوط به جهت سرعت بُوید iام است. در این مدل برای سادگی فرض می‌کنیم اندازه سرعت تمامی بُویدها در تمام طول مسیر یکسان (برابر v)

[1] Magnetoreception
[2] Vicsek
[3] Reynolds
[4] Couzin

است و تنها جهت حرکت در تعیین مکان جدید تأثیر دارد. در صورت نبود همسایه در شعاع جدایی، اگر همسایه‌ای در شعاع بینایی قرار گیرد جهت جدید بُوید در قدم بعدی براساس قوانین هم‌جهت‌شدن و همدوسی به صورت،

$$\mathbf{d}_i(t+\Delta t)=\sum_{j=1}\frac{\mathbf{v}_i(t)}{|\mathbf{v}_j(t)|}\Bigg|_{|\mathbf{r}(t)_j-\mathbf{r}(t)_i|<r_v} +\sum_{j\neq i}\frac{\mathbf{r}_j(t)-\mathbf{r}_i(t)}{|\mathbf{r}_j(t)-\mathbf{r}_i(t)|}\Bigg|_{|\mathbf{r}(t)_j-\mathbf{r}(t)_i|<r_v}, \qquad (۲)$$

محاسبه می‌شود. $\mathbf{v}_j$ بردار سرعت بُوید است. جمله‌ی اول سبب همسویی با همسایه‌ها و جمله‌ی دوم سبب حرکت به سمت دسته می‌شود. در این مرحله حرکت دسته‌ای با حرکت به سمت جهت مرجع $\hat{\mathbf{g}}_i$ ترکیب می‌شود،

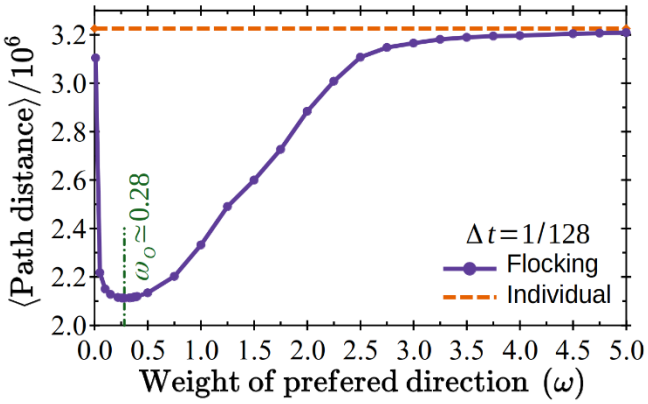
$$\mathbf{d}'_i(t+\Delta t)=\frac{\hat{\mathbf{d}}_i(t+\Delta t)-\omega\hat{\mathbf{g}}_i}{|\hat{\mathbf{d}}_i(t+\Delta t)-\omega\hat{\mathbf{g}}_i|}\ . \qquad (۳)$$

ضریب ω وزن توجه هر بُوید به جهت‌یابی انفرادی و حرکت به سمت هدف را نشان می‌دهد. زمانی که ω صفر باشد، بُویدها تنها حرکت دسته‌ای دارند و هنگامی که به بینهایت میل کند، آن‌ها فقط به جهت‌یابی به سمت هدف توجه می‌کنند [٦].

پس از محاسبه جهت جدید، بردار سرعت بُوید ($\mathbf{v}_i$) تا حداکثر زاویه‌ی $\theta_{\max}=\vartheta_0\Delta t$ می‌چرخد تا با آن همسو شود. در اینجا Δt طول قدم گسسته‌سازی و ϑ_0 سرعت عمل بُوید در گردش و تغییر جهت هستند. پس از تعیین جهت جدید برای تمامی بُویدها مکان آن‌ها به صورت زیر بروزرسانی می‌شود [٦]،

$$\mathbf{r}_i(t+\Delta t)=\mathbf{r}_i(t)+\mathbf{v}_i(t+\Delta t)\Delta t\ . \qquad (٤)$$

برای نزدیک‌تر کردن مدل بالا به شرایط واقعی می‌توان خطاهایی را به آن اضافه نمود. اولین خطایی که می‌تواند اضافه کردن یک



شکل ۱: نمودار متوسط طول مسیر پیموده شده توسط بُویدها تا مقصد برحسب ω. خط‌چین افقی مقدار این کمیت را زمانی که بُویدها به صورت انفرادی ($\omega=10^6$) حرکت می‌کنند را نشان می‌دهد. خط‌نقطه‌چین عمودی مقدار بیشینه‌ی این نمودار را در $\omega_o \simeq 0.28$ نمایش می‌دهد.

زاویه‌ی تصادفی به جهت نهایی حاصل از حرکت دسته‌ای و حرکت به سمت هدف است. در این پژوهش برای سادگی این خطا را در نظر نمی‌گیریم. خطای دیگری که می‌توان به مدل اضافه کرد، خطا در تشخیص جهت مرجع یا هدف است که معادل خطا در مسیریابی و تعیین جهت با استفاده از سازوکارهای مختلف مانند دریافت مغناطیسی است. این خطا را به صورت یک دوران به اندازه زاویه تصادفی φ_i، که از یک توزیع گاؤسی با انحراف معیار Δ و میانگین صفر به‌دست آمده، به $\hat{\mathbf{g}}_i$ اضافه می‌کنیم [٦]،

$$\hat{\mathbf{g}}'_i=R(\varphi_i)\hat{\mathbf{g}}_i\ . \qquad (٥)$$

تعمیم مدل کازین

در تعمیم مدل کازین به‌جای در نظر گرفتن یک جهت مرجح، هدفی را در فاصله‌ی بسیار دور (معادل $5\times10^6\,\mathrm{m}$) از بُویدها قرار می‌دهیم و سفر آن‌ها را تا این مقصد شبیه‌سازی می‌کنیم. به دلیل تغییر موقعیت بُویدها نسبت به این هدف، برخلاف مدل کازین دیگر جهت $\hat{\mathbf{g}}_i$ ثابت باقی نمی‌ماند و تابع مکان بُوید ($\mathbf{r}_g$) است،

$$\hat{\mathbf{g}}_i=\frac{\mathbf{r}_g(t)-\mathbf{r}_i(t)}{|\mathbf{r}_g(t)-\mathbf{r}_i(t)|}\ . \qquad (٦)$$

با تغییر طول قدم گسسته‌سازی تأثیر جمله‌ی تصادفی در دینامیک تغییر می‌کند، بنابراین به‌جای به‌روزرسانی بردار $\hat{\mathbf{g}}'_i$ در هر قدم شبیه‌سازی آن را بعد از هر Δt_{obs} به‌روزرسانی می‌کنیم. Δt_{obs} باید آنقدر بزرگ باشد که بُوید فرصت کافی برای همسویی با جهت مشاهده شده را داشته باشد،

$$\Delta t_{obs} > \frac{\Delta}{\vartheta_0} \quad . \qquad (۷)$$

در بخش بعد نتایج حاصل از شبیه‌سازی این مدل را برای تعداد $N = ۴۰$ بُوید، دریک صفحه‌ی دوبعدی و برای زمانی که مقصد در نقطه‌ی $\mathbf{r}_g = ۲\times۱۰^{۶} l_* \hat{\mathbf{j}}$ قرار دارد و بُویدها از نقطه‌ی $۱۰^{۳} l_* \hat{\mathbf{j}}$ شروع به حرکت می‌کنند، بررسی می‌کنیم. شبیه‌سازی‌ها در دستگاه واحدهای کاهیده انجام شده‌اند ($l_* = ۲٫۴۹\text{m}$). شعاع جدایی و بینایی به ترتیب برابر l_* و $۸۰ l_*$ هستند .همچنین اندازه‌ی سرعت بُویدها، طول قدم گسسته‌سازی و سرعت گردش آن‌ها را به ترتیب به صورت $۱ l_*/t_*$، $۱۲۸ t_*/t_*$ و $۰٫۴\text{rad}/t_*$ قرار می‌دهیم که در آن t_* معادل $۰٫۲\text{s}$ است. در نهایت مقدار $\Delta = ۱٫۱\text{rad}$ و $\Delta t_{obs} = ۱٫۱\text{s}$ است.

نتایج

یکی از کمیت‌هایی که برای بررسی تأثیر حرکت دسته‌ای در بهبود مسیریابی می‌تواند مورد مطالعه قرار گیرد، میانگین مسافتی است که بُویدها تا رسیدن به هدف می‌پیمایند که به صورت،

$$\langle n_i v \Delta t \rangle = \frac{۱}{N} \sum_{i=۱}^{N} n_i v \Delta t \ , \qquad (۸)$$

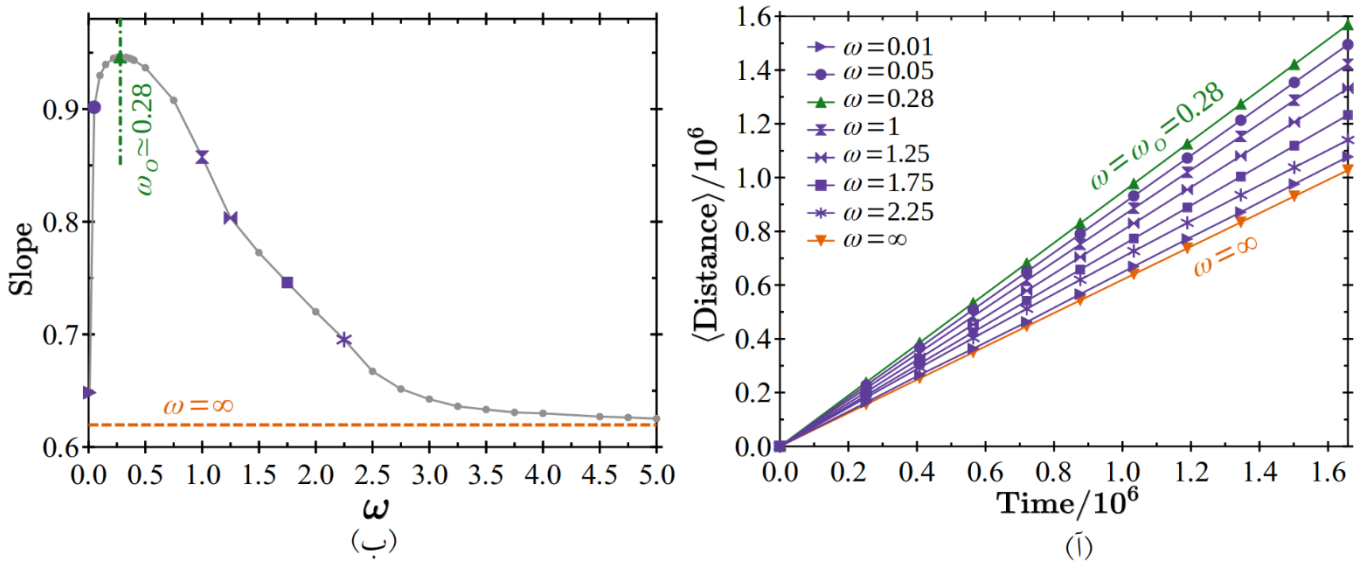
محاسبه می‌شود. n_i تعداد قدم‌های بُوید iام تا مقصد است. هرچه این کمیت کوچکتر باشد بُویدها مسافت کوتاه‌تری را تا مقصد طی می‌کنند و در نتیجه مسیریابی آن‌ها بهینه‌تر است.

شکل ۱ متوسط طول مسیر بُویدها را برحسب ω نمایش می‌دهد. هرچه ω بزرگ‌تر باشد، میزان توجه بُویدها به حرکت انفرادی بیشتر است و کمتر با دسته همراه اند. خط‌چین افقی در این نمودار حالتی را نشان می‌دهد که در آن ω مقداری بسیار بزرگ ($۱۰^{۶}$) دارد. این شرایط نزدیک به حالتی است که بُویدها به صورت کاملاً انفرادی حرکت می‌کنند. همان‌طور که از منحنی شکل ۱ مشخص است، مقدار کمیت میانگین مسافت طی شده تا مقصد توسط بُویدها، در مقدار بهینه‌ی $\omega_o \simeq ۰٫۲۸$ کمینه می‌شود. این موضوع نشان دهنده‌ی بهینه‌تر بودن مسیریابی با وجود حرکت دسته‌ای است.

کمیت دیگری که می‌تواند مورد مطالعه قرار گیرد فاصله‌ی مرکز جرم دسته از مبدأ حرکت برحسب زمان است. شکل ۲ (آ) نمودار این کمیت را به ازای ωهای متفاوت نشان می‌دهد. رفتار این نمودارها تقریباً به صورت خطی است و شیب آن‌ها سرعت حرکت مرکز جرم دسته را نمایش می‌دهد. در شکل ۲ (ب) شیب‌ها این نمودارها برحسب ω رسم شده اند. همان‌طور که مشاهده می‌کنید، باز هم در $\omega_o \simeq ۰٫۲۸$ این شیب بیشینه است. این موضوع نشان دهنده‌ی سرعت بیشتر حرکت مرکز جرم و درنتیجه بهینه‌تر بودن مسیریابی است. نمودارهای شکل ۱ و ۲ حاصل از میانگین‌گیری روی ۵ نمونه‌ی آماری هستند.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش حرکت گروهی از جانداران را که هم تمایل به حرکت به سمت مقصد مهاجرت و هم تمایل به ماندن با گروه و حرکت دسته‌ای دارند را با استفاده از مدل کازین تعمیم‌یافته شبیه‌سازی کردیم. نتایج حاصل نشان می‌دهند که زمانی که بُویدها خطای زیادی در تشخیص جهت هدف دارند ($\Delta = ۱٫۱\text{rad}$)، با به‌کارگیری حرکت دسته‌ای می‌توانند به صورت بسیار بهینه‌ای به مقصد برسند. $\omega_o \simeq ۰٫۲۸$ مقدار وزن توجه به مقصد را نشان



شکل ۲: (آ) نمودار فاصله مرکز جرم دسته از مبدأ حرکت برای چند نمونه ω. (ب) شیب منحنی‌های (آ) برحسب ωهای مختلف رسم شده است. خط‌چین عمودی مقدار بیشینه‌ی این شیب را در $\omega_o \simeq ۰/۲۸$ مشخص می‌کند. $\omega = \infty$ در هر دو قسمت شکل معادل $\omega = ۱۰^۶$ است.

می‌دهد که در آن مسیریابی به بهینه‌ترین حالت خود انجام می‌شود. کوچک بودن این مقدار حاکی از آن است که دسته تنها با اندکی توجه به هدف و اتکای بیشتر به حرکت دسته‌ای می‌تواند بسیار موفق عمل کند.

مرجع‌ها

[1] D. S. Wilcove and Martin Wikelski; "Going, going, gone: is animal migration disappearing"; *PLoS biology* **6**, No. 7 (2008) 188.
[2] H. Mouritsen; "Long-distance navigation and magnetoreception in migratory animals"; *Nature* **558**, No. 7708 (2018) 50-59.
[3] R. Wiltschko and W. Wolfgang; "Animal navigation: how animals use environmental factors to find their way"; *The European Physical Journal Special Topics* **232**, No. 2 (2023) 237-252.
[4] S. Johnsen, K. Lohmann, and E. Warrant; "Animal navigation: a noisy magnetic sense?" *Journal of Experimental Biology* **223** No. 18 (2020).
[5] J. Granger and S. Johnsen; "Collective movement as a solution to noisy navigation and its vulnerability to population loss"; *Proc. R. Soc. B* **289** No. 1987 (2022) 20221910.
[6] I. D. Couzin, J. Krause, N. R. Franks and S. A. Levin; "Effective leadership and decision-making in animal groups on the move"; *Nature* **433**, No. 7025 (2005) 513-516.
[7] T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen and O. Shochet; "Novel type of phase transition in a system of self-driven particles"; *Physical review letters* **75**, No. 6 (1995) 1226.
[8] C. W. Reynolds; "Flocks, herds and schools: A distributed behavioral model"; *Proceedings of the 14th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*; (1987) 25-34.

همگرایی سری چندقطبی برهم‌کنش کازیمیر بین کلوییدهای واقع در فصل مشترک سیال

موسوی، سید عماد؛ نوروزی فر، احسان

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

چکیده

برهم‌کنش کازی‌می‌ر بی‌ن نانوکلوی‌دهای‌ی که در فصل مشترک دو سی‌ال مقی‌د شده اند، ناشی از تغی‌ی‌راتی است که شرای‌ط مرزی کلوی‌ی‌دها در نوسانات گرمای‌ی سطح بی‌ن‌فازی ای‌جاد می‌کند. ای‌ن نی‌رو از نوع جاذب بوده و می‌تواند نقش مهمی در پدی‌ده‌ی انعقاد ذرات کلوی‌ی‌دی ای‌فا کند. شناخت دقی‌ق ای‌ن نی‌روها به بهبود طراحی و کنترل سی‌ستم‌های کلوی‌ی‌دی، به‌وی‌ژه در جلوگی‌ری از انعقاد ناخواسته و تشکی‌ل ساختارهای دوبعدی در فصل مشترک، کمک شای‌انی می‌کند. در ای‌ن مطالعه، نی‌روی کازی‌می‌ر بی‌ن کلوی‌ی‌دهای ژانوس کروی با استفاده از فرمالی‌سم پراکندگی محاسبه شده‌است. از آن‌جاکه ای‌ن روش بر پای‌ه بسط چندقطبی عمل می‌کند، نشان می‌دهی‌م که تا چه مرتبه‌ای از چندقطبی‌ها برای رسی‌دن به همگرای‌ی نی‌روی کازی‌می‌ر بی‌ن دو کلوی‌ی‌د در فواصل مختلف کافی است. همچنی‌ن از آنجا که ای‌ن نی‌رو در حضور بی‌ش از دو ذره غی‌رجمع پذی‌ر می‌باشد، و از قاعده برهم نهی نمی‌توان استفاده نمود، برای سه کلوی‌ی‌د ژانوس کروی در پی‌کربندی‌های خطی و مثلثی نشان خواهی‌م داد که چه تغی‌ی‌ری در همگرای‌ی نی‌رو بدی‌ن واسطه ای‌جاد می‌گردد.

واژگان کلیدی: *نیروی کازیمیر، افت و خیز گرمایی، فصل مشترک دو سیال، کلیوییدِ ژانوس، بسط چند قطبی*

Multipole Series Convergence of Casimir Interaction Between Colloids at Fluid Interfaces

Mousavi, Seyed Emad; Noruzifar, Ehsan

Faculty of Physics, K. N. Toosi University of Technology, Tehran

Abstract

The Casimir interaction between nano-colloids trapped at fluid interfaces arises from the modifications imposed by the colloids' boundary conditions on the thermal fluctuations of the interface. This interaction is attractive in nature and can play a significant role in the coagulation of colloidal particles. A precise understanding of such forces is essential for improving the design and control of colloidal systems, particularly in preventing undesired coagulation and enabling the formation of stable two-dimensional structures at fluid interfaces. In this study, we compute the Casimir force between spherical Janus colloids using the scattering formalism. Since this method relies on a multipole expansion, we determine the order of multipoles required to achieve convergence of the Casimir force between two colloids at various separations. Moreover, given the non-additive nature of these interactions in the presence of more than two particles, we analyze how the convergence behavior is affected in three-body configurations by comparing linear and triangular arrangements of spherical Janus colloids.

Keywords*: Casimir force, Thermal fluctuations, Two fluids interface, Janus Colloids, Multipole expansion*

مقدمه

برهم‌کنش‌های ناشی از افت‌وخیزهای گرمایی در سیستم‌های ماده نرم، نقش مهمی در تشکیل ساختارهای دوبعدی ایفا می‌کنند. یکی از نمونه‌های برجسته‌ی این نیروها، نیروی کازیمیر در فصل مشترک دو سیال است که به دلیل محدود شدن نوسانات گرمایی سطح ایجاد می‌شود [۱–۴]. برای ذرات کلوئیدی به دام افتاده در فصل مشترک، این نیرو می‌تواند منجر به چیدمان‌های متنوعی شود که کنترل آن‌ها از نظر فناوری و علوم بنیادی اهمیت بالایی دارد [۵].

استفاده از فرمالیسم پراکندگی برای محاسبه‌ی این نیروها توسعه یافته است، که امکان در نظر گرفتن همزمان افت‌وخیزهای فصل مشترک و ذرات را فراهم می‌کند [۶–۷]. این رویکرد به‌ویژه برای سیستم‌های دارای بیش از دو ذره و هندسه‌های پیچیده کارآمد است. در این کار، با استفاده از این فرمالیسم، به مطالعه‌ی همگرایی نیروی کازیمیر بین کلوئیدهای ژانوس کروی محصور در فصل مشترک سیالات پرداخته می‌شود.

پیکربندی و فیزیک سیستم

سیستم مورد مطالعه، فصل مشترک دو فاز غیر یکسان سیال – مانند آب و هوا – با اختلاف چگالی مشخص، $\Delta\rho = \rho_2 - \rho_1$ و کشش سطحی آن σ می‌باشد. این فصل مشترک که بی نهایت گسترده در نظر گرفته شده است تحت تاثیر افت و خیزهای گرمایی از حالت تخت تعادلی خود که در صفحه $z = 0$ قرار دارد، انحراف می‌یابد که این انحراف با $z = u(x, y)$ نمایش داده می‌شود. در تقریب گرادیان کوچک ($|\nabla u| \ll 1$) انرژی آزاد فصل مشترک با استفاده از هامیلتونی امواج مویینگی تقریب زده می‌شود،

$$\mathcal{H}_{\text{int}}[u] \approx \frac{\sigma}{2}\int_{\mathbb{R}^2} \mathrm{d}^2x \left[(\nabla u)^2 + \frac{u^2}{\lambda_c^2}\right] \qquad (۱)$$

که در آن $\lambda_c = \sqrt{\sigma/(\Delta\rho g)}$ طول مویینگی می‌باشد.

در این سیستم، تعدادی تعدادی کلوییید ژانوس کروی روی فصل مشترک دو سیال به دام افتاده‌اند. کلوییدهای ژانوس ذراتی مهندسی شده هستند که نیمی از آنها آبگریز و نیمی آبدوست می‌باشد. این ویژگی باعث می‌شود که این ذرات کلوییدی به صورت پایدار ب در فصل مشترک دو سیال قرار گرفته و خط تماس بین فازی روی این کلوییدها ثابت شده و اصطلاحاً پین شود.

از آنجا که تحرکات کلوییدی باعث تغییر شکل تصویر خط تماس روی صفحه $z = 0$ می‌شود، انرژی کل سیستم نیز ثابت نمی‌ماند. هامیلتونی مربوط به حرکات کلوییید i ام روی فصل مشترک دو سیال $\mathcal{H}^i_{\text{col}}[u, f_i]$، که تابعی از خط تماس کلوییید f_i نیز هست، در تقریب گرادیان کوچک، شامل سه بخش است: انرژی افت‌وخیز فصل مشترک در ناحیه‌ی احاطه‌شده توسط کلوئید، انرژی گرانشی ناشی از تغییر ارتفاع مرکز جرم، و انرژی‌های سطحی بین کلوئید و دو سیال. فرمول صریح این انرژی به دلیل طولانی بودن در اینجا آورده نمی‌شود.

با توجه به اینکه خط تماس روی کلوییدها پین شده است، سه سناریوی حرکتی برای کلوییدها در نظر می‌گیریم:

- **کلوییید ثابت**: کلوییید در فصل مشترک ثابت می ماند و تصویر خط تماس روی صفحه $z = 0$ تغییری نمی‌کند.
- **حرکت عمودی**: کلوییدها فقط یک درجه آزادی در جهت عمود بر فصل مشترک سیال دارند و می‌توانند به بالا و پایین حرکت کنند.
- **حرکت مایل**: کلوییید همراه با حرکت عمودی به گونه‌ای حرکت کند که محور گذرا از مرکز کلوییید و عمود بر فصل مشترک تعادلی دو سیال ($z = 0$) که از مرکز کلوییید نیز می گذرد از حالت تعادل انحراف پیدا کند.

در سناریوهای حرکت عمودی و مایل تصویر خط تماس روی صفحه $z = 0$ ثابت نمانده و از حالت تعادلی کوچکتر می‌شود.

در نهایت، هامیلتونی کل سیستم از مجموع هامیلتونی فصل مشترک سیال و N کلویید به صورت زیر به دست می‌آید،

$$\mathcal{H}_{\rm tot}[u, f_1, \ldots, f_N] = \mathcal{H}_{\rm int}[u] + \sum_{i=1}^{N} \mathcal{H}^i_{\rm col}[u, f_i] \qquad (۴)$$

با توجه به این که سیستم در شرایط آنسامبل کانونی قرار دارد، می‌توانیم تابع پارش سیستم ناشی از افت و خیزهای گرمایی فصل مشترک را به صورت زیر به دست آوریم:

$$\mathcal{Z} = \int_C \mathrm{D}u \prod_{i=1}^{N} \mathcal{D}f_i \, exp\left[-\frac{\mathcal{H}_{tot}[u, f_i]}{k_B T}\right] \qquad (۵)$$

که در آن انتگرالهای مسیر $\mathcal{D}u$ و $\mathcal{D}f_i$ به معنی جمع روی تمامی پیکربندی‌های مجاز فصل مشترک و خط تماس روی کلویید می‌باشد.

روش محاسبه

با استفاده تابع پارش معرفی شده در رابطه (۵) که در بخش قبلی به دست آمد می‌توان انرژی آزاد ناشی از افت و خیزهای گرمایی فصل مشترک دو سیال را محاسبه کرد. انرژی برهم‌کنش کازیمیر بین کلوییدهای به دام افتاده در فصل مشترک دو سیال در فرمالیسم پراکندگی [۱] با استفاده از رابطه زیر به دست می‌آید،

$$\mathcal{F} = \frac{k_B T}{2} \ln \det(\mathbf{1} - \widetilde{\mathbf{T}}\mathbf{U}) \qquad (۶)$$

که در آن $k_{\rm B}$ ثابت بولتزمان، T دمای محیط، $\widetilde{\mathbf{T}}$ ماتریس پراکندگی، و $\mathbf{U}$ ماتریس انتقال می‌باشد.

ماتریس پراکندگی یک ماتریس بلوکی است که ماتریس پراکندگی مربوط به هر کلویید، $\widetilde{\mathbb{T}}^i$، روی قطر آن می‌باشد، یعنی

$$\widetilde{\mathbf{T}}_{ij} = \widetilde{\mathbb{T}}^i \delta_{ij} \,, \qquad (۷)$$

این رابطه بیانگر این نکته است که ماتریس پراکندگی یک تک کلویید کروی در مختصات قطبی یک ماتریس قطری است و عناصر آن معادل ترمهای بسط چندقطبی می‌باشند. عناصر ماتریس پراکندگی هر کلویید برحسب حرکات و درجات آزادی کلویید دستخوش تغییراتی می‌شوند [۱]: در سناریوی حرکتی مایل عناصر $m = 0, \pm 1$ در ماتریس پراکندگی برابر با صفر خواهند بود، در سناریوی حرکتی عمودی تنها عنصر $m = 0$ برابر با صفر خواهد بود، و نهایتاً در سناریوی کلویید ثابت تمامی عناصر ماتریس پراکندگی غیر صفر هستند.

ماتریس انتقال نیز یک ماتریس بلوکی می باشد که بلوکهای روی قطر آن ماتریس صفر و بلوک‌های خارج قطر، انتقال از کلویید i به کلویید j می‌باشند؛ به بیان دیگر،

$$\mathbf{U}_{ij} = \mathbb{U}^{ij}(1 - \delta_{ij}) \qquad (۸)$$

بلوکهای روی قطر ماتریس انتقال سیستم ماتریس صفر می باشد.

محاسبه برای دو و سه کلویید

برای دو کلویید ژانوس کروی همسان، انرژی کازیمیر با استفاده از روابط (٦) تا (۸) به صورت زیر بیان می‌شود،

$$\mathcal{F}_{12} = \frac{k_B T}{2} \ln \det\left(\mathbf{1} - \mathbb{T}^1 \mathbb{U}^{12} \mathbb{T}^2 \mathbb{U}^{21}\right) \qquad (۹)$$

برای سه ذره پس از محاسبه دترمینان رابطه (۶)، انرژی کازیمیر بین سه ذره را می‌توان به صورت زیر بازنویسی نمود،

$$\mathcal{F}_{\rm tot} = \sum_{i<j=1}^{3} \mathcal{F}_{ij} + \mathcal{F}_{123} \qquad (۱۰)$$

که درآن $\mathcal{F}_{123}$ برهم‌کنش سه جسمی است و نشان دهنده غیرجمع‌پذیری انرژی کازیمیر بین سه ذره می‌باشد.

بررسی همگرایی انرژی

برای محاسبه انرژی آزاد، ابتدا ابعاد ماتریس‌های پراکندگی کلویید و انتقال را با حداقل مرتبه ممکن چند قطبی می‌سازیم. به

عنوان مثال حداقل مرتبه ممکن در سناریوی کلویید ثابت، $m = 0$ است و یا در سناریوی حرکت مایل حداقل مرتبه ممکن $m = \pm 2$ می‌باشد. سپس با استفاده از ماتریس‌های به دست آمده، انرژی کازیمیر را با استفاده از روابط بخش قبلی محاسبه می‌کنیم. در مرحله بعدی تعداد چند قطبی‌ها را افزایش داده و مجدداً انرژی کازیمیر را محاسبه می‌کنیم. اگر انرژی به دست آمده در این دو مرحله کمتر از یک تولرانس مشخص (مثلاً در کار حاضر مقدار 10^{-7} در نظر گرفته شده است) باشد، همگرایی حاصل شده است. در غیر اینصورت افزایش مرتبه ادامه پیدا کرده تا همگرایی حاصل شود.

در کار حاضر همگرایی انرژی برای سه پیکربندی، مورد مطالعه قرار گرفته است: دو کلویید همسان کروی به فاصله d، سه کلویید همسان کروی در پیکربندی خطی، یعنی $d_{12} = d_{23} = d, d_{13} = 2d$ و سه کلویید کروی همسان در پیکربندی مثلثی روی رئوس مثلث متساوی الاضلاع، یعنی تمامی فواصل بین کلوییدی برابر با d است.

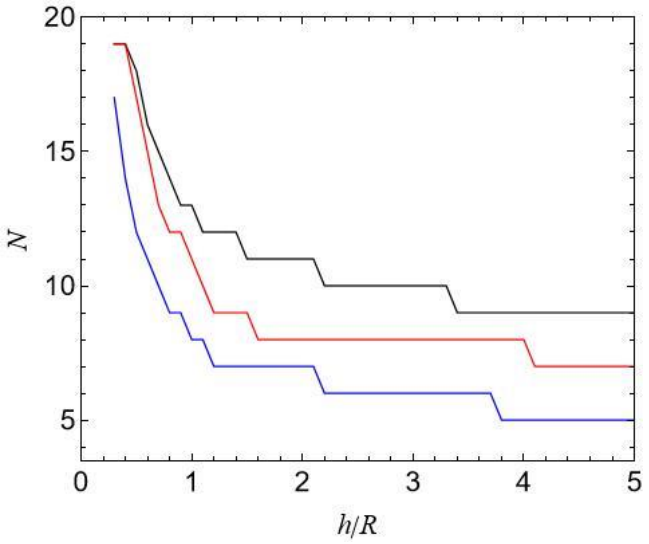
شکل ۱ تعداد چندقطبی‌های مورد نیاز، N، برای همگرا شدن انرژی بین دو کلویید کروی برای فواصل بین کلوییدی مختلف،

$$h = d - 2R$$

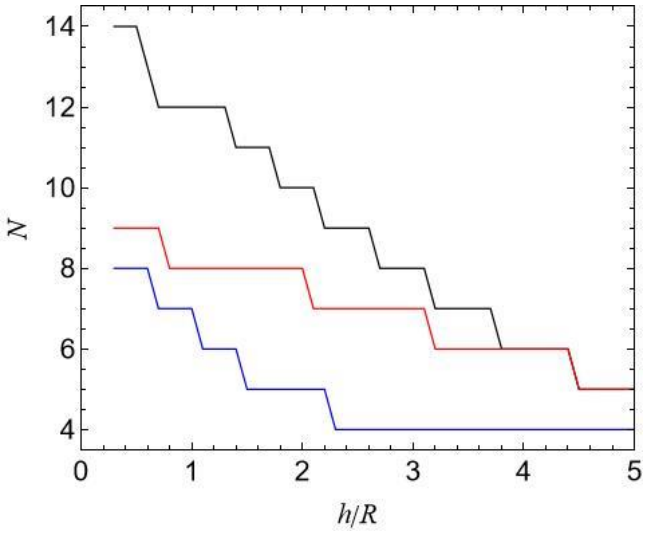
ترسیم شده است. منحنی‌های آبی، قرمز و سیاه به ترتیب نشانگر سناریوهای کلویید ثابت، حرکت عمودی و مایل هستند. همانطور که مشاهده می‌شود برای سناریوی کلویید ثابت همگرا شدن انرژی با N کمتری به نسبت دو سناریوی دیگر اتفاق می‌افتد. این به دلیل رفتار لگاریتمی جمله تک قطبی می‌باشد که اثر غالب را در انرژی کازیمیر دارد. در سایر سناریوهای حرکتی به دلیل جمله تک قطبی حذف می‌شود، همگرایی با جمله‌های بیشتری اتفاق می‌افتد. همگرایی سناریوی حرکت عمودی به نسبت سناریوی حرکت مایل با تعداد چندقطبی‌های کمتری اتفاق می‌افتد، به دلیل اینکه ترم‌های پیشروی بیشتری برای سناریوی حرکت عمودی وجود دارد.

شکل ۲ همگرا شدن انرژی سه جسمی $\mathcal{F}_{123}$ را نمایش می‌دهد. در برهم‌کنش سه جسمی برای پیکربندی خطی نیز مثل برهم کنش دو کلویید، همگرایی برای سناریوی کلویید ثابت با تعداد کمتری از چند قطبی‌ها اتفاق می‌افتد. همانند شکل ۱، همگرایی انرژی در سناریوی حرکت عمودی با N کمتری به نسبت سناریوی حرکت مایل اتفاق می افتد. محاسبات انجام شده برای انرژی سه جسمی پیکربندی مثلثی نشان می‌دهد که همگرایی تفاوت چندانی با پیکربندی خطی نمی‌کند و نتایج نمایش داده شده در شکل ۲ برای پیکربندی مثلثی نیز برقرارند.

نکته دیگری که در همگرایی انرژی کازیمیر سه جسمی می‌توان مشاهده کرد این است که درمقایسه با حالت دو کلوییدی N کمتری برای همگرا شدن جواب نیاز است.



شکل ۱: تعداد چندقطبی‌های مورد نیاز برای همگرا شدن انرژی آزاد کازیمیر بین دو ذره کلوییدی کروی همسان برحسب فاصله سطح به سطح. خطوط آبی، قرمز و مشکی به ترتیب مربوط به سناریوهای کلویید ثابت، حرکت عمودی و حرکت مایل می‌باشند.



شکل۲ : تعداد چند قطبی‌های مورد نیاز برای همگرایی انرژی کازیمیر سه جسمی بر حسب فاصله سطح به سطح. خطوط آبی، قرمز و مشکی به ترتیب مربوط به سناریوهای کلویید ثابت، حرکت عمودی و حرکت مایل می‌باشند.

نتیجه گیری

در این مطالعه نیروی کازیمیر بین کلوئیدهای ژانوس کروی به دام افتاده در فصل مشترک دو سیال با استفاده از فرمالیسم پراکندگی محاسبه شد. با بررسی همگرایی سری چندقطبی، نشان داده شد که مرتبه‌ی لازم برای همگرایی انرژی به شدت به نوع حرکت کلوئیدها وابسته است. در حالتی که کلوئیدها روی فصل مشترک ثابت باشند (سناریوی الف)، همگرایی سریع‌تر و با تعداد کمتری از چندقطبی‌ها حاصل می‌شود. در سناریوهای حرکتی دیگر، با حذف جمله‌ی تک‌قطبی، تعداد بیشتری از چندقطبی‌ها برای همگرایی لازم است.

بررسی برهم‌کنش سه ذره‌ای نشان داد که علاوه بر حفظ روند کلی همگرایی، تعداد چندقطبی‌های مورد نیاز نسبت به حالت دو ذره‌ای کاهش می‌یابد. همچنین تغییر پیکربندی از خطی به مثلثی تغییر محسوسی در رفتار همگرایی ایجاد نمی‌کند.

مرجع‌ها

[1] E. Noruzifar, J. Wagner, and R. Zandi, *Physical Review E* **87** (2013) 042314.
[2] E. Noruzifar, J. Wagner, and R. Zandi, *Physical Review E* **87** (2013) 020301(R).
[3] E. Noruzifar, and M. Oettel, *Physical Review E* **87** (2009) 051401.
[4] H. Lehle, E. Noruzifar, and M. Oettel, EPJE **26** (2008) 151-160.
[5] Deng, J., Molaei, M., Chisholm, N. G., Yao, T., Read, A., and Stebe, K. J. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, **61** (2022), 101629.
[6] SJ Rahi, T. Emig, N. Graham, RL. Jaffe, and M. Kardar, *Physical Review D* 80 (2009) 085021.
[7] G. Bimonte, T. Emig, *Physical Review A* **108** (2023) 052807.

مطالعه‌ی امواج مغز با رویکرد مدل‌های انتشار بیماری در شبکه‌های مهاری

محمد حسینی انیسی[۱]؛ علیرضا ولیزاده[۲] مژگان خانجانیان پاک[۳]

[۱،۲،۳]دانشگاه تحصیلات تکمیلی زنجان، زنجان

چکیده

فعالیت مجموعه‌ای از نورون‌ها به عنوان اصلی‌ترین یاخته‌های ساختار مغز، باعث به وجود آمدن امواج مغزی می‌شوند. این امواج نقش موثری در فرآیندهای شناختی دارند. بدین سبب مطالعه‌ی آن‌ها اهمیت دارد. یکی از روش‌های مدل‌سازی این نوسانات، به کارگیری مدل‌های انتشار بیماری است. در این پروژه از مدلی برای توصیف شبکه‌ی عصبی مغز استفاده می‌کنیم که در آن دینامیک نورون‌ها و سیناپس‌ها به صورت دو جانبه بر یکدیگر اثر می‌گذارند، به طوری که نورون‌ها از یک مدل آستانه‌ای تبعیت می‌کنند و دینامیک سیناپس‌ها با مدل سالم-بیمار-سالم توصیف می‌شود. در این رویکرد زمان‌گسسته، نورون‌ها در اثر یک نوفه تصادفی فعال می‌شوند. با تمرکز بر شبکه‌هایی که در آن‌ها همه‌ی نورون‌ها صرفاً از نوع مهاری هستند، نوسانات عصبی را در محدوده گاما بازسازی می‌کنیم و تاثیر پارامترهای مختلفی چون تاخیر زمانی، آستانه تحریک را بر شبکه بررسی و اثر این عوامل بر رفتار جمعی نورون‌ها را مشاهده می‌کنیم. به طوری که افزایش تاخیر زمانی باعث افزایش هم‌گامی فعالیت شبکه، دامنه نوسانات و کاهش بسامد می‌شود. همچنین، اثر پراکندگی آستانه فعالیت نورون‌ها و تأثیر آن بر دامنه و فرکانس نوسانات، همگامی شبکه و نرخ فعالیت نورون‌ها را مطالعه می‌کنیم. نشان می‌دهیم که با افزایش مقدار تاخیر زمانی، نوسانات گاما پدیدار می‌شوند. که مشاهدات ما مطابق یافته‌ها از دینامیک شبکه مهاری با نتایج و تحقیقات سازگار می‌باشد.

واژه‌های کلیدی: نوسانات گاما، تاخیر زمانی، آستانه فعالیت نورون، مدل‌های انتشار بیماری

The study of brain oscillations with the approach of disease spreading models in inhibitory networks

Mohammad Hoseini Anisi [1]; Alireza valizadeh[2]

Mozhgan Khanjanianpak[3]

[1,2,3]Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan

Abstract

The excellence of a collection of neurons as the primary structural cells of the brain leads to the generation of brain waves. These waves play a significant role in cognitive processes, making the study of them crucial. One of the modeling methods for these oscillations involves employing disease propagation models. In this project, we utilize a model to describe the brain's neural network, where the dynamics of neurons and synapses interact bidirectionally, such that neurons adhere to a threshold model, and synaptic dynamics are described using a susceptible-infected-susceptible (SIS) model. In this discrete-time approach, neurons become active due to an active noise. Focusing on networks where all neurons are solely inhibitory, we reconstruct neural oscillations in the gamma range and

investigate the effects of various parameters such as time delay, stimulation threshold on the network, and observe their impact on the collective behavior of neurons. Increasing the time delay leads to increased synchrony of network activity, reduced oscillation amplitude, and frequency. Additionally, we study the effect of threshold scatter on neuronal activity and its impact on oscillation amplitude, frequency, network synchrony, and neuronal firing rate. We demonstrate that increasing the time delay results in the emergence of gamma oscillations, which align with findings from inhibitory network dynamics and are consistent with existing research results.

Keywords:*Gamma oscillations, time delay, neuronal activation threshold, disease propagation models.*

مقدمه

فعالیت زندگی روزانه هر شخصی می‌تواند پر از اتفاقاتی چون خوشحالی، خشم، فعالیت ورزشی، خواندن کتاب ، در حال استراحت کردن و یا هر چیزی که هم اکنون به آن فکر می‌کنید باشد. همه‌ی این اتفاقات حاصل فعالیت مجموعه‌ای از نورون‌ها در مغز ما هستند و می‌توان به صورت امواج الکتریکی ضبط شوند. هر یک از این امواج حالت خاصی از فعالیت مغزی را توصیف می‌کند. یکی از مهم ترین این امواج، گاما نام دارد که بیشترین تنوع حالت‌ها را نشان می‌دهد. نزدیک به نیم قرن است که این حالت‌های مغز را شبیه‌سازی می‌کنند که هر کدام به نوعی عملکرد عصبی را توصیف می‌کنند. مطابق یافته‌ها، شبکه‌ی کاملا مهاری نیز می‌تواند هم‌بستگی دامنه و بسامد و هم‌بستگی دامنه‌های متوالی را ایجاد کند. همچنین نقش تاخیر زمانی برایجاد همگامی وایجاد ریتم گاما نقش موثری دارد.

نورون‌ها، همبستگی فعالیت شبکه به طبع دامنه و فعالیت شبکه کاهش می‌یابد. همچنین، تغییرات بخصوصی در میانگین نرخ فعالیت شبکه ندارد و فرکانس شبکه ثابت باقی می‌ماند.

در پایان، برای افزایش اعتبار نتایج به دست آمده، تأثیر اندازه شبکه در مدل نورونی نیز مورد بررسی قرار گرفت و برای اندازه شبکه‌های بزرگ‌تر تکرار شد. نتیجه نشان داد که تأثیر همان نتایج بدست آمده مستقل از مدل نورونی و اندازه شبکه است.

معرفی مدل

در این پژوهش، با استفاده از مدل مرجع [1] نوسانات عصبی را بازسازی می‌کنیم.

تجمع‌ای از نورون‌های مهاری زمانی که با یک تکانه‌ی قوی جریان مواجه می‌شوند، شروع به فعالیت نورونی و موجب ایجاد همگامی شبکه می‌شوند. مدلی که راینرل و ونگ ارائه کردند نشان داد که یک شبکه‌ی مهاری به تنهایی می‌تواند، جمعیت نورون‌ها را همگام کرده و نوسانات عصبی را در محدوده‌ی نوسانات گاما تولید کنند. در این پژوهش، از یک شبکه‌ی صرفاً مهاری استفاده شده است تا بتوانیم این نوسانات را تولید، بررسی و مطالعه کنیم. این شبکه شامل N نورون مهاری است که با احتمال P به صورت تصادفی به یکدیگر متصل هستند. سیناپس‌های خروجی از نورون‌ها را با یال‌ها همچنین نورون‌ها را با گره نشان می‌دهیم و همچنین برهم‌کنش هر جفت نورون با یکدیگر برابر در نظر می‌گیریم. این شبکه، یک شبکه‌ی تصادفی و جهت‌دار است.

برای شبکه ای حاوی N نورون، می‌توان عناصر ماتریس مجاورت را به شکل زیر نمایش داد[3].

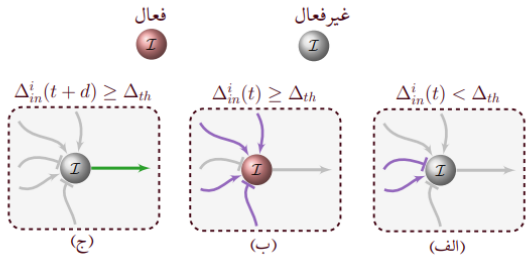
$$A_{ij} = \begin{cases} ۱ & \text{اگر نورون } j \text{ به } i \text{ متصل باشند} \\ ۰ & \text{در غیر این صورت} \end{cases}$$

ه در اینجا (i) و (j) شاخص نشان دهنده نورون‌ها هستند. این ماتریس مجاورت نمایانگر اتصالات بین نورون‌ها در شبکه است. متوسط درجه‌ی ورودی و خروجی یال‌ها به ترتیب برابر است با:

$$\langle k_{\text{in}} \rangle = \sum_{j=۱}^{N} A_{ij}$$
$$\langle k_{\text{out}} \rangle = \sum_{j=۱}^{N} A_{ji}.$$

نحوه عملکرد دینامیک نورون‌ها

همان‌طور که می‌دانیم، پتانسیل عمل زمانی ایجاد می‌شود که نورون‌ها به تغییرات جریان ورودی، اگر از حد آستانه Δ_{th} عبور کنند، نورون‌ها به سرعت به این تغییرات جریان پاسخ داده و شروع به شلیک می‌کنند و در غیر این صورت در حالت استراحت باقی می‌ماند. برای مدل‌سازی دینامیک نورون‌ها در شبکه به هر نورون (i) از نوع مهاری را در هر زمان (t)، وضعیت فعالیت آن (π_t^I) اختصاص می‌دهیم. به این صورت که هنگام فعال شدن نورون وضعیت فعالیت $(\pi_t^I = 1)$ است و در غیر این صورت $(\pi_t^I = 0)$ است. از آنجایی که نورون‌ها تماماً مهاری هستند، برای فعالیت در هر گام زمانی، اگر مجموع جریان ورودی‌های داخلی و ورودی جریان خارجی به مقدار آستانه برسد، فعال می‌گردد. در غیر این صورت، در وضعیت استراحت باقی می‌ماند.



شکل ۱: در این تصویر دینامیک نورون‌های مهاری نشان داده شده است برگرفته از مرجع [1]. دایره‌های قرمز نشان‌دهنده‌ی نورون فعال مهاری می‌باشد. (الف) اگر مجموع جریان ورودی و خارجی به حد آستانه نرسد، نورون خاموش می‌ماند (ب) از حد آستانه عبور کند، نورون فعال می‌شود. (ج) پس ازآن، همه‌ی سیناپس‌های خروجی از آن با تأخیز زمانی d فعال می‌شوند.

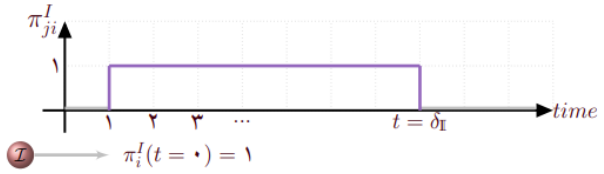
نحوه عملکرد دینامیک سیناپس‌ها

در سیستم عصبی، کانال‌های یونی پیش‌سیناپسی با یک ثابت زمانی فعال می‌مانند که این زمان می‌تواند از چند میلی‌ثانیه تا صد میلی‌ثانیه متغیر باشد. برای درج این ویژگی در مدل، یک حالت به لینک‌ها در شبکه اختصاص می‌دهیم که وابسته به حالت نورون پیش‌سیناپسی است. به طور خاص، هنگامی که یک نورون آتش‌زنی می‌کند، تمام لینک‌های خروجی آن فعال شده و برای یک ثابت زمانی (Δ_{th}) فعال می‌مانند. در ابتدا فرض می‌کنیم که زمان تأخیر تمام لینک‌ها یکسان است و (d = 1)\ را در نظر می‌گیریم. ثابت زمان فعالیت سیناپسی (Δ_{th}) وابسته به نوع سیناپس است و از آنجایی که سیناپس‌های شبکه مهاری است یک مقدار ثابتی است و در این مطالعه به عنوان یک متغیر ثابت در نظر گرفته می‌شود.

ما وضعیت فعالیت لینک‌ها را که نود (i) را به (j) متصل می‌کنند با نماد π_{ij} نشان می‌دهیم. هر لینک فعال از نوع (I)، یک جریان منفی

به نورون پس‌سیناپسی می‌فرستد. شدت جریان به یک واحد تنظیم شده است. از آنجایی که نورون‌های مهاری به یک تکانه‌ی خارجی (جریان ورودی خارجی) برای فعالیت نیاز دارند، پس از جمع‌آوری کل جریان ورودی نورون (i) در زمان (t)، مجموع جریان‌های ورودی خارجی و مهاری برابر با $\Delta_{in}^{i}(t)$ می‌شود. اگر مجموع جریان‌ها از مقدار آستانه عبور کند، نورون فعال می‌شود و در غیر این صورت، غیرفعال می‌مانند بنابراین:

- اگر $\Delta_{in}^{i}(t) < \Delta_{th}$ باشد، آنگاه $\pi_i^n(t) = 0$ (نورون i فعال نمی‌شود).
- اگر $\Delta_{in}^{i}(t) > \Delta_{th}$ باشد، آنگاه $\pi_i^n(t) = 1$ (نورون i فعال می‌شود) و $\pi_{ji}^n(t+1) = A_{j,i}$ می‌باشند.



شکل ۲: [نمایشی از دینامیک سیناپس‌ها] تصویری از دینامیک سیناپس‌ها برگرفته از مرجع[1]. در صورت فعال شدن نورون پیش‌سیناپسی i، یال‌های خروجی آن می‌توانند در t=d فعال شوند و سپس به رأس‌های پس‌سیناپسی جریان ارسال می‌کنند. یک رأس مهاری به مدت δ_I فعالیت می‌کند و حالت سیناپس‌های خروجی به صورت تابع π_t^I نمایش داده شده است .

هر نورون یک گره در شبکه است که با پیوندهای جهت‌دار به سایر نورون‌ها متصل می‌شود و هر یک از نورون‌ها یک آستانه‌ی فعال‌سازی به عنوان Δ_{th} دارد که اگر مجموع جریانات بیشتر از آن شود، نورون فعال می‌شود. در این صورت پیوندهای خروجی آن فعال شده و برای مدت زمان ثابت δ_I فعالیت می‌کند. بنابراین، نورون پس‌سیناپسی جریانی را در طول زمان δ_I پس از انجام یک فعالیت از نورون پیش‌سیناپسی دریافت می‌کند. شکل (۱) و (۲)به ترتیب دینامیک نورون‌ها و سیناپس‌ها آن‌ها را نشان می‌دهند[1].

دینامیک متقابل نورون و سیناپس

با توجه به توصیف دینامیک نورون‌ها، آن‌ها از یک شرط آستانه پیروی می‌کنند. همچنین اتصالات سیناپسی نیز توسط مدل SIS مدل شده‌اند. دینامیک سیناپس‌ها، یک یال زمانی فعال می‌شود که نورون پیش سیناپسی آن آتش‌زنی بکند. به این صورت دینامیک نورون‌ها و سیناپس‌ها به یکدیگر تأثیر می‌گذارند. به عبارت دیگر، فعالیت یک نورون می‌تواند تغییراتی در وضعیت نورون‌های متصل به آن ایجاد کند و وضعیت یک یال نیز می‌تواند تأثیری در فعالیت رأس‌های متصل به آن داشته باشد (فعال شوند یا غیرفعال باقی بمانند). این تعاملات میان نورون‌ها و سیناپس‌ها، جزئی از پویایی مدل است که در مطالعه شبکه‌های عصبی مورد استفاده قرار گرفته است.

نتایج

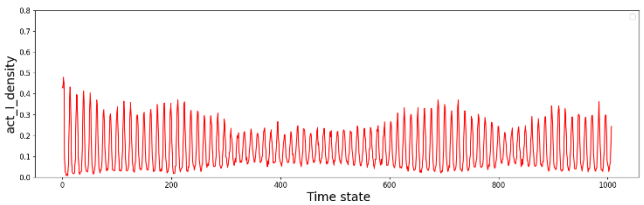
تحول زمانی چگالی نورون و سیناپس

در این پژوهش با شبیه‌سازی نوسانات مغز در محدوده ریتم گاما یک شبکه مهاری با تعداد نورون‌های

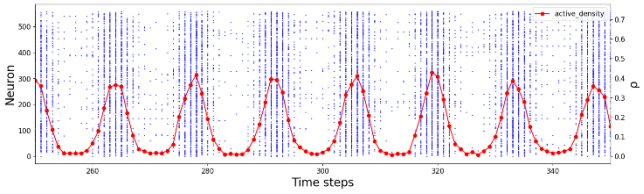
N = 560 , 1500 با ساختار شبکه تصادفیER با دینامیک آستانه‌ای نورون‌ها و دینامیک مدل انتشار بیماری SIS برای سیناپس‌ها استفاده می‌کنیم که این دو دینامیک برهم دیگر اثر متقابل دارند.

برای توصیف رفتار تناوبی چگالی نورون‌های مهاری ابتدا احتمال اتصال نورون‌ها را برابر (P = 0.01) در نظر می‌گیریم. متوسط درجه ورودی نورون‌های تقریبا برابر $\langle k \rangle \approx N \cdot P$

بنابراین برای تعداد نورون‌های ۵۶۰، $\langle k_{in} \rangle = 5.6$ می‌باشد و همچنین متوسط درجه خروجی نورون‌ها نیز $\langle k_{out} \rangle = 5.6$ است.



(الف)



(ب)

شکل ۳: [چگالی نورون‌های فعال]{ فعالیت شبکه. چگالی نورون‌های فعال در هرگام زمانی نمایش داده شده‌است نمودار (الف) فعالیت شبکه در کل بازه می‌باشد و نمودار (ب) در پنجره زمانی (۲۵۰-۳۵۰) نمایش داده شده‌است. مشخصات این نمودار برابر $\delta_I = 7$, N=560 , d=4 , p=0.01 . می‌باشد , ونمایه تصویری از فعالیت نورون‌ها در طول زمان، در این تصویر که با افزایش تاخیر زمانی d هم‌گامی نورون‌ها افزایش می‌یابد و پنجره‌های فعال و غیر فعال ایجاد می‌شود.

شکل(۳) چگالی کل نورون‌های فعال $\rho(t)$را در طول زمان نشان می‌دهد. واضح است که به صورت نوسانی تغییر می‌کنند.

همان طور که مشاهد می‌شود در برخی از بازه‌های زمانی $\rho(t)$ به صفر نزدیک می‌شود با این حال می‌توانند مجددا افزایش یابند.

برای شبیه‌سازی‌های صورت گرفته در شبکه، برای هر نورون یک مقدار آستانه تحریک در نظر می‌گیریم. شکل (۳) نمایانگر این است که توزیع آستانه تحریک به صورت گوسی با میانگین ۱۰ و انحراف معیار ۲ در نظر گرفته و در هر آزمایش، مقادیر آستانه تحریک هر نورون ثابت است، به این معنی که اگر نورون ۱۰ام یک مقدار خاص شرط آستانه دارد و در هر آزمایش مقدار آستانه نورون ۱۰ ام همان مقدار خواهد بود و تغییری نخواهد کرد. اما توزیع مجموعه‌ی آستانه تحریک نورون‌ها گوسی است.

نقش تأخیر زمانی

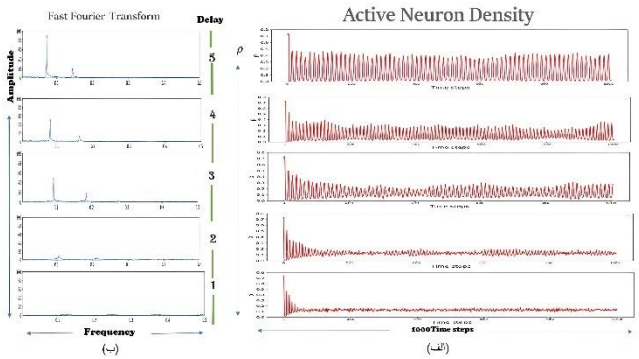
در شبیه‌سازی‌های و مدل‌سازی عصبی، تاخیر زمانی یکی از پارامترهای مهم است که در نظر گرفته می‌شود. این پارامتر نشان‌دهنده مقدار زمان لازم برای انتقال اطلاعات یا سیگنال بین عناصر می‌باشد. تاخیر زمانی می‌تواند متغیر باشد و به شکل‌گیری الگوها و دینامیک‌های خاص در شبکه‌های عصبی کمک کند. در شبیه‌سازی های صورت گرفته مدت زمان فعالیت سیناپس‌ها را ثابت در نظر گرفته‌ایم و مقایر تاخیر زمانی را در بازه‌های (۱۰ تا ۱) تغییر داده‌ایم که متناسب با شبکه‌های مغزی می‌باشد و نیز خصوصیت‌های دینامیک جمعی شبکه چگونه تحت تاثیر پارامتر تاخیر زمانی قرار دارد و می‌توان نتیجه مستقیم افزایش تاخیر زمانی در دامنه نوسانات و مجموعه فعالیت‌های نورونی مشاهده کرد[2].

فعالیت قابل توجه نورون‌ها در یک بازه‌ی کوتاه منجر به تولید یک جریان مهاری در شبکه می‌شود. در نتیجه، شبکه به خاموشی می‌رود. مدت زمان این پنجره‌ی خاموشی بیشتر از هر پارامتر دیگری تحت تأثیر زمان فعالیت سیناپسی و تاخیر زمانی قرار دارد. بنابراین، پارامتر تعیین‌کننده در مدت زمان پنجره‌ی آتش، تاخیر زمانی است که خود تحت تأثیر تاخیر انتقال سیگنال در شبکه و اکسون و همچنین زمان رشد نمایی سیناپسی قرار دارد. با استفاده از تبدیل فوریه سریع که یک تکنیک رایج در پردازش سیگنال و تحلیل بسامد است. طیف بسامد فعالیت چگالی نورون‌های فعال در زمان را به دامنه فرکانس

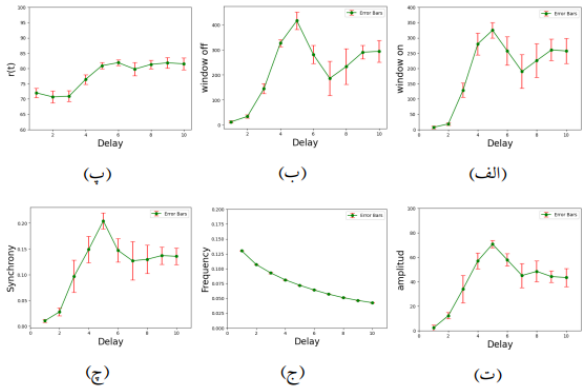
تبدیل می‌کند. تاثیر تاخیر زمانی بر فرکانس و دامنه را در شبکه مشاهده می‌کنیم.

تأثیرات تاخیر زمانی بر پارامترهای مختلف شبکه در شکل(٤)نمایش داده شده‌اند. افزایش تاخیر زمانی تأثیر مستقیمی بر همگامی شبکه، دامنه نوسانات، تعداد پنجره‌های فعال و مقدار فرکانس شبکه دارد.

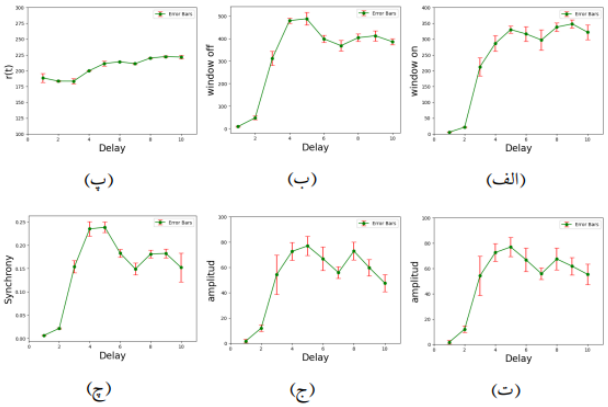
نمودار شکل (٤) قسمت (الف) همبستگی متقابل بین جریان سیناپسی و فعالیت شبکه را نشان می‌دهد، و شکل (٤) قسمت (ب) طیف توانی شبکه و فعالیت شبکه را نشان می‌دهد که شبکه در محدوده بسامدهای ریتم گاما (با فرکانس‌های بین ۳۰ تا ۱۰۰ هرتز) فعال است.



شکل ٤: شکل (الف) تعداد نورون‌های فعال در یک پنجره زمانی ۱۰۰۰ گام زمانی می‌باشد . با افزایش مقدار تاخیر زمانی میزان فعالیت نورون در طول زمان حالت نوساناتی دارد. شکل (ب) طیف بسامدی فعالیت شبکه متناسب با رفتار زمانی چگالی که بیانگر این است که دامنه و فرکانس نوسانات شبکه با تغییرات تاخیر زمانی ثابت نیستند و با افزایش تاخیر زمانی دامنه نوسانات افزایش و فرکانس شبکه کاهش می‌یابد.



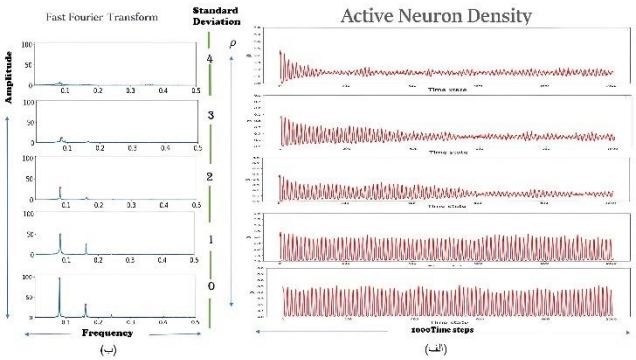
شکل۵: نتایج شبیه سازی با تعداد نورون‌های۵۶۰ و تاخیر سیناپسی ثابت $\delta_I = 7$ p=0.01 N=560 (الف)تعداد پنجره‌های فعال، (ب) تعداد پنجره‌های خاموش، (پ)دامنه نوسانات، (ت) میانگین بسامد نوسانات، (ت) میانگین تعداد نورون‌های فعال و(پ) شاخص هم‌گامی بر حسب تاخیر زمانی رسم شده‌است.



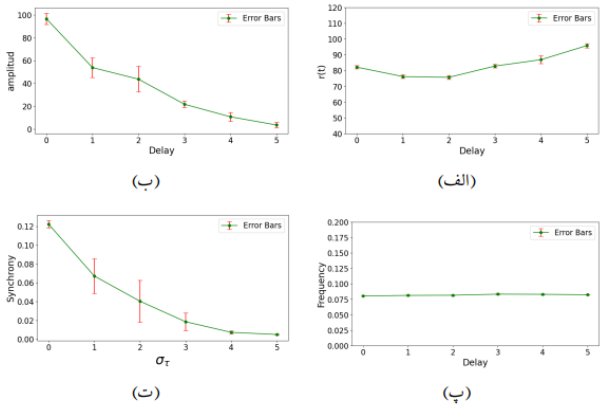
شکل۵: تکرار نتایج شبیه سازی با تعداد نورون‌های ۱۵۰۰ و تاخیر سیناپسی ثابت $\delta_I = 7$ p=0.004 N=1500 با همان نتایج نمودار (٤) با تعداد نورون‌های بیشتر انجام شده است. . (الف) تعداد پنجره‌های فعال، (ب) تعداد پنجره‌های خاموش، (پ)دامنه نوسانات، (ت) میانگین بسامد نوسانات، (ت) میانگین تعداد نورون‌های فعال و(پ) شاخص هم‌گامی بر حسب تاخیر زمانی رسم شده‌است.

نقش آستانه بر فعالیت نورون‌ها

در این بخش اثر آستانه فعالیت نورون‌ها را بررسی می‌کنیم تا دریابیم چگونه در شرایطی که تاخیر زمانی ثابت است، بر دینامیک جمعی تأثیر می‌گذارند. تاخیر زمانی ثابت را طوری در نظر گرفتیم که شبکه در بیشترین حالت پایداری از نظر هم‌گامی قرار داشته‌باشد. همانطور که ذکر شد، نورون‌ها نیاز به جریان ورودی تحریکی کافی دارند تا پس از عبور از شرط آستانه فعالیت کنند. جریان ورودی به گونه‌ای انتخاب شده‌است که در شبکه رفتار نوسانی مشاهد شود. در این بخش، به بررسی تأثیر آستانه تحریک نورون‌ها بر روی نوسانات می‌پردازیم. در این شبیه‌سازی، برای هر یک از نورون‌های شبکه، یک مقدار متفاوت برای شرط آستانه فعالیت در نظر گرفته شده‌است. سپس با استفاده از توزیع گوسی با میانگین ۱۰ و با تغییر میزان پراکندگی σ، اثر این پارامتر بر شبکه مورد بررسی قرار گرفته است.



شکل ۵: شکل (الف) تعداد نورون‌های فعال در یک پنجره زمانی ۱۰۰۰ گام زمانی می‌باشد . با افزایش مقدار تا انحراف معیار از میانگین از پایین به سمت بالا میزان فعالیت متفاوت مشاهده می شود که دامنه و شاخص هم‌گامی تفاوت و فرکانس تقریبا نوسانات ثابت است. شکل (ب) تغییرات دامنه و فرکانس نوسانات به تغییرات انحراف معیار آستانه تحریک را نشان می دهد که دامنه نوسانات کاهش می‌یابد.



شکل(٦): تاثیر پراکندگی شرط آستانه بر فعالیت شبکه. (الف)فعالیت جمعی شبکه به ازای مقادیر افزایش انحراف معیار تغییر به خصوصی نمی‌کند. (ب) با افزایش مقادیر انحراف معیار شبکه به سمت خاموشی پیش می‌رود و در پی آن دامنه نوسانات نیز کاهش می‌یابد. (ت) شاخص هم‌گامی با افزایش انحراف معیار پراکندگی فعالیت نورون‌ها را افزایش می‌دهد و در پی‌آن شاخص هم‌گامی کاهش می‌یابد.

نتیجه گیری

در این پژوهش، به بررسی چگونگی تاثیرات پارامترهای مختلف همچون تاخیر زمانی و شرط آستانه تحریک نورون‌ها بر شبکه مهاری پرداختیم. در فصل گذشته، به بررسی و تحلیل شبیه‌سازی‌های انجام شده از شبکه مهاری برای توصیف فعالیت نورون‌های شبکه و ایجاد نوسانات عصبی پرداختیم. در این بررسی از یک مدل انتشار بیماری ساده برای توصیف فعالیت‌های سیناپسی و مدل آستانه‌ای برای فعالیت نورون‌ها در نظر گرفتیم. هدف اصلی از انجام این شبیه‌سازی‌ها، توصیف نوسانات عصبی و بررسی چگونگی تأثیرات پارامترهای مختلف بر فعلیت‌های شبکه می‌باشد.

با ترکیب دینامیک رأس و یال و با توجه به نحوه فعالیت نورون و سیناپس و تأثیر دوجانبه آن‌ها، یک مدل نسبتاً ساده برای شبکه عصبی مغز معرفی شده است. در این مدل، نورون‌ها از یک شرط آستانه‌ای

برای فعالیت پیروی می‌کنند و سیناپس‌ها نسبت به نورون پیش‌سیناپسی خود با تاخیر فعال می‌شوند. از این مدل برای بازسازی نوسانات مغز استفاده شده است.

در این پژوهش، تلاش بر این بوده است که با روشی متفاوت‌تر و با سرعت بهتر، نقش تاخیر زمانی در نوسانات مغزی را بررسی می‌کند و تأثیر آن را بر میزان و نحوه‌ی فعالیت های مغزی بررسی می‌نماید.

در بررسی‌های صورت گرفته نشان داده شده است که همدوسی نوسانات با افزایش تاخیر زمانی افزایش می‌یابد. به عبارت دیگر، با افزایش تاخیر زمانی، هماهنگی بین نوسانات بیشتر می‌شود. از طرفی، مقادیر کم تاخیر زمانی نمی‌توانند نوسانات هماهنگ را ایجاد کنند. از سوی دیگر، مقادیر زیاد تاخیر زمانی می‌توانند نوسانات پایدار را ایجاد کنند.

چنین تغییری در میزان هم‌گامی شبکه در شرایطی رخ می‌دهد که میانگین نرخ آتش نورون‌ها تغییر محسوسی نمی‌کند و بسامد شبکه کاهش می‌یابد. در دینامیک متنوع و غنی شبکه مهاری، در محدوده‌ای میانی از مقادیر تاخیر زمانی، تغییرات قابل مشاهده‌ای وجود دارد که مشخصه‌ی آن تغییرپذیری بالایی در دامنه و دوره تناوب نوسانات گاما است. این محدوده از مقادیر تاخیر زمانی با آنچه از شبکه‌های موضعی مغز می‌دانیم سازگاری دارد.

همچنین، تأثیر پارامترهای مهم دیگری مانند شرط آستانه فعالیت نورون‌های مغز در دینامیک شبکه و ایجاد ریتم گاما نیز مورد بررسی قرار گرفته است. با بررسی نقش تاخیر زمانی در کنار این پارامتر، نگاهی فراگیرتر به نوسانات شبکه مهاری ارائه شده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش پراکندگی شرط آستانه نورون‌ها، همبستگی فعالیت شبکه به طبع دامنه و فعالیت شبکه کاهش می‌یابد. همچنین، تغییرات بخصوصی در میانگین نرخ فعالیت شبکه ندارد و فرکانس شبکه ثابت باقی می‌ماند.

مرجع‌ها

[1] Khanjanianpak, Mozhgan, Azimi-Tafreshi, Nahid, and Valizadeh, Alireza. Emergence of complex oscillatory dynamics in the neuronal networks with long activity time of inhibitory synapses. Available at SSRN 4501703.

[2] Roohi, Nariman and Valizadeh, Alireza. Role of interaction delays in the synchronization of inhibitory networks. Neural Computation, 34(6):1425–1447, 2022.

[3] Newman, M. Networks: an introduction: Oxford. 2010.

تحلیل آکوستیک جریان آشفته حول سیلندر

کمال‌خانی، نیلوفر[1]؛ شمالی، زهرا [1]؛ غضنفریان، جعفر[2]

گروه ماده‌چگال، دانشکده علوم‌پایه، دانشگاه تربیت مدرس تهران

گروه مهندسی‌مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه زنجان

چکیده

در این مطالعه، شبیه‌سازی عددی جریان آشفته حول یک سیلندر ساده با نرم‌افزار OpenFOAM و استفاده از حل‌گر pimpleFoam در رینولدز ۴۰۰۰ انجام شده است. شبکه‌بندی دامنه با blockMesh صورت گرفته و برای تحلیل نویز از آنالوژی فاکس ویلیامز–هاوکینگز (Ffowcs-Williams and Hawking) بهره گرفته شده است. نتایج نشان می‌دهند که بیشترین شدت فشار آکوستیکی در ناحیه پشت سیلندر و در محل تشکیل گردابه‌های فون کارمن (Karman vortex street) اتفاق می‌افتد، و طیف فرکانسی فشار آکوستیکی نیز وجود یک فرکانس غالب مشخص را تأیید می‌کند. این نتایج می‌توانند برای درک بهتر رفتار هایدرواکوستیکی اجسام ساده و توسعه‌ی روش‌های کنترل و کاهش نویز مورد استفاده قرار گیرند.

واژگان کلیدی: *جریان آشفته، تحلیل آکوستیک، آنالوژی فاکس ویلیامز–هاوکینگ، گردابه‌های فون کارمن*

Acoustic Analysis of Turbulent Flows Around a Cylinder

Kamalkhani, Niloofar[1]; Shomali, Zahra [1]; Ghazanfarian, Jafar[2]

[1] *Department of Physics, Tarbiat Modares university*

[2]Mechanical Engineering Department, Faculty of Engineering, University of Zanjan, Zanjan, Iran

Abstract

In this study, a numerical simulation of turbulent flow around a simple cylinder was performed with using OpenFOAM software and the pimpleFoam solver at a Reynolds number of 4000. The computational domain was meshed using blockMesh, and noise analysis was performed based on the Ffowcs-Williams and Hawking analogy. The results reveal that the highest acoustic pressure intensity occurs in the wake region behind the cylinder, precisely at the formation site of the Karman vortex street. Furthermore, the frequency spectrum of the acoustic pressure confirms the presence of a distinct dominant frequency. These findings contribute to a deeper understanding of the hydroacoustic behavior of simple geometric bodies and support the development of effective noise control and reduction methods

Keywords*: Turbulent Flow, Acoustic Analysis, Ffowcs-Williams and Hawkings (FW-H) Method, Kármán Vortex Street*

مقدمه

مطالعه رفتار جریان‌های آشفته حول اجسام ساده از جمله سیلندرها، همواره یکی از مباحث بنیادی در مکانیک سیالات و آکوستیک سیالات بوده است. این مسئله نه تنها به دلیل اهمیت صنعتی آن در زمینه‌هایی همچون طراحی سازه‌های دریایی، پل‌ها و سیستم‌های تهویه، بلکه به عنوان مدلی مرجع برای تحلیل برهم‌کنش‌های غیرخطی بین جریان، نیروهای هیدرودینامیکی و تولید نویز ایرواکوستیکی، مورد توجه ویژه قرار گرفته است. در محیط‌های چگال و غیرتعادلی، رفتار جریان‌های آشفته و نحوه‌ی تبدیل انرژی جنبشی به انرژی صوتی، نقشی کلیدی در انتقال انرژی و شکل‌گیری ساختارهای منظم ایفا می‌کند. هدف از این تحقیق، بررسی دقیق میدان آیرواکوستیکی حاصل از جدایش جریان و تولید گردابه‌های فون کارمن در پسای سیلندر، تحلیل ارتباط بین ضرایب هیدرودینامیکی و تابش صوتی، و تبیین چگونگی تأثیر این فرایندها بر انتشار انرژی در محیط‌های چگال می‌باشد

با بهره‌گیری از شبیه‌سازی‌های پیشرفته‌ی عددی و تحلیل دقیق میدان‌های فشار آکوستیکی با استفاده از آنالوژی فاکس ویلیامز–هاوکینگ می‌توان به تحلیل‌های دقیق و جامعی دست یافت.

معادلات حاکم

آنالوژی فاکس ویلیامز–هاوکینگز(۱) یک روش پیشرفته در علم دینامیک سیالات آکوستیکی است که برای تحلیل صدای تولید شده توسط جریان های سیال حول اجسام متحرک مورد استفاده قرار می گیرد. این روش توانست محدودیت های آنالوژی کرل را که فقط به اجسام ثابت توجه داشت، برطرف کند و امکان مطالعه روی اجسام متحرک را فراهم سازد. این یک معادله موج ناهمگن است که شامل منابع صوتی و نیروهای سطحی ناشی از جریان سیال است. این معادله از انجام عملیات ریاضی روی معادلات پیوستگی و اندازه حرکت به دست می آید و به صورت زیر نوشته می شود

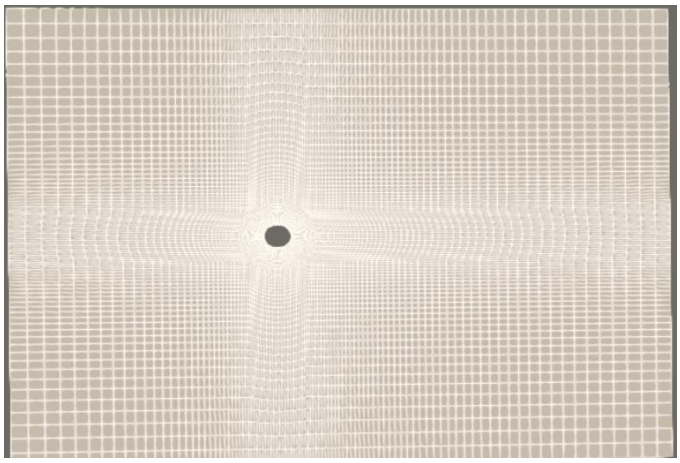
$$\frac{1}{C^2}\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - \nabla^2 p = \frac{\partial}{\partial t}[\rho_\infty v_n + p(u_n - v_n)]\delta(f)$$
$$- \frac{\partial}{\partial x_i}[P_i j n_j + \rho u_i(u_n - v_n)]\delta(f) + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} T_i j H(f)$$

معادله ۱ فاکس وی‌ای‌امز–

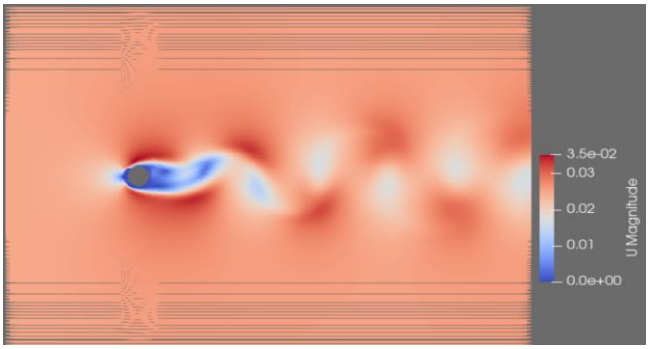
روش تحقیق

برای کاوش دقیق در پدیده‌های هایدروآکوستیکی و ایروآکوستیکی ناشی از جریان آشفته پیرامون یک سیلندر ساده، در این پژوهش از شبیه‌سازی عددی مبتنی بر نرم‌افزار اپن–فوم در رینولدز ۴۰۰۰ بهره گرفته شده است. طراحی هندسی دامنه با دقت بالا و به‌صورت بلوک‌بندی ساختاریافته از طریق ابزار بلاک مش صورت گرفته؛ جایی که تمرکز اصلی بر افزایش تراکم شبکه در ناحیه جدایش جریان و مسیر تشکیل گردابه‌ها بوده است. حل‌گر pimpleFoam، با توانایی هم‌زمان حل معادلات فشار و سرعت در شرایط گذرا، ستون اصلی محاسبات جریان را تشکیل می‌دهد. برای استخراج مؤلفه‌های صوتی ناشی از برهم‌کنش جریان با سطح سیلندر و گردابه‌های متوالی، از آنالوژی فاکس ویلیامز–هاوکینگز استفاده شد که امکان شبیه‌سازی تابش صوت به نواحی دورافتاده از بدنه را فراهم می‌سازد. مرزهای دامنه شامل ورودی، خروجی، سطح سیلندر و دیواره‌های بالا و پایین بوده و با اعمال شرط empty در سطوح پیش و پس‌زمینه، رفتار دوبعدی مسئله حفظ شده است. چارچوب محاسباتی امکان ره‌گیری دقیق منشأ و مسیر انتشارنویزهای

هیدرودینامیکی را فراهم می‌کند و بستری برای تحلیل دقیق ساختارهای صوتی در اثر گردابه‌های فون کارمن فراهم می‌سازد.



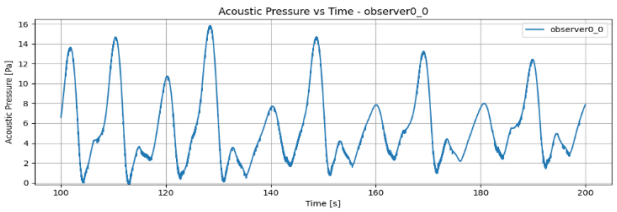
شکل ۱-ساختار بلاک مش مسئله



شکل ۲-تغییرات سرعت و نمایش خیابان گردابه‌ی فون کارمن

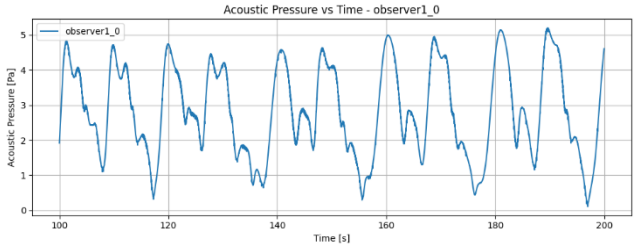
نتیجه گیری

در مطالعه‌ی انجام شده توسط نرم افزار اپن فوم، رفتار جریان آشفته و الگوهای آکوستیکی حول سیلندر در یک جریان آشفته مورد بررسی قرار گرفت. بر اساس نقاط مشاهده‌گر تعریف شده در ۵ موقعیت مختلف،نتایج حاصله نشان داد که بیشترین شدت فشار آکوستیکی در ناحیه‌ی پشت سیلندر و هم‌راستا با مسیر تشکیل گردابه‌های فون کارمن ایجاد می‌شود.

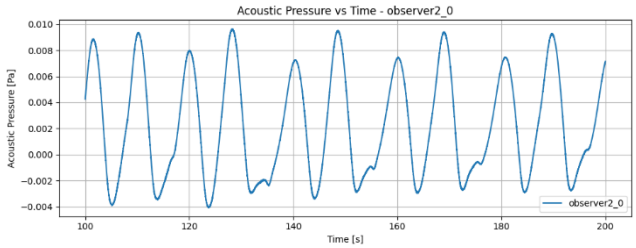


شکل ۳-مشاهده گر در موقعیت مکانی(0.01,-1,0.20)

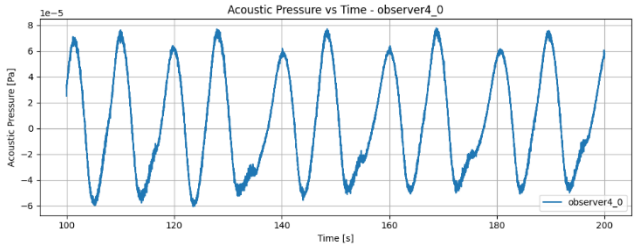
در موقعیت مشاهده‌گر شکل ۳ دامنه نوسانات فشار آکوستیکی نسبتا بالا است. در نتیجه نوسانات پیچیده و غیر سینوسی هستند، این امر می‌تواند ناشی از تلاطم جریان و تشکیل گردابه های منقطع نزدیک بدنه استوانه باشد.



شکل ۴-مشاهده گر در موقعیت مکانی (0.01,-0.3,1)

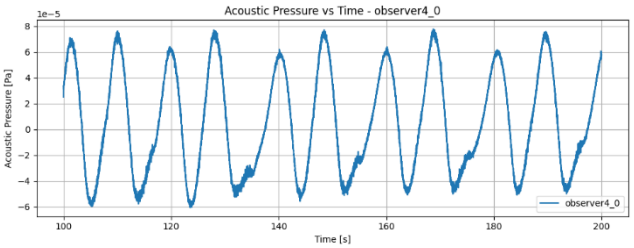


شکل ۵-مشاهده گر در موقعیت مکانی(0.01,-5,0.20)



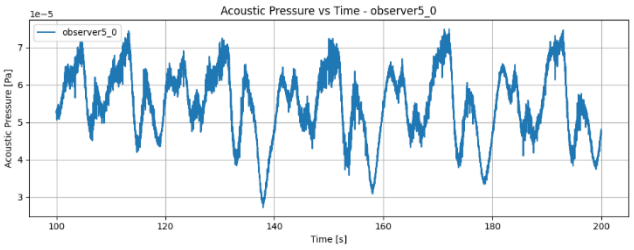
شکل ۶-مشاهده‌گر در موقعیت مکانی (0.01,-0.3,5)

در این موقعیت شکل ٦ پاسخ بصورت سینوسی و منظم‌تر است به دلیل فاصله بیشتر از استوانه، تأثیر اغتشاشات موضعی کاهش یافته و امواج آکوستیکی واضح‌تر منتقل شده‌اند.



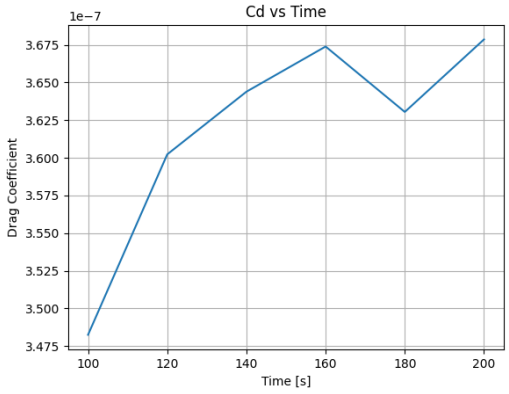
شکل ۷–مشاهده‌گر در موقعیت مکانی (0.01,-50,0.20)

در شکل ۷ ، رفتار سی‌گنال پای‌دار ولی نوی‌زی‌تر شده است. ای‌ن امر می‌تواند به دلی‌ل بازتاب‌های محی‌طی ی‌ا تداخل امواج باشد.

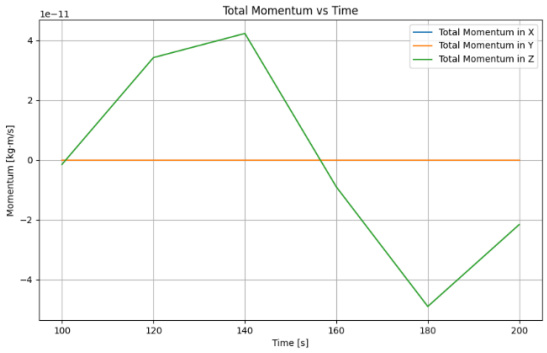


شکل ۸–مشاهده گر در موقعیت مکانی(0.01,-0.3,50)

تغییرات ضریب درگ و تکانه در نمودارهای شکل ۹ و ۱۰ قابل مشاهده می‌باشند

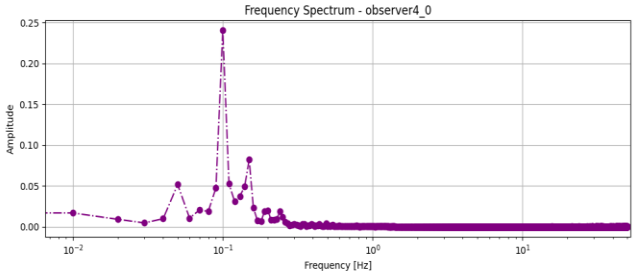


شکل ۹–تغییرات نی‌روی درگ



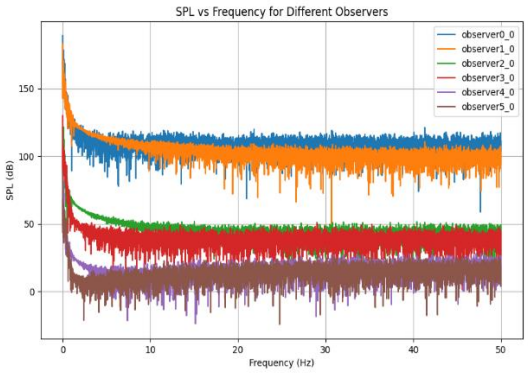
شکل ۱۰–نمودار تکانه بر حسب زمان

با مقایسه‌ی دو شکل ۹ و ۱۰ میتوان نتیجه گرفت افزایش ضریب درگ منجر به کاهش تکانه جریان در پشت سیلندر می‌شود و این کاهش انرژی جریان، شدت نوسانات گردابه‌ای را تضعیف کرده و در نتیجه موجب افت قابل توجه در شدت فشار آکوستیکی تولیدی و شیفت احتمالی فرکانس غالب به مقادیر پایین‌تر می‌گردد.



شکل۱۱ –طیف فرکانسی مربوط به مشاهده گر (۰.۰۱,-۵۰,۰.۲۰)

طیف فرکانسی سیگنال فشار شکل ۱۱ نشان می‌دهد که انرژی آکوستیکی در فرکانس‌های پایین، به‌ویژه حوالی ۰.۱ هرتز، متمرکز است که با رهایش گردابه‌ها مرتبط باشد. پیک‌های فرعی نشان‌دهنده‌ی مودهای غیرخطی و اندرکنش‌های جریان هستند. با افزایش فرکانس، انرژی به سرعت افت می‌کند و نویز فرکانس پایین غالب است. نمودار SPL (Sound Pressure Level) که معمولاً به صورت SPL vs Frequency نمایش داده می‌شود، یکی از ابزارهای مهم برای تحلیل و نمایش ویژگی‌های صوتی و آکوستیکی در مهندسی صدا، و تحقیقات صوتی است. این نمودار به طور خاص برای تحلیل سطح فشار صوتی در طول یک بازه فرکانسی خاص استفاده می‌شود .



شکل ۱۲ نمودار سطح فشار صوتی بر اساس فرکانس

از این نمودار میتوان نتیجه گرفت بیشترین شدت صدا در فرکانس‌های پایین متمرکز است و با افزایش فرکانس، سطح فشار صوت به طور پیوسته کاهش می‌یابد. ناظرهای مختلف، به دلیل موقعیت نسبی متفاوت نسبت به سیلندر و میدان جریان، شدت‌های متفاوتی از نویز آیرودینامیکی را ثبت کرده‌اند. رفتار کلی نشان‌دهنده‌ی غلبه‌ی فرکانس‌های پایین ناشی از تولید و رهاسازی گردابه‌های فون کارمن می‌باشد.

مراجع

۱.- Williams, BY J. E. Ffowcs and HAWKINGSt, D. L. Sound generation by turbulence and surfaces in arbitrary motion. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, **264**:321 – 342,1969.

2- Soheibi, H., Shomali, Z., & Ghazanfarian, J. (2022). Combined active-passive heat transfer control using slotted fins and oscillation: The cases of single cylinder and tube bank. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, *182*, 121972.

3- Barandagh, A. R., Barandagh, A. R., & Ghazanfarian, J. (2023). Hybryd Heat Transfer Augmentation from Oscillating Cylinder with Partial Superhydrophobic Janus Surfaces. Heat Transfer Engineering, 44(20), 1878-1902.

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اثر پوشش گرافنی بر کاهش آسیب‌های کاویتاسیون بر سطح فلزی

هاتفی دارستانی ، رهام ؛ لطفعلی‌نژاد ، علیرضا ؛ رجب‌پور ، علی

گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه بین المللی امام خمینی ، قزوین

چکیده

کاویتاسیون و پدیده‌های ناشی از آن، از جمله تخریب‌های سطحی ناشی از تشکیل و فروپاشی حباب‌ها، از چالش‌های مهم در صنایع دریایی و مکانیکی بهشمار می‌روند. در این پژوهش، اثر پوشش‌های گرافنی بر کاهش آسیب‌های ناشی از کاویتاسیون روی سطح فلزی آلومینیوم بررسی شده است. با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD)، تعامل نانوحباب‌ها و امواج ضربه حاصل از ترکیدن آن‌ها با ساختارهای فلزی پوشش‌دار و بدون پوشش تحلیل شد. نتایج نشان داد که وجود پوشش گرافنی به‌طور مؤثری موجب کاهش نوسانات فشار، انتقال انرژی و تنش‌های نقطه‌ای ناشی از کاویتاسیون شده و در نتیجه از تخریب ساختاری سطح جلوگیری می‌کند. بنابراین، پوشش‌های گرافنی می‌توانند به‌عنوان یک راهکار مؤثر جهت افزایش مقاومت سطوح فلزی در برابر پدیده کاویتاسیون در کاربردهای حساس مانند دریایی، انرژی و پزشکی مطرح شوند.

Molecular Dynamics Study on the Role of Graphene Coating in Mitigating Cavitation-Induced Damage on a Metallic Surface

Hatefi Darestani, Roham; Lotfalinezhad, Alireza; Rajabpour, Ali

Department of Mechanical Engineering, Imam Khomeini International University, Qazvin

Abstract

Cavitation and its associated phenomena, including surface degradation caused by the formation and collapse of bubbles, are among the major challenges in marine and mechanical industries. In this study, the effect of graphene coatings on mitigating cavitation-induced damage to aluminum metallic surface has been investigated. Using molecular dynamics (MD) simulations, the interactions of nanobubbles and the shock waves resulting from their explosions with coated and uncoated metallic structures were analyzed. The results demonstrated that the presence of graphene coating effectively reduces pressure fluctuations, energy transfer, and localized stresses caused by cavitation, thereby preventing structural surface degradation. Consequently, graphene coatings can be considered an effective strategy for enhancing the resistance of metallic surfaces against cavitation in critical applications such as Maritime industry, energy, and medical fields.

مقدمه

فرسایش و خوردگی ناشی از کاویتاسیون از مسائل بحرانی در صنایع دریایی و زیردریایی محسوب می‌شوند، به‌ویژه اینکه عملکرد و طول عمر سکان‌ها و پروانه‌های کشتی را تحت تأثیر قرار می‌دهند. این

مشکلات به دلیل تشکیل و فروپاشی حباب‌های بخار در سیال رخ می‌دهند که منجر به ایجاد امواج ضربه‌ای با فشار بالا می‌شوند و به‌مرور زمان، سطوح مواد را فرسایش می‌دهند. این پدیده در طولانی‌مدت باعث ایجاد حفره‌های سطحی، تضعیف ساختاری و کاهش کارایی سیستم‌های پیشرانه و مانورپذیری کشتی‌ها می‌شود. علاوه بر این، وجود آب دریا موجب تسریع فرآیند خوردگی از طریق واکنش‌های الکتروشیمیایی شده و به تخریب بیشتر مواد منجر می‌شود. برای مقابله با این چالش‌ها، مهندسی پیشرفته مواد، پوشش‌های محافظتی و طراحی‌های هیدرودینامیکی بهینه‌شده ضروری هستند تا اثرات کاویتاسیون کاهش یابد و دوام قطعات دریایی افزایش پیدا کند [۱-۳].

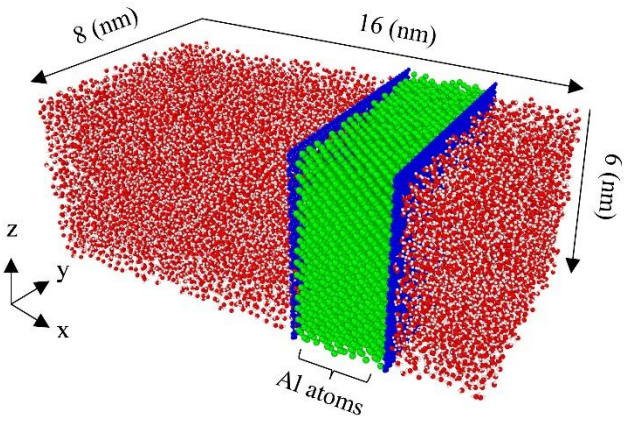
یکی از مهم‌ترین مکانیسم‌هایی که به فرسایش سطحی فلزات کمک می‌کند، تشکیل میکروجت‌هایی است که به مرز جامد برخورد می‌کنند. زمانی که یک حباب در نزدیکی یک سطح جامد فرو می‌پاشد، میکروجتی در رأس مرز حباب کاویتاسیونی ایجاد می‌شود که به‌واسطه‌ی گرادیان‌های فشار بالا در اطراف حباب هدایت می‌شود. علاوه بر این مکانیسم اصلی، یک عامل دیگر که می‌تواند بر میزان فرسایش ناشی از فروپاشی حباب تأثیر بگذارد، فروپاشی حفره‌های حلقوی است. این حفره‌ها که پس از فروپاشی اولیه‌ی حباب تشکیل می‌شوند، با تولید اثرات موضعی فشار بالا در طی فروپاشی خود، به تخریب بیشتر سطح جامد منجر می‌شوند [٤]. فرسایش ناشی از کاویتاسیون، که یک مشکل رایج در تجهیزات حمل و نقل سیال محسوب می‌شود، به‌واسطه‌ی تشکیل و فروپاشی حباب‌های بخار در یک مایع، موجب تخریب مواد می‌شود [٥]. گرافن، که یک ورقه‌ی دوبعدی با ضخامت یک اتم متشکل از اتم‌های کربن است، به دلیل خواص مکانیکی، الکتریکی و حرارتی استثنایی، توجه گسترده‌ی محققان را به خود جلب کرده است. این ویژگی‌های منحصربه‌فرد، ورقه‌های گرافن (GS) را به‌عنوان یک ماده‌ی ایده‌آل برای تقویت کامپوزیت‌ها در پلیمرها، فلزات و سرامیک‌ها مطرح کرده است[٦].

مطالعات کمی در مورد نانوکامپوزیت‌های فلزی تقویت‌شده با ورقه‌های گرافن (GS) انجام شده است. در میان ماتریس‌های فلزی مختلف، آلومینیوم (Al) پرکاربردترین فلز محسوب می‌شود، زیرا در ساخت آلیاژهای سبک وزن طیف گسترده‌ای از کاربردهای فنی دارد. توسعه و توصیف تجربی نانوکامپوزیت‌های مبتنی بر گرافن چالش‌های قابل‌توجهی به همراه دارد، زیرا فرآیندهای ساخت آن‌ها پیچیده و پرهزینه است. علاوه بر این، مدل‌سازی تحلیلی در مقیاس نانو، به دلیل پیچیدگی بالای آن، این فرایند را یا بسیار دشوار یا بسیار زمان‌بر می‌کند، در نتیجه رویکردهای محاسباتی مقرون‌به‌صرفه و سریع، نقش مهمی در توسعه و توصیف این نانوکامپوزیت‌ها ایفا می‌کنند و نتایج شبیه‌سازی ارزشمندی را برای درک، تحلیل و طراحی بهتر این مواد ارائه می‌دهند.

در این مطالعه، هدف ما شبیه‌سازی اثرات نانو *حباب*‌های ناشی از کاویتاسیون بر سطح فلزی آلومینیوم (Al) با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) است. برای بررسی تأثیر رفتار نانو *حباب*‌ها بر ویژگی‌های ساختاری این فلزات، یک پوشش ورقه‌ی گرافنی بر روی سطح فلزی آلومینیوم اعمال شده است. نتایج حاصل از ساختارهای پوشش‌دار، با نمونه‌های بدون پوشش مقایسه شده تا تأثیر پوشش بر رفتار مواد ارزیابی شود. در این راستا، چندین پارامتر کلیدی از جمله ابعاد نانو *حباب*‌ها، سرعت اعمال امواج ضربه‌ای به این نانو *حباب*‌ها و تأثیرات ناشی از این عوامل بر یکپارچگی ساختاری سیستم‌های فلزی مورد بررسی قرار گرفته‌اند.

جزئیات شبیه سازی

برای مدل‌سازی دقیق اثرات کاویتاسیون، یک دامنه شبیه‌سازی به شکل یک مکعب مستطیل با ابعاد ۱۶ × ۸ × ۶ نانومتر ایجاد شد. ساختارهای فلزی بررسی شده یعنی آلومینیوم به‌صورت صفحات نازکی با ابعاد ۲.۵ × ۸ × ۶ نانومتر درون این دامنه قرار داده شدند (شکل ۱).



شکل ۱ : نمای ایزومتریک از مدل شبیه سازی شده سیستم برخورد با گرافن

برای بررسی جامع نقش پوشش‌های گرافنی، دو حالت شبیه‌سازی متمایز در نظر گرفته شد: نخست، یک سیستم فلزی پوشش‌دار با گرافن و دوم، یک سیستم فلزی بدون پوشش گرافنی در نظر گرفته شده است. در پیکربندی‌های پوشش‌دار، لایه‌های گرافنی به‌صورت استراتژیک در سطوح بالایی و پایینی ساختارهای فلزی قرار داده شدند تا تأثیر محافظتی بالقوه آن‌ها در برابر آسیب‌های ناشی از کاویتاسیون به حداکثر برسد.

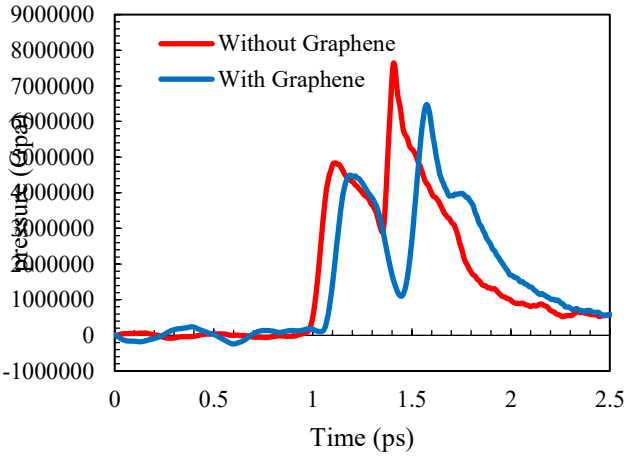
مولکول‌های آب در این شبیه‌سازی با استفاده از مدل آب TIP4P شبیه‌سازی شدند، مدلی که به دلیل توانایی بالای آن در بازتولید دقیق خواص ترمودینامیکی آب، به‌ویژه در مطالعات هیدرودینامیکی در مقیاس مولکولی، به طور گسترده مورد استفاده قرار می‌گیرد. تعاملات بین‌مولکولی حاکم بر سیستم با استفاده از پتانسیل لنارد جونز (LJ) مدل‌سازی شدند، که نیروهای واندروالسی و دافعه‌های کوتاه‌برد را در نظر می‌گیرد.

برای مدیریت تعاملات بین گونه‌های اتمی مختلف، از قانون ترکیب لورنتز برتلوت استفاده شد که محاسبه ضرایب متقابل تعاملات را به‌طور فیزیکی دقیق و سازگار تضمین می‌کند. پتانسیل ترسوف، که یک میدان نیروی شناخته‌شده برای سیستم‌های کووالانسی است، برای شبیه‌سازی پیوندهای قوی کربن-کربن در لایه‌های گرافنی مورد استفاده قرار گرفت، به‌طوری‌که استحکام مکانیکی و مقاومت ذاتی آن‌ها به‌خوبی ثبت شود. علاوه بر این، برای مدل‌سازی دقیق تعاملات الکترواستاتیکی و واندروالسی در برد بلند از حلگر (PPPM) در چارچوب شبیه‌سازی استفاده شده است. همچنین، میدان نیروی CHARMM برای توصیف دقیق تعاملات مولکولی، به‌ویژه در شبیه‌سازی‌های زیست‌مولکولی و فازهای چگال، مورد استفاده قرار گرفت تا نمایشی قوی از ویژگی‌های ساختاری سیستم ارائه دهد.

شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار LAMMPS، که یک بسته‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مقیاس‌پذیر و کارآمد برای تحلیل تعاملات پیچیده‌ی مواد است، انجام شد. این شبیه‌سازی‌ها با وضوح زمانی ۱ فمتوثانیه (fs) اجرا شدند تا رویدادهای سریع در مقیاس اتمی، از جمله کاویتاسیون و انتشار امواج ضربه‌ای، با دقت زمانی بالا ثبت شوند. برای تسهیل تحلیل ساختاری و تجسم داده‌ها، از نرم‌افزار (VMD) استفاده شد. این ابزار امکان ایجاد مدل‌های دقیق، تجسم مسیرهای اتمی و بررسی عمیق مکانیزم‌های تغییر شکل مشاهده‌شده در ساختارهای فلزی را فراهم کرد.

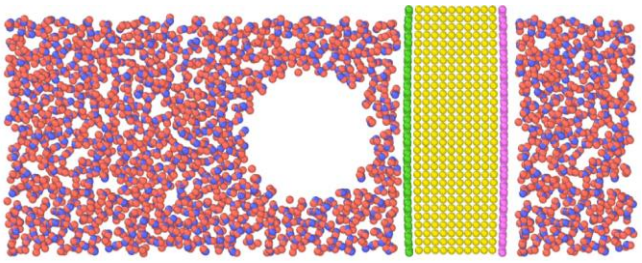
نتایج

نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان می‌دهد که برخورد موج حاصل از ترکیدن یک حباب کاویتاسیونی در محیط آبی به سطح آلومینیوم، منجر به ایجاد تغییرات قابل توجهی در میدان فشار و نیروهای وارد بر سطح می‌گردد. نمودار مربوط به فشار در شکل ۲ نشان می‌دهد که در غیاب لایه محافظ، پاسخ سطح آلومینیوم به موج ضربه‌ها دارای پیک‌های شدید و نوسانات نامنظم است که بیانگر انتقال مستقیم و شدید انرژی موج به ساختار فلزی می‌باشد.

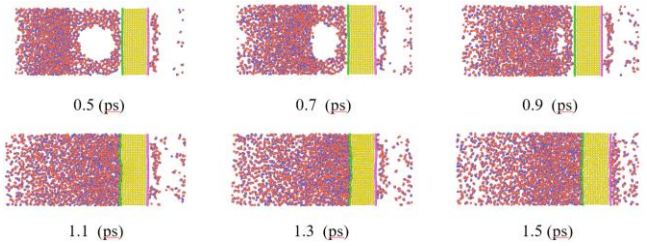


شکل۲ : مقایسه پاسخ ضربه ای نانو کامپوزیت با گرافن (خط قرمز) و بدون گرافن (خط آبی)

در مقابل، هنگامی که سطح آلومینیوم توسط یک لایه گرافنی پوشش داده می‌شود، دامنه نوسانات فشار به طرز معناداری کاهش یافته و رفتار فشار به صورت تعدیل شده و کنترل پذیرتر بروز می‌کند. این موضوع به وضوح عملکرد جذب انرژی و توزیع مجدد تنش‌ها توسط لایه گرافن را نشان می‌دهد. چنین رفتاری گویای نقش موثر گرافن به عنوان یک سد مکانیکی در برابر موج‌های شوک و ترکیدن‌های موضعی است.



شکل۳ : ساختار اولیه سیستم شبیه سازی شده پیش از اعمال ضربه



شکل٤ : تحول ساختاری ماده هدف در طی زمان پس از ضربه در زمان‌های مختلف پس از اعمال شوک

نتیجه گیری

در این بررسی با بهره‌گیری از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، تأثیر پوشش گرافنی بر کاهش آسیب‌های ناشی از ترکیدن حباب‌های کاویتاسیون بر سطح آلومینیومی بررسی گردید. تحلیل نتایج به دست آمده نشان داد که پوشش گرافنی نقش مؤثری در بهبود رفتار مکانیکی سطح در برابر بارهای دینامیکی حاصل از کاویتاسیون ایفا می‌کند. در نمونه‌های بدون پوشش، ترکیدن حباب‌های کاویتاسیون موجب ایجاد امواج ضربه‌ای با شدت بالا و نوسانات سریع تنشی شد که در سه راستای فضایی نیروهای شدیدی را به سطح فلز منتقل کردند. این نیروها در نهایت منجر به تخریب‌های موضعی شامل فرورفتگی‌ها، ایجاد ترک‌های ریز و آسیب‌های پلاستیک پایدار در ساختار سطحی شدند. این رفتار، به ویژه در فرآیندهای دینامیکی مانند کاویتاسیون، که در آن نرخ اعمال بار بسیار بالا است، می‌تواند به افت شدید خواص مکانیکی

و کوتاه شدن عمر خستگی مواد منجر شود. افزودن یک لایه گرافنی به سطح، تأثیر بسزایی در تغییر این الگو داشت. حضور گرافن موجب تضعیف شدت موج‌های ضربه‌ای، توزیع یکنواخت‌تر تنش‌های اعمالی و کاهش پیک فشار در زمان برخورد شد. این ویژگی‌ها نتیجه‌ی خواص استثنایی گرافن از جمله مدول یانگ بسیار بالا و استحکام کششی فوق‌العاده آن است که اجازه می‌دهد انرژی حاصل از امواج کاویتاسیون به طور مؤثر جذب یا منحرف شود، بدون آنکه تغییر شکل قابل توجهی در زیرلایه فلزی ایجاد گردد. تحلیل دقیق‌تر نشان داد که لایه‌ی گرافنی با محدود کردن دامنه‌ی نوسانات نیرو و فشار، نقش یک سپر مکانیکی را ایفا کرده و انتقال انرژی مخرب به ساختار فلزی زیرین را به میزان قابل توجهی کاهش داده است. این مکانیسم به طور مستقیم موجب کاهش نرخ رشد ترک‌های سطحی و جلوگیری از تخریب‌های پلاستیک ماندگار می‌شود. بر این اساس می‌توان نتیجه گرفت که استفاده از پوشش‌های مبتنی بر گرافن، یک استراتژی نوید بخش برای افزایش مقاومت سطوح فلزی در برابر پدیده‌های پرانرژی و مخرب نظیر کاویتاسیون می‌باشد. این یافته‌ها می‌توانند مبنای توسعه‌ی فناوری‌های جدید در حوزه‌ی محافظت سطحی، به ویژه در صنایع حساس مانند صنایع دریایی (محافظت از پروانه‌های کشتی، پمپ‌های آب دریا، تجهیزات سونار) و صنایع پزشکی (ابزارهای مبتنی بر امواج اولتراسوند و سیستم‌های میکروکاویتاسیون) قرار گیرند، جایی که مقاومت به کاویتاسیون و دوام طولانی مدت اهمیت حیاتی دارد.

مرجع‌ها

[1] Y. Lin, E. Kadivar, O. El Moctar, J. Neugebauer, T.E. Schellin, “Experimental investigation on the effect of fluid-structure interaction on unsteady cavitating flows around flexible and stiff hydrofoils”, Phys. Fluids. 34 (2022).
[2] M. Dular, B. Bachert, B. Stoffel, B. Sirok, “Relationship between cavitation structures and cavitation damage”, Wear. 257 (2004) 1176–1184.
[3] D. Zhang, J. Guan, C. Shen, S. Tang, J. Zhou, “Dynamic behavior of near-surface nanobubbles formation and development”, J. Mol. Liq. 358 (2022).
[4] A. Zhang, S. Wang, and J. Cui, “Dynamic characteristics of large-scale spark bubbles close to different boundaries,” Phys. Fluids 29, 092107 (2017).
[5] M. Lee, Y. Kim, Y. Oh, Y. Kim, S. Lee, H. Hong, and S. Kim, Wear 255, 157 (2003).
[6] Soldano, C., Mahmood, A., &Dujardin, E., “Production, properties and potential of graphene”. Carbon, 48(8), (2010), 2127–2150.

مطالعه حالت پایه مدل زنجیره ای اسپین-۱/۲XX با برهم‌کنش سه اسپینی ناهمسانگرد

محبوب آج بیشه، نیما[۱]؛ مهدوی فر، سعید[۱]
[۱] گروه فیزیک، دانشگاه گیلان، گیلان

چکیده

در این مقاله، ویژگی‌های حالت پایه مدل زنجیره اسپین-½ XX با برهمکنش سه‌اسپینی ناهمسانگرد با استفاده از تکنیک فرمیونش بررسی شده است. با قطری‌سازی دقیق همیلتونی، رابطه پاشندگی، انرژی حالت پایه و پارامترهای نظم را بررسی می‌کنیم. یافته‌های ما دو فاز بدون گاف را شناسایی می‌کند که با یک خط گذار لیفشیتز از هم جدا شده‌اند: یکی با نظم بلندبرد کایرال و دیگری با نظم بلندبرد کایرال-نماتیک شناخته شده اند.
واژگان کلیدی: فرمیونش، اسپین، برهم‌کنش، زنجیره اسپین ۱/۲، پارامتر نظم خوشه ای

Ground State Analysis of the Spin-1/2 XX Chain Model with Anisotropic Three-Spin Interaction

N. Mahboob[1], S. Mahdavifar[1]
Department of physics, Gilan University, Gilan [1]

Abstract

In this paper, we investigate the ground state properties of the spin-1/2 XX chain model with anisotropic three-spin interaction using the fermionization technique. By exactly diagonalizing the Hamiltonian, we analyze the dispersion relation, ground state energy, and order parameters. Our results reveal two gapless phases separated by the Lifshitz critical line: a composite phase exhibiting both chiral and spin-nematic-I long-range orderings, and a phase characterized by spin-nematic-II long-range ordering.

مقدمه

حالت پایه‌ی کوانتومی، پیکربندی با کم‌ترین انرژی یک سیستم است؛ حالتی که در آن تمام ذرات در پایین‌ترین سطوح انرژی در دمای صفر مطلق قرار دارند. درک ماهیت این حالت برای بررسی پدیده‌های کوانتومی، به‌ویژه در مغناطیس های کوانتومی کم بعد، اهمیت اساسی دارد[1-2]. نمودار فاز حالت پایه، فازهای مختلف را با تغییر پارامترهایی مانند فشار یا میدان مغناطیسی ترسیم می‌کند و گذارهای فاز کوانتومی ناشی از افت و خیزهای کوانتومی را آشکار می‌سازد [3-4].

گذارهای فاز کوانتومی می‌توانند شامل تغییر در گاف انرژی باشند. در گذار از یک فاز گاف دار به فاز دارای گاف دیگر، دو فاز متمایز گاف انرژی خود را حفظ می‌کنند، مانند فاز هالدین در زنجیره اسپین-½ که دارای خواص توپولوژیکی خاصی است[5]. در مقابل، گذار از فاز دارای گاف به فاز بدون گاف زمانی رخ می‌دهد که سیستم از حالت دارای گاف به فاز بدون گاف، مانند فاز مایع لوتینگر در مدل XXZ با تنظیم ناهمسانگردی، تغییر می‌کند[6-8]

گذار فازبدون گاف به بدون گاف به گذار بین دو فاز مختلف بدون گاف در یک سیستم کوانتومی اشاره دارد. در این نوع گذار، سیستم هم قبل و هم پس از گذار بدون گاف باقی می‌ماند، اما ماهیت برانگیختگی های بدون گاف دستخوش تغییر می‌گردد. در سیستم‌های زنجیره اسپین-½ با برهم‌کنش سه‌اسپینی می‌تواند چنین گذار فاز کوانتومی روی دهد. این نوعی برهم‌کنش خوشه‌ای است که در آن گروهی از اسپین‌ها به‌طور جمعی برهم‌کنش دارند. به‌ویژه، برهم‌کنش سه‌اسپینی زمانی رخ می‌دهد که سه اسپین با جمله‌ای که به حاصل‌ضرب مؤلفه‌های اسپین بستگی دارد، کوپل می‌شوند. این برهم‌کنش می‌تواند منجر به پدیده‌هایی مانندواماندگی، درهم‌تنیدگی، و گذارهای فازی کوانتومی شود.

مدل

هامیلتونی مدل زنجیره‌ای یک‌بعدی اسپین-½ نوع XX با برهم‌کنش سه‌اسپینی ناهمسانگرد به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mathcal{H} = J\sum_{n=1}^{N}[S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y] + J'\sum_{n=1}^{N}[(S_n^x S_{n+2}^y + \beta S_n^y S_{n+2}^x)S_{n+1}^z] \qquad (1)$$

که در آن $J>0$ ضریب برهم‌کنش تبادلی آنتی‌فرومغناطیسی دو-اسپینی است. متغیر Nاندازه‌ی سیستم را نشان می‌دهد که برابر با تعداد اسپین‌هاست. در این مدل شرایط مرزی به صورت دوره‌ای فرض شده‌اند، یعنی :

$$S_{n+N}^{\mu} = S_n^{\mu}$$

$$\mu = x, y, z$$

برای تحلیل بهتر، نسبت $\frac{J'}{J} = \alpha$ تعریف می‌شود و استفاده از آن بدون از دست دادن کلیت مسئله مجاز است .

قطری‌سازی

هامیلتونی معادله با استفاده از تبدیلات جردن ویگنر و تبدیلات فوریه و تبدیلات بوگولیوبوف قطری شده و به فرم زیر در می آید:

$$\mathcal{H} = \sum_{k=-\pi}^{\pi} \varepsilon(k)(\gamma_k^{\dagger}\gamma_k - \tfrac{1}{2}) \qquad (2)$$

که طیف انرژی به صورت:

$\varepsilon(k) = \sqrt{(A_k^2 + C_k^2)} + B_k^2$ تعریف میشود که در آن

$$A_k = \cos(k)\,, B_k = \frac{1}{4}\alpha(\beta - 1)\sin(2k),$$

$$C_k = \tfrac{1}{4}\alpha(\beta + 1)\sin(2k), \tan(2\theta_k) = \frac{C_k}{A_k} \qquad (3)$$

حالت پایه‌ی سیستم با پیکربندی‌ای $N\to\infty$در حد ترمودینامیکی متناظر است که در آن تمام حالت‌هایی با انرژی

$\varepsilon(k) \leq 0$ پر هستند وحالت هایی که $0 < \varepsilon(k)$خالی هستند

برای $\beta > 0$ تنها دو نقطه فرمی وجود دارد $k_F = \pm\frac{\pi}{2}$ و حالت پایه اینجا حالت خلا است

و در ناحیه ای که $\beta < 0$ اگر $-\beta \leq \frac{1}{\alpha^2}$ باشد دو نقطه فرمی دیگر ظاهر میشوند که مکان آن ها به صورت زیر داده میشود :

$$k_F^+ = \arcsin\left(\frac{1}{\alpha\sqrt{-\beta}}\right),$$

$$K_F^- = -\pi + \arcsin\left(\frac{1}{\alpha\sqrt{-\beta}}\right) \qquad (4)$$

در این حالت حالت پایه به نوعی تعریف میشود حالت ها در ناحیه ای به اسم λ پر است

$$-\pi \prec k \prec K_F^-, k_F^+ \prec k \prec \pi$$

درنتیجه، یک گذار فاز کوانتومی در مقدار بحرانی زیر رخ می‌دهد:

$$\beta_c = -\frac{1}{\alpha^2} \qquad (5)$$

این گذار بین دو فاز بدون گاف اتفاق می‌افتد: یکی با دو نقطه فرمی و دیگری با چهار نقطه فرمی.

نتایج

گذار فاز در حالت پایه

مطالعه‌مان را با بررسی رابطه‌ی پاشندگی آغاز می‌کنیم، که ابزاری حیاتی برای تحلیل ویژگی‌های ریزساختاری سامانه‌های کوانتومی و درک گذارفاز کوانتومی به‌شمار می‌رود. رابطه‌ی پاشندگی نشان می‌دهد که انرژی شبه‌ذره‌ها چگونه با تکانه‌شان تغییر می‌کند، و در واقع، توزیع ترازهای انرژی را به‌صورت تابعی از بردار موج مشخص می‌سازد. این رابطه اطلاعات کلیدی‌ای درباره‌ی ماهیت برانگیختگی‌های ابتدایی سامانه فراهم می‌کند.

برای نمونه، در یک فاز با گاف، رابطه‌ی پاشندگی وجود یک گاف انرژی مینیمم را نشان می‌دهد، در حالی‌که در یک فاز بدون گاف، این رابطه در نقاطی به انرژی صفر می‌رسد. در نزدیکی گذارهای فاز کوانتومی، رابطه‌ی پاشندگی اغلب رفتار بحرانی از خود نشان می‌دهد؛ مانند ظهور برانگیختگی‌های کم‌انرژی جدید یا تغییرات در ساختار طیف انرژی که نشانه‌ای از گذار بین دو فاز متفاوت است.

در شکل ۱(a) تابع $\varepsilon(k)$ بر حسب K برای زنجیره ای به اندازه ی هزار(N=1000) که به‌اندازه کافی بزرگ است تا حد ترمودینامیکی را بازتولید کند ترسیم شده است در این تحلیل۲ $\alpha = 2$ ومقادیر مختلفی از β از جمله $-1, -0.5, -0.25, 0, 1$ بررسی شده است مقدار بحرانی در این حالت برابر است با$\beta_c = -0.25$

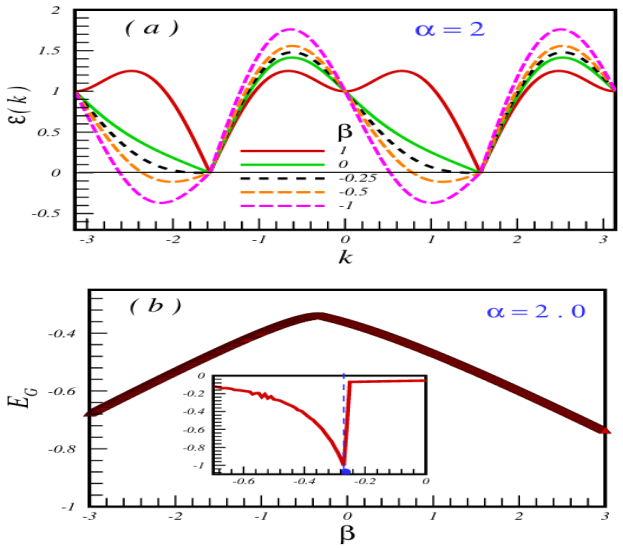
برای $\beta \succ \beta_c$ سامانه تنها دو نقطه فرمی دارد که به ساختار خاصی از سطح فرمی اشاره دارد. اما هنگامی که$\beta \prec \beta_c$شود تغییرات بنیادینی در توپولوژی سطح فرمی رخ می‌دهد که منجر به ظهور چهار نقطه فرمی می‌شود. با وجود این تغییر ساختاری، هر دو ناحیه در طیف انرژی بدون گاف باقی می‌مانند، که نشان‌دهنده‌ی وقوع گذار لیفشیتزدر مدل است.

چگالی انرژی حالت پایه سامانه از رابطه زیر به‌دست می‌آید:

$$E_G = \frac{1}{2N}\sum_{k\in\lambda}\varepsilon(k) - \frac{1}{2N}\sum_{k\notin\lambda}\varepsilon(k) \qquad (9)$$

که در آن λ ناحیه ای است که $\varepsilon(k) \prec 0$.

در شکل ۱(b)، چگالی انرژی حالت پایه به‌عنوان تابعی از β و برای $\alpha = 2.0$ترسیم شده است. درون‌نگاشت این شکل مشتق دوم انرژی حالت پایه نسبت به β را نشان می‌دهد. از نمودارها مشخص است که در مشتق دوم انرژی حالت پایه در نقطه بحرانی β_c ناپیوستگی وجود دارد که دلالت بروقوع گذار فاز کوانتومی پیوسته دارد.



شکل ۱

در سامانه‌های کوانتومی با بسیاری از درجات آزادی، توابع پاسخ و به‌ویژه پارامترهای نظم ابزارهایی حیاتی برای تشخیص و تمایز بین ناحیه‌های مختلف در فضای حالت پایه‌اند. این پارامترها در فازهای نامنظم (بی‌نظم) صفر هستند، که بیانگر تقارن است، و در فازهای منظم به مقدار غیرصفر میل می‌کنند که نشانه‌ی شکست تقارن است. اهمیت پارامترهای نظم فراتر از طبقه‌بندی فازهاست؛ این پارامترها ماهیت گذارهای فاز کوانتومی را آشکار می‌کنند. چنین گذارهایی ممکن است پیوسته و از نوع مرتبه دوم، یا ناپیوسته و از نوع مرتبه اول باشند.

پارامترهای نظم کلاستری که از برهم‌کنش بین سه یا تعداد بیشتری از عملگرهای اسپین ساخته می‌شوند، شناساگرهایی مؤثر برای فازهای کوانتومی پیچیده محسوب می‌شوند. گرچه این پارامترها ممکن است تعریف سنتی نظم بلندبرد را برآورده نکنند، اما با ثبت همبستگی‌های موضعی اسپین و کشف پدیده‌های نوظهور، ابزارهایی قوی در توصیف فازهای خاص به‌شمار می‌روند.

مدلی که در این‌جا بررسی می‌شود هیچ نوع مغناطش خالصی تولید نمی‌کند. بنابراین، برای تحلیل دقیق ماهیت فازهای بی‌گاف مختلف در مدل، ما پارامترهای نظم کلاستری را محاسبه می‌کنیم که به‌صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$Cl^{-} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\langle(S_n^x S_{n+2}^y - S_n^y S_{n+2}^x)s_{n+1}^z\rangle,$$

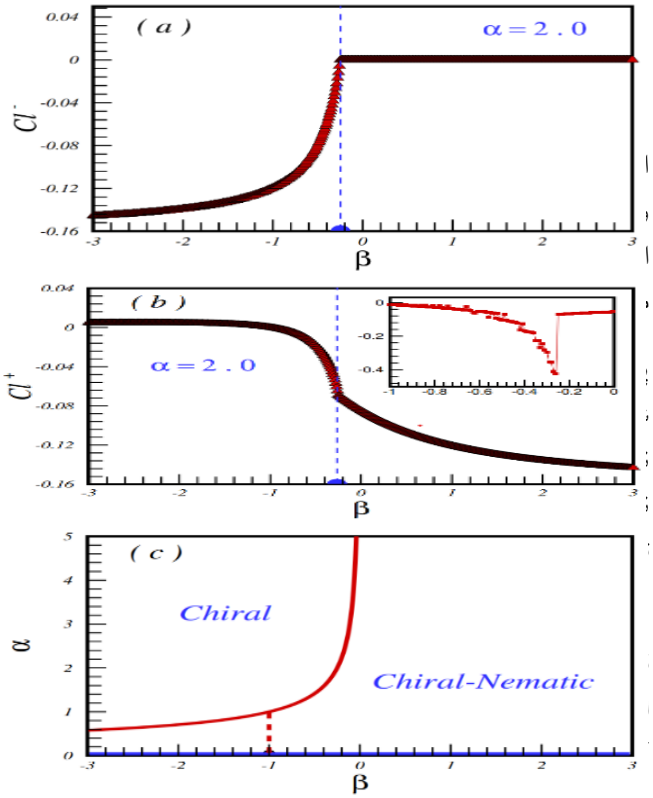
$$= -\frac{1}{2N}\sum_{k\in\lambda}\sin(2k)$$

$$Cl^{+} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\langle(S_n^x S_{n+2}^y + S_n^y S_{n+2}^x)s_{n+1}^z\rangle,$$

$$= \frac{1}{2}\sum \sin(2k)\sin(2\theta_k)$$

منفرد، به‌صورت ترجیحی در دو محور متعامد ظاهر می‌شود. این فاز، که با عنوان فاز اسپین–نماتیک کوانتومی شناخته می‌شود تفاوت اساسی Cl^{+} با پارامترهای معمول نماتیکی در این است که اگرچه نماتیک سنتی تقارن وارونگی زمان را حفظ می‌کند، پارامتر Cl^{+} به‌سبب داشتن ترکیبی از مؤلفه‌های مختلط اسپین در جهات مختلف، بخشی از آن تقارن را می‌شکند و نوعی ویژگی کایرال‌مانند به خود می‌گیرد. بنابراین، این پارامتر نه فقط نظم نماتیک را توصیف می‌کند، بلکه مؤلفه‌ای از کایرالیتی نیز دارد. بدین‌ترتیب، Cl^{+}یک پارامتر نظم کایرال–نماتیک است که ماهیتی ترکیبی دارد، و وجود همزمان همبستگی‌های جهت‌دار از نوع نماتیک و چرخشی از نوع کایرال را ثبت می‌کند.

شکل۲ (a,b) نتایج پارامترهای نظم کلاستری (خوشه ای) Cl^{-}, Cl^{+} به‌عنوان تابعی از β در $\alpha = 1$ برای یک سیستم زنجیره‌ای با هزار ذره (N=1000) ارائه شده‌اند. در داخل شکل۲(b)، نتایج مشتق اول Cl^{+} نسبت به βنشان داده شده است. **شکل۲**(c) نمودار فاز حالت پایه نسبت به α, β درα=0، که سیستم زنجیره اسپین–½ XX خالص تبدیل می‌شود، حالت پایه در فاز مایع لوتینگر قرار می‌گیرد. به‌طور مشابه، وقتی β= -1 و $\alpha < 1$ حالت پایه همچنان در فاز مایع لوتینگر باقی می‌ماند. در امتداد این خطوط، هیچ نشانه‌ای از نظم خوشه‌ای مشاهده نمی‌شود.



شکل ۲

نتیجه گیری

در این پژوهش، ما حالت پایه‌ی مدل زنجیره اسپین-½ XX با برهم‌کنش سه‌اسپینی ناهمسانگرد را به طور کامل تحلیل کردیم. با اعمال تبدیل جردن-ویگر و قطری‌سازی دقیق همیلتونی، خواص حالت پایه و ساختار فازی سامانه به دست آمد.

نتایج ما نشان داد که:

با تغییر پارامتر ناهمسانگردی

β ، سامانه بین دو فاز بدون گاف متفاوت گذار می‌کند:

فاز کایرال (با نظم کایرال بلند برد).

فاز کایرال-نماتیک (با نظم بلند برد کایرال-نماتیک).

این دو فاز توسط یک گذار بحرانی لیفشیتز بدون گاف از هم جدا می‌شوند.

مرجع ها

[1] A. N. Vasiliev, O. S. Volkova, E .A. Zvereva, M. M. Markina, Low-dimensional magnetism, CRC Press, ISBN 9781032239002 (2019).

[2] A. Vasiliev, O. Volkova, E. Zvereva and M. Markina, Milestones of low-D quantum magnetism, npj Quant. Mater. 3, 18 (2018).

[3] S. Sachdev, Quantum Phase Transitions, 2nd ed. Cam bridge University Press, (2011).

[4] Matthias Vojta, Quantum Phase Transitions, Rep. Prog. Phys. 66, 2069 (2003).

[5] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. 50, 1153 (1983).

[6] A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan and A. M. Tsvelik, Bosonization and strongly correlated systems , (Cam bridge University Press 1998).

[7] T. Giamarchi, Quantum Physics in One Dimension , (Clarendon Press, Oxford 2004).

[8] M. Takahashi, Thermodynamics of One Dimensional Solvable Models , (Cambridge University Press 1998).

[9] G. Wen, F. Wilczek, and A. Zee, Phys. Rev. B 39 11413 (1989).

[10] R. Mao, Y.-W. Dai, S. Y. Cho, and H.-Q. Zhou, Phys. Rev. B 103, 014446 (2021).

[11] W. Yang, A. Nocera, E. S. Srensen, H.-Y. Kee and I. A eck, Phys. Rev. B 103, 054437 (2021).

[12] S. Mahdavifar, D. C. Liu, Sci. Rep. 14, 30024 (2024).

[13] M. Abbasi, S. Mahdavifar, M. Motamedifar, Scipost phys. core. 8, 001 (2025).

شناسایی نقاط گذار همگامی با استفاده از شبکه‌های عصبی عمیق

موذن، نجمه[۱]؛ نریمانی، زهرا[۲]؛ زارعی، مینا[۱]

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

[۲] دانشکده علوم رایانه و فناوری اطلاعات، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، زنجان

چکیده

دینامیک یک شبکه متأثر از ساختار آن است. با این حال، در بسیاری از شبکه‌های پیچیده مانند مغز، ساختار دقیق شبکه به‌طور کامل شناخته شده نیست. اطلاعات موجود عمدتاً محدود به سری‌های زمانی و داده‌های ثبت‌شده از فعالیت شبکه طی آزمایش‌های مختلف است. در این پژوهش، هدف آن است که با تحلیل سری‌های زمانی مربوط به دینامیک گره‌های شبکه، نقاط گذار همگامی شناسایی شود. برای دستیابی به این هدف، از روش‌های مبتنی بر شبکه‌های عصبی عمیق بهره گرفته شده است.

واژگان کلیدی: *مدل کوراموتو، شبکه‌های عصبی عمیق، نقطه گذار همگامی*

Identifying Synchronization Transition Points Using Deep Neural Networks

Moazzen, Najmeh[1]; Narimani, Zahra[2]; Zarei, Mina[1]

[1] *Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan*

[2] *Department of Computer Science and Information Technology, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan*

Abstract

The dynamics of a network are influenced by its structure. However, in many complex networks, such as the brain, the exact structure remains largely unknown. The available information is mostly limited to time series and recorded activity data from experiments. In this study, the goal is to identify the synchronization transition points by analyzing time series related to the dynamics of the network nodes. To achieve this, methods based on deep neural networks have been employed.

Keywords*: Kuramoto model, Deep neural networks, Synchronization transition point*

مقدمه

یکی از پدیده‌های بنیادی و گسترده در دینامیک سامانه‌های پیچیده، همگامی است. همگامی نقش محوری در عملکرد صحیح بسیاری از سامانه‌های طبیعی و مصنوعی ایفا می‌کند. نمونه‌هایی از بروز این پدیده در طبیعت شامل فعالیت‌های نورونی در مغز، تپش هماهنگ سلول‌های قلبی، و رفتار جمعی کرم‌های شب‌تاب در تولید نور هماهنگ است [1].

اخیرا استفاده از رویکردهای یادگیری عمیق پیشرفت‌های چشمگیری را در حوزه‌های مختلف علوم و مهندسی ممکن ساخته است. این روش‌ها با ارائه ابزارهای تحلیلی پیشرفته، امکان بررسی دقیق‌تر و پیش‌بینی رفتار سامانه‌های پیچیده را فراهم کرده‌اند. مطالعه سیگنال‌های آشوبناک این سامانه‌ها، راهی برای درک عمیق‌تر ویژگی‌های دینامیکی و پیش‌بینی تحول آن‌ها ارائه می‌دهد. رویکردهای یادگیری عمیق، به‌طور مؤثری شناسایی همکاری و تعامل میان اجزای عصبی را تسهیل کرده‌اند. همگامی در الگوهای آشوبناک، که حاصل تعاملات پیچیده میان شمار زیادی از عناصر عصبی است، می‌تواند نشانه‌ای از دستیابی سامانه به یک وضعیت پایدار باشد. از این رو، گذار فاز از حالت بی‌نظم به حالت منظم، یکی از موضوعات اساسی در مطالعه این سامانه‌ها به‌شمار می‌رود [2].

در این پژوهش، تمرکز بر به‌کارگیری الگوریتم‌های یادگیری عمیق برای تحلیل گذار فازهای پیوسته و ناپیوسته در سامانه‌هایی است که طی فرآیند گذار از ناهمگامی به همگامی، رفتارهای آشوبناک از خود نشان می‌دهند.

شبیه‌سازی گذار فاز همگامی

همگامی یک الگوی جمعی در مقیاس ماکروسکوپی است که از تعامل نوسانگرهای مختلف تولید می‌شود. مدل کوراموتو شامل N نوسانگر جفت‌شده است که از طریق یک جمله غیرخطی با یکدیگر برهمکنش دارند. دینامیک گره‌های شبکه‌ای از نوسانگرها می‌تواند با رابطه ساکاگوچی–کوراموتو مدل شود [3]. بنابراین دینامیک تحول فازی گره i ام در دو لایه I و II را می‌توان به صورت زیر تعریف کرد:

$$\dot{\theta}_i^{\mathrm{I}} = \omega_i^{\mathrm{I}} + \frac{\sigma}{N}\sum_{j=1}^{N}\sin(\theta_j^{\mathrm{I}} - \theta_i^{\mathrm{I}}) + \lambda\sin(\theta_i^{\mathrm{II}} - \theta_i^{\mathrm{I}} + \alpha),$$

$$\dot{\theta}_i^{\mathrm{II}} = \omega_i^{\mathrm{II}} + \frac{\sigma}{N}\sum_{j=1}^{N}\sin(\theta_j^{\mathrm{II}} - \theta_i^{\mathrm{II}}) + \lambda\sin(\theta_i^{\mathrm{I}} - \theta_i^{\mathrm{II}} + \alpha).$$

در این‌جا $\theta_i^{\mathrm{I(II)}}$ و $\omega_i^{\mathrm{I(II)}}$ به ترتیب فاز و فرکانس ذاتی گره i ام در لایه I یا II است. σ و λ به ترتیب نشانگر قدرت جفت‌شدگی درون‌لایه‌ای و بین‌لایه‌ای و α پارامتر ناکامی است.

همچنین میزان همگامی سامانه در هر لایه از شبکه، توسط پارامتر نظم مختلط که در حد $t \to \infty$ به صورت زیر:

$$r^{\mathrm{I(II)}}e^{i\psi^{\mathrm{I(II)}}} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}e^{i\theta_j^{\mathrm{I(II)}}}, \qquad (۳)$$

کمی می‌شود که در آن r میزان همدوسی فاز جمعیت هر لایه و ψ زاویه فاز متوسط آن لایه را نشان می‌دهد.

این مدل نشان می‌دهد که با افزایش قدرت جفت‌شدگی درون‌لایه‌ای نوسانگرها گرایش بیشتری به همگامی فازهای خود پیدا می‌کنند. برای مقادیر کوچک قدرت‌جفت‌شدگی درون‌لایه‌ای رفتار سیستم ناهمگام است و نوسانگرها تقریباً مستقل عمل می‌کنند، در حالی که با عبور از یک آستانه بحرانی، یک گذار فاز به سمت همگامی جمعی رخ می‌دهد.

در حالت کلی دو نوع گذار فاز وجود دارد که شامل گذار فاز مرتبه اول و مرتبه دوم است. در گذار فاز مرتبه اول، تغییر حالت ماده به صورت ناگهانی و با تغییر پارامتر کنترل، پارامتر نظم به طور ناپیوسته تغییر می‌یابد. در گذار فاز مرتبه دوم، با تغییر پارامتر کنترلی پارامتر نظم به مرور و به طور پیوسته تغییر می‌کند. در مدل کوراموتو گذار فاز از حالت ناهمگام به همگام، می‌تواند از هر دو نوع گذار فاز ناپیوسته (مرتبه اول) یا پیوسته (مرتبه دوم) باشد.

در این مطالعه از یک شبکه دو لایه استفاده شده، که هر لایه آن، یک شبکه کاملا متصل و شامل ۱۰۰۰ گره است. فاز اولیه نوسانگرها به صورت تصادفی از تابع توزیع یکنواخت در بازه $-\pi < \theta_i^{I(II)} \leq \pi$ انتخاب شده است. دینامیک سیستم با استفاده از روش رانگ-کوتای مرتبه‌ی چهارم و گام‌های زمانی ۰/۰۱ برای ۴۰۰۰۰ گام زمانی محاسبه شده است. برای پیدا کردن میزان همگامی نهایی شبکه، میانگین زمانی r برای ۸۰ درصد پایانی مدت زمان اجرا، یعنی بعد از رسیدن سامانه به حالت پایا محاسبه شده است. همچنین λ برابر با ۱۰ در نظر گرفته شده است.

در مطالعات پیشین، نشان داده شده که ساختار شبکه، دینامیک اجزای آن و عواملی چون پارامتر ناکامی و چینش فرکانس ذاتی می‌توانند بر نوع گذار فاز از حالت ناهمگام به همگام تأثیر بگذارند [5,4]. از آن‌جا که نحوه چینش فرکانس ذاتی گره‌ها در دینامیک شبکه‌های دولایه تاثیر به سزایی دارد، در همه شبیه‌سازی‌ها، فرکانس ذاتی گره‌ها در لایه I در بازه $-0/5 \leq \omega_i^I \leq 0/5$ از کم به زیاد مرتب می‌شوند. در لایه II مقادیر فرکانس‌ها مشابه لایه I است با این تفاوت که چینش آن به گونه‌ای است که از رابطه زیر:

$$\Delta\omega = \frac{\sum_{i=1}^{N}|\omega_i^I - \omega_i^{II}|}{2\sum_{i=1}^{N}|\omega_i^I|},$$

تبعیت می‌کند و میانگین اختلاف فرکانس‌های گره‌های نظیر در لایه‌ها، یعنی $\Delta\omega$، برابر با ۰/۸ فرض می‌شود. در این مقاله، اختلاف فرکانسی بین دو لایه به دو صورت **تصادفی** و **منظم** ایجاد می‌شود.

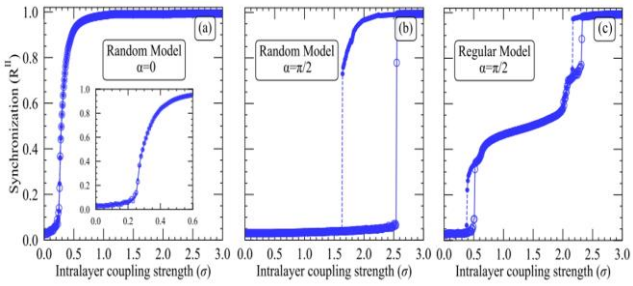
برای ایجاد اختلاف فرکانس تصادفی، ابتدا فرکانس‌های لایه II را مشابه لایه I به ترتیب صعودی مرتب کرده، سپس با جابجایی تصادفی فرکانس مربوط به هر گره به مقدار $\Delta\omega = 0/8$ میرسیم. همچنین برای ایجاد اختلاف فرکانس منظم، ابتدا فرکانس‌های لایه II را مشابه لایه I به ترتیب صعودی مرتب کرده، سپس با جابجایی متوالی اولین و آخرین فرکانس‌ها و محاسبه $\Delta\omega$ جدید، روند را تا رسیدن به مقدار $\Delta\omega = 0/8$ ادامه می‌دهیم [5].

با تنظیم پارامتر ناکامی $\alpha = 0$ و تنظیم فرکانس ذاتی لایه II به صورت تصادفی، گذار فاز پیوسته (مرتبه دوم) ملاحظه می‌شود که در شکل ۱(a) نشان داده شده است.

با تنظیم پارامتر ناکامی $\alpha = \frac{\pi}{2}$ و تنظیم فرکانس ذاتی لایه II به صورت تصادفی، گذار فاز ناپیوسته (مرتبه اول) ملاحظه می‌شود که در شکل ۱(b) نشان داده شده است.

با تنظیم پارامتر ناکامی $\alpha = \frac{\pi}{2}$ و تنظیم فرکانس ذاتی لایه II به صورت منظم، گذار فاز ناپیوسته طی دو مرحله قابل مشاهده است که در شکل ۱(c) نشان داده شده است.

لازم به ذکر است که در تمام گذار فازهای نمایش داده شده در شکل ۱، پارامتر نظم همگامی مربوط به لایه II است، زیرا گذار فازها در هر دو لایه از شبکه رفتار مشابهی از خود نشان می‌دهند.



شکل ۱: گذار فاز از حالت ناهمگام به همگام برای لایه **II** با تغییر قدرت جفت‌شدگی درون‌لایه‌ای در یک شبکه دولایه. خطوط ممتد با نقاط پر نشده، گذارهای رو به جلو را نشان می‌دهند، در حالی که خط‌چین‌ها با نقاط پر شده، گذارهای رو به عقب را نشان می‌دهند [5]. **(a)** گذار فاز پیوسته با $\boldsymbol{\alpha = 0}$ و توزیع فرکانس ذاتی لایه **II** تصادفی. نقطه بحرانی در $\boldsymbol{\sigma = 0/29}$ اتفاق می‌افتد (نقطه‌ای که تقعر منحنی عوض می‌شود). **(b)** گذار فاز ناپیوسته با $\boldsymbol{\alpha = \frac{\pi}{2}}$ و توزیع فرکانس ذاتی لایه **II** تصادفی. نقطه بحرانی در $\boldsymbol{\sigma = 1/64}$ اتفاق می‌افتد. **(c)** گذار فاز ناپیوسته دو مرحله‌ای با $\boldsymbol{\alpha = \frac{\pi}{2}}$ و توزیع فرکانس ذاتی لایه **II** منظم. نقطه بحرانی در $\boldsymbol{\sigma = 0/39}$ و در $\boldsymbol{\sigma = 2/18}$ اتفاق می‌افتد.

نتایج مبتنی بر یادگیری عمیق

هدف این مطالعه، شناسایی نقاط گذار در شبکه‌های معرفی‌شده در بخش پیشین، تنها بر اساس داده‌های سری زمانی تحول فازهای نوسانگرها است. این مسئله به صورت یک مسئله طبقه‌بندی نظارت‌شده تعریف شده است.

برای این منظور، سیستم به گونه‌ای آموزش داده شده است که با دریافت فاز نوسانگرها (در گذارهای رو به عقب) به عنوان ورودی شبکه عصبی عمیق، بتواند بین حالت‌های همگام و ناهمگام تمایز قائل شود. به منظور پیش‌پردازش داده‌های ورودی و در نظر گرفتن ماهیت چرخه‌ای فازها، از تبدیل کسینوس و سینوس برای هر فاز استفاده شده است.

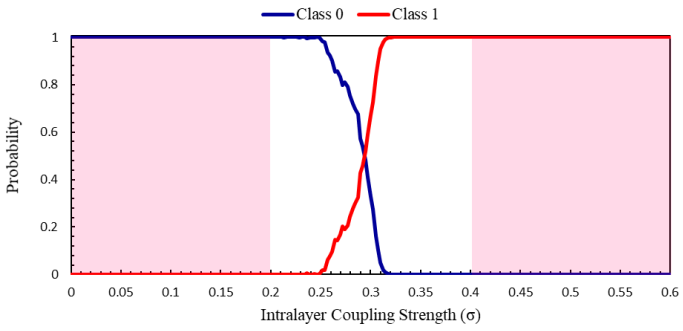
یک شبکه عصبی عمیق با سه لایه پنهان، هر کدام شامل ۱۲۸ نورون مصنوعی، طراحی شده است. برای بهبود پایداری و سرعت همگرایی آموزش، نرمال‌سازی دسته‌ای بین لایه‌های متوالی به کار رفته است. در این ساختار، برای لایه‌های پنهان از تابع فعال‌سازی تانژانت هیپربولیک و برای لایه خروجی از تابع softmax استفاده شده است. به منظور آموزش مدل، از تابع زیان آنتروپی متقاطع دودویی و بهینه‌ساز RMSprop بهره گرفته شده است [2].

برای مجموعه داده‌های آموزشی، هر اسنپ‌شات زمانی بر اساس روش کدگذاری وان-هات برچسب‌گذاری شده است. در مورد گذار فازهای پیوسته و ناپیوسته که نتایج شبیه‌سازی آن‌ها به ترتیب در شکل ۱(a) و ۱(b) ارائه شده است، داده‌های ورودی (اسنپ‌شات زمانی فاز گره‌های شبکه) به دو ناحیه زیربحرانی با برچسب (۱,۰) و فرابحرانی با برچسب (۰,۱) تفکیک شده‌اند.

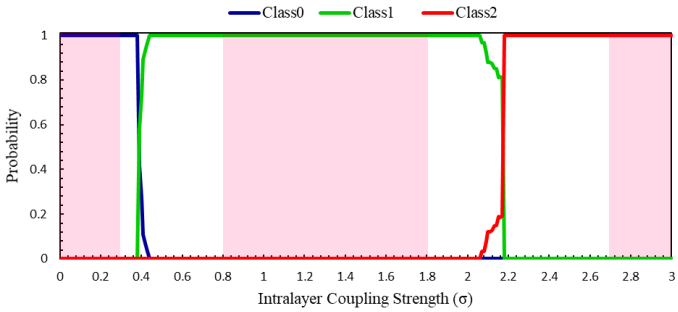
شبکه عصبی آموزش‌دیده، برای هر مقدار مشخص از قدرت جفت‌شدگی درون‌لایه‌ای، دو خروجی تولید می‌کند که به ترتیب احتمال قرار گرفتن سیستم در ناحیه زیربحرانی و فرابحرانی را نشان می‌دهد. نتایج این پیش‌بینی‌ها برای گذار فاز پیوسته توسط شبکه عصبی، که شبیه‌سازی آن در شکل ۱(a) نمایش داده شده بود، در شکل ۲ ارائه شده است. همچنین، نتایج مربوط به پیش‌بینی گذار فاز ناپیوسته، که در شکل ۱(b) شبیه‌سازی شده بود، در شکل ۳ نشان داده شده است.

در مورد گذار فاز ناپیوسته دو مرحله‌ای که نتایج شبیه‌سازی آن در شکل ۱(c) ارائه شده است، داده‌ها به سه ناحیه زیربحرانی با برچسب (۱,۰,۰)، ناحیه میانی با برچسب (۰,۱,۰) و ناحیه فرابحرانی با برچسب (۰,۰,۱) تفکیک شده‌اند. شبکه عصبی آموزش‌دیده، برای هر مقدار مشخص از قدرت جفت‌شدگی، سه خروجی تولید می‌کند که به ترتیب احتمال قرار گرفتن سیستم در ناحیه زیربحرانی، میانی یا فرابحرانی را نشان می‌دهد. نتایج این پیش‌بینی‌های شبکه عصبی برای این گذار فاز، که شبیه‌سازی آن در شکل ۱(c) نمایش داده شده بود، در شکل ٤ ارائه شده است.

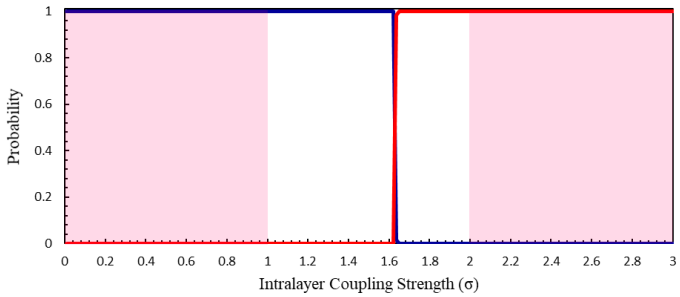
در شکل‌های ۲ و۳ و ٤ ناحیه هاشورخورده صورتی‌رنگ شامل قدرت جفت‌شدگی‌های استفاده‌شده در مرحله آموزش و ناحیه بدون هاشور شامل قدرت جفت‌شدگی‌های مرحله آزمایش است.



شکل ۲: خروجی شبکه عصبی آموزش‌دیده برای گذار فاز پیوسته مطابق با شبیه‌سازی شکل ۱(a). احتمال زیربحرانی بودن با منحنی آبی و احتمال فرابحرانی بودن با منحنی قرمز نمایش داده شده است. نقطه تقاطع دو خروجی در $\sigma = 0/29$ نشان‌دهنده نقطه بحرانی پیش‌بینی‌شده سامانه است.



شکل ۳: خروجی شبکه عصبی آموزش‌دیده برای گذار فاز ناپیوسته مطابق با شبیه‌سازی شکل ۱(b). احتمال زیربحرانی بودن با منحنی آبی و احتمال فرابحرانی بودن با منحنی قرمز نمایش داده شده است. نقطه تقاطع دو خروجی در $\boldsymbol{\sigma = 1/64}$ نشان‌دهنده نقطه بحرانی پیش‌بینی‌شده سامانه است.



شکل ٤: خروجی شبکه عصبی آموزش‌دیده برای گذار فاز ناپیوسته دو مرحله‌ای مطابق با شبیه‌سازی شکل ۱(c). احتمال زیربحرانی بودن با منحنی آبی، احتمال میانی بودن با منحنی سبز و احتمال فرابحرانی بودن با منحنی قرمز نمایش داده شده است. نقطه تقاطع کلاس ۰ و کلاس ۱ در $\boldsymbol{\sigma = 0/39}$ و نقطه تقاطع کلاس ۱ و کلاس ۲ در $\boldsymbol{\sigma = 2/18}$ نشان‌دهنده نقاط بحرانی پیش‌بینی‌شده سامانه است.

نتیجه‌گیری

با مقایسه نقطه گذار شبیه‌سازی شکل ۱(a) و نقطه گذار پیش‌بینی‌شده توسط شبکه عصبی در شکل ۲، مشخص می‌شود که مدل یادگیری عمیق توانسته است نقطه گذار همگامی را با دقت بالایی شناسایی کند. همین روند در مقایسه نتایج شکل ۱(b) و ۱(c) با پیش‌بینی‌های متناظر در شکل‌های ۳ و ٤ نیز مشاهده می‌شود؛ به‌طوری که نقاط گذار پیش‌بینی‌شده به‌طور قابل توجهی با نقاط واقعی گذار فاز حاصل از شبیه‌سازی مطابقت دارند. این تطابق دقیق نشان‌دهنده کارایی و اعتبار شبکه عصبی توسعه‌یافته در تحلیل سری‌های زمانی دینامیک شبکه است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهند که استفاده از روش‌های مبتنی بر شبکه‌های عصبی عمیق می‌تواند تنها بر اساس داده‌های سری زمانی دینامیک شبکه، ابزاری مؤثر برای شناسایی نقاط گذار فاز در شبکه‌های پیچیده فراهم کند.

یکی از چالش‌های اصلی در سامانه‌های پیچیده، ناشناخته بودن ساختار دقیق شبکه مغز است. تاکنون بیشتر اطلاعات موجود به داده‌های زمانی فعالیت‌های مغزی محدود شده و ساختار کامل شبکه همچنان نامشخص باقی مانده است. این امر انگیزه‌ای ایجاد کرده تا با تحلیل سری‌های زمانی حاصل از دینامیک شبکه‌ها، بدون اطلاع از ساختار شبکه، به بررسی نحوه عملکرد شبکه بپردازیم. داده‌های زمانی با ارائه اطلاعات ارزشمند درباره فعالیت شبکه، زمینه مطالعه الگوها و روابط ساختاری را فراهم می‌کنند.

مرجع‌ها

[1] Strogatz, S.; *"Sync: How Order Emerges from Chaos in the Universe, Nature, and Daily Life"*; Hachette Books (2003).

[2] Song, J. U., Choi, K., Oh, S. M., Kahng, B.; "Exploring nonlinear dynamics and network structures in Kuramoto systems using machine learning approaches"; *Chaos* **33**, No. 7 (2023) 073148.

[3] Sakaguchi, H., Kuramoto, Y.; "A Soluble Active Rotator Model Showing Phase Transitions via Mutual Entrainment"; *Progress of Theoretical Physics* **76**, No. 3 (1986) 576–581.

[4] Kumar, A., Jalan, S.; "Explosive synchronization in interlayer phase-shifted Kuramoto oscillators on multiplex networks"; *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science* **31**, No. 4 (2021) 041103.

[5] Seif, A., Zarei, M.; "Double hysteresis loop in synchronization transitions of multiplex networks: The role of frequency arrangements and frustration"; *Chaos, Solitons & Fractals* **196** (2025) 116412.

تأثیر بازآرایی آنتی‌هب بر همگامی شبکه‌ی نوسانگرهای کوراموتو مرتبه دوم

گل‌محمدی، سولماز[1]؛ زارعی، مینا[1]

[1] گروه فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی زنجان، زنجان

چکیده

*یکی از مکانیزم‌های شناخته‌شده‌ی یادگیری در شبکه‌های عصبی مغز قاعده‌ی آنتی‌هب است. طبق این قاعده، اتصال نورون‌هایی که به صورت هم‌زمان فعالیت می‌کنند، در طول زمان تضعیف می‌شود. تحقیقات پیشین نشان داده‌اند که در شبکه‌ای از نوسانگرهای کوراموتوی مرتبه‌ی اول، این قاعده موجب تقویت **همگامی سراسری** و ایجاد **همبستگی مثبت بین درجه گره‌ها** و **اندازه‌ی فرکانس ذاتی** آن‌ها می‌شود. در مدل کوراموتو، از پارامتر لختی صرف‌نظر می‌شود. در این مقاله نشان می‌دهیم که بازآرایی آنتی‌هب، بسته به مقدار **پارامتر لختی**، منجر به ساختار و همگامی متفاوتی می‌شود.*

***واژگان کلیدی**: مدل کوراموتو مرتبه‌ی دوم، بازآرایی آنتی‌هب، همگامی*

The effect of Anti-Hebbian rewiring on the network of second-order Kuramoto oscillators

Golmohammadi, Solmaz [1]; Zarei, Mina[1]

[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan

Abstract

One of the well-known learning mechanisms in brain neural networks is the anti-Hebbian rule. According to this rule, the connection between neurons that are active simultaneously weakens over time. Previous research has shown that in a network of first-order Kuramoto oscillators, this rule enhances global synchronization and creates a positive correlation between node degrees and the magnitude of their intrinsic frequencies. In the Kuramoto model, the inertia parameter is neglected. In this paper, we show that anti-Hebbian rewiring, depending on the value of the inertia parameter, leads to different structure and synchronization.

***Keywords**: second-order Kuramoto model, Anti-Hebbian rewiring, synchronization*

مقدمه

همگامی پدیده‌ای است که در حوزه‌های مختلفی مانند اتصالات جوزفسون، جمعیت‌های نورونی و رفتار جمعی کرم‌های شب‌تاب مشاهده می‌شود [۱-۲]. یکی از ساده‌ترین مدل‌های ریاضی برای توصیف پدیده‌ی همگامی، مدل کوراموتو است که دینامیک تحول

فاز مجموعه‌ای از نوسانگرهای فازی ساده و متصل به هم را به کمک N معادله‌ی دیفرانسیل مرتبه‌ی اول غیرخطی توصیف می‌کند[۳-۵]. این مدل ساده شده، با وجود اینکه در بسیاری از موارد قابلیت توصیف پدیده‌های طبیعی را دارد اما با برخی از مشاهدات ناسازگار است. به طور مثال زمان رسیدن به همگامی چشمک زدن کرم‌های شب‌تاب معمولا کندتر از چیزی است که مدل کوراموتو پیش‌بینی می‌کند. در مدل کوراموتو فرض می‌شود که نوسانگرها بدون هیچ مقاومت و لختی‌ای بر یک‌دیگر تاثیر می‌گذارند. یکی از روش‌های نزدیک‌تر کردن مدل نوسانگرهای فازی استفاده از مدل کوراماتو مرتبه‌ی دوم است که با افزودن پارامتر لختی، شتاب نوسانگر را نیز در نظر می‌گیرد. این تصحیح با افزایش لختی به مدل نوسانگر هماهنگ ساده، روش ایده‌الی برای واقعی‌تر کردن مدل کوراموتو فراهم می‌کند. به طور مثال به کمک این تغییر، زمان به دست آمده برای رسیدن به همگامی در کرم‌های شب‌تاب به واقعیت نزدیک‌تر است[۶]. در مطالعات قبلی از مدل کوراموتو مرتبه‌ی دوم برای بررسی همگامی در شبکه‌های اتصال برق، رفتارهای جمعیت‌های نورونی و اتصالات جوزفسونی استفاده شده است[۷-۹]. بررسی‌های قبلی نشان داده که افزودن لختی می‌تواند روی دینامیک همگامی اثر بگذارد، به عنوان مثال نوع گذار فاز همگامی را به گذار فاز مرتبه‌ی اول تغییر می‌دهد[۱۰]. همچنین منجر به ناپایداری برخی از نقاط ثابت دینامیک می‌شود[۱۱].

مطالعات انجام شده روی شبکه‌های پیچیده نشان داده که همانطور که ساختار شبکه روی دینامیک همگامی اثر می‌گذارد، دینامیک نیز می‌تواند ساختار را تغییر دهد. این هم‌تکاملی دینامیک و ساختار می‌تواند منجر به بهبود همگامی، پیدایش خوشه‌های دینامیکی، یا حتی رفتارهای جمعی پیچیده شود که صرفاً با فرض ساختار ثابت شبکه قابل توجیه نیست[۱۲]. بسیاری از سیستم‌های واقعی دارای ساختاری پویا هستند. به عنوان مثال؛ فرآیند یادگیری در مغز با پویایی ساختار مغز توجیه می‌شود. یادگیری آنتی‌هب یک قاعده‌ی سازگاری در شبکه‌های عصبی است که بر خلاف یادگیری هبین، تمایل دارد اتصالات بین نورون‌هایی را تقویت کند که رفتارهای غیرهمگام دارند. در این رویکرد، اتصالات میان نوسانگرهایی که فازهای متفاوت‌تری دارند حفظ یا تقویت می‌شود، و برعکس، ارتباط میان نوسانگرهای هم‌فاز تضعیف یا حذف می‌شود[۱۳-۱۵].

پژوهش‌ها نشان داده‌اند که قواعد سازگاری آنتی‌هب، باعث می‌شود ساختار شبکه به سمت ساختارهایی با همبستگی مثبت بین درجه گره‌ها و اندازه‌ی فرکانس میل کند. این ساختار همان ساختار بهینه برای همگامی نوسانگرهای کوراموتوی مرتبه‌ی اول است. در واقع تغییر ساختار به کمک قاعده‌ی آنتی هب باعث همگامی کلی شبکه می‌شود[۱۶].

در این پژوهش اثر لختی در تغییر ساختار شبکه توسط قاعده‌ی آنتی‌هب را با استفاده از مدل کوراموتو مرتبه‌ی دوم بررسی می‌کنیم. با اعمال یادگیری آنتی‌هب بر روی شبکه‌ی نوسانگرهای کوراموتو مرتبه‌ی دوم نشان دادیم که ساختار بهینه برای شبکه با افزودن لختی و میرایی تغییر می‌کند و با اینکه در لختی‌های پایین می‌توان ساختار و همگامی شبکه را مشابه کوراماتو مرتبه اول دید، اما یادگیری آنتی هب در لختی‌های بالا منجر به همگامی شبکه نمی‌شود.

مدل پیشنهادی و روش شبیه‌سازی

مدل کوراموتو مرتبه دوم که از اتصال N نوسانگر فازی با مقاومت و لختی تشکیل شده است به صورت زیر معرفی می‌شود:

$$m\frac{d^2\theta_i}{dt^2} = \alpha\frac{d\theta_i}{dt} + \omega_i + \frac{K}{N}\sum_j A_{ij}sin(\theta_j - \theta_i)$$

که در آن m ضریب لختی و α ضریب میرایی است. ω_i فرکانس ذاتی نوسانگر i ام را نشان می‌دهد و θ_i نیز فاز لحظه‌ای این نوسانگر است. در این جا K ثابت جفت‌شدگی و A_{ij} درایه‌های ماتریس

مجاورت شبکه هستند. به طوری که اگر دو گره به هم متصل بشند $A_{ij} = ۱$ و در غیر این صورت مساوی صفر است.

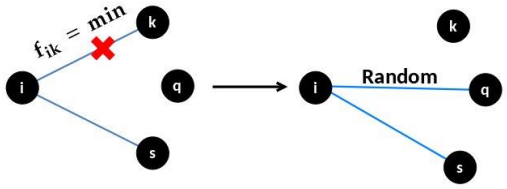
برای کمی کردن میزان همگامی شبکه پارامتر نظم همگامی را به صورت زیر تعریف می‌کنیم.

$$r(t) = \left|\frac{1}{N}\sum_j^N e^{i\theta_j}\right|$$

در این‌جا $r = ۱$ همگامی کامل و $r = ۰$ حالت ناهمگام شبکه را نشان می‌دهد.

برای مدل کردن قاعده‌ی آنتی هب، از روش بازآرایی معرفی شده در مقاله‌ی [۱۶] استفاده می‌کنیم. به این معنی که برای تضعیف قدرت اتصال گره‌های همگام، در هر گام زمانی یالی که منجر به حداقل شدن پارامتر f_{ij} می‌شود قطع شده و به گره‌ی تصادفی جدیدی وصل می‌شود.

$$f_{ij} = \frac{1}{2}\left(1 - cos\left(\theta_i - \theta_j\right)\right)$$

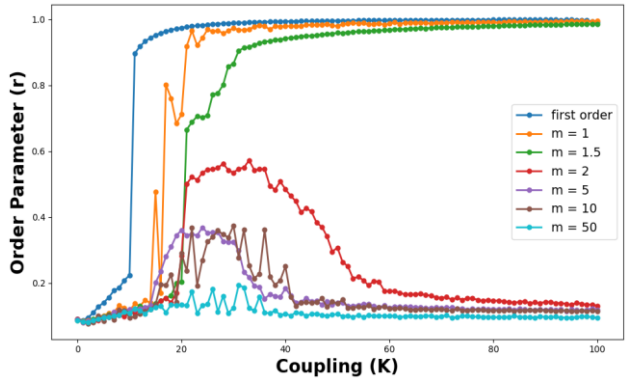


شکل ۱ : شکل شماتیک بازآرایی آنتی‌هب. این قاعده، اتصالی را که پارامتر f_{ik} را کمینه کند را قطع کرده و یک اتصال جدید تصادفی جایگزین می‌کند.

در این پژوهش، معادلات دیفرانسیل به صورت عددی و با استفاده از روش رانگ-کوتای مرتبه ۴ حل شده‌اند. فازهای اولیه به صورت تصادفی از بازه‌ی $(۰,۲\pi)$ انتخاب شده‌اند. همچنین سرعت‌های اولیه از تابع توزیع یکنواخت در بازه‌ی (۰.۰۱ و ۰.۰۱-) مقداردهی شده‌اند. فرکانس‌های ذاتی نوسانگرها نیز به صورت تصادفی از بازه‌ی (۲و۲-) استخراج می‌شوند. در تمام شبیه‌سازی‌ها α برابر با یک در نظر گرفته شده است.

نتایج

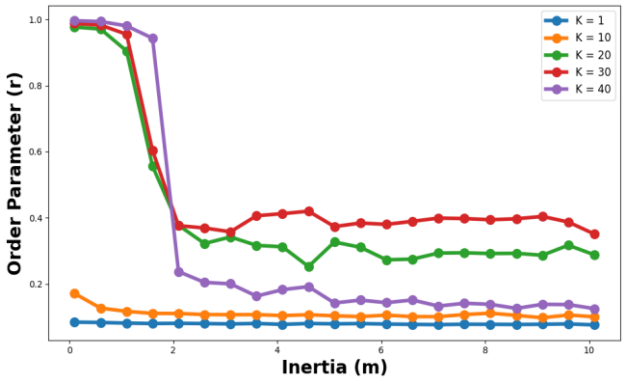
در ابتدا تاثیر پارامتر لختی بر گذار فاز همگامی در حین قاعده‌ی آنتی‌هب را بررسی می‌کنیم. شکل ۱ گذار فاز همگامی را برای پارامترهای لختی متفاوت نشان می‌دهد. همانطور که در شکل مشاهده می‌شود، در مدل کوراموتوی مرتبه‌ی یک، قاعده‌ی آنتی‌هب به صورت انفجاری شبکه را از حالت ناهمگام به همگام می‌برد. برای پارامترهای لختی کوچک، با افزایش m ، جفت‌شدگی بحرانی گذار فاز افزایش پیدا می‌کند. برای لختی‌های بالاتر از ۲ این گذار فاز از بین می‌روند و یادگیری آنتی‌هب نمی‌تواند منجر به همگامی کلی در شبکه شود.



شکل ۲ : میانگین پارامتر نظم شبکه در حالت پایا نسبت به ثابت جفت‌شدگی برای نوسانگرهای مرتبه‌ی اول و نوسانگرهای مرتبه‌ی دوم با لختی‌های متفاوت، تحت دینامیک بازآرایی آنتی‌هب. این شبکه‌ها متشکل از ۱۰۰ گره و دارای میانگین درجه ۱۲.۵ هستند.

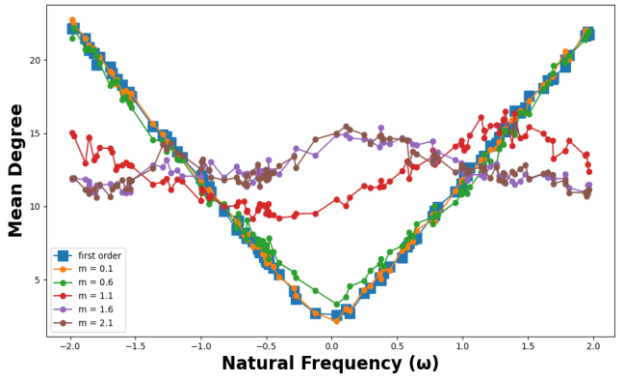
همچنین در شکل ۳ نشان داده شد که با ثابت‌های جفت‌شدگی بزرگ‌تر از ۱۰، می‌توان دو فاز متفاوت از شبکه را مشاهده کرد که

در آن از همگامی بالا در لختی‌های پایین و همگامی جزئی در لختی‌های بالا داریم.

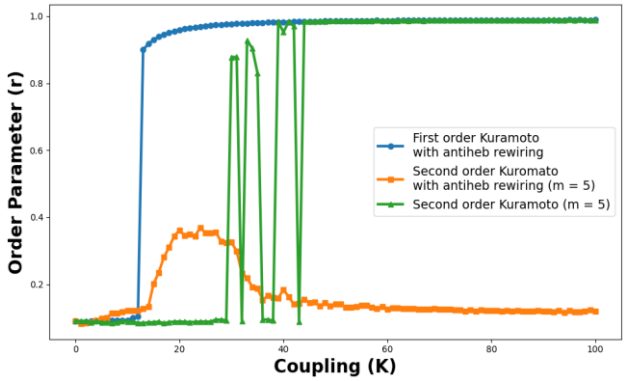


شکل ۳ : میانگین پارامتر نظم شبکه در حالت پایا نسبت به اندازه‌ی لختی برای نوسانگرهای مرتبه‌ی دوم با ثابت‌های جفت‌شدگی متفاوت، تحت دینامیک بازآرایی آنتی‌هب. این شبکه‌ها متشکل از ۱۰۰ گره و دارای میانگین درجه ۱۲.۵ هستند.

همانطور که قبلا اشاره شد در مدل کوراموتوی مرتبه‌ی اول، قاعده‌ی آنتی‌هب، به ساختار بهینه برای همگامی که در آن همبستگی مثبت بین درجه و اندازه‌ی فرکانس وجود دارد، منجر می‌شود. شکل ٤ نشان می‌دهد که برای لختی‌های کوچک، این روند تغییر ساختار همچنان پایدار است. اما با افزایش لختی، این همبستگی از بین می‌رود و در نتیجه، قاعده‌ی آنتی‌هب به همگامی کلی شبکه منجر نمی‌شود. سوالی که مطرح می‌شود این است که آیا همبستگی مثبت بین درجه و اندازه‌ی فرکانس، ساختار بهینه برای مدل کوراماتو مرتبه‌ی دوم هم است یا خیر؟ برای این منظور، ساختار بهینه‌ای که از قاعده‌ی آنتی‌هب برای مدل کوراموتوی مرتبه‌ی اول به دست آوردیم را به عنوان شبکه‌ی اولیه به مدل کوراموتوی مرتبه‌ی دوم دادیم. شکل ۵ نشان می‌دهد که برای $m = ۵$ که قاعده‌ی آنتی‌هب به ساختار بهینه و افزایش همگامی منجر نمی‌شد، این ساختار می‌تواند به همگامی کلی برسد، هرچند در نقطه‌ی بحرانی بالاتر و با نوسانات بیش‌تری در محدوده‌ی جفت‌شدگی بحرانی.



شکل ٤ : میانگین درجه‌ی گره‌های شبکه نسبت به فرکانس اولیه‌ی آن‌ها پس از اعمال بازآرایی آنتی هب. این میانگین‌گیری روی ۱۰۰ کپی برای هر مقدار لختی انجام شده است.



شکل ۵ : میانگین پارامتر نظم شبکه در حالت پایا نسبت به ثابت جفت‌شدگی برای نوسانگرهای کوراموتو مرتبه‌ی اول و دوم تخت بازآرایی آنتی‌هب. همچنین گذار فاز همگامی برای نوسانگرهای کوراموتوی مرتبه‌ی دوم روی ساختاری با همبستگی مثبت درجه و اندازه‌ی فرکانس رسم شده است. این شبکه‌ها متشکل از ۱۰۰ گره و دارای میانگین درجه ۱۲.۵ هستند.

نتیجه گیری

همانطور که می‌دانیم در شبکه‌های پیچیده، ساختار و دینامیک روی یک‌دیگر به صورت متقابل اثر می‌گذارند. دو قاعده‌ی یادگیری مهم

برای تغییر ساختار مغز در حین دینامیک، قواعد هب و آنتی‌هب هستند. در شبکه‌ای از نوسانگرهای کوراموتوی مرتبه‌ی اول، تغییر ساختار به کمک قاعده‌ی آنتی‌هب، به ساختار بهینه برای همگامی منجر می‌شود. برای نزدیک کردن مدل کوراموتو به واقعیت، در این مقاله پارامتر لختی به مدل اضافه شده است. نتایج بازآرایی آنتی‌هب برای نوسانگرهای کوراموتوی مرتبه‌ی دوم، نشان دادند که قاعده‌ی آنتی‌هب برای لختی‌های کوچک، به ساختار بهینه و افزایش همگامی منجر می‌شود. در حالی که برای لختی‌های بزرگ این نتیجه صادق نیست. هرچند برای این پارامترها، ساختاری با همبستگی مثبت بین درجه و اندازه‌ی فرکانس، هنوز ساختار بهینه است. به نظر می‌رسد که برای لختی‌های بزرگ این ساختار به جای نقطه‌ی جفت‌شدگی بحرانی، دارای بازه‌ی بحرانی است. برای فهم دینامیک در این بازه، تحقیقات بیش‌تر لازم است.

مرجع‌ها

[1] S. H. Strogatz, Sync: How Order Emerges from Chaos in the Universe, Nature, and Daily Life (Hyperion, 2008)
[2] A. Pikovsky, M. Rosenblum, and J. Kurths, Synchronization: A Universal Concept in Nonlinear Sciences (Cambridge University Press, 2003).
[3] Y. Kuramoto, Lecture Notes in Physics (Springer-Verlag, Berlin, 1975), Vol. 39; Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence (Springer Verlag, Berlin, 1984).
[4] Acebrón, J. A., Bonilla, L. L., Pérez Vicente, C. J., Ritort, F., & Spigler, R. (2005). The Kuramoto model: A simple paradigm for synchronization phenomena. Reviews of Modern Physics, 77(1), 137–185 .
[5] Strogatz, S. H. (2000). From Kuramoto to Crawford: exploring the onset of synchronization in populations of coupled oscillators. Physica D: Nonlinear Phenomena, 143(1-4), 1–20.
[6] B. Ermentrout, “An adaptive model for synchrony in the firefly Pteroptyx malaccae,” Journal of Mathematical Biology 29, 571–585 (1991).
[7] G. Filatrella, A. H. Nielsen, and N. F. Pedersen, “Analysis of a power grid using a Kuramoto-like model,” The European Physical Journal B 61, 485–491 (2008).
[8] J. M. V. Grzybowski, E. E. N. Macau, and T. Yoneyama, “On synchronization in power-grids modelled as networks of second-order Kuramoto oscillators,” Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science 26, 093119 (2016).
[9] B. R. Trees, V. Saranathan, and D. Stroud, “Synchronization in disordered Josephson junction arrays: Small-world connections and the Kuramoto model,” Physical Review E 71, 016215 (2005).
[10] H.-A. Tanaka, A. J. Lichtenberg, and S. Oishi, “First order phase transition resulting from finite inertia in coupled oscillator systems,” Physical Review Letters 78, 2104–2107 (1997).
[11] E. Mahdavi, M. Zarei, and F. Shahbazi, “Synchronization of two coupled massive oscillators in the time-delayed Kuramoto model,” Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science 35(1), 013101 (2025).
[12] Rodrigues, F. A., Peron, T. K. D., Ji, P., & Kurths, J. (2016). The Kuramoto model in complex networks. Physics Reports, 610, 1–98.
[13] Hebb, D. O. (1949). *The Organization of Behavior: A Neuropsychological Theory*. Wiley.
[14] Bell, C. C., & Grant, K. (2019). Anti-Hebbian plasticity in the electrosensory lobe of mormyrid electric fish. Current Opinion in Neurobiology, 54, 1–7.
[15] Yang, S., & Lisberger, S. G. (2024). Anti-Hebbian spike-timing dependent plasticity drives sequence learning in striatum. Nature Communications, 15, 1234 .
[16] Papadopoulos, L., Kim, J. Z., Kurths, J., & Bassett, D. S. (2017). Development of structural correlations and synchronization from adaptive rewiring in networks of Kuramoto oscillators. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, *27*(7).

مطالعه گذار جهت‌بندی در سامانه‌های پیچیده: مدل تپه‌های شنی نوسانی

چراغعلی‌زاده، جعفر؛ ارقند، نگین ؛ نطاق نجفی، مرتضی

گروه فیزیک، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل

چکیده

در این پژوهش، گسترشی از مدل تپه های شنی بک–تنگ–ویزنفیلد (BTW) با معرفی نوسانات زمانی با دامنه‌ی ϵ_0 و دوره‌ی تناوب T ارائه شده است. مدل پیشنهادی یک گذار جهت‌مندی در $T = T^*$ نشان می‌دهد که با محلی شدن بهمن‌ها و ناپدید شدن احتمال بهمن‌های فراگیر همراه است. تحلیل‌های مقیاسی نمایه‌های بحرانی متمایزی را در مقیاس‌های کوچک و بزرگ مکانی آشکار می‌کند. جرم، اندازه و مدت زمان بهمن‌ها از توزیع‌های تابع توانی پیروی می‌کنند و قله‌های مقیاسی آن‌ها به مقدار T وابسته است. شایان ذکر است که نمایه‌ی مقیاسی جرم–مدت زمان نسبت به تغییرات T ثابت باقی می‌ماند.

واژگان کلیدی: *مدل‌های تپه شنی، گذار فاز، بحران‌های خودسامان‌ده*

Vibrating Sandpiles: An example of systems with directionality transition

J. Cheraghalizadeh, N. Arghand, and M. N. Najafi

Department of Physics, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil

Abstract

We propose an extension of the Bak–Tang–Wiesenfeld (BTW) sandpile model by introducing temporal oscillations with amplitude ϵ_0 and period T. The model exhibits a directionality crossover at $T = T^*$, marked by avalanche localization and vanishing spanning probabilities. Scaling analyses reveal distinct critical exponents across small and large spatial scales. Avalanche mass, size, and duration follow power-law distributions, with scaling peaks dependent on T. Notably, the mass-duration scaling exponent remains invariant with respect to T.

Keywords*: sandpile models, phase transition, self-organized criticality*

مقدمه

مفهوم بحرانیّت خودسازمانده (SOC[37]) نخستین‌بار توسط بک، تنگ و ویزنفیلد (BTW) از طریق مدل تپه های شنی معرفی شد تا وقوع نویز $\frac{1}{f}$ در سامانه‌های طبیعی را تبیین کند [۱]. در این مدل، سامانه بدون نیاز به تنظیم دقیق پارامترها و تنها از طریق فرآیند ساده‌ی ورود و اتلاف انرژی، به حالت بحرانی دست می‌یابد. یکی از کاربردهای مهم SOC در توصیف بهمن‌های عصبی است [۲]، جایی که مدل‌های تپه‌های شنی به عنوان شبیه‌هایی از رفتار دینامیکی سامانه‌های تصادفی به کار می‌روند. مطالعات متعدد، دینامیک تپه‌های شنی را به شبکه‌های جهان-کوچک در ابعاد دو و سه و همچنین به الگوهای بهمنی در شبکه‌های زمین‌لرزه‌ای گسترش داده‌اند [۳]. یکی از مفاهیم بنیادی در این زمینه، وجود کلاس‌های جهان‌شمولی متمایز با نمایه‌های مقیاسی خاص است که عواملی نظیر جهت‌مندی، تصادفی بودن، بُعدمندی، نوع قوانین بازتوزیع انرژی و هندسه پس-زمینه در تعیین آن‌ها نقش دارند. در این پژوهش، گونه‌ای جدید از آشفتگی به مدل BTW معرفی می‌شود که شاملِ اعمال ارتعاش خارجی بر سامانه است. این ارتعاش، با ایجاد ناهمسانگردی[38]، بر پایداری و دینامیک بهمن‌ها اثرگذار است. هدف از این مطالعه، بررسی میزان پایداری مدل BTW در برابر این نوع آشفتگی و برقراری ارتباط با مطالعات تجربی و شبیه‌سازی‌هایی است که در آن‌ها ارتعاشات خارجی به تپه‌های واقعی وارد شده است. بدین منظور، با اعمال نوسانات در یک راستا، ویژگی‌های سامانه در راستاهای مختلف و دوره‌های زمانی متفاوت مورد تحلیل قرار گرفته‌اند [٤].

مدل

در این پژوهش، یک مدل از سامانه‌ی خودسازمانده بحرانی (SOC) مورد بررسی قرار گرفته است که دینامیک آن بر پایه‌ی فرآیندهای بهمن استوار است. در این مدل، ارتعاشات خارجی در یک راستای خاص به سامانه اعمال می‌شود که منجر به ایجاد ناهمسانگردی در توزیع انرژی می‌گردد، بدون آنکه آستانه‌ی ناپایداری تغییری یابد.

مدل بر روی یک شبکه‌ی مربعی با ابعاد $L \times L$ شده است. به هر گره، به صورت تصادفی، مقداری انرژی در بازه‌ی $[1, 4n]$ اختصاص داده می‌شود که در اینجا $n = 10$ در نظر گرفته شده است. در هر مرحله‌ی زمانی، یک گره‌ی تصادفی انتخاب شده و یک واحد انرژی به آن افزوده می‌شود. چنانچه انرژی گره از مقدار $4n$ فراتر رود، گره ناپایدار شده و تحت فرآیند فرو ریزش قرار می‌گیرد.

قوانین فرو ریزش در این مدل دارای وابستگی جهت‌دار می‌باشند:

- در راستای افقی (محور x)، فرو ریزش مطابق با قوانین استاندارد مدل بک-تانگ-ویزنفلد (BTW Model) انجام می‌شود.
- در راستای عمودی (محور y) فرو ریزش به صورت نوسانی و وابسته به زمان صورت می‌گیرد.

ماتریس تغییرات انرژی هنگام فرو ریزش، شامل مولفه‌ای سینوسی است که به فرکانس ارتعاش (ω) و شدت آن (ϵ_0) وابسته می‌باشد [۵]. فرو ریزش‌ها به ترتیب در هر گام زمانی اجرا می‌شوند و پس از اتمام هر بهمن (یعنی زنجیره‌ای از فرو ریزش‌ها بین دو تزریق

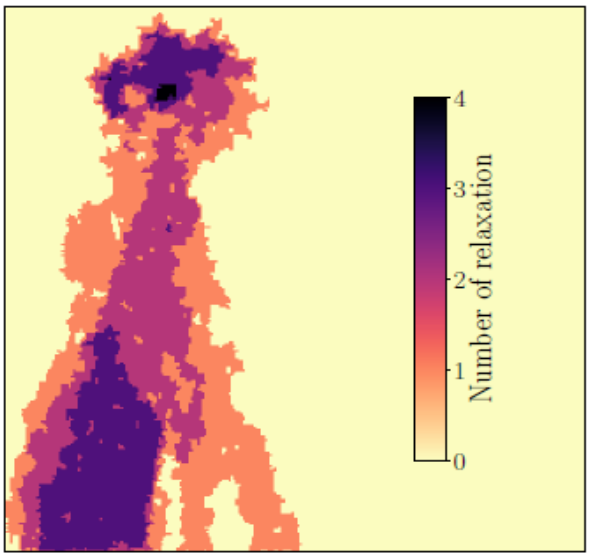
[37] Self-Organized Criticality

[38] Anisotropy

انرژی متوالی)، متغیرهایی نظیر طول عمر بهمن (D) ، جرم بهمن (m)و اندازه‌ی بهمن (s) ثبت می‌گردند.

با توجه به ناهمسانگرد بودن مدل، اندازه‌گیری‌ها به تفکیک در راستاهای موازی و عمود بر جهت ارتعاش صورت می‌پذیرد و کمیت‌های خطی نظیر $s_{\parallel}$ و $s_{\perp}$ نیز تعریف می‌شوند. تحلیل خواص آماری سامانه، به ویژه در حالت تکرار شونده[۳۹]، نیازمند نمونه‌برداری در بازه‌های زمانی بزرگ‌تر از دوره‌ی نوسان ارتعاشات می‌باشد [۶].

هدف اصلی این مطالعه، توصیف حالت تکرار شونده جدید ناشی از ناهمسانگردی و بررسی رفتار آماری سامانه تحت این شرایط است.



شکل ۱: نمونه‌ای از بهمن در T=۴۰۹۶ و L=۲۵۶

تحلیل ویژگی‌ها

برای مطالعه ویژگی‌های آماری مدل، شبکه‌های مربعی با اندازه‌های $L = 32, 64, 128, 256, 512$ با شرایط مرزی باز شبیه‌سازی شدند. برای هر مقدار T، سامانه به اندازه‌ی کافی رشد داده شد تا به حالت تکرار شونده برسد. پس از رسیدن به حالت تکرار شونده، حدود 10^6 بهمن برای هر مقدار T جمع‌آوری و تحلیل شد.

ابتدا برای بررسی وجود گذار جهت‌مندی، میانگین طول بهمن در راستاهای عمود ($l_{\perp}$) و موازی ($l_{\parallel}$) با جهت نوسان محاسبه گردید. نسبت این دو کمیت، یعنی $\frac{\langle l_{\perp} \rangle}{\langle l_{\parallel} \rangle}$، به عنوان معیاری برای جهت‌مندی انتخاب شد [۷]. شکل ۱ این نسبت را برحسب T نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، این نسبت بسته به مقدار T تغییر می‌کند: برای مقادیر کوچک T، نسبت کمتر از یک است (کشیدگی در راستای زمانی) و برای مقادیر بزرگ T، نسبت بزرگ‌تر از یک می‌شود (کشیدگی در راستای فضایی). در مقدار بحرانی $T = T^*$ این نسبت به تقریباً یک می‌رسد که نشان‌دهنده‌ی رفتار همسانگرد سامانه است.

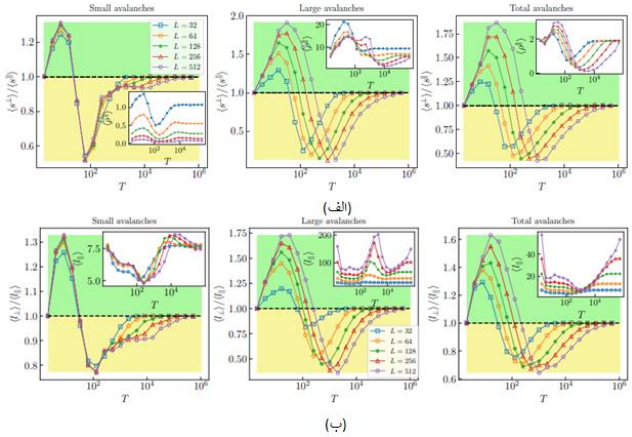
در ادامه، احتمال وقوع بهمن‌های فراگیر (SAP) در هر دو راستا بررسی شد. شکل ۲ رفتار احتمال SAP را نسبت به مقدار T نمایش می‌دهد. نتایج نشان دادند که این احتمال در نزدیکی T^* به صفر می‌رسد، که نشانه‌ای از محلی شدن بهمن‌ها در این نقطه‌ی گذار است. همچنین مشاهده شد که رفتار SAP در دو سوی T^* متفاوت است.

برای تحلیل دقیق‌تر ویژگی‌های مقیاسی، توزیع جرم(m) ، اندازه (s)و طول عمر (D) بهمن‌ها مورد بررسی قرار گرفتند. این توزیع‌ها،

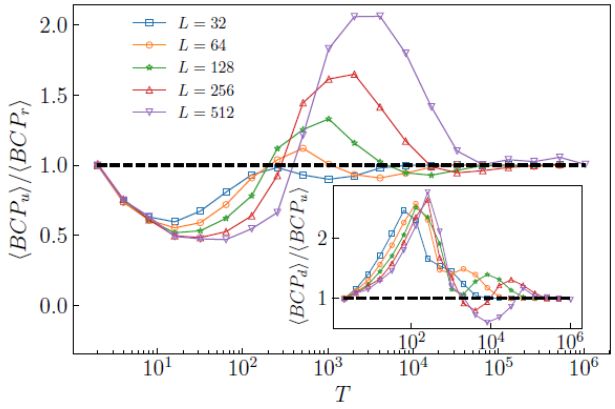
[۳۹] Recurrent States

که در شکل ۳ نشان داده شده‌اند، رفتار تابع توانی از خود بروز می‌دهند. در این توزیع‌ها قله‌های مشخصی ظاهر شده‌اند که مکان این قله‌ها تابعی از مقدار T است و این نشان‌دهنده‌ی حضور یک مقیاس طولی جدید در سیستم می‌باشد.

همچنین تحلیل مقایسه‌ای بین جرم بهمن و اندازه‌ی آن، و بین جرم بهمن و طول عمودی بهمن انجام شد. این بررسی‌ها نشان داد که در مقیاس‌های کوچک و بزرگ، رفتار مقیاسی متفاوتی وجود دارد که با یک مقدار مرزی (x^*) از یکدیگر جدا می‌شوند.



شکل ۲: الف) نسبت جهت‌گیری بهمن‌ها بر حسب دوره‌ی نوسان T برای اندازه‌های مختلف شبکه، به ترتیب برای بهمن‌های کوچک، بزرگ و کل. درون‌نما: میانگین طول موازی بهمن‌ها بر حسب T برای اندازه‌های مختلف شبکه. (ب) نسبت اندازه‌ی بهمن‌ها درامتداد نوارها بر حسب دوره‌ی نوسان T برای اندازه‌های مختلف شبکه. درون‌نما: میانگین چگالی موازی بهمن‌ها بر حسب T برای اندازه‌های مختلف شبکه.



شکل ۳: نسبت احتمال گذر از مرز بالا به احتمال گذر از مرز راست بر حسب T . درون‌نما: نسبت احتمال گذر از مرز پایین به احتمال گذر از مرز بالا بر حسب T .

در مقیاس‌های کوچک، نمایه‌های مقیاسی جرم نسبت به طول عمودی بهمن برابر با $\gamma_{ml_\perp} = 2.0 \pm 0.05$ و جرم نسبت به اندازه‌ی بهمن برابر با $\gamma_{ms} = 0.95 \pm 0.05$ به دست آمدند. در مقیاس‌های بزرگ، این نماها به $\gamma_{ml_\perp} = 2.66 \pm 0.05$ و $\gamma_{ms} = 0.68 \pm 0.05$ تغییر یافتند.

در نهایت، نمایه‌ی مقیاسی جرم—طول عمر، مورد بررسی قرار گرفت و مقدار $\gamma_{mD} = 1.57 \pm 0.04$ برای آن به دست آمد. این مقدار در برابر تغییرات T مقاوم بود و تغییر محسوسی نشان نداد.

این نتایج نشان می‌دهند که اعمال نوسانات زمانی علاوه بر ایجاد ناهمسانگردی در سامانه، منجر به ظهور ساختارهای مقیاسی جدید و گذارهای رفتاری در دینامیک بهمن‌ها می‌شود.

نتایج

در این مطالعه، با اعمال ارتعاشات در یک راستا (راستای زمانی) به سامانه‌ی تپه های شنی دوبعدی، پایداری سیستم و ظهور رژیم‌های جدید بررسی شد. در این مدل، در حالی که فرو ریزش‌ها طبق قوانین

استاندارد در راستای فضایی انجام می‌شوند، ارتعاشات تنها در راستای زمانی اعمال می‌شوند و سامانه ویژگی‌های جهت‌دار از خود نشان می‌دهد.

تحلیل نسبت‌های مختلف از جمله نسبت جهت‌گیری بهمن‌ها نشان داد که رفتار جهت‌داری بهمن‌ها تابعی از دوره‌ی تناوب ارتعاشات است. برای مقادیر کوچک دوره‌ی تناوب T، بهمن‌ها عمدتاً در راستای فضایی (عمود بر ارتعاشات) گسترش می‌یابند، در حالی که برای مقادیر بزرگ T، کشیدگی بهمن‌ها در راستای زمانی (موازی با ارتعاشات) غالب می‌شود. یک نقطه‌ی گذار T^* وجود دارد که در آن سامانه همسانگرد می‌شود، به طوری که پارامتر ناهمسانگردی r در این نقطه برابر با یک است.

در نزدیکی T^*، احتمال بهمن‌های فراگیر (SAP) در هر دو راستا به صفر می‌رسد، که نشانه‌ای از محلی شدن کلاسیک بهمن‌ها است. این رفتار با چگالی خطی بهمن‌ها در راستاهای موازی و عمود نیز سازگار است.

تحلیل روابط مقیاسی نشان داد که سامانه در دو رژیم متمایز رفتار می‌کند:

- در مقیاس‌های کوچک، بهمن‌ها رفتار تابع توانی با نماهایی مشابه مدل BTW دارند.
- در مقیاس‌های بزرگ، اگرچه رفتار تابع توانی همچنان مشاهده می‌شود، اما ظهور قله در انتهای توزیع‌ها نشان می‌دهد که روابط مقیاسی تنها در بخشی از داده‌ها معتبر است.

به طور دقیق‌تر، برای اندازه‌ی بهمن‌های کوچکتر از s_1^*، نماهای مقیاسی با مدل BTW مطابقت دارند؛ برای بازه‌ی $s_1^* < s < s_1^*$، نمای جدیدی به دست آمد $T_s^{(2)} = 2.5 \pm 0.1$ که با نمای مدل $T_s^{(1)} \approx 1.25$ BTW متفاوت است. همچنین یک قله‌ی موضعی در s_{peak}^* مشاهده شد که وابسته به T و اندازه‌ی شبکه L است. برای مقادیر کوچک T (به طور خاص $T < T_s$)، رابطه‌ی $s_{peak}^* \sim T^{\sigma_{s_{peak}}}$ با $\sigma_{s_{peak}} = 1.55 \pm 0.06$ برقرار است، در حالی که برای مقادیر بزرگ‌تر T، s_{peak}^* تقریباً ثابت می‌ماند.

در مجموع، نتایج نشان می‌دهد که در رژیم‌های مختلف، رفتار سامانه از مدل BTW فاصله می‌گیرد و گذار جهت‌داری سامانه با محلی شدن بهمن‌ها و تغییر در نماهای مقیاسی همراه است.

مرجع‌ها

[1] P. Bak, C. Tang, and K. Wiesenfeld, Self-organized criticality: An explanation of the 1/f noise, Phys. Rev. Lett. 59, 381 (1987).

[۲] [2] P. Bak, C. Tang, and K. Wiesenfeld, Self-organized criticality, Phys. Rev. A 38, 364 (1988).

[3] M. Najafi and H. Dashti-Naserabadi, Statistical investigation of avalanches of three-dimensional small-world networks and their boundary and bulk cross-sections, Physical Review E 97, 032108 (2018).

[4] M. Najafi, S. Tizdast, and J. Cheraghalizadeh, Some properties of sandpile models as prototype of selforganized critical systems, Physica Scripta 96, 112001 (2021).

[5] J. Cheraghalizadeh, M. Seifi MirJafarlou, and M. Najafi, Sandpiles subjected to sinusoidal drive, Physical Review E 107, 064132 (2023).

[6] R. Karmakar and S. Manna, Directed fixed energy sandpile model, Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics 69, 067107 (2004).

[۷] V. B. Priezzhev, The upper critical dimension of the abelian sandpile model, Journal of Statistical Physics 98, 667 (2000).

بررسی حرکت سلول‌های کلامیدوموناس در میکرولوله‌های موئین تحت تابش با نور قطبیده

موسی الرضایی، سعیده؛ حاجی زاده، فائقه؛ ملکی، مانیا[1]

[1] *گروه فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی زنجان، زنجان*

چکیده

این مقاله به بررسی تأثیر تابش نور قطبیده بر حرکت میکروجلبک‌های کلامیدوموناس در لوله‌های موئین می‌پردازد. کلامیدوموناس، جلبک تک‌سلولی-دو تاژکی است که نسبت به نور واکنش نشان می‌دهد و با استفاده از ویژگی نورگرایی و نیروی خودپیشران مسیر حرکت خود را تنظیم می‌کند. در این مطالعه، سلول‌های‌کلامیدوموناس به همراه محیط کشت در لوله‌های موئین قرار داده می‌شوند و حرکت آنها ابتدا تحت تابش نور سبز با قطبش خطی و در توان‌های تابشی مختلف، سپس تحت تابش همان نور بدون قطبش مورد بررسی قرار می گیرد. مسیر و سرعت حرکت سلول‌ها در دو راستا، یعنی در امتداد لوله موئین و در راستای عمود بر آن، به صورت تجربی اندازه‌گیری و مقایسه شده است. نتایج این بررسی نشان می‌دهد که سلول‌ها در داخل میکرولوله معمولا حرکت تناوبی از خود نشان می‌دهد و به نظر می‌رسد که قطبش نور بر روی رفتار حرکتی سلول‌ها مخصوصا مولفه‌های سرعت داخل میکرولوله تاثیرگذار است.

واژگان کلیدی: *میکروشناگرهای کلامیدوموناس، لکه چشمی، نورگرایی، قطبش نور، میکرولوله موئین، نیروی خودپیشران، گیرنده‌های نوری*

The effect of polarized light on the velocity of Chlamydomonas cells in capillaries

Musarrezaii, Saeedeh; Hajizadeh, Faegheh; Maleki, Maniya[1]

[1] *Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan*

Abstract

In this article, we study the influence of polarized light and non-polarized light on the motility of Chlamydomonas Reinhardtii[40] *(CR) cells within capillaries. This unicellular, biflagellate Chlamydomonas responds to light in different conditions; directed by the phototaxis mechanism in the eyespot and self-propelled flagellate force allowing it to reorient in response to light. The cells are suspended in a TAP medium inside the capillary and exposed to different powers of green light with linear polarization, then under exposure to the same light without polarization. We measure and compare the velocities of CR microswimmers in two directions: parallel and perpendicular to the tube. The results show that polarized light influences the motile manners of cells inside capillaries.*

[40] Chlamydomonas Reinhardtii(CR)

Keywords: *Chlamydomonas Reinhardtii Micro Swimmers, Eyespot, Phototaxis, Polarized light, Capillary tubes, Incident light power, Self-propelled force, Photoreceptor*

مقدمه

توانایی حرکت هدفمند در پاسخ به محرک‌های محیطی، یکی از ویژگی‌های بنیادی موجودات زنده به شمار می‌رود. شواهد بسیاری حاکی از آن است که ابتدایی‌ترین کارکرد سیستم عصبی در موجودات زنده، کنترل حرکت خودآگاه بوده است. بررسی‌های جدید نشان داده‌اند که ریزموجودات تک‌سلولی نیز قادر به ادراک و پردازش اطلاعات محیطی هستند. در موجودات میکروسکوپی و تک‌سلولی، از جمله میکروجلبک فتوسنتزکننده *کلامیدوموناس*، حرکت نه تنها ابزاری برای یافتن شرایط محیطی مطلوب‌تر است، بلکه به بقای سلول، در استفاده بهینه از منابع نوری و غذایی کمک می‌کند. این میکروجلبک با بهره‌گیری از دو تاژک متقارن و یک لکه چشمی حساس به نور، قادر است رفتار نورگرایی از خود نشان دهد؛ بدین معنا که می‌تواند به طور فعال با ضربات تناوبی تاژکی، مشابه شنای پروانه، به سوی منبع نور (نورگرایی مثبت) یا در جهت مخالف آن (نورگرایی منفی) حرکت کند [۱]. زمانی که سلول‌ها تحت تابش نور قرار می‌گیرند، تغییرات غلظت کلسیم درون تاژک‌ها باعث تنظیم الگوی ضربات آنها می‌شود، به‌طوری‌که این تنظیم ضربات، سلول را در جهت‌گیری مناسب نسبت به نور یاری می‌دهد [۲]. مطالعه‌ها نشان داده‌اند که هرگونه تغییر در شدت نور تابشی، طول موج، دما، وشکسانی محیط و حتی هندسه ظرفی که سلول در آن محدود شده است، می‌تواند منجر به تغییر در رفتار حرکتی سلول شود [۳-٤].

لکه چشمی و نور قطبیده: لکه چشمی اندامکی است که معمولاً به ریشه میکروتوبولی D_4 متصل می‌باشد و این ریشه به تاژک سیس می‌رسد. لکه چشمی از سه بخش تشکیل شده است: ۱- بخش‌هایی از غشای پلاسمایی که گیرنده‌های پروتئینی حساس به نور (کانال رودوپسین[41]) را در خود دارد. ۲- ناحیه باریک سیتوپلاسمی بین غشا و غشای کلروپلاست. ۳- لایه‌های کارتنوئیدی که در کلروپلاست قرار دارد. این اجزاء به صورت یکپارچه به هم متصل هستند، به گونه‌ای که ساختار منسجم و فشرده لایه‌های کارتنوئید، دلیل اصلی جهت‌گیری سلول‌ها در امتداد نور است [۵]. آرایش ساختاری لایه‌های کاروتنوئیدی در لکه چشمی کلامیدوموناس به گونه‌ای است که مانند یک **تیغه دوشکستی** عمل می‌کند و باعث ایجاد پاسخ‌های نوری وابسته به **قطبش نور** می‌شود [٦]. سلول کلامیدوموناس در حین حرکت در آب، با فرکانس تقریباً **۲ هرتز** به دور خود می‌چرخد. از آنجا که لکه چشمی تنها در یک سوی سلول قرار دارد و نسبت به نور حساس است، **شدت نوری که سلول در طول یک دور چرخش دریافت می‌کند، یکنواخت باقی نمی‌ماند؛** بلکه به صورت منظم تغییر می‌کند. این نوسان‌ها توسط گیرنده‌های نوری مثل **ChR۱** و **ChR۲** درک می‌شوند و در نتیجه سیگنالی الکتریکی ایجاد می‌شود که به کنترل جهت‌گیری و حرکت تاژک‌ها منجر می‌گردد و در نتیجه سلول به صورت مارپیچ شنا می‌کند [۷-۸].

تاژک و تحرک سلول : در سلول‌های کلامیدوموناس، دو تاژک در ناحیه قدامی سلول قرار دارند و ساختار آکسونمی آنها از یک آرایش

[41] Channel Rhodopsin (ChR)

۹+۲ میکروتوبولی تشکیل شده است. حرکت تاژک‌ها زمانی آغاز می‌شود که موتور پروتئین‌های وابسته به میکروتوبول فعال شده و موجب لغزش این ساختارها نسبت به یکدیگر می‌شود. در مشاهده حرکت کلامیدوموناس، ضربه شنای رو به جلو به صورت یک حرکت دو مرحله‌ای مشابه شنای پروانه توصیف می‌شود: ۱-ضربه قدرتی[۴۲]، در این مرحله، دو تاژک به طور کامل و هماهنگ در جهت‌های مخالف از یکدیگر فاصله می‌گیرند و نیروی پیشران اصلی برای حرکت رو به جلو را فراهم می‌کنند. ۲-ضربه بازگشتی[۴۳]، در این مرحله، دو تاژک به یکدیگر نزدیک شده و فاصله بین آنها به حداقل می‌رسد، تا برای ضربه قدرتی بعدی آماده شوند. این الگوی حرکتی با هماهنگی زمانی دقیق بین دو تاژک انجام می‌شود و مشابه حرکت مژک‌های موجودات مژکدار به نظر می‌رسد [۷].

در مطالعه‌ای که در سال ۲۰۲۱ توسط H.P.Zhang و همکارانش انجام گرفت، به بررسی حرکت میکروجلبک‌های اوگلنا[۴۴] تحت تاثیر میدان‌های نور قطبیده پرداخته شد. نتایج این بررسی نشان داد که در تابش نور قطبیده یکنواخت، این سلول‌ها تمایل دارند در جهت عمود بر قطبش نور حرکت کنند و آرایش نماتیک مانند کریستال‌های مایع بدون سرعت خالص را تشکیل دهند. اما زمانی که قطبش نور به صورت فضایی تغییر می‌کند، دینامیک سلول‌ها با تغییرات محلی قطبش تنظیم می‌شود و الگوهای پیچیده‌ای از توزیع و حرکت سلول‌ها ظاهر می‌شود که به ویژگی‌های توپولوژیکی میدان نور وابسته‌اند. این الگوهای منظم حرکت سلولی حتی می‌توانند جریان‌های موضعی داخل سیال ایجاد کنند [۶].

در این مقاله، از میدان نور خطی قطبیده برای بررسی تاثیر تابش نور بر حرکت سلول‌های کلامیدوموناس درون میکرولوله‌ها استفاده شده است. نور قطبیده خطی توسط یک تیغه قطبش‌گر داخل میکروسکوپ ایجاد می‌شود و به دو صورت در راستا و عمود بر محور میکرولوله با شدت‌های مختلف به ذرات تابانده می‌شود. نتایج آزمایش‌ها نشان می‌دهد که قطبش نور به طور معناداری بر دینامیک حرکت میکروشناگرهای جلبکی سبز تاثیر می‌گذارد، به گونه‌ای که این تاثیر در مقایسه با نور غیرقطبیده مشهود است.

مواد و روش‌ها

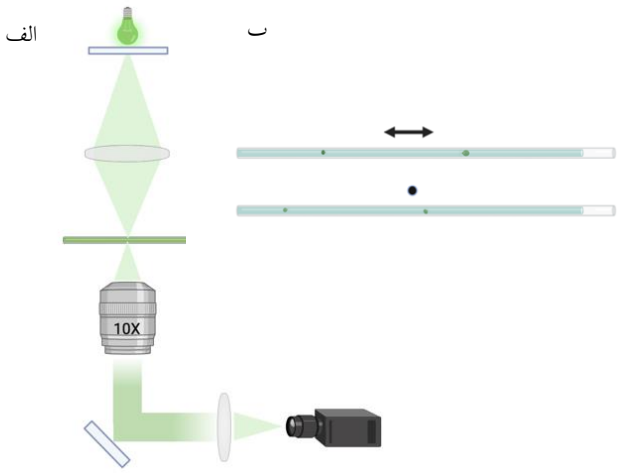
برای انجام آزمایش‌ها از سلول‌های نوع وحشی کلامیدوموناس، سویه CC-۱۲۵ استفاده می‌شود. این سلول‌ها به‌صورت همزمان در محیط کشت TAP[45] ، در دمای ۲۵ تا ۲۶ درجه سانتی‌گراد و در چرخه نوری ۱۲ ساعت روشنایی- ۱۲ ساعت تاریکی، درون انکوباتور بدون لرزاننده رشد داده می‌شوند. طی چهار روز، رشد سلول‌ها به بیشینه مقدار خود می‌رسد [۹]. برای انجام آزمایش، سلول‌ها به همراه محیط کشت به درون لوله‌های موئین با قطر داخلی ۱۰ ± ۴۰ میکرومتر تزریق و دو سر لوله‌ها با استفاده از چسب سیلیکونی به‌طور کامل بسته می‌شود. برای تحریک نورگرایی، از نور سبز استفاده می‌شود [۸]. تصویربرداری از حرکت سلول‌ها با استفاده از میکروسکوپ معکوس Olympus-IX71، دوربین PixeLink و عدسی شیئی ۱۰x انجام می‌گیرد. تصاویر با نرخ ۳۰ فریم بر ثانیه ثبت می‌شوند.

[3] Power Stroke
[4] Return Stroke
[5] *Euglena gracilis*
[6] Tris Acetate Phosphate

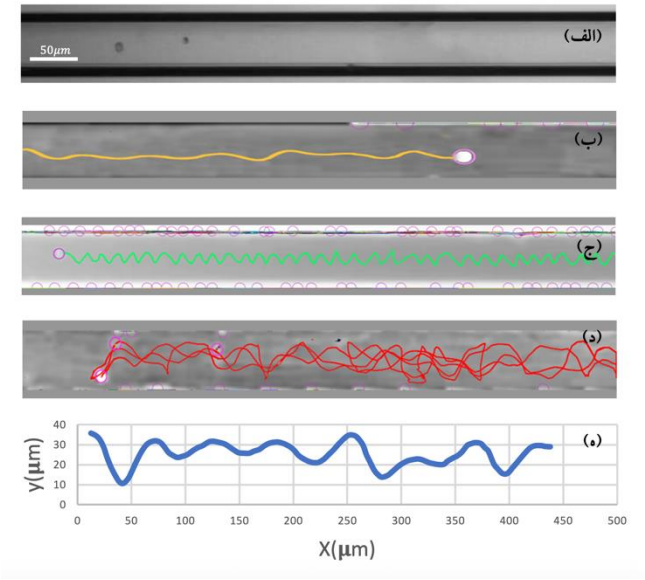
شکل (۱) طرح‌واره‌ای از نحوه قرارگیری لوله در زیر میکروسکوپ را تحت تابش نور قطبیده خطی در دو جهت موازی و عمود بر محور لوله نشان می‌دهد. در این بررسی از قطبش‌گر داخل میکروسکوپ استفاده می‌شود.

شکل (۲، الف) تصویر میکروسکوپی از رفتار میکروجلبک‌ها در لوله‌های موئین است که توسط دوربین ثبت شده و لکه تیره در وسط عکس یک سلول میکروجلبک را نشان می‌دهد.

شکل‌های (۲، ب تا ۲، د) مسیر حرکت سلول را نشان می‌دهند که با استفاده از نرم‌افزار تحلیل تصویر *ImageJ* استخراج شده‌اند. در این تصاویر دایره‌های بنفش همه تغییرات شدتی است که توسط این نرم‌افزار به عنوان جسم یا سلول در نظر گرفته می‌شود. دایره‌های بنفشی که مکان آنها در طول زمان و در فریم‌های مختلف تغییر نکند، به عنوان مثال سلول‌های بی‌حرکت یا نقاطی با شدت متفاوت که به اشتباه به عنوان ذره فرض شده‌اند، از ادامه تحلیل داده حذف می‌شوند و منحنی‌های رنگی در **شکل‌های (۲، ب–د)** مسیر حرکت چندین میکروجلبک متحرک را در طول زمان نشان می‌دهند. این منحنی‌ها به خوبی حرکت نوسانی این سلول‌ها را در طول عبور از یک لوله نشان می‌دهد [۸]. در نهایت، نتیجه نهایی تحلیل تصویر برای مسیر حرکت یک میکروجلبک داخل یک میکرولوله به صورت **شکل (۲، ه)** بدست می‌آید. محور y و x در این عکس پهنای لوله و طول لوله بر حسب میکرومتر نشان می‌دهد.



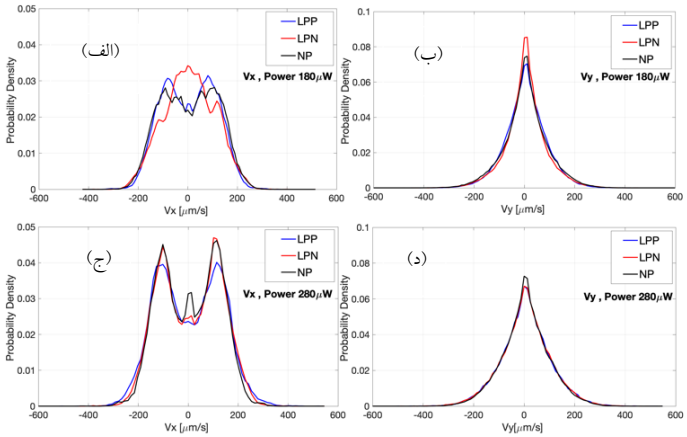
شکل ۱) (آلف) طرح‌واره‌ای از میکروسکوپ معکوس و قرارگیری لوله موئین (ب) علامت « ↔ » قطبش نور در راستای محور لوله و« • » قطبش در راستای عمود بر محور لوله



شکل ۲) (الف) تصویر ثبت‌شده از ذرات کلامیدوموناس در داخل میکرولوله زیر میکروسکوپ. (ب–د) نتیجه استخراج شده از مسیر حرکت سلول داخل میکرولوله که با استفاده از نرم‌افزار ImageJ بدست می‌آید. (ه) نتیجه نهایی برای حرکت یک سلول داخل میکرولوله.

نتایج

این آزمایش‌ها و بررسی حرکت سلول‌ها داخل میکرولوله برای تعداد حدود ۱۵۰ سلول در سه حالت نوردهی مختلف قطبش نور موازی با لوله، عمود بر لوله و نور غیر قطبیده، در مجموع ۴۵۰ حالت، انجام گرفت. با استفاده از تحلیل تصویر با کمک نرم‌افزار و تحلیل این داده‌ها مرکز جرم همه این ذرات و حرکت آنها داخل لوله استخراج شد. بر همین اساس و با استفاده از فاصله زمانی بین هر دو فریم سرعت لحظه‌ای این سلول‌ها اندازه‌گیری شد. جدول شماره (۱) متوسط سرعت حرکت سلول‌های کلامیدوموناس را تحت تابش نور با توان‌ها و قطبش‌های مختلف نشان می‌دهد. سرعت‌ها در دو راستای x (محور لوله) و y (عمود بر محور لوله) اندازه گیری شده‌اند و توان نوردهی از ۱۲۰ تا ۲۸۰ میکروووات تغییر کرده است. این نتایج نشان می‌دهد که افزایش شدت نوردهی منجر به افزایش سرعت



متوسط سلول‌ها در هر دو راستا می‌شود که این افزایش در راستای x مشخص‌تر است.

برای درک بهتر تغییرات سرعت با نوردهی‌های مختلف، فراوانی سرعت در راستای x و سرعت در راستای y در شکل(۳) رسم شده است.

جدول (۱) سرعت متوسط سلول‌ها تحت شرایط نوردهی مختلف

توان نور تابشی]μW[	Vx (قطبش موازی با لوله)]μm/s[	Vx (قطبش عمود بر محور لوله)]μm/s[	Vx (بدون قطبش)]μm/s[	Vy (قطبش موازی با لوله)]μm/s[	Vy (قطبش عمود بر محور لوله)]μm/s[	Vy (بدون قطبش)]μm/s[
۱۲۰	۸۵/۵۸	۸۲/۵۸	٦٧/٤٧	٦٠/٤٦	٦١/٥١	٦٠/٢٤
۱۸۰	۹۰/۰٦	۸۳/٤١	۹٤/٦٨	٦٢/٤٩	٥٩/١٢	٦٤/٨٢
۲۲۰	١٠٠/٥٤	۹۹/١٥	٧٧/٥٢	٦٦/٩٤	٧٠/١٧	٥٦/٩٦
۲۸۰	١١٠/٤٦	١٠٦/٥٨	١٠١/٥٥	٧٥/٠٦	٧٤/٨٤	٧١/٧٦

شکل ۳) توزیع فراوانی مقادیر مولفه‌های سرعت V_x و V_y سلول‌ها تحت شرایط مختلف قطبش (LPP قطبش خطی در راستای لوله، LPN قطبش خطی عمود بر راستای لوله و NP نور غیرقطبیده) در توان‌های تابش ۱۸۰ میکروووات و ۲۸۰ میکروووات. نمودارهای سمت چپ مربوط به مولفه V_x و نمودارهای سمت راست مربوط به مولفه V_y هستند.

در این شکل فراوانی سرعت در راستای x در ستون سمت چپ و سرعت در راستای y در ستون سمت راست آورده شده است. ردیف بالا برای توان ۱۸۰ میکروووات ($۳/۵۸ \frac{W}{m^2}$) و ردیف پایین برای توان ۲۸۰ میکروووات است. همه این نمودارها به تعداد کل نقاط، که شامل تعداد ذرات در تعداد فریم‌ها است، نرمال شده است.

آنچه که از شکل (۳) فراوانی احتمال سرعت‌های حرکت $v^{(ج)}$ می‌توان نتیجه گرفت به قرار زیر است:

۱) در مولفه V_x، نمودارها عموماً شامل دو قله هستند و سلول‌ها در راستای x، تمایل به حرکت رفت و برگشتی در این راستا را نشان می‌دهند.

۲) در مولفه V_y، نمودارها به شکل تک قله‌ای دیده می شوند و به دلیل پهنای کم میکرولوله‌ها سلول‌ها در این راستا محدودیت بیشتری نسبت به راستای x دارند.

۳) از نمودار سرعت در راستای x می‌توان مشاهده کرد که با افزایش توان از ۱۸۰ µW به ۲۸۰ µW، قله‌های سرعت در راستای x و y کمی پهن‌تر می‌شوند. این روند از طریق انطباق و مقایسه نمودارها قابل تشخیص است و بیانگر تغییراتی در پاسخ دینامیکی نمونه تحت شدت‌های مختلف نور است.

٤) فراوانی سرعت در راستای x وقتی که قطبش نور موازی با لوله و هنگامی که قطبش نور عمود بر لوله است تفاوت واضحی دارند. این نتیجه با آنچه که قبلا در دانشگاه تحصیلات تکمیلی برای بررسی حرکت سلول‌های کلامیدوموناس در یک محفظه آزاد بدست آمده است، مطابقت دارد. در آن آزمایش نیز در شرایط مشابه توان نوردهی ۱۵۰ µW، فراوانی سرعت در راستای x و y تفاوت قابل ملاحظه‌ای نشان داد [۹].

نتیجه‌گیری

با توجه به داده‌های بدست‌آمده از آزمایش‌ها و تحلیل تصاویر توسط نرم‌افزار، مشخص شد تابش نور قطبیده و جهت‌گیری آن تاثیر قابل توجهی بر حرکت سلول‌ها دارند. به ویژه، هنگام استفاده از نور قطبیده خطی موازی با محور لوله، رفتار حرکتی سلول‌ها در راستای x و راستای y متفاوت است، بدین گونه که نه تنها با افزایش توان نور سرعت حرکت ذرات افزایش می‌یابد، بلکه تابش نور قطبیده خطی در راستای محور لوله نیز موجب افزایش سرعت حرکت سلول‌ها در همان راستا می‌شود. این نتایج با مشاهدات قبلی که برای حرکت آزاد همین‌سلول‌ها بدست آمده است و نشان‌دهنده تفاوت‌های معنادار در فراوانی سرعت در راستای x و y سلول‌های کلامیدوموناس است، همخوانی دارد. بنابراین، علاوه بر اثر شدت نور، قطبش نور نیز نقش مؤثری در تنظیم حرکت سلول‌ها دارد و این یافته‌ها می‌توانند به درک بهتر اثرات نور بر رفتار سلول‌ها در شرایط آزمایشی مختلف کمک کند.

مرجع‌ها

[1] Bennett, Rachel R., and Ramin Golestanian. "*A steering mechanism for phototaxis in Chlamydomonas*." *Journal of The Royal Society Interface* **12**, no. 104 (2015): 20141164.

[2] Goodenough, Ursula, ed. The Chlamydomonas Sourcebook*:* Volume 1*: Introduction to Chlamydomonas and Its Laboratory Use*. Academic Press, 2023.

[3] Wan, Kirsty Y. "*Active oscillations in microscale navigation*." *Animal Cognition* **26**, no. 6 (2023): 1837-1850.

[4] Polin, Marco, Idan Tuval, Knut Drescher, Jerry P. Gollub, and Raymond E. Goldstein. "*Chlamydomonas swims with two "gears" in a eukaryotic version of run-and-tumble locomotion.*" Science **325**, no. 5939 (2009): 487-490.

[5] Mittelmeier, Telsa M., Joseph S. Boyd, Mary Rose Lamb, and Carol L. Dieckmann. "*Asymmetric properties of the Chlamydomonas reinhardtii cytoskeleton direct rhodopsin photoreceptor localization."* Journal of Cell Biology **193**, no. 4 (2011): 741-753.

[6] Yang, Siyuan, Mingji Huang, Yongfeng Zhao, and H. P. Zhang. *"Controlling cell motion and microscale flow with polarized light fields."* *Physical Review Letters* **126**, no. 5 (2021): 058001.

[7] Harris, Elizabeth H. *The chlamydomonas sourcebook*. Edited by David B. Stern, and George Witman. Vol. 1. San Diego, CA: Elsevier, 2009.

[8] Cánovas, Francisco M., Ulrich Lüttge, Rainer Matyssek, and Hans Pretzsch, eds. *Progress in Botany*. Springer International Publishing, 2021.

[9] جولائیان، فرنوش ؛ «مطالعه دینامیک میکروجلبک تحت تاثیر نور قطبیده خطی و دایروی»؛ *پایان‌نامه کارشناسی ارشد*، دانشگاه تحصیلات تکمیلی در علوم پایه زنجان، سال **۱۳۹۶**

نقض پاریته و دینامیک غیرتعادلی در ظهور دستیدگی حیات

جنت، امیرمسعود[۱]؛ شاکری، سروش[۱]؛ فرخ‌پور، حسین[۲]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان

[۲]دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی اصفهان

چکیده

یکی از معماهای طبیعت هموکایرالیتی زیست‌مولکولی است. دیدگاه‌های متفاوتی در مورد ریشه این پدیده وجود دارد. این دیدگاه‌ها را می‌توان به دو شاخه اصلی تقسیم کرد: ۱) فرآیندهای تصادفی ۲) برهم‌کنش‌های نقض پاریته. هر دوی این دیدگاه‌ها منجر به آثار کوچکی می‌شوند و نیاز به یک سازوکار تقویت‌کننده دارند. در این پژوهش با ترکیب این دو دیدگاه، سازوکاری ارائه می‌شود که هموکایرالیتی زیست‌مولکولی را نتیجه خواهد داد. با در نظر گرفتن این سازوکار برای برهم‌کنش نقض پاریته مولکول‌های دستیده، به بررسی اثر آن بر یک سامانه دور از تعادل متأثر از نویز پرداخته خواهد شد.

واژگان کلیدی: *هموکایرالیتی، نقض‌پاریته، ماده‌تاریک، فرآیند تصادفی، نویز*

Parity Violation and Non-Equilibrium Dynamics in the Emergence of Life’s Chirality

Jannat, Amirmasoud[1]; Shakeri, Soroush[1]; Farrokhpour, Hossein[2]

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

[2]Department of Chemistry, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

One of the mysteries of nature is biomolecular homochirality. There are various perspectives on the origin of this phenomenon, which can be broadly categorized into two main approaches: (1) stochastic processes, and (2) parity-violating interactions. Both approaches, on their own, result in negligible effects and thus require an amplification mechanism. In this study, by combining these two perspectives, we propose a mechanism that leads to biomolecular homochirality. Considering this mechanism for the parity-violating interaction chiral molecules, we investigate its impact on a far-from-equilibrium system induced by noise.

Keywords: *Homochirality, Parity Violation, Dark Matter, Stochastic Process, Noise*

مقدمه

حیات به عنوان یک سیستم پیچیده، از سازمان‌یافتگی مولکول‌های دستیده پدیدار شده است و دستیدگی مولکول‌ها نقش بنیادی در ایجاد نظم اولیه و ظهور فرایندهای زیستی ایفا کرده است.

زیست‌مولکول‌هایی چون آمینواسیدها مولکول‌هایی دستیده هستند؛ برخلاف شواهد آزمایشگاهی در زمینه تولید این نوع مولکول‌ها که منجر به یک مخلوط راسمیک می‌شود، تنها یک نوع انانتیومر از این مولکول‌ها در موجودات زنده وجود دارد. این پدیده هموکایرالیتی زیست‌مولکولی نامیده می‌شود [۱–۳].

منشأ این پدیده تا به امروز ناشناخته است؛ البته نظریاتی برای پاسخ به آن وجود دارد. گروهی از دانشمندان بر این باورند که این پدیده به صورت تصادفی به وجود آمده است و با استفاده از معادلات مربوط به فرآیندهای تصادفی آن را بررسی کرده‌اند. گروهی دیگر با استفاده از برهم‌کنش‌های نقض پاریته چون برهم‌کنش‌های جریان ضعیف با این مولکول‌ها سعی بر توجیه این پدیده داشته‌اند [۱, ۳–۷].

با در نظر گرفتن نظریه‌های مختلف، می‌توان با وارد کردن یک برهم‌کنش نقض پاریته به صورت القای یک مولکول غیردستیده که به یک مولکول کایرال تبدیل می‌شود، دو دیدگاه مختلف را به یک سازوکار جدید تبدیل کرد که می‌تواند جایگزین دیدگاه‌های گذشته باشد. عناصر این سازوکار با توجه به نوع برهم‌کنش نقض پاریته و شمای شیمیایی می‌تواند تغییر کند.

در این پژوهش با استفاده از فرآیندهای تصادفی و اعمال برهم‌کنش‌های نقض پاریته به شمای شیمیایی مسئله، یک مدل برای توجیه پدیده هموکایرالیتی زیست‌مولکولی ارائه شده است. نشان داده خواهد شد که با فرضیات معین در خصوص ثابت سرعت‌ها و در حضور برهم‌کنش نقض پاریته امکان تولید مولکول‌های دستیده در بازه زمانی کوتاه وجود دارد.

تحول شیمیایی مولکول‌های دستیده

برای بررسی مسئله باید واکنش‌هایی شیمیایی را که می‌توانند غلظت‌های دستیدگی‌های متفاوت از مولکول دستیده را تغییر دهند بررسی کرد. فرانک[46] مدلی معرفی کرد که در آن مولکول‌های دستیده از مولکول غیردستیده، A، به صورت خودکاتالیستی تولید می‌شوند[۸]:

$$A + D \overset{k_a}{\rightleftarrows} 2D$$
$$A + L \overset{k_a}{\rightleftarrows} 2L \qquad (۱)$$

که در آن D مولکول راست‌دست، L مولکول چپ‌دست، A مولکول غیردستیده و k_a ثابت سرعت واکنش خود–کاتالیسیتی است. مولکول‌های دستیده D و L می‌توانند به مولکول غیردستیده A نیز تبدیل شوند. این نوع از واکنش‌ها در کلی‌ترین حالت به صورت زیر بیان می‌شوند [۹]:

$$A \underset{k_n}{\overset{k_d}{\rightleftarrows}} D$$
$$A \underset{k_n}{\overset{k_d}{\rightleftarrows}} L \qquad (۲)$$

که در آن k_d ثابت سرعت واکنش واپاشی و k_n ثابت سرعت واکنش غیرخود–کاتالیستی است. برای وارد کردن اثر ذراتی با واکنش‌های نقض پاریته، می‌توان واکنش زیر را به این واکنش‌ها اضافه کرد:

$$A + \phi \overset{k_s}{\rightleftarrows} D \qquad (۳)$$

[46] Frank

در این واکنش ϕ ذره‌ای با برهم‌کنش نقض پاریته و k_s ثابت سرعت این واکنش است. این واکنش به وضوح شکست تقارن را به سامانه اعمال می‌کند و برهم‌کنش‌های نقض پاریته با مولکول‌های دستیده و ارجحیت یکی از دستیدگی‌ها را به مدل‌های پیشین اضافه می‌کند. این واکنش می‌تواند شامل برهم‌کنش نقض پاریته یک ذره بنیادی با برهم‌کنش ضعیف نظیر نوترینوها یا برخی از نامزدهای ماده تاریک مانند نوترینوهای استریل یا اکسیون‌ها با الکترون‌ها [۳, ۱۰] یا پروتون‌های مولکول [۵] غیردستیده باشد که منجر به اختلاف انرژی در حالت‌های کوانتومی مولکول دستیده می‌شود و یکی از دستیدگی‌های آن را به گزینه‌ای پایدارتر و مرجح تبدیل می‌کند. در واکنش (۳) این برتری برای مولکول راست‌دست در نظر گرفته شده است.

می‌توان تقارن در غلظت‌های دستیدگی‌های متفاوت را با معرفی پارامتر زیر دنبال کرد [۹]:

$$\omega = \frac{([D]-[L])}{([D]+[L])} \qquad (٤)$$

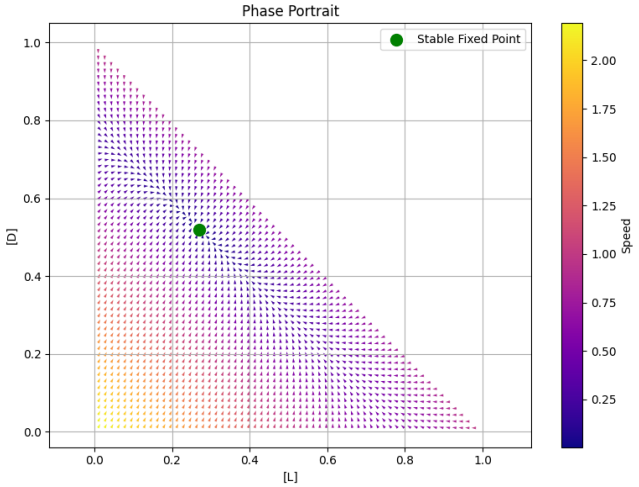
علامت [] برای غلظت به کار گرفته شده است. با توجه به واکنش‌های (۳-۱)، تغییرات زمانی غلظت را می‌توان از دو معادله دیفرانسیل زیر بدست آورد:

$$\frac{d\omega}{dt} = (1-\omega)\frac{k_s[A]n_\phi}{r} - \frac{2k_n[A]\omega}{r} \qquad (5)$$

$$\frac{d[A]}{dt} = (k_d - k_a[A])r - 2k_n[A] - k_s[A]n_\phi \qquad (6)$$

که در آن $r = [D] + [L]$ و n_ϕ غلظت ذره با برهم‌کنش نقض پاریته است.

شکل (۱) تغییرات غلظت دستیدگی‌های مختلف مولکول را با شرایط اولیه متفاوت نشان می‌دهد. در محورهای افقی و عمودی حالت‌های هموکایرال و در نقاطی که روی خط $[D] = [L]$ قرار دارند حالت راسمیک کامل به وجود می‌آید. در سایر نقاط غلظت یکی از انانتیومرها از دیگری بیش‌تر است. نقطه سبزرنگ نقطه تعادل سامانه را نشان می‌دهد که یک تعادل پایدار است و در صورتی که سامانه در این حالت قرار بگیرد دیگر تحول نمی‌کند. تأثیر اعمال واکنش (۳) به وضوح قابل مشاهده است چرا که نقطه تعادل پایدار در حالتی قرار گرفته که غلظت یکی از انانتیومرها (در اینجا D) بیش‌تر از دیگری است.



شکل(۱): نمودار فاز برای غلظت انانتیومرهای چپ‌دست و راست‌دست به ازای شرایط اولیه مختلف. در این نمودار $k_a = k_n = k_d = \mathrm{n}_\phi k_s = 10^{-5}s^{-1}$ و $10^{-5}M^{-1}s^{-1}$.

مدل تصادفی برای سامانه دور از تعادل

با توجه به شمای شیمیایی در نظر گرفته شده و نویز گاوسی استاندارد (نویزی گاوسی با میانگین برابر با صفر و واریانس برابر با یک) در سامانه می‌توان معادله فوکر-پلانک را به صورت زیر نوشت [۹]:

$$\frac{\partial P(\omega,t)}{\partial t} = -\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial\left(H_j P(\omega,t)\right)}{\partial x_j} + \frac{1}{2}\sum_{j,k=1}^{3}\frac{\partial^2\left(B_{jk}P(\omega,t)\right)}{\partial x_j \partial x_k} \qquad (٧)$$

که در آن P چگالی احتمال و x_iها مؤلفه‌های بردار حالت زیر هستند:

$$x = ([A],[D],[L]) := (a,d,l) \qquad (٨)$$

H جمله پیش‌ران است که به صورت زیر به دست می‌آید[۹]:

$$\boldsymbol{H} = \sum_i T(x + \epsilon \boldsymbol{s_i}|x)\boldsymbol{s_i} \qquad (۹)$$

که در آن ϵ معکوس حجم سامانه است و $\boldsymbol{s_i}$ها سطرهای ماتریس استیکیومتری هستند که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$S = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (۱۰)$$

$T(x + \epsilon \boldsymbol{s_i}|x)$ نیز نرخ‌های گذار از یک حالت به حالت دیگر هستند. در مدل ارائه‌شده ماتریس پیش‌ران به صورت است:

$$H = \begin{pmatrix} (k_d - k_a a - k_n)r - k_s a n_\phi \\ k_a a d + k_n a - k_d d + k_s a n_\phi \\ k_a a l + k_n a - k_d l \end{pmatrix} \qquad (۱۱)$$

B ماتریس پخش است که از رابطه زیر به دست می‌آید [۹]:

$$B = \epsilon \sum_i T(x + \epsilon \boldsymbol{s_i}|x)\boldsymbol{s_i} \otimes \boldsymbol{s_i} \qquad (۱۲)$$

پس از انجام محاسبات و اعمال تقریب‌هایی چون حد ترمودینامیکی ($n \gg 1$)، ثابت ماندن r، ثابت ماندن n و تغییر متغیر[۴۷] معادله لانژوین به دست می‌آید:

$$\frac{d\omega}{dt} = -\frac{2k_n k_d V}{k_a V}\omega + k_s n_\phi \left[\frac{\frac{k_a k_d N}{V} - 2k_n k_d}{\frac{ka^2N^2}{V^2} - \frac{k_a k_d N}{V} + 2k_n k_d}\right] + \sqrt{\frac{1-\omega^2}{N}\left[k_s n_\phi \left(\frac{N}{V} - 1\right) + 2k_d\right]}\eta(t) \qquad (۱۳)$$

و در نهایت معادله فوکر–پلانک را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\frac{\partial P(\omega,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \omega}\left\{\left(-\frac{2k_n k_d V}{k_a N}\omega + k_s n_\phi \left[\frac{\frac{k_a k_d N}{V} - 2k_n k_d}{\frac{ka^2N^2}{V^2} - \frac{k_a k_d N}{V} + 2k_n k_d}\right]\right)P(\omega,t)\right\} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial \omega^2}\left\{\frac{1-\omega^2}{N}\left[k_s n_\phi \left(\frac{N}{V} - 1\right) + 2k_d\right]P(\omega,t)\right\} \qquad (۱۴)$$

نتایج

با حل معادله (۱۴) به صورت عددی و روش کرنک–نیکلسون[۴۸]، می‌توان چگالی احتمال را در حالت‌های مختلف و زمان‌های مختلف بررسی کرد. شکل (۲) این نتیجه را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود سامانه به حالت نزدیک به هموکایرال میل پیدا می‌کند و محتمل‌ترین حالت، $\omega \sim 0.7$ است. در شکل (۳) چگالی احتمال نهایی سامانه، در زمان 10^7 ثانیه نشان داده شده است.

با توجه به ماهیت برهم‌کنش نقض پاریته، ثابت سرعت k_s باید بسیار کوچک‌تر بقیه ثابت‌های سرعت باشد. از طرف دیگر از آن جا که غلظت بسیاری از گزینه‌هایی که می‌توان به عنوان ذره‌ای که برهم‌کنش نقض پاریته با مولکول دستیده انجام می‌دهد، مانند نوترینوها یا نامزدهای ماده تاریک، بسیار بالاست و با توجه به اینکه بقیه ثابت‌های سرعت از مرتبه 10^{-5} هستند[۷]، در شبیه‌سازی‌های صورت‌گرفته، $n_\phi k_s = 10^{-5} s^{-1}$ قرار داده شده است.

یک نکته قابل توجه که وجود دارد حضور برهم‌کنش نقض پاریته در جمله پیش‌ران است. جمله پخشی با زمان به صورت $\sqrt{t}$ و جمله پیش‌ران با آهنگ t افزایش می‌یابد. بنابراین جمله پیش‌ران در زمان‌های بالا نهایتاً غالب خواهد شد و تأثیر تخمین مقدار $n_\phi k_s$ را از بین خواهد برد.

[47] $x \to y = \left(n = l + d + a = \frac{N}{V}, r, \omega\right)$

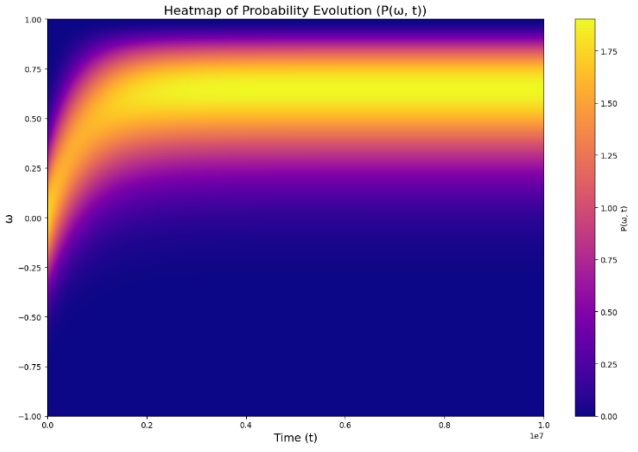
[48] Crank–Nicolson method

شکل (۳) حالت نهایی سامانه را در 10^7 ثانیه نشان می‌دهد. در کارهای مشابه انجام شده برای جریان‌های ضعیف، این زمان از مرتبه 10^{11} ثانیه برآورد شده است. این نشان می‌دهد که سازوکار معرفی‌شده با استفاده از بازنویسی شمای شیمیایی و اعمال واکنش شکست تقارن به صورت مستقیم تا چه حد بازدهی را افزایش داده است.

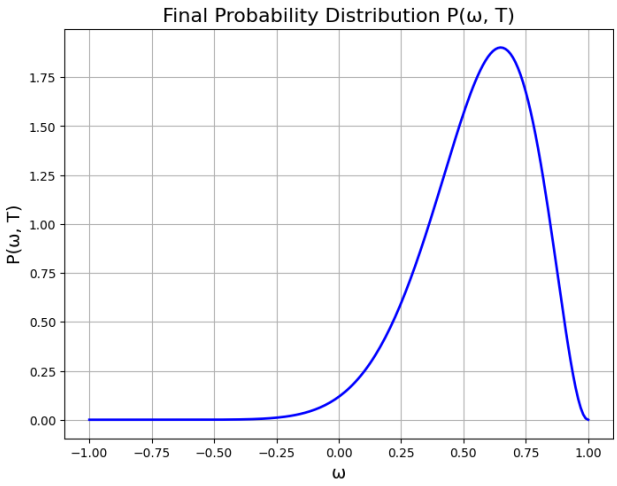
مدل‌سازی این سامانه در آزمایشگاه نیازمند انتخاب دقیق پارامترهای فیزیکی و هم‌چنین شرایط ویژه آزمایش از جمله اعمال دینامیک غیرتعادلی است.

جمع‌بندی

مدل ارائه‌شده اثر ناچیز برهم‌کنش‌های نقض پاریته با مولکول‌های دستیده[۳, ٤, ۱۰] را تقویت می‌کند. هم‌چنین زمان طولانی پیش‌بینی شده توسط مدل‌هایی که تنها با در نظر گرفتن فرآیندهای تصادفی[۹] سعی در توجیه این پدیده داشتند یا حتی مدل‌هایی که سعی در ترکیب این دیدگاه‌ها به گونه دیگری را داشتند[۷, ۱۱] را به صورت چشم‌گیری کاهش می‌دهد.



شکل (۲): چگالی احتمال (رنگ) حالت‌های مختلف (محور عمودی) برحسب زمان(محور افقی) به ازای $k_a = ,k_n = k_d = \mathrm{n}_\phi k_s = 10^{-5}s^{-1}$ و $10^{-5}M^{-1}s^{-1}$. $V = 100cm^3$



شکل (3): مقدار چگالی نهایی احتمال در حالت‌های مختلف در زمان 10^7 ثانیه به ازای در این نمودار $k_a = ,k_n = k_d = \mathrm{n}_\phi k_s = 10^{-5}s^{-1}$ و $10^{-5}M^{-1}s^{-1}$. $V = 100cm^3$

به طور خلاصه، این سازوکار می‌تواند نارسایی‌های دیدگاه‌های مختلف را پوشش دهد و ضرورت هموکایرالیتی زیست‌مولکولی را توجیه کند. بدین ترتیب سازوکار ارائه‌شده، توسعه‌ای بر کارهایی که در گذشته صورت گرفته، از جمله [۷, ۹, ۱۱] است.

در ادامه این پژوهش هدف این است که این مدل‌سازی را برای شرایط واقعی و با بهره‌گیری از پارامترهای واقعی، این سامانه بررسی شود و فضای پارامتر و نتایج سنجیده شود. هرچند، مدل ارائه‌شده علی رغم سادگی، ویژگی‌های کلیدی سیستم را شامل می‌شود.

سپاس‌گزاری

از هم‌کاری دکتر فرهاد شهبازی، دکتر کیوان آقابابایی سامانی، دکتر نیلوفر احمدی‌پور و مهندس نیما شمالی صمیمانه تشکر می‌کنیم.

مرجع‌ها

[۱] Quack, M., G. Seyfang, and G. Wichmann, *Perspectives on parity violation in chiral molecules: theory, spectroscopic experiment and biomolecular homochirality.* Chemical Science, ۲۰۲۲. ۱۳(۳۶): p. .۱۰۵۹۸-۱۰۶۴۳

[۲] Senami, M. and K. Ito, *Asymmetry of electron chirality between enantiomeric pair molecules and the origin of homochirality in nature.* Physical Review A, ۲۰۱۹. ۹۹(۱): p. .۰۱۲۵۰۹

[۳] جنت, ا. و س. شاکری, اثر نوترینوهای کیهانی،ابرنواختری و استریل بر معمای کایرال حیات, در در چهاردهمین کنفرانس فیزیک ذرات و میدان‌ها. ۱۴۰۲, دانشگاه شیراز: شیراز.

[٤] Bargueño, P. and R. Pérez de Tudela, *The role of supernova neutrinos on molecular homochirality.* Origins of Life and Evolution of Biospheres, ۲۰۰۷. ۳۷: p. .۲۵۳-۲۵۷

[٥] Famiano, M.A., et al., *Chiral selection ,isotopic abundance shifts, and autocatalysis of meteoritic amino acids.* Physical Review Research, ۲۰۲۱. ۳(۳): p. .۰۳۳۰۲۵

[٦] Globus, N., R.D. Blandford, and A. Fedynitch, *Polarized muons and the origin of biological homochirality.* arXiv preprint arXiv:.۲۰۲۱ ,۲۱۱۰/۰۱۹۷۵

[۷] Kondepudi, D.K. and G.W. Nelson, *Weak neutral currents and the origin of biomolecular chirality.* Nature, ۱۹۸۵. ۳۱۴(۶۰۱۰): p. .۴۳۸-۴۴۱

[۸] Frank, F.C., *On spontaneous asymmetric synthesis.* Biochimica et biophysica acta, ۱۹۵۳. ۱۱: p. .۴۵۹-۴۶۳

[۹] Jafarpour, F., T. Biancalani, and N. Goldenfeld, *Noise-induced mechanism for biological homochirality of early life self-replicators.* Physical review letters, ۲۰۱۵. ۱۱۵(۱۵): p. .۱۵۸۱۰۱

[۱۰] جنت, ا., نقش ماده‌تاریک بر معمای کایرال حیات, در دانشکده فیزیک. ۱۴۰۱, دانشگاه صنعتی اصفهان. ص .۹۲–۹۱.

[۱۱] Kondepudi, D.K. and G.-W. Nelson, *Chiral symmetry breaking in nonequilibrium systems.* Physical Review Letters, ۱۹۸۳. ۵۰(۱۴): p. .۱۰۲۳

پیش‌بینی مبتنی بر یادگیری ماشین زبری سطح در نهشت دانه‌ای با استفاده از ResNet

سید فیض‌اله قوامی میرمحله[۱]، احسان ندایی اسکوئی[۲]، مانیا ملکی[۳]

[۱،۲،۳] گروه فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی زنجان، زنجان

چکیده

در این پژوهش، از مدل یادگیری ماشینی ResNet برای پیش‌بینی زبری سطح در شبیه‌سازی‌های دینامیکی مواد دانه‌ای با استفاده از داده‌های شبیه‌سازی شبکه‌ای متناظر یعنی نهشت تصادفی بهره گرفته شد. شبیه‌سازی‌های دینامیکی با استفاده از نرم‌افزار لمپس انجام پذیرفت و داده‌های حاصل از فرآیند نهشت تصادفی به عنوان ورودی مدل مورد استفاده قرار گرفت و زبری سطح شبیه‌سازی‌های دینامیکی به عنوان خروجی مدل قرار گرفت. یافته‌ها نشان داد که مدل ResNet قادر است با دقت مناسبی میزان زبری سطح را پیش‌بینی نماید. این روش نه تنها می‌تواند زمان مورد نیاز برای شبیه‌سازی را به میزان قابل توجهی کاهش می‌دهد، بلکه توانایی روش‌های یادگیری ماشینی در تحلیل سیستم‌های فیزیکی پیچیده را نیز به نمایش می‌گذارد.

***واژگان کلیدی**: یادگیری ماشین، ResNet، شبیه‌سازی دینامیکی، زبری سطح، مواد دانه‌ای.*

Machine Learning-Based Prediction of Interface Roughness of Granular Deposition Using ResNet

Ghavami Mirmahalle, S.F. [1]; Nedaaee Oskoee, Ehasn[2]; Maleki, Maniya[3]

[3,2,1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan

Abstract

In this study, a machine learning model (ResNet) was used to predict interface roughness of dynamic simulations of granular materials using the corresponding lattice simulation data, i.e. random deposition. The dynamic simulations were performed using LAMMPS software. The data obtained from the random deposition process were used as input for the model and the roughness of dynamic simulation was used as output. The results demonstrated that the ResNet model can predict interface roughness with appropriate accuracy. This approach not only significantly reduces the required simulation time but also shows the capability of machine learning methods in analyzing complex physical systems.

***Keywords**: Machine learning, ResNet, Dynamic simulation, Interface roughness, Granular materials.*

مقدمه

رشد سطح، موضوعی جذاب برای مطالعه علمی است ازانجاکه در بسیاری از فرآیندهای طبیعی و غیرطبیعی مشاهده می‌شود. برخی

از این فرآیندها شامل پیشروی جبهه آتش، رشد باکتری، رشد کریستال، نهشت بخار و خوردگی مواد است. ساده‌ترین نوع رشد سطح، مدل نهشت تصادفی‌است که در آن ذره در یک مکان تصادفی در بالای سطح بطور عمودی پایین می‌آید و به بالاترین ذره در آن ستون می‌چسبد [۱]. ابزار استاندارد برای مطالعه سطح درحال رشد، مفاهیم مقیاس‌بندی و استفاده از نماهای بحرانی است. روابط مقیاس‌بندی برای توصیف پدیده‌هایی همانند نهشت دانه‌ای [۲] استفاده شده‌اند.

از سوی دیگر، مدل‌های یادگیری ماشین، پتانسیل بالایی در تحلیل سیستم‌های فیزیکی از خود نشان داده‌اند. در حوزه مواد دانه‌ای، مطالعات مختلفی با مدل‌های یادگیری ماشین انجام شده‌اند [۳ و ٤] اما در زمینه رشد سطح مواد دانه‌ای استفاده از یادگیری ماشین موجود نیست.

در این مطالعه، ما شبیه‌سازی‌های غیرشبکه‌ای و دینامیکی دانه‌ها با استفاده از نیروهای برهمکنشی را در محیط سیال انجام داده و با استفاده از شبکه عصبی ResNet، ارتباطی بین این نوع شبیه‌سازی با شبیه‌سازی شبکه‌ای (با توزیع مشابه) که بدون محاسبات نیرو و برخورد انجام می‌شود برقرار می‌سازیم که توانایی مدل یادگیری ماشین در یافتن ارتباط بین نتایج فیزیکی را بیان می‌کند و از طریق آن می‌توان در زمان بسیار کمتر از شبیه‌سازی‌های دینامیکی، نتایج فیزیکی را بدست آورد.

شبیه‌سازی

برای شبیه‌سازی دینامیک از بسته دینامیک مولکولی مواد دانه‌ای لمپس (LAMMPS) استفاده شد. شبیه‌سازی در داخل یک سیستم دوبعدی انجام شد. دانه‌های با خصوصیات پلی‌استایرن در دسته‌های ٦٠ عددی در بالای یک جعبه دوبعدی ۱۲×۱۰ سانتیمتر بصورت توزیع تصادفی یکنواخت ایجاد می‌شوند. ۲٤۰ دسته در فاصله‌های زمانی معین تولید می‌شوند که در اینجا ما آن را ۲٤۰ زمان شبیه‌سازی می‌نامیم. برای شبیه‌سازی دینامیکی که زمان‌بر می‌باشد ۵۰ بار شبیه‌سازی هر بار با یک عدد توزیع در LAMMPS انجام شد. در این شبیه‌سازی‌ها، با استفاده از نیروهای تعیین شده، دانه‌ها به سمت پایین سلول با نیروی گرانش حرکت کرده و پس از برخوردهای متوالی، سطح را تشکیل می‌دهند. سه نوع شبیه‌سازی در داخل محیط‌هایی با وشکسانی و چگالی آب، استون و هگزان انجام شد. نرم‌افزار لمپس برهمکنش‌های موجود بین ذرات و سیال را محاسبه کرده و تصاویر نهشت را ارائه می‌دهد.

برهمکنش نیروها با یکدیگر و با دیوار توسط مدل هرتزی[٤٩] محاسبه می‌شود که از روابط زیر استفاده می‌کند:

$$F_{n_{i,j}} = \sqrt{\frac{\delta_{i,j}}{d}}\left(k_n \delta_{i,j} n_{i,j} - \gamma_n m_{eff} v_{n_{i,j}}\right) \qquad (۱)$$

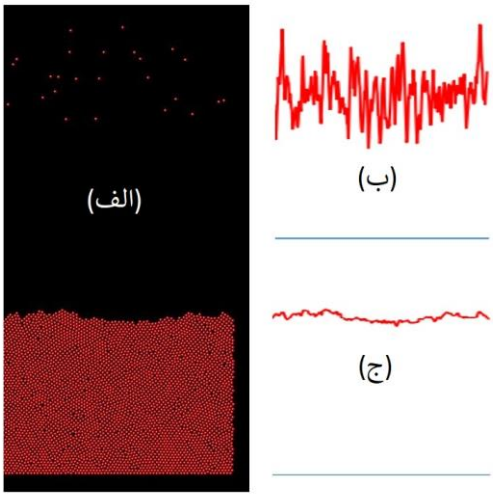
$$F_{t_{i,j}} = \sqrt{\frac{\delta_{i,j}}{d}}\left(k_t \delta_{i,j} n_{i,j} - \gamma_t m_{eff} v_{t_{i,j}}\right) \qquad (۲)$$

که در آن δ فاصله برهمکنشی دو ذره، d، قطر دانه‌ها، m جرم موثر، n بردار واحد در جهت خط بین مرکز دو دانه، k، ضریب کشسانی، γ ضریب ویسکوالاستیک، v سرعت نسبی است. برای محیط داخل سلول، ضرایب مرتبط با آب قرار داده شده است. نیروی حاصل از وشکسانی نیز بصورت زیر وارد می‌شود:

[٤٩] Hertzian

$$F_i = -\gamma v_i \qquad (۳)$$

در روابط بالا F نیرو، k ضریب الاستیک، γ ضریب میرایی، v سرعت نسبی و m جرم موثر است. نیروی گرانش نیز به سمت پایین وارد می‌شود.



شکل ۱: تصویر (الف) قسمتی از سطح تشکیل یافته با نرم‌افزار لمپس تا زمان ۱۷۵–ام را نشان می‌دهد. تصویر (ب) سطح نهشت تصادفی را که از محاسبه مختصات طولی اولیه دانه‌های تولید شده تا آن زمان بدست می‌آید نشان می‌دهد و تصویر (ج) سطح دینامیکی را که به یک فصل مشترک یک بعدی تبدیل شده است نشان می‌دهد.

نهشت تصادفی: برای انجام شبیه‌سازی شبکه‌ای که در زمان کوتاهی انجام می‌شود تصویر دانه‌ها پس از تولید ذخیره شده و سپس دانه‌ها از ظرف خارج می‌شوند. از مختصات طولی این دانه‌های ظاهر شده برای انجام شبیه‌سازی شبکه‌ای انجام می‌شود. بدین صورت که در هر واحد از طول که دانه‌ای ایجاد شود اندازه آن واحد از طول افزایش می‌یابد و در طی ۲۴۰ دوره زمانی سطح این مقادیر با هم جمع شده وسطوح نهشت تصادفی در طی زمان ایجاد می‌شود. ۵۰ بار نهشت تصادفی متناظر با توزیع دانه‌ها در ۵۰ شبیه‌سازی دینامیکی با عدد توزیع در لمپس مشابه با شبیه‌سازی دینامیکی و ۴۵۰ بار دیگر با توزیع‌های دیگر انجام شد. محاسبات آن در نرم‌افزار متلب با استفاده از تصاویر ایجاد شده در لمپس انجام شد.

مفاهیم مقیاس‌بندی

نماهای مقیاس‌بندی، پیکربندی و دینامیک سطح درحال رشد را توصیف می‌کنند. دو پارامتر اصلی که باید در این مفاهیم محاسبه شود ارتفاع متوسط سطح درحال رشد و دیگری زبری سطح است. ارتفاع متوسط از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$\bar{h}(t) \equiv \frac{1}{L}\sum_{i=1}^{L} h(i,\ t) \qquad (۴)$$

که در آن $h(i,\ t)$ ، ارتفاع سطح درحال رشد در موقعیت افقی x_i و زمان t است. زبری سطح نیز از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$w(L,t) \equiv \sqrt{\frac{1}{L}\sum_{i=1}^{L}[h(i,t) - \bar{h}(t)]^2} \qquad (۵)$$

زبری سطح قبل از رسیدن به اشباع، از رابطه نمایی زیر پیروی می‌کند:

$$w(L,\ t) \sim t^{\beta} \qquad (۶)$$

که در آن β نمای رشد است . ترسیم نمودار لگاریتمی زبری برحسب ارتفاع متوسط برای هر مورد از شبیه‌سازی و سپس متوسط گیری از همه موردها، منحنی‌ای را می‌دهد که شیب آن در محدوده قبل از اشباع برابر با نمای رشد است [۱].

برای بدست آوردن این نمودار، باید نویز سیستم درحال رشد حذف شود. این کار را می‌توان با شبیه‌سازی در یک سیستم با پهنای زیاد یا با انجام دادن شبیه سازی در پهنای کم با دفعات زیاد

و سپس متوسط گیری از همه آنها انجام داد که در این کار مورد دوم که زمان شبیه‌سازی کمتری در شبیه‌سازی دینامیک نیاز دارد اتخاذ شده است. هرچه تعداد شبیه‌سازی‌ها بیشتر باشد نویز کمتری در نمودار متوسط وجود خواهد داشت.

مدل یادگیری ماشین

در این کار، ما به بررسی کاربرد شبکه‌های عصبی برای پیدا کردن الگوهای پیچیده‌ای می‌کنیم که بتوانند از اطلاعات نهشت تصادفی شبیه‌سازی شبکه‌ای به زبری سطح حاصل از شبیه‌سازی دینامیکی ارتباط برقرار کنند. در این مطالعه ما از مدل ResNet [۵] استفاده می‌کنیم که مدل توسعه یافته‌ای از CNN [۶] است.

ازآنجاکه سطوح شبیه‌سازی به یک آرایه یک بعدی تبدیل می‌شوند از مدل ResNet یک‌بعدی استفاده می‌شود تا زبری سطح حاصل از شبیه‌سازی دینامیکی را از روی سطح شبیه‌سازی شبکه‌ای که در زمان بسیار کمی انجام می‌شود پیش‌بینی کند.
این مدل شامل ٤ بلوک است که هر بلوک شامل دو لایه کانولوشن است و درنهایت به دو لایه کاملا متصل و یک لایه خروجی می‌رسد.

لایه ورودی که داده‌های مرتبط با سطح نهشت تصادفی را دریافت می‌کند یک آرایه ۹۳۳ المانی است که ۹۳۲ المان ارتفاع سطح نهشت تصادفی در هر واحد طولی (منهای ارتفاع متوسط آن سطح) در آن زمان است و المان ۹۳۳–ام زمان آن سطح است.

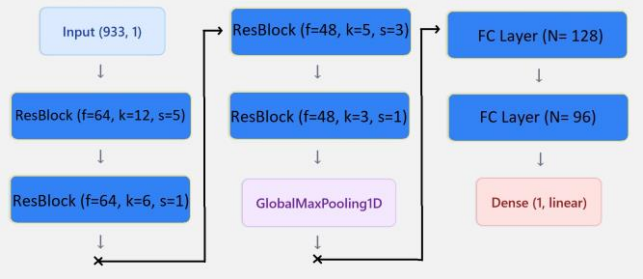
آخرین لایه یک نورون دارد که از بدست آوردن زبری سطح حاصل از شبیه‌سازی دینامیکی در لمپس بدست می‌آید. از تابع فعال‌سازی سافت‌مکس در تمام لایه‌های پنهان استفاده شده است ازانجاکه در این کار از سایر توابع فعال‌ساز نتایج بهتری داد و لایه خروجی تابع فعال‌سازی خطی دارد. جمع مقادیر میانگین مربعی خطا و میانگین خطای مطلق به عنوان تابع هزینه و ADAMax به عنوان تابع بهینه‌ساز استفاده شد. خلاصه مدل در شکل ۲ نشان داده شده است.

آماده‌سازی داده

سطوح درحال رشد از نهشت تصادفی برای ورودی مدل استفاده شده است. برای آموزش و آزمایش مدل از ۵۰ شبیه‌سازی نهشت تصادفی متناظر با ۵۰ مورد شبیه‌سازی دینامیکی استفاده شده است. زبری سطوح شبیه‌سازی‌های دینامیکی به عنوان خروجی مدل درنظر گرفته شده است. ٤۲ مورد شبیه‌سازی برای داده های آموزشی، ٤ مورد برای داده‌های اعتبارسنجی و ٤ مورد نیز برای داده‌های آزمایشی استفاده شدند.

هر مورد شبیه سازی خود شامل ۲٤۰ سطح می‌شد که بدین ترتیب ۲٤۰*٤۲ نمونه برای داده‌های آموزشی بوجود آمد که نمونه‌های آموزش یکبار قبل از آموزش جابجا شده و هم زده می‌شوند تا مدل از روی ترتیب آنها در طی زمان کار یادگیری را انجام ندهد. اما برای داده‌های اعتبارسنجی و آزمایشی این کار انجام نمی‌شود و نمونه‌های آزمایشی با ترتیب خودشان پیش‌بینی می‌شوند تا بتوان براساس ترتیب آنها نمودار زبری هر شبیه‌سازی را ترسیم کرد.

بدین ترتیب، یادگیری مدل با استفاده از ۵۰ مورد شبیه سازی نهشت تصادفی و زبری‌های متناظر با نهشت دینامیکی آن‌ها انجام می‌شود. سپس مدل آموزش دیده، برای پیش‌بینی زبری‌های متناظر با ۵۰۰ مورد شبیه سازی نهشت تصادفی استفاده می‌شود.



شکل ۲: مدل ResNet استفاده شده در این مطالعه. هر بلوک ResNet متشکل از دو لایه کانولوشن است.

تقویت داده: ازانجاکه سطح نهشت تصادفی که حاصل از جمع شدن دانه‌ها در واحدهای افقی تا آن زمان از شبیه سازی است قرینه‌سازی آنها نباید تاثیر در زبری سطح که برای خروجی درنظر گرفته می‌شود داشته باشد. ازین موضوع برای تقویت داده‌های آموزش استفاده شد و قرینه هر سطح به عنوان نمونه جدید با همان زبری به عنوان خروجی استفاده شد.

نتایج

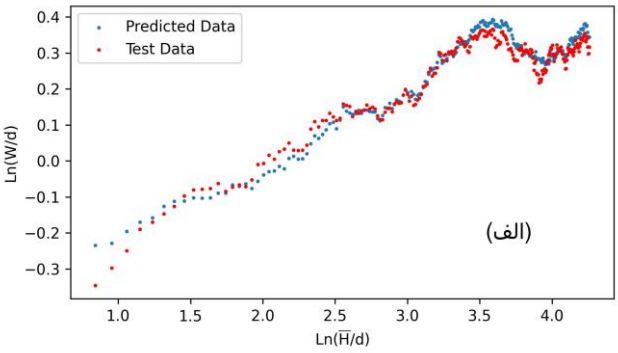
در این مطالعه از توانایی یادگیری ماشین برای پیش‌بینی شبیه‌سازی‌های جدید استفاده کردیم. برای یادگیری از ۳۵ دوره آموزش برای هر سه محیط استفاده شد و ابرپارامترها برای هر سه محیط یکسان بودند. برای داده‌های هر کدام از سه محیط، فرآیند آموزش جداگانه با پارامترهای یکسان انجام شد.

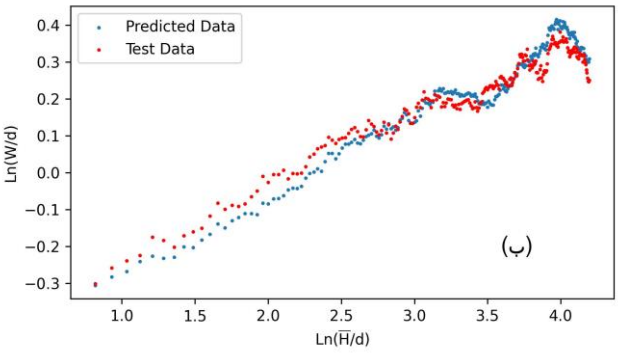
نتایج پیش‌بینی متوسط زبری‌های ۳ نوع شبیه‌سازی با محیط‌های مختلف که برای داده‌های تست قرار داده شده بودند توسط مدل یادگیری ماشین در شکل ۳ نشان داده شده است. نمودار (الف) مربوط به آب، نمودار (ب) مربوط به استون و نمودار (ج) مربوط به هگزان است.

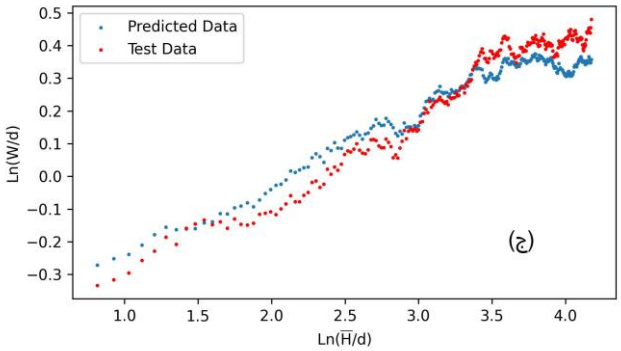
از مدل آموزش دیده برای پیش بینی داده‌های مربوط به ۵۰۰ رشد نهشت تصادفی استفاده شد. متوسط مقادیر برای این ۵۰۰ اجرا در هر زمان گرفته شد و نمودار متوسط آن بصورت مقایسه‌ای با متوسط ۵۰ نمودار حاصل از شبیه سازی‌های دینامیک در شکل ٤ برای محیط‌های آب، استون و هگزان قرار داده شده است.

نمودار شکل ۳ نشان دهنده آن است که چقدر مدل در پیش‌بینی داده‌ها دقت دارد ازانجاکه پیش‌بینی ۵۰۰ نهشت در شکل ٤ بدون نظارت است. در طی فرآیند آموزش مدل، بیشترین نوسان در محیط استون مشاهده شد.

در حالی که ۵۰ شبیه‌سازی در محیط آب (که بیشترین زمان شبیه‌سازی را بدلیل وشکسانی بالا نیاز داشت) با کامپیوتر مورد استفاده بیش از ده روز طول کشید مراحل آموزش و پیش‌بینی ۵۰۰ شبیه‌سازی توسط مدل یادگیری ماشین با همان کامپیوتر در کمتر از یک ساعت انجام شد.



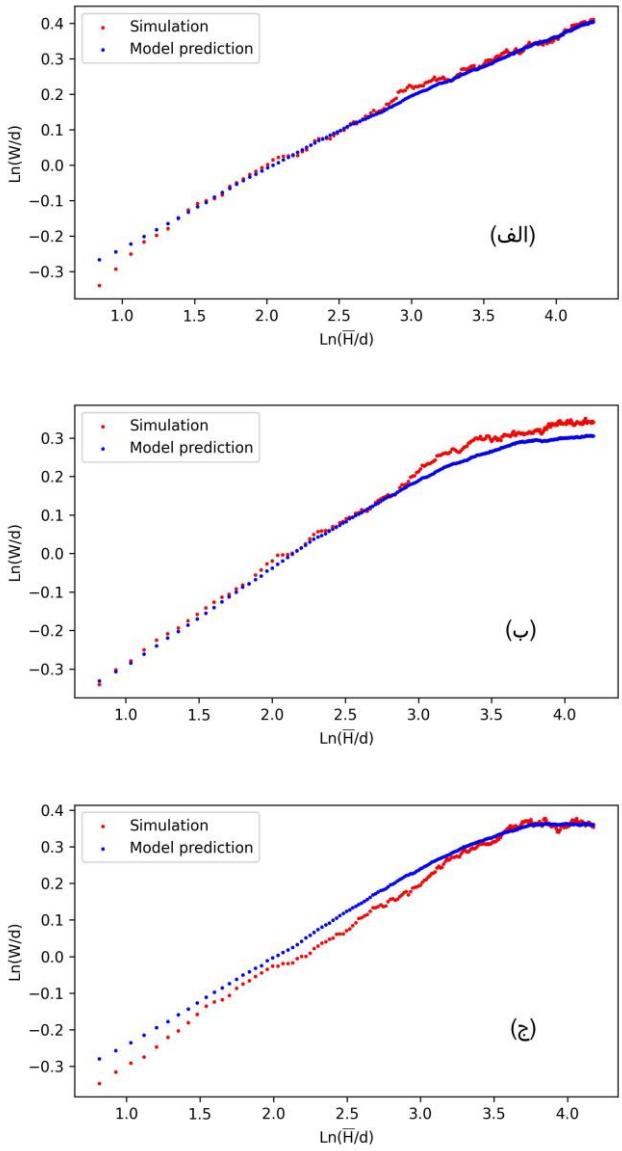




شکل۳ : نمودار قرمز، نمودار زبری متوسط چهار شبیه‌سازی دینامیک و نمودار آبی، متوسط چهار پیش‌بینی مدل برای نهشت تصادفی متناظر با آن‌ها است. سه تصویر برای (الف) محیط آب، (ب) محیط استون و (ج) محیط هگزان نشان داده شده‌اند.

نتیجه گیری

مطالعه حاضر نشان داد که مدل یادگیری ماشینی ResNet می‌تواند ارتباط معناداری بین داده‌های نهشت تصادفی و ناهمواری سطح در شبیه‌سازی‌های دینامیکی متناظر ایجاد کند. با آموزش مدل بر روی مجموعه داده‌های موجود، امکان پیش‌بینی ناهمواری سطح برای شبیه‌سازی‌های دینامیک فراهم شد. نتایج حاصل گویای آن است که با کار روی این روش می‌توان پیش‌بینی مناسبی را از شبیه‌سازی‌های دینامیک زمان‌بر در زمان بسیار کم بدست آورد. عملکرد مدل در محیط‌های سیالی مختلف یعنی آب، استون و هگزان مورد بررسی قرار گرفت که کمترین نوسان مدل در یادگیری برای محیط آب بود که در آن ذرات کمترین انرژی جنبشی را داشتند.



شکل ٤: نمودار قرمز، نمودار زبری متوسط پنجاه شبیه‌سازی دینامیک و نمودار آبی، متوسط پانصد پیش‌بینی مدل برای نهشت تصادفی است. سه تصویر برای (الف) محیط آب، (ب) محیط استون و (ج) محیط هگزان نشان داده شده‌اند.

مرجع‌ها

[۱] Barabasi, A. 1996, Fractal concepts in surface growth (Cambridge University Press)

[۲] Sardari, V., Safari, F., and Maleki, M., Physics of Fluids, 36, (2024), 053303

[۳] Rituparno Mandal, Corneel Casert & Peter Sollich, Nature Communications, 13, No. 4424 (2022)

[٤] Z Cheng, J Wang, W Xiong. Géotechnique 74, (2023), 1291-1303

[٥] Kaiming He, Xiangyu Zhang, Shaoqing Ren, Jian Sun, IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, 2016

[٦] Homma, Toshiteru and Atlas, Les and II, Robert, Neural Information Processing Systems, 1988, 31-40

کاهش بعد فضای مارکف فرایند موران در شبکه‌های دوبخشی

حسنی، مریم؛ آقابابائی سامانی، کیوان

دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

فضای مارکف فرایند موران در یک شبکهٔ N رأسی 2^N بعدی است. کاهش ابعاد فضای مارکف می‌تواند هزینهٔ محاسباتی این فرایند را کاهش دهد. در این مقاله ضمن ارائهٔ گام‌های اصلی برای ساختن فضای مارکف فرایند موران می‌کوشیم با استفاده از تقارن‌ها و ویژگی‌های خاص شبکه‌های دوبخشی ابعاد فضای مارکف را کاهش دهیم و به‌این‌ترتیب سرعت محاسبهٔ کمیت‌هایی همچون احتمال تثبیت و میانگین زمان تثبیت را افزایش دهیم.

واژگان کلیدی: *فرایند موران، زنجیرهٔ مارکف، زمان تثبیت، احتمال تثبیت*

Dimension reduction of Markov space of Moran process on bipartite networks

Hasani, Maryam; Aghababaei Samani, Keivan

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

The Markov space of the Moran process on a network of size N is 2^N-dimensional. Reducing the dimensions of the Markov space may reduce the computational cost of this process. In this article, while presenting the main steps for constructing the Markov space of the Moran process, we try to reduce the dimensions of the Markov space of the Moran process on bipartite networks by using the special features and symmetries of these networks. We show that how this dimension reduction increases the speed of computation of quantities such as fixation probability and the average fixation time.

Keywords*: Moran Process, Markov chain, fixation time, fixation probability*

مقدمه

نظریهٔ گراف تکاملی (RGT) در سال‌های اخیر به یکی از ابزارهای پرکابرد برای مطالعهٔ تحولات جمعیت در سامانه‌های پیچیده و به‌ویژه جمعیت‌های ساختاریافته تبدیل شده است [1]. این نظریه

در ساده‌ترین شکل خود تغییرات جمعیت دو گونهٔ رقیب (مقیم و مهاجم) را روی یک شبکهٔ پیچده مدل‌سازی می‌کند. درواقع در نظریهٔ گراف تکاملی با استفاده از مدل‌سازی عامل‌محور و با در نظر گرفتن قواعد ساده‌ای برای برهم‌کنش و تحول زمانی گونه‌های مختلفِ حاضر در ترکیب جمعیتی، تغییرات جمعیت گونه‌ها را در طول زمان مطالعه می‌کنیم. فرایند موران یکی از ساده‌ترین روش‌های مدل‌سازی برهم‌کنش و تحول زمانی گونه‌ها در یک جمعیت است. در این مدل گونه‌ها به دو دستهٔ مقیم و مهاجم تقسیم می‌شوند و در هر گام زمانی یکی از اعضای جمعیت مطابق این مدل دستخوش تغییر می‌شود. جزئیات این مدل را در بخش بعد مرور خواهیم کرد. دو کمیت اساسی در این مدل مورد توجه قرار می‌گیرند: **احتمال تثبیت** و **زمان تثبیت** گونه‌های مهاجم. مقدار این دو کمیت علاوه بر ویژگی‌های دینامیکی مانند سازواری (fitness) به ویژگی‌های ساختاری شبکه نیز بستگی دارد. در سال‌های اخیر بستگی این کمیت‌ها به ساختار شبکه با روش‌های گوناگون از جمله، محاسبات تحلیلی، شبیه‌سازی و استفاده از زنجیره‌های مارکف مطالعه شده است [2]. زنجیره‌های مارکف معمولا به شکل تقریبی مورد استفاده قرار می‌گیرند زیرا فضای مارکف کامل متناظر با فرایند مارکف در شبکه‌ای با N رأس بسیار بزرگ و 2^N بعدی است. در برخی از شبکه‌ها تقارن‌های موجود در ساختار می‌تواند به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای بعد فضای مارکف را کاهش دهد [3] .

در پژوهش حاضر ما خود را به دسته‌ای خاص از شبکه‌های پیچیده، یعنی شبکه‌های دوبخشی، محدود می‌کنیم و می‌کوشیم فضای مارکف متناظر با فرایند موران را به زیرفضاهایی با ابعاد کوچک‌تر تقسیم کنیم، به‌طوری که بستگی اندازهٔ هر زیرفضا به اندازهٔ شبکه، از یک رابطهٔ توانی پیروی کند.

در بخش‌های بعدی ضمن ارائهٔ ایده و نقشهٔ راه کلی، نتایج به‌دست آمده برای یک گراف دوبخشی ساده، یعنی گراف خطی، را ارائه خواهیم کرد.

فضای مارکفِ فرایند موران

فرض کنید شبکه ای که قرار است فرایند موران روی آن اجرا شود، با یک گراف ساده داده شده باشد. منظور از گراف ساده گرافی است بی جهت و بی وزن و بدون حلقه (یعنی هیچ یالی بین یک رأس با خود آن رأس وجود ندارد) که بین هر دو رأس غیر یکسان آن حداکثر یک یال وجود دارد. تعداد رأس های این گراف ساده را N می گیریم. هر رأس را با یک عدد i، $0 \le i \le N-1$، برچسب می زنیم. همهٔ اطلاعات چنین گرافی در ماتریس همسایگی آن، A، که به شکل زیر تعریف می شود وجود دارد:

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{اگر بین رأس های } j \text{ و } i \text{ یالی باشد} \\ 0, & \text{در غیر این صورت} \end{cases} \qquad (1)$$

هر رأس می تواند در یکی از دو حالت مقیم یا مهاجم باشد. حالت کل شبکه را با آرایهٔ S مشخص می کنیم که به شکل زیر نوشته می شود:

$$S = (s_{N-1}, s_{N-2}, \dots, s_1, s_0) \qquad (2)$$

که درآن

$$s_i = \begin{cases} 1, & \text{مهاجم} \\ 0, & \text{مقیم} \end{cases} \qquad (3)$$

فایدهٔ این نمادگذاری این است که به کمک آن می توان حالت شبکه را با عددی بیان کرد که نمایش دودویی آن با دنبالهٔ $s_{N-1}, s_{N-2}, \dots, s_1, s_0$ داده می شود. واضح است که این عدد مقداری بین 0 و $2^N - 1$ دارد و مقدار دهگانی آن برابر است با

$$m = \sum_{i=0}^{N-1} s_i\, 2^i \qquad (٤)$$

به این ترتیب تعداد کل گونه های مهاجم وقتی که شبکه در حالت $m = s_{N-1}, s_{N-2}, \dots, s_1, s_0$ قرار دارد عبارت است از:

$$\mathrm{N} = \sum_{i=0}^{N-1} s_i \qquad (5)$$

به هر عضو (رأس) پارامتری به اسم سازواری نسبت داده می شود. این پارامتر در فرآیند انتخاب برای تولیدمثل، نقش بازی می کند. سازواری رأس شمارهٔ i را با f_i نشان می دهیم که برای رأس های مقیم برابر با ۱ و برای رأس های مهاجم برابر با r است. در فرآیند موران در هر گام زمانی حداکثر حالت یک رأس تغییر می کند. بنابراین یک شرط لازم برای این که در فضای مارکف گذاری از حالت m به حالت n وجود داشته باشد این است که فاصلهٔ همینگ [۵۰] این دو حالت حداکثر برابر با ۱ باشد. فاصلهٔ همینگ به شکل زیر تعریف می شود:

$$H_{mn} = \sum_{i=0}^{N-1} |s_i - \acute{s}_i| \qquad (6)$$

که $m = s_{N-1}, s_{N-2}, \dots, s_1, s_0$ و $n = \acute{s}_{N-1}, \acute{s}_{N-2}, \dots, \acute{s}_1, \acute{s}_0$.

به عبارت دیگر گذار یا از یک حالت به خودش است (فاصلهٔ همینگ صفر) یا بین دو حالت که نمایش دودویی آن ها فقط در یک بیت متفاوت است (فاصلهٔ همینگ یک).

اکنون می توانیم عنصر ماتریسی ماتریس گذار فرایند مارکف متناظر با فرایند موران را به شکل زیر بنویسیم. برای عناصر قطری خواهیم داشت:

$$P_{mm} = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{f_i}{\sum_{l=0}^{N-1} f_l} \sum_{j=0}^{N-1} \left(\frac{a_{ij}}{k_i}\right) \delta_{s_i,s_j} \qquad (7)$$

که در آن f_i و s_i به ترتیب درایه های بردار سازواری و بردار حالت نمایش دودویی حالت m را نشان می دهند. برای عناصر غیرقطری خواهیم داشت:

$$P_{mn} = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{f_i}{\sum_{l=0}^{N-1} f_l} \left(\frac{a_{ij}}{k_i}\right) (1 - \delta_{s_i,s_j}) \qquad (8)$$

که در آن j شماره رأسی است که قرار است حالت آن تغییر کند. ازآن جاکه $H_{mn} = 1$ ، مقدار j از رابطهٔ

$j = \log_2|m - n|$ به دست می آید. با استفاده از این دو رابطه می توان دید که مجموع عناصر روی هر سطر ماتریس P برابر با یک است.

به سادگی می توان دید که به ازای هر m (یعنی روی هر سطر ماتریس P) حداکثر تعداد $N+1$ از میان 2^N درایه غیر صفر اند. بنابراین تعداد درایه های غیر صفر ماتریس P حداکثر برابر است با $2^N(N+1)$.

فرض کنید ω_{ij} را به شکل زیر تعریف کنیم :

$$\omega_{ij} = \frac{f_i a_{ij}}{k_i \sum_{l=0}^{N-1} f_l} \qquad (9)$$

در این صورت خواهیم داشت :

$$P_{mm} = \sum_{i,j=0}^{N-1} \omega_{ij} \delta_{s_i,s_j} \qquad (10)$$

و

$$P_{mn} = \sum_{i=0}^{N-1} \omega_{ij}(1 - \delta_{s_i,s_j}) \ , \ j = \log_2|m - n| \qquad (11)$$

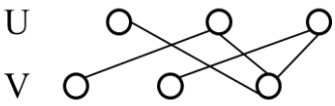
رابطه زیر نیز برقرار است.

$$\sum_{i,j=0}^{N-1} \omega_{ij} = 1 \qquad (12)$$

[۵۰] Hamming distance

شبکه‌های دوبخشی

اکنون میخواهیم فرمول‌بندی فوق را برای شبکه‌های دوبخشی به کار ببریم. شبکه‌های دوبخشی با $G = (U, V, E)$ نشان می‌دهیم که در آن رأس‌ها به دو زیرمجموعهٔ UوV تقسیم می‌شوند طوری‌که یال های گراف تنها رأس‌های یک مجموعه را به رأس‌های مجموعهٔ دیگر متصل می‌کنند و درون هر زیرمجموعه یالی وجود ندارد [٤].

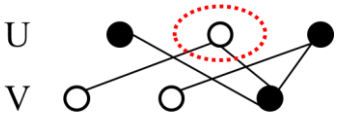


شکل۱: گراف یک شبکه دو بخشی

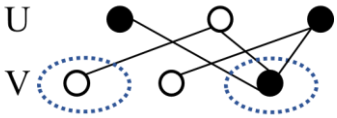
شبکه‌های دوبخشی امکان مدل‌سازی جمعیت‌هایی را دارند که در آن‌ها افراد به دو گروه مجزا با نقش‌های متفاوت تقسیم می‌شوند [٦]. استفاده از این شبکه‌ها در مدل‌سازی فرآیند موران، برای درک چگونگی تأثیر ساختار جمعیت و تعاملات بین گروه‌های مختلف بر نتایج تکاملی، جایی که گونه مهاجم و مقیم بر سر تثبیت گونه خود رقابت می کنند، بسیار کاربردی است.

شبکه‌های دوبخشی به دلیل ساختار دوگانه‌ای که دارند، خواص تقارنی‌ای را نشان می دهند که در حل مسئلهٔ پیش رو به ما کمک می کند تا ابعاد فضای مارکف فرآیند را کاهش دهیم [٥].

ماهیت دوگانه این شبکه باعث می شود رأسی که برای تولید مثل انتخاب شده نوزاد خود را در مجموعه مقابل قرار دهد.

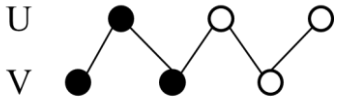


شکل ۲ : فرآیند جایگذاری نوزاد: از مجموعه U یک رأس برای تولید مثل انتخاب شده است.

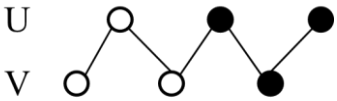


شکل۳: فرآیند جایگذاری نوزاد: نوزاد تولید شده ناچار به قرار گیری در یکی از این دو موقعیت در مجموعه V است.

همچنین، اگر مجموعه‌های یک گراف دوبخشی را به یکدیگر تبدیل کنیم (یعنی گونه های مقیم را به مهاجم و گونه مهاجم را به مقیم تبدیل کنیم)، آنگاه یک گراف دوبخشی جدید با همان مجموعه یال‌ها اما با نقش‌های معکوس دو مجموعه را ایجاد کردیم. به عبارتی، تحت تبدیل دو گونه به یکدیگر یک حالت جدید ایجاد شده که این حالت نیزعضوی از فضای مارکف این فرآیند است.



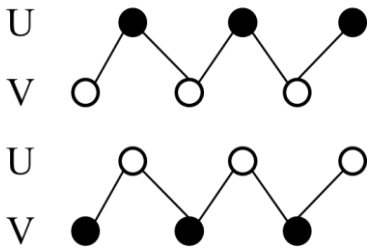
شکل٤: گراف دو بخشی یک حالت از فضای مارکف فرآیند موران



شکل٥: گراف دو بخشی حالت بالا پس از تبدیل نقش های اعضای آن

در دینامیک تکاملی که روی شبکه‌ها مدل‌سازی می‌شود؛ یک حالت، پیکربندی شبکه در یک زمان معین نشان می دهد[٥] . در فرایند موران دو حالت جاذب وجود دارد: یکی حالتی که همهٔ اعضا از نوع مقیم باشند (انقراض) و دیگری حالتی که همهٔ اعضا از نوع مهاجم باشند (تثبیت). حالت‌های دیگری هم می‌توانند وجود داشته باشند که آن‌ها را حالت‌های دافع می‌نامیم. این‌ها حالت‌هایی هستند که از هیچ حالت دیگری نمی‌توان به آن‌ها

رسید. به‌عبارت دیگر در فضای مارکف هیچ ورودی‌ای ندارند. ویژگی خاص شبکه‌های دوبخشی این است که در آن‌ها حتما حالت‌های دافع وجود دارند. این‌ها حالت‌هایی هستند که در آن‌ها تمامی رأس‌های یک بخش مقیم و تمامی رأس‌های بخش دیگر مهاجم هستند.



شکل۶: دو حالت دافع موجود در فضای مارکف فرآیند موران برای $N = 6$

گراف خطی

مطالعه فرآیند موران روی شبکه های که بتوان برای آن حل دقیقی ارائه کرد، اهمیت بسزایی دارد زیرا می تواند جنبه هایی از رابطه دینامیک با ساختار را نشان دهد. پیش از این، حل‌های دقیق و تقریبی این مسئله با بکار گیری روش های مختلف بررسی شده است [2].

در اینجا گراف خطی مثالی برای بررسی روشی است که به کمک ویژگی های تقارنی این گراف، قادر هستیم تا فضای مارکف این شبکه دو بخشی را کاهش دهیم و به حل دقیقی برای آن دست یابیم. طی بررسی های مختلفی که روی حالت‌های فضای مارکف این فرآیند انجام دادیم، متوجه خاصیت های مشابه‌ای میان گروه‌هایی از حالت‌ها شدیم. ویژگی اول: در کل فضای مارکف مربوطه، تنها بین حالت‌هایی که این گروه‌ها را تشکیل میدهند انتقال دوسویه وجود دارد. ویژگی دوم: به دلیل تقارن سامانه، جفت گروه‌هایی تشکیل می‌شوند که حالات آن ها مکمل دودویی یک‌دیگرند. حال راهبردی که به کمک نوع نامگذاری و دسته‌بندی حالت‌ها می‌توانیم فضای مارکف سامانه را کاهش دهیم معرفی میکنیم. اگر این گروه حالات دسته‌بندی شده(دارای ویژگی اول) را به ترتیب خاصی نام گذاری کرده و در ماتریس گذار قرار دهیم، آنگاه هر یک از این گروه ها بلوک‌هایی را تشکیل می‌دهند که با کنار هم قرارگیری آنها در نهایت ماتریس کل سامانه به صورت بلوکه–بالامثلثی در می آید.

ماتریس گذار، اهمیت زیادی در بررسی فرآیند های مارکف دارد؛ زیرا به کمک آن سایر جنبه‌های چنین سامانه‌هایی مانند زمان ثبیت و انقراض و... قابل بررسی خواهد بود. در نتیجه این ساده سازی، محاسبات مرتبط با این ماتریس گذار، عملا به محاسبات مربوط به بلوک‌های روی قطر کاهش می‌یابد و به‌این‌ترتیب هزینهٔ محاسبات، به‌خصوص زمانی که سامانه از تعداد حالات بسیار زیادی تشکیل شده است، به‌شدت کاهش می‌یابد.

به طور نمونه، با تبدیل ماتریس گذار به فرم کانونیک و سپس تشکیل ماتریس اساسی N، ماتریس زمان t و احتمال جذب B به راحتی قابل دستیابی است.

$$P_{canonical} = \begin{pmatrix} Q & R \\ 0 & I \end{pmatrix} \qquad (13)$$

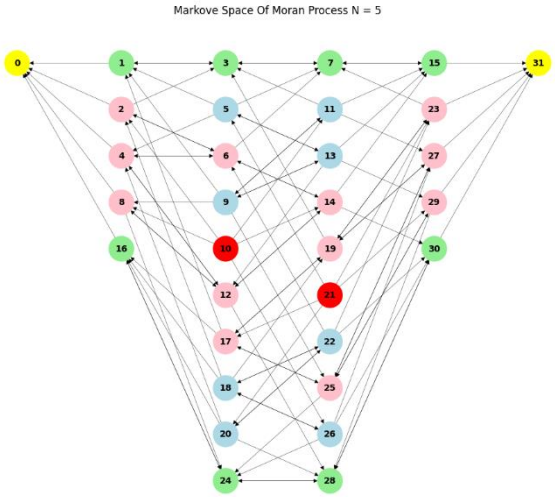
$$N = (I - Q)^{-1}, \quad t = Nc, \quad B = NR. \qquad (14)$$

که درآن Q و $R, c, I, 0$ به ترتیب ماتریس صفر، همانی، ماتریس ستونی ۱، ماتریس حالت‌های جاذب و ماتریس حالت‌های گذرا هستند.

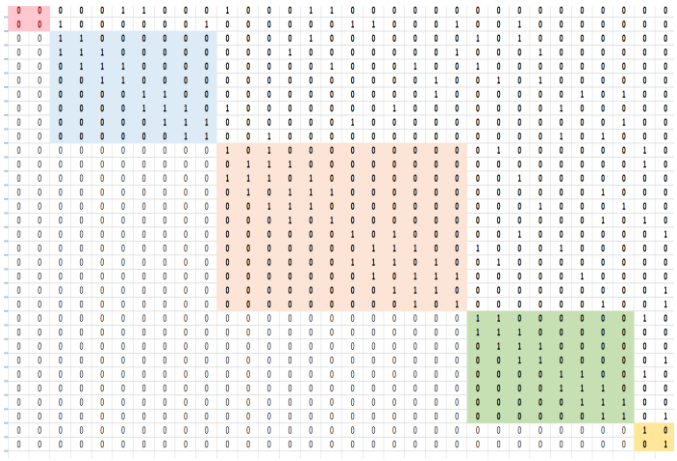
نتیجه‌گیری

برای فرآیند مورانی که روی گراف خط بررسی کردیم، توانستیم ابعاد فضای مارکف آن را با استفاده از گروه بندی حالاتی که خواص مشابه ای دارند از نمایی به خطی تبدیل کنیم. به این شکل،

ماتریس گذار سامانه به‌شکل ماتریس بلوکه–بالامثلثی درآمده که نقش بسزایی در ساده شدن محاسبات مربوطه دارد.



شکل۷: فضای مارکف فرآیند موران برای N=5



شکل ۸ : شمای کلی ماتریس انتقال بلوک قطری شده فرآیند موران برای N=5

البته این رهیافت هنوز یک گام اولیه است و امیدواریم بتوانیم این روش را برای گراف‌های دوبخشی دیگر و در ادامه برای یک گراف دلخواه به‌کار ببریم. همچنین، به‌نظر می‌رسد مطالعهٔ ویژه‌مقدارهای و ویژه‌بردارهای ماتریس گذار بتواند به گروه‌بندی حالت‌های فضای مارکف و درنتیجه به بلوک‌بندی ماتریس انتقال کمک کند، اما هنوز نتیجهٔ تحلیلی دقیقی دراین‌باره به‌دست نیاورده‌ایم.

مرجع‌ها

[1] E. Lieberman, C. Hauert, and M. A. Nowak, "*Evolutionary dynamics on graphs*", *Nature,* **433**, (2005), 312-316.

[2] M.Askari and K Aghababaei Samani, "*Analytical calculation of average fixation time in evolutionary graphs*", *Phys. Rev. E* ***92*** (2015), 042707.

[3] M. Hajihashemi and K. Aghababaei Samani, "*Multi-strategy evolutionary games: A Markov chain approach*", *PLOS One* **17**, (2022) e0263979.

[4] M. E. J. Newman "*Networks: An Introduction:*, Oxford University Press , (2018).

[5] J. R. Norris, "*Markov Chains*", Cambridge University Press (1998).

[6] M. A. Nowak, "*Evolutionary dynamics: exploring the equations of life", H*arvard University Press (2006).

نگاشت مدل حرکت تصادفی SLE به شبکه پیچیده و تحلیل ویژگی‌های آن

نطاق-نجفی، مرتضی[۱]؛ شجاع-دلیکلی داش، عباس[۱]؛ جعفری، محمد[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل

چکیده

در این تحقیق، با استفاده از معادله حرکت تصادفی شرم-لونر (Schramm Loewner Evolution) یا SLE ، مسیرهایی تصادفی در صفحه تولید شده است. با تعریف مدلی احتمالی مبتنی بر فاصله بین نقاط، این مسیرها به شبکه‌های پیچیده نگاشته شدند. شبکه‌های حاصل با تغییر پارامترهای فاصله (r_0) و مقادیر مختلف پارامتر SLE یعنی κ مورد بررسی قرار گرفتند. ویژگی‌های ساختاری این شبکه‌ها، شامل توزیع درجه، مرکزیت شاه‌راهی، مرکزیت نزدیکی و ضریب خوشه بندی تحلیل شد. نتایج نشان دادند که توزیع درجه به خوبی با تابع گامای عمومی (GGD) برازش می‌شود و وجود ساختارهای غیرتصادفی و وابستگی‌های مقیاسی را در شبکه‌ها تأیید می‌کند.

واژگان کلیدی: ***شرم-لونر تصادفی (SLE) ، شبکه‌های پیچیده، توزیع گامای عمومی، ویژگی‌های شبکه***

Mapping the SLE Random walk to a Complex Network and Analyzing Its Features

Nattagh-Najafi, Morteza[1];Shoja-Daliklidash, Abbas [1]; Jafari, Mohammad

[1] Department of Physics, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil

Abstract

In this study, random paths on the plane were generated using the Schramm-Loewner Evolution (SLE) stochastic equation of motion. By defining a probabilistic model based on the distance between points, these paths were mapped to complex networks. The resulting networks were analyzed by varying the distance parameter (r_0) and different values of the SLE parameter κ. Structural properties of these networks, including degree distribution, betweenness centrality, closeness centrality, and clustering coefficient, were examined. The results showed that the degree distribution fits well with the Generalized Gamma Distribution (GGD) and confirmed the presence of non-random structures and scale-dependent correlations in the networks.

Keywords: Schramm-Loewner Evolution (SLE), complex networks, Generalized Gamma Distribution, network properties

مقدمه

مطالعه‌ی سیستم‌های پیچیده و ساختارهای شبکه‌ای در دو دهه‌ی اخیر به یکی از محورهای اصلی تحقیقات در فیزیک آماری،

ریاضیات کاربردی و علوم بین‌رشته‌ای تبدیل شده است. از شبکه‌های اجتماعی و اینترنت گرفته تا ساختارهای زیستی و مالی، فهم نحوه‌ی شکل‌گیری و تکامل شبکه‌ها اهمیت ویژه‌ای یافته است[۱]. در این میان، مدل‌های تصادفی برای ساخت شبکه‌ها، مانند مدل‌های رشد تصادفی و مدل‌های بر پایه‌ی حرکت‌های تصادفی، ابزارهای قدرتمندی برای درک پدیده‌های واقعی فراهم کرده‌اند. یکی از این ابزارها، **معادله‌ی حرکت تصادفی شرم-لونر** (Schramm Loewner Evolution) یا SLE است که در ابتدا برای توصیف مرزهای خوشه‌ها در مدل‌های بحرانی دوبعدی (همچون خوشه‌های ایزینگ یا پرکولاسیون) معرفی شد. فرایندSLE ، مسیری تصادفی اما هموومورفیک را در صفحه مختلط تولید می‌کند که ویژگی‌های آماری و هندسی آن به شدت به پارامتر κ وابسته است. این پارامتر نقش مهمی در تعیین خواص فرکتالی، خودتقاطع و زینگی مسیری که تولید می‌شود، دارد[۲-۳].

با الهام از این ویژگی‌های منحصر به فرد، در این تحقیق سعی شده است تا با استفاده از مسیرهای تولید شده توسط SLE و یک مدل اتصال مبتنی بر فاصله، شبکه‌های پیچیده‌ای ساخته شده و ویژگی‌های ساختاری آن‌ها تحلیل شود. تحلیل این شبکه‌ها می‌تواند بینش‌های جدیدی درباره‌ی نگاشت فرایندهای تصادفی به ساختارهای گرافی و تأثیر ویژگی‌های مقیاسی بر پویایی شبکه‌ها ارائه دهد.

مدل SLE

معادله‌ی شرم-لونر تصادفی در سال ۲۰۰۰ توسط اودد شرم معرفی شد و چارچوبی برای تحلیل دقیق مسیرهای تصادفی هموومورفیک در صفحه مختلط فراهم کرد. فرمول‌بندی اصلی این معادله به صورت رابطه (۱) است[٤].

$$\frac{dg_t(z)}{dt} = \frac{2}{g_t(z)-\xi_t} \qquad (۱)$$

که در آن $g_t(z)$ نگاشتی هموومورفیک است که صفحه‌ی مختلط را به فضای خارج از مسیر رشد یافته تا زمان t می‌برد و ξ_t یک حرکت براونی یک بعدی با شدت پراکندگی κ است. مسیر تولید شده توسط معکوس نگاشت، خطی تصادفی با ویژگی‌های خاص آماری و فرکتالی خواهد بود. بسته به مقدار κ ، خواص مسیر تغییر می‌کند. این ویژگی‌ها باعث می‌شود SLE ابزاری قدرتمند برای مدل‌سازی مرزهای بحرانی و ساختارهای تصادفی پیچیده باشد[۵-٦].

نگاشت SLE به شبکه پیچیده

برای تبدیل مسیرهای تولید شده به ازای κ های مختلف از حرکت تصادفی به شبکه‌های پیچیده، از قاعده‌ای احتمالی برای اتصال نقاط استفاده شد. فرض بر این است که احتمال اتصال دو نقطه فقط به فاصله اقلیدسی آن‌ها بستگی دارد و به صورت رابطه (۲) طریف می‌شود.

$$p(r) = \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) \qquad (۲)$$

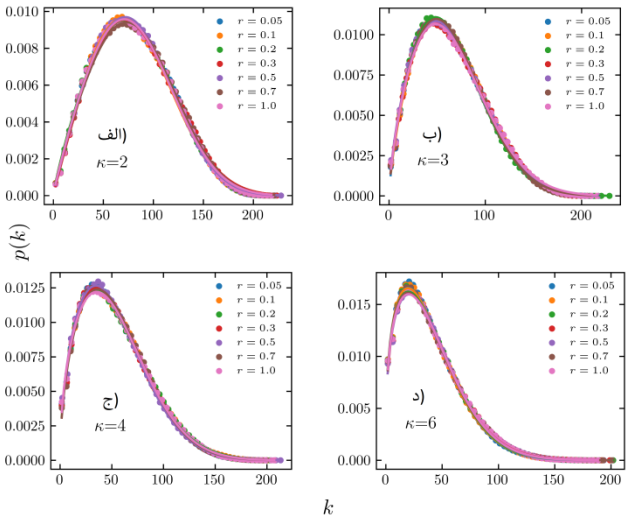
که در آن r فاصله‌ی اقلیدسی بین دو نقطه در مسیر SLE و r_0 پرامتر کنترل است که مقادیر مختلی را از ۰ تا ۱ به خود می‌گیرد. در عمل، برای هر زوج از نقاط، فاصله r محاسبه می‌شود، یک عدد تصادفی از توزیع یکنواخت بین (۰,۱) تولید می‌شود، اگر عدد تصادفی کمتر از p(r) باشد، یک یال بین دو نقطه ایجاد می‌شود و به این طریق شبکه‌های مختلفی به ازای پرامترهای مختلف r_0 ساخته می‌شود. برای دست یابی به نتایج دقیق با نویز کمتر به ازای هر پرامتر r_0 به میزان ۲۰۰۰ شبکه ساخته شد و میانگین گیری انجام شد.

این روش نگاشت، شبکه‌ای غیرجهت‌دار و بدون وزن ایجاد می‌کند که ساختار آن مستقیماً تحت تأثیر هندسه تصادفی مسیر SLE یا همان پارامتر κ و پارامتر اتصال r_0 قرار دارد.

تابع توزیع درجه

درجه گره‌ها در یک شبکه پیچیده بینش‌های مهمی در مورد مرکزیت گره‌ها فراهم می‌آورد، که به‌عنوان فرکانس استفاده از یک گره خاص در دینامیک‌های شبکه تفسیر می‌شود. درجه یک گره به‌عنوان مجموع تعداد یال‌های متصل به آن تعریف می‌شود که نشان‌دهنده تعداد تعاملات مستقیم گره است. مرکزیت درجه به‌عنوان یکی از مهم‌ترین معیارها در تحلیل شبکه‌های پیچیده شناخته می‌شود که ویژگی‌های ساختاری و اتصال شبکه را منعکس می‌کند.

توزیع درجه p(k) برای مقادیر مختلف κ و r_0 در شکل ۱ نشان داده شده است. همانطور که از شکل (۱) مشخص است توزیع احتمال درجه یک توزیع پیک دار است که با افزایش κ پهنای پیک کاهش می‌یابد از شکل ۱–الف تا شکل ۱–د. با توجه به نمودارهای شکل (۱) هیچ وابستگی به پرامتر r_0 مشاهده نمی‌شود و یک جهان شمولی در این پرامتر وجود دارد.



شکل ۱: تابع توزیع درجه برای الف) پرامترهای مختلف r_0 و κ برابر با ۲، ب) پرامترهای مختلف r_0 و κ برابر با ۳، ج) پرامترهای مختلف r_0 و κ برابر با ٤، د) پرامترهای مختلف r_0 و κ برابر با ٦.

توزیع درجه در تمام موارد، الگوی غیرگاوسی داشته و به خوبی توسط تابع گامای عمومی (GGD) مطابق با رابطه (۳) برازش شده است.

$$G_{\alpha,\beta,\gamma}(k) = A(\alpha,\beta,\gamma).k^{\alpha}.\exp\left[-\frac{1}{\beta}\left(\frac{k}{\bar{k}}\right)^{\gamma}\right] \qquad (۳)$$

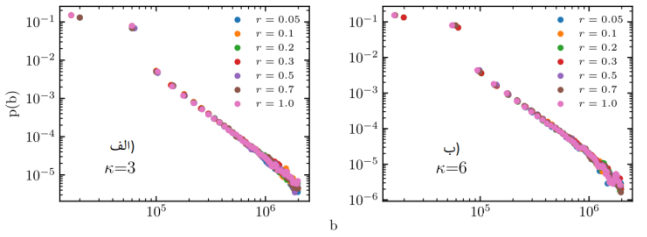
که در آن α، β و γ نماهایی هستند که شکل تابع را تعیین می‌کنند و $A(\alpha,\beta,\gamma)$ یک عامل نرمال‌سازی است. توزیع گاما عمومی به توزیع‌های دیگری مانند توزیع‌های پایدار لِوی، مفسر گاما عمومی و فرآیندهای لِوی نزدیک است[۷]. در زمینه سیستم‌های دینامیکی، ظهور GGD در سری‌های زمانی را می‌توان به همبستگی‌های بلندمدت یا اثرات حافظه نسبت داد، که متغیر موردنظر در یک زمان خاص تحت تأثیر تعاملات یا وابستگی‌های تجمعی در چندین گام زمانی قبلی است.

سایر ویژگی های شبکه

کمیت‌های دیگر شبکه نیز حاوی اطلاعات مهمی درباره ساختار و دینامیک آن هستند. فاکتور نزدیکی (closeness centrality)، ضریب خوشه‌بندی (clustering coefficient) و مرکزیت شاهراهی (betweenness centrality) از جمله کمیت‌های مورد علاقه برای تعیین ویژگی‌های ساختاری شبکه هستند. برای مثال، فاکتور نزدیکی تعیین‌کننده‌ی میزان دسترسی یک گره به سایر گره‌های شبکه است؛ گره‌هایی با نزدیکی بالاتر می‌توانند در زمان کمتری به دیگر نقاط شبکه دست یابند و از نظر انتقال اطلاعات یا تأثیرگذاری در شبکه، نقش مؤثرتری ایفا می‌کنند.

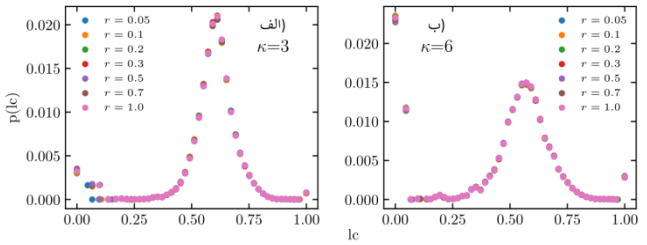
همچنین، شبکه‌هایی با ضریب خوشه‌بندی بالا معمولاً دارای ساختارهای محلی قوی هستند، به این معنی که اگر دو گره به یک گره سوم متصل باشند، احتمال اتصال مستقیم آن دو نیز زیاد است. این ویژگی در بسیاری از شبکه‌های واقعی، مانند شبکه‌های اجتماعی و بیولوژیکی، مشاهده می‌شود و نشان‌دهنده‌ی تمایل به تشکیل خوشه‌ها یا گروه‌های محلی است. از سوی دیگر، مرکزیت شاهراهی نشان‌دهنده‌ی این است که یک گره چگونه در مسیرهای کوتاه بین سایر گره‌ها قرار می‌گیرد. گره‌هایی با مرکزیت شاهراهی بالا نقش کلیدی در انتقال جریان اطلاعات یا مواد در شبکه دارند و می‌توانند به عنوان گره‌های بحرانی یا نقاط گلوگاهی برای عملکرد کلی شبکه در نظر گرفته شوند. تحلیل این کمیت‌ها اطلاعات ارزشمندی درباره‌ی میزان همبندی، ناهمگنی و سازمان‌یافتگی شبکه فراهم می‌کند و به درک بهتر پایداری، تاب‌آوری و کارایی سیستم‌های پیچیده کمک می‌کند.

در شکل ۲، مرکزیت شاهراهی برای گره‌های شبکه نمایش داده شده است. همان‌طور که از این شکل مشاهده می‌شود، این کمیت رفتاری توانی از خود نشان می‌دهد؛ رفتاری که معمولاً در شبکه‌های بی‌مقیاس (scale-free networks) مشاهده می‌شود. این نوع رفتار نشان‌دهنده‌ی وجود تعداد کمی گره با مرکزیت بسیار بالا و تعداد زیادی گره با مرکزیت پایین است، که بیانگر ساختار ناهمگن شبکه می‌باشد. این مشاهده با نتایج قبلی درباره‌ی مرکزیت درجه‌ی رأس نیز همخوانی دارد؛ چرا که در تحلیل مرکزیت درجه نیز مشاهده شد که تابع توزیع درجه‌ی رأس‌ها دارای دم چاق(fat-tailed) است، که خود نشانه‌ای از ناهمگنی در شبکه است. با این حال، لازم به ذکر است که در تحلیل توزیع درجه، رفتار دقیقاً بی‌مقیاسی مشاهده نشد. بلکه تنها ویژگی‌هایی نظیر وجود تعداد معدودی گره‌ی پراتصال (hubs)مشهود بود.



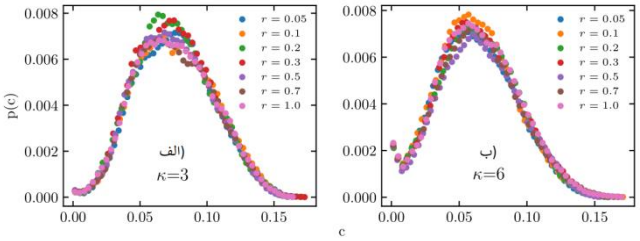
شکل ۲: تابع توزیع مرکزیت شاه‌راهی برای الف) پارامترهای مختلف r_0 و K برابر با ۳، ب) پارامترهای مختلف r_0 و K برابر با ٦

در شکل ۳، ضریب خوشه‌بندی شبکه نمایش داده شده است. این تابع رفتاری نزدیک به توزیع گاوسی دارد، به طوری که مقادیر ضریب خوشه‌بندی حول یک مقدار میانگین متمرکز شده‌اند. مشاهده می‌شود که مکان پیک این توزیع وابستگی قابل توجهی به پارامتر فاصله‌ی اتصال r_0 ندارد، اما نسبت به تغییر پارامتر نفوذپذیری K حساس‌تر است. این نتایج نشان می‌دهد که ساختار خوشه‌ای شبکه بیشتر تحت تاثیر ویژگی‌های تصادفی مسیرهای اولیه یعنی مقدار K قرار دارد تا صرفاً وابسته به معیارهای هندسی مانند فاصله‌ی بین گره‌ها.



شکل ۳: تابع توزیع ضریب خوشه بندی برای الف) پارامترهای مختلف r_0 و K برابر با ۳، ب) پارامترهای مختلف r_0 و K برابر با ٦

مطابق شکل ٤، تحلیل مرکزیت نزدیکی نشان می‌دهد که شبکه دارای ساختاری پیک‌دار است؛ یعنی برخی گره‌ها از نظر دسترسی سریع به سایر گره‌ها متمایز هستند. وجود این پیک‌ها نشان‌دهنده‌ی حضور نقاط مرکزی قوی در شبکه است. همچنین مشاهده می‌شود که تغییر پارامتر فاصله‌ی اتصال r_0 می‌تواند شدت و موقعیت این پیک‌ها را تغییر دهد.



شکل ٤: تابع توزیع مرکزیت نزدیکی برای الف) پارامترهای مختلف r_0 و K برابر با ۳، ب) پارامترهای مختلف r_0 و K برابر با ٦

نتیجه گیری

این تحقیق نشان داد که با استفاده از مسیرهای تولید شده توسط معادله SLE و تعریف مدل اتصال مبتنی بر فاصله، می‌توان شبکه‌های پیچیده‌ای با ویژگی‌های غیرتصادفی و رفتارهای مقیاسی ایجاد کرد. توزیع درجه شبکه‌ها پیروی دقیقی از تابع گامای عمومی داشت که وجود ساختارهای خاص مقیاسی و خوشه‌بندی غیرتصادفی را تایید می‌کند. مطالعه‌ی دقیق‌تر وابستگی ساختار شبکه به پارامتر K و رفتارهای گذار در تغییر r_0 می‌تواند افق‌های تازه‌ای در مدل‌سازی شبکه‌های طبیعی و مصنوعی باز کند.

مرجع‌ها

[1] Newman, Mark EJ. “Complex systems: A survey.” *arXiv preprint arXiv:1112.1440* (2011).

[2] O. Schramm, “Scaling limits of loop-erased random walks and uniform spanning trees.” *Israel Journal of Mathematics* 118.**1** (2000) 221-288.

[3 J. Cardy, “SLE for theoretical physicists.” *Annals of Physics* 318.**1** (2005): 81-118.

[4] S. Smirnov, “Comptes Rendus L Acad.” *Sci. Ser. I-Math* 333 (2001) 239.

[5] D. Bernard, G. Boffetta, A. Celani, and G. Falkovich, *Phys. Rev.*

Lett. **98**, 024501 (2007).

[6] M. N. Najafi, S. Moghimi-Araghi, and S. Rouhani, *Phys. Rev.*

E **85**, 051104 (2012).

[7] R. Shanker, K. S. Kamlesh. “A generalization of generalized gamma distribution.” *International Journal of Computational and Theoretical Statistics* **6**, no. 1 (2019): 33-42.

فرکانس طبیعی پایه در ارتعاشات عرضی B-DNA: شبیه سازی دینامیک مولکولی تحت شرایط فیزیولوژیکی

معصومی، علیرضا[1]؛ علی، رجب پور[1]*؛ مجید، قدیری[1]

[1] *آزمایشگاه شبیه سازی و محاسبات پیشرفته، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه بین المللی امام خمینی، قزوین، ایران.*

چکیده

DNA به عنوان یک درشت مولکول پویا، نقش حیاتی در فرآیندهای زیستی نظیر همانندسازی و تنظیم ژن ایفا می‌کند. تناقضات قابل‌توجهی در مطالعات تجربی و محاسباتی درباره بسامدهای طبیعی ارتعاشی DNA وجود دارد که طیفی از مگاهرتز تا چند هزار تراهرتز را پوشش می‌دهد.این مطالعه با هدف تعیین بسامد پایه طبیعی در ارتعاشات عرضی DNA نوع B تحت شرایط فیزیولوژیکی طراحی شده است. از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) تمام اتمی با نرم‌افزار LAMMPS برای بررسی یک DNA دو رشته‌ای استفاده شد. سیستم در جعبه به همراه آب و یون با شرایط مرزی دوره‌ای و قطعات انتهایی ثابت‌شده مدل‌سازی گردید. پس از متعادل‌سازی در هنگردهای NVT و NVE، ارتعاشات عرضی با اعمال جابجایی اولیه تک‌جهته القا شدند. پردازش سیگنال نوسانات در مرکز جرمو با استفاده از تحلیل تبدیل فوریه سریع (FFT) برای استخراج بسامد طبیعی به اعمال شد. بسامد پایه ارتعاشات عرضی DNA تحت شرایط فیزیولوژیکی ۴/۹۹۷۵ گیگاهرتز اندازه‌گیری شد. تحلیل حساسیت متغیرها (گام زمانی، مقدار جابجایی اولیه و پیکربندی محدوده‌ها) نشان داد که سیستم در رفتاری خطی و پایدار دارد. نتایج با مطالعات تجربی و محاسباتی همخوانی دارد و تفاوت‌ها به عوامل ساختاری، توالی و مودهای ارتعاشی متفاوت نسبت داده شده است. این مطالعه بسامد پایه ارتعاشات عرضی DNA نوع B را در محدوده گیگاهرتزی نشان داد و می‌تواند برای کاربردهای نوین در نانوتکنولوژی (مانند DNA اوریگامی) و زیست‌پزشکی (ویرایش ژن) مفید باشد. محدودیت‌های مطالعه شامل طول محدود DNA، تاثیر توالی‌های مختلف و پیکربندی‌های یون‌ها است که می‌تواند زمینه‌ای برای پژوهش‌های آینده باشد.

واژگان کلیدی: *دی ان ای، دینامیک مولکولی، فرکانس، ارتعاشات، نوکلوئیک اسید.*

Fundamental Natural Frequency of Transverse Vibrations in B-DNA: Molecular Dynamics Simulation under Physiological Conditions

Masoumi, Alireza [1]; Rajabpour, Ali[1]; Ghadiri, Majid[1]

Advanced Simulation and Computing Laboratory, Mechanical Engineering Department, Imam Khomeini [1] International University, Qazvin, Iran

Abstract

Deoxyribonucleic Acid (DNA) serves as a dynamic macromolecule that plays a pivotal role in biological processes such as replication and gene regulation. However, significant discrepancies persist across experimental and computational studies regarding DNA's natural vibrational frequencies, which span a spectrum from megahertz to several terahertz. This study was designed to determine the fundamental natural frequency of transverse vibrations

in B-type DNA under physiological conditions. We employed all-atom molecular dynamics (MD) simulations using the LAMMPS software to investigate a double-stranded DNA model. The system, solvated in a water-ion box, was simulated with periodic boundary conditions and fixed-end fragments. Following equilibration in NVT and NVE ensembles, transverse vibrations were induced by applying a unidirectional initial displacement. Signal processing of oscillations at the center of mass was conducted using Fast Fourier Transform (FFT) analysis to extract the natural frequency The fundamental frequency of DNA's transverse vibrations under physiological conditions was measured at 4.9975 GHz. Sensitivity analyses of variables—including timestep size, initial displacement magnitude, and boundary configurations—revealed linear and stable system behavior. These results align with prior experimental and computational studies, with observed variations attributed to structural factors, sequence specificity, and distinct vibrational modes. This work establishes the fundamental frequency of B-DNA transverse vibrations within the gigahertz range, offering potential utility in emerging nanotechnology applications (e.g., DNA origami) and biomedical innovations (e.g., gene editing). Study limitations, such as finite DNA length, sequence-dependent effects, and ion configuration influences, provide avenues for future research.

***Keywords**: DNA, Molecular Dynamics, Frequency, Vibrations, Nucleic Acid*

مقدمه

دئوکسی ریبونوکلئیک اسید (DNA) پایداری ساختاری و عملکرد آن توسط تعاملات پیچیده به واسطه محیط آبی اطراف آن کنترل می‌شود. این درشت مولکول نقش حیاتی در فرآیندهای زیستی ایفا می‌کند که نسبت به عوامل محیطی از جمله آب‌پوشی، قدرت یونی و دما حساس هستند که انعطاف‌پذیری ساختاری DNA و تعاملات آن با پروتئین‌ها را تنظیم می‌کنند. علی‌رغم مطالعات تجربی و محاسباتی گسترده، چالشی مداوم در طیف گسترده‌ای از بسامدهای طبیعی گزارش شده (مثلاً ۰٫۱ گیگاهرتز برای DNA تک‌رشته‌ای [1] تا ٤٤ ترا هرتز برای باز شدن رشته‌ها [2]) وجود دارد که بسته به روش‌شناسی، اندازه سیستم و شرایط محیطی به میزان قابل توجهی متفاوت است و به طور قابل توجهی تحت تأثیر جفت‌شدگی‌های ناهماهنگ بین مودهای ستون فقرات (backbone) قند–فسفات قرار دارد [3]. با این حال، نقش آن‌ها در شکل‌دهی بسامدهای ارتعاشی عرضی طبیعی DNA (که یک متغیر تعیین‌کننده کلیدی در انعطاف‌پذیری مکانیکی است) به طور سامانمند بررسی نشده است. این تناقض بین یافته‌ها و همچنین عدم پرداختن به ارتعاشات عرضی DNA درک بسامدهای طبیعی عرضی DNA و وابستگی آن‌ها به توالی، آب‌پوشی و محیط‌های یونی را برجسته می‌کند.

مطالعات تجربی مانند طیف‌سنجی ترا هرتز، پراکندگی رامان و حس‌گرهای موج صوتی سطحی بینش‌های بنیادی در مورد بسامدDNA ارائه کرده‌اند[5] ,[4].

شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی (MD) تصویری در ابعاد اتمی و کنترل شده از ارتعاشات DNA را ارائه می‌دهند که امکان کمی سازی اثرات غیرهمساز و تعاملات محیطی را فراهم می‌کند [6], [8] ,[7]. مطالعات محاسباتی اغلب شرایط را بیش از حد ساده می‌کنند که توانایی آن‌ها را برای پیش‌بینی بسامدهای عرضی مرتبط با محیط فیزیولوژیک محدود می‌کند[9] که منجر به ناهمخوانی در پیش‌بینی فرکانس‌های مرتبط با شرایط فیزیولوژیک می‌شوند.

از این رو، سؤال اصلی این مطالعه این است که بسامد پایه ارتعاشی عرضی DNA-B تحت شرایط آب‌پوشی و یونی فیزیولوژیکی چیست؟ با پاسخ به این سؤال، این مطالعه چارچوبی قوی برای پیش‌بینی رفتار مکانیکی DNA ایجاد می‌کند که پتانسیلی برای کاربرد در فناوری نانو (مثلاً کاغذتا (origami) در DNA)،

زیست پزشکی (مثلاً ویرایش ژن هدفمند ترا هرتز) یا داروسازی (تحویل دقیق دارو) است.

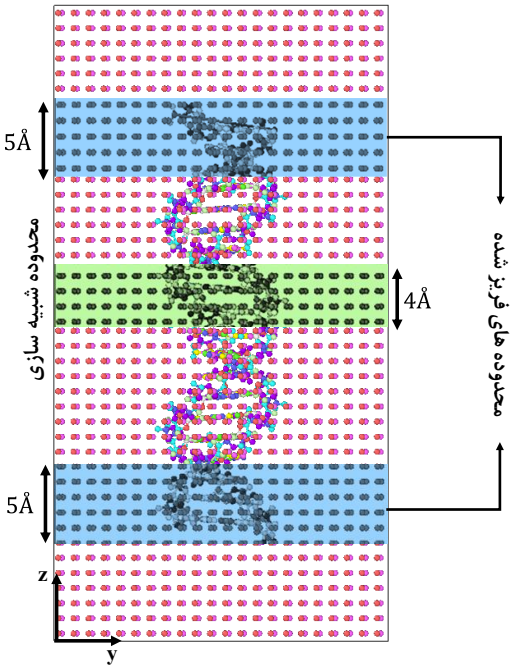
مواد و روش‌ها

شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی (MD) تمام اتمی با استفاده از LAMMPS برای بررسی بسامد پایه طبیعی در ارتعاشات عرضی مود یک برای یک DNA-B دو رشته‌ای با توالی: ATCGTAGCATCGTAGCATCG انجام شد. سیستم با قرار دادن DNA در یک جعبه آب TIP3P با یون‌های متقابل Na^+ (۰،۱۵ مولار NaCl) برای تقلید شرایط فیزیولوژیکی در جعبه‌ای با اندازه مشخص $54 \times 54 \times 103 Å^3$ ساخته شد. برهم‌کنش‌های بین‌اتمی با استفاده از میدان نیروی CHARMM مدل‌سازی شدند در حالی که برهم‌کنش‌های واندروالسی با استفاده از نقطه برش $10Å$ محاسبه شدند. پیوندهای هیدروژنی با استفاده از الگوریتم SHAKE محدود شدند و گام زمانی $1fs$ در نظر گرفته شد.

در مجموع، سیستم شامل ۵۹ اتم DNA و ۵۸۴۱۵ اتم کل (آب و یون) است. شرایط مرزی دوره‌ای برای اطمینان از رفتار واقع‌بینانه سیستم اعمال شد و همان‌طور که در شکل نشان داده شده است، قطعات انتهایی DNA (قطعاتی به اندازه $5Å$ از پایین و بالا) بسته و ثابت شدند تا بتوان مود اول و پایه ارتعاشات عرضی را شبیه‌سازی کرد. پس از پایداری سیستم برای القای ارتعاشات، یک جابجایی اولیه تک جهته ($-0.5 \times 10^{-3} Å$) به بخش شبیه‌سازی (± 2 Å در اطراف مرکز جرم DNA) برای $5\ ps$ اعمال شده است. یک اجرای گذرا برای ثبت حرکات آرامش انجام شد که اطمینان حاصل شود که سیستم قبل از تحلیل به حالت پایدار رسیده است.

نتایج

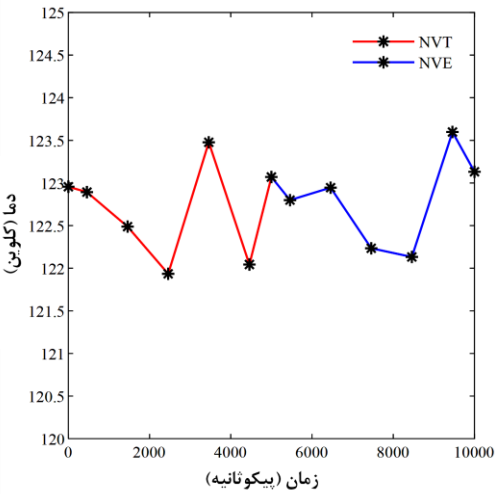
تحلیل چند متغیری ارتعاشات DNA، پیاده‌سازی شده با استفاده از کد دینامیک مولکولی LAMMPS، برای بررسی ارتعاشی DNA تحت شرایط مختلف به کار گرفته شد. در ابتدا وضعیت پایداری شبیه‌سازی در هنگردها مورد بررسی قرار گرفته و سپس یک تحلیل حساسیت متغیری جامع در گام‌های زمانی، میزان جابجایی اولیه و پیکربندی‌های اتم جعبه‌های منجمد شده در ابتدا و انتها و همچنین مرکز جرم بود. پس از اطمینان از همگرایی نتایج، پاسخ زمانی و بسامدی ارتعاشات ارائه شده است.



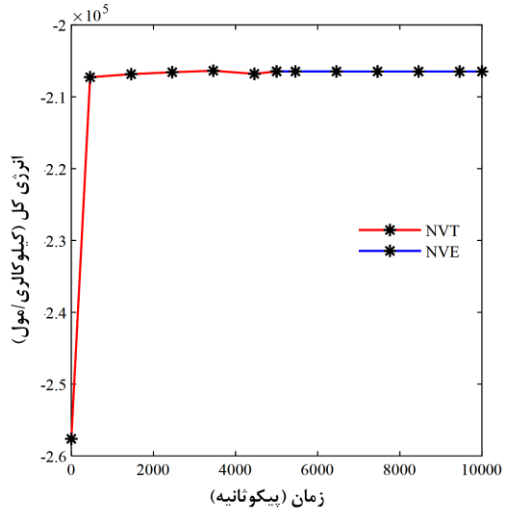
شکل ۱- نمایش جعبه شبیه سازی، محدوده اعمال شرایط مرزی و محدوده اعمال شرایط اولیه و گرفتن خروجی

جذر میانگین مربعات (RMS) دما و انرژی کل DNA در سه سرعت اولیه تصادفی (۱۲۳۵۶۷، ۴۵۶۸۹۱، ۷۸۹۱۲۳) برای ارزیابی پایداری در طول شبیه‌سازی‌ها محاسبه شد. مقادیر RMS برای هر دو هنگرد NVT (تعداد ثابت ذرات، حجم و دما) و NVE (تعداد ثابت ذرات، حجم و انرژی) ثبت شدند. برای مجموعه NVT (شکل)، مقادیر RMS پس از ۵۰۰۰ گام در حدود $122.7\ K$ تثبیت شدند، ه نشان‌دهنده یک سیستم متعادل شده است. در هنگرد NVE (شکل)، مقادیر RMS نوسانات جزئی حول $122.8\ K$ را در طول

شبیه‌سازی نشان دادند، پایداری ساختار DNA تحت شرایط متغیر را نشان می‌دهد. پایداری انرژی با پایش انرژی کل در طول شبیه‌سازی‌ها ارزیابی شد. برای هنگرد NVE (شکل)، RMS انرژی کل در محدوده 0.003% از انرژی کل اولیه باقی ماند که دقت انتگرال‌گیری و پایداری شبیه‌سازی را تأیید می‌کند. در هنگرد NVT (شکل)، RMS انرژی کل حول مقداری کمی بالاتر 0.006%، همگرا شد که با توجه به استفاده از ترموستات برای حفظ دمای ثابت سازگار است. تحلیل حساسیت متغیرها در مورد تأثیر گام زمانی (Δt)، مقدار جابجایی اولیه (IDM)، و عرض محدوده های فریز شده در ابتدا و انتها (FRW) و محدوده شبیه سازی (SRW) بر نتایج شبیه‌سازی نشان داد. برای گام‌های زمانی ۰٫۰۱ فمتوثانیه، ۰٫۱ فمتوثانیه و ۱ فمتوثانیه، همان‌طور که در جدول ۱ نشان داده شده است، مقادیر RMS جابجایی برحسب زمان تغییرات حداقلی را نشان دادند، که نشان می دهد سیستم در این محدوده پایدار باقی می‌ماند و شبیه‌سازی حول یک پاسخ همگرا شده است.



شکل ۳- نوسانات دمایی در هنگردهای NVT و NVE



شکل ٤- نوسانات انرژی کل در هنگردهای NVT و NVE

همان‌طور که در شکل ۵ نشان داده شده است، نوسانات مرکز جرم محدوده شبیه‌سازی (CoM) DNA (۲± آنگستروم اطراف مرکز جرم) یک قله غالب را در شکل ۵ نشان می‌دهد که مطابق با بسامد طبیعی پایه ارتعاشات عرضی مرکز جرم DNA، تحت شرایط فیزیولوژیکی (۰٫۱۵ مولار NaCl، آب TIP3P) است. این مقدار از طریق تحلیل سریع فوریه (FFT) پاسخ گذاری سیستم (پس از باربرداری جابجایی اولیه)، با بسامد داده‌برداری $10000\ THz$ استخراج شد. برای اطمینان از همگرایی پاسخ‌ها، سه شبیه‌سازی مستقل با مقادیر بذر تصادفی بسامدهای مشابه $(4.9975\ GHz)$ را نتیجه دادند، که همگرایی را تأیید می‌کند.

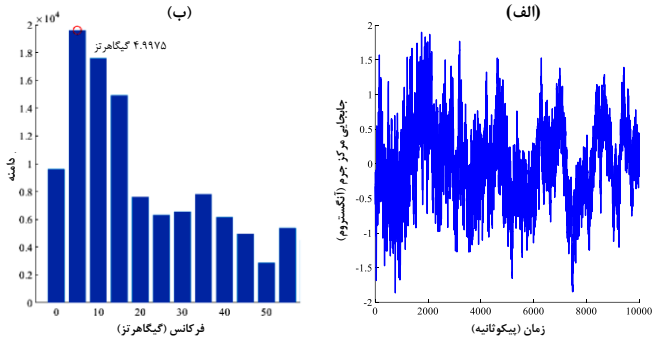
جدول ۱- تحلیل حساسیت متغیرهای گام زمانی، مقدار جابجایی اولیه و عرض محدوده‌های فریز شده و شبیه سازی نسبت به جابجایی جهت جذر میانگین مربعات (RMS) نوسانات مرکز جرم محدوده شبیه سازی (CoM) در شبیه سازی ارتعاشات عرضی DNA.

نام متغیر	مقدار آزمون شده	RMS) Å(
گام زمانی(Δt)	0.01 fs	0.2112
	0.1 fs	0.2117
	1 fs	0.2106
مقدار جابجایی اولیه (*IDM*)	-2.5×10^{-3} Å	0.2129
	-1×10^{-3} Å	0.2119
	-0.5×10^{-3} Å	0.2106
	6 Å	0.2134
	8 Å	0.2111

عرض محدوده فریزشده (*FRW*)	10 Å	0.2106
عرض محدوده شبیه سازی(*SRW*)	2 Å	0.2106
	4 Å	0.2106
	6 Å	0.2106

نتیجه‌گیری

مطالعه حاضر از یک چارچوب شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) برای یافتن بسامد پایه طبیعی در ارتعاشات عرضی DNA-B تحت شرایط فیزیولوژیکی استفاده می‌کند که شکاف در تناقضات تجربی و محاسباتی برجسته شده در مطالعات قبلی را پر می‌کند [5], [8], [9]. با ادغام تحلیل‌های حساسیت چند متغیره (گام‌های زمانی، مقادیر جابجایی اولیه و پیکربندی‌های اتم‌ها در جعبه‌های مختلف)، ما بسامد طبیعی ۴.۹۹۷۵ گیگاهرتز را برای نوسانات مرکز جرم DNA شناسایی کردیم. یافته این مطالعه مبنی برای B-DNA تحت شرایط فیزیولوژیکی که از شبیه‌سازی‌های MD به‌دست آمده است، توسط طیف وسیعی از ادبیات موضوع حمایت می‌شود[11] ,[12] ,[10] ,[5].اگرچه بسامدهای گزارش‌شده در سایر مطالعات بسته به توالی و ساختار DNA، مود ارتعاشی و روش‌شناسی به کار رفته متفاوت است، اجماع کلی نشان می‌دهد که DNA در محدوده بسامدی گیگاهرتزی رفتار دینامیکی قابل توجهی از خود نشان می‌دهد. یافته‌ها می‌توانند برای کاربردهایی مانند پایداری کاغذتا DNA در فناوری نانو، حسگرهای نانو-زیستی، تحویل دقیق دارو و ویرایش ژن استفاده شوند..



شکل ۵- جابجایی‌های CoM نسبت به زمان و طیف فرکانسی در شبیه سازی ارتعاشات DNA، (الف) نوسانات CoMدر جهتy ، (ب) نتیجه تبدیل فوریه سریع نوسانات CoM، که فرکانس ارتعاشی طبیعی (۴.۹۹۷۵~ گیگاهرتز) را از طریق تحلیل قله طیف فرکانسی شناسایی می‌شود.

مرجع ها

[1] R. K. Adair, “Vibrational Resonances in Biological Systems at Microwave Frequencies,” *Biophysical Journal*, vol. 82, no. 3, pp. 1147–1152, Mar. 2002.
[2] K. Wu, C. Qi, Z. Zhu, C. Wang, B. Song, and C. Chang, “Terahertz Wave Accelerates DNA Unwinding: A Molecular Dynamics Simulation Study,” *J. Phys. Chem. Lett.*, vol. 11, no. 17, pp. 7002–7008, Sep. 2020.
[3] A. Svidlov *et al.*, “Influence of Environmental Parameters on the Stability of the DNA Molecule,” *Entropy*, vol. 23, no. 11, p. 1446, Oct. 2021.
[4] A. Wittlin, L. Genzel, F. Kremer, S. Häseler, A. Poglitsch, and A. Rupprecht, “Far-infrared spectroscopy on oriented films of dry and hydrated DNA,” *Phys. Rev. A*, vol. 34, no. 1, pp. 493–500, Jul. 1986.
[5] A. Kotnala, S. Wheaton, and R. Gordon, “Playing the notes of DNA with light: extremely high frequency nanomechanical oscillations,” *Nanoscale*, vol. 7, no. 6, pp. 2295–2300, 2015.
[6] J. Yoo, D. Winogradoff, and A. Aksimentiev, “Molecular dynamics simulations of DNA–DNA and DNA–protein interactions,” *Current Opinion in Structural Biology*, vol. 64, pp. 88–96, Oct. 2020.
[7] S. Wang, “Efficiently Calculating Anharmonic Frequencies of Molecular Vibration by Molecular Dynamics Trajectory Analysis,” *ACS Omega*, vol. 4, no. 5, pp. 9271–9283, May 2019.
[8] D. J. Floisand and S. A. Corcelli, “Computational Study of Phosphate Vibrations as Reporters of DNA Hydration,” *J. Phys. Chem. Lett.*, vol. 6, no. 20, pp. 4012–4017, Oct. 2015.
[9] T. Siebert, B. Guchhait, Y. Liu, R. Costard, and T. Elsaesser, “Anharmonic Backbone Vibrations in Ultrafast Processes at the DNA–Water Interface,” *J. Phys. Chem. B*, vol. 119, no. 30, pp. 9670–9677, Jul. 2015.
[10] B. L. Ikhlov, “Resonant Absorption of Microwaves by Macromolecules,” *OALib*, vol. 09, no. 03, pp. 1–10, 2022.
[11] U. J. Lorenz and A. H. Zewail, “Biomechanics of DNA structures visualized by 4D electron microscopy,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, vol. 110, no. 8, pp. 2822–2827, Feb. 2013.
[12] B. Saif, R. K. Mohr, C. J. Montrose, and T. A. Litovitz, “On the mechanism of dielectric relaxation in aqueous DNA solutions,” *Biopolymers*, vol. 31, no. 10, pp. 1171–1180, Sep. 1991, doi: 10.1002/bip.360311005.

نظریه بس‌ذره‌ای کوانتمی برای فرمیون‌ها و بوزون‌های q–دگرگون

اسمعیلی، حبیب[1]؛ محمدزاده، حسین[1] ؛ نطاق نجفی، مرتضی[1]

[1] گروه فیزیک، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل

چکیده

ما یک نظریه جامع در فیزیک بس–ذره‌ای کوانتومی برای فرمیون‌ها و بوزون‌های q –دگرگون ارائه می‌دهیم، که چارچوبی نوین برای ارتباط مستقیم آمار ذرات با شدت برهم‌کنش مؤثر فراهم می‌کند. این ذرات که توسط پارامترهای k و q تغییرشکل یافته‌اند، رفتارهای آماری از خود نشان می‌دهند که بین سیستم‌های بوزونی و فرمیونی معمولی درونیابی می‌کنند و ما را قادر می‌سازند تا برهم‌کنش‌های پیچیده را از طریق اصلاحات آماری مدل‌سازی کنیم. ما یک قضیه ویک تعمیم‌یافته و نمودارهای فاینمن تعمیم‌یافته متناسب با ذرات kq توسعه می‌دهیم، که به ما امکان می‌دهد دو نوع تابع گرین را محاسبه کنیم. عبارات صریح برای این توابع گرین در هر دو فضای مستقیم و تکانه به دست آمده‌اند، که بینش‌های کلیدی در مورد خواص جمعی سیستم‌های فرمیونی و بوزونی q–دگرگون ارائه می‌دهند. با استفاده از تقریب فاز تصادفی، ما تابع دی‌الکتریک را برای گاز q – فرمیونی $(k=-1)$ تخمین می‌زنیم.

واژگان کلیدی: فرمیون‌ها و بوزون‌های q –دگرگون ، نمودارهای فاینمن تعمیم‌یافته ، تابع دی‌الکتریک

Quantum many-body theory for q-deformed fermions and bosons

Esmaili, Habib [1]; Mohammadzadeh, Hosein[1]; NattaghNajafi, Morteza[1];

[1] *Department of Physics, University of Mohaghegh Ardabili*

Abstract

We present a comprehensive quantum many-body theory for q-deformed fermions and bosons, offering a novel framework that relates particle statistics directly to effective interaction strength. Deformed by the parameters k and q, these particles exhibit statistical behaviors that interpolate between conventional bosonic and fermionic systems, enabling us to model complex interactions via statistical modifications.We develop a generalized Wick theorem and extended Feynman diagrammatics tailored to kq particles, allowing us to calculate two types of Green's functions. Explicit expressions for these Green's functions are derived in both direct and momentum spaces, providing key insights into the collective properties of q-fermionic and bosonic systems. Using a random phase approximation, we estimate the dielectric function for q-fermion gas (k = −1).

***Keywords**: q-deformed fermions and bosons, generalized Feynman diagrammatics, dielectric function*

مقدمه

چهار دهه پیش، معرفی مفهوم آنیون‌ها و تعمیم اصل طرد پائولی[1,2]، بستر مناسبی برای توسعه آمار کوانتومی کسری فراهم ساخت. در سال‌های اخیر، مدل‌سازی سیستم‌هایی با آمار غیرمرسوم و برهم‌کنش‌های پیچیده، موجب افزایش توجه به ذرات کوانتومی دگرگون گردیده است. این روند، زمینه‌ساز تحقیقات گسترده‌ای در راستای بازنگری عدد اشغال کوانتومی و گسترش اصل پائولی شده و نشان داده است که اصلاح آمار ذرات می‌تواند ابزاری کارآمد برای تنظیم برهم‌کنش مؤثر میان آن‌ها باشد؛ همان‌گونه که در پدیده‌هایی نظیر اثر هال کوانتومی کسری[3,4] مشاهده می‌شود.

در همین راستا، نظریه‌های میدان توپولوژیکی به منظور بررسی ویژگی‌های توپولوژیکی چنین سیستم‌هایی مورد استفاده قرار گرفته‌اند[5,6]. همچنین، بررسی ارتباط میان آمار طرد کسری و برهم‌کنش‌های بین ذرات در گازهای بوزونی نشان داده است که در شرایط خاص، امکان جایگزینی برهم‌کنش‌های مستقیم با برهم‌کنش‌های آماری وجود دارد.

به منظور تعمیم آمار فرمیونی و بوزونی و فراهم‌سازی بستری برای درونیابی میان آن‌ها، مفهوم ذرات q (یا kq) با بهره‌گیری از پارامترهای تغییرشکل‌یافته k و q معرفی شده است. این چارچوب، توصیف منعطف‌تری از خواص ترمودینامیکی سیستم‌ها و پدیده‌هایی نظیر چگالش بوز–اینشتین ارائه می‌دهد.

با وجود پیشرفت‌های قابل توجه در مطالعه ذرات kq ، همچنان فقدان نظریه‌ای جامع برای توصیف رفتار جمعی این ذرات احساس می‌شود. مقاله حاضر با هدف پر کردن این خلأ، به توسعه یک نظریه چندجسمی کوانتومی برای سیستم‌های دارای ذرات kq می‌پردازد و از طریق فرمول‌بندی بسط ماتریسS، تعمیم قضیه ویک و استفاده از نمودارهای فاینمن، بیان صریحی از تابع دی‌الکتریک در گاز فرمیونی kq ارائه می‌نماید.

آمار q–فرمیون و بوزون

از نظر ریاضی، برای ذرات غیرقابل تشخیص، می‌تواند یک مجموعه کامل از عملگرهای جا به جا پذیر $\{N_1, N_2, \dots\}$ وجود داشته باشد که مقادیر ویژه آن‌ها، یعنی مجموعه اعداد اشغال $\{n_1, n_2, \dots\}$ بیانگر تعداد ذراتی است که حالت‌های کوانتومی α_2, α_1 و غیره را اشغال می‌کنند. حالت یک سیستم چندذره‌ای با $|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$ نشان داده می‌شود، که فضای فوک متناظر با سیستم چندجسمی مورد نظر را می‌پوشاند. این حالات به عنوان بردار ویژه عملگر شمارنده N_ν، شناخته می‌شوند:

$$N_\nu |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle = n_\nu |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle, \quad \nu = 1,2,\dots \quad (1)$$

در اینجا n_ν، عدد اشغال برای حالت α_ν، است. برای بوزون‌ها، $n_\nu = 0,1,2,\dots$ که می‌تواند هر عدد صحیح غیرمنفی باشد، در حالی که برای فرمیون‌ها، به دلیل اصل طرد پائولی، $n_\nu = 0,1$ است.

با الهام از پیشرفت‌های موفق اخیر در فرمول‌بندی نظریه مربوط به بوزون‌ها و فرمیون‌های q–دگرگون [7,8,9]، ما جبر تعمیم یافته را بصورت زیر می‌نویسیم:

$$\begin{aligned} \left[a_\nu, a_\nu^\dagger\right]_{kq} &= a_\nu a_\nu^\dagger - kq a_\nu^\dagger a_\nu = q^{-N_\nu}, \\ \left[a_\nu, a_\nu\right]_k &= \left[a_\nu^\dagger, a_\nu^\dagger\right]_k = 0, \end{aligned} \quad (2)$$

که در آن q بعنوان تعمیم است که می‌تواند مقدار $0 \le q \le 1$ داشته باشد و N_ν عملگر تعداد برای ذرات kq در نظر گرفته می‌شود که در تعریف زیر صدق می‌کند:

$$[N_\nu] = a_\nu^\dagger a_\nu. \quad (3)$$

هم‌چنین اعداد یا عملگرها در پایه q بصورت زیر تعریف می‌شوند

$$[x] = \frac{q^x - q^{-x}}{q - q^{-1}}. \quad (4)$$

برای محاسبه میانگین تعداد اشغال ما نیاز به تعریف هامیلتونی مناسب برای سیستم بس‌ذره‌ای هستیم، بنابراین

$$[\bar{n}_\nu]=\frac{Tr(e^{-\beta\hat{K}_{kq}}a_\nu{}^\dagger a_\nu)}{Z_{kq}}, \qquad (5)$$

که $\hat{K}_{kq}=H_{kq}+\mu N=\sum_\nu \zeta_\nu N_\nu$ و $\zeta_\nu=\epsilon_\nu-\mu$ است. بنابراین با پیگیری روابط فوق و انجام محاسبات می‌توانیم تابع توزیع متناسب با جبر معرفی شده را بدین صورت استخراج کنیم:

$$\bar{n}_\nu=\bar{n}_{kq}(\zeta_\nu)=\frac{1}{q-q^{-1}}\ln\left(\frac{e^{\beta z}-kq^{-k}}{e^{\beta z}-kq^{k}}\right) \qquad (6)$$

تابع گرین تک ذره‌ای

در ادامه تابع گرین را بر اساس عملگرهای kq و با بهره‌گیری از تابع توزیع مربوط به ذرات q–دگرگون بدست خواهیم‌آورد. ما ابتدا تابع گرین استاندارد که از جبر حاکم بر ذرات q–دگرگون (رابطه(۲)) حاصل می‌شود، شروع می‌کنیم. تابع گرین استاندارد تک ذره‌ای kq در دمای محدود به صورت زیر داده می‌شود:

$$iG_{kq}^{(X)}(\nu;t,t')=\frac{1}{Z_{kq}}Tr\left[e^{-\beta\hat{K}_{kq}}a_\nu(t)a_\nu^\dagger(t')\right], \qquad (7)$$

که $a_\nu(t)=e^{itH}a_\nu e^{-itH}$ و $Z_{kq}=\mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta\hat{K}_{\mathrm{kq}}}\right)$ است. از طرفی تابع گرین ماتسوبارا با تعریف زیر:

$$iG_{kq}^{(M,X)}(\nu;\tau,\tau')=-\langle T_\tau a_\nu(\tau)a_\nu^\dagger(\tau')\rangle \qquad (8)$$

که τ نشان دهنده زمان موهومی است و عملگر ترتیب زمانی بکار رفته، متناسب با جبر تعمیم یافته در مسئله است. تابع گرین ماتسوبارا که با در نظر گرفتن جبر حاکم بر ذرات q–دگرگون و قضیه ویک متناسب با آن را با انجام محاسباتی در این راستا به این صورت می‌توان نوشت:

$$iG_{kq}^{(M,X,0)}\left(\nu,i\omega_n^{(X,j)}\right)=\frac{q^{-n_\nu}}{i\omega_n^{(X,j)}+\zeta_\nu\{k(1-q)[n_\nu]-q^{-n_\nu}\}}, \qquad (9)$$

تابع گرین فوق برحسب فرکانس‌های ماتسوبارا $i\omega_n^{(X,j)}$ می‌باشد که این فرکانس مقدار $i\omega_n^{(X,j)}=i\omega_n^{(X)}+\frac{k_X(-1)^j}{\beta}\ln(q)$ را میتواند اختیار کند. توجه داریم که این فرکانس‌های در حالت‌های حدی به فرکانس‌های معمول بوزونی و فرمیونی تبدیل می‌شوند. بنابراین ما اکنون یک تابع گرین تعمیم‌یافته داریم که توصیف کننده بوزون‌ها و فرمیون‌های q–دگرگون است و بطور مشخص از این تابع گرین می‌توان به توابع گرین شناخته‌شده بوزونی و فرمیونی رسید.

روش دوم برای محاسبه تابع گرین با عنوان تابع گرین تک ذره‌ای موثر، استفاده از تابع توزیع ذرات kq و بهره‌گیری از قضیه بسط قطب‌های تابع مربوطه است. در این روش، ابتدا تابع توزیع را در نظر می‌گیریم و سپس سعی می‌کنیم قطب‌های این تابع را با استفاده از بسط قطب توابع مرومورفیک پیدا کنیم. با معرفی تابع:

$$f(z)=\frac{1}{q-q^{-1}}\ln[\sigma_{kq}(z)], \qquad (10)$$

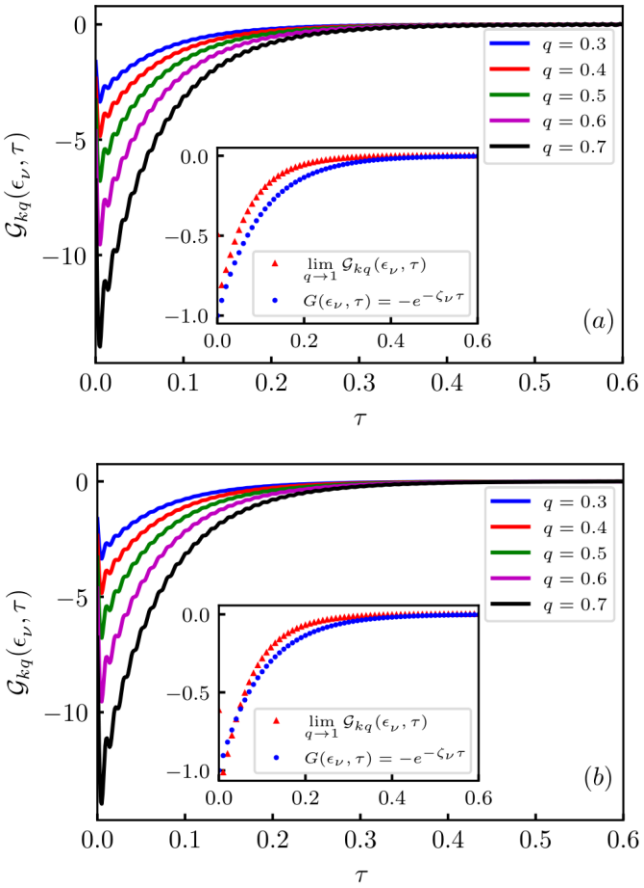
که $\sigma_{kq}(z)=\frac{e^{\beta z}-kq^{-k}}{e^{\beta z}-kq^{k}}$ است، بطوری که تابع فوق مطابق با رابطه (۶) می‌باشد $\bar{n}_{kq}(\zeta_\nu)\equiv f(\epsilon_\nu-\mu)$. برای بسط تابع از قضیه Mittag-Leffler استفاده می‌کنیم که قطب‌های این تابع فرکانس‌های تعمیم‌یافته ماتسوبارا خواهد بود. در نتیجه با توجه به رابطه مابین تابع توزیع و تابع گرین ما می‌توانیم تابع گرین موثر داشته باشیم[10]:

$$\bar{n}_{kq}(\zeta_\nu)=-\frac{1}{kq}\lim_{\tau\to0^-}\left(i\tilde{\mathcal{G}}_{kq}^{(0)}(\zeta_\nu,\tau)\right) \qquad (11)$$

در نهایت داریم:

$$i\tilde{\mathcal{G}}_{kq}^{(0)}\left(\zeta_\nu,i\omega_n^{(X,j)}\right)\approx\frac{(-1)^{j+1}}{q-q^{-1}}\ln\left(\frac{\zeta_\nu-i\omega_n^{(X,j)}}{a-i\omega_n^{(X,j)}}\right), \qquad (12)$$

در اینجا a یک عدد ثابت است. بدین ترتیب ما رفتار توابع گرین برای q–فرمیون‌ها و q–بوزون‌ها، به ازای مقادیر مختلف q می‌توانیم مطابق شکل ۱ داشته باشیم که در q=1 رفتاری شبیه و یکسان با تابع گرین مرسوم از خود نشان می‌دهد.



شکل۱: توابع گرین موثر برای k=1 (a) و k=-1 (b) که به ترتیب رفتار توابع گرین q–فرمیون‌ها و q–بوزون‌ها را نشان می‌دهد.

تابع دی‌الکتریک در دمای صفر برای گاز q–فرمیونی

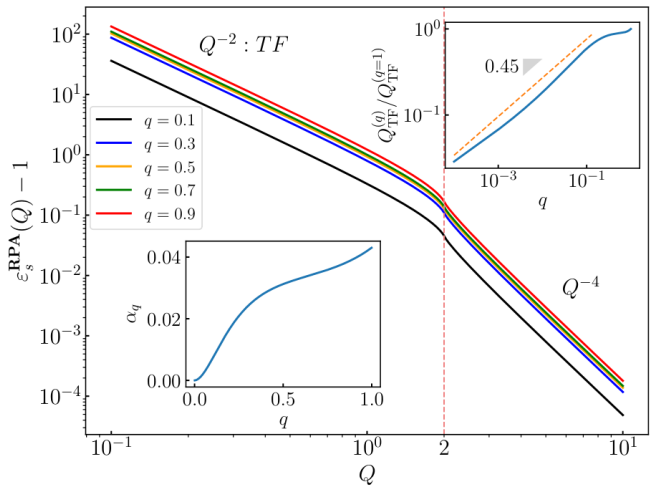
برای انجام یک تحلیل عمیق‌تر، ما نیاز داریم تا درج قطبش (polarization insertion) مرتبه پایین‌تر، که با Π^0 نشان داده می‌شود و به عنوان یک حباب منفرد (single bubble) تعریف و به صورت ریاضی به شکل زیر نمایش داده می‌شود را بررسی کنیم

$$\Pi^0_{kq}(x,x') = -i(kq)iG^{(M,X,0)}_{kq}(x,x')iG^{(M,X,0)}_{kq}(x',x). \quad (13)$$

در ادامه با رفتن به فضای تکانه، تابع دی‌الکتریک با تقریب فاز تصادفی (RPA) را بصورت زیر می‌نویسیم:

$$\varepsilon^{\mathrm{RPA}}\left(\omega_n^{(j)},Q\right) = 1 - v_0(Q)\Pi^0_{\mathrm{q}}\left(\omega_n^{(j)},Q\right), \quad (14)$$

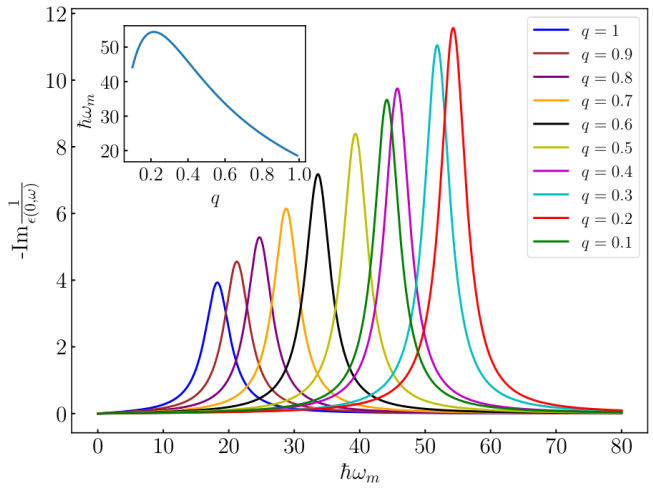
که ما در اینجا برهم‌کنش کولن $v_0(Q) = 4\pi e^2/Q^2$ را در نظر گرفته‌ایم. ما رفتار تابع دی‌الکتریک را برحسب بردار موج در شکل۲ برای حالت‌های متفاوت نشان داده‌ایم.



شکل۲

هم چنین ما در ادامه بحث می‌توانیم توابع مختلفی از جمله تابع اتلاف انرژی برای گاز q–فرمیونی را محاسبه کنیم که با رابطه زیر داده می‌شود و رفتار آن را در شکل ۳ مشاهده می‌کنیم:

$$-\mathrm{Im}\frac{1}{\varepsilon(\omega,0)} = \frac{\tau^{-1}\omega\Omega_P^{(q)^2}}{\left(\omega^2-\Omega_P^{(q)^2}\right)^2+\frac{\omega^2}{\tau^2}}. \quad (15)$$



شکل۳

نتیجه گیری

این پژوهش یک نظریه کوانتومی بس–ذره‌ای برای ذرات kq با آمار q–دگرگون توسعه داده است، که امکان تحلیل سیستم‌هایی با آمار ذرات و برهم‌کنش‌های مؤثر درهم‌تنیده را فراهم می‌کند. محاسبه تابع دی‌الکتریک برای q–فرمیون‌ها در تقریب فاز تصادفی، ماهیت آماری اثرات پوششی را نشان می‌دهد و بررسی پدیده‌هایی مانند نوسانات فریدل و فرکانس پلاسما را ممکن می‌سازد. این کار نشان می‌دهد که رویکردهای آماری مبتنی بر q–دگرگون می‌توانند بینش‌هایی در مورد اثرات جمعی ارائه دهند و راه را برای تحقیقات آتی در زمینه برهم‌کنش‌های مرتبه بالاتر و کاربردهای احتمالی در سیستم‌های کوانتومی غیراستاندارد باز کنند.

مرجع‌ها

[1] Wilczek, F. (1982). Quantum mechanics of fractional-spin particles. Physical review letters, 49(14), 957.

[2] Haldane, F. D. M. (1991). ‘‘Fractional statistics’’in arbitrary dimensions: A generalization of the Pauli principle. Physical review letters, 67(8), 937.

[3] Wu, Y. S. (1984). Multiparticle quantum mechanics obeying fractional statistics. Physical Review Letters, 53(2), 111.

[4] Laughlin, R. B. (1983). Anomalous quantum Hall effect: an incompressible quantum fluid with fractionally charged excitations. Physical Review Letters, 50(18), 1395. [5] Wilczek, F. (1982). Quantum mechanics of fractional-spin particles. Physical review letters, 49(14), 957.

[5] Shirley, W., Slagle, K., & Chen, X. (2019). Fractional excitations in foliated fracton phases. Annals of Physics, 410, 167922.

[6] Vijay, S., Haah, J., & Fu, L. (2016). Fracton topological order, generalized lattice gauge theory, and duality. Physical Review B, 94(23), 235157.

[7] Chaichian, M., Felipe, R. G., & Montonen, C. (1993). Statistics of q-oscillators, quons and relations to fractional statistics. Journal of Physics A: Mathematical and General, 26(16), 4017.

[8] Lavagno, A., & Swamy, P. N. (2002). Generalized thermodynamics of q-deformed bosons and fermions. Physical Review E, 65(3), 036101.

[9] Lavagno, A., & Swamy, P. N. (2000). Thermostatistics of a q-deformed boson gas. Physical Review E, 61(2), 1218.

[10] Fetter, A. L., & Walecka, J. D. (2012). Quantum theory of many-particle systems. Courier Corporation.

اثر نانوحفره‌ها بر انتقال حرارت گذرا در کانال ترانزیستور دوبعدی ایندیم سلنید

فرجوند، محمدپارسا[۱]؛ شمالی، زهرا[۲]؛ غضنفریان، جعفر[۱]

[۱] گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه زنجان، زنجان

[۲] گروه فیزیک ماده چگال، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

چکیده

در این مقاله، معادله انتقال بولتزمن برای فونون‌ها به روش مونت‌کارلو به منظور بررسی اثر نانوحفره‌ها بر توزیع دما در ماده دوبعدی ایندیم سلنید (Inse) حل شده‌است. InSe به‌عنوان یک نیمه‌هادی دوبعدی با رسانش حرارتی پایین و خواص گرمایی-الکترونی مطلوب، گزینه‌ای مناسب برای کاربردهای ترموالکتریک به شمار می‌رود. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که پراکندگی مرزی فونون‌ها با دیواره نانوحفره‌ها، باعث افزایش محسوس دما در اطراف نانوحفره‌ها و در نتیجه منجر به کاهش رسانش حرارتی موضعی در ساختار می‌گردد.

واژگان کلیدی: *انتقال حرارت ابعاد نانو، مواد دوبعدی، معادله بولتزمن، روش مونت‌کارلو*

The Effect of Nanopores on Transient Heat Transfer in Two-Dimensional Indium Selenide Transistor Channel

Farajvand, Mohammad Parsa[1]; Shomali, Zahra[2]; Ghazanfarian, Jafar[1]

[1] *Mechanical Engineering Department, Faculty of Engineering, University of Zanjan, Zanjan*

[2] *Department of Condensed Matter Physics, Tarbiat Modares University, Tehran*

Abstract

In this article, the phonon-Boltzmann transport equation is solved using the Monte Carlo method to investigate the effect of nanopores on temperature distribution in the two-dimensional material indium selenide (InSe). As a two-dimensional semiconductor with low thermal conductivity and favorable thermoelectric properties, InSe is considered a suitable candidate for thermoelectric applications. The simulation results demonstrate that boundary scattering of phonons at nanopore walls leads to a significant temperature rise around the nanopores, consequently reducing local thermal conductivity in the structure.

Keywords*: Nanoscale heat transport, 2D materials, Boltzmann equation, Monte Carlo method*

مقدمه

از اوایل قرن نوزدهم برداشت انرژی به علت نیاز به کاهش مصرف انرژی هسته‌ای و انرژی‌های فسیلی به طورگسترده مورد توجه قرارگرفته‌است. یکی از راه‌های برداشت انرژی استفاده از مواد ترموالکتریک است. این مواد توسط اثر سیبک قابلیت تبدیل گرما به الکتریسیته را دارند و بخش اصلی یک ژنراتور ترموالکتریک هستند.

مواد دو بعدی به علت رسانندگی گرمایی شبکه پایین، پتانسیل بالایی برای استفاده به عنوان مواد ترموالکتریک دارند. حامل‌های انرژی غالب در مواد دو بعدی فونون‌ها هستند.

با کاهش ابعاد قطعات الکترونیکی به کمتر از میکرومتر، استفاده از قانون فوریه برای بررسی انتقال حرارت به علت اثرات غیر فوریه این سیستم‌ها منجر به نتایج اشتباه می‌شود. یکی از راه‌های بررسی انتقال حرارت در این مواد حل معادله بولتزمن برای فونون‌ها است.

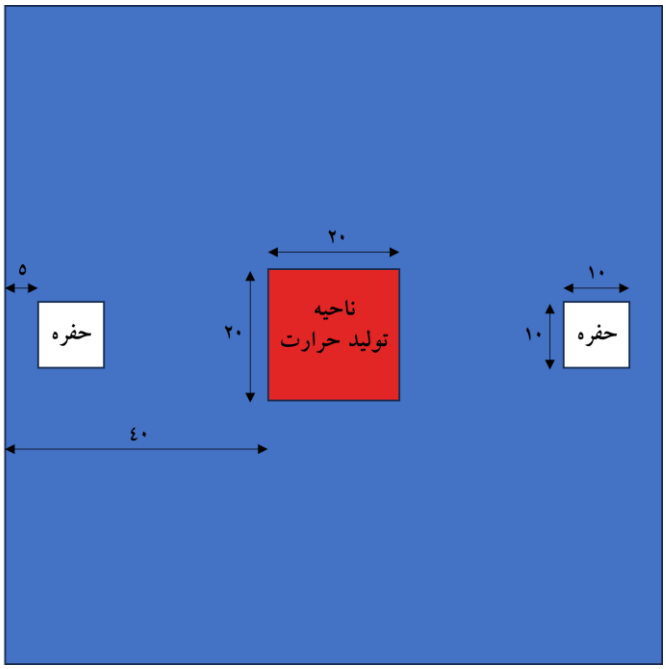
حل معادله انتقال بولتزمن برای فونون‌ها با روش‌های قطعی در یک هندسه دلخواه، به دلیل زیاد بودن متغیرهای مستقل و دشواری روش گسسته‌سازی آنها بسیار دشوار است. یکی از روش‌های حل این معادله که انعطاف بالایی در بررسی هندسه‌های پیچیده دارد، استفاده از روش مونت‌کارلو است که روشی عددی بر مبنای تولید اعداد تصادفی است[۱].

روش محاسباتی

انتقال حرارت با حضور نانوحفره‌ها در ایندیم سلنید (InSe) که یک ساختار تک لایه است، بررسی شده‌است. این ساختار تک لایه متشکل از چهار صفحه تک اتمی است که در یک الگوی شش ضلعی چیده شده‌اند. این صفحات به صورت چهاروجهی و با توالی Se-In-In-Se از طریق پیوندهای کووالانسی به هم متصل شده‌اند، به طوری که هر اتم ایندیم به سه اتم سلنید مجاور متصل است. این پیکربندی منجر به یک ساختار لایه‌ای با شبکه لانه زنبوری از اتم‌های ایندیم و سلنیوم می‌شود[۲].

نمونه شبیه‌سازی شده دارای طول (Lx) و عرض (Ly) ۱۰۰ نانومتر و ضخامت ۰/۷۵۷ نانومتر است و منبع حرارتی حجمی برابر با 10^{12}(W/m3) به آن اعمال می‌شود. همه مرزها به جز مرز پایینی، آدیاباتیک در نظر گرفته می‌شوند و دمای آنها برابر با دمای محیط است. مرز پایینی باعث می‌شود سیستم مورد بررسی با محیط انرژی مبادله کند. لازم به ذکر است که دمای اولیه سیستم ۲۹۹ کلوین است. دو نانوحفره به ابعاد ۱۰ در ۱۰ نانومتر در دو طرف منبع حرارتی وجود دارند. نانوحفره‌ها در تمام ضخامت ماده امتداد دارند و از سطح بالا تا پایین ادامه می‌یابند. کل زمان شبیه‌سازی ۴۰۰ پیکوثانیه است. در ۲۰۰ پیکوثانیه اول منبع حرارتی روشن و در زمان ۲۰۰ پیکوثانیه منبع خاموش می‌شود.

شکل ۱ نمایی شماتیک از مدل شبیه‌سازی شده را از دید بالا نشان می‌دهد.



شکل ۱: شماتیک مدل شبیه‌سازی شده (ابعاد بر حسب نانومتر هستند)

با توجه به اینکه مطالعه در ابعادنانو انجام شده‌است، برای به‌دست‌آوردن جواب‌های دقیق، باید از روش‌های غیرفوریه‌ای استفاده کرد. در این مقاله انتقال حرارت در ماده دوبعدی دارای نانوحفره از طریق حل معادله انتقال‌بولتزمن برای فونون‌ها به روش مونت‌کارلو بررسی شده‌است. رابطه ۱ معادله انتقال بولتزمن برای فونون‌ها را با فرض عدم وجود جمله چشمه و نیروهای خارجی نشان می‌دهد[۳].

$$\frac{\partial f_b(r,q,t)}{\partial t} + v_{b,q}.\nabla_r f_b(r,q,t) = \frac{\partial f_b(r,q,t)}{\partial t}|_{scat} \quad (۱)$$

در این رابطه v سرعت گروهی فونون‌ها و $f_b(r,q,t)$ تابع توزیع احتمال برای هر شاخه[۵۱] از فونون‌ها است که به با پارامترهای زمان، مکان و بردار موج بستگی دارد.

روش مونت‌کارلو به‌طور گسترده به طیف وسیعی از روش‌های محاسباتی که از نمونه‌گیری تصادفی برای به دست آوردن جواب‌های عددی استفاده می‌کنند، اشاره دارد و به دلیل ماهیت تصادفی سیستم‌های فونونی، برای حل معادله انتقال‌بولتزمن برای فونون‌ها بسیار مناسب است. نمونه‌های تصادفی تولید شده در این روش نماینده‌ای از چگالی توزیع فونون‌ها در مواد هستند. هم‌چنین با استفاده از اعداد تصادفی تولید شده، مسیر حرکت فونون‌ها شبیه‌سازی می‌شود. این مرحله شامل محاسبه مسیر و زمان جابجایی فونون‌ها است[٤]. علاوه‌براین، نرخ پراکندگی برای فونون‌ها در محدوده‌ی فرکانس هر شاخه از فونون‌ها، برای هر ۱۰۰۰ فرکانس ممکن، بررسی می‌شود. نرخ پراکندگی با معکوس کردن زمان‌های استراحت[۵۲] فونون تعیین می‌شود.

منحنی پراکندگی[۵۳] فونونی شاخه‌های آکوستیک، تقریبا همسانگرد هستند و با معادله درجه دوم برازش داده می‌شوند[۵].

$$\omega_b = C_b k^2 + V_b k \quad (۲)$$

در صورت برخورد فونون‌ها با دیواره‌های نانوحفره‌ها، پراکندگی مرزی[۵٤] بین دیواره‌ها و فونون‌ها رخ می‌دهد.

شکل ۲ کانتور دما را در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی نشان می‌دهد.

همان‌طور که از این شکل مشخص است، پراکندگی مرزی فونون‌ها با دیواره نانوحفره‌ها، باعث افزایش محسوس دما در اطراف نانوحفره‌ها شده‌است.

نتیجه‌گیری

نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که افزودن نانوحفره‌ها به ساختار ماده دوبعدی ایندیم سلنید ، باعث افزایش دمای موضعی در اطراف نانوحفره‌ها می‌شود. این افزایش ناشی از پراکندگی مرزی فونون‌ها با دیواره‌های نانوحفره‌ها است که مسیر انتقال حرارت و حرکت فونون‌ها در ماده را محدود می‌کند. در نتیجه، رسانش حرارتی موضعی کاهش یافته و افزودن نانوحفره‌ها می‌تواند به عنوان یکی از راه‌های بهبود کارایی مواد ترموالکتریک در نظر گرفته‌شود.

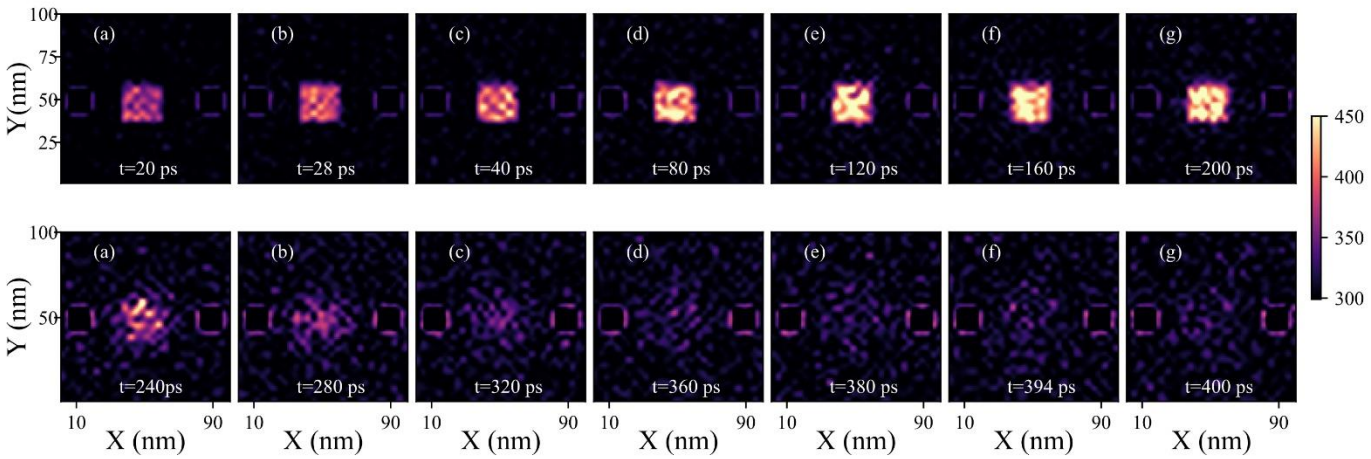
---

۵۱ Branch

۵۲ Relaxation time

۵۳ Dispersion curve

۵٤ Boundary scattering



شکل۲ : توزیع دما در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی در ایندیم سلنید با حضور نانو حفره‌ها در زمان‌های مختلف

مرجع‌ها

[۱] Shomali, Zahra, et al. "Monte-Carlo parallel simulation of phonon transport for 3D silicon nano-devices." International journal of thermal sciences 114 (2017): 139-154

[۲] A. Politano, and et al, "Indium selenide: an insight into electronic band structure and surface excitations", Scientific Reports. 7 (1): 3445, 2017.

[۳] Kalantari, Mohammad Hassan & Zhang, Xian. (2022). Thermal Transport in 2D Materials. Nanomaterials. 13. 117. 10.3390/nano13010117

[۴] Arpit Mittal, “Monte-Carlo Study of Phonon Heat Conduction in Silicon” Master of Science in the Graduate School of The Ohio State University 2009

[۵]S.A. Bahadori, Z. Shomali, “Thermal transport in thermoelectric materials of SnSSe and SnS2: A non-equilibrium Monte-Carlo simulation of Boltzmann transport equation” Case Stud. Therm. Eng, 57, 104377, 2024.

شبیه‌سازی مدل کیتائف-ککوله بر روی شبکه مربعی-شش‌ضلعی-دوازده‌ضلعی با استفاده از شبکه‌های تانسوری

براری، سعید[1]؛ سیوف جهرمی،سید سعید[1]

[1] گروه فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، زنجان

چکیده

مایع‌های اسپینی کوانتومی به عنوان فازهایی نوظهور و فاقد نظم مغناطیسی کلاسیک در دماهای پایین، از جمله پدیده‌های برجسته در فیزیک ماده چگال هستند. در این مقاله، به مطالعه مدل کیتائف با رنگ‌بندی ککوله بر روی شبکه ارشمیدوسی مربعی-شش‌ضلعی-دوازده‌ضلعی می‌پردازیم. برای به‌دست آوردن انرژی حالت پایه و بررسی خواص مغناطیسی از روش شبکه‌های تانسوری بهره گرفته‌ایم. نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهند که در حد باند درهم‌تنیدگی بزرگ، مقدار میانگین مغناطش به صفر میل کرده و سیستم به سمت یک فاز مایع اسپینی کوانتومی بدون نظم مغناطیسی گرایش دارد. همچنین، رفتار همبستگی‌های اسپینی و انرژی باندها با ویژگی‌های مایع‌های اسپینی کوانتومی کیتائف تطابق دارد. این مطالعه نه تنها وجود فاز مایع اسپینی را در شبکه‌های پیچیده‌تر تأیید می‌کند، بلکه نشان می‌دهد که روش‌های تانسوری ابزار قدرتمندی برای تحلیل سیستم‌های فراتر از شبکه‌های منتظم هستند.

واژگان کلیدی: مایع اسپینی کوانتومی، مدل کیتائف-ککوله، شبکه مربعی-شش‌ضلعی-دوازده‌ضلعی، شبکه تانسوری.

Tensor Network Simulation of Kitaev-Kekule Model on the square-hexagonal-dodecagonal Lattice

Barari, Saeed[1]; Soyouf Jahromi, Seyed Saeed[1]

[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan

Abstract

Quantum spin liquids, as emergent phases lacking classical magnetic order at low temperatures, are among the most remarkable phenomena in condensed matter physics. In this paper, we investigate the Kitaev model with a Kekulé-type bond coloring on the Archimedean square-hexagon-dodecagon (SHD) lattice. We employ tensor network methods to compute the ground state energy and explore the magnetic properties of the system. Our results show that, in the large entanglement bond dimension limit, the average magnetization approaches zero, indicating a tendency towards a quantum spin liquid phase without magnetic ordering. Furthermore, the behavior of spin correlations and band energies is consistent with the characteristics of Kitaev quantum spin liquids. This study not only confirms the existence of spin liquid phases on more complex lattices, but also demonstrates that tensor network techniques are powerful tools for analyzing systems beyond regular lattices.

Keywords: Quantum spin liquid, Kitaev-Kekulé model, square-hexagonal-dodecagonal lattice, tensor network.

مقدمه

مایع‌های اسپینی کوانتومی [۱] یکی از فازهای نوظهور و نامتعارف ماده در فیزیک حالت جامد هستند که به‌ویژه در سیستم‌های دوبعدی با برهم‌کنش‌های کوانتومی قوی پدیدار می‌شوند. برخلاف سامانه‌های مغناطیسی معمول که در دماهای پایین به‌سوی نظم فرومغناطیسی یا آنتی‌فرومغناطیسی میل می‌کنند، این فازها حتی در دمای صفر کلوین نیز فاقد هرگونه نظم مغناطیسی بلندبرد هستند. این رفتار غیرعادی نتیجه‌ی وجود درهم‌تنیدگی کوانتومی قوی و عواملی مانند درماندگی هندسی یا برهم‌کنش‌های ناهمسانگرد موضعی میان اسپین‌هاست که مانع از شکستن تقارن‌های فضایی یا داخلی در حالت پایه سیستم می‌شوند. [۲]

مایع‌های اسپینی کوانتومی به دلیل داشتن برهم‌کنش‌های بلندبرد و حالت پایه‌ی به‌شدت درهم‌تنیده، بستر مناسبی برای مطالعه‌ی نظم‌های کوانتومی غیرموضعی و فازهای توپولوژیکی فراهم می‌کنند. همچنین مایعات اسپینی کوانتومی به‌عنوان کاندیداهایی امیدبخش برای پیاده‌سازی محاسبات کوانتومی توپولوژیکی مطرح شوند؛ زیرا در چنین فازهایی، اطلاعات کوانتومی می‌تواند به‌صورت غیرموضعی رمزگذاری‌شده و در برابر نویزهای موضعی محیطی محافظت شود.[۳]

در این مقاله به بررسی مدل کیتائف با رنگ‌بندی ککوله بر روی شبکه مربعی–شش‌ضلعی–دوازده‌ضلعی[۵۵] (SHD)، که یکی از زیر مجموعه شبکه‌های ارشمیدوسی[٤] است، می‌پردازیم (شکل ۱). این شبکه بر اساس تعداد همسایه‌های هر راس با نام (۱۲، ٦، ٤) نیز شناخته می‌شود که بیان‌گر نوع و تعداد شکل‌های موجود در شبکه است. مدل کیتائف بر روی این شبکه به‌دلیل تنوع در اندازه و زاویه‌های چندضلعی‌ها و ناهمسانگردی موضعی می‌تواند از نظم مغناطیسی جلوگیری کرده و فازهای نوظهوری مانند مایع‌های اسپینی کوانتومی را میزبانی کند.[۵]

مدل کیتائف–ککوله:

شبکه SHD را در نظر بگیرید که بر روی راس‌های آن اسپین‌های $\frac{1}{2}$ قرار دارد، برهم‌کنش میان این اسپین‌ها از نوع کیتائف می‌باشد. هامیلتونی مدل کیتایف بر روی شبکه SHD به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$H = \sum_{\langle i,j\rangle,\alpha} K\, S_i^{\alpha}.S_j^{\alpha}, \quad \alpha = x,y,z \qquad (۱)$$

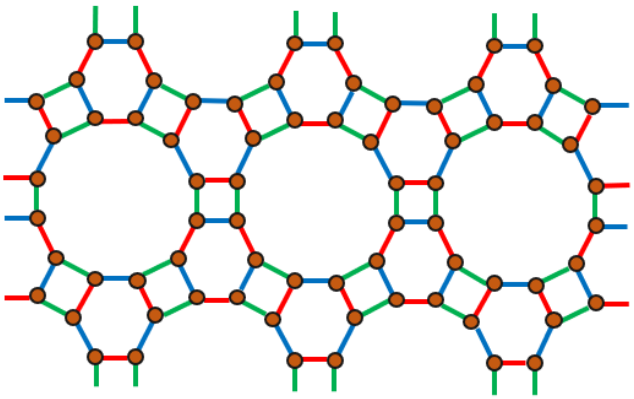
در این رابطه، $\langle i,j\rangle$، جمع بر روی همسایه‌های نزدیک است، α نشان‌دهنده‌ی سه جهت مختلف برهمکنش‌ها بر روی شبکه می‌باشد، K ثابت جفت‌شدگی کیتائف است و در آخر S^{α} عملگر اسپینی در راستای α می‌باشد.

رنگ‌بندی استاندارد کیتائف بر روی پلاکت‌های شبکه لانه‌زنبوری[۵۶] دارای تقارن ۱۸۰ درجه است، اما از آنجایی که پیاده‌سازی همچین تقارن رنگی‌ای بر روی شبکه SHD پیچیده است، برای کاهش هزینه‌های محاسباتی، رنگ‌بندی ککوله را انتخاب کردیم.

همان‌طور که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، هر کدام از اسپین‌ها در هر راس تحت برهم‌کنش در هر سه راستای x, y و z است. در نتیجه اسپین به‌طور هم‌زمان در سه جهت نمی‌تواند هم‌راستا شود و این ناهمسازگاری که به دلیل برهم‌کنش‌های سیستم است سبب بروز درماندگی هندسی و القای افت و خیزهای کوانتومی شدید در سیستم شده که از شکل‌گیری یک نظم معمول مغناطیسی جلوگیری می‌کند.

[۵۵] Square-Hexagonal-Dodecagonal

[۵۶] honeycomb



شکل ۱: مدل کی‌تائف برای شبکه SHD با رنگ بندی ککوله. نقطه ها اسپین‌های $\frac{1}{2}$ هستند و رنگ‌های قرمز، سبز و آبی به ترتیب نشان دهنده برهمکنش‌های تبادلی در راستاهای x، y و z هستند.

روش محاسباتی

شبکه‌های تانسوری [۷–۶] به عنوان یکی از روش‌های نوین در فیزیک ماده چگال، نقش کلیدی در مطالعه مدل‌های کوانتومی ایفا می‌کنند و امکان دست‌یابی به حالت پایه سیستم‌ها و استخراج کمیت‌های فیزیکی مهم را برای مدل‌هایی که حل دقیقی برای آن‌ها وجود ندارد، فراهم می‌سازند. در این مقاله از روش جفت‌های درهم‌تنیده تصویر شده نامتناهی[۵۷] (iPEPS) [۱۰–۸] و روش گروه‌های بهنجارسازی ماتریس انتقال-گوشه[۵۸] (CTMRG) برای انقباض‌های[۵۹] تانسوری حالت پایه استفاده کردیم. [۱۴–۱۰]

برای نمایش تابع موج سیستم‌های دوبعدی، در شبکه‌های تانسوری، از قراردادن تانسورها روی شبکه‌ای مربعی نامتناهی استفاده می‌شود. تانسورها برای شبکه‌های دو بعدی از مرتبه[۶۰] ۵ هستند؛ هر تانسور دارای یک باند فیزیکی (p) که درجه آزادی اسپینی سیستم را نشان می‌دهد، و دارای چهار باند مجازی (D) است که میزان درهم‌تنیدگی میان اجزای مختلف سیستم را توصیف می‌کنند.

در روش iPEPS، از یک حالت اولیه دلخواه و تصادفی می‌توانیم شروع کنیم و با استفاده از تقریب سوزوکی تروتر، عملگر تحول زمانی موهومی ($e^{-\beta H}$) را به n عملگر کوچک‌تر ($e^{-\tau H}$) تجزیه می‌کنیم (رابطه ۲) و با اعمال این عملگرهای کوچک‌تر بر روی حالت اولیه، به سمت حالت پایه سیستم می‌رویم.

$$e^{-\beta H} = e^{-n\tau H} = (e^{-\tau H})^n \qquad (۲)$$

تابع موج بی‌نهایت بدست‌آمده از روش iPEPS را با استفاده از روش CTMRG منقبض می‌کنیم تا محیط اطراف هر تانسور را بدست‌آوریم.

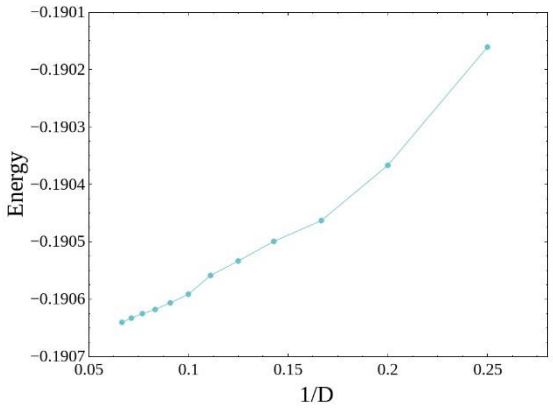
با تعریف بیشینه مقدار χ برای اندازه باند درهم‌تنیدگی، دقت محاسبه محیط اطراف هر سایت را می‌توان کنترل کرد. در این مقاله نتایج برای D از ٤ تا ۱۵ رسم شده است و مقدار χ برای D های مختلف $\chi = D^2 \leq 64$ می‌باشد. از سه گام زمانی (τ) مختلف از 10^{-1} تا 10^{-3} و تجزیه سوزوکی تروتر مرتبه دوم در این مقاله استفاده کردیم.

تبدیل شبکه SHD به ساختار مربعی

در روش iPEPS، ساختار شبکه باید مربعی باشد، به همین خاطر نیاز است که در قدم اول شبکه SHD را تبدیل به ساختار مربعی

[۵۷] infinite Projected Entangled Pair States
[۵۸] Corner Transfer Matrix Renormalization Group
[۵۹] contractions
[۶۰] rank

کنیم. سلول واحد شبکه SHD تحت برهم‌کنش کیتائف-ککوله مطابق شکل ۳ الف می‌باشد.

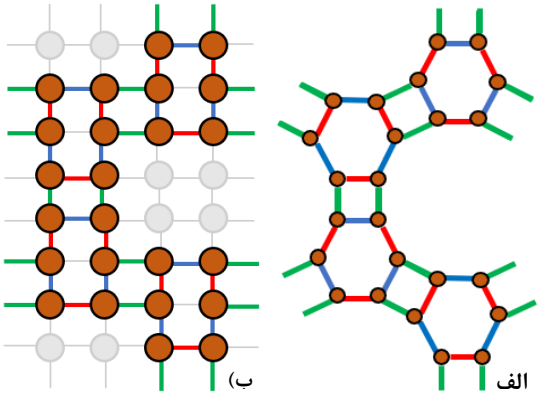


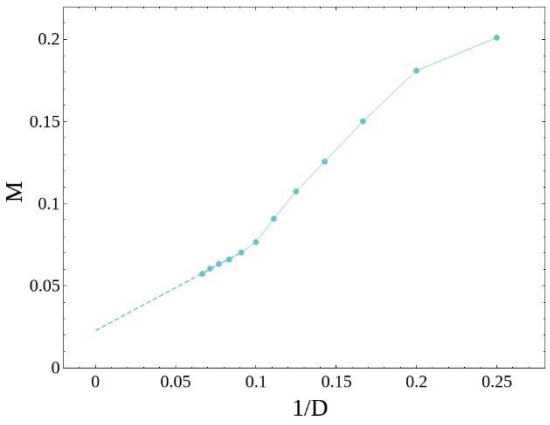
نمودار ۲: مقدار انرژی هر باند شبکه SHD برحسب وارون مقدار باند مجازی

با فشرده کردن شبکه SHD و تغیر هندسه شبکه به ساختار آجری[۶۱] و سپس با جایگزاری‌کردن جاهای خالی با تانسورهای فرضی[۶۲] و لینک‌های فرضی بدون برهم‌کنش (تانسورها و لینک‌های خاکستری) یک شبکه مربعی کامل بدست می‌آید شکل ۳ ب. اندازه باندهای

شکل ۱: نحوه مربعی کردن شبکه SHD الف) سلول واحد شبکه SHD با برهمکنش کیتائف-ککوله، ب) می‌توانیم این سلول واحد را در ابتدا با تبدیل به ساختار آجری و سپس اضافه‌کردن لینک‌ها و تانسورهای فرضی به ساختار مربعی تبدیل بکنیم.

مجازی برای تانسورهای فرضی برابر با یک می‌باشد و در محاسبات



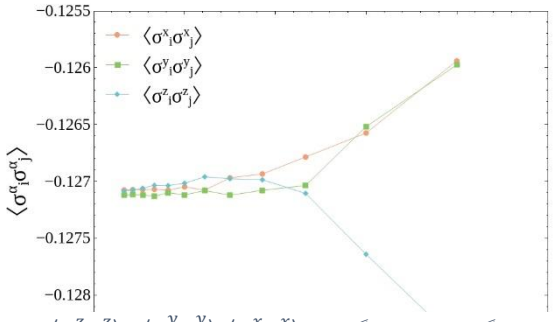


نمودار ۱: میانگین مغناطش برحسب مقدار وارون باند مجازی

نقشی ندارند. حال که شبکه مربعی را ساختیم می‌توانیم از روش iPEPS استفاده کنیم.

نتایج

پس از آنکه حالت پایه سیستم را بدست‌آوردیم انرژی هر باند را محاسبه کردیم که در D = 15 مقدار آن برابر با $E_b = -۰.۱۹۰۶$ می‌باشد (نمودار ۱). همان‌طور که در نمودار ۲ مشاهده می‌کنید هر چه اندازه باند مجازی بیشتر می‌شود مقدار میانگین مغناطش به صفر



نمودار ۳: میانگین مقدار همبستگی‌های $\langle\sigma_i^x\sigma_j^x\rangle$، $\langle\sigma_i^y\sigma_j^y\rangle$ و $\langle\sigma_i^z\sigma_j^z\rangle$ بر روی تمام لینک‌های مربوط به خودشان برحسب وارون اندازه باند مجازی

[۶۱] brick wall

[۶۲] dummy tensors

میل می‌کند که مطابق با رفتار انتظاری مایع‌های اسپینی کوانتومی است.

در نمودار ۳، همبستگی باندها را با برهمکنش $\sigma^z\sigma^z$ مشاهده می‌کنید هر چه اندازه باند درهم‌تنیدگی بیشتر می‌شود، مقدار همبستگی باندها به هم نزدیک‌تر می‌شود و درنیایت به یک مقدار می‌رسند.

نتیجه‌گیری

در این مقاله حالت پایه مدل کیتائف-ککوله در شبکه مربعی-شش‌ضلعی-دوازده‌ضلعی با استفاده از روش شبکه‌های تانسوری بدست‌آوردیم و از طریق روش iPEPS و CTMRG نشان دادیم که در حد ترمودینامیک مغناطش به سمت صفر می‌رود و همبستگی‌های $\langle\sigma_i^x\sigma_j^x\rangle$، $\langle\sigma_i^y\sigma_j^y\rangle$ و $\langle\sigma_i^z\sigma_j^z\rangle$ بر روی لینک‌های مربوط به خودشان با هم برابر است که نشان‌دهنده عدم شکست تقارن فضایی در شبکه است که یکی دیگر از ویژگی‌های انتظاری مایع‌های اسپینی کوانتومی کیتائف می‌باشد.

همچنین نشان دادیم چگونه با اضافه کردن تانسورهای فرضی می‌توانیم روش iPEPS را به هر شبکه‌ی دوبعدی دلخواهی حتی با ساختارهای پیچیده اعمال بکنیم، این رویکرد می‌تواند ابزاری بسیار

مناسب برای مطالعه سایر مدل‌های اسپینی بر روی شبکه‌هایی با ساختارهای پیچیده‌تر باشد.

همچنین مطالعات ما که در اینجا آورده نشده است، نشان می‌دهد که در فضای حقیقی نتایج بدست‌آمده برای مایع‌های اسپینی کوانتوم با رنگ‌بندی ککوله و رنگ‌بندی متقارن (رنگ‌بندی کیتائف) با هم تطابق دارد.

مرجع‌ها

[1] Lucile Savary, Leon Balents, "Quantum spin liquids," IOP Publishing, p. 80, 2016.
[2] L. Balents, *Spin liquids in frustrated magnets*, Nature 464, 199–208 (2010).
[3] H. Bombin, M. A. Martin-Delgado, *Topological Quantum Distillation*, Phys. Rev. Lett. 97, 180501 (2006)
[4] D. J. J. Farnell, O. Goetze, J. Richter, R. F. Bishop, P. H. Y. Li, *"Quantum s = ۱/۲ Antiferromagnets on Archimedean Lattices: The Route from Semiclassical Magnetic Order to Nonmagnetic Quantum States,"* arXiv, p. ۱۳, ۲۰۱۳
[5] Farnell, D. J. J., et al. (۲۰۱۸). Interplay between lattice topology, frustration, and spin quantum number in quantum antiferromagnets on Archimedean lattices. Physical Review B, ۹۸(۲۲), ۲۲۴۴۰۲.
[6] F. Verstraete, V. Murg, and J. Cirac, Advances inPhysics 57, 143 (2008).
[7] R. Orus, *"A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states," Annals of Physics, 349,117-158 (2014)*
[8] *Philippe Corboz, Roman Orus, Bela Bauer, and Guifre Vidal, "Simulation of strongly correlated fermions in two spatial dimensions with fermionic Projected Entangled-Pair States," arXiv, 2010.*
[9] J. Jordan, R. Orus, G. Vidal, F. Verstraete, and J. I. Cirac, "Classical Simulation of Infinite-Size Quantum Lattice Systems in Two Spatial Dimensions," Physical Review Letters, p. 4, 2008.
[10] Ho N. Phien, Johann A. Bengua, Hoang D. Tuan, Philippe Corboz, and Roman Orus, "Infinite projected entangled pair states algorithm improved: Fast full update and gauge fixing," PHYSICAL REVIEW B , p. 12, 2015.
[11] T. Nishino and K. Okunishi, "Corner Transfer Matrix Renormalization Group Method," arXiv, p. 14, 1995.
[12] Vidal, Román Orús and Guifré, "Simulation of two-dimensional quantum systems on an infinite lattice revisited: Corner transfer matrix for tensor contraction," PHYSICAL REVIEW B, p. 4, 2009.
[13] Philippe Corboz, Jacob Jordan, and Guifré Vidal, "Simulation of fermionic lattice models in two dimensions with projected entangled-pair states: Next-nearest neighbor Hamiltonians," PHYSICAL REVIEW B, 2010.
[14] Philippe Corboz, T. M. Rice, and Matthias Troyer, "Competing States in the t-J Model: Uniform d-Wave State versus Stripe State," PHYSICAL REVIEW B, p. 5, 2014.

مطالعه ترشوندگی سطوح آلوتروپ های فسفرن با قطره آب به روش دینامیک مولکولی

عشقی، مینا؛ حمزه پور، حسین؛ منظورالجداد، سید محمد کاظم

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران

چکیده

در پی خواص الکتریکی و نوری آلوتروپ های مختلف فسفرن رفتار ترشوندگی آن ها نظر محققین را به خود جلب کرده است. در این مطالعه خاصیت ترشوندگی آلوتروپ های مختلف فسفرن با قطرات آب به روش دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت.در مرحله اول رفتار آب گریزی فسفرن سیاه به کمک پتانسیل ریکس مورد مطالعه قرار گرفت که با داده های تجربی و مطالعات قبلی مطابقت داشت. در مرحله دوم برای اولین بار ترشوندگی فسفرن آبی مورد بررسی قرار دادیم که نتایج شبیه سازی نشان دهنده آن است که سطح فسفرن آبی نیز رفتار آب گریزی از خود نشان می دهند. در این پژوهش به مطالعه رفتار ترشوندگی و مقایسه زاویه تماس فسفرن سیاه و آبی و مقایسه این دو با هم به روش دینامیک مولکولی می پردازیم.

واژگان کلیدی: ترشوندگی، فسفرن، دینامیک مولکولی

Wettability of phosphorene allotrope surfaces with water droplets using molecular

Eshghi, Mina; Hamzehpour, Hossein; Manzoorolajdad, Seyed Mohammad Kazem

Department of physics, K.N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran

Abstract

The wettability behavior of various phosphorene allotropes has attracted researchers' attention due to their electrical and optical properties. In this study, the wettability of different phosphorene allotropes with water droplets was investigated using molecular dynamics simulations. In the first phase, the hydrophobic behavior of black phosphorene was examined using the ReaxFF potential, which aligned with experimental data and prior studies. In the second phase, the wettability of blue phosphorene was explored for the first time, with simulation results revealing that its surface also exhibits hydrophobic behavior. Finally, the contact angle values of the two allotropes were compared

Keywords: *Wettability, Phosphorene, Molecular Dynamics*

مقدمه

مواد دوبعدی به دلیل خواص ویژه آن ها در حوزه‌های مختلف فناوری، از جمله نانوالکترونیک، فوتونیک، و زیست‌فناوری، توجه بسیاری از پژوهشگران را به خود جلب کرده‌اند. در میان این مواد، فسفرن، یک آلوتروپ دوبعدی فسفر سیاه، به دلیل ویژگی‌های برجسته‌ای همچون تحرک الکترونی بالا، شکاف نواری مستقیم و قابل تنظیم، و ساختار لایه‌ای با خواص ناهمسانگرد، جایگاه ویژه‌ای یافته است [۱-٤].

فسفرن علاوه بر ساختار سنتی خود (فسفر سیاه)، آلوتروپ‌های دیگری همچون فسفرن آبی و سبز دارد که به تازگی به‌عنوان مواد نوظهور برای استفاده در نانوالکترونیک و حسگرها پیشنهاد شده‌اند. فسفرن آبی به دلیل پایداری ساختاری و خواص اپتوالکترونیکی منحصربه فردش، در تنظیم شکاف نواری و بهینه‌سازی ابزارهای نانو کاربرد دارد [٤].

یکی از جنبه‌های جذاب در مطالعه مواد دوبعدی، بررسی رفتار ترشوندگی آن‌ها است که نقش مهمی در کاربردهایی نظیر حسگرهای زیستی، کاتالیست‌ها و طراحی پوشش‌های سطحی دارد. ترشوندگی در طراحی ایمپلنت‌ها، داروهای هدفمند و حسگرهای زیستی نقش کلیدی دارد. سطوح آب‌دوست می‌توانند جذب پروتئین و سلول‌ها را بهبود دهند، در حالی که سطوح آب‌گریز می‌توانند از ایجاد لایه‌های زیستی جلوگیری کنند [۱].

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به‌عنوان ابزاری قدرتمند برای تحلیل رفتار اتمی و مولکولی مواد، امکان درک عمیق‌تری از اثرات متقابل بین سطح فسفرن و مایعات را فراهم می‌کند. این روش به ویژه در مطالعه زاویه تماس، ساختار لایه‌های آب مجاور سطح، و تأثیرات عوامل خارجی نظیر کرنش و اکسیداسیون بر رفتار ترشوندگی اهمیت دارد [۱و٥]. روش‌های عمومی زیادی برای بررسی پدیده خیس شدن، از جمله اندازه‌گیری‌های تجربی روی زوایای تماس، شبیه‌سازی مولکولی، [٦] و نظریه‌های تابعی چگالی کلاسیک استفاده می‌شود.که در مطالعه اخیر برای توصیف رفتار تر شوندگی فسفرن های سیاه و آبی از معادله یانگ استفاده شده است [٦و٧] .

روش شبیه سازی

در این شبیه سازی زیر لایه ای در ابعاد ۸۶ × ۸۶ آنگستروم تعداد ۵۰۰ مولکول آب و در فاصله ۳ آنگسترومی از صفحات فسفرن سیاه و آبی قرار گرفته است. لایه صفحه فسفرن با ابعاد ۸۶ × ۸۶ مدل سازی گردید پ اتم های تشکیل دهنده آن در طول فرآیند شبیه سازی به صورت ثابت (Fixed) در نظر گرفته شدند.

برای اندازه گیری زاویه تماس و توصیف خواص ترشوندگی سطوح، از معادله یانگ به صورت زیر استفاده می شود:

$$\cos\theta = \frac{\gamma_{SV}-\gamma_{SL}}{\gamma_{LV}} \qquad (۱)$$

که در آن γ_{SV}، γ_{SL} و γ_{LV} به ترتیب کشش سطحی جامد-بخار، جامد-مایع و مایع-بخار هستند. زیرنویس‌های L، S و V به ترتیب برای فازهای مایع، جامد و بخار و θ زاویه تماس یانگ است. معادله (۲) کشش‌های سطحی γ بین این سه را به کشش خطی τ ، زاویه تماس θ و شعاع پایه قطره R مرتبط می‌کند:

$$\gamma_{SV} = \gamma_{SL} + \gamma_{LV}\cos\theta + \tau/R \qquad (۲)$$

در این پژوهش، از پارامترهای جدید توسعه یافته میدان نیروی ReaxFF استفاده شده است. ReaxFF به عنوان یک میدان نیروی پرکاربرد، امکان مدل سازی واکنش های شیمیایی را از طریق محاسبه توزیع دینامیکی بار اتمها و مفاهیم طول پیوند و مرتبه پیوند فراهم میکند. انرژی سیستم در مدل ReaxFF به صورت زیر می باشد[۸]:

$$E_{system}= E_{bond}+ E_{lp}+ E_{over} + E_{under}+E_{val}+E_{pen}+E_{coa}+E_{c_2}+E_{riple}+E_{tors}+E_{conj}+ E_{H\text{-}bond}+E_{vdWalls}+E_{coulomb} \quad (۳)$$

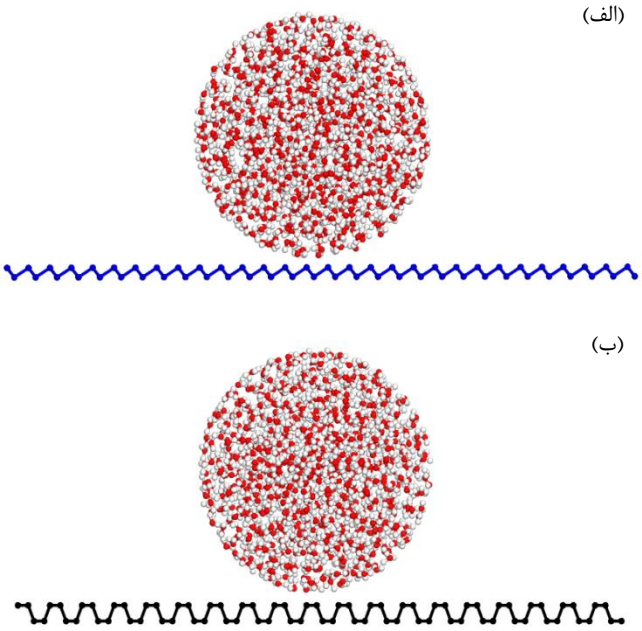
شبیه سازیهای دینامیک مولکولی با بهره گیری از نرم افزار LAMMPS انجام شده و تصاویر نتایج توسط نرم افزار VMD صورت پذیرفته است. در این مطالعه، شرایط مرزی تناوبی در راستاهای x و y اعمال گردید، در حالی که در جهت z از شرایط مرزی غیرتناوبی استفاده شد. ابعاد جعبه شبیه سازی به ترتیب ۸۸ × ۸۸ × ۴۵ آنگستروم در نظر گرفته شد.

کنترل دمای سیستم(۲۹۸ °k)، با آنسامبل کانونیک (NVT) و ترموستات نوز–هوور (Nosé–Hoover thermostat) انجام شد. مدت زمان شبیه سازی در این مطالعه ۳ نانوثانیه در نظر گرفته شد که ۱ نانوثانیه برای زمان به تعادل رسیدن و ۲ نانوثانیه برای اندازه گیری گذاشته شد.

نتایج

در این پژوهش، رفتار ترشوندگی قطرات آب بر روی سطوح فسفرن آبی و سیاه با دقت مورد تحلیل قرار گرفته است. شکل (۱) نمایانگر وضعیت اولیه ی قطره آب بر روی دو نوع فسفرن است، در حالی که شکل (۲) تغییرات چشمگیر در آرایش مولکولی و گسترش قطره را در پایان فرآیند شبیه سازی نشان می دهد. برای درک عمیق تر مکانیسم های حاکم بر این پدیده، نقشه های کانتور چگالی با تمرکز بر ۵۰۰ مولکول آب در راستاهای آرمچیر و زیگزاگ ترسیم شده است.

بر پایه ی تحلیل نقشه های کانتور شکل (۲)، ناهمگونی آشکاری در توزیع فضایی مولکولهای آب در دو راستای مورد مطالعه مشاهده می شود. در راستای زیگزاگ، چگالی مولکولی آب به طور محسوسی افزایش یافته که این امر ناشی از کاهش سد انرژی فعالسازی در این جهت است. ساختار اتمی ویژهٔ فسفرن در جهت زیگزاگ با آرایشی کم مقاومت تر، امکان نفوذ و استقرار بهتر مولکول



شکل۱: پیکربندی اولیه قطره آب روی سطوح فسفرن (الف) آبی (ب) مشکی. رنگ‌های قرمز و سفید به ترتیب نشان‌دهنده اتم‌های اکسیژن و هیدروژن می باشند.

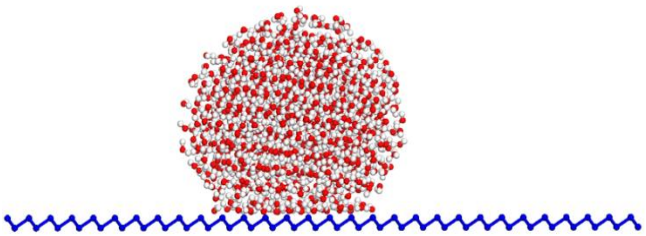
های آب را فراهم می سازد، حال آنکه در جهت آرمچیر، چیدمان اتم ها موانع انرژی بالاتری ایجاد کرده و موجب کاهش تراکم مولکولی می شود. این ناهمسانی ساختاری نه تنها بر توزیع چگالی، بلکه بر پویایی کلی قطره در مراحل مختلف شبیه سازی تأثیرگذار است.

از سوی دیگر، بررسی های کمی زاویهٔ تماس در جدول (۱) حاکی از تفاوت های اندک اما معنادار بین مقادیر اندازه گیری شده در دو راستای آرمچیر و زیگزاگ است. این اختلاف ناچیز، که در هر دو نوع فسفرن آبی و سیاه تکرار شده است، می تواند نشانی از تعامل پیچیده بین عوامل ساختاری و شیمیایی سطح باشد. به طور ویژه،

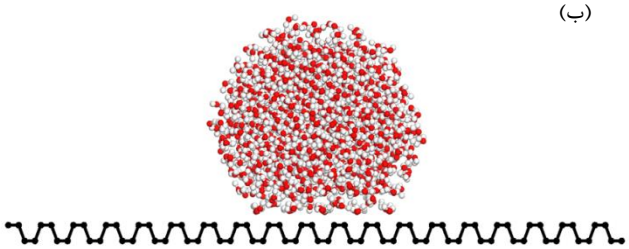
فسفرن سیاه با دارا بودن نقایص شبکه ها یا گروه های عاملی خاص، ممکن است واکنش پذیری متفاوتی نسبت به فسفرن آبی از خود نشان دهد. هرچند تفاوت در زاویه های تماس جزئی است، اما این ناهمسانی در مقیاس نانو میتواند تأثیرات شگرفی در کاربردهای عملی همچون طراحی سطوح ابرآبگریز یا سیستم های رهایش کنترل شده دارو داشته باشد.

نتایج به دست آمده از این مطالعه، گواهی بر اهمیت جهت گیری اتمی در خواص ترشوندگی مواد دوبعدی است.

(الف)



(ب)



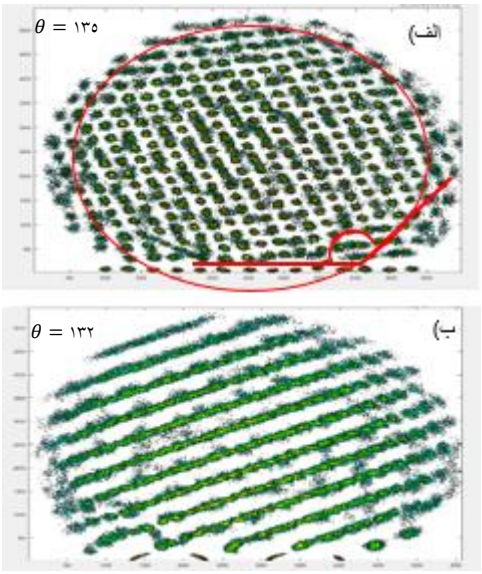
شکل۲:قطره آب در انتهای فرآیند ترشوندگی برای (الف) فسفرن آبی (ب) فسفرن سیاه.

نتایج حاصل نشان می دهد که فسفرن از گرافن آب گریزتر است که نتایج آن در جدول یک مقایسه شده است [۱].

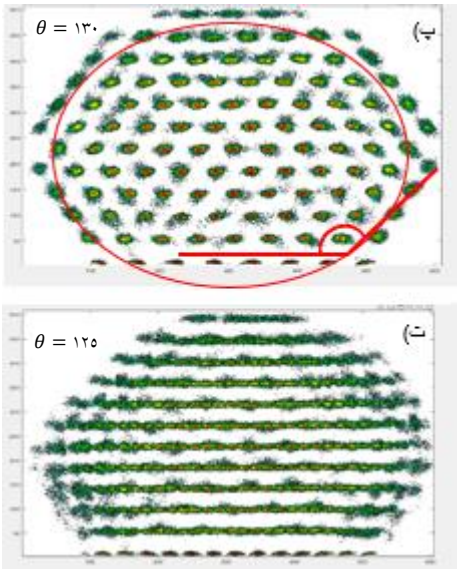
به نظر می رسد که مهندسی جهت دار سطوح فسفرن با بهره گیری از این ناهمسانی ذاتی، افق های نوینی را در ساخت ادوات میکروسیالی، حسگرهای زیستی و پوششهای هوشمند می گشاید.همچنین، همخوانی داده های شبیه سازی با مشاهدات تجربی پیشین، اعتبار روش شناسی به کار رفته در این پژوهش را تأیید میکند.

جدول۱ : زاویای تماس قطرات آب با تعداد مولکول ۵۰۰ روی آلوتروپ های فسفرن در امتداد جهت‌های زیگزاگ و آرمچیر است.

آلوتروپ فسفرن	زاویه تماس(برحسب درجه°) در جهت زیگزاگ	زاویه تماس(برحسب درجه°) در جهت آرمچیر
مشکی	۳±۱۳۲	۳±۱۳۵
آبی	۳±۱۲۵	۳±۱۳۰



شکل۳:نقشه کانتور قطره آب با ۵۰۰ مولکول آب بر روی امتداد سطح سیاه (الف) آرمچیر و (ب) زیگزاگ



شکل ٤: نقشه کانتور قطره آب با ۵۰۰ مولکول آب بر روی امتداد سطح آبی(الف) آرمچیر و (ب) زیگزاگ

نتیجه گیری

این مطالعه نشان می دهد که خواص ترشوندگی فسفرن تحت تأثیر جهت گیری بلوری (آرمچیر و زیگزاگ) و نوع سطح (آبی و سیاه) قرار دارد. تفاوت در سدهای انرژی و چیدمان اتمی بین دو راستا، منجر به تغییرات معنادار در توزیع چگالی مولکولی آب و رفتار پویای قطره میشود.

مرجع‌ها

[۱] Foroutan M, Bavani BM, Boudaghi A. Controlled hydrophilization of black phosphorene: A reactive molecular dynamics simulation approach. Physical Chemistry Chemical Physics. 2022;24(44):27532-47.

[۲] Kazem Manzoorolajdad SM, Hamzehpour H, Sarabadani J. Molecular dynamics study of electro-osmotic flow in a nanochannel with molybdenum disulfide walls. Microfluidics and Nanofluidics. 2024 Mar;28(3):13.

[۳] Kazem Manzoorolajdad SM, Hamzehpour H, Sarabadani J. Electro-osmotic flow in different phosphorus nanochannels. Physics of Fluids. 2023 Apr 1;35(4).

[4] Chen J, Hanson BJ, Pasquinelli MA. Molecular dynamics simulations for predicting surface wetting. AIMS Mater. Sci. 2014 Jun 13;1:121-31.

[5] Li T, Li J, Lin H, Duan Y, Xia Y, Jiang Y, Li H. Control of wettability transition and coalescence dynamics of droplets on the surface via mechanical vibration: A molecular simulation exploration. Applied Surface Science. 2019 Apr 15;473:393-400.

[6] Chen S, Cheng Y, Zhang G, Pei Q, Zhang YW. Anisotropic wetting characteristics of water droplets on phosphorene: roles of layer and defect engineering. The Journal of Physical Chemistry C. 2018 Mar 1;122(8):4622-7.

[7] Lu L, Liu Q, Zhu Y, Chan KH, Qin L, Li Y, Wang Q, Chan JF, Du L, Yu F, Ma C. Structure-based discovery of Middle East respiratory syndrome coronavirus fusion inhibitor. Nature communications. 2014 Jan 28;5(1):3067.

[8] Xiao H, Shi X, Hao F, Liao X, Zhang Y, Chen X. Development of a transferable reactive force field of P/H systems: application to the chemical and mechanical properties of phosphorene. The Journal of Physical Chemistry A. 2017 Aug 17;121(32):6135-49.

مدل سازی و بررسی اثر افزودن یال بر فاصله میانگین در شبکه‌های دولایه حمل‌ونقل زمینی و هوایی

انجم‌شعاع، همایون[۱]؛ میرزا، بهروز[۱]

[۱]دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۴۱۵۶۸۳۱۱۱

چکیده

در این مقاله، یک مدل شبکه‌ای دولایه برای سامانه‌ی حمل‌ونقل زمینی و هوایی ارائه شده است. در این مدل، شهرهایی که از طریق جاده به یکدیگر متصل هستند در یک لایه، و شهرهایی که دارای فرودگاه و ارتباط هوایی هستند در لایه‌ی دیگر قرار گرفته‌اند. ارتباط‌های جاده‌ای و هوایی به ترتیب با یال‌های درون هر زیرشبکه مدل شده‌اند و برای اتصال بین دو لایه نیز دو یال در نظر گرفته شده است که نشان‌دهنده‌ی ارتباط جاده‌ای شهرهای دارای فرودگاه با سایر شهرهای شبکه‌ی زمینی است. در ادامه، چندین استراتژی مختلف برای افزودن یال به شبکه مورد بررسی قرار گرفته است. این استراتژی‌ها شامل افزودن تصادفی یال در شبکه‌ی جاده‌ای، افزودن تصادفی یال در هر دو شبکه‌ی جاده‌ای و هوایی، افزودن فرودگاه به شهرهای بدون فرودگاه و ایجاد ارتباط هوایی جدید، و همچنین ایجاد یال‌های هدفمند بین دو لایه براساس بیشینه یا کمینه‌ی فاصله میان گره‌ها می‌باشند. با اجرای این استراتژی‌ها و افزودن تدریجی یال‌ها، تغییرات فاصله‌ی میانگین شبکه تحلیل و نمودارهای مربوطه ترسیم گردیده است. کلیه‌ی تحلیل‌ها و نتایج از طریق شبیه‌سازی عددی انجام شده و تأثیر نوع استراتژی بر بهبود کارایی و کاهش فاصله‌ی میانگین در شبکه‌های حمل‌ونقل دولایه به طور کامل بررسی شده است.

واژگان کلیدی: *شبکه‌های چند لایه، شبکه دو لایه، فاصله میانگین در شبکه، شبکه‌های حمل و نقل*

Modeling and Analysis of the Impact of Edge Addition on the Average Path Length in Two-Layer Land and Air Transportation Networks

Anjomshoa, Homayon[1]; Mirza, Behrouz[1]

[1] *Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran*

Abstract

In this paper, a two-layer network model is proposed to represent land and air transportation systems. Cities connected by roads are placed in one layer, while cities with airports and air connections form the second layer. Road and air connections are modeled through intra-layer edges, and two inter-layer edges are introduced to represent ground connections between cities with airports and the road network. Several strategies for adding edges to the network are investigated, including randomly adding edges within the road network, randomly adding edges within both the road and air networks, adding airports to cities without airports and establishing new air connections, and purposefully creating inter-layer edges based on the maximum and minimum shortest-path distances between nodes. By gradually adding edges according to these strategies, changes in the network's average path length are analyzed and corresponding diagrams are plotted. All analyses and results are conducted through numerical simulations, and the impact of different strategies on improving efficiency and reducing the average path length in two-layer transportation networks is thoroughly examined.

Keywords: *Multilayer Networks, Two-Layer Networks, Average Path Length in Networks, Transportation Network*

مقدمه

در دهه‌های اخیر، سیستم‌های پیچیده به طور فزاینده‌ای در زمینه‌های مختلفی چون اقتصاد، زیست‌شناسی و حمل‌ونقل مورد توجه قرار گرفته‌اند. این سیستم‌ها به دلیل ساختار پیچیده و تعاملات غیرخطی میان اجزای مختلفشان، در تحلیل‌های علمی و مهندسی جایگاه ویژه‌ای پیدا کرده‌اند. در اقتصاد، شبکه‌های اقتصادی به عنوان مدل‌هایی برای شبیه‌سازی رفتار بازارهای مالی و تجاری شناخته می‌شوند [۱]. در زیست‌شناسی، شبکه‌های زیستی مانند شبکه‌های تعاملات پروتئینی و شبکه‌های عصبی به عنوان مدل‌هایی برای درک ساختار و عملکرد سیستم‌های زیستی پیچیده مطرح هستند [۲]. همچنین، در حمل‌ونقل، تحلیل شبکه‌های حمل‌ونقل به‌عنوان ابزاری برای بهینه‌سازی مسیرها و جریان‌های ترافیکی در سطح شهرها و بین‌المللی کاربرد دارد [۳]. در این میان، فیزیک‌دانان با کمک علم شبکه‌ها به تحلیل این سیستم‌های پیچیده پرداخته و تلاش کرده‌اند تا رفتارهای جمعی این سیستم‌ها را درک و مدل‌سازی کنند. استفاده از مفاهیم و ابزارهای نظریه شبکه‌ها برای شبیه‌سازی و تحلیل سیستم‌های پیچیده در حوزه‌های مختلف از جمله فیزیک اجتماعی، دینامیک سیستم‌های پیچیده و سیستم‌های پیچیده زیستی به یک رویکرد رایج تبدیل شده است [۴و۵].

این رویکرد به ما این امکان را می‌دهد که با استفاده از ساختارهای شبکه‌ای، اثرات تغییرات مختلف بر رفتار کلی سیستم را پیش‌بینی کنیم. شبکه‌ها به طور خاص مزایای زیادی دارند. یکی از مزایای اصلی استفاده از شبکه‌ها این است که می‌توانند روابط پیچیده بین اجزای سیستم را به روشی ساده و مؤثر مدل‌سازی کنند. علاوه بر این، شبکه‌ها به تحلیل رفتار دینامیکی سیستم‌های پیچیده، از جمله روندهای انتشار اطلاعات، جریان مواد یا انرژی، و تعاملات اجتماعی کمک می‌کنند [۳]. با استفاده از شبکه‌ها، می‌توانیم فهم بهتری از نحوه ارتباط و تعامل اجزای سیستم به‌دست آوریم و از این اطلاعات برای بهینه‌سازی عملکرد سیستم استفاده کنیم. با توجه به پیچیدگی‌های موجود در سیستم‌های واقعی، مفهوم شبکه‌های چندلایه به ویژه در تحلیل سیستم‌های پیچیده اهمیت پیدا کرده است. این نوع شبکه‌ها، که چندین نوع ارتباط مختلف را در یک مدل شبکه‌ای ترکیب می‌کنند، به تحلیل‌های چندبعدی کمک می‌کنند. در شبکه‌های چندلایه، می‌توان روابط مختلف بین اجزای سیستم را که در لایه‌های مختلف قرار دارند، بررسی کرد و تأثیرات متقابل این لایه‌ها را بر یکدیگر تحلیل نمود [۶]. این ویژگی‌ها شبکه‌های چندلایه را به ابزاری کارآمد برای مدل‌سازی و تحلیل سیستم‌های پیچیده مانند سیستم‌های حمل‌ونقل تبدیل کرده است.

در این مقاله، ما با استفاده از یک مدل شبکه دولایه سامانه حمل‌ونقل زمینی و هوایی را مدل‌سازی و تحلیل می‌کنیم. این مدل با در نظر گرفتن دو لایه جداگانه برای حمل‌ونقل جاده‌ای و هوایی، امکان تحلیل تعاملات میان این دو لایه و اثرات افزودن یال‌ها در کاهش فاصله میانگین شبکه را فراهم می‌آورد. هدف این است که با شبیه‌سازی عددی، تغییرات فاصله میانگین در این شبکه‌ها را بررسی و تأثیر استراتژی‌های مختلف افزودن یال بر کارایی شبکه‌های حمل‌ونقل را تحلیل کنیم.

شبکه دو لایه

در بسیاری از سامانه‌های واقعی، روابط میان اجزا تنها با یک نوع ارتباط قابل توصیف نیستند، بلکه نیازمند مدل‌هایی هستند که بتوانند چندین نوع تعامل متفاوت را به طور همزمان در نظر بگیرند. شبکه‌های چندلایه، و به طور خاص شبکه‌های دولایه چارچوبی

جامع برای مدل‌سازی چنین سامانه‌هایی ارائه می‌دهند [۷و۶]. در یک شبکه‌ی دولایه، گره‌ها ممکن است در هر لایه حضور داشته باشند یا تنها در یکی از لایه‌ها ظاهر شوند. هر لایه شامل مجموعه‌ای از یال‌های درون‌لایه‌ای است که گره‌های همان لایه را به هم متصل می‌کند. علاوه بر این، یال‌های بین‌لایه‌ای، ارتباط میان گره‌های لایه‌های مختلف را برقرار می‌کنند. این ساختار امکان مدل‌سازی سیستم‌هایی را فراهم می‌کند که در آن‌ها چند نوع تعامل با دینامیک‌ها و ساختارهای متفاوت به طور همزمان وجود دارد.

یکی از ویژگی‌های کلیدی شبکه‌های دولایه، وابستگی متقابل میان لایه‌ها است. تغییر در ساختار یا دینامیک یک لایه می‌تواند اثرات گسترده‌ای بر لایه‌ی دیگر داشته باشد. این وابستگی متقابل می‌تواند تاثیرهای گسترده‌ای بر ساختار کلی شبکه داشته باشد. به همین دلیل، تحلیل رفتار شبکه‌های دولایه در برابر اختلالات و تغییرات، اهمیت ویژه‌ای دارد.

در تحلیل شبکه‌های دولایه، کمیت‌های نظیر فاصله‌ی میانگین، درجه‌ی مرکزیت، توزیع درجه و قابلیت اتصال به گونه‌ای تعمیم یافته‌اند که بتوانند تأثیر یال‌های بین‌لایه‌ای را نیز در نظر بگیرند. به طور خاص، افزودن یال‌های بین لایه‌ها می‌تواند نقش کلیدی در بهبود دسترسی‌پذیری و کاهش فاصله‌ی میانگین کل سامانه داشته باشد.

در این پژوهش، ما از یک مدل شبکه‌ی دولایه برای شبیه‌سازی سامانه‌ی حمل‌ونقل استفاده کرده‌ایم که در آن، یک لایه نمایانگر شبکه‌ی جاده‌ای و لایه‌ی دیگر معرف شبکه‌ی هوایی است. یال‌های بین‌لایه‌ای، اتصال بین این دو نوع حمل و نقل را مدل می‌کنند. با بررسی استراتژی‌های مختلف برای افزودن یال، تغییرات در شاخص‌های ساختاری شبکه، به ویژه فاصله‌ی میانگین، تحلیل شده است.

فاصله میانگین در شبکه‌ها

فاصله‌ی میانگین یکی از کمیت‌های بنیادی و مهم در تحلیل شبکه‌هاست که میانگین طول کوتاه‌ترین مسیرها میان تمام جفت‌های گره را اندازه‌گیری می‌کند. برای شبکه‌ای با N راس، این کمیت به صورت زیر تعریف می‌شود [۶]:

$$L = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i \neq j} d(i,j) \qquad (۱)$$

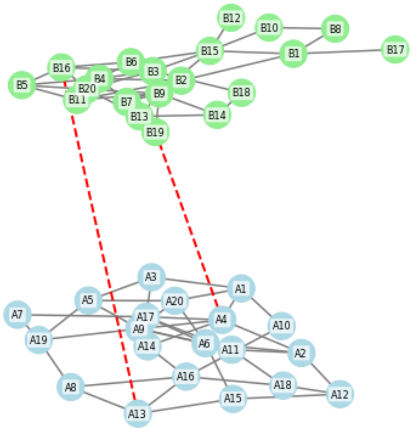
در رابطه (۱) عبارت $d(i,j)$ طول کوتاه‌ترین مسیر میان گره‌های i و j است [۶].

فاصله‌ی میانگین یکی از شاخص‌های کلیدی در تحلیل شبکه‌هاست که میزان کارایی کلی شبکه را در انتقال اطلاعات یا جریان منابع نشان می‌دهد. مقدار کمتر این شاخص بیانگر افزایش سرعت و بهبود کارایی ارتباطات درون شبکه است. در شبکه‌های چندلایه، محاسبه‌ی فاصله‌ی میانگین به گونه‌ای انجام می‌شود که مسیرهای عبوری از یال‌های بین‌لایه‌ای نیز در نظر گرفته شوند؛ این یال‌های بین‌لایه‌ای نقش مهمی در کاهش فاصله‌ی کلی شبکه و ارتقای دسترس‌پذیری سامانه ایفا می‌کنند.

مدل سازی

در این مطالعه، یک مدل شبکه‌ی دولایه برای سامانه‌ی حمل‌ونقل زمینی و هوایی در نظر گرفته شده است که شامل دو زیرشبکه است. هر زیرشبکه شامل ۲۰ گره و ۳۰ یال است که به‌طور تصادفی به هم متصل شده‌اند. شبکه‌ی اول (A) نمایانگر شهرهایی است که از طریق جاده به یکدیگر متصل هستند و شبکه‌ی دوم (B) شامل شهرهایی است که دارای فرودگاه و از طریق ارتباطات هوایی به هم متصل می‌شوند. علاوه بر این، دو گره مشترک بین دو شبکه وجود دارد که

نشان‌دهنده‌ی شهرهایی هستند که هم دسترسی جاده‌ای دارند و هم فرودگاه، و از طریق یال‌هایی به شبکه‌ی جاده‌ای متصل هستند.



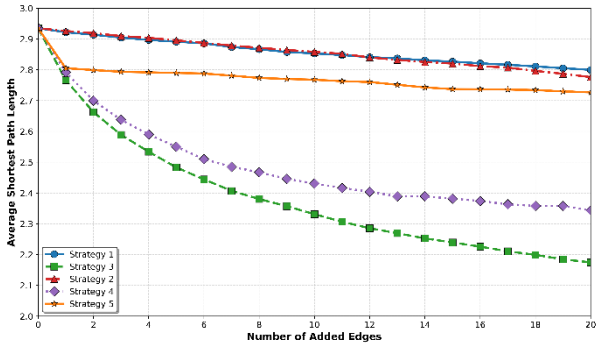
شکل ۱: شبکه دولایه توصیف کننده مدل، راس‌های آبی نشان دهنده شهرهایی هستند که از طریق جاده به هم متصل شده‌اند و راس‌های سبز نشان دهنده شهرهایی هستند که از طریق هوایی به هم متصل شده اند.

این مدل دولایه با ترکیب شبکه‌های جاده‌ای و هوایی امکان تحلیل و بررسی تأثیر افزودن یال‌های جدید بر فاصله‌ی میانگین شبکه را فراهم می‌آورد.

استراتژی‌های افزودن یال

ما در این مقاله پنج استراتژی مختلف برای افزودن یال‌ها به شبکه در نظر گرفته‌ایم. در استراتژی اول، یال‌ها به‌طور تصادفی بین راس‌ها شبکه جاده‌ای اضافه می‌شوند، که در شبکه هوایی نیز معادل آن قابل اجرا است. در استراتژی دوم، یک زیرشبکه به‌طور تصادفی انتخاب شده و سپس یک یال به آن اضافه می‌شود و دوباره به طور تصادفی یک زیر شبکه انتخاب می‌شود و به آن یال اضافه می‌شود، این کار را تا اضافه شدن تمام یال‌ها ادامه میدهم. استراتژی سوم شامل اتصال یک راس از شبکه جاده‌ای به یک راس از شبکه هوایی است، که معادل اضافه کردن فرودگاه به شهرهایی است که فقط ارتباط جاده‌ای دارند. در استراتژی چهارم، یک یال از شبکه هوایی به‌طور تصادفی حذف شده و یک یال جدید بین شبکه‌های جاده‌ای و هوایی اضافه می‌شود، که معادل اضافه کردن فرودگاه به شهرهای جاده‌ای با کاهش مسیرهای هوایی است در زیر شبکه اول است. در نهایت، استراتژی پنجم شامل انتخاب راسی با بیشترین فاصله در شبکه جاده‌ای و اتصال آن به راسی با کمترین فاصله در شبکه هوایی است تا دسترسی بین لایه‌ها بهبود یابد.

برای هر یک از استراتژی‌ها، فرآیند افزودن یال به شبکه ۳۰ مرتبه تکرار می‌شود تا اثرات تصادفی کاهش یابد و میانگین نتایج محاسبه گردد. در هر تکرار، تعداد یال‌های اضافه شده به شبکه به‌طور تصادفی انتخاب می‌شود و پس از آن فاصله‌ی میانگین شبکه محاسبه می‌گردد. سپس، میانگین فاصله‌ها از تمام تکرارها برای هر استراتژی محاسبه و نمودار فاصله‌ی میانگین برحسب تعداد یال‌های اضافه شده ترسیم می‌شود.



شکل ۲: نمودار فاصله میانگین شبکه برای هر چنج استراتژی برحسب یال های اضافه شده

با توجه به شکل ۲، بین استراتژی اول و دوم تفاوت قابل توجهی مشاهده نمی‌شود، به‌طوری‌که تأثیر افزودن یال‌ها به‌طور تصادفی در هر یک از شبکه‌ها تقریباً مشابه است. از سوی دیگر، استراتژی‌های سوم و چهارم بیشترین کاهش در فاصله‌ی میانگین را نشان دادند؛ البته باید توجه داشت که در استراتژی چهارم، هم یال اضافه می‌شود و هم یال حذف می‌گردد، بنابراین مقدار کاهش فاصله در این استراتژی کمتر از استراتژی سوم است که تنها یال‌های جدید افزوده

می‌شوند. در نهایت، استراتژی پنجم نتایج جالبی را به‌دنبال داشت، به‌طوری‌که با افزودن چند یال اول، کاهش چشمگیری در فاصله‌ی میانگین مشاهده شد و در ادامه، این مقدار تقریباً ثابت ماند.

این فرآیند به ما کمک می‌کند تا تأثیر افزوده شدن یال‌ها بر کارایی شبکه و تغییرات فاصله‌های میانگین را تحلیل کرده و مقایسه‌ای جامع بین استراتژی‌ها انجام دهیم.

نتیجه گیری

در این مقاله، یک شبکه دو لایه برای مدل‌سازی سیستم حمل‌ونقل جاده‌ای و هوایی ارائه شد. پنج استراتژی مختلف برای افزودن یال به این شبکه‌ها پیشنهاد گردید که شامل افزودن یال به‌طور تصادفی در شبکه‌های جاده‌ای و هوایی، انتخاب تصادفی زیرشبکه‌ها برای افزودن یال، اتصال گره‌ها بین دو شبکه، حذف یال‌ها از شبکه هوایی و در نهایت انتخاب راس‌های با بیشترین و کمترین فاصله بود. نتایج نشان داد که استراتژی‌های اول و دوم تأثیر مشابهی بر فاصله میانگین دارند، در حالی که استراتژی‌های سوم و چهارم کاهش بیشتری در فاصله میانگین نشان دادند، البته استراتژی چهارم به دلیل اضافه و حذف یال‌ها این کاهش کمتر از استراتژی سوم بود. استراتژی پنجم نیز با افزودن چند یال اول کاهش زیادی در فاصله میانگین ایجاد کرد، اما در ادامه مقدار فاصله تقریباً ثابت ماند. بنابراین، با در اختیار داشتن چنین مدل‌هایی، در مدیریت سیستم‌های حمل‌ونقل می‌توان تصمیمات دقیق‌تر و به‌صرفه‌تری اتخاذ کرد که به بهینه‌سازی کارایی و کاهش فاصله‌ها در شبکه‌های جاده‌ای و هوایی کمک می‌کند.

مرجع‌ها

[۱] Haldane, A.G. and May, R.M., 2011. Systemic risk in banking ecosystems. *Nature*, *469*(7330), pp.351-355.

[۲] Barabási, A.L., 2007. Network medicine—from obesity to the "diseasome". *New England Journal of Medicine*, *357*(4), pp.404-407.

[۳] Newman, M.E., 2010. Networks: an introduction.

[٤] Watts, D.J. and Strogatz, S.H., 1998. Collective dynamics of 'small-world'networks. *nature*, *393*(6684), pp.440-442.

[٥] Albert, R. and Barabási, A.L., 2002. Statistical mechanics of complex networks. *Reviews of modern physics*, *74*(1), p.47.

[٦] Bianconi, G., 2018. *Multilayer networks: structure and function*. Oxford university press.

[۷] Boccaletti, S., Bianconi, G., Criado, R., Del Genio, C.I., Gómez-Gardenes, J., Romance, M., Sendina-Nadal, I., Wang, Z. and Zanin, M., 2014. The structure and dynamics of multilayer networks. *Physics reports*, *544*(1), pp.1-122.

استفاده از فرایند مارکوف برای بررسی تأثیر گروه‌های زن و مرد در جذب مشتریان جدید

راستکار، بهار[1,2]؛ انجم‌شعاع، همایون[1]؛ میرزا، بهروز[1]

[1]دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۴۱۵۶-۸۳۱۱۱

[2]اصفهان، بانک رفاه کارگران ۸۱۵۷۷۱۴۴۵۶

چکیده

با توجه به آمار سالانه، درصد جذب مشتریان زن در مقایسه با مشتریان مرد در بانک کمتر است. این در حالی است که تعداد مشتریان زن فعال در بازار، به ویژه در حوزه‌هایی مانند آنلاین شاپ‌ها، به طور روزافزونی در حال افزایش است. یکی از دلایل احتمالی این عدم تعادل می‌تواند این باشد که بانک‌ها و مؤسسات خدماتی به طور سنتی خدمات خود را بیشتر بر اساس مشاغلی که اکثراً توسط مردان اداره می‌شود، طراحی کرده‌اند. ما در این مقاله، با استفاده از فرایند مارکوف جاذب، مدلی پیشنهاد میدهیم که تأثیر توجه به مشاغلی که زنان بیشتر در آن‌ها فعال هستند را در جذب مشتریان جدید بررسی می‌کند. نتایج مدل نشان می‌دهد که توجه به این مشاغل می‌تواند تأثیر نمایی در جذب مشتریان زن داشته باشد. علاوه بر این، مدل نشان می‌دهد که توجه به این دسته از مشاغل، در جذب مشتریان مرد نیز می‌تواند تأثیرگذار باشد.

واژگان کلیدی: *فرایند مارکوف، فرایند مارکوف جاذب، مکانیک*

Using the Markov Process to Examine the Impact of Male and Female Groups on Attracting New Customers

Rastkar, Bahar[1,2]; Anjomshoa, Homayon[1]; Mirza, Behrouz[1]

[1]Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran

[2] Isfahan, Refah Bank 8157714456

Abstract

According to annual statistics, the percentage of female customers attracted to banks is lower compared to male customers. However, the number of active female customers in the market, especially in areas such as online shops, is increasing steadily. One possible reason for this imbalance could be that banks and financial institutions traditionally design their services based on industries predominantly run by men. In this paper, using a Markov process model, we propose a model that examines the impact of focusing on industries where women are more actively involved in attracting new customers. The results of the model indicate that paying attention to these industries can have a significant impact on attracting female customers. Furthermore, the model shows that focusing on these types of industries can also influence the attraction of male customers.

Keywords*: Markov process, Absorbing Markov process, Statistical Mechanics*

مقدمه

در بسیاری از سیستم‌های پیچیده‌ای که در دنیای اطراف ما وجود دارند، به علت تعداد زیاد پارامترهای مؤثر بر تعیین وضعیت سیستم، تحلیل و بررسی آن‌ها با استفاده از روش‌های متداول و سنتی به طور معمول غیرممکن یا بسیار دشوار است. به همین دلیل، برای مطالعه و مدل‌سازی این سیستم‌ها، از روش‌های پیشرفته‌ای استفاده می‌شود که یکی از کارآمدترین آن‌ها، استفاده از فرایندهای مارکوف است. [۱،۲]. فرایندهای مارکوف در تحلیل سیستم‌های پیچیده به ویژه در فیزیک، نقش برجسته‌ای ایفا می‌کنند. یکی از مهم‌ترین حوزه‌های کاربرد این فرایندها، مطالعه و مدل‌سازی سیستم‌های اقتصادی است. این سیستم‌ها با توجه به پیچیدگی‌های درونی و تعاملات متعدد بین اجزای مختلف خود، به یکی از جذاب‌ترین و چالش‌برانگیزترین حوزه‌ها در پیوند علم فیزیک آماری، سیستم‌های پیچیده و اقتصاد تبدیل شده‌اند [۳]. به عنوان مثال، یکی از مسائل برجسته در علم اقتصاد که با استفاده از فرایندهای مارکوف مدل‌سازی می‌شود، "مدل اقتصادی لئونتیف" است [٤]. در سیستم‌های اقتصادی، به ویژه در بانک‌ها، به علت بالا بودن تعداد بخش‌ها و نهادهای مرتبط با هم (از جمله بانک مرکزی، دولت، روابط بین‌الملل، سایر بانک‌ها، مردم و غیره)، تعیین رفتار سیستم و انتخاب استراتژی‌های بهینه برای آن، کار بسیار دشواری است. این پیچیدگی‌ها در تحلیل رفتار سیستم‌های اقتصادی باعث می‌شود که استفاده از روش‌هایی مانند فرایند مارکوف برای مدلسازی و پیش‌بینی رفتارهای مختلف در این سیستم‌ها اهمیت ویژه‌ای پیدا کند. از طرفی با توجه به آمار سالانه، درصد جذب مشتریان زن در مقایسه با مشتریان مرد در بانک‌ها کمتر است. این در حالی است که تعداد مشتریان زن فعال در بازار، به ویژه در حوزه‌هایی مانند آنلاین شاپ‌ها، به طور روزافزونی در حال افزایش است. در این مقاله، با استفاده از فرایند مارکوف جاذب، مدلی پیشنهاد می‌شود که تأثیر توجه به مشاغلی که زنان بیشتر در آن‌ها فعال هستند را در جذب مشتریان جدید بررسی می‌کند.

فرایند مارکوف

به فرایندهای تصادفی که بتوان به طور احتمالاتی حالت آینده آن را از طریق مقادیر فعلی آن محاسبه کرد، فرایند مارکوف می‌گویند. این فرایند کاربرد بسیار زیادی در توصیف سیستم‌های دارد که رابطه بین حالت‌های آن‌ها با احتمال توصیف می‌شود، مانند مکانیک آماری، نظریه اطلاعات، سیستم‌های پیچیده و غیره.

هنگامی که یک سیستم را با کمک فرایند مارکوف مدل سازی می‌کنند به مجموعه حالت‌های آن سیستم، فضای حالت گفته می‌شود [۵].

$$S = \{s_1, s_2, \dots s_r\} \qquad (۱)$$

مجموعه S نشان دهنده فضای حالت یک فرایند مارکوف با r حالت است. احتمال گذار از حالت s_i به s_j با p_{ij} نمایش داده می‌شود. از آنجای که فرایند مارکوف یک فرایند تصادفی است باید شرط زیر برای احتمال‌های مربوط به گذار از حالت‌های مختلف فضای حالت به یک دیگر برقرار باشد [۵].

$$\sum_{j=1}^{r} p_{ij} = 1 \qquad (۲)$$

ماتریس گذرا برای یک فرایند مارکوف با فضای حالتی شامل r حالت به صورت زیر است [۵].

$$P = \begin{array}{c} \\ s_1 \\ s_2 \\ \vdots \\ s_r \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} s_1 & s_2 & \cdots & s_r \end{array} \\ \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} & \cdots & P_{1r} \\ P_{21} & P_{22} & \cdots & P_{2r} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{r1} & P_{r2} & \cdots & P_{rr} \end{pmatrix} \end{array} \qquad (۳)$$

هر سطر از ماتریس گذار نشان دهنده احتمال گذار از یک حالت خاص در فضای حالت به سایر حالت است. بنابراین مجموع احتمال

هر سطر باید یک باشد. در فرایند مارکوف برای مشخص کردن حالت سیستم از بردار حالت استفاده می‌کنند [۵].

$$U = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_r \end{pmatrix} \quad (٤)$$

بردار حالت احتمال حضور سیستم در هر حالت از فضای حالت را به ما می‌دهد. برای پیدا کردن حالت سیستم در زمان‌های بعد باید ماتریس گذار را بر روی بردار حالت اثر دهیم. با هر بار اثر دادن ماتریس گذار بر روی بردار حالت یک گام زمانی گفته می‌شود. برای گام زمانی بعدی از رابطه زیر استفاده می‌شود [۵].

$$U^{(n)} = P^n U \quad (٥)$$

فرایندهای مارکوف بر اساس ویژگی‌های مختلفی که دارند به دسته‌های مجزای تقسیم می‌شوند. ما در این مقاله از فرایند مارکوف جاذب استفاده می‌کنیم.

فرایند مارکوف جاذب

در فضای حالت فرایند مارکوف ممکن است حالتی وجود داشته باشد که احتمال گذار آن به سایر حالت‌های موجود در فضای حالت فرایند مارکوف صفر باشد، احتمال باقی ماندن این حالت در خودش برابر با یک است. بنابراین حالت جاذب: حالت s_i جاذب است اگر $p_{ii} = 1$ باشد.

برای مطالعه راحتتر فرایند مارکوف جاذب، ماتریس گذار مربوط به این فرایند را به شکل کانونیک می‌نویسند. برای نوشتن فرم کانونیک ماتریس گذار فرایند مارکوف جذاب باید سطرهای مربوط به حالت‌های جاذب موجود در فضای حالت را به انتهای ماتریس گذار ببریم [۵].

$$p = \begin{pmatrix} Q_{r\times r} & R_{r\times t} \\ 0_{t\times r} & I_{t\times t} \end{pmatrix} \quad (٦)$$

در رابطه (٦) شکل کانونیک ماتریس گذار t تعداد حالت‌های گذرا و r تعداد حالت‌های جاذب است.

به مدت زمانی که طول می‌کشد تا با شروع از یک حالت گذرا به یک حالت جاذب برسد را زمان جذب گفته می‌شود. برای محاسبه مدت زمان جذب در فرایند مارکوف جاذب یک ماتریس اساسی به صورت زیر تعریف می‌شود، که در آن Q از فرم کانونیک (٦) ماتریس گذار بدست می‌آید [۵].

$$N = (I - Q)^{-1} \quad (٧)$$

با کمک ماتریس اساسی می‌توان تعداد گام زمانی لازم برای رسیدن از هر حالت گذرا به هر حالت جاذب را محاسبه کنیم. برای این کار یک ویژه حالت به صورت زیر تعریف می‌کنیم.

$$C = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \quad (٨)$$

و زمان جذب از رابطه زیر به دست می‌آید [۵].

$$T = NC = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (٩)$$

هر یک از عناصر ماتریس T بیان کنند مدت زمان رسیدن از هر حالت گذرا از فضای حالت به هر حالت جاذب در فضای حالت است.

مدل سازی

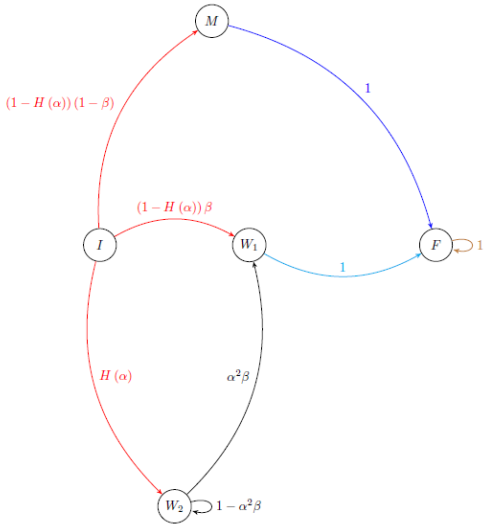
در این بخش، ما مدلی مبتنی بر فرایند مارکوف جاذب برای بررسی جذب مشتریان جدید توسط بانک ارائه میدهیم. در این مدل، کل مشتریانی که بانک می‌تواند به عنوان مشتری جدید جذب کند با نماد I نمایش داده‌ایم. از میان این مشتریان، تعداد مشتریان زنی که توسط بانک جذب می‌شوند با نماد $W1$ و تعداد مشتریان زنی که جذب بانک نمی‌شوند با نماد $W2$ مشخص کرده ایم. همچنین در این مدل، فرض کرده‌ایم که تمامی مشتریان مرد جذب بانک می‌شوند و این گروه با نماد M نمایش داده می‌شود. در نهایت، حالتی که در آن مشتریان (اعم از مرد یا زن) جذب بانک شده‌اند، به عنوان حالت جاذب در فرایند مارکوف در نظر گرفتیم و با نماد F نشان داده‌ایم.

با این مدل، می‌توان یک دیدکلی نسبت به دسته بندی مشتری‌ها و تاثیر آن بر رویی روند جذب مشتریان جدید پیدا کرد.

در این مدل فضای حالت‌ها به صورت زیر است.

$$S = \{I, W1, W2, M, F\} \qquad (۱۰)$$

که نمودار فرایند مارکف مدل ما به صورت زیر است.



شکل ۱: نمودار فرایند مارکوف جاذب ارائه شده.

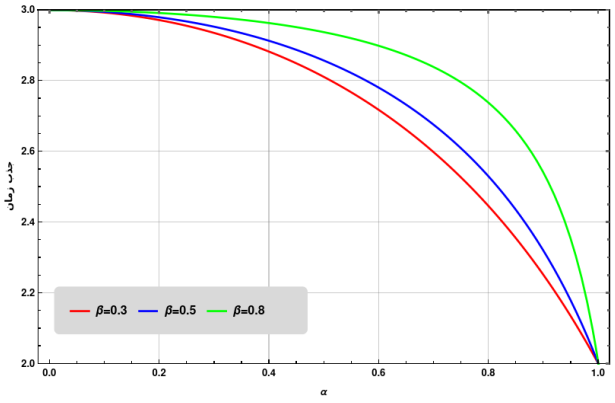
همانگونه که در شکل ۱ مشخص است حالت F یک حالت جاذب است. و عناصر ماتریس گذار به صورت زیر نوشته می‌شوند.

$$\begin{aligned} P_{IW2} &= H(\alpha) \\ P_{IW1} &= \beta\big(1 - H(\alpha)\big) \\ P_{IM} &= \big(1 - H(\alpha)\big)(1 - \beta) \\ P_{W2W1} &= \alpha^2\beta \\ P_{W2W2} &= 1 - \alpha^2\beta \\ P_{FF} &= P_{MF} = P_{W1F} = 1 \end{aligned} \qquad (۱۱)$$

سایر عناصر ماتریس گذار صفر هستند، ضریب β نشان دهنده نسبت زن‌ها به مردها است. در اینجا با انتخاب مناسب برای $H(\alpha)$ می‌توان حالت های متفاوتی را مدل کرد، درصورت در دسترس بودن آمار می‌توان انتخابی نزدیک به واقعیت داشت. ما در این جا یک تابع کلی برای $H(\alpha)$ درنظر می‌گیریم که برخی ویژگی های کلی مد نظر ما را داشته باشد، مثلا با افزایش α مقدار آن کاهش پیدا کند که این می‌توان همان حالتی را بیان کند که بخشی از مشتری‌های زن کنار گذاشته شوند.

$$H(\alpha) = 1 - \alpha^2 \qquad (۱۲)$$

حال با کمک رابطه (۶)، (۷) و (۱۰) عناصر ماتریس اساسی این فرایند را به دست می‌آوریم و با کمک رابطه (۹) و (۱۲) زمان جذب را رسم می‌کنیم. همچنین برای رسم زمان جذب مقادیر متفاوت β را در نظر می‌گیریم که نشان دهنده حالت‌های متفاوت نسبت زن به مرد است.



شکل ۲: زمان جذب برای حالت $\beta = 0.3$، $\beta = 0.5$ و $\beta = 0.8$

با توجه به شکل ۲ به دست آمده، مشاهده می‌شود که افزایش ضریب α، که نمایانگر میزان توجه بانک به جذب مشتریان زن فعال در کسب و کارهای مختلف است، منجر به کاهش قابل‌توجه در زمان جذب مشتریان جدید می‌شود. به عبارت دیگر، هرچه توجه به این گروه از مشتریان افزایش یابد، فرایند جذب مشتری تسریع می‌شود.

از سوی دیگر، نکته قابل توجه این است که در برخی مقادیر خاص از α، نسبت جذب مشتریان زن به مرد که با نماد β نمایش داده شده است، تغییر محسوسی مشاهده می‌شود. این تغییر می‌تواند در بهینه‌سازی استراتژی جذب مشتریان، اهمیت ویژه‌ای داشته باشد. به طور خاص، در صورت در دسترس بودن داده‌های واقعی و دقیق‌تر، می‌توان از این ویژگی مدل برای تنظیم بهینه سیاست‌های جذب بانک‌ها استفاده کرد و کارایی مدل را در شرایط واقعی بهبود بخشید.

نتیجه گیری

ما در این مقاله، فرایند جذب مشتریان جدید توسط بانک را با استفاده از یک مدل مبتنی بر فرایند مارکوف جاذب مورد بررسی قرار دادیم. در مدل ارائه‌شده، مشتریان بالقوه به گروه‌های مختلفی شامل مشتریان زن جذب‌شده، مشتریان زن جذب‌نشده و مشتریان مرد تقسیم شدند و جذب نهایی به عنوان حالت جاذب در نظر گرفته شد.

بر اساس نتایج مدل و تحلیل نمودارها، افزایش ضریب α که میزان توجه به کسب و کارهای با فعالیت بیشتر زنان را نشان می‌دهد، باعث کاهش قابل‌توجه زمان جذب مشتریان جدید می‌شود، به عبارت دیگر، هرچه توجه به این گروه از مشتریان افزایش یابد، فرایند جذب مشتری تسریع می‌شود. همچنین مشخص شد که در برخی مقادیر خاص از α، نسبت جذب مشتریان زن به مرد (β) تغییر محسوسی پیدا می‌کند که این موضوع می‌تواند در بهینه‌سازی سیاست‌های جذب بانک‌ها مورد استفاده قرار گیرد.

در نهایت، باید توجه داشت که این مدل یک چارچوب نظری اولیه است و برای دستیابی به نتایج دقیق‌تر، نیاز به استفاده از داده‌های واقعی و بهینه‌سازی مدل وجود دارد.

مرجع‌ها

[۱] Kostoska, Olivera, Viktor Stojkoski, and Ljupco Kocarev. "On the structure of the world economy: An absorbing Markov chain approach." *Entropy* 22, no. 4 (2020): 482.

[۲] Onwukwe, C.E. and Samson, T.K., 2014. on predicting the long run behaviour of Nigerian Bank stocks prices: a Markov Chain approach. *American journal of applied mathematics and statistics*, *2*(4), pp.212-215.

[۳] Vasconcelos, Vítor V., Fernando P. Santos, Francisco C. Santos, and Jorge M. Pacheco. "Stochastic dynamics through hierarchically embedded Markov chains." *Physical Review Letters* 118, no. 5 (2017): 058301.

[۴] Leontief, W. "Input-output economics." (1986).

[۵] Grinstead CM, Snell JL. Introduction to probability. American Mathematical Soc.; 2012 Oct 30.

وابستگی ولتاژ های ورودی بر دینامیک جمعی نوریستور های گرمایی

روستا، ماندانا [۱]؛ محسنی، مجید [۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی تهران، تهران

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی تهران، تهران

چکیده

سیستم های نورومورفیک با الهام از کارایی محاسباتی مغز دستگاه هایی مقیاس پذیر و کم مصرف تولید می کنند که دسته ای از ان ها نوریستورهای حرارتی هستند .این دستگاه ها از طریق تعاملات حرارتی و گذار فلز-عایق در وانادیوم دی اکساید نوسان های اسپایکی ایجاد می کنند که این عمل شبیه ساز رفتار نورون های زیستی است. این پژوهش نشان می دهد که رفتار جمعی این شبکه های نورون مصنوعی مجموعه ی متنوع ای از فاز ها را شامل می شود که با تغییر دو پارامتر مهم قدرت برهمکنش حرارتی بین نوریستور های مجاور و ولتاژ اعمال شده بر شبکه قابل کنترل هستند

واژگان کلیدی: *واژه‌ی کلی نوریستور های حرارتی، دینامیک جمعی،کوپلینگ حرارتی، وانادیوم دی اکساید*

The Effect of Thermal Coupling on Collective Dynamic in Neuromorphic Network

Roosta, Mandana [1]; Mohseni, Majid [2]

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

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

Abstract

Neuromorphic systems inspired by the computational efficiency of the brain produce scalable and low-power devices, a category of which are thermal neuristors. These devices generate spiking oscillations through thermal interactions and the metal-insulator transition in vanadium dioxide (VO_2), an action that simulates the behavior of biological neurons. This research demonstrates that the collective dynamical behavior of these artificial neuron networks encompasses a diverse set of phases that are controllable by adjusting two important parameters: the strength of thermal interaction between neighboring neuristors and the voltage applied to the network

Keywords*: Thermal neuristor, Collective dynamic, Thermal coupling, VO2*

مقدمه

کامپیوترهای نورومورفیک به عنوان کامپیوترهایی غیر از ساختار فون نویمان تعریف می‌شوند که ساختار و عملکردشان از مغز الهام گرفته و از نورون‌ها و سیناپس‌ها تشکیل شده‌اند(۱)در کامپیوتر نورومورفیک، تفکیک واضحی بین واحد پردازش و حافظه وجود ندارد(۲).به دلیل ماهیت رویدادمحور و موازی بودن گسترده، سیستم‌های نورومورفیک معمولاً با مصرف انرژی بسیار کمتر از سیستم‌های سنتی کار می‌کنند(۱)

ممریستورهای فعال برای ساخت معادل‌های الکترونیکی نورون‌های زیستی به کار گرفته می‌شوند .(۳) پدیده‌ی تغییر مقاومت که پایه‌ی عملکرد ممریستورهاست، می‌تواند برای پیاده‌سازی قابلیت‌های نورومورفیک استفاده شود(۲)سیستم‌ها و دستگاه‌های ممریستیو رفتارهای غیرخطی و پاسخ‌های وابسته به تاریخچه ورودی را نشان می‌دهند(٤) ممریستورهایی که عملکرد محاسباتی نورون‌ها را تقلید می‌کنند نوریستور نامیده می‌شوند.(۲)

نوریستورهای حرارتی به عنوان دسته‌ای جدید از **نوسانگرهای اسپایکی** معرفی می‌شوند.نوریستورهای مجاور از طریق **حرارت** تعامل دارند؛ اگرچه به صورت الکتریکی ایزوله هستند، اما می‌توانند از طریق زیرلایه حرارت را منتقل کنند.(۵)

تغییر در **ولتاژ بایاس نوسانگر** می‌تواند منجر به گذار فازی از عدم نوسان به نوسان‌های هم‌زمان در نوسانگرهای حرارتی, واندیوم دی اکساید شود. تعامل دینامیک حرارتی و ولتاژ ورودی، دینامیک شبکه را در مقیاس‌های زمانی مختلف تحت تأثیر قرار می‌دهد.حافظه به عنوان توانایی حفظ اطلاعات بلندمدت درباره‌ی حالت‌های گذشته که از **اینرسی حرارتی و ظرفیت الکتریکی** آن ناشیست تعریف می‌شود. این ویژگی برای درک دینامیک سیستم حیاتیست(۵)

با توجه به اهمیت این موضوع و ضرورت ساخت یک دستگاه قابل‌اعتماد، ما به سیستم‌های محاسباتی نیاز داریم هرچند مراحل ابتدایی توسعه قرار دارند. هدف ارائه‌ی درک عمیق‌تری از عوامل مؤثر بر سیستم و تقویت اعتبار مدل‌های نظری در توصیف رفتار اصلی **شبکه‌های نوریستور حرارتی کوپل شده** است

درک تحلیلی موضوع

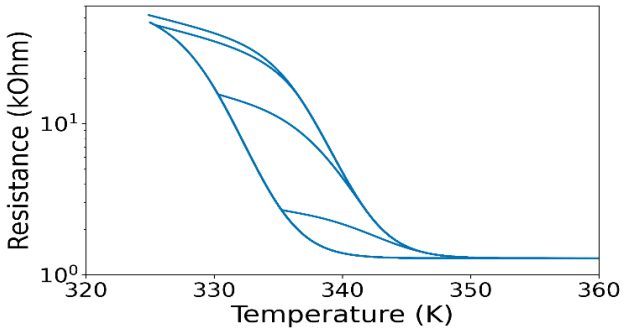
وانادیوم دی اکساید یکی از اکسیدهای فلزی انتقالی است.(۲) دستگاه‌های مبتنی بر وانادیوم دی اکساید که اغلب به عنوان **نوریستورهای حرارتی** شناخته می‌شوند(٦) یکی از ویژگی‌های کلیدی در وانادیوم دی اکساید ، **رفتار هیسترزیس** آن است. این رفتار هم در منحنی مقاومت–دما و هم در مشخصه‌ی جریان–ولتاژ شکل۱ قابل مشاهده است این هیسترزیس، که در واقع توانایی ماده برای حفظ اطلاعات درباره‌ی حالت‌های قبلی است (ناشی از اینرسی حرارتی و ظرفیت الکتریکی)، نوعی **حافظه** در شبکه‌های نوریستور وانادیوم دی اکساید ایجاد می‌کند و نقش اساسی در دینامیک جمعی آن‌ها دارد. (۵)وجود **حلقه‌های هیسترزیس بزرگ و کوچک** برای شبیه‌سازی پاسخ‌های نورونی تحریک‌کننده و مهاری اهمیت دارد(٦)در مطالعه ی ما سیستمی بر پایه‌ی یک **شبکه‌ی دوبعدی از نوسانگرهای دی‌اکسید وانادیوم که به صورت حرارتی کوپل شده مورد بررسی است** به طور خاص، دستگاه‌ها روی زیرلایه‌ای ساخته می‌شوند که معمولاً **زیرلایه‌ی یاقوت کبود** است، زیرا این ماده دارای رسانایی حرارتی بالا و رسانایی الکتریکی پایین می‌باشد(۵) شکل۲

با رسیدن ولتاژ به یک **آستانه‌ی بحرانی**، گذار در وانادیوم دی اکساید رخ می‌دهد و مقاومت آن به طور ناگهانی کاهش می‌یابداین افت مقاومت باعث تخلیه‌ی سریع خازن موازی می‌شود که نتیجه‌ی

آن تولید یک **اسپایک جریان** است پس از تخلیه‌ی خازن، ولتاژ روی دستگاه وانادیوم دی اکساید کاهش یافته و گرمایش ژولی دیگر کافی نیست تا حالت فلزی را حفظ کند، بنابراین وانادیوم دی اکساید دوباره به حالت **عایق** بازمی‌گردد این چرخه به طور مداوم تکرار می‌شود و **نوسان‌های اسپایکی پایدار** ایجاد می‌کند (۵)اگر گرمایش بیش از حد شود، دستگاه ممکن است در حالت فلزی گرفتار شده و دیگر اسپایک نزند (یک ویژگی بازدارنده). در مقابل، اگر گرمایش کافی نباشد، گذار از حالت عایق به فلز رخ نمی‌دهد و اسپایکی تولید نمی‌شود(۶)

جفت شدگی (کاپلینگ) گرمایی

برخلاف نورون‌های زیستی که از طریق سیگنال‌های الکتریکی یا شیمیایی با هم ارتباط برقرار می‌کنند، **نوریستورهای حرارتی از طریق گرما تعامل می‌کنند** در سیستم‌های وانادیوم دی اکساید مورد مطالعه، نوریستورهای مجاور **از نظر الکتریکی جدا** هستند اما **از طریق بستر** به صورت **حرارتی به هم متصل** شده‌اند هر اسپایک جریان تولید شده توسط یک دستگاه وانادیوم دی اکساید باعث **گرمایش ژولی می شود**(۵) این گرمایش **از طریق بستر پخش** شده و به دستگاه‌های مجاور می‌رسند(۷) گرمای دریافت‌شده دمای دستگاه مجاور را افزایش می‌دهد و در صورتی که دما به دمای گذار عایق–فلز نزدیک شود، این تأثیر حرارتی می‌تواند باعث **کاهش ولتاژ آستانه** شود(۷) این فرآیند موجب می‌شود دستگاه مجاور **با احتمال بیشتری دچار گذار شده و اسپایک بزند**، که معادل با یک **تعامل تحریکی** است.از طرفی گرمای بیش از حد ممکن است باعث شود نوریستور مجاور



شکل ۱ ویژگی بنیادی وانادیوم دی اکساید ، **گذار از عایق به فلز**است که در دمای بحرانی حدود **۳۴۰ کلوین (۶۷ درجه‌ی سانتیگراد)** رخ می‌دهد. در دماهای پایین‌تر از این مقدار، وانادیوم دی اکساید در حالت عایق با مقاومت بالا قرار دارد و در دماهای بالاتر، به حالت فلزی با مقاومت پایین گذار می‌کند (۵)

در حالت فلزی گرفتار شده و دیگر اسپایک نزند، که معادل با تعامل مهاری در نورون هاست. کاپلینگ حرارتی برای رفتارهای جمعی پیچیده و گذارهای فازی در شبکه ضروری است(۵)

روش های محاسباتی

سیستم مورد مطالعه ی ما از نوریستورهای همسان تشکیل شده است که با فاصله‌های یکنواخت در یک **آرایه‌ی منظم دوبعدی** قرار گرفته‌اند. رفتار آن‌ها توسط معادلات زیر کنترل می‌شود

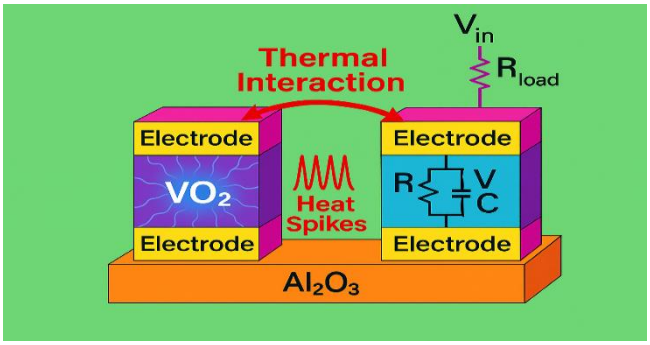
$$C_0 \frac{dV_1}{dt} = \frac{V_0}{R_0} - V_1\left(\frac{1}{R_0} + \frac{1}{R_1}\right) \quad (۱)$$

$$C_{\text{th}} \frac{dT_i}{dt} = \frac{V_i^2}{R_i} - S_e(T_i - T_0) + S_c\nabla^2 T_i + \sigma\eta_i(t) \quad (۲)$$

$$R(T) = R_0 \exp\left(\frac{T}{E_a}\right) F(T) + R_m \quad (۳)$$

$$F(T) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tanh\left(\beta\left(\frac{\delta}{2w} + T_c - \left[T + T_{pr}P\left(\frac{T_{pr}}{T - T_r}\right)\right]\right)\right) \quad (٤)$$

$$T_{pr} = \frac{\delta}{2w} + T_c - \frac{1}{\beta}(2F(T_r) - 1) - T_r \quad (٥)$$

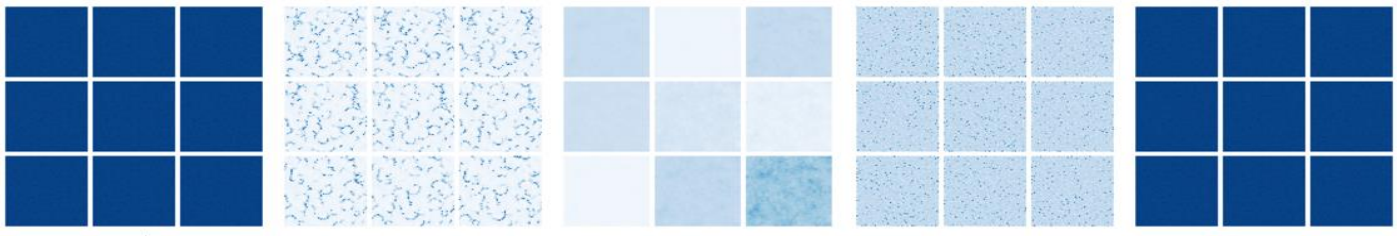


شکل ۲ **الکترودهای پایینی** شامل یک لایه‌ی **۵ نانومتری تیتانیوم** و یک لایه‌ی **۲۵ نانومتری پلاتین** الگوگذاری می‌شوند. یک **دستگاه وانادیوم دی اکساید** به صورت **سری با یک مقاومت بار** متصل می شود این مقاومت ولتاژ ورودی به مدار را تنظیم می کند همچنین یک خازن ذاتی نیز در مدار ترسیم شده است که با شارژ و تخلیه ی ناگهانی خود سبب اسپایک زدن می شود

$$P(x) = \frac{1}{2}(1 - \sin(\gamma x))(1 + \tanh(2\pi - 2\pi x)) \quad (٦)$$

معادله ی (۱) این معادله رفتاری شبیه به نورون‌های *نشت و اتش* را توصیف می‌کند که تحت تأثیر ولتاژ ورودی و مقاومت‌های نورستور و مقاومت بار قرار دارد این یک معادله‌ی بنیادی مدار است که از قانون جریان کیرشهف برای گره بین مقاومت سری و ترکیب موازی خازن وانادیوم دی اکساید استخراج شده است.معادله ی (۲) چگونگی تغییر دمای نورستور به دلیل تولید گرما، تبادل گرما با محیط، تبادل حرارتی با همسایگان و نویز را توضیح می‌دهد.این معادله بر اساس موازنه انرژی در سیستم حرارتی نوشته شده است.معادلات (۳و٤و٥و٦)رابطه‌ی مقاومت ماده‌ی وانادیوم دی اکساید با دمای آن را توصیف می‌کنند که شامل ویژگی هیسترزیس مربوط به گذار عایق–فلزی می‌شود

به طور جزئی معادله ی (۳) خروجی نهایی بخش مقاومت مدل است. یعنی مشخص می‌کند که مقاومت دستگاه وانادیوم دی اکساید در دمای T چقدر است معادله ی (٤) هسته‌ی مدل هیسترزیس است. گذار بین حالت‌های فلزی و عایق را به صورت **ملایم و پیوسته** مدل می‌کند. معادله ی (٥) دما را **فقط در لحظه‌ای که جهت تغییر دما برعکس می‌شود** محاسبه می کند و معادله ی (٦) این تابع یک ابزار ریاضی درون معادله‌ی F(T)است که اثر دمای مجاورتTpr را تنظیم میکند ای معادلات ار رفرنس های (۵و۷)استخراج شده اند


الف ب ج د ه

شکل ۳ در **ولتاژهای زیر آستانه‌ای**، ولتاژ کافی برای تحریک گذار وجود ندارد و نورستور در حالت غیرفعال باقی می‌ماند و جریانی ایجاد نمی‌شود.مثلا ولتاژ ۹ ولت(الف) با افزایش ولتاژ از فاز بی‌فعالی، دنباله‌ای از فازهای دینامیکی ظاهر می‌شوددر این سطوح ولتاژ، گروه‌هایی از نورستورها به صورت هماهنگ با هم نوسان می‌کنند و خوشه‌های فضایی از فعالیت شکل می‌گیرد مثلا ولتاژ ۱۰ ولت (ب) در ادامه‌ی این دنباله، **امواج گسترده‌ی سامانه‌ای در ولتاژهای ۱۲ ولت مشاهده می شود** این حالت یک وضعیت جمعی است که در آن فعالیت به صورت الگویی شبیه به موج در سراسر آرایه‌ی ٦٤×٦٤منتشر می‌شود.(ج) با افزایش بیشتر ولتاژ مثلاً به ١٤ ولت سامانه وارد فاز **پیک‌های نامرتبط** می‌شود در این حالت، نورستورهای منفرد در حال شلیک هستند، اما فعالیت آن‌ها با همسایگان یا کل شبکه هماهنگ نیست (د). در نهایت، فازهای دینامیکی**دوباره با بی‌فعالی در ولتاژهای بسیار بالا** به پایان می‌رسند نوریستور در حالت فلزی گیر می‌کنند و جریان ثابتی برقرار می‌شود، در نتیجه نوسان متوقف می‌شود.(ه)

وابستگی به اعمال ولتاژ

مکانیسم پشت رفتار جمعی نوریستورها ، شامل یک **گذار از حالت عایق به فلز** تحریک‌شده توسط ولتاژ است در نوریستورهای **کوپل شده**، رفتار جمعی و عملکردهای عصبی قابل پیکربندی عمدتاً از طریق تعاملات حرارتی بروز پیدا می‌کند و این رفتارها مستقیما تحت تاثیر ولتاژ ورودی به سیستم قرار دارند(شکل ۳) این تعاملات عبارت اند از : **تعامل تحریکی**:ولتاژ ورودی اعمال شده به یک نورستور (نوریستور۱)می‌تواند پیک‌های گرمایی ایجاد کند که ولتاژ آستانه‌ی نورستور همسایه(نورستور ۲) را کاهش دهد، حتی اگر نوریستور ۲در حالت زیرآستانه باشد، و باعث تحریک آن به شلیک شود. ادغام نشت‌دار تصادفی: یک نورستور بایاس شده در حالت زیرآستانه (نوریستور۱) می تواند پیک‌های گرمایی نورستور شلیک‌کننده‌ی همسایه (نوریستور۲) را تجمیع کند و پس از جمع‌آوری گرمای کافی شلیک کند.تعامل مهاری: نورستور ۱که در یک ولتاژ معین به طور پایدار شلیک می‌کند، می‌تواند توسط نورستور۲که توسط ولتاژ ورودی خود فعال شده است، مهار شود.این اتفاق زمانی رخ می‌دهد که پیک‌های گرمایی نوریستور فعال، نوریستور مهارشده را به ناحیه‌ی حالت فلزی سوق دهد و از نوسان جلوگیری کند. (٦)

نتیجه گیری

شبیه سازی های عددی که با استفاده از یک مدل نظری انجام شده بر وابستگی ولتاژ ورودی به اسپایک های نوریستورهای حرارتی تاکیید دارد. هر پیک جریانی که توسط یک نورستور تولید می‌شود، یک پیک حرارتی ایجاد می‌کند که از طریق بستر به نورستورهای مجاور منتشر می‌شود دینامیک حرارتی وسیله‌ی اصلی تعامل بین نوریستورها است این کوپل حرارتی، امکان پیدایش رفتارهای جمعی پیچیده را فراهم می‌کند

سپاسگزاری : اینکار با پشتیبانی معنوی وعلمی **دکتر رضا جعفری** انجام شد.

مرجع‌ها

[۱]*Catherine D. Schuman 1,2 ✉, Shruti R. Kulkarni1, Maryam Parsa1,3, J. Parker Mitchell1, Prasanna Date 1 and Bill Kay,* Opportunities for neuromorphic computing algorithms and applications,2021

[۲]Javier del Valle; Juan Gabriel Ramírez ; Marcelo J. Rozenberg; Ivan K. Schuller, Challenges in materials and devices for resistive-switchingbased neuromorphic computing,2018

[۳]Wei Yi 1, Kenneth K. Tsang 1, Stephen K. Lam1, Xiwei Bai1, Jack A. Crowell1 & Elias A. Flores1, Biological plausibility and stochasticity in scalable VO2 active memristor neurons,2018

[4] Gouhei Tanaka a,b,*, Toshiyuki Yamane c, Jean Benoit Héroux c, Ryosho Nakane a,b, Naoki Kanazawa c, Seiji Takeda c, Hidetoshi Numata c, Daiju Nakano c, Akira Hirose, Recent advances in physical reservoir computing: A review,219

[5] Yuan-Hang Zhang 1 , Chesson Sipling 1, Erbin Qiu1,2, Ivan K. Schuller 1 & Massimiliano Di Ventra, Yuan-Hang Zhang 1 , Chesson Sipling 1, Erbin Qiu1,2, Ivan K. Schuller 1 & Massimiliano Di Ventra,2024

[6] Erbin Qiu1,2, *, Yuan-Hang Zhang2, Massimiliano Di Ventra2 and Ivan K. Schuller2, Reconfigurable cascaded thermal neuristors for neuromorphic computing,2023

[7] Andrei Velichko * , Maksim Belyaev and Petr Boriskov, A Model of an Oscillatory Neural Network with Multilevel Neurons for Pattern Recognition and Computing,2018

توسعه روش‌های دستکاری نوری با استفاده از توری چنگالی و باریکه‌های لاگر-گاوسی

صمدزاده، محسن[۱]؛ رسولی، سیف اله[۱و۲]؛ حاجی‌زاده، فائقه[۱]؛

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی زنجان، زنجان

[۲] مرکز مطالعات و همکاری های علمی بین المللی (CISSC)، وزارت علوم، تحقیقات و فناوری، تهران ، ایران

چکیده

در سال‌های اخیر، روش‌های مختلف دستکاری نوری به دلیل عدم نیاز به تماس مستقیم فیزیکی و مکانیکی با ذرات، توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده‌اند. در این میان، انبرک نوری مبتنی بر باریکه گاوسی، با وجود توانمندی بالا در کنترل ذرات، با محدودیت‌هایی همراه است. یکی از این محدودیت‌ها، ناتوانی در تله‌اندازی ذرات بزرگ یا ذرات با ویژگی‌های نوری خاص می‌باشد. در مقابل، تله‌اندازی نوری با استفاده از باریکه‌های لاگر-گاوسی، امکان به دام انداختن ذرات با ضریب شکست کوچک‌تر نسبت به محیط سیال و همچنین ذرات بزرگ‌تر را فراهم می‌کند. در این پژوهش، با پراش باریکه گاوسی از توری چنگالی، زوجی از باریکه‌های لاگر-گاوسی با بارهای توپولوژیکی مخالف ایجاد شده است. عبور همزمان این باریکه‌ها از محیط سیال در اطراف ذرات، منجر به شکل‌گیری زوج تله‌های نوری مدور می‌شود. رفتار جمعی ذرات گرفتار شده در این تله‌ها مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که ذرات در این دو تله مدور، حرکتی چرخشی و مخالف جهت یکدیگر دارند که عملکردی مشابه یک پمپ در محیط سیال ایجاد می‌کند. یافته‌های این تحقیق می‌تواند کاربردهای بالقوه‌ای در زمینه‌های اپتیک پیشرفته، میکروسیالات، و نانوفناوری داشته باشد.

واژگان کلیدی: *دستکاری های نوری، ضریب شکست، باریکه لاگر-گاوسی، توری چنگالی، میکروسیالات.*

Advancing Optical Manipulation Techniques Using Forked Gratings and Laguerre-Gaussian Beams

Samadzadeh, Mohsen[1], Rasouli, Saifollah[1,2]; Hajizadeh, Faegheh[1]

[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan

[2] Center for International Scientific Studies and Collaboration (CISSC), Ministry of Science, Research and Technology, Tehran, Iran

Abstract

In recent years, various optical manipulation methods have gained significant attention due to their non-invasive nature, eliminating the need for direct physical and mechanical contact with particles. Among these, the conventional optical tweezers based on Gaussian beams, while powerful for particle control, are limited by their inability to efficiently trap larger particles or those with particular optical properties. In contrast, optical trapping using Laguerre-Gaussian beams enables the capture of particles with higher refractive indices relative to the surrounding fluid and can effectively trap larger-sized particles.In this study, we generate a pair of Laguerre-Gaussian beams with opposite topological charges by diffracting a Gaussian beam through a forked grating. The simultaneous propagation of these

beams through the fluid medium near particles leads to the formation of a pair of circular optical traps. We investigate the collective behavior of particles captured in these traps. Our results show that the trapped particles exhibit rotational motion in opposite directions, effectively acting as a microfluidic pump. These findings open up potential applications in advanced optics, microfluidics, and nanotechnology.

Keywords: *Optical manipulation, Refractive index, Laguerre-Gaussian beam, Forked grating, Microfluidics.*

مقدمه

دستکاری نوری ذرات در مقیاس میکرومتری و نانومتری کاربردهای گسترده‌ای در میکروروباتیک [۱]، خودآرایی[۶۳] [۲] و میکروسیالات [۳] دارد. این تکنیک امکان کنترل دقیق ذرات و ایجاد ساختارهای پیچیده را فراهم می‌کند.یکی از ابزارهای قدرتمند در این راستا، استفاده از پرتوباریکه‌های لاگر-گاوسی است [٤].

باریکه‌های لاگر-گاوسی با دارا بودن تکانه زاویه‌ای مداری و تکینگی فازی، امکان تله‌اندازی ذرات با ضریب شکست کوچک‌تر از محیط و ایجاد گشتاور برای چرخش آن‌ها را فراهم می‌کنند [٤-٦]. کنترل دقیق بر روی ذرات در مقیاس میکرومتری، کاربردهای گسترده‌ای در زمینه‌های مختلف دارد. در میکروروباتیک، از این تکنیک برای ساخت و کنترل ربات‌های کوچک استفاده می‌شود. در میکروسیالات، امکان دستکاری و جداسازی ذرات در کانال‌های میکرومتری فراهم می‌شود. در زمینه خود-آرایی، می‌توان از پرتوهای لاگر-گاوسی برای ایجاد ساختارهای پیچیده و منظم از ذرات استفاده کرد. همچنین، دستکاری نوری ذرات، امکان مطالعه برهم‌کنش‌های بین ذرات و ایجاد ساختارهای جدید با خواص نوری و مکانیکی منحصر به فرد را فراهم می‌کند [۱۰-۷].

استفاده از پرتوهای لاگر-گاوسی و همچنین توسعه روش‌های جدید برای ایجاد پرتوهای با شکل و خواص دلخواه، می‌تواند امکانات جدیدی را در این زمینه فراهم کند [۱۲-۱۱]. علاوه بر این، درک بهتر از سازوکارهای فیزیکی حاکم بر برهم‌کنش نور و ماده در مقیاس میکرو و نانو، می‌تواند به بهبود عملکرد و کارایی سیستم‌های دستکاری نوری کمک کند. اخیراً در گزارشی برای پمپ ذره از میکروچرخانه‌های محرک نوری استفاده شده است [۱۳]. در این روش با ایجاد چند تله‌ی نوری توسط تغییر فاز باریکه برای چرخش میکروچرخانه‌ها استفاده شده است.

در این مقاله طرح ساده‌ای برای چرخش جمعی ذرات میکروسکوپی حتی در صورت استفاده از ذراتی با ضریب شکست کمتر از محیط اطراف یا استفاده از ذراتی با قطر بزرگتر [۱۵-۱٤] بیان شده است. در این روش برای چرخش ذرات از قطبش نور به کار برده نشده است و صرفاً از تکانه زاویه‌ای مداری باریکه لاگر-گاوسی استفاده شده است. هدف از این مقاله، ارائه یک دیدگاه جامع از چرخش جمعی ذرات در تله‌ی نوری حاصل از دو باریکه لاگر-گاوسی با بارتوپولوژی مخالف و بررسی چالش‌ها و فرصت‌های پیش روی این زمینه است. روش تولید باریکه‌های لاگر-گاوسی استفاده از توری‌های چنگالی با بار توپولوژی l است و تابع عبور آن به صورت معادله (۱) است.

[۶۳] Self-assembly

$$T(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2}(1+\cos(\frac{2\pi r}{d} - l\theta)) \quad (1)$$

که d گام توری و $\theta = tan^{-1}(x / y)$ مؤلفه‌ی سمتی را بیان می‌کند. اگر میدان نوری با نمایه گاوسی به این تابع عبور فرود بیاید. میدان نوری بلافاصله بعد از توری به صورت زیر خواهد بود:

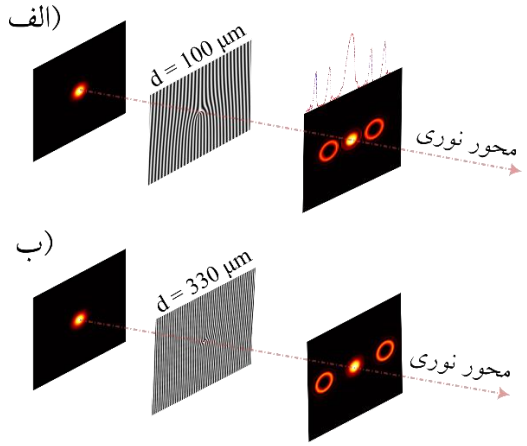
$$\Psi(\boldsymbol{r},0) = u(\boldsymbol{r},0)T(\boldsymbol{r}) \quad (2)$$

$$\Psi(\boldsymbol{r},0) = \frac{r}{\omega}exp(-\frac{r^2}{\omega}) \times \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{4}exp(-i(\frac{2\pi r}{d} - l\theta)) + \frac{1}{4}exp(i(\frac{2\pi r}{d} - l\theta))\right] \quad (3)$$

$$\Psi(r,\theta,z) = (\frac{k}{2\pi iz})\int_0^{\infty} r'dr' \int_0^{2\pi} d\theta' \Psi(r',\theta',0)e^{ik(r^2+r'^2-2rr'cos(\theta-\theta'))/2z} \quad (4)$$

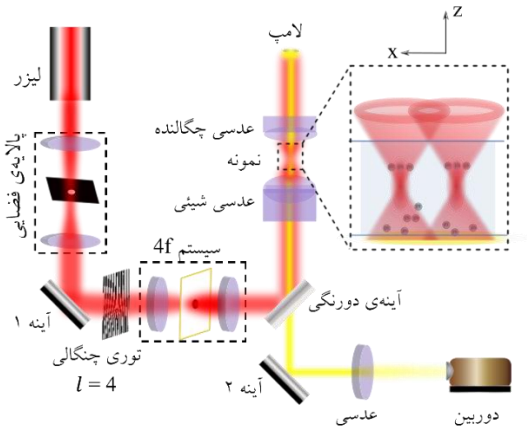
اگر از تقریب فرنل در مختصات قطبی مطابق معادله (٤) استفاده شود، آن‌گاه میدان نوری در راستای انتشار را می‌توان با تقریبی به صورت زیر نوشت:

$$\Psi(r,z) \approx e^{ikr^2/2z} \left[\begin{array}{l} \frac{1}{2}\frac{r}{\omega(z)}exp(-\frac{r^2}{\omega^2}) + \ldots \\ \frac{1}{4}e^{-ik|r-\frac{\lambda z}{d}x|}\frac{|\boldsymbol{r}-\frac{\lambda z}{d}x|}{\omega(z)}exp(-\frac{|\boldsymbol{r}-\frac{\lambda z}{d}x|^2}{\omega(z)^2})e^{il\theta} + \ldots \\ \frac{1}{4}e^{-ik|r+\frac{\lambda z}{d}x|}\frac{|\boldsymbol{r}+\frac{\lambda z}{d}x|}{\omega(z)}exp(-\frac{|\boldsymbol{r}+\frac{\lambda z}{d}x|^2}{\omega(z)^2})e^{-il\theta} \end{array}\right] \quad (5)$$



شکل۱: طرح‌واره‌ای از تاثیر گام توری در فاصله مراتب پراش از توری.

گام توری چنگالی در چیدمان تله‌اندازی خیلی مهم است. مطابق معادله (٥) با تغییر گام توری فاصله مراتب پراش از توری چنگالی با نسبت $\Delta x = \left|\frac{\lambda z}{d} - (\frac{\lambda z}{d})\right| = \frac{2\lambda z}{d}$ تغییر می‌کند و مطابق شکل (۱- الف وب) با افزایش گام توری مراتب پراش زودتر از هم در فاصله کانونی عدسی از هم جدا می‌شوند.



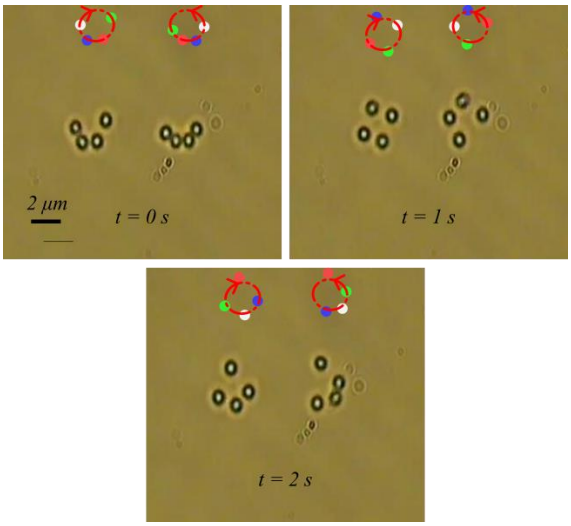
شکل۲: طرح‌واره‌ای از چیدمان آزمایش.

مطابق شکل(۲) باریکه لیزر بعد از پالایه فضایی به توری با بار توپولوژی ٤ برخورد می‌کند. توسط سیستم ٤f مرتبه صفر پراش از

توری توسط متوقف کننده[64]، مسدود می‌شود و بعد از بازتاب از آینه‌ی دو رنگی، مراتب ۱+ و ۲+ وارد عدسی شیئی 100x- Olympus غوطه ور در روغن می‌شود. تله‌ی نوری در فاصله‌ی کانونی عدسی شیئی شامل دو کانون حلقوی با بار توپولوژی ٤+ و ٤- ایجاد می‌شود. از سوی دیگر نور لامپ توسط عدسی چگالنده داخل نمونه را روشن می‌کند و تصویر نمونه توسط عدسی شیئی گرفته شده و توسط دوربین در کانونی عدسی ضبط می‌شود. گام توری چنگالی به صورتی طراحی شده است که مراتب پراش ۱+ و ۲+ در کانون عدسی شیئی در فاصله ۲/٦ میکرومتر قرار گرفته‌اند.

محفظه نمونه شامل ذرات پلی استایرن با قطر ۱ میکرومتر هستند که مطابق شکل(۳) چرخش ٤ ذره که توسط دو باریکه لاگر-گاوسی (با بارتوپولوژی مخالف هم) کانونی شده تله اندازی شده‌اند. توان داخل نمونه (مراتب پراش ۱+ و ۲+) برابر با ۲۱/۸ میلی‌وات است.

از سوی دیگر نور لامپ توسط عدسی چگالنده نمونه را روشن می‌کند و تصویر نمونه توسط عدسی شیئی گرفته شده و در کانون عدسی تصویربرداری توسط دوربین ثبت می‌شود.

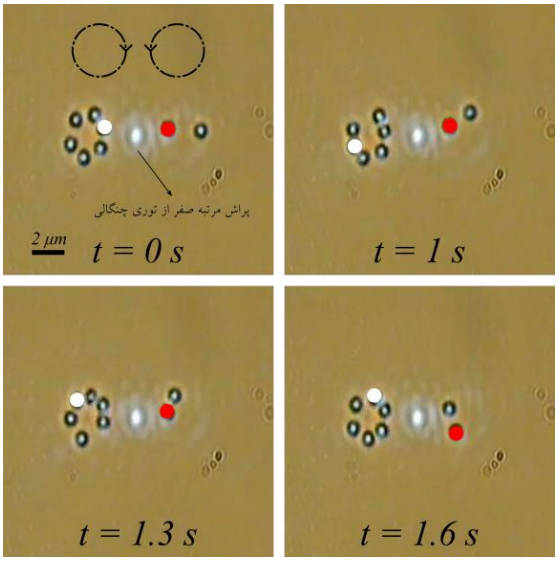


شکل۳: تصاویر میکروسسکوپی جمعی از ذرات تله‌اندازی شده در تله‌ی نوری؛ برای نشان دادن جابه‌جایی‌های ذرات هر کدام رنگ‌های سفید، آبی، قرمز و سبز برچسب گذاری شده‌اند. فاصله زمانی فریم‌ها ۱ ثانیه است.

در شکل(۳) تصاویر تله اندازی ۸ ذره که توسط دو باریکه لاگر-گاوسی کانونی شده با بار توپولوژی مخالف هم تله‌اندازی شده‌اند، را نشان می‌دهد. در ۲ ثانیه اول می‌توان با ردیابی مکان هر کدام از ذرات که به رنگ‌های سفید، آبی، قرمز و سبز در بالای تصاویر برچسب زده شده‌اند، چرخش حول حلقه باریکه لاگر- گاوسی را مشاهده کرد که چرخش به صورت خلاف جهت هم روی می‌دهد. همچین حرکت دینامیکی ذرات در هرکدام از تله‌های نوری مورد بررسی قرار گرفت.

شدت مرتبه صفر پراش از توری چنگالی از مراتب پراش مجاورش بیشتر است. وقتی مرتبه‌ی صفر پراش از توری چنگالی متوقف نشود، ذرات در مرتبه صفر که دارای نمایه گاوسی است به تله می‌افتند روی حرکت ذرات حول هر دو حلقه باریکه لاگر-گاوسی با بار توپولوژی مخالف تاثیر می‌گذارد.

[64] Obstacle



شکل٤: تصویر میکروسکوپی از دو ذره‌ای که با رنگ قرمز و سفید برچسب گذاری شده‌اند، تحت تاثیر نیروی تله‌ی مرکزی از چرخش متوقف شده‌اند.

مطابق شکل(٤) که تصویر میکروسکوپی دو ذره‌ای که با دایره‌های سفید و قرمز برچسب گذاری شده را در زمان‌های مختلف نشان می‌دهند که تحت تاثیر نیروی تله‌ی مرکزی از چرخش متوقف می‌شوند تا زمانی که ذره بعدی به آن برسد. ذره قرمز برچسب زده شده تا رسیدن ذره قبلی در زمان ۱/۳ ثانیه متوقف شده و در زمان ۱/٦ ثانیه ذره قبلی متوقف شده و ذره قرمز برچسب گذاری شده به حرکت مسیر حلقوی ادامه می‌دهد. ذره سفید برچسب گذاری شده چون ذرات ماقبل سریع‌تر به آن می‌رسد و متوقف می‌شود، زودتر به مسیر خود نسبت به ذره قرمز برچسب گذاری شده ادامه می‌دهد.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، یک تله نوری مبتنی بر دو باریکه لاگر–گاوسی با بار توپولوژی مخالف با استفاده از توری چنگالی طراحی و پیاده‌سازی شد. رفتار چرخشی جمعی ذرات پلی‌استایرن با قطر ۱/۰۸ میکرومتر در این تله‌ها بررسی شد. وقتی مرتبه صفر پراش متوقف نشود، شدت پراش مرتبه صفر از توری می‌تواند چرخش ذرات را تحت تاثیر قرار داده و متوقف کند. این چیدمان ساده و قابل پیاده‌سازی، پتانسیل کاربرد در میکروسیالات، نانوتکنولوژی، و میکروروباتیک را دارد و در کارهای آتی برای پمپ ذرات موجود در سیال استفاده خواهد شد..

مرجع‌ها

[۱] Chen, X., Duan, S., Cao, D., Tang, J., Ma, X., Kuang, T., ... & Wang, W. (2025). Reconfigurable Transport and Assembly of Colloidal Particles via Opto-Chemical-Electronic Tweezer (OCET). *ACS Applied Materials & Interfaces*.

[۲] Chen, X., Lin, L., Li, Z., & Sun, H. B. (2022). Light-Directed Assembly of Colloidal Matter. *Advanced Functional Materials*, **32**(22), 2104649.

[۳] Malekmohammadi, M., Akhlaghi, E. A., Soltani, J., & Hajizadeh, F. (2020). Escape velocity sorting in optical tweezers system using a home-made piezo mirror. *Journal of Optics*, **22**(5), 055301.

[٤] Cojoc, D., Garbin, V., Ferrari, E., Businaro, L., Romanato, F., & Di Fabrizio, E. (2005). Laser trapping and micro-manipulation using optical vortices. *Microelectronic Engineering*, **78**, 125-131.

[٥] Li, X., Dan, D., Yu, X., Zhou, Y., Zhang, Y., Gao, W., ... & Yao, B. (2023). Concentric ring optical traps for orbital rotation of particles. *Nanophotonics*, **12**(24), 4507-4517.

[٦] Nossir, N., L. Dalil-Essakali, and A. Belafhal. "Optical trapping of particles by radiation forces of doughnut laser beams in the Rayleigh regime." *Optical and Quantum Electronics* **53** (2021): 1-13.

[۷] Zijlstra, P., and M. Orrit. "Single metal nanoparticles: optical detection, spectroscopy and applications." *Reports on Progress in Physics* **74**.10 (2011): 106401.

[۸] Rösch, T., Sarbia, M., Schumacher, B., Deinert, K., Frimberger, E., Toermer, T., ... & Neuhaus, H. (2004). Attempted endoscopic en bloc resection of mucosal and submucosal tumors using insulated-tip knives: a pilot series (including videos). *Endoscopy*, **36**(09), 788-801.

[۹] Chen, X., Lin, L., Li, Z., & Sun, H. B. (2022). Light-Directed Assembly of Colloidal Matter. *Advanced Functional Materials*, **32**(22), 2104649.
[۱۰] Xu, Q. (2024). Design of 2D Skyrmionic Metamaterial Through Controlled Assembly.

[۱۱] Chen, X., Duan, S., Cao, D., Tang, J., Ma, X., Kuang, T., ... & Wang, W. (2025). Reconfigurable Transport and Assembly of Colloidal Particles via Opto-Chemical-Electronic Tweezer (OCET). *ACS Applied Materials & Interfaces*.

[۱۲] Shama, Y. S., Rahmanian, S., Mouharrar, H., Abdelrahman, R., Elhady, A., & Abdel-Rahman, E. M. (2024). Unraveling the nature of sensing in electrostatic MEMS gas sensors. *Microsystems & Nanoengineering*, **10**(1), 56.

[۱۳] Būtaitė, U. G., Gibson, G. M., Ho, Y. L. D., Taverne, M., Taylor, J. M., & Phillips, D. B. (2019). Indirect optical trapping using light driven micro-rotors for reconfigurable hydrodynamic manipulation. *Nature communications*, **10**(1), 1215.

[۱۴] Gahagan, K. T., and G. A. Swartzlander Jr. "Trapping of low-index microparticles in an optical vortex." *Journal of the Optical Society of America B* **15**.2 (1998): 524-534.

[۱۵] Liang, Y., Lei, M., Yan, S., Li, M., Cai, Y., Wang, Z., ... & Yao, B. (2017). Rotating of low-refractive-index microparticles with a quasi-perfect optical vortex. *Applied Optics*, ***57***(1), 79-84..

تأثیر انواع انعطاف پذیری بر تجمع دو ماکرومولکول پلیمری

طاهرخانی، مریم[۱]؛ میرزایی، مسعود[۱]؛ فضلی، حسین[۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی زنجان، زنجان

چکیده

در این مطالعه، اثرانواع سختی خمشی دو زنجیره ی پلیمری بر فرآیند تجمع (جفت شدن) آن‌ها با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی شده است. شبیه سازی با استفاده ار روش درشت دانه و بسته شبیه سازی لمپس انجام شد. دو زنجیر پلیمری هر یک شامل ۲۰ مونومر، تحت شرایط دمایی ثابت وبا برهمکنش لنارد-جونز، مدل‌سازی شدند.

***واژگان کلیدی**: سختی خمشی، تجمع، شبیه سازی دینامیک مولکولی،بسته شبیه سازی لمپس، برهمکنش لنارد-جونز*

Effect of a Variety of Flexibilities on Aggregation of Two Polymeric Macromolecules

Taherkhani, Maryam[1]; Mirzaei, Masoud[1] ; Fazli, Hossein[1]

[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan

Abstract

In this study, the effect of different bending stiffnesses of two polymer chains on their aggregation process was investigated using molecular dynamics simulations. The simulation was performed using a coarse-grained approach and the LAMMPS simulation package. Each polymer chain, composed of 20 monomers, was modeled under constant temperature conditions with Lennard-Jones interantions.

***Keywords**: bending rigidity, aggregation, LAMMPS simulation package, molecular dynamics simulations, Lennard-Jones interactions .*

مقدمه

ماکرومولکول‌های پلیری در فرآیندهای بیولوژیکی و صنعتی نقش حیاتی دارند. این پلیمرها به دلیل ویژگی‌های خاص خود، مانند قابلیت انعطاف‌پذیری، رفتارهای منحصر به فردی از خود نشان می‌دهند که می‌تواند بر تعاملات و تجمعات آنها تاثیر بسزایی بگذارد. در این تحقیق، تاثیر انعطاف‌پذیری بر تجمع دو ماکرومولکول پلیری با استفاده از مدل‌های شبیه‌سازی مولکولی مورد بررسی قرار گرفته است. به‌ویژه، اثر سختی خمشی به عنوان یک پارامتر مهم فیزیکی در شرایط مختلف انعطاف‌پذیری پلیمرها ارزیابی شده است. نتایج حاصل نشان می‌دهند که با افزایش انعطاف‌پذیری پلیمرها، احتمال تجمع و جفت شدن آنها ابتدا کاهش و سپس افزایش می‌یابد. این تحقیق می‌تواند به بهبود طراحی مواد نانو و بیولوژیکی و همچنین کاربردهای مرتبط با ماکرومولکول‌ها کمک کند.

مطالعات فیزیکی بر روی پلیمرها از دهه‌های گذشته به‌طور گسترده‌ای آغاز شده است و فیزیک پلیمر به یکی از شاخه‌های مهم در علم مواد تبدیل شده است. رفتارهای مختلف پلیمرها در شرایط گوناگون تحت تاثیر ویژگی‌های ساختاری و شیمیایی آنها است که انعطاف‌پذیری یکی از این ویژگی‌ها به حساب می‌آید. از آنجا که پلیمرها در صنایع مختلف مانند داروسازی، مواد نانو، و زیست‌فناوری کاربرد دارند، فهم بهتر از چگونگی تاثیر انعطاف‌پذیری بر رفتار تجمعی آنها امری ضروری است. این ویژگی می‌تواند بر تعاملات بین مولکول‌ها، سرعت و نوع تجمع آنها تاثیر بگذارد.

در طول سال‌ها، بسیاری از مدل‌ها برای شبیه‌سازی رفتار پلیمرها توسعه یافته‌اند. یکی از این مدل‌ها، مدل‌های دینامیک مولکولی هستند که به‌طور دقیق و با جزئیات بالا رفتار مولکول‌ها را شبیه‌سازی می‌کنند. این روش‌ها به پژوهشگران این امکان را می‌دهند که بدون نیاز به آزمایش‌های زمان‌بر و پرهزینه، تعاملات و خواص فیزیکی پلیمرها را در شرایط مختلف شبیه‌سازی و بررسی کنند.

در این تحقیق، تاثیر مقادیر مختلف انعطاف‌پذیری و غیر یکنواخت بودن آن ها، بر تجمع دو ماکرومولکول پلیری مورد بررسی قرار گرفته است. این تحقیق نه تنها به درک عمیق‌تر از رفتار تجمعی پلیمرها کمک می‌کند، بلکه می‌تواند در طراحی پلیمرهای جدید با ویژگی‌های خاص برای کاربردهای صنعتی و بیولوژیکی نقش مهمی ایفا کند. به‌ویژه، نتایج این تحقیق می‌توانند در توسعه مواد جدید برای صنایع داروسازی و مواد نانو کاربردهای فراوانی داشته باشند.

مدل و روش کار شبیه سازی

در این تحقیق، برای شبیه‌سازی تجمع دو ماکرومولکول پلیری از مدل دینامیک مولکولی استفاده شد. به منظور مدل‌سازی تعاملات بین اتم‌ها، از پتانسیل‌های لنارد–جونز برای تعاملات غیر پیوندی میان اتم‌های نوع 1 و 2 بهره گرفته شد. همچنین، برای پیوندهای بین اتم‌ها در زنجیره‌های پلیمری، از پتانسیل‌های هارمونیک استفاده گردید و به‌منظور مدل‌سازی زوایای بین پیوندها، پتانسیل‌های هارمونیک زاویه‌ای نیز در نظر گرفته شد. این پتانسیل‌ها در شبیه‌سازی‌های پلیمرها کاربرد گسترده‌ای دارند و رفتار ماکرومولکول‌ها را تحت شرایط مختلف شبیه‌سازی می‌کنند.

شبیه‌سازی‌ها در یک جعبه شبیه‌سازی با ابعاد ۶۰×۶۰×۶۰ با شرایط مرزی دوره‌ای در تمامی جهات انجام شد. این شرایط مرزی به‌طور خودکار اثرات مرزی را از شبیه‌سازی حذف کرده و این امکان را فراهم می‌آورد که رفتار ماکرومولکول‌ها در فضای بی‌نهایت فرضی شبیه‌سازی شود، که برای تحلیل تجمع دو ماکرومولکول پلیمر در محیط‌های مختلف ضروری است.

دما در شبیه‌سازی‌ها به مقدار 1.8 واحد لنارد–جونز تنظیم گردید و از گام زمانی 0.001 واحد زمانی برای دقت مناسب در

پیگیری تحولات دینامیکی سیستم استفاده شد. این پارامترها به‌منظور تضمین انجام شبیه‌سازی در شرایطی دقیق با رفتار واقعی سیستم انتخاب شدند.

برای تحلیل انعطاف‌پذیری پلیمرها، شعاع ژیراسیون به‌عنوان معیاری برای اندازه‌گیری گستردگی فضایی پلیمرها محاسبه گردید. این پارامتر برای هر یک از زنجیره‌های پلیمری به‌طور جداگانه اندازه‌گیری شد تا تأثیر تغییرات سختی خمشی بر ویژگی‌های فضایی پلیمرها بررسی شود. علاوه بر این، احتمال جفت شدن دو زنجیره پلیمری که به‌عنوان معیاری برای ارزیابی تجمع پلیمرها در نظر گرفته می‌شود، با استفاده از فرمول زیر محاسبه گردید:

$$P_{agg} = \frac{n_{agg}}{N_t}$$

که در آن، n_{agg} تعداد گام های زمانی گه پلیمرها تجمع کرده اند و $N_t=1\times10^6$ تعداد کل گام های زمانی در شبیه‌سازی است. در این مدل، احتمال جفت شدن دو زنجیره برحسب سختی خمشی پلیمرها محاسبه شد. این احتمال برای سختی‌های خمشی مختلف (0، 10، 30، 50، 100) به‌طور جداگانه اندازه‌گیری و تحلیل شد تا تأثیر انعطاف‌پذیری بر رفتار تجمعی پلیمرها بررسی گردد.[جدول ۱]

جدول ۱: سختی خمشی برحسب احتمال جفت شدن

سختی خمشی	۰	۱۰	۳۰	۵۰	۱۰۰
احتمال جفت شدن	۰.۹۸۸	۰.۰۳۲	۰.۰۳۴	۰.۰۳۳	۰.۱۳۸

در این شبیه‌سازی‌ها، فرآیند تجمع دو زنجیره پلیمری از حالت ابتدایی که دو زنجیره به‌طور موازی و با فاصله ابتدایی در جعبه شبیه‌سازی قرار داشتند، آغاز شد. در ابتدا، سیستم برای 10^6 تایم‌استپ به‌منظور تعادل‌دهی اولیه تنظیم گردید. در هر تایم‌استپ، اگر انرژی تعامل لنارد–جونز بین دو پلیمر کمتر از $k_BT(N/2)$ (که تقریباً نیمی از مونومرهای یک پلیمر با پلیمر دیگر در تماس قرار دارند) می‌شد، دو پلیمر به‌عنوان تجمع یافته در نظر گرفته می‌شدند.

این شبیه‌سازی‌ها به‌منظور تحلیل و مقایسه رفتار تجمعی دو زنجیره پلیمری و نحوه تغییر این رفتار با توجه به ویژگی‌های انعطاف‌پذیری انجام شدند. نتایج حاصل از این شبیه‌سازی‌ها می‌توانند در طراحی و بهینه‌سازی پلیمرهای نانو و بیولوژیکی برای کاربردهای صنعتی و پزشکی کاربرد فراوانی داشته باشند.

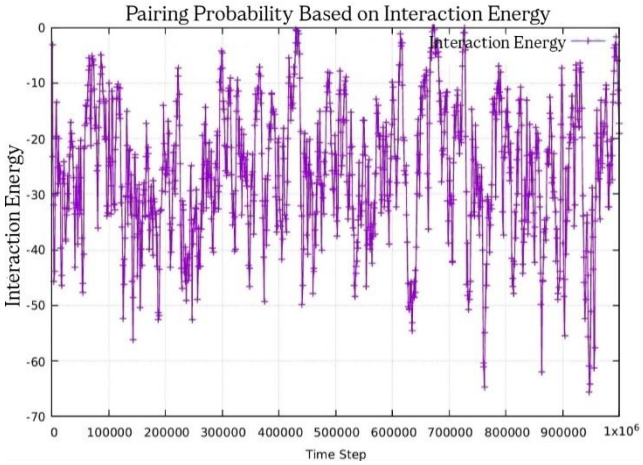
نتایج و بحث

نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها با تمرکز بر بررسی رفتار تجمعی دو پلیمر در شرایط مختلف سختی خمشی و انعطاف‌پذیری تحلیل می‌شود. نتایج این شبیه‌سازی‌ها به‌ویژه تأثیرات انعطاف‌پذیری پلیمرها را بر احتمال جفت شدن و تجمع آنها در شرایط مختلف سختی خمشی مورد بررسی قرار می‌دهند.

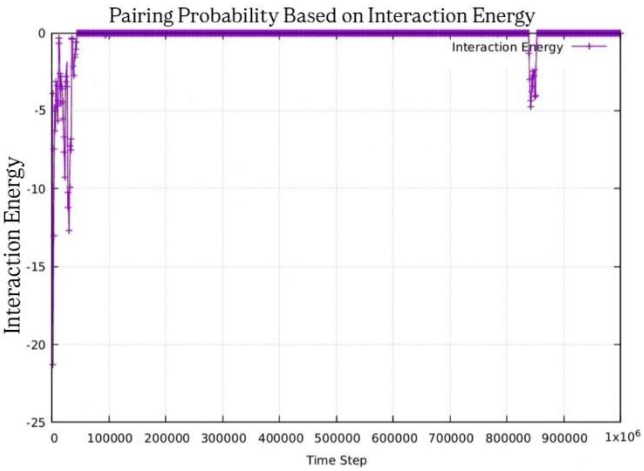
با افزایش سختی خمشی، احتمال جفت شدن دو زنجیره پلیمر به‌طور قابل‌توجهی کاهش می‌یابد. در شرایط سختی خمشی صفر، احتمال جفت شدن دو زنجیره به 0.988 می‌رسد که نشان‌دهنده افزایش تعاملات و تجمع دو پلیمر در این وضعیت است.[شکل ۱] اما در سختی‌های خمشی 10، 30، 50 و 100 [بترتیب شکل های ۲ و ۳ و ٤ و ٥]، این احتمال به ترتیب به 0.032، 0.034، 0.033 و 0.138 کاهش می‌یابد، که این تغییرات تأثیر منفی افزایش سختی خمشی بر تعاملات پلیمرها را به‌وضوح نشان می‌دهند. این روند کاهش احتمال جفت شدن با افزایش سختی خمشی، به‌ویژه در شرایطی که انعطاف‌پذیری پلیمرها بیشتر است، تأکید می‌کند که پلیمرهای کمتر انعطاف‌پذیر تمایل کمتری به تجمع دارند. که در جدول ۱ نشان داده شده است.

علاوه بر این، از نظر ساختاری، پلیمرهای انعطاف‌پذیر و پلیمرهای میله‌ای‌شکل نسبت به پلیمرهای نیمه‌انعطاف‌پذیر تمایل

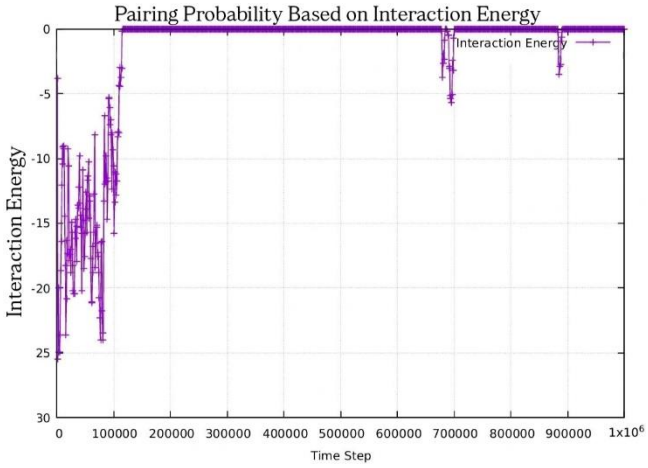
بیشتری به تجمع دارند. پلیمرهای انعطاف‌پذیر به‌دلیل ساختار فشرده‌تر و توانایی بیشتری که در جفت شدن و تشکیل پیوندهای بین‌زنجیره‌ای دارند، تجمع بیشتری را تجربه می‌کنند. این در حالی است که پلیمرهای نیمه‌انعطاف‌پذیر به دلیل ساختار نسبتاً سخت‌تر و کمتر قابل تغییر، تمایل کمتری به جفت شدن و تشکیل تجمع دارند. این پدیده در شبیه‌سازی‌ها به‌وضوح مشاهده شد، جایی که پلیمرهای انعطاف‌پذیر و پلیمرهای میله‌ای‌شکل بیشترین میزان تجمع را داشتند.



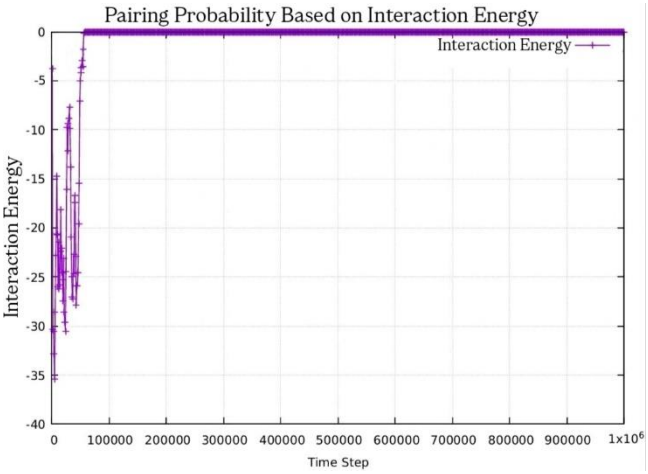
شکل ۱: نمودار احتمال جفت شدن دو مولکول پلیمری برای سختی خمشی صفر



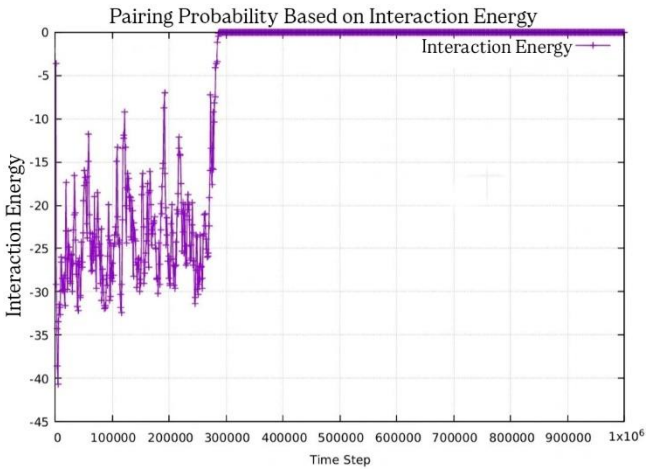
شکل ۲: نمودار احتمال جفت شدن دو مولکول پلیمری برای سختی خمشی ۱۰



شکل ۳: نمودار احتمال جفت شدن دو مولکول پلیمری برای سختی خمشی ۳۰



شکل ٤: نمودار احتمال جفت شدن دو مولکول پلیمری برای سختی خمشی ۵۰



شکل۵: نمودار احتمال جفت شدن دو مولکول پلیمری برای سختی خمشی ۱۰۰

نتیجه گیری

نتایج شبیه‌سازی‌ها به‌طور کلی نشان می‌دهند که انعطاف‌پذیری پلیمرها تأثیر چشم‌گیری بر رفتار تجمعی آنها دارد. به‌ویژه، کاهش سختی خمشی موجب افزایش احتمال جفت شدن و تجمع دو زنجیره پلیمر می‌شود. این یافته‌ها می‌توانند در طراحی پلیمرهایی با ویژگی‌های خاص و انعطاف‌پذیری بالا برای کاربردهای صنعتی و بیولوژیکی مفید باشند. در نتیجه، این نتایج می‌توانند به طراحی مواد جدید با خواص بهینه و خاص در صنعت مواد نانو، داروسازی و سایر صنایع مشابه کمک کنند.

مرجع‌ها

[۱] Emamyari, s, Mirzaei, M, Mohammadineiad, S, Fazli, D, & Fazli, H. (2023) Impact of flexibility on the aggregation of polymeric macromolecules. The European physical Journal E (Springer), Article 324.

[۲] Rubinstein, M. a. (2003). Polymer Physics. New York: Oxford University Press.

[۳] Nelson, P. C. (2003). Biological Physics: Energy, Information, Life. New York: W. H. Freeman.

[۴] Phillips, R, Kondev, J, Theriot, J, & Garcia, H. G. (2012). Physics Biology of the cell. New York: Garland Science.

مایعِ ناهم‌تنیده‌یِ کوانتومیِ وارونه در نردبان اسپینی دو پا

نجف‌زاده، هانیه[۱]؛ لنگری، عبدالله[۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

چکیده

دینامیک درهم‌تنیدگی را در یک نردبان اسپینی دوپا، با برهم‌کنش‌های ناهمسانگرد بررسی می‌کنیم؛ به‌گونه‌ای که برهم‌کنش XY در امتداد پاها و برهم‌کنش آیزینگ بین دو پا اعمال شده است. با شکستن شدید تقارن بین دو پا — و اختصاص دادن دینامیک سریع به یکی از پاها و دینامیک بسیار آهسته به دیگری— سیستمی می‌سازیم که در آن درجات آزادیِ اسپینیِ سبک و سنگین دینامیک تعادلیِ کاملاً متفاوتی از خود نشان می‌دهند. به‌طرز شگفت‌انگیزی، در غیاب هرگونه بی‌نظمی، ما شاهد ظهور فازی از مایع ناهم‌تنیده‌ی کوانتومی وارونه هستیم، که در آن اسپین‌های سبک هم‌دما می‌شوند، در حالی که اسپین‌های سنگین تا بازه‌های زمانی طولانی غیرارگودیک باقی می‌مانند. این رفتار در تضادّ کامل با حالت‌های متداول QDL است که در آن معمولاً ذرّات سنگین به سرعت هم‌دما می‌شوند. این مدل یک سیستم با برهم‌کنش و بدون بی‌نظمی است که دینامیک درهم‌تنیدگی آن توسّط یائو [۱] بررسی شده است و اصطلاحاً آن را شبهِ–جایگزیدگیِ بس‌ذرّه‌ای نامیده است. نتایج ما سازوکار دینامیک فوق را شرح می‌دهد که صرفاً از نامتقارن بودن دینامیکی درون‌سیستم پدید می‌آید و این مسیر جدیدی برای بررسی فازهای غیرارگودیک در سیستم‌هایِ کوانتومیِ تمیز فراهم می‌آورد.

واژگان کلیدی: *مایعِ ناهم‌تنیده‌ی کوانتومی، دینامیکِ درهم‌تنیدگی، شبه–جایگزیدگیِ بس‌ذرّه‌ای، هم‌دما شدن، جایگزیدگیِ بدون بی‌نظمی، دینامیکِ غیرتعادلی*

Reversed Quantum Disentangled Liquid Behavior in a Two-Leg Spin Ladder System

Hanieh Najafzadeh [1]; Abdollah Langari[1]

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

Abstract

We investigate the entanglement dynamics of a clean, translation-invariant two-leg spin ladder with anisotropic interactions: XY coupling along the legs and Ising interactions across the rungs. By introducing a strong dynamical asymmetry between the two legs—assigning fast dynamics to one leg and parametrically slower dynamics to the other—we construct a setting in which light and heavy spin degrees of freedom exhibit sharply contrasting thermal behavior. In the absence of any quenched disorder, we observe a reversed quantum disentangled liquid (QDL) regime: the light spins thermalize, while the heavy spins remain non-ergodic over extended timescales. This dynamical separation stands in direct contrast to conventional QDL scenarios, where heavy particles typically thermalize first. The model represents a fully interacting, disorder-free system whose entanglement dynamics has previously been studied by [1]*, which has been associated with quasi-many-body localization (quasi-MBL). Our results elucidate a mechanism by which non-ergodic behavior emerges purely from internal dynamical asymmetry, offering a new pathway for exploring slow relaxation and memory retention in clean quantum systems.*

Keywords*: Quantum Disentangled Liquid, Entanglement Dynamics, Quasi-Many-Body Localization, Thermalization, Disorder-Free Localization, Out-of-Equilibrium Quantum Dynamics*

مقدمه

رفتار دینامیکی سیستم‌های کوانتومی بسته در شرایطی که به تعادل گرمایی نمی‌رسند، موضوعی بنیادین در فیزیک مادّه‌ی چگال مدرن است. آندرسون نشان داد که بی‌نظمی می‌تواند از انتشار موج و انتقال انرژی جلوگیری کند[۲] . در سال‌های اخیر، این مفهوم با در نظر گرفتن برهم‌کنش، به جایگزیدگی بس‌ذرّه‌ای[۶۵] گسترش یافته است [۳] و به‌طور تجربی نیز مشاهده شده است [٤]، که در آن سیستم حافظه‌ی حالت اوّلیّه را حفظ می‌کند. از سوی دیگر، مفهوم مایعِ ناهم‌تنیده‌ی کوانتومی[۶۶] معرّفی شده است که در آن تنها بخشی از درجات آزادی هم‌دما می‌شوند و بقیّه‌ی آن‌ها در وضعیّت اوّلیّه باقی می‌مانند [۵]. در این مقاله، ما ساختاری ارائه‌شده در مرجع [۱] را مطالعه می‌کنیم که نسخه‌ای وارونه از QDL را نشان می‌دهد: در آن، اسپین‌های سبک هم‌دما می‌شوند، در حالی که اسپین‌های سنگین غیرارگودیک باقی می‌مانند. این پدیده تنها ناشی از تفاوت در دینامیک اجزای سیستم است. با معرّفی روش تشخیص فاز QDL ، حالت سیستم در یک زمان دلخواه را مطالعه می‌کنیم و خصوصیات دینامیک درجات آزادیِ مختلف را توصیف می‌کنیم.

مدل نردبان اسپینی

در این پژوهش، یک سیستم نردبانی شامل دو زنجیره‌ی اسپینی بررسی می‌شود که از طریق برهم‌کنش‌های کوانتومی به یک‌دیگر متصّل شده‌اند. هر زنجیره از اسپین‌های $\frac{1}{2}$ تشکیل شده است، به‌طوری که زنجیره‌ی پایینی شامل اسپین‌های S (سبک) و زنجیره‌ی بالایی شامل اسپین‌های σ (سنگین) می‌باشد. برهم‌کنش‌ها در امتداد زنجیره‌ها از نوع XY و بین دو زنجیره از نوع آیزینگ در راستای z در نظر گرفته می‌شوند.

هامیلتونی سیستم به‌صورت زیر تعریف می‌شود [۱]:

$$H = J\sum_i \left(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y\right) + J'\sum_i \left(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y\right) + J_z \sum_i S_i^z \sigma_i^z \qquad (1)$$

که در آن پارامترهای جفت‌شدگی برابرند با:

$$J = 1, \qquad J' = 0/001, \qquad J_z = 10$$

شرایط مرزی سیستم **دوره‌ای** در نظر گرفته شده‌است.

قابل توجّه است که سیستم به‌طور کامل تمیز، انتقال‌ناوردا و فاقد هرگونه بی‌نظمی خارجی است.

روش تشخیص فاز QDL

برای تشخیص فاز QDL در سیستم‌های شامل دو زیرسیستمِ سبک و سنگین، از روش‌هایی مبتنی بر محاسبه‌ی آنتروپی درهم‌تنیدگی شرطی استفاده می‌شود. در این روش، زنجیره‌ی سنگین (مثلاً اسپین‌های σ) در پیکربندی‌های مختلف اندازه‌گیری می‌شود و سپس آنتروپی درهم‌تنیدگی زیرسیستم سبک (اسپین‌های S) در هر یک از این پیکربندی‌ها بررسی می‌گردد.

در گام نخست، ویژه‌بردار انرژی حالت سیستم به صورت تابعی از هر دو زیرسیستم تعریف می‌شود:

[۶۵] Many-Body Localization(MBL)

[66] Quantum Disentangled Liquids(QDL)

$$H\left|\psi^{(m)}(S,\sigma)\right\rangle = E_m\left|\psi^{(m)}(S,\sigma)\right\rangle \qquad (2)$$

که در آن m اندیس حالت انرژی است.

برای تحلیل ساختار درهم‌تنیدگی، ابتدا پیکربندی خاص $\chi_l(\sigma)$ از زیرسیستم سنگین(زنجیره‌ی σ) را درنظر می‌گیریم. در این شرایط، حالت ویژه‌ی کلّیِ سیستم به حالت مؤثّر روی فضای هیلبرت زیرسیستمِ سبک (زنجیره‌ی S) فرافکنی[۶۷] می‌شود:

$$\left|\psi_p^{(m)}(S,\sigma)\right\rangle_l = \sum_i C_{i,l}^{(m)}\ \left|\Phi_i(S)\right\rangle \qquad (3)$$

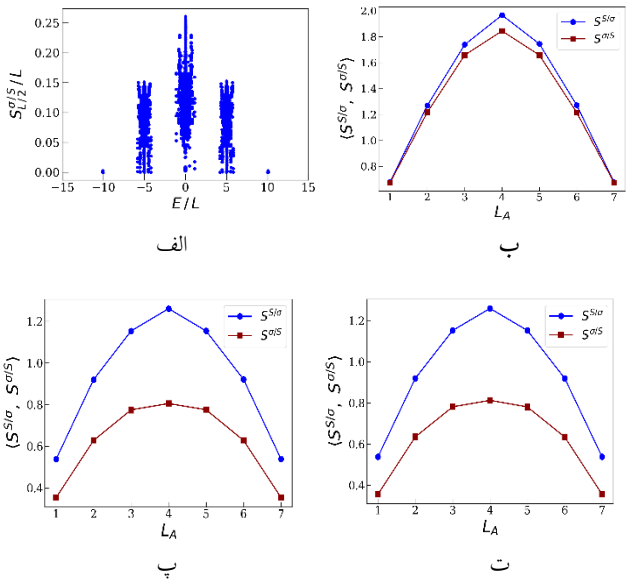
در این رابطه؛ $\left|\Phi_i(S)\right\rangle$ ، بردارهای پایه‌ی فضای هیلبرت زنجیره‌ی سبک هستند (یعنی تمام پیکربندی‌های ممکن برای اسپین‌های S)، ضریب $C_{i,l}^{(m)}$ وزن پیکربندی $\left|\Phi_i(S)\right\rangle$ در حالتِ ویژه‌ی کلّیِ $\left|\psi^{(m)}(S,\sigma)\right\rangle$ ، وقتی پیکربندی σ در حالت $\chi_l(\sigma)$ ثابت شده، را نشان می‌دهد. سپس برای هر پیکربندی مشخّص شده، آنتروپی درهم‌تنیدگی زیرسیستم A (زیرمجموعه‌ای از S) محاسبه می‌شود:

$$S_{A,l}^{(m)} = -Tr_A\left(\rho_{A,l}^{(m)}\ln\rho_{A,l}^{(m)}\right) \qquad (4)$$

که در آن، $\rho_{A,l}^{(m)}$ ماتریس چگالی کاهش‌یافته‌ی حالت فرافکنی‌شده است. آنتروپی نهایی، با میانگین‌گیری روی همه‌ی پیکربندی‌های ممکنِ σ و وزن‌دهی با احتمال $P_{l,\sigma}^{(m)}$ به‌دست می‌آید:

$$S_A^{S/\sigma}(m) = \sum_l P_{l,\sigma}^{(m)}\ S_{A,l}^{(m)} \qquad (5)$$

در حالت QDL، انتظار می‌رود که برای یک پیکربندی مشخّص شده‌ی زیرسیستم سنگین، آنتروپی درهم‌تنیدگی زیرسیستم



شکل ۱ : الف- توزیع آنتروپی درهم‌تنیدگی برای حالت‌های ویژه‌ی انرژی برحسب انرژی بهنجارشده. این نمودار سه باند انرژی متمایز را نشان می‌دهد که هرکدام دارای رفتار آماری متفاوت در آنتروپی هستند. این جدایش انرژی-درهم‌تنیدگی مبنایی برای تحلیل میانگین آنتروپی در باندهای مختلف فراهم می‌سازد. ب- میانگین آنتروپی درهم‌تنیدگی در باند میانی. هر دو منحنی $\left\langle S_A^{S/\sigma}\right\rangle$ و $\left\langle S_A^{\sigma/S}\right\rangle$ افزایش مشابهی را نشان می‌دهند که بیانگر رفتار هم‌دما در این ناحیه است. پ- میانگین آنتروپی درهم‌تنیدگی $\left\langle S_A^{S/\sigma}\right\rangle$ و $\left\langle S_A^{\sigma/S}\right\rangle$ در باند سمت چپ نمودار انرژی. تفاوت قابل توجه بین دو منحنی، نشانه‌ی فاز QDL –وارونه در این باند است. ت- میانگین آنتروپی درهم‌تنیدگی در باند سمت راست. مشابه با باند چپ، جدایش بین دو نوع آنتروپی حفظ شده که نشان‌دهنده‌ی باقی‌ماندQDL – وارونه در این ناحیه است.

[۶۷] Projection

سبک از قانون مساحت[۶۸] پیروی کند. در مقابل، آنتروپی کلّیِ سیستم (یا در صورت جابه‌جایی S و σ) می‌تواند از قانون حجم[۶۹] پیروی کند. این تفاوت در الگوی رشد درهم‌تنیدگی، نشانه‌ای از **عدم توازن در روند هم‌دما شدن زیرسیستم‌های سبک و سنگین** بوده و شاخصی از حضور فاز QDL به‌شمار می‌آید.

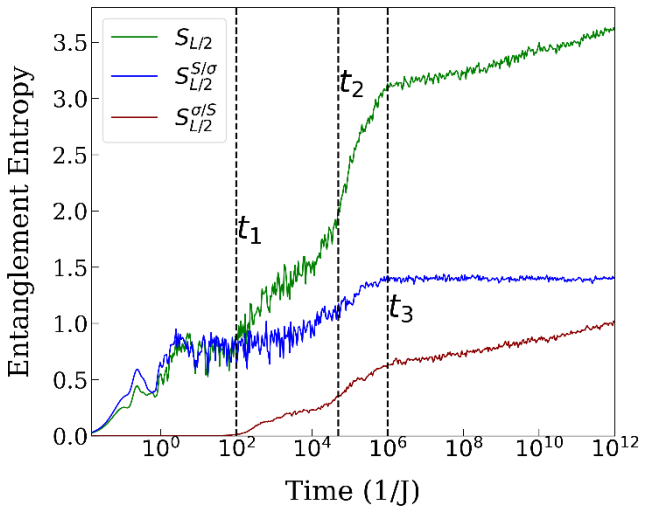
لازم به ذکر است که فرآیند فرافکنی و محاسبه‌ی آنتروپی، صرفاً محدود به مشخّص‌کردن پیکربندی زیرسیستم سنگین (σ) نیست. در واقع، می‌توان همین روش را به‌طور متقارن با فیکس‌کردن پیکربندی‌های زنجیره‌ی سبک (S) نیز انجام داد.

برای بررسی دقیق‌تر رفتار QDL وارونه در مدل مورد مطالعه، آنتروپی درهم‌تنیدگی حالت‌های ویژه را برحسب انرژی بهنجارشده‌ی آن‌ها ترسیم کرده‌ایم (شکل ۱). همان‌طور که مشاهده می‌شود، طیف انرژی به سه باند مشخّص تقسیم می‌شود که هرکدام الگوی آماری متفاوتی از درهم‌تنیدگی را نشان می‌دهند. در ضمن از حالت‌های نزدیک به لبه‌ی باند که در دینامیک بلندبرد سهم اندکی دارند، صرف‌نظر شده است. به‌منظور تحلیل تفکیکی، آنتروپی میانگین درهم‌تنیدگی در هر باند به‌طور جداگانه برای مقادیر مختلف طول زیرسیستم L_A محاسبه شده و در شکل‌های ۱.ب تا ۱.ت نمایش داده شده‌اند.

نتایج نشان می‌دهند که در باندهای انرژی پایین و بالا (شکل‌های پ و ت)، منحنی‌های $\left\langle S_A^{\sigma/S} \right\rangle$ و $\left\langle S_A^{S/\sigma} \right\rangle$ اختلاف قابل‌ملاحظه‌ای دارند؛ بدین معنا که یکی از زنجیره‌ها به حالت هم‌دما(قانون حجم) می‌رسد، در حالی که دیگری در وضعیت غیرهم‌دما(قانون مساحت) باقی می‌ماند. این نشانه‌ی روشنی از وجود فاز QDL –وارونه در این باندهاست. در مقابل، در باند میانی (شکل ۱. ب)، دو منحنی تقریباً برهم منطبق‌اند و هر دو زیرسیستم رفتار هم‌دما از خود نشان می‌دهند.

برای بررسی نرخ رشد درهم‌تنیدگی میان زیرسیستم‌های سبک و سنگین، آنتروپی درهم‌تنیدگی را در طول تحوّل زمانی بررسی کرده‌ایم (شکل ۲). همان‌طور که مشاهده می‌شود، در ابتدا (تا حوالی t_1 رشد مشابهی در همه‌ی منحنی‌ها دیده می‌شود، که مربوط به فاز اوّلیّه‌ی گسترش درهم‌تنیدگی است. پس از آن، آنتروپی زنجیره‌ی سبک $S_{L/2}^{S/\sigma}$ به‌سرعت رشد کرده و حوالی t_2 به ناحیه‌ی اشباع می‌رسد. در مقابل، زنجیره‌ی سنگین $S_{L/2}^{\sigma/S}$ تا زمان t_3 تقریباً در سطح بسیار پایینی باقی می‌ماند و پس از آن تنها رشد بسیار کندی دارد.

این تفکیک زمانی میان دو زیرسیستم، نشانه‌ی بارز **فاز QDL – وارونه** است که در آن، اسپین‌های سبک با وجود برهم‌کنش با سیستم، به حالت هم‌دما می‌رسند، در حالی‌که اسپین‌های سنگین برای بازه‌ی زمانی بسیار طولانی در وضعیّت غیرهم‌دما باقی می‌مانند. این رفتار در غیاب هرگونه بی‌نظمی خارجی مشاهده شده و نتیجه‌ی مستقیم نابرابری دینامیکی ذاتی در مدل است.



[۶۸] Area-law

[۶۹] Volume-law

شکل۲ : تحوّل زمانی آنتروپی درهم‌تنیدگی برای سیستم نردبانی با پارامترهای $J = 1,\ J' = 0/001,\ J_z = 10$ ، و شرایط مرزی دوره‌ای. منحنی سبز نشان‌دهنده‌ی آنتروپی درهم‌تنیدگی کلّی سیستم برای نصف زنجیره است. منحنی آبی، $S_{L/2}^{S/\sigma}$ ، آنتروپی زنجیره‌ی سبک (S) برای پیکربندی مشخّص‌شده‌ی اسپین‌های سنگین (σ) و منحنی قرمز، $S_{L/2}^{\sigma/S}$ ، برعکس آن را نشان می‌دهد. زمان‌های مشخص‌شده با t_1 ، t_2 و t_3 به‌ترتیب زمان شروع رشد لگاریتمی، اشباع زیرسیستم سبک، و آغاز رشد تدریجی زیرسیستم سنگین را مشخّص می‌کنند. جدایش زمانی میان دو زیرسیستم نشانه‌ی روشنی از وجود فازQDL – وارونه است.

نتیجه گیری

در این پژوهش، ما ظهور فازی وارونه از مایع ناهم‌تنیده‌ی کوانتومی را در یک سیستم کاملاً تمیز و انتقال‌ناوردا، بدون هیچ‌گونه بی‌نظمی، شناسایی و بررسی کردیم. این فاز، برخلاف ساختار کلاسیک QDL، در شرایطی شکل می‌گیرد که **زیرسیستم سبک کاملاً هم‌دما می‌شود، در حالی که زیرسیستم سنگین برای زمان‌های طولانی در وضعیّت غیرهم‌دما باقی می‌ماند.** این پدیده که ما آن را QDL –وارونه می‌نامیم، تنها از طریق شکستن شدید تقارن دینامیکی میان دو زنجیره حاصل می‌شود و نیازی به هیچ‌گونه بی‌نظمی فضایی یا اختلال خارجی ندارد.

رفتار آنتروپی درهم‌تنیدگی، چه در مقیاس زمانی و چه در طیف حالت‌های انرژی، به‌روشنی ساختار QDL –وارونه را تأیید می‌کند. رشد سریع و اشباع‌شده‌ی آنتروپی زنجیره‌ی سبک، در کنار ماندگاری پایین آنتروپی زنجیره‌ی سنگین، هم در زمان و هم در میانگین‌گیری روی باندهای انرژی، گویای جدایش پایدار در روند هم‌دما شدن زیرسیستم‌هاست.

اهمیّت QDL –وارونه تنها در وارونگی ساختار کلاسیک آن خلاصه نمی‌شود. این فاز مفهومی، چالشی جدّی برای دیدگاه‌های سنّتی در مورد هم‌دمایی در سیستم‌های بسته ایجاد می‌کند. در حالی که QDL مرسوم بر پایه‌ی «اختلال مؤثّر» ناشی از ذرّات کند بنا شده، QDL–وارونه نشان می‌دهد که **حتّی درجات آزادی دینامیکی می‌توانند با حفظ نظم درونی خود، مانع از هم‌دمایی کامل کلّ سیستم شوند.** به بیان دیگر، **دینامیکِ نابرابر می‌تواند به‌تنهایی نقش بی‌نظمی را ایفا کند.**

از منظر کاربردی، این پدیده بستری نوین برای مطالعه‌ی گذارهای هم‌دمایی، نگهداری اطلاعات کوانتومی و طرّاحی سیستم‌های مقاوم در برابر آشوب باز می‌کند. در آینده، بررسی این فاز در مدل‌های چندزنجیره‌ای، سیستم‌های جفت‌شده به محیط، یا حتّی شبیه‌سازی آن در پلتفرم‌های اتم سرد می‌تواند افق‌های تازه‌ای در درک مادّه‌ی کوانتومی خارج از تعادل بگشاید.

سپاسگزاری

این پژوهش تحت حمایت مادی بنیاد ملی علم ایران(INSF) با طرح شماره‌ی ۴۰۳۷۰۵۰ انجام شده است.

مرجع‌ها

[1] N. Yao, C. Laumann, J. Cirac, . M. Lukin and J. Moore, "Quasi-Many-Body Localization in Translation-Invariant Systems," *Physical review letters,* p. 240601, 2016.

[2] P. W. Anderson, "Absence of Diffusion in Certain Random Lattices," *Phys. Rev.,* pp. 1492--1505, 1958.

[3] D. A. Huse, R. Nandkishore and V. Oganesyan, "Phenomenology of fully many-body-localized systems," *Phys. Rev. B,* vol. 90, p. 174202, 2014.

[4] M. Schreiber, . S. S. Hodgman, P. Bordia, H. P. Lüschen, M. H. Fischer, R. Vosk, E. Altman, U. Schneider and I. Bloch, "Observation of many-body localization of interacting fermions in a quasirandom optical lattice," *Science,* vol. 349, p. 842–845, 2015.

[5] T. Grover and . M. P. A. Fisher, "Quantum disentangled liquids," *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment,* vol. 2014, p. P10010, 2014.

هندسه ترمودینامیکی دو اسپین کوپل‌شده از طریق همیلتونی‌های مختلف ایزینگ

نیره عینعلی سقاواز[1]؛ حسین محمدزاده، مرتضی نطاق نجفی، زهرا عبادی[2و3]

[1] گروه فیزیک، دانشگاه محقق اردبیلی،اردبیل

چکیده

در پژوهش حاضر، به بررسی هندسه ترمودینامیکی سیستم‌های متشکل از دو اسپین جفت‌شده تحت تأثیر همیلتونی‌های مختلف ایزینگ پرداخته می‌شود. در گام نخست، فضای پارامترهای ترمودینامیکی سیستم مورد نظر ساخته شده و متعاقباً، عناصر متریک‌های مربوطه محاسبه می‌گردند. در ادامه، تغییرات ساختارهای هندسی این سیستم‌ها با اعمال تغییرات در پارامترهای سیستم، از جمله ثابت‌های جفت‌سازی و میدان‌های مغناطیسی خارجی، مورد تحلیل دقیق قرار می‌گیرند. نتایج حاصله نمایانگر آن است که مدل‌های مختلف ایزینگ، ویژگی‌های متمایزی را در فضای پارامترهای ترمودینامیکی از خود بروز می‌دهند که این ویژگی‌ها به طور مستقیم به علامت انحنای ترمودینامیکی سیستم وابسته می‌باشند. یافته‌های این مطالعه، ضمن ارائه درکی عمیق‌تر از رفتار ترمودینامیکی ماکروسکوپی ناشی از تعاملات میکروسکوپی اسپین‌ها، چارچوبی نوظهور برای تحلیل سیستم‌های پیچیده ترمودینامیکی فراهم می‌آورند.

واژگان کلیدی: *هندسه ترمودینامیکی ، مدل ایزینگ،انحنای اسکالر*

Thermodynamic geometry of two coupled spins via various Ising Hamiltonians

Nayyere Einali Saghavaz, Hosein Mohammadzadeh, Zahra Ebadi, Morteza Nattagh Najafi

1Department of Physics, University of Mohaghegh Ardabili, P.O. Box 179, Ardabil

Abstract

We investigate the thermodynamic geometry of systems composed of two coupled spins governed by different Ising Hamiltonians. We construct the thermodynamic parameters space and evaluate the related metrics elements and analyze how these geometric structures change with variations in system parameters, such as coupling constants and external magnetic fields. We show that different models exhibit distinct features in thermodynamic parameters space based on the sign of thermodynamic curvature.

These insights refine our understanding of the macroscopic thermodynamic behavior emerging from microscopic spin interactions.

Keywords*: thermodynamic geometry ,curvature, Ising model*

مقدمه

در این مقاله، هندسه ترمودینامیکی سیستم‌های متشکل از دو اسپین جفت‌شده تحت مدل‌های ایزینگ عادی، عرضی و مورب مورد

مطالعه قرار می‌گیرد. مدل ایزینگ، به عنوان یکی از سنگ‌بناهای فیزیک ماده چگال و مکانیک آماری، ابزاری کارآمد برای توصیف گذارهای فازی و رفتارهای بحرانی فراهم می‌کند [۳–۱]. در حوزه سیستم‌های کوانتومی، تحلیل مدل‌هایی با تعداد محدود اسپین، همچون سیستم‌های دو یا سه اسپینی، بینشی ارزشمند نسبت به گذارهای فاز کوانتومی ارائه کرده است[٤].هندسه ترمودینامیکی، نخستین‌بار توسط وین‌هولد و سپس توسط روپاینر توسعه یافت [٥،٦]، و روشی نوین برای تحلیل رفتار سیستم‌های ترمودینامیکی از منظر هندسی فراهم کرد. در این رویکرد، ویژگی‌هایی نظیر انحنای اسکالر با نوسانات ترمودینامیکی و نقاط بحرانی ارتباط می‌یابند [۷].در این پژوهش، سه نسخه از مدل ایزینگ –عادی، عرضی و مورب تحلیل شده و تأثیر میدان مغناطیسی خارجی، به‌ویژه زاویه‌ی میدان در مدل مورب، بر ویژگی‌های ترمودینامیکی سیستم بررسی می‌شود. با استفاده از محاسبات دقیق و چارچوب هندسه ترمودینامیکی، انحنای فضای پارامتری برای هر مدل به دست آمده و اثر نوع تعامل و شرایط خارجی بر ویژگی‌های سیستم مورد ارزیابی قرار می‌گیرد [۸].

مدل ایزینگ

مدل ایزینگ، که نخستین بار در سال ۱۹۲۵ توسط ارنست ایزینگ برای توصیف رفتار مواد فرومغناطیسی ارائه شد یکی از مدل‌های بنیادی در مکانیک آماری محسوب می‌شود. در این مدل، هر اسپین می‌تواند دو حالت ممکن (+۱ یا –۱) اختیار کند و معمولاً در ساختارهای شبکه‌ای منظم سازماندهی می‌شود. ویژگی‌های ترمودینامیکی چون مغناطش، انرژی داخلی و ظرفیت گرمایی بر اساس این مدل قابل محاسبه‌اند. مطالعات نشان داده‌اند که مدل ایزینگ در بعد یکم (d=1) فاقد گذار فازی در دماهای غیرصفر است، در حالی که در ابعاد بالاتر امکان گذار فاز فرومغناطیسی وجود دارد. همیلتونی این مدل به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$H= -J \sum_{<ij>} S_i S_j - h \sum_i S_i.$$

که در آن J ثابت جفت‌شدگی و h میدان مغناطیسی خارجی است. بسته به علامت J، سیستم می‌تواند رفتار فرومغناطیسی (J>0) یا آنتی‌فرومغناطیسی (J<0) از خود نشان دهد.

تابع پارش

تابع پارش (Z) ابزاری کلیدی در مکانیک آماری و کوانتومی برای تعیین خواص ترمودینامیکی سیستم‌هاست. تعریف کلی آن به صورت زیر ارائه می‌شود:

$$Z=\mathrm{Tr}\, e^{-BH}.$$

که در آن H هامیلتونی سیستم و $\beta = \frac{1}{K_B T}$ است، جایی که K_B ثابت بولتزمن و T دمای سیستم است. انرژی آزاد هلمهولتز (A)، از رابطه‌ی $A = -K_B T \ln Z$ قابل محاسبه بوده و اطلاعات جامعی درباره قابلیت انجام کار توسط سیستم فراهم می‌کند.

بررسی مدل‌های ایزینگ: طولی، عرضی و مورب

مدل ایزینگ طولی شامل جفت‌سازی اسپین‌ها با یک میدان طولی است که با جهت اسپین‌ها هم‌راستا می‌باشد [۹]. این مدل در حضور میدان خارجی گذار فازی از فاز پارامغناطیسی به فاز فری مغناطیسی را نشان می‌دهد و در دماهای بالا و پایین رفتار متفاوتی دارد [۱۰]. هامیلتونی آن در یک بعد برای دو اسپین جفت‌شده در امتداد جهت z به‌صورت زیراست.

$$H = -J S_1^z S_2^z - h (S_1^z + S_2^z)$$

و با استفاده از تابع پارش سیستم، ویژگی‌های ترمودینامیکی آن تحلیل می‌شود.

$$Z= e^{\beta J-2\beta h} + e^{\beta J+2\beta h}+2e^{-\beta J}$$

مدل ایزینگ عرضی، نسخه‌ی کوانتومی توسعه‌یافته‌ای از مدل کلاسیک ایزینگ است که به‌منظور بررسی رفتار سیستم‌های اسپینی در حضور میدان مغناطیسی عرضی معرفی شده است. در این مدل، اسپین‌ها در راستای z با یکدیگر اندرکنش دارند و همزمان تحت تأثیر یک میدان مغناطیسی در راستای x قرار می‌گیرند. هامیلتونی این سیستم برای دو اسپین جفت‌شده در معادله زیر تعریف می‌شود:

$$H = -J\, S_1^Z\, S_2^Z - h\,(S_1^X + S_2^X)$$

وجود میدان عرضی منجر به وقوع گذار فاز کوانتومی در دمای صفر می‌شود، که طی آن سیستم از حالت فرومغناطیسی منظم به فاز پارامغناطیسی کوانتومی بی‌نظم تغییر می‌یابد. تابع پارش مربوط به این مدل در معادله زیر ارائه شده است:

$$Z = 2\cos\left(\sqrt{(\beta J)^2 + 4\,(\beta h)^2}\,\right) + 2\cos(\beta J)$$

این تابع امکان تحلیل ویژگی‌های ترمودینامیکی و کوانتومی مدل را در حضور نوسانات کوانتومی فراهم می‌سازد.

مدل مورب تعمیمی از مدل ایزینگ است که در آن اسپین‌ها تحت تأثیر میدانی با مؤلفه‌های طولی و عرضی نسبت به جهت برهم‌کنش قرار می‌گیرند. بردار میدان مغناطیسی به صورت زیر تعریف می‌شود

$$h = h\sin(\alpha)\,\hat{\imath} + h\cos(\alpha)\,\hat{k}$$

h دامنه‌ی میدان و α زاویه‌ی بین میدان و محور z می‌باشد. هامیلتونی این مدل به شکل زیر ارائه می‌شود

$$H = -J\, S_1^Z\, S_2^Z - h\,\sin(\alpha)\,(S_1^X + S_2^X) - h\cos(\alpha)\,(S_1^Z + S_2^Z)$$

و تعامل بین اسپین‌ها را در حضور میدان مغناطیسی توصیف می‌کند. این مدل گذار پیوسته‌ای بین فازهای مغناطیسی مختلف را امکان‌پذیر می‌سازد؛ به گونه‌ای که در α= 0 به مدل ایزینگ طولی و در α = π/2 به مدل ایزینگ عرضی فروکاسته می‌شود. تحلیل مقادیر ویژه ومحاسبه تابع پارش به درک ویژگی‌های ترمودینامیکی و کوانتومی این مدل کمک می‌کند، به‌ویژه در مطالعه‌ی تغییر نظم مغناطیسی تحت تأثیر تغییرات زاویه میدان.

ترمودینامیک هندسی

مفهوم هندسه در ترمودینامیک با معرفی متریک‌هایی چون متریک وین‌هولد و روپاینردیدگاه جدیدی برای تحلیل ویژگی‌های تعادلی سیستم‌های فیزیکی فراهم کرده است. متریک وین‌هولد بر اساس مشتقات دوم انرژی داخلی و متریک روپاینر بر مبنای مشتقات دوم آنتروپی نسبت به متغیرهای گسترده تعریف می‌شوند. همچنین متریک فیشر–رائو، بر پایه مشتقات دوم لگاریتم تابع پارش نسبت به پارامترهای شدت ترمودینامیکی، ساختار فضای آماری سیستم را توصیف می‌کند. با استفاده از این متریک‌ها، می‌توان تانسور ریچی و در نتیجه انحنای اسکالر (R) را محاسبه کرد که اطلاعاتی درباره پایداری سیستم و موقعیت گذارهای فازی فراهم می‌آورد.

خمیدگی ترمودینامیکی اسپین‌های جفت شده

این بخش به بررسی خمیدگی ترمودینامیکی دو اسپین جفت‌شده، بر اساس مدل‌های ارائه‌شده در بخش قبلی، اختصاص دارد. در این راستا، عناصر متریک مدل طولی به صورت زیر محاسبه شده‌اند:

$$= \frac{8\left(e^{4y}+1\right)e^{2(x+y)}}{\left(e^{2x+4y}+e^{2x}+2e^{2y}\right)^2} g_{xx} = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial x^2}$$

$$\frac{8\left(e^{4y}-1\right)e^{2(x+y)}}{\left(e^{2x+4y}+e^{2x}+2e^{2y}\right)^2} g_{xy} = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial x \partial y} =$$

$$= \frac{8(2e^{2(x+y)}+e^{4y}+1)e^{2(x+y)}}{(e^{2x+4y}+e^{2x}+2e^{2y})^2} g_{yy} = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial y^2}$$

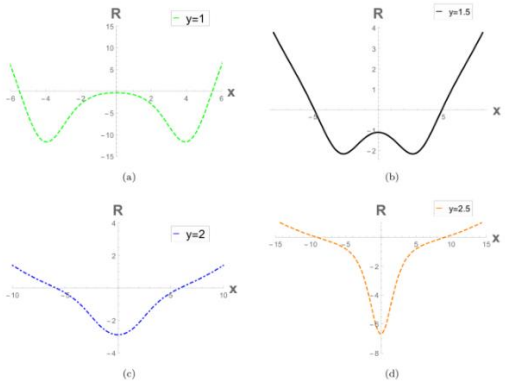
که در آن، x=βJ و y =βh به ترتیب پارامترهای ترمودینامیکی هستند. برای فضای دوبعدی، خمیدگی ترمودینامیکی R با استفاده از رابطه ساده زیر به دست می‌آید:

$$R = -\frac{\begin{vmatrix} g_{xx} & g_{xy} & g_{yy} \\ g_{xx,x} & g_{xy,x} & g_{yy,x} \\ g_{xx,y} & g_{xy,y} & g_{yy,y} \end{vmatrix}}{2\begin{vmatrix} g_{xx} & g_{xy} \\ g_{yx} & g_{yy} \end{vmatrix}^2}$$

که در آن، برای نمونه، gxx,x مشتق gxx نسبت به x است.که خمیدگی ترمودینامیکی این مدل به صورت زیر محاسبه شده:

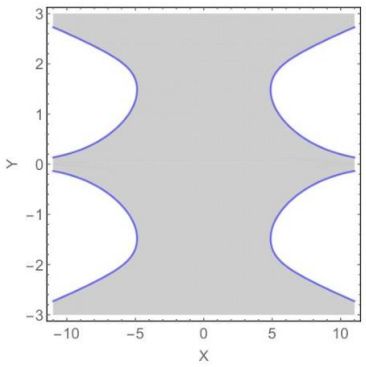
$$R=\frac{1}{2}$$

این خمیدگی در تمام بازه‌های فیزیکی پارامترهای مدل ، (Jوh) مقداری مثبت و ثابت دارد. بر اساس مطالعات پیشین مثبت بودن خمیدگی ترمودینامیکی نشان‌دهنده وجود برهم‌کنش‌های آماری جاذبه‌ای ذاتی در سیستم است.



شکل۱: نمایش رفتار ترمودینامیکی و ضریب کوپلینگ مدل عرضی برای مقادیر مختلف میدان خارجی

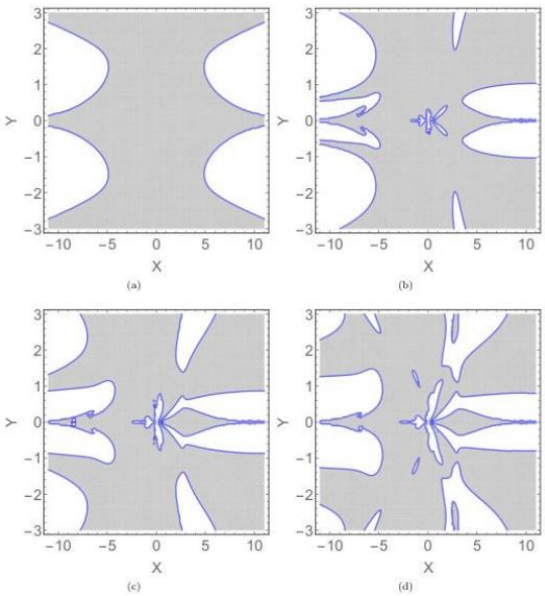
در مدل ایزینگ عرضی، مشابه مدل طولی، عناصر متریک و رابطه مربوط به خمیدگی ترمودینامیکی محاسبه می‌شود که از ارائه‌ی صریح آن صرف نظر شده و رفتار آن به صورت نموداری تحلیل شده است. در شکل ۱، خمیدگی ترمودینامیکی به عنوان تابعی از x=βJ و y=β برای مقادیر ثابت ترسیم شده است. نتایج نشان می‌دهدکه دوناحیه با علامت‌های مخالف برای خمیدگی ترمودینامیکی ظاهر می‌شود؛ به طوری که برای میدان مغناطیسی خارجی ثابت، مقدار مشخصی از ثابت کوپلینگ، x_0، وجود دارد که در آن خمیدگی ترمودینامیکی صفر می‌شود. برای $x< x_0$، مقدار خمیدگی منفی و برای $x> x_0$، مثبت است. همچنین، رفتار خمیدگی ترمودینامیکی نسبت به تغییر علامت J متقارن است.



شکل۲: ناحیه های با خمیدگی ترمودینامیکی مثبت ومنفی برحسب xوy

در شکل ۲، علامت خمیدگی ترمودینامیکی به عنوان تابعی از x و yنشان داده شده است؛ به‌طوری‌که نواحی تاریک (روشن) به ترتیب به نواحی با خمیدگی منفی (مثبت) مربوط می‌شوند. این نتایج بیانگر آن است که رفتار کلی خمیدگی ترمودینامیکی در مدل عرضی به طور چشمگیری با مدل طولی متفاوت است. در حالی که در مدل طولی خمیدگی ترمودینامیکی یک مقدار ثابت مثبت دارد، در مدل عرضی دو ناحیه‌ی متمایز در فضای پارامترهای هامیلتونی مشاهده می‌شود .ناحیه با خمیدگی مثبت به تعاملات درون‌سیستمی جاذب ذاتی، و ناحیه با خمیدگی منفی به تعاملات دافعه ذاتی مربوط

می‌شود. در مدل مورب، مقادیر ویژه‌ی هامیلتونی به صورت توابع پیچیده‌ای از پارامترهای x و y و α به‌دست می‌آیند. اگرچه محاسبه‌ی تابع پارش بر مبنای این مقادیر ویژه امکان‌پذیر است، اما به دلیل طولانی بودن، از ارائه‌ی صریح آن صرف‌نظر می‌شود. مؤلفه‌های متریک و در ادامه خمیدگی ترمودینامیکی محاسبه شده‌اند. شکل (۳) تغییر علامت خمیدگی را برحسب x و y برای مقادیر مختلف α نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل ۳ (a)مشاهده می‌شود، برای α=π/2 مدل مورب به مدل ایزینگ عرضی بازمی‌گردد و ساختار دوگانه‌ی نواحی با خمیدگی مثبت و منفی تکرار می‌شود. با کاهش α، نواحی دارای خمیدگی مثبت گسترش یافته و سرانجام در تمام فضای پارامترها غالب می‌شوند. این رفتار نشان می‌دهد که تغییر جهت میدان مغناطیسی می‌تواند باعث گذار از نواحی دارای برهم‌کنش‌های دافعه به نواحی با برهم‌کنش‌های جاذبه ذاتی شود.



شکل۳: نمای برهمکنش ثابت جفت‌شدگی ومیدان مغناطیسی برروی خمیدگی ترمودینامیکیدر مدل مورب برای مقادیر مختلف α.(الف) α=π/2،.(ب) α=π/3،.(ج) α=π/4،و (د) α=π/6،نواحی روشن بیانگرخمیدگی مثبت ونواحی تیره نشان دهنده خمیدگی منفی هستند.

نتیجه گیری

در این پژوهش، هندسه‌ی ترمودینامیکی سامانه‌های اسپین جفت‌شده تحت انواع همیلتونی‌های ایزینگ بررسی شد. نشان داده شد که تغییرات در پارامترهای برهم‌کنش، مانند شدت کوپلینگ و میدان مغناطیسی خارجی، ساختار هندسی فضای پارامترهای ترمودینامیکی را تحت تأثیر قرار می‌دهد. به طور خاص، علامت خمیدگی ترمودینامیکی به عنوان شاخصی از نوع برهم‌کنش‌های آماری ذاتی (جاذبه یا دافعه) شناسایی گردید. مدل طولی همواره برهم‌کنش‌های جاذبه را نشان می‌دهد، در حالی که مدل عرضی و مورب رفتار پیچیده‌تری با نواحی جاذبه و دافعه دارند. این نتایج ارتباط عمیقی میان ویژگی‌های میکروسکوپی و ساختارهای ماکروسکوپی ترمودینامیکی برقرار کرده و مسیر را برای مطالعات آینده در شبکه‌های اسپینی پیچیده‌تر و سامانه‌های کوانتومی هموار می‌سازند.

مرجع‌ها

[۱] Feynman, R. P. (2018). Statistical mechanics: a set of lectures. CRC press.

[۲] Landau, L. D., & Lifshitz, E. M. (2013). Course of theoretical physics. Elsevier.

[۳] Parkinson, J. B., & Farnell, D. J. (2010). An introduction to quantum spin systems (Vol. 816). Springer.

[۴] Abd-Rabbou, M. Y., Rahman, A. U., Yurischev, M. A., & Haddadi, S. (2023). Comparative study of quantum Otto and Carnot engines powered by a spin working substance. Physical Review E, 108(3), 034106.

[۵] Weinhold, F. (1975). Metric geometry of equilibrium thermodynamics. The Journal of Chemical Physics, 63(6), 2479-2483.

[۶] Ruppeiner, G. (1979). Thermodynamics: A Riemannian geometric model. Physical Review A, 20(4), 1608.

[۷] Ruppeiner, G. (1995). Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory. Reviews of Modern Physics, 67(3), 605.

[۸] Silva, E. V., de Souza, S. M., Rojas, O., Skea, J. E., & Thomaz, M. T. (2008). The spin-1/2 ising model with skew magnetic field at high temperatures. Brazilian Journal of Physics, 38, 123-130.

[۹] Jaeger, G. (1998). The Ehrenfest classification of phase transitions: introduction and evolution. Archive for history of exact sciences, 53, 51-81.

[۱۰] Onsager, L. (1944). Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. Physical review, 65(3-4), 117.

سیمای فاز توپولوژیک در سامانه هیبریدی مبتنی بر ابررسانای آهن‌پایه: رهیافت محاسبه عدد چرن در فضای حقیقی

صحرایی، احمد؛ حشمتی، مریم؛ مشکوری، مهدی

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیر الدین طوسی، تهران

چکیده

سامانه هیبریدی مبتنی بر ابررساناهای نامتعارف یک بستر غنی و مناسب برای مهندسی ابررسانایی توپولوژیک در دماهای بالا را فراهم می‌آورد. پژوهش‌های انجام شده در مورد سامانه هیبریدی مبتنی برای مجاورت ابررسانای آهن‌پایه و یک لایه با برهم‌کنش اسپین-مدار قوی نشان از ابررسانایی توپولوژیک با حفظ تقارن وارون زمان دارد. در این مقاله با در نظر گرفتن ویژگی کلیدی این سامانه در القای جفت‌شدگی $s\pm$ -wave توسط ابررسانای آهن‌پایه و افزودن اثر شکستن تقارن وارون زمانی از طریق برهم‌کنش زیمان به بررسی سیمای فاز توپولوژیک در لایه میانی می‌پردازیم. بررسی فازهای توپولوژیک این سامانه نشان می‌دهد که ترکیب سه مؤلفه‌ی ابررسانایی، برهم‌کنش مغناطیسی و اسپین-مدار، منجر به ظهور فازهای توپولوژیک مختلفی با اعداد چرن متمایز می‌شود. عدد چرن با استفاده از روش‌های عددی در فضای حقیقی محاسبه شده و نشان داده شده است که افزایش جفت‌شدگی ابررسانایی در همسایه اول باعث توسعه فازهای توپولوژیک با عدد چرن مثبت و کاهش مساحت فاز توپولوژیک با عدد چرن منفی می‌شود. این نتایج زمینه‌ای را برای مطالعه پایداری فازهای توپولوژیک در حضور بی‌نظمی و با محاسبه در فضای حقیقی فراهم می‌کنند.

واژگان کلیدی: *ابررسانای آهن‌پایه، سامانه هیبریدی، عدد چرن، ابررسانای توپولوژیک*

Topological Phase Diagram of a Hybrid Strucutre Based on Iron-Based Superconductor: A Real-Space Chern Number Approach

Sahrayi, Ahmad ; Heshmati, Maryam ; Mashkoori, Mahdi

Department of Physics, K.N. Toosi University of Technology, Tehran

Abstract

The hybrid-structure based on unconventional superconductors provides a rich and suitable platform for engineering topological superconductivity at high temperatures. Previous studies on a hybrid-structure consisting of an iron-based superconductor and a strong spin-orbit coupled semiconductor have demonstrated topological superconductivity while preserving time-reversal symmetry. In this work, considering the key feature of proximity inducing $s_{\pm}$-wave pairing through the iron-based superconductor and Zeeman interaction, we examine the topological phase diagram in the intermediate layer. The investigation of the topological phases of this system reveals that the combination of three components—superconductivity, magnetic interaction, and spin-orbit coupling—leads to the emergence of distinct topological phases characterized by different Chern numbers. The Chern number is evaluated using numerical methods in real space, and it is shown that increasing superconducting pairing to the nearest neighbor, expands topological phases for positive Chern numbers while compressing those with negative

Chern numbers. These findings paves the way for studying the stability of topological phases in the presence of disorder using real-space topolgical markers.

***Keywords**: Iron-based supercondcutor, Hybrid-strucutre, Chern number, Topological superconductivity*

مقدمه

ابررساناهای غیرمتعارف، به‌ویژه ابررساناهای آهن‌پایه به دلیل غنای فضای فاز از یک‌سو و گاف انرژی ناهمسانگرد با تقارن s±-wave از سوی دیگر در کانون توجه پژوهشگران فیزیک ماده چگال قرار دارد[۱,۲]. در عین حال فازهای ابررسانایی توپولوژیک با در نظر گرفتن پتانسیل بهره‌گیری در محاسبات کوانتومی و همچنین غنای فیزیک نظری و آزمایشگاه مورد توجه زیادی قرار گرفته است[۳,٤]. این فازهای توپولوژیک می‌توانند حالت‌های لبه‌ای کایرال را پشتیبانی کنند، که کاربردهای بالقوه‌ای در محاسبات کوانتومی و اسپینترونیک دارند. علیرغم پیشرفت‌های سریع، ساخت وتایید تجربی ابررساناهای توپولوژیک و شبه‌ذرات مایورانا همچنان یکی از زمینه‌های پژوهشی فعال با انبوهی از پرسش‌ها و مسائلی است که نیاز به بررسی دارد[۵]. به عنوان مثال، به لحاظ نظری فازهای توپولوژیکی با ناورداهایی مانند عدد چرن طبقه‌بندی می‌شوند که قاعدتا ویژگی ساختار نواری ماده به حساب می‌آید. به این معنی با در نظر گرفتن تقارن انتقالی و بهره‌گیری از قضیه بلاخ می‌توان این ویژگی توده‌ی ماده را در فضای وارون محاسبه کرد. اما در عین حال توجه به محاسبه اندیس‌های توپولوژیک در فضای حقیقی به خصوص در حضور ناخالصی و بی‌نظمی که باعث شکستن تقارن انتقالی در سامانه می‌شود، در چند سال اخیر اهمیت یافته است[٦]. در این مقاله ما با بهره‌گیری از روشی نوین در محاسبه‌ی عدد چرن در فضای حقیقی به بررسی سامانه‌ای مبتنی بر مجاورت ابررسانای آهن‌پایه و یک لایه‌ی با برهم‌کنش اسپین مدار قوی می‌پردازیم[۷]. این سامانه پیش‌تر به عنوان کاندیدای ابررسانای توپولوژیک با حفظ تقارن وارون زمان مورد بررسی قرار گرفته و ابررسانایی توپولوژیک رتبه‌ی ۱ و رتبه ۲ در آن پیش‌بینی شده است [۸,۹]. در اینجا با در نظرگرفتن برهم‌کنش مغناطیسی تقارن وارون زمان شکسته شده و عدد چرن را در فضای حقیقی با بهره‌گیری از کتابخانه *TBTK* محاسبه می‌کنیم[۱۰]. انجام محاسبه اندیس‌های توپولوژیک در فضای حقیقی، به عنوان ابزاری موضعی، کمک شایان توجهی برای فهم بهتر گذارفازهای توپولوژیک به خصوص در حضور بی‌نظمی و ناخالصی پیش‌روی پژوهشگران قرار می‌دهد [۱۱,۱۲].

فازها می‌توانند حالت‌های لبه‌ای کایرال را پشتیبانی کنند، که کاربردهای بالقوه‌ای در محاسبات کوانتومی و اسپینترونیک دارند. در این پژوهش، ما خواص توپولوژیکی یک ابررسانای s±-wave را با استفاده از مدل تنگا-بست روی یک شبکه مربعی دوبعدی بررسی می‌کنیم و بر محاسبه عدد چرن به عنوان معیاری برای شناسایی فازهای کوانتومی متمایز تمرکز داریم.

مدل و روش عددی

در این مقاله مطابق شکل زیر به بررسی سامانه‌ای هیبریدی متشکل از یک ابررسانای نامتعارف آهن‌پایه، یک لایه با برهم‌کنش اسپین-مدار قوی و یک لایه مغناطیسی می‌پردازیم.

شکل ۵. نمای شماتیک از سامانه هیبریدی متشکل از ابررسانای آهن پایه

ویژگی مهم این سامانه هیبریدی در این است که ابررسانای آهن‌پایه جفت‌شدگی *s±-wave* را در لایه‌ی میانه به صورت اثر مجاورت القا می‌کند. همچنین لایه مغناطیسی با القای برهم‌کنش زیمان باعث

شکستن تقارن وارون زمان در لایه‌ی میانی می‌گردد. وجود سه مولفه‌ی ابررسانایی، مغناطیسی و برهم‌کنش اسپین–مدار در لایه‌ی میانی باعث پدیدار شدن ابررسانایی توپولوژیک در این سامانه می‌گردد. همیلتونی موثر تنگابست در این لایه‌ی میانی عبارت است از:

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i,j,\sigma}\left(t_{ij}c^{\dagger}_{j\sigma}\,c_{i\sigma} + \Delta_{ij}c^{\dagger}_{i\sigma}\,c^{\dagger}_{j\bar{\sigma}}\right) - \lambda\sum_{i,\eta=\pm}\eta c^{\dagger}_{i,\uparrow}\left(c_{i-\eta\hat{x},\downarrow} - ic_{i-\eta\hat{y},\downarrow}\right) + H.C. + J\sum_{i\alpha\beta}c^{\dagger}_{i\alpha}\left(\vec{S}_i\cdot\vec{\sigma}_{\alpha\beta}\right)c_{i\beta} \quad (۱)$$

که عملگرهای c و $c^{\dagger}$ نشان دهنده عملگرهای خلق و فنا فرمیونی در لایه‌ی میانی هستند. اندیس $\boldsymbol{i}$ در این همیلتونی نمایانگر یک نقطه در شبکه‌ی مربعی به صورت $\boldsymbol{i} = (i_x, i_y)$ است. در این همیلتونی به ازای $\boldsymbol{i} = \boldsymbol{j}$ مقادیر $\Delta_{ij} = \Delta_0$ و $t_{ij} = \mu$ بوده که μ نشان‌دهنده پتانسیل شیمیایی و Δ_0 نشان دهنده جفت‌شدگی در یک نقطه شبکه است. همچنین پارامتر پرش و جفت‌شدگی به همسایه‌ی اول محدود می‌شود، لذا به ازای $\langle \boldsymbol{i},\boldsymbol{j}\rangle$ خواهیم داشت $t_{\langle i,j\rangle} = t$ و $\Delta_{\langle i,j\rangle} = \Delta_1$. حضور همزمان Δ_0 و Δ_1 به معنی پدیدار شدن ابررسانایی *extended s-wave* در این سامانه می‌گردد. به علاوه پارامتر λ نشان‌دهنده قدرت برهم‌کنش اسپین–مدار است. لازم به توضیح است در صورتیکه لایه مغناطیسی نظم فرومغناطیس داشته باشد، برهم‌کنش موثر به شکل جداشدگی زیمان در لایه‌ی میانی پدیدار شده و با پارامتر J در همیلتونی نشان داده می‌شود.

فازهای متمایز ابررسانایی توپولوژیکی که در این سامانه پدیدار می‌شوند، با عدد چرن به عنوان اندیس توپولوژیک قابل شناسایی خواهند بود. به این منظور عموما با در نظر گرفتن رفتار توپولوژیک ساختار نواری توده‌ی ماده، عدد چرن بر اساس همیلتونی در فضای وارون محاسبه می‌گردد. اما در حضور بی‌نظمی تقارن انتقالی در سامانه شکسته شده و نمی‌توان با استفاده از قضیه بلاخ همیلتونی را در فضای وارون در نظر گرفت. در چنین شرایطی بهره‌مندی از اندیس‌های توپولوژیک در فضای حقیقی بسیار مغتنم خواهد بود.

برای محاسبه‌ی عدد چرن در فضای حقیقی از رابطه زیر استفاده می‌شود:

$$C = \frac{1}{2\pi i}Tr\left(\boldsymbol{P}\left[\partial_x\boldsymbol{P}, \partial_y\boldsymbol{P}\right]\right) \quad (۲)$$

که در این عبارت ماتریس تصویر به صورت:

$$\boldsymbol{P} = \sum_{\boldsymbol{n}\in \boldsymbol{occupied}}|\psi_n\rangle\langle\psi_n| \quad (۳)$$

تعریف شده و تصویر بر روی حالت‌های اشغال‌شده را به دست می‌دهد. همچنین که در آن $\left[\partial_x\boldsymbol{P}, \partial_y\boldsymbol{P}\right]$ جابه‌جاگر مشتقات عملگر تصویر نسبت به x و y است. در فرمول شماره (۲) مشتقات $\partial_x\boldsymbol{P}$ و $\partial_y\boldsymbol{P}$ با استفاده از روش مبتنی بر تبدیل فوریه محاسبه می‌شوند:

$$\partial_w\boldsymbol{P} = \sum_{m=-Q}^{+Q} c_m\left(e^{-2\pi i m\,\hat{w}/N_w}P\,e^{2\pi i m\,\hat{w}/N_w}\right) \quad (۴)$$

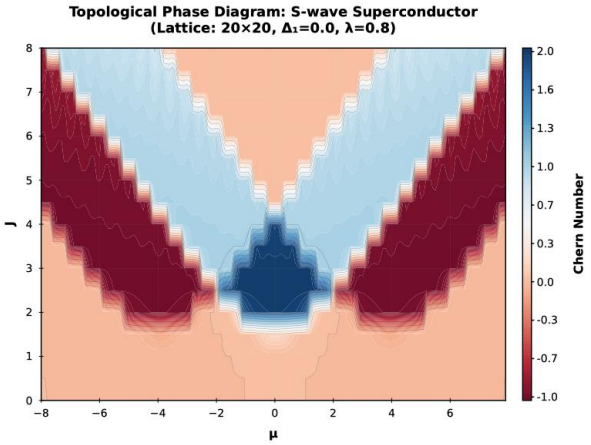
که $w = x, y$ است. برای محاسبه این مشتقات لازم است که ضرایب c_m از حل معادله ماتریسی $Ac = b$ به‌دست می‌آیند. در این معادله $\mathrm{A_{ij}} = 2\mathrm{j}^{2\mathrm{i}-1}$ و $b_i = \delta_{i,j}$ تعریف می‌شوند. می‌آیند[۴].

محاسبات عددی با بهره‌گیری از کتابخانه محاسباتی TBTK انجام شده‌اند، که ابزاری قدرتمند برای شبیه‌سازی سیستم‌های کوانتومی پیچیده فراهم می‌کند [۲]. محاسبات عددی بر روی یک شبکه مربعی دوبعدی با شرایط مرزی دوره‌ای و ابعاد $N_x \times N_y$ انجام می‌شود. محاسبات برای $N_x = N_y = 20$, $\Delta_0 = 0.8$ و $\lambda = 0.6$ انجام شده است.

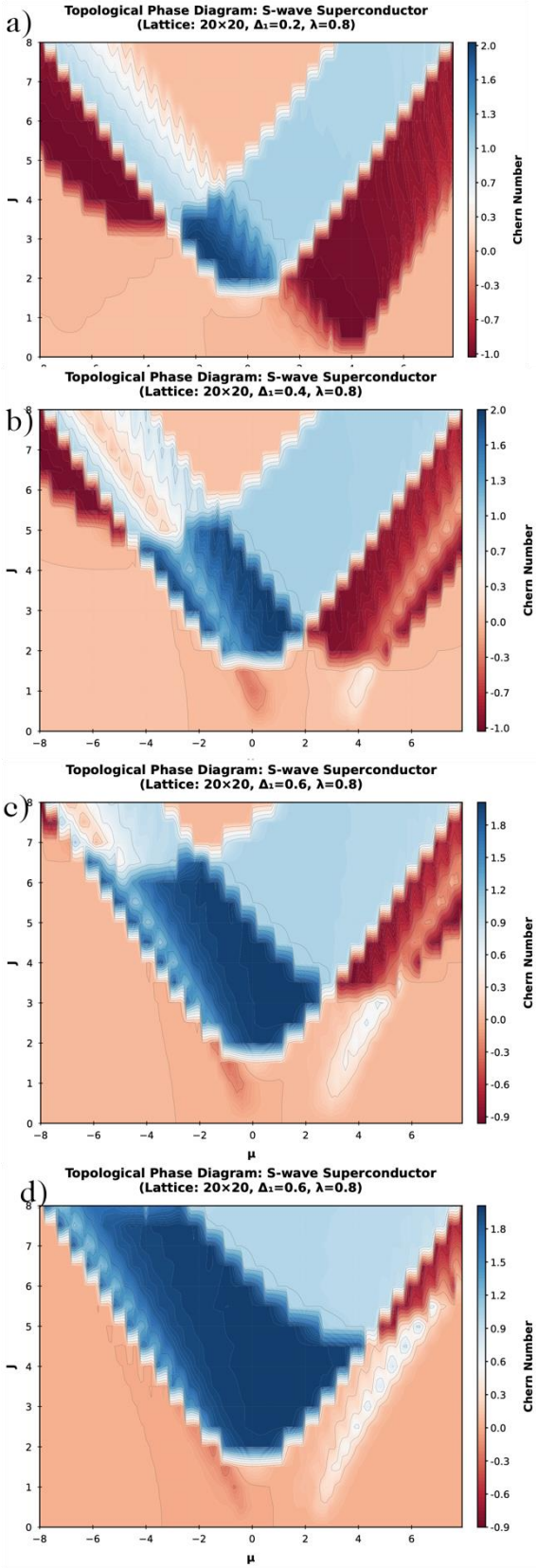
سیمای فاز

از آن‌جایی هدف این مقاله بررسی اثر حضور ابررسانای آهن‌پایه بر روی سیمای فاز توپولوژیک این سامانه‌ی هیبریدی است، ابتدا فرض می‌کنیم که ابررسانای متعارف *s-wave* در اختیار داریم؛ یعنی $\Delta_1 = 0$. سیمای فاز این سامانه در شکل ٦ نشان داده شده است. در این شکل محور افقی پتانسیل شیمیایی و محور عمودی بزرگی برهم‌کنش مغناطیسی است. همانطور که مشاهده می‌شود، سه فاز توپولوژیک با عددهای چرن $C = -1, +1, +2$ و یک فاز بدیهی $C = 0$ در سیمای فاز ظاهر می‌شود.

در این حالت سیمای فاز نسبت به خط $\mu = 0$ متقارن بوده و ناحیه‌ی آبی تیره، آبی روشن و قرمز رنگ به ترتیب فازهای مربوط به عدد چرن ۲+، ۱+ و ۱− را نشان می‌دهد. از آن‌جایی که حضور ابررسانای آهن‌پایه در این سامانه هیبریدی منجر به ظاهر شدن $\Delta_1 \neq 0$ می‌شود به صورت گام به گام این پارامتر را افزایش داده و در هر گام پس از محاسبه عدد چرن به ازای $\mu \in [-8,8]$ و $J \in [0,8]$ سیمای فاز مطابق شکل ۷ حاصل می‌شود. همان‌گونه که در این شکل ملاحظه می‌شود مقدار Δ_1 در پنل (a-d) از ۰.۲ به ۰.۸ افزایش یافته است. با افزایش پارامتر جفت‌شدگی ابررسانایی مربوط به همسایه‌اول Δ_1 ملاحظه می‌شود که تقارن سیمای فاز نسبت به خط $\mu = 0$ از بین می‌رود. همچنین مساحت ناحیه توپولوژیک با عدد چرن ۲+ و ۱+ افزایش یافته در حالی که ناحیه با عدد چرن ۱− فشرده می‌شود.



شکل ٦سیمای فاز توپولوژیک سامانه هیبریدی به ازای $\Delta_1 = 0$. محور افقی نمایشگر پتانسیل شیمیایی و محور عمودی نمایشگر برهم‌کنش مغناطیسی است.



شکل ۷ سیمای فاز توپولوژیک سامانه هیبریدی به ازای $\Delta_1 = 0.2,0.4,0.6,0.8$ محور افقی نمایشگر پتانسیل شیمیایی و محور عمودی نمایشگر برهم‌کنش مغناطیسی است.

نتیجه گیری

در این مقاله به بررسی سیمای فاز سامانه متشکل از یک ابررسانای آهن‌پایه با تقارن s±wave، یک لایه‌ی با برهم کنش اسپین–مدار قوی و یک لایه‌ی مغناطیسی می‌پردازم. ابتدا هملیتونی موثر این سامانه در تقریب تنگابست در یک شبکه مربعی دوبعدی را معرفی نموده و برای بررسی خواص توپولوژیک آن، عدد چرن به عنوان یک ناوردای توپولوژیکی کلیدی برای شناسایی فازهای توپولوژیکی محاسبه می‌کنیم. ضمن توضیح سیمای فازی غنی این سامانه نشان می‌دهیم که سه فاز توپولوژیک با اعداد چرن ۲+، ۱+ و ۱– در کنار فاز بدیهی پدیدار می‌شود. همچنین با افزایش گام به گام جفت‌شدگی ابررسانایی بین همسایه اول مشاهده می‌کنیم فاز مربوط به عدد چرن ۲+ و ۱+ توسعه یافته و فاز مربوط به عدد چرن ۱– فشرده می‌گردد. محاسبه‌ی عدد چرن در فضای حقیقی زمینه را برای بررسی پایداری این فازهای توپولوژیک با حضور بی‌نظمی فراهم می‌کند که این موضوع در پژوهش‌های آتی مورد مطالعه قرار خواهد گرفت.

مرجع‌ها

[1] Dagotto, Elbio. "Correlated electrons in high-temperature superconductors." *Reviews of Modern Physics* **66**, no. 3 (1994): 763.

[2] Paglione, Johnpierre, and Richard L. Greene. "High-temperature superconductivity in iron-based materials." *Nature physics* **6**, no. 9 (2010): 645.

[3] Hasan, M. Zahid, and Charles L. Kane. "Colloquium: topological insulators." *Reviews of modern physics* **82**, no. 4 (2010): 3045.

[4] Qi, Xiao-Liang, and Shou-Cheng Zhang. "Topological insulators and superconductors." *Reviews of modern physics* **83**, no. 4 (2011): 1057.

[5] Sato, Masatoshi, and Yoichi Ando. "Topological superconductors: a review." *Reports on Progress in Physics* **80**, no. 7 (2017): 076501

[6] Chen, Wei. "Universal topological marker." *Physical Review B* **107**, no. 4 (2023): 045111.

[7] Mascot, Eric, Jasmin Bedow, Martin Graham, Stephan Rachel, and Dirk K. Morr. "Topological superconductivity in skyrmion lattices." *npj Quantum Materials* **6**, no. 1 (2021): 6.

[8] Zhang, Fan, C. L. Kane, and E. J. Mele. "Time-reversal-invariant topological superconductivity and Majorana Kramers pairs." *Physical review letters* **111**, no. 5 (2013): 056402

[9] Wang, Qiyue, Cheng-Cheng Liu, Yuan-Ming Lu, and Fan Zhang. "High-temperature Majorana corner states." *Physical review letters* **121**, no. 18 (2018): 186801.

[10] K. Björnson; "TBTK: A quantum mechanics software development kit"; *SoftwareX* **9** (2019) 205-210.

[11] Mashkoori, Mahdi, Fariborz Parhizgar, Stephan Rachel, and Annica M. Black-Schaffer. "Detrimental effects of disorder in two-dimensional time-reversal invariant topological superconductors." *Physical Review B* **107**, no. 1 (2023): 014512

[12] Mashkoori, Mahdi, A. G. Moghaddam, M. H. Hajibabaee, Annica M. Black-Schaffer, and Fariborz Parhizgar. "Impact of topology on the impurity effects in extended s-wave superconductors with spin-orbit coupling." *Physical Review B* **99**, no. 1 (2019): 014508.

پذیرفتاری دینامیکی زنجیره سو–شریفر–هیگر: اثرات برهم‌کنش بلندبرد

محمدی، سپیده؛ ابویی، جهانفر

دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، زنجان ۶۶۷۳۱-۴۵۱۳۷، ایران

چکیده

زنجیره توپولوژیک سوشریفرهیگر یک عایق توپولوژیک یک‌بعدی شناخته شده است که بدلیل وجود پرشهای متناوب (بین سلولی و درون سلولی) می‌تواند یک حالت توپولوژیک داشته باشد. در حضور برهم‌کنشهای بلندبرد فازهای گوناگون دیگری نیز در دیاگرام فاز حالت پایه سامانه مشاهده می‌شوند که از جمله می‌توان به فاز مایع غیرفرمی توپولوژیک در پرشدگی‌های صحیح $n=1, 2$ اشاره کرد. جهت درک ماهیت این فازها پذیرفتاریِ دینامیکی اسپینی و بار را مطالعه می‌کنیم. نتایج ما نشان می‌دهد در پرشدگی ۱ پذیرفتاری دینامیکی صفر است اما در فازهای با پرشدگی غیرصحیح و پرشدگی صحیح ۲، مقداری غیرصفرِ وابسته به بسامد و بردار موج اختلال خارجی دارد. پذیرفتاری دینامیکی ارتباط مستقیم دارد با اطلاعات کوانتومی فیشر (کیواف‌آی) که معیاری از درهم‌تنیدگی چندبخشی در سامانه است. بررسی رفتار کیواف‌آی نشان می‌دهد که این کمیت در فازهای با پرشدگی یکسان، ثابت است. در فازهای با پرشدگی صحیح مستقل از بردار موج میدان خارجی اعمالی است در حالیکه در ناحیه با پرشدگی غیرصحیح شدیدا به بردار موج بستگی دارد که منعکس کننده درهمتنیدگی متغیر در فازهای مختلف است.

Dynamical Susceptibility of SSH chain: Effects of Long-Range Interaction

Mohamadi, Sepide; Abouie, Jahanfar

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

Abstract

The topological Su-Schrieffer-Heeger (SSH) chain is a paradigmatic one-dimensional topological insulator characterized by alternating intra- and inter-cell hopping amplitudes, which give rise to distinct topological phases. When long-range interactions are incorporated, the ground-state phase diagram broadens to include additional phases, such as the topological non-Fermi liquid (TNFL) phase at integer fillings n = 1, 2. To elucidate the nature of these phases, we analyze the spin and charge dynamical susceptibilities. Our findings indicate that at filling n = 1, the dynamical susceptibility vanishes, whereas at 1 < n < 2 and n = 2, the susceptibilities exhibit non-zero, frequency- and wave vector-dependent responses. The dynamical susceptibility is directly related to the quantum Fisher information (QFI), which quantifies multipartite entanglement within the system. The QFI remains constant in phases with uniform filling; specifically, at n = 1 and n = 2, it is independent of the wave vector of the external field, while in the 1 < n < 2 regime, it shows a strong dependence on the wave vector, reflecting the varying entanglement structure across different phases.

مقدمه

زنجیره سو-شریفر-هیگر (اس‌اس‌اچ) یک عایق توپولوژیک یک بعدی است که مطالعات زیادی روی فازهای آن انجام شده است. اخیرا نشان داده شده است که در حضور پرش‌های بلندبرد هاتسوگای-کوهموتو (اچ‌کی)[۱] فازهای گوناگونی در دیاگرام فاز زنجیره اس‌اس‌اچ دیده می‌شود که از جمله می‌توان به مایع غیرفرمی توپولوژیک اشاره کرد [۲]. مایع غیرفرمی حالتی از سامانه‌های الکترونی همبسته قوی است که نظریه مایع فرمی در توضیح رفتارهای پیچیده آن ناتوان است. مایع غیرفرمی توپولوژیک دیده شده در زنجیره برهم‌کنشی اس‌اس‌اچ ویژگیهای منحصر بفردی دارد که از جمله می توان به شبه ذرات متفاوت و قطبش الکتریکی، اشاره کرد [۲]. با این حال هنوز خصوصیات این فاز بطور کامل برای ما روشن نیست و نیازمند درک عمیقتری از این فاز هستیم. برای این منظور رفتار همبستگی‌های کوانتومی موجود در توابع پاسخ فازهای مختلف زنجیره اس‌اس‌اچ-اچ‌کی را مطالعه می‌کنیم.

درهم‌تنیدگی یکی از مفاهیم بنیادی اطلاعات کوانتومی است [۳-۵] که هم‌بستگی‌های غیرکلاسیکیِ بخشهای مختلف یک سامانه کوانتومی را توصیف می‌کند و ابزاری مناسب برای شناخت فازهای کوانتومی نوظهور و گذار فازهای توپولوژیک است [۶]. اطلاعات کوانتومی فیشر (کیواف‌آی) معیاری از درهم‌تنیدگی چندبخشی است که منعکس کننده رفتار درهمتنیدگی در گذار فازهای کوانتومی است [۷، ۸]. مزیت کیواف‌آی نسبت به سایر سنجه ها این است که می‌توان آن را به‌طور مستقیم از توابع پاسخ قابل اندازه‌گیری مانند پذیرفتاری دینامیکی استخراج کرد، و این امر آن را به ابزاری مفید در بررسی فازهای کوانتومی تبدیل کرده است [۹].

پذیرفتاری دینامیکی در چارچوب نظریه پاسخ خطی تعریف می‌شود و توصیف می‌کند که چگونه یک سیستم کوانتومی در برابر میدان مغناطیسی خارجیِ نوسانی واکنش نشان می‌دهد. پذیرفتاری دینامیکی به‌صورت ترکیبی از توابع گرین تعریف می‌شود و می‌توان از آن برای تحلیل رفتار سیستم در شرایط مختلف استفاده کرد [۱۰].

در این مقاله رفتار پذیرفتاری دینامیکی اسپین و بارالکتریکی و در نتیجه کیواف‌آی را در فازهای مختلف زنجیره اس‌اس‌اچ-اچ‌کی بررسی می‌کنیم. نتایج ما نشان می‌دهد اطلاعات کوانتومی موجود در پذیرفتاریهای اسپین و بار شاخص خوبی برای تشخیص مایعهای غیرفرمی (توپولوژیک و بدیهی) با پرشدگیهای متفاوت است.

زنجیره اس‌اس‌اچ-اچ‌کی

زنجیره اس‌اس‌اچ یک شبکه‌ی یک بعدی است که هر سلول واحد آن از دو زیرشبکه‌ی a و b تشکیل شده است [۱۲، ۱۱]. در حضور برهم‌کنشهای بلندبرد هامیلتونی این زنجیره به صورت زیر نوشته می‌شود (شکل آ.۱، شماتیک این مدل است):

$$H = H_{SSH} + H_{HK}$$

$$H_{SSH} = \sum_{j,\sigma}\left(v\, a^{\dagger}_{j\sigma}\, b_{j\sigma} + w\, a^{\dagger}_{j+1\sigma}\, b_{j\sigma}\right) + h.c.,$$

$$H_{HK} = \frac{U}{N}\sum_{j_1,j_2,j_3,j_4} \delta_{j_1+j_3,j_2+j_4}(a^{\dagger}_{j_1\uparrow}a_{j_2\uparrow}a^{\dagger}_{j_3\downarrow}a_{j_4\downarrow} + b^{\dagger}_{j_1\uparrow}b_{j_2\uparrow}b^{\dagger}_{j_3\downarrow}b_{j_4\downarrow} + a^{\dagger}_{j_1\uparrow}a_{j_2\uparrow}b^{\dagger}_{j_3\downarrow}b_{j_4\downarrow}) \qquad (۱)$$

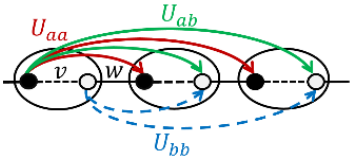
که h.c. بیانگر مزدوج مختلط، $a^{\dagger}_{j,\sigma}$ $(a_{j,\sigma})$ عملگر خلق(فنا) فرمیونی با اسپین σ در زیرشبکه a سلول j ام، و N تعداد سلولهای واحد است. جمله اول هامیلتونی، بیانگر پرش درون(بیرون) سلول به اولین همسایه نزدیک با قدرت v(w) است و جمله‌ی دوم هامیلتونی برهم‌کنش اچ‌کی است. هامیلتونی (۱) در فضای تکانه به شکل زیر بازنویسی می‌شود:

$$H = \sum_{k}\left(H_{SSH}(k) + H_{HK}(k)\right), \qquad (۲)$$

$$H_{SSH}(k)= \sum_{\sigma}\left(\epsilon_k a^{\dagger}_{k,\sigma} b_{k,\sigma} + h.c\right), \quad (۳)$$

$$H_{HK}(k)= U\left(\hat{n}^{a}_{k,\uparrow}\hat{n}^{a}_{k,\downarrow}+\hat{n}^{b}_{k,\uparrow}\hat{n}^{b}_{k,\downarrow}+\hat{n}^{a}_{k,\uparrow}\hat{n}^{b}_{k,\downarrow}\right), \quad (۴)$$

که در آن $\epsilon_k = v + w\, e^{ik}$ است.



شکل ۱: آ) شماتیک مدل اس‌اس‌اچ با برهم‌کنش‌های بلندبرد اچ‌کی. بردارهای قرمز، سبز و آبی رنگ، به ترتیب مربوط به برهم‌کنش بین ذرات نوع a، b و ab است.

دیاگرام فاز حالت پایه این مدل در مقاله [۲] مطالعه شده است. در این قسمت پذیرفتاری دینامیکی را مطالعه می‌کنیم.

پذیرفتاری دینامیکی

در نظریه‌ی پاسخ خطی، پاسخ یک سیستم به میدان خارجی ضعیف، با پذیرفتاری سیستم داده می‌شود. برای یک سیستم کوانتومی تحت تأثیر میدان مغناطیسی، پذیرفتاری مغناطیسی نحوه تغییرات مغناطش نسبت به میدان مغناطیسی خارجی را مشخص می‌کند.

به طور کلی، پذیرفتاری از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید [۱۱]:

$$\chi(t-t') = -i\theta(t-t')\langle[A(t),A(t')]\rangle, \quad (۷)$$

که در اینجا $\langle\cdots\rangle$ بیانگر متوسط روی حالت پایه است. اگر $A(t)$ عملگر چگالی اسپین $m(t) = \sum_{\sigma=\pm}\sigma a^{\dagger}_{\sigma}(r,t)a_{\sigma}(r,t)$ باشد پذیرفتاری همبستگی‌های اسپین–اسپین را نشان می‌دهد و در صورتی که $A(t)$ عملگر چگالی بار $n(t) = \sum_{\sigma} a^{\dagger}_{\sigma}(r,t)a_{\sigma}(r,t)$ باشد، پذیرفتاری همبستگی‌های بار–بار را نشان می‌دهد. این پذیرفتاری‌ها از روابط زیر بدست می‌آیند:

$$\chi_s(q,\tau) = -\frac{1}{N}\sum_{kk'} \quad (۸)$$

$$\langle T_\tau\left(a^{\dagger}_{\uparrow}(k+q,\tau)a_{\downarrow}(k,\tau)\right)\left(a^{\dagger}_{\downarrow}(k'-q,0)a_{\downarrow}(k',0)\right)\rangle$$

$$\chi_c(q,\tau) = -\frac{1}{N}\sum_{kk'\sigma} \quad (۹)$$

$$\langle T_\tau\left(a^{\dagger}_{\sigma}(k+q,\tau)a_{\sigma}(k,\tau)\right)\left(a^{\dagger}_{\sigma}(k'-q,0)a_{\sigma}(k',0)\right)\rangle.$$

هامیلتونی اس‌اس‌اچ–اچ‌کی در فضای تکانه یک عملگر موضعی است و بنابراین بطور دقیق می‌توان ویژه توابع و ویژه مقادیر آن را بدست آورد. این مزیتی است که بدلیل شکل خاص هامیلتونی برهم‌کنشیِ اچ‌کی به ما هدیه داده می‌شود. یکی دیگری از پیامدهای این موضوع معتبر بودن قضیه ویک حتی در حضور برهم‌کنش است. طبق قضیه ویک میانگین چهار عملگر فرمیونی را می‌توان به شکل حاصلضرب دو عملگر نوشت. براین اساس پذیرفتاری‌های اسپین و بار به شکل زیر ساده می‌شوند:

$$\chi_s^{xy}(q,\tau) = \frac{1}{N}\sum_{k}\langle T_\tau a_{\uparrow}(k+q,0)a^{\dagger}_{\uparrow}(k+q,\tau)\rangle \langle T_\tau a_{\downarrow}(k,\tau)a^{\dagger}_{\downarrow}(k,0)\rangle, \quad (۱۰)$$

$$\chi_c^{xy}(q,\tau) = \frac{1}{N}\sum_{k\sigma}\langle T_\tau a_{\sigma}(k+q,0)a^{\dagger}_{\sigma}(k+q,\tau)\rangle \langle T_\tau a_{\sigma}(k,\tau)a^{\dagger}_{\sigma}(k,0)\rangle, \quad (۱۱)$$

که برحسب تابع گرین $\left(G^{aa}_{\sigma} = -\langle T_\tau a_{\sigma}(k,\tau)a^{\dagger}_{\sigma}(k,\tau)\rangle\right)$ به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\chi_s^{xy}(q,\tau) = \frac{1}{N}\sum_{k} G^{xx}_{\uparrow}(k+q,-\tau)G^{yy}_{\downarrow}(k,\tau), \quad (۱۲)$$

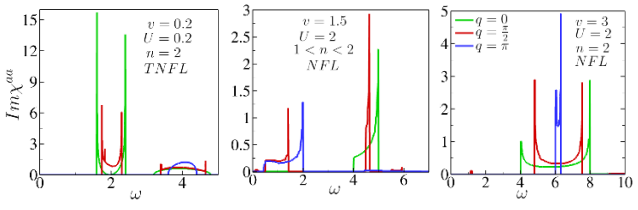
$$\chi_c^{xy}(q,\tau) = \frac{1}{N}\sum_{k,\sigma} G^{xx}_{\sigma}(k+q,-\tau)G^{yy}_{\sigma}(k,\tau)\,, \quad (۱۳)$$

در این‌جا، اندیسهای x و y، a یا b هستند.

محاسبه پذیرفتاری‌ها منوط به محاسبه توابع گرین است. پس از انجام تبدیل فوریه زمانی و محاسبه جمع ماتسوبارا، توابع گرین را از نمایش لهمن محاسبه می کنیم. (بدلیل طولانی بودن جزییات را نیاورده‌ایم.) با استفاده از توابع گرین بدست آمده پذیرفتاری اسپین و بار را بدست می‌آوریم. در هامیلتونی اس‌اس‌اچ–اچ‌کی (رابطه ۲)

هیچ جمله‌ای وجود ندارد که تعداد ذرات در زیرشبکه‌ها را تغییر دهد، بنابراین $\langle n^a_{k\sigma}\rangle - \langle n^b_{k\sigma}\rangle = 0$ که حالت پارامغناطیس است. در این حالت پذیرفتاری بار دو برابر پذیرفتاری اسپین است.

در شکل ۲، قسمت موهومی پذیرفتاری اسپینی زنجیره اس‌اس‌اچ-اچ‌کی را بر حسب بسامد و بردار موج میدان خارجی و به ازای پارامترهای مختلف رسم کرده‌ایم. به ازای $(U,v,w)=(0.2,0.2,1)$ پرشدگی $n=2$ بوده و زنجیره در فاز مایع غیرفرمی توپولوژیک است (شکل ۲ چپ). در این نمودار بیشترین مقدار پذیرفتاری مربوط به بردار موج صفر است. به ازای $(U,v,w)=(2,3,1)$ زنجیره در فاز مایع غیرفرمی با پرشدگی $n=2$ قرار دارد (شکل ۲ راست) [۲]. در این فاز پذیرفتاری دینامیکی در بازه‌ای از بسامدهای میدان غیرصفر است. پهنای این بازه و مقدار پذیرفتاری به بردار موج q بستگی دارد. در $q=0$ پهنا بیشترین اما مقدار پذیرفتاری کمترین است و با افزایش q این پهنا با همان مرکزیت کمترشده و در $q=\pi$ پهنا کمترین اما مقدار پذیرفتاری بیشترین است. در شکل ۲ وسط، پذیرفتاری دینامیکی به ازای $(U,v,w)=(2,1.5,1)$ رسم شده است. در این حالت زنجیره در فاز مایع غیرفرمی با پرشدگی غیرصحیح قرار دارد. در پرشدگی غیرصحیح نیز پذیرفتاری در بازه‌ای از بسامد میدان خارجی غیرصفر است اما مرکزیت این بازه با q عوض می‌شود. در پرشدگی $n=1$، پذیرفتاری صفر است و سیستم به میدان خارجی پاسخ نمی‌دهد.



شکل ۲: قسمت موهومی پذیرفتاری اسپینی بر حسب بسامد میدان خارجی و به ازای بردار موجهای متفاوت. دامنه پرش بین سلولی $w=1$ در نظر گرفته شده است.

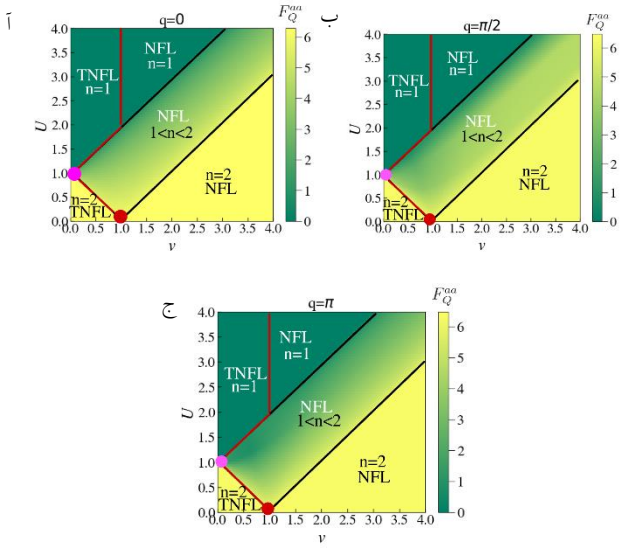
اطلاعات کوانتومی فیشر

کیواف‌آی معیاری مناسب برای اندازه‌گیری درهم‌تنیدگی چند بخشی است. ارتباط مستقیم کیواف‌آی و پذیرفتاری دینامیکی مزیتی است که این سنجه نسبت به سنجه‌های دیگر دارد و می‌توان از آن برای درک همبستگیهای موجود در حالتهای سیستم‌های همبسته قوی استفاده کرد. کیواف‌آی و پذیرفتاری دینامیکی با رابطه زیر به هم مرتبط هستند[۹]:

$$F_Q^{xy} = {}^4\!/_\pi \int_0^\infty d\omega \, \tanh\left({}^\omega\!/_{2\,T}\right) \mathrm{Im}\,\chi_s^{xy}(q,\omega), \qquad (۱۶)$$

که $\mathrm{Im}\,\chi_s^{xy}(q,\omega)$ قسمت موهومی پذیرفتاری دینامیکی است. بسته به اهداف مساله و اینکه ما در جستجوی درهمتنیدگی چه اجزایی در یک حالت کوانتومی هستیم پذیرفتاری‌های متفاوتی را بکار می‌گیریم. در این مساله پذیرفتاری‌های اسپین و بار را در نظر گرفته‌ایم، در نتیجه کیواف‌آی مقدار درهم‌تنیدگی اسپین-اسپین و بار-بار را به ما می‌دهد.

در شکل (۳)، کیواف‌آی برحسب قدرت برهم‌کنش و دامنه پرش داخل سلول، و به ازای q های مختلف رسم شده است. در شکلهای آ تا ج خطهای مشکی جداکننده فازهای با پرشدگی متفاوت است و خطهای قرمز جداکننده فاز توپولوژیک از بدیهی است. در این نمودارها چگالی رنگها مقدار کیواف‌آی را نشان می‌دهد. همانطور که دیده می‌شود کیواف‌آی در فازهای با پرشدگی یکنواخت ثابت است: در فاز با پرشدگی ۱ صفر، در فاز با پرشدگی ۲، 2π و در فاز با پرشدگی غیرصحیح مقداری بین صفر و 2π دارد. در فازهای با پرشدگی یکنواخت کیواف‌آی مستقل از بردار موج میدان اعمالی است. در این فازها درهم‌تنیدگی اسپین-اسپین و بار-بار به تغییرات فضایی میدان خارجی وابسته نیست. این درحالیست که در پرشدگی غیرصحیح، کیواف‌آی به شدت به بردار موج q وابسته است.



شکل ۳: اطلاعات کوانتومی فیشر برحسب دامنه پرش درون سلول و قدرت برهمکنش. در اینجا $w = 1$ است. در آ–ج، خطهای سیاه بیانگر گذار فاز پیوسته است. نقطه صورتی در $(v,U) = (0,1)$ بیانگر گذار فاز ناپیوسته در چگالی ذرات (n) است. خطهای قرمز و نقطه‌ی قرمز در $(v,U) = (1,0)$ بیانگر مرز جدایی فاز بدیهی NFL و توپولوژیک TNFL است.

در فاز با پرشدگی $n = 2$ ، در نواحی زرد رنگ، بالای $v = 1$ زنجیره در فاز مایع غیرفرمی است، اما در زیر این نقطه مایع غیرفرمی توپولوژیک داریم. این همچنین برای فاز با پرشدگی $n = 1$ نیز برقرار است. اما همانطور که از چگالی رنگها دیده می‌شود کیوافآی به گذار فاز توپولوژیک حساس نیست. این بدان معنی است که درهمتنیدگی اسپین–اسپین و بار–بار نمی‌تواند گذار فاز توپولوژیک در فاز با پرشدگی یکنواخت را نشان دهد. بنابراین برای مشخص کردن این نوع گذار فازها نیاز است از توابع پاسخ دیگری مانند توابع پاسخ مربوط به چگالی موج پیوندی و یا پارامترهای دیگر استفاده کنیم. لازم به ذکر است که در زنجیره اس‌اس‌اچ بدون برهم کنش آنتروپی درهمتنیدگی و طیف درهمتنیدگی شاخص‌های مناسبی برای مشخص کردن گذار فاز توپولوژیک هستند [۱۲].

نتیجه‌گیری

در این مقاله پذیرفتاری دینامیکی اسپین و بار مدل اس‌اس‌اچ را در حضور برهم‌کنشهای بلندبرد مطالعه کردیم. نشان دادیم در فازهای با پرشدگی صحیحِ $n = 2$ و پرشدگی غیرصحیحِ $1 < n < 2$ پذیرفتاری دینامیکی اسپین و بار در بازه‌هایی از بسامد و بردار موج میدان خارجی غیرصفر است. این سبب می‌شود اطلاعات کوانتومی فیشر که معیاری از درهم‌تنیدگی چندبخشی است مقداری غیرصفر داشته باشد. در فاز با پرشدگی صحیحِ ۲ مقدار درهمتنیدگی بیشترین مقدار است و حال آنکه در فاز با پرشدگی صحیحِ ۱ این مقدار صفر است. اطلاعات کوانتومی فیشر می‌تواند شاخص مناسبی برای تشخیص فازهای با پرشدگی مختلف نسبت به هم باشد. همچنین نشان دادیم که اطلاعات کوانتومی فیشر ذخیره شده در همبستگی‌های اسپین–اسپین و بار–بار شاخص مناسبی برای تشخیص گذار فازِ مایع غیرفرمی توپولوژیک به مایع غیرفرمی بدیهی با پرشدگی یکسان نیست. برای تشخیص این نوع گذار فازها باید توابع پاسخ دیگری مطالعه شود که در آینده به آن پرداخته می‌شود.

مرجع‌ها

[1] Y. Hatsugai and M. Kohmoto, "Exactly solvable model of correlated lattice electrons in any dimensions," Journal of the Physical Society of Japan, vol. 61, no. 6, pp. 2056– 2069, 1992.

[2] Mohamadi, Sepide, and Jahanfar Abouie. "Emergence of topological non-Fermi liquid phases in a modified Su-Schrieffer-Heeger chain with long-range interactions." *Physical Review B* **111**, (2025): 165129.

[3] Zeng, X. Chen, D.-L. Zhou, X.-G. Wen, et al., *"Quantum information meets quantum matter"*, Springer, 2019.

[4] Kitaev and J. Preskill, "Topological entanglement entropy", *Phys. Rev. Lett.* **96**, (2006): 110404.

[5] M. Levin and X.-G. Wen, "Detecting topological order in a ground state wave functionc", *Phys. Rev. Lett.* **96**, (2006): 110405.

[6] L. Balents, "Spin liquids in frustrated magnets", Nature **464**, 199 (2010).

[7] Strobel, Helmut, Wolfgang Muessel, Daniel Linnemann, Tilman Zibold, David B. Hume, Luca Pezzè, Augusto Smerzi, and Markus K. Oberthaler. "Fisher information and entanglement of non-Gaussian spin states." *Science* 345, **6195** (2014): 424-427.

[8] Hyllus, Philipp, Wiesław Laskowski, Roland Krischek, Christian Schwemmer, Witlef Wieczorek, Harald Weinfurter, Luca Pezzé, and Augusto

Smerzi. "Fisher information and multiparticle entanglement." *Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics* **2**, (2012): 022321.

[9] Hauke, Philipp, Markus Heyl, Luca Tagliacozzo, and Peter Zoller. "Measuring multipartite entanglement via dynamic susceptibilities." *arXiv preprint arXiv:* 1509.01739 (2015).

[10] G. D. Mahan, *"Many-particle physics"*. Springer Science & Business Media, 2013.

[11] Su, W., John Robert S., and Alan J. H. "Solitons in polyacetylene". *Physical Review Letters* **42**, (1979): 1698.

[12] Ahmadi, N., J. Abouie, and Dionys B. "Topological and nontopological features of generalized Su-Schrieffer-Heeger models". *Physical Review B* **101**, (2020): 195117.

خواص ترموالکتریک شیشه‌های اسپینی فلزی

تحریری نیک‌صفت، نعیمه[۱]؛ ابویی، جهانفر[۱]؛ وشایی، داریوش[۲و۳]

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

[۲] دانشکده علوم مواد و مهندسی، دانشگاه کارولینای شمالی، رالی

[۳] دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر، دانشگاه کارولینای شمالی، رالی

چکیده

این مقاله به بررسی خواص ترموالکتریک شیشه‌های اسپینی، مواد مغناطیسی با ساختار بی‌نظم و رفتارهای منجمد مغناطیسی، می‌پردازد. با تأکید بر توان حرارتی، که نشان‌دهنده ولتاژ القایی ناشی از گرادیان دما است، نتایج تجربی حاکی از مقادیر قابل توجه توان حرارتی در این مواد است که قابلیت‌های کاربردی این موارد در سامانه‌های تبدیل انرژی گرمایی به الکتریکی را نشان می‌دهد. در عین حال، کمبود چارچوب‌های نظری جامع برای تحلیل این خواص ترابردی، نیازمند توسعه مدل‌های جدید است. در این پژوهش، با استفاده از فرمالیسم بولتزمن توان حرارتی شیشه‌های اسپینی فلزی با دمای گذار پایین را بدست می‌آوریم. در محاسبه زمان واهلش الکترونها در اثر برهمکنش با ناخالصیهای مغناطیسی، اثرات دینامیک اسپین ناخالصیها را در نظر می‌گیریم و زمان واهلش را بر حسب پذیرفتاری دینامیکی شیشه اسپینی بدست می‌آوریم. از آنجا که پذیرفتاری دینامیکی در گذار فاز دمایی در این سیستمها تغییر رفتار می‌دهد، لذا توان حرارتی نیز از این تغییر رفتار پیروی کرده و در نقطه گذار فاز از فاز شیشه اسپینی به فاز پارامغناطیس بشدت افزایش می یابد. سپس در ناحیه پارامغناطیس بیشینه‌ای را تجربه کرده و در دماهای خیلی بالا افت می‌کند. نتایج بدست آمده از این روش با نتایج تجربی تطابق خوبی دارند.

واژگان کلیدی: *توان حرارتی، شیشه اسپینی، پراکندگی، اختلال*

Thermoelectric Properties of Metallic Spin Glasses

Tahriri Niksefat, Naeimeh[1]; Abouie, Jahanfar[1]; Vashaee, Daryoosh[2,3]

[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences (IASBS), Zanjan

[2] Department of Materials Science & Engineering, Raleigh

[3] Department of Electrical & Computer Engineering, Raleigh

Abstract

This paper investigates the thermoelectric properties of spin glasses, which are magnetic materials characterized by magnetically disordered structures with spins that are frozen below a certain freezing temperature. Experiments show that these materials exhibit high thermopower, reflecting the induced voltage generated by a temperature gradient. This characteristic highlights their potential applications in thermal-to-electrical energy conversion systems. However, the lack of comprehensive theoretical frameworks for analyzing these thermal properties necessitates the development of new models. In this study, we derive the thermopower of metallic spin glasses using Boltzmann

formalism. When calculating the relaxation time of electrons due to interactions with magnetic impurities, we take into account the spin dynamics effects of these impurities and express the relaxation time in terms of the dynamical susceptibility of the spin glass. Since the dynamical susceptibility exhibits a change in behavior at the freezing temperature in these systems, the thermopower also reflects this change, increasing sharply at the phase transition point from the spin glass phase to the paramagnetic phase. Subsequently, it reaches a maximum in the paramagnetic region before decreasing at very high temperatures. The results obtained from this method align well with experimental findings.

Keywords: thermopower, spin glass, scattering, perturbation

مقدمه

شیشه‌های اسپینی دسته‌ای از مواد مغناطیسی با رفتارهای پیچیده هستند که در آن‌ها برهم‌کنش‌های تصادفی بین ممان‌های مغناطیسی، موجب بروز یک حالت منجمد مغناطیسی در دمای پایین می‌شود. ویژگی‌های نامعمول مغناطیسی و ساختاری این مواد، مانند درماندگی اسپین‌ها و وجود بی‌نظمی، باعث شده‌اند که شیشه‌های اسپینی به محیطی مناسب برای بررسی پدیده‌های پیچیده و غیرعادی در انتقال گرما و بار تبدیل شوند.

شیشه‌های اسپینی در مدل‌سازی حوزه‌هایی نظیر حافظه‌های مغناطیسی، سامانه‌های محاسباتی الهام‌گرفته از مغز، و تاشدگی پروتئین نیز مورد توجه هستند. از این رو، شناخت عمیق‌تر خواص ترابردی آن‌ها نه‌تنها از منظر بنیادی بلکه در راستای کاربردهای فناورانه نیز حائز اهمیت است.

یکی از ویژگی‌های ترابردی مهم شیشه‌های اسپینی، توان حرارتی آن‌هاست که بیانگر ولتاژ القاشده در اثر گرادیان دما است. گزارش‌های تجربی حاکی از آن است که توان حرارتی در برخی شیشه‌های اسپینی مقدار قابل توجهی دارد، ویژگی‌ای که می‌تواند در توسعه سامانه‌های تبدیل انرژی گرمایی به الکتریکی مؤثر باشد.

با وجود پیشرفتهای آزمایشگاهی در این زمینه، کمبود یک چارچوب نظری جامع برای تحلیل خواص ترابردی، به‌ویژه توان حرارتی در شیشه‌های اسپینی به شدت احساس می‌شود و بخش عمده‌ای از مطالعات به بررسی‌های آزمایشگاهی محدود شده‌اند. این خلأ نظری، ضرورت توسعه مدل‌هایی برای توصیف رفتار ترابردی در چنین سیستم‌های پیچیده‌ای را دوچندان می‌کند.

در دهه نود میلادی کی. اچ. فیشر یک توصیف نظری برای داده‌های آزمایشگاهی مربوط به مقاومت و توان حرارتی شیشه‌های اسپینی فلزی ارایه کردند [۱و۲]. از آنجا که محاسبات ایشان بر پایه فرضهایی استوار است برای بکارگیری آنها در سیستمهای مختلف باید دقت لازم بعمل آید. بطور مثال نتایج ایشان در مرتبه‌ی دوم اختلال، توان حرارتی را صفر پیش‌بینی می‌کنند. اما نتایج ما با این پیش‌بینی در تضاد است. این اختلاف ناشی از فرضیات خاصی است که از جمله می‌توان به موارد زیر اشاره کرد: (۱) فرض پاریته زوج تابع چگالی حالت‌ها، مانند تابع لورنتزی یا ثابت در بازه‌ی محدود انرژی مانند $[-D, D]$ که در آن $2D$ پهنای نوار رسانش است. (۲) سرعت مستقل از انرژی. (۳) بازه‌ی انرژی به صورت متقارن. (٤) فرض انرژی فرمی صفر و اندازه‌گیری همه انرژی‌ها نسبت به آن. (۵) عدم دقت به دما در به کارگیری پذیرفتاری دینامیکی.

ما در این مقاله بدون در نظر گرفتن حالت‌های خاص و به صورت کلی رابطه‌ای برای توان حرارتی و مقاومت ارائه خواهیم کرد.

تعریف سامانه مورد مطالعه

برای بررسی توان حرارتی شیشه‌های اسپینی، سامانه‌ای شامل الکترون‌های رسانش و ناخالصی‌های مغناطیسی رقیق در نظر می‌گیریم. هامیلتونی این سامانه به صورت زیر تعریف می‌شود [۳]:

$$H = H_e + H_{dd} + H_{sd}, \quad (1)$$

که

$$H_e = \sum_{ks} \varepsilon_k c_{ks}^{+} c_{ks}, \quad (2)$$

هامیلتونی الکترون‌های رسانش، شامل عملگر خلق و فنای الکترون با بردار موج k و اسپین s و انرژی ε_k است. H_{dd} هامیلتونی توصیف کننده برهم‌کنش ناخالصیها است و به صورت زیر توصیف می‌شود:

$$H_{dd} = -\frac{1}{2}\sum_{hh'} W_{hh'} S_h S_{h'}, \quad (3)$$

که شامل جمع روی محل ناخالصی‌هاست و $W_{hh'}$ شدت برهمکنش تصادفی بین اسپین‌های ناخالصی مغناطیسی را نشان می‌دهد. همچنین

$$H_{sd} = N^{-1}\sum_{kk',ss'}\sum_h e^{i(k'-k).R_h} c_{k's'}^{+} c_{ks} \times (V\delta_{ss'} - \frac{J}{2} S_h \sigma_{s's}) \quad (4)$$

برهمکنش بین الکترون‌های رسانش و اسپین ناخالصی است، که J جفت‌شدگی تبادلی و V پتانسیل برهم‌کنشی مستقل از اسپین، $\sigma_{ss'}$ ماتریس پائولی و N تعداد کل ناخالصی‌هاست.

پذیرفتاری دینامیکی و زمان واهلش

دینامیک اسپین ناخالصیها در زمان واهلش الکترونهای سیستم نقش بازی می‌کنند. برای پی بردن به این مهم، در این قسمت زمان واهلش را بر حسب پذیرفتاری دینامیکی شیشه‌های اسپینی به دست می‌آوریم. به طور خاص با استفاده از نظریه اختلال، ماتریس پراکندگی که بیانگر دامنه پراکندگی الکترون‌ها از ناخالصی‌هاست را برحسب پذیرفتاری دینامیکی به‌دست آورده و سپس از بخش موهومی متوسط دمایی این ماتریس، زمان واهلش را از رابطه زیر محاسبه می‌کنیم:

$$\tau^{-1}(\omega) = -\frac{2}{\hbar} c \mathrm{Im}\left\langle T^{(r)}(\omega)\right\rangle \quad (5)$$

که c غلظت ناخالصی‌ها، $\hbar$ ثابت پلانک کاهش‌یافته، $\langle\ \rangle$ متوسط دمایی و r به معنای تابع تاخیری است.

با استفاده از زمان واهلش، تابع طیفی $(A_k(\omega) = \frac{\tau_k^{-1}}{(\omega-\varepsilon_k)^2+\frac{1}{4}\tau_k^{-2}})$ و از آن چگالی حالت‌های سیستم $(N(\omega) = \int dk A_k(\omega))$ تعیین می‌شود. در نهایت، با در اختیار داشتن زمان واهلش و چگالی حالت‌ها، رسانندگی الکتریکی و ضریب سیبک را از روابط استاندارد زیر استخراج می‌کنیم:

$$\sigma(T) = e^2 \int d\omega N(\omega)\tau(\omega)v^2(\omega)\left(-\frac{\partial f}{\partial \omega}\right), \quad (6)$$

$$\alpha(T) = \frac{e}{T\sigma(T)}\int d\omega N(\omega)(\omega-\varepsilon_F)\tau(\omega) \times v^2(\omega)\left(-\frac{\partial f}{\partial \omega}\right) \quad (7)$$

در اینجا e بار الکترون، ε_F انرژی فرمی، v سرعت الکترون و f تابع توزیع فرمی–دیراک است.

در این مدل، فرض می‌کنیم که ناخالصی‌ها به‌صورت مستقل از یکدیگر الکترونها را پراکنده می‌کنند و اثرات برهم‌کنش مستقیم میان ناخالصی‌ها در دینامیک هر اسپین وارد می‌شود. بدین ترتیب، تنها یک ناخالصی در نظر گرفته شده و تأثیر سایر ناخالصی‌ها به‌صورت مؤثر در دینامیک ناخالصی مورد نظر وارد می شود: به عبارت دیگر $S^i(\tau) = e^{H_{dd}\tau}S^i e^{-H_{dd}\tau}$ که $\tau = it$ زمان موهومی نامیده می‌شود.

هنگام پراکندگی یک الکترون از یک ناخالصی، حالت الکترون تغییر می‌کند و همزمان، حالت اسپینی ناخالصی نیز دچار تحول می‌شود.

این فرآیند پایه‌گذار مفاهیمی نظیر خودهمبستگی اسپین است که بیانگر همبستگی یک اسپین با خود در زمان‌های مختلف $\langle S^i(\tau)S^j(0)\rangle$ است. در اینجا i و j مولفه های اسپین هستند. در شیشه های اسپینی، در دماهای پایین‌تر و بالاتر از دمای انجماد، خودهمبستگی اسپین رفتارهای مشخص زیر را دارد [۴،۵]:

$$\langle S^i(\tau)S^j(0)\rangle \propto \begin{cases} \tau^{-\nu}, & T < T_f \\ e^{-\tau/t'}. & T > T_f \end{cases} \qquad (9)$$

که ν نمایی است که مقدار آن کمتر از ۱ و وابسته به دما است و t' زمان واهلش اسپینی است.

تبدیل فوریه این کمیت، پذیرفتاری دینامیکی سیستم، یعنی $\chi_r^{ij}(\omega)$، را تعریف می‌کند. سپس با اعمال ادامه تحلیلی برای یافتن تابع تاخیری، بخش موهومی آن را در محاسبات مربوط به زمان واهلش استفاده می‌کنیم.

نتایج

زمان واهلش به صورت زیر برای دو بازه دمایی مورد نظر تعریف می‌شود:

$$\tau^{-1}(\varepsilon_k) = \frac{2\pi a}{\hbar}\tilde{\tau}^{-1} \qquad (8)$$

که

$$\tilde{\tau}^{-1} = \begin{cases} \int d\varepsilon_{k'}\sqrt{\varepsilon_{k'}}\frac{C(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_k)}{\Gamma(\nu)}\left|\frac{1}{(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_k)}\right|^{2-\nu} \\ \times\left(1-e^{-\left|\frac{\varepsilon_{k'}-\varepsilon_k}{k_BT}\right|}\right)n(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_k) & T<T_f \\ \times\frac{1-f(\varepsilon_{k'})}{1-f(\varepsilon_k)} + \sqrt{\varepsilon_k}\langle S^i\rangle\langle S^j\rangle \\ \sqrt{\varepsilon_k+\frac{1}{t'}}\left(1-e^{-\frac{1}{k_BT.t'}}\right)n\left(\frac{1}{t'}\right) & T>T_f \\ \times\frac{1-f\left(\varepsilon_k+\frac{1}{t'}\right)}{1-f(\varepsilon_k)} + \sqrt{\varepsilon_k}\langle S^i\rangle\langle S^j\rangle \end{cases} \qquad (10)$$

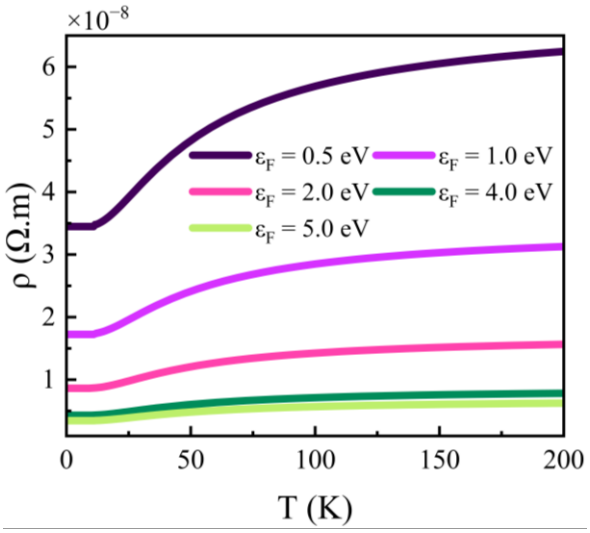
و

$$a \equiv \frac{J^2\Omega_0^2 n_{Imp}(2m^*)^{\frac{3}{2}}}{8(2\pi^2\hbar^3)}. \qquad (11)$$

در عبارات بالا n تابع توزیع بوزونی، Ω_0 حجم اشغال‌شده توسط یک تک ناخالصی، n_{Imp} چگالی ناخالصی و m^* جرم موثر الکترون است.

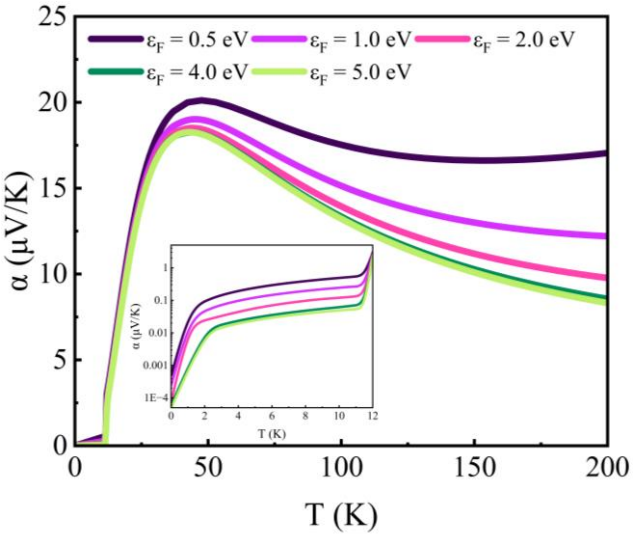
برای یک ماده فلزی با خواص شیشه اسپینی مانند AuMn با در نظر گرفتن مقادیر $J \to J_{sd} \approx 0.2eV$ ،$\varepsilon_F < 5eV$ ،$n_{Imp} \approx 5.9 \times 10^{20}cm^{-3}$ ،$m^* \approx 1.1m_e \approx 10^{-30}kg$ ،$\Omega_0 \approx 5 \times 10^{-8}cm^3$ و $T_f \approx 1meV \approx (12\ K)$ می‌توان زمان واهلش، چگالی حالت‌ها، رسانندگی (مقاومت) و ضریب سیبک را محاسبه کرد. برای این منظور، چگالی حالت‌ها به صورت خودسازگار به کمک زمان واهلش و تابع طیفی به دست می‌آید. در نمونه‌ی فلزی مورد بررسی، رفتار مقاومت الکتریکی به صورت تابعی از دما دو ناحیه‌ی متمایز را در شکل ۱ نشان می‌دهد. در دماهای پایین‌تر از دمای انجماد، (T_f) مقاومت تقریباً ثابت باقی می‌ماند. این رفتار ناشی از انجماد ممان‌های مغناطیسی است؛ به طوری که اسپین‌ها در حالت تصادفی منجمد شده و دینامیک حرارتی مؤثری برای ایجاد پراکندگی جدید در حامل‌های بار وجود ندارد. در نتیجه، مقاومت تغییر محسوسی با دما در این ناحیه نشان نمی‌دهد. به عبارت دیگر، وجود یک پلاتو در منحنی مقاومت–دما در دماهای پایین‌تر از T_f، نشان‌دهنده‌ی تثبیت بی‌نظمی‌های مغناطیسی و توقف دینامیک اسپینی است؛ در نتیجه پراکندگی حامل‌های بار مستقل از دما شده و مقاومت تقریباً ثابت باقی می‌ماند. با عبور از دمای T_f، مقاومت الکتریکی با افزایش دما روندی صعودی نشان می‌دهد. این رفتار برخلاف فلزات معمول است که در آن‌ها مقاومت عمدتاً تحت تأثیر پراکندگی فونونی در دماهای بالا افزایش می‌یابد و در دماهای پایین کاهش می‌یابد. افزایش مقاومت نشان‌دهنده‌ی غالب بودن پراکندگی ناشی از بی‌نظمی مغناطیسی است. به عبارت دیگر افزایش افت وخیزهای اسپینی در دماهای بالاتر، پراکندگی حامل‌های بار را

تشدید کرده و موجب افزایش مقاومت می‌شود. این پدیده شاخصه‌ی بارزی از وجود نظم مغناطیسی تصادفی و رفتار غیرمعمول فاز شیشه اسپینی در خواص ترابرد الکتریکی ماده است.



شکل ۱: نمودار مقاومت الکتریکی بر حسب دما برای انرژی فرمی‌های متفاوت.

شکل ۲ رفتار ضریب سیبک با دما را برای انرژی فرمی‌های متفاوت نشان می‌دهد. در دماهای بسیار پایین، توزیع فرمی–دیراک به یک تابع شبه–دلتا تبدیل می‌شود، به‌طوری‌که تنها حالت‌های بسیار نزدیک به انرژی فرمی (ε_F) در انتقال حرارت نقش دارند. با توجه به اینکه انرژی فرمی در فلزات معمولاً بزرگ است، ترم $(\varepsilon - \varepsilon_F)$ در رابطه مات بسیار کوچک می‌شود. این موضوع باعث می‌شود که ضریب سیبک در این ناحیه دمایی بسیار کوچک باشد. با افزایش دما، توزیع فرمی–دیراک پهن‌تر می‌شود و حالت‌های بیشتری در اطراف ε_F در انتقال گرما مشارکت می‌کنند. این موضوع در نمودار داخلی شکل ۲ اورده شده است، در دماهای کم، با کاهش ε_F ضریب سیبک افزایش می‌یابد. علاوه بر این، در شیشه‌های اسپینی، دینامیک اسپینی با افزایش دما فعال‌تر می‌شود، که منجر به افزایش پراکندگی حامل‌های بار توسط اسپین‌ها می‌شود. افت توان حرارتی در دماهای بالا که در نتایج تجربی مشاهده می‌شود به دلیل پراکندگی الکترون‌ها از فونون‌ها است اما در نتایج ما این افت به دلیل رفتار پذیرفتاری دینامیکی است. نتایج ما شباهت قابل قبولی با نتایج مربوط به یک شیشه اسپینی فلزی مانند FeAs دارد [۶].



شکل ۲: نمودار ضریب سیبک بر حسب دما. شکل داخلی نمایانگر بازه دمایی ۰ تا ۱۲ کلوین است که محور عمودی با مقیاس لگاریتمی رسم شده است. از این شکل می‌توان مشاهده کرد که با کاهش انرژی فرمی، در دماهای کم، ضریب سیبک افزایش می‌یابد.

نتیجه گیری

در این پژوهش، با تمرکز بر خواص ترابردی شیشه‌های اسپینی فلزی، رفتار ضریب سیبک و مقاومت الکتریکی به صورت تحلیلی بررسی شد. محاسبه زمان واهلش با در نظر گرفتن پراکندگی اسپین–ناخالصی و اثرات دینامیک مغناطیسی، امکان پیش‌بینی دقیق رفتار توان حرارتی را فراهم کرد. نتایج نشان دادند که وجود فاز اسپین گلس موجب ایجاد یک بیشینه قابل توجه در ضریب سیبک می‌شود، که می‌تواند برای کاربردهای مبدل انرژی گرمایی به الکتریکی مفید باشد. انطباق خوب بین مدل نظری توسعه‌یافته و داده‌های تجربی اعتبار رویکرد ارائه شده را تایید می‌کند. با این حال، به منظور درک عمیق‌تر از مکانیزم‌های ترابردی در چنین سامانه‌های پیچیده‌ای، توسعه چارچوب‌های نظری دقیق‌تر در آینده ضروری به نظر می‌رسد.

مرجع‌ها

[۱] K. H. Fischer; "Transport properties of spin-glasses"; Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **15**, 131-132 (1980).

[۲] K. H. Fischer; "Kondo effect in spin glasses: Electrical resistivity"; Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, **42**, 27-38 (1981).

[۳] K. H. Fischer; "On the electrical resistivity of spin glasses"; Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, **34**, 45-53 (1979).

[۴] S. Lederer, D. Jost, T. Böhm, R. Hackl, E. Berg, &S. A. Kivelson, "Measuring the imaginary time dynamics of quantum materials"; Philosophical Magazine, **100**(19), 2477-2490 (2020).

[۵] A. Keren, P. Mendels, I. A. Campbel, & J. Lord; "Probing the spin-spin dynamical autocorrelation function in a spin glass above T g via muon spin relaxation"; Physical review letters, **77**(7), 1386 (1996).

[۶] D. Van Thiet, D. D. Dung, A. T. Duong, N. X. Chung, N. T. Hong, S. Cho; "Thermoelectric, Magnetic Properties and Re-entrant Spin-glass State in MBE Grown FeAs Film on LaAlO3 (100) Substrate"; ECS Journal of Solid State Science and Technology, **12**(2), 023005 (2023).

تجزیه و تحلیل حالت‌های الکترونی و توپولوژیک چارچوب‌های آلی-فلزی دوبعدی بر پایه‌ی نیکل

فلسفی، نفیسه[۱]؛ عابدین‌پور هرزند، سعید[۲]؛ نظری، فریبا[۱]

[۱]دانشکده شیمی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، زنجان

[۲]دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، زنجان

چکیده

در این بررسی به مطالعه‌ی ویژگی‌های الکترونی و توپولوژیک سه چارچوب آلی-فلزی غیرمغناطیسی بر پایه‌ی نیکل پرداخته شده است. با وجود این که لیگاند آلی هر سه ساختار به یک گروه از جدول تناوبی تعلق دارند و هم‌ظرفیت هستند، اما رفتار الکترونی و هدایت اسپینی هال متفاوتی دارند. در سامانه‌ی حاوی لیگاند اکسیژن، به‌دلیل سایز کوچک لیگاند و وجود پرش مرتبه‌ی دوم، شکاف نواری عمومی حذف و فاز فلزی Z_2 ظاهر می‌شود.

کلمات کلیدی: *چارچوب آلی-فلزی، تابع ونیر، هدایت اسپینی هال، عایق توپولوژیک دوبعدی، فاز فلزی Z_2*

Characterizing and Modifying Electronic and Topological Properties in 2D Nickel-Based Metal Organic Frameworks

Falsafi, Nafiseh [1]; Abedinpour H.; Saeed [2]; Nazari, Fariba [1]

[1] Department of Chemistry, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan, Iran

[2] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan, Iran

Abstract

In this study, we investigate the electronic and topological properties of three non-magnetic nickel-based organometallic frameworks. Although the organic ligands in these structures belong to the same group of the periodic table and are iso-valence, they exhibit distinct electronic behaviors and varying spin Hall conductivities, in different SOC gaps. In structure with oxygen ligands, the small size of the ligands causes the next-nearest-neighbor hopping and eliminates the global band gap, resulting in the observation of the Z_2 metallic phase.

Keywords: *Metal organic frameworks, Wannier function, Spin Hall conductivity, 2D Topological insulator, Z_2 metallic phase*

مقدمه

درجه‌های آزادی بار و اسپین می‌توانند به‌کمک اثر اسپینی هال به‌یکدیگر تبدیل شوند [۱] تبدیل کارآمد بار به اسپین، در ابزارهای بر پایه‌ی اسپین، همانند اسپین-ترونیک اهمیت بالایی دارد. از این‌رو کنترل این تبدیل، اهمیت دوچندانی در فیزیک ماده چگال پیدا کرده است. یکی از ویژگی‌های اثر اسپینی هال این است که می‌تواند به عنوان منبع اسپین عمل کند. این اثر با تولید جریان اندازه حرکت زاویه‌ای اسپینی (جریان اسپینی) در حضور میدان الکتریکی، شناخته می‌شود. امروزه با توجه به مشکلاتی که توسعه‌ی ابزارهای الکترونیکی دارند، جریان‌های اسپینی و الکترونیک مبتنی بر آن‌ها (اسپین‌ترونیک) اهمیت دو چندان یافته است. جریان‌های اسپینی به دو نوع جریان‌های اسپین-قطبیده و جریان‌های اسپینی خالص طبقه-بندی می‌شوند. جریان‌های اسپین-قطبیده در موادی با جمعیت اسپینی متفاوت (مواد فرومغناطیس) دیده می‌شوند و دارای محدودیت‌هایی هستند که کاربرد آن‌ها را در ابزارها محدود می‌کند. از جمله‌ی این محدودیت‌ها، می‌توان به ساخت دشوار ابزارها به کمک مواد فرومغناطیس اشاره کرد. این مواد ممکن است همراه با آلودگی‌های مغناطیسی باشند که با ایجاد افت و خیزهای تصادفی در میدان مغناطیسی، باعث کاهش طول عمر جریان‌های اسپینی می‌شوند که در اسپین-ترونیک بسیار اهمیت دارند. مشکل دیگر، راندمان پایین این ابزارها است که از مرتبه‌ی ۱۰ تا ۵۰ درصد است. از این‌رو بهترین نوع جریان، جریان‌های اسپینی خالص خواهند بود که به اختصار جریان‌های اسپینی نیز نامیده می‌شوند. در جریان‌های اسپینی خالص، اسپین‌های رو به بالا و رو به پایین در دو جهت مخالف هم حرکت می‌کنند. از مزیت‌های جریان‌های اسپینی، می‌توان به مصرف انرژی پایین، سرعت پردازش و ذخیره‌ی اطلاعات بالا و نیز تولید گرمای پایین در آن‌ها اشاره کرد. از جمله فازهای دارای جریان‌های اسپینی می‌توان به اثر اسپینی هال و اثر اسپینی هال کوانتومی که عایق توپولوژیک دوبعدی هم نامیده می‌شود، اشاره کرد. مشخصه‌ی عایق‌های توپولوژیک و اثر اسپینی هال، وجود هدایت اسپینی هال است که در عایق‌های توپولوژیک دوبعدی، نسخه‌ی کوانتیده‌ی آن مشاهده می‌شود. هدایت اسپینی هال، متکی به بر هم‌کنش اسپین-مدار است و به دو نوع ذاتی و غیرذاتی تقسیم می‌شود. محدودیت-هایی که در اندازه‌گیری تجربی هدایت اسپینی هال وجود دارد، اهمیت بررسی‌های نظری را دو چندان می‌کند. در تحقیق پیش‌رو به محاسبه‌ی هدایت اسپینی هال در چارچوب‌های آلی-فلزی بر پایه‌ی نیکل، شامل نیکل-بنزن هگزول، نیکل-بنزن هگزاتیول و نیز نیکل-بنزن هگزاسلنولات پرداخته شده است.

روش

محاسبه‌ی هدایت اسپینی هال به‌کمک رابطه‌ی کوبو انجام می‌شود اما روش مستقیم محاسبه‌ی آن، فرآیندی زمان‌بر است. زیرا نیاز به انتگرال‌گیری در فضایی با دانه‌بندی بسیار ریز، از مرتبه‌ی چند میلیون دارد [۲]. راه‌حل ساده‌تر استفاده از فرمول کوبو بر اساس تابع‌های ونیر با حداکثر جای‌گزیدگی است که با به‌کارگیری تکنیک درون یابی، هزینه‌ی محاسبه‌ها را بسیار کاهش می‌دهد [۳] . استفاده از این تکنیک، در عین حال که از سادگی هامیلتونی تنگ‌بست برای کاهش هزینه‌ی محاسباتی استفاده می‌کند، دقت روش‌های آغازین را هم با خود به همراه دارد. رابطه‌ی کوبو برای هدایت اسپینی هال مطابق با رابطه‌ی (۱) تعریف می‌شود که از انتگرال انحنای بری اسپینی به-دست می‌آید.

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\gamma} = -\frac{e^2}{\hbar}\int_{BZ}\frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^d}\Omega_{\alpha\beta}^{\gamma}(\boldsymbol{k}) \qquad (۱)$$

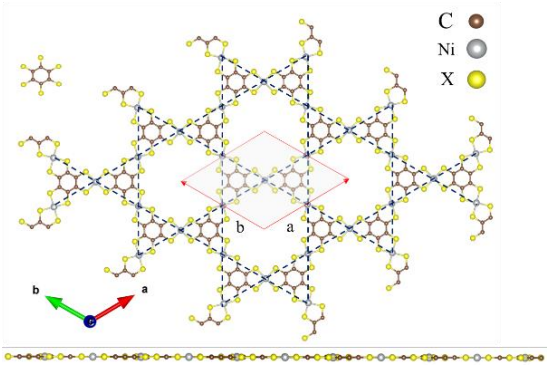
در این رابطه d ابعاد سامانه و $\Omega^{\gamma}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k})$ انحنای بری اسپینی کل است که تابع $\boldsymbol{k}$ بوده و از جمع انحنای بری اسپینی تک تک نوارهای اشغال شده ($\Omega^{\gamma}_{n,\alpha\beta}(\boldsymbol{k})$ [۴]) مطابق با رابطه‌ی (۲) به‌دست می‌آید. وجود تابع توزیع فرمی-دیراک در این رابطه، جمع بر روی نوارهای اشغال شده را تضمین می‌کند.

$$\Omega^{\gamma}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}) = \sum_n f\,(E)\,\Omega^{\gamma}_{n,\alpha\beta}(\boldsymbol{k}) \qquad (۲)$$

در این رابطه $f(E) = 1/[e^{(E-\mu)/(k_B T)} + 1]$ تابع توزیع فرمی-دیراک است و μ، k_B و T به‌ترتیب پتانسیل شیمیایی، ثابت بولتزمن و دمای مطلق هستند. هدایت هالی که از رابطه‌ی (۱) به دست می‌آید یک تنسور مرتبه‌ی سوم است که تعداد عنصرهای مستقل و غیر صفر آن‌را، تقارن‌های سامانه تعیین می‌کند [۵،۶] . اما در کنار تقارن، ابعاد سامانه‌ها هم در تعیین تعداد مولفه‌های غیر صفر آن نقش دارند. به‌طور مثال در سامانه‌های دوبعدی، تنها یک مولفه از تنسور هدایت اسپینی هال غیر صفر است ($\sigma^{z}_{xy} = -\sigma^{z}_{yx}$). در تحقیق پیش‌رو با به‌کارگیری ابزارهای محاسبه‌ی ویژگی‌های الکترونی، همانند کوانتوم اسپرسو که بر پایه‌ی موج تخت ناجای-گزیده و روش شبه پتانسیل استوار است و نیز ابزارهای محاسبه‌ی ویژگی‌های توپولوژیک همانند ونیر۹۰ [۷] و ونیر تولز [۸]، به محاسبه‌ی ویژگی‌های الکترونی و توپولوژیک سامانه‌های یاد شده، پرداخته شده است. فرآیند تولید تابع‌های پایه‌ی ونیر، توسط تعدادی از اوربیتال‌های اتمی، به‌عنوان حدس اولیه انجام می‌شود. سپس تابع-های ونیر به‌دست آمده، بهینه می‌شوند تا تابع‌های ونیر با حداکثر جایگزیدگی به‌دست آیند. این فرآیند با چرخه‌ی تکرار انجام می‌شود تا جایی که گستردگی تابع‌های ونیری، کمینه شود و به مقدار ۷-۱۰ bohr^2 برسد. در گام بعدی تابع‌های ونیر به‌دست آمده، باید از نظر همگرایی در هم‌تنیدگی و نیز انطباق با ساختار نواری به‌دست آمده، از تابع‌های بلوخ بررسی شوند. برای اطمینان از این‌که مقدار هدایت اسپینی هال به‌دست آمده نیز شامل خطای عددی نباشد از تست همگرایی استفاده شده است. برای این منظور از افزایش دانه‌بندی نقاط $\boldsymbol{k}$ تا مقدار عددی ۵۰۰ × ۵۰۰ × ۵۰۰ و حد هم‌گرایی دانه‌بندی با مقدار $۵۰۰\ \text{Å}^2$ استفاده شده است. در کنار این پارامترها از روش اصلاح تطبیقی نقاط $\boldsymbol{k}$ با مقدار ۴ × ۴ × ۴ نیز برای هم‌گرایی کارآمد هدایت اسپینی هال استفاده شده است.

بحث و نتیجه‌گیری

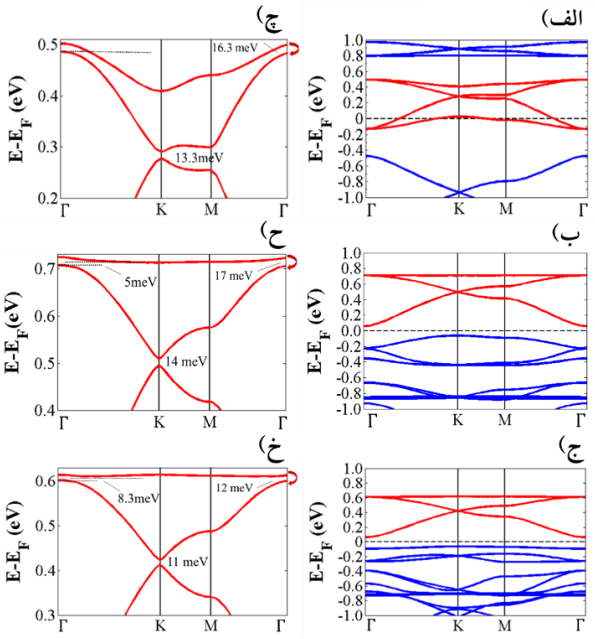
چارچوب‌های آلی-فلزی، متشکل از یون‌های فلزی در کنار لیگاندهای آلی هستند که به‌دلیل سنتز تنظیم پذیر و تنوع ساختاری، در تحقق فازهای توپولوژیک آلی بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. مزیت ترکیبات توپولوژیک آلی، نسبت به همتایان معدنی خود ساخت آسان و قیمت پایین آن‌ها است. ساختار چارچوب‌های آلی-فلزی مورد بررسی نیکل-بنزن هگزا X دارای ۳ اتم Ni، ۱۲ اتم C و ۱۲ اتم X است (X = O, S, Se) که در شبکه‌ی کاگومه متبلور می-شوند. شکل ۱ ساختار اتمی آن‌ها و نیز شبکه‌ی کاگومه‌ی آن‌ها را (خط‌های نقطه‌چین آبی) نشان می‌دهد.



شکل ۱. ساختار اتمی نیکل-بنزن هگزا X با شبکه‌ی کاگومه (خط‌های نقطه چین آبی). خط‌های قرمز سلول واحد با بردارهای شبکه‌ی a و b است. شکل بالا سمت چپ لیگاند آلی این سامانه و شکل پایینی ساختار بهینه شده‌ی مسطح آن‌را نشان می‌دهد. اتم های کربن قهوه ای، نیکل خاکستری و X = O, S, Se زرد رنگ هستند.

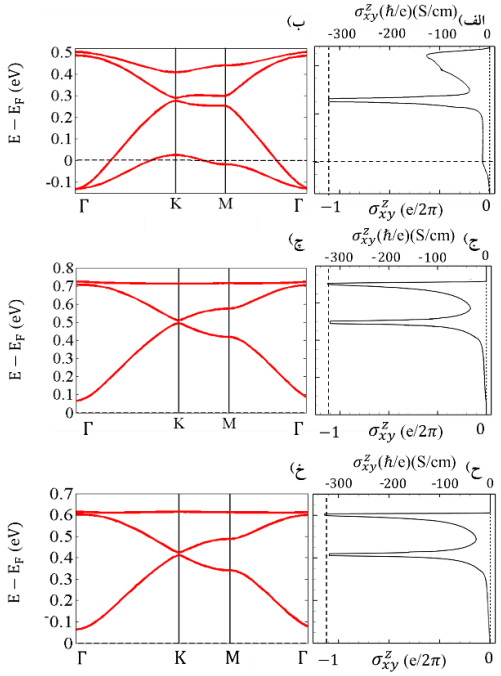
مشخصه‌ی شبکه‌ی کاگومه، وجود نوارهای کاگومه است که در شکل ۲ با رنگ قرمز مشخص شده‌اند. نوارهای کاگومه، در این سامانه‌ها متشکل از نوارهای نسبتا مسطح و نوارهای مشابه مخروط

دیراک گرافن هستند که توسط دو شکاف نواری ناشی از بر هم‌کنش اسپین- مدار از هم جدا شده‌اند. از این شکاف‌های نواری با نام شکاف نواری غیربدیهی یا شکاف نواری بر هم‌کنش اسپین-مدار یاد می‌شود، که به سه گروه تقسیم می‌شوند. گروه اول شکاف نواری دیراک نامیده می‌شود که بین دو نوار دیراک در نقطه‌ی K ایجاد می شود. گاف‌های بعدی گاف‌های موضعی در نقطه‌ی Γ و گاف عمومی هستند که به‌ترتیب، فاصله‌ی بین دو نوار مسطح و قسمت بالایی نوار دیراک و فضای خالی بین کمینه‌ی نوار مسطح و بیشینه‌ی نوار بالایی دیراک هستند.



شکل ۲ : (الف، ب و ج) به‌ترتیب پاشندگی الکترونی سامانه‌های نیکل-بنزن هگزول، نیکل-بنزن هگزاتیول و نیکل-بنزن هگزاسلنولات، بدون در نظر گرفتن بر هم‌کنش اسپین-مدار، نوارهای قرمز رنگ نوارهای کاگومه هستند. (چ، ح و خ) پاشندگی الکترونی نوارهای کاگومه در حضور بر هم‌کنش اسپین-مدار در این سه سامانه است. شکاف‌های نواری غیر بدیهی (اعداد داخل شکل‌ها) نشان می‌دهد که شکاف نواری عمومی، تنها در سامانه‌ی نیکل-بنزن هگزول (قسمت چ) برابر با صفر است.

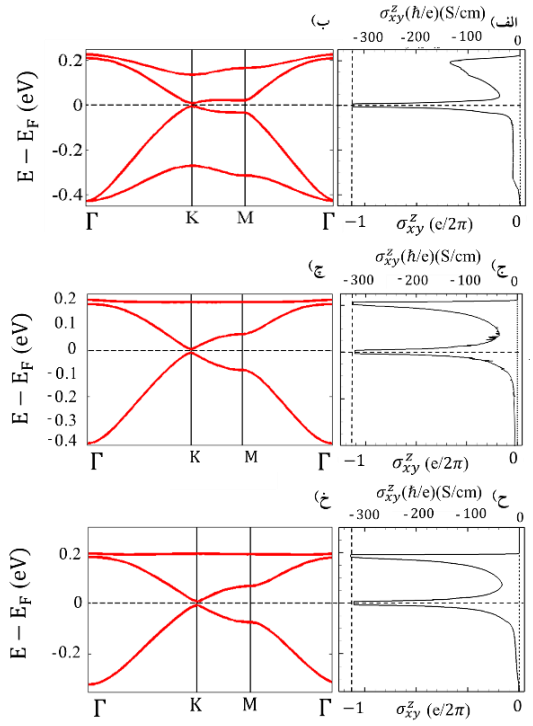
با رسم ساختارهای نواری تصویر شده بر روی اوربیتال‌های اتمی، سهم هر یک از اتم‌ها در تشکیل نوارهای کاگومه مشخص شد. در نهایت تابع‌های ونیری با حداکثر جای‌گزیدگی، با اوربیتال‌های p_z اتم‌های C و X و نیز اوربیتال‌های d_{xz} و d_{yz} اتم‌های Ni ساخته شد و برای محاسبه‌ی هدایت اسپینی هال، به‌کار گرفته شد. شکل ۳ هدایت اسپینی هال کوانتیده‌ی این سامانه‌ها را در شکاف‌نواری غیر بدیهی آن‌ها، نشان می‌دهد. در دو سامانه‌ی نیکل-بنزن هگزاتیول و نیز نیکل-بنزن هگزاسلنولات، هدایت اسپینی هال محاسبه شده، در هر دو شکاف نواری غیر بدیهی دارای مقدار ماکزیمم و کوانتیده است. اما در مورد نیکل-بنزن هگزول، با صفر شدن شکاف نواری عمومی در ناحیه‌ی ۰.۵ الکترون ولت بالای سطح فرمی، هدایت اسپینی هال آن از مقدار کوانتیده خارج شده و عدد کوچکتری را نسبت به هدایت اسپینی هال آن در شکاف نواری دیراک نشان می‌دهد. دلیل حذف این شکاف نواری را می‌توان به حضور پرش همسایه‌ی دوم، در این سامانه نسبت داد که به‌دلیل سایز کوچک این لیگاند اتفاق می‌افتد [۹،۱۰].



شکل ۳ : رفتار هدایت اسپینی هال با اسکن انرژی فرمی (شکل سمت راست)، در کنار ساختار نواری در حضور بر هم‌کنش اسپین-مدار (چپ)، در سه سامانه‌ی

(الف،ب) نیکل-بنزن هگزول، (ج، چ) نیکل-بنزن هگزاتیول و (ح، خ) نیکل-بنزن هگزاسلنولات.

مقدار کوانتیده‌ی هدایت اسپینی هال ($-1\frac{e}{2\pi}$) در شکاف نواری دیراک هر سه سامانه، نشان‌دهنده‌ی رفتار عایق توپولوژیک دوبعدی در آن‌ها است. در تجربه برای مشاهده‌ی این ویژگی، لازم است که سطح فرمی آن‌ها به ناحیه‌ی شکاف نواری غیر بدیهی منتقل شود. وجود سطح فرمی در یکی از این دو شکاف نواری غیر بدیهی، استفاده از این چارچوب‌های آلی-فلزی را (به‌عنوان مواد توپولوژیک آلی) در ابزارها کارآمد می‌سازد. انتقال به شکاف نواری اول (دیراک) با آلاییدن مقدار مشخصی الکترون برابر با 1.37×10^{14} cm^{-2}، 1.07×10^{14} و 0.98×10^{14} به‌ترتیب، در سامانه‌های نیکل-بنزن هگزول، نیکل-بنزن هگزاتیول و نیز نیکل-بنزن هگزاسلنولات انجام شد، که همگی در تجربه قابل دست‌یابی هستند. شکل ٤ تحقق هدایت اسپینی هال کوانتیده در سطح فرمی این سامانه‌ها را نشان می‌دهد که در کنار ناواردای توپولوژیک $Z_2=1$، وجود فاز عایق توپولوژیک دوبعدی در آن‌ها را تایید می‌کند. در سامانه‌ی نیکل-بنزن هگزول، ناواردای توپولوژیک $Z_2=1$ در شکاف نواری غیر بدیهی موضعی در ۰.۲ الکترون ولت و نیز هدایت اسپینی هال غیر کوانتیده (شکل ٤-الف)، نشان می‌دهد که در صورت انتقال سطح فرمی به این ناحیه، می‌تواند میزبان فاز توپولوژیک فلزی Z_2 باشد [۹].



شکل ٤ : رفتار هدایت اسپینی هال با اسکن انرژی فرمی در سه سامانه‌ی معرفی شده در شکل ۳ که با غلظت مشخص الکترون یاد شده آلاییده شده‌اند.

مرجع‌ها:

[1] Hirsch, J.E. Spin Hall effect. *Phys. Rev. Lett.* (1999), 83 (9), 1834.

[2] Guo, G.Y.; Murakami, S.; Chen, T.W. and Nagaosa, N. Intrinsic spin Hall effect in platinum: First-principles calculations. *Phys. Rev. Lett*. (2008), 100 (9), 096401.

[3] Qiao, J.; Zhou, J.; Yuan, Z. and Zhao, W. Calculation of intrinsic spin Hall conductivity by Wannier interpolation. *Phys. Rev. B*. (2018), 98 (21), 214402.

[4] Falsafi, N.; Abedinpour, S.H.; Nazari, F. and Illas, F. Tuning Topologically Nontrivial States in the BHT-Ni Metal–Organic Framework. *J. Phys. Chem. C*. (2025).

[5] Roy, A.; Guimarães, M.H. and Sławińska, J. Unconventional spin Hall effects in nonmagnetic solids. *Phys. Rev. Mater*. (2022), 6 (4), 045004.

[6] Seemann, M.; Ködderitzsch, D.; Wimmer, S. and Ebert, H. Symmetry-imposed shape of linear response tensors. *Phys. Rev. B*. (2015), 92 (15), 155138.

[7] Mostofi, A.A.; Yates, J.R.; Lee, Y.S.; Souza, I.; Vanderbilt, D. and Marzari, N. wannier90: A tool for obtaining maximally-localized Wannier functions. *Comput. Phys. Commun.* (2008), 178 (9), 685.

[8] Wu, Q.; Zhang, S.; Song, H.F.; Troyer, M. and Soluyanov, A.A. WannierTools: An open-source software package for novel topological materials. *Comput. Phys. Commun.* (2018), 224, 405.

[9] Zhao, B.; Zhang, J.; Feng, W.; Yao, Y. and Yang, Z. Quantum spin Hall and Z_2 metallic states in an organic material. *Phys. Rev. B*. (2014), 90 (20), 201403.

[10] Silveira, O.J.; Ribeiro, G.A. and Chacham, H. Activation of topological insulator phase in Kagome-type bilayers by interlayer coupling: The cases of $Ni(CO)_4$ and $Pd(CO)_4$. *Appl. Phys. Lett*. (2020), 116 (10), 103103.

مطالعه اثردما بر دینامیک رمبش یک رشته پلیمر با استفاده از شبیه سازی دینامیک لانژوین

جمشیدی، عرفان[۱]؛میرزایی،مسعود[۱]؛فضلی،حسین[۱]

دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی زنجان، زنجان

چکیده

در این پژوهش، رمبش یک رشته پلیمر به عنوان مدلی برای نواحی ذاتا بی نظم پروتئین‌ها، در دماهای مختلف بررسی شده است. با بهره‌گیری از شبیه‌سازی دینامیک لانژوین و مدل‌سازی دانه‌درشت در محیط حلال ضعیف، رفتار دینامیکی زنجیره پلیمری تحلیل شد. نتایج نشان داد که دما نقش مهمی در الگوی رمبش، پایداری ساختار رمبیده و میزان جابجایی مونومرها ایفا می‌کند. با محاسبه ماتریس همسایگی مونومرها، طرح رمبش آن بررسی شد. کاهش دما منجر به تشکیل ساختارهای متراکم‌تر و پایدارتر، و افزایش تماس‌های بین‌مونومری شد. این یافته‌ها به درک بهتر پدیده‌های زیستی مرتبط با فازهای غلیظ درون‌سلولی کمک می‌کند

***واژگان کلیدی**: پلیمر, حلال ضعیف، شبیه سازی دینامیک لانژوین*

Study the effect of temperature on the collapse dynamics of a polymer chain using Langevin dynamics simulations

Jamshidi, Erfan[1]; Mirzaei, Masoud[1]; Fazli, Hossein[1]

Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan

Abstract

In this study, the collapse of a polymer chain, as a model for intrinsically disordered regions (IDRs) of proteins, was investigated at different temperatures. Using Langevin dynamics simulations and coarse-grained modeling in a poor solvent environment, the dynamic behavior of the polymer chain was analyzed. The results demonstrated that temperature plays a significant role in the collapse pattern, the stability of the collapsed structure, and the displacement of monomers. By calculating the monomer contact matrix, the collapse pattern was further examined. Lower temperatures led to the formation of more compact and stable structures, along with increased inter-monomer contacts. These findings contribute to a better understanding of biological phenomena associated with intracellular dense phases.

***Keywords**: Polymer, Poor solvent, Langevin dynamics simulations*

مقدمه

پلیمرها، به عنوان مولکول‌های زنجیره‌ای بلند، از دیرباز موضوع مطالعه‌ی گسترده در فیزیک، شیمی و علم مواد بوده‌اند. در دهه‌های گذشته، درک بهتر رفتار دینامیکی پلیمرها به ویژه در شرایط محیطی مختلف مانند تغییرات دما، به پیشرفت‌های قابل توجهی در توسعه‌ی مواد جدید و درک فرایندهای زیستی منجر شده است. یکی از پدیده‌های مهم در رفتار پلیمرها، **رمبش** یا فشرده‌شدن زنجیره تحت تأثیر شرایط محیطی است، که نقش کلیدی در فرایندهایی مانند تاخوردگی پروتئین‌ها و تشکیل ساختارهای درشت مولکولی دارد. مطالعه‌ی دینامیک رمبش در پلیمرها نیازمند درک دقیق از تعاملات درون‌مولکولی و اثرات محیط حلال است. در این راستا، استفاده از **دینامیک لانژوین به** عنوان روشی کارآمد برای مدل‌سازی تاثیرات گرمایی و نیروهای تصادفی محیطی، امکان بررسی دقیق این پدیده را فراهم می‌کند. دینامیک لانژوین با وارد کردن نویز تصادفی و نیروی اصطکاکی، رفتار سیستم را در حضور یک حلال مؤثر بدون نیاز به مدل‌سازی صریح ذرات حلال شبیه‌سازی می‌کند. در این مطالعه، محیط حلال به صورت ضمنی به عنوان یک **حلال ضعیف** در نظر گرفته شده است، به طوری که تمایل مونومرها به یکدیگر بیشتر از تمایل آن‌ها به محیط اطراف است و این موضوع به پیشبرد فرآیند رمبش کمک می‌کند. این مدل‌سازی حلال ضعیف اهمیت ویژه‌ای در شبیه‌سازی رفتار رمبشی پلیمرها در شرایط زیستی و صنعتی دارد. اهمیت این مطالعه در چندین بعد قابل توجه است: نخست، مطالعه‌ی این فرآیند در سطح بنیادین، بینشی عمیق‌تر در مورد مکانیسم‌های بنیادی پدیده‌هایی چون جدایی فاز در سیستم‌های زیستی و تشکیل اندامک‌های بدون غشا فراهم می‌آورد. دوم، با استفاده از شبیه‌سازی‌های عددی، امکان بررسی شرایطی فراهم می‌شود که ممکن است در آزمایش‌های تجربی دستیابی به آن‌ها دشوار باشد. در این پژوهش، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک لانژوین، اثر دما بر فرآیند رمبش یک رشته‌ی پلیمری بررسی شده است. تحلیل کمیت‌های آماری همچون **شعاع ژیراسیون، میانگین مربع جابجایی** و **ماتریس مجاورت** در طول زمان، اطلاعات ارزشمندی درباره‌ی نحوه‌ی تغییر شکل و رفتار دینامیکی رشته‌ی پلیمری در دماهای مختلف ارائه می‌دهد.

مدل و روش کار شبیه سازی

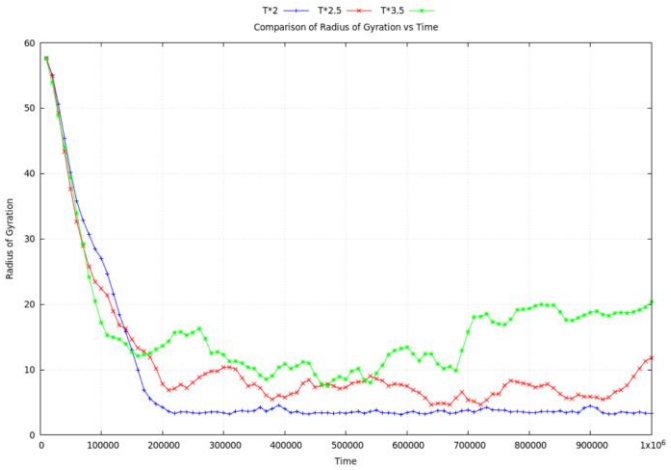
در این مطالعه، یک زنجیره‌ی پلیمری شامل ۲۰۰ مونومر یکسان مدل‌سازی شده است. برای توصیف برهم‌کنش‌های بین ذرات، از ترکیبی از دو نوع پتانسیل استفاده شده است. پتانسیل لنارد–جونز برای مدل‌سازی برهم‌کنش‌های غیراتصالی بین تمام جفت‌های مونومرها به کار گرفته شده، که شامل بخش کوتاه‌برد است و به فرم استاندارد خود اعمال گردیده است. همچنین، برای اتصال باندهای بین مونومرهای مجاور در امتداد زنجیره، از پتانسیل فنری–هارمونیک استفاده شده تا پایداری و حفظ ساختار خطی زنجیره تضمین شود. ابعاد جعبه‌ی شبیه‌سازی برابر با ۲۲۰ واحد در راستای محور x و ۴۰ واحد در راستای محورهای y و z در نظر گرفته شده و در تمامی جهات، شرایط مرزی دوره‌ای اعمال شده است تا از اثرات لبه‌ای جلوگیری شود. شبیه‌سازی‌ها در دماهای بی‌بعد شده‌ی ۲.۰، ۲.۵ و ۳.۵ انجام شده‌اند تا اثر تغییرات دما بر دینامیک رمبش زنجیره مورد بررسی قرار گیرد. گام زمانی شبیه‌سازی در بخش‌های مختلف، به منظور مشاهده‌ی اثرات دینامیکی در بازه‌های زمانی گوناگون، تغییر داده شده است. با این حال، داده‌های اصلی مربوط به پارامترهای مورد مطالعه در بازه‌ای معادل با یک میلیون واحد زمان بی‌بعد شده جمع‌آوری شده که دقت مناسبی برای ردیابی حرکات ذرات فراهم می‌کند. در برخی از تحلیل‌ها، به منظور بررسی بهتر رفتار کوتاه‌مدت سامانه، از تایم‌استپ‌های کوچکتر یا نمونه‌برداری‌های با فواصل زمانی متفاوت استفاده شده است. برای تحلیل ویژگی‌های ساختاری و دینامیکی زنجیره، کمیت‌های زیر محاسبه شده‌اند:

$$R_g = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(r_i - r_{cm})^2}$$

شعاع ژیراسیون برای ارزیابی میزان گستردگی زنجیره پلیمری در فضا محاسبه شده است. در این محاسبه، فاصله‌ی هر مونومر نسبت به مرکز جرم زنجیره مورد استفاده قرار گرفته و میانگین‌گیری روی تمام مونومرها انجام شده است. برای برآورد دقت نتایج، انحراف معیار شعاع ژیراسیون در طول زمان‌های مختلف تعیین شده و به عنوان خطای اندازه‌گیری گزارش شده است. برای تحلیل رفتار حرکتی مونومرها، میانگین مربع جابجایی محاسبه شده است. در این محاسبه، جابجایی هر مونومر نسبت به موقعیت اولیه‌ی خود در زمان‌های مختلف اندازه‌گیری شده و میانگین‌گیری بر روی تمامی مونومرها صورت گرفته است تا رفتار پخشی سامانه به دقت بررسی شود. به منظور تحلیل ساختار رمبیده زنجیره، ماتریس مجاورت تعریف گردیده است. در این ماتریس، برای هر جفت مونومر، اگر فاصله‌ی بین آن‌ها کمتر ازمقدار حدی (۲.۵) باشد، مقدار ۱ به ماتریس اختصاص داده می‌شود و در غیر این صورت مقدار ۰ ثبت می‌شود. این ماتریس اطلاعات ارزشمندی درباره‌ی میزان و نحوه فشردگی زنجیره و ارتباطات بین بخش‌های مختلف آن در اختیار قرار می‌دهد. برای مشاهده‌ی ساختارهای فضایی و تحلیل‌های تصویری، از نرم‌افزار **اوویتو** برای پردازش و نمایش داده‌های شبیه‌سازی استفاده شده است.

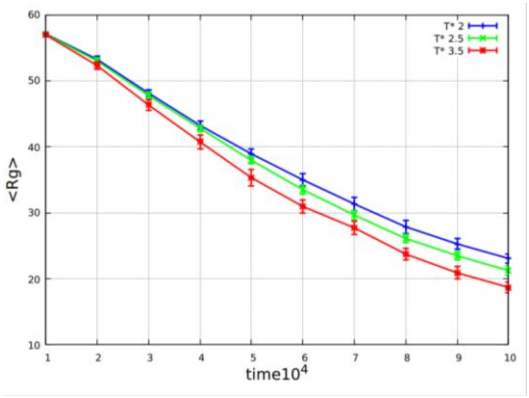
نتایج و بحث

با استفاده از محاسبات عددی و اجرای آن‌ها در بسته‌ی شبیه‌سازی لمپس و تحلیل داده‌های به‌دست‌آمده، نتایج مربوط به شعاع ژیراسیون زنجیره‌ی پلیمری در دماهای مختلف استخراج گردید. شکل (۱) تغییرات شعاع ژیراسیون یک رشته‌ی شامل ۲۰۰ مونومر را در دماهای ۲ و۲.۵ و۳.۵ نمایش می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، زنجیره‌ی پلیمری که در ابتدا به صورت خطی در راستای محور x چیده شده بود، در تمامی دماها به سمت رمبش و جمع‌شدگی حرکت می‌کند.



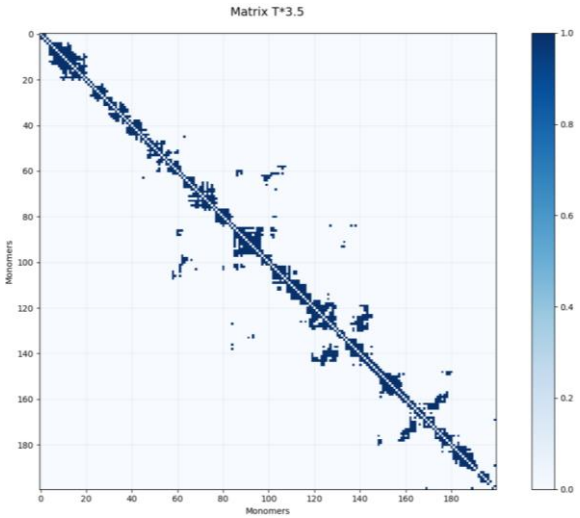
شکل ۱: شعاع ژیراسیون در سه دمای مختلف(رنگ سبز دمای ۳.۵ رنگ قرمز دمای ۲.۵ و رنگ آبی دمای ۲)

با این حال، شدت و الگوی این رمبش با تغییر دما متفاوت است. در دمای ۳.۵ زنجیره پس از رمبش اولیه تمایل بیشتری به باز شدن مجدد نشان می‌دهد، به طوری که در بازه‌های زمانی مشخصی شعاع ژیراسیون افزایش می‌یابد. در دمای ۲.۵ این رفتار کمتر مشاهده شده و زنجیره پس از رمبش اولیه پایدارتری دارد. در مقابل، در دمای ۲، رمبش زنجیره به‌صورت یکنواخت‌تر و مداوم‌تری رخ می‌دهد و شعاع ژیراسیون به طور پیوسته کاهش می‌یابد، که نشان‌دهنده‌ی تشکیل ساختارهای متراکم‌تر در این دما است. این نتایج بیانگر آن است که افزایش دما می‌تواند باعث کاهش پایداری ساختار رمبیده و افزایش نوسانات ساختاری در طول زمان گردد، در حالی که در دماهای پایین‌تر، سامانه تمایل بیشتری به حفظ ساختار رمبیده و متراکم خود نشان می‌دهدهمچنین، تحلیل خطای اندازه‌گیری شعاع ژیراسیون شکل(۲) در طول زمان نشان می‌دهد که در دماهای پایین‌تر، انحراف معیار شعاع ژیراسیون کمتر است، که بیانگر پایداری بالاتر ساختار رمبیده در این دماهاست. در مقابل، در دماهای بالاتر به دلیل افزایش نوسانات حرارتی، تغییرات بیشتری در شعاع ژیراسیون مشاهده می‌شود. این نتایج همسو با تحلیل‌های ارائه شده در خصوص میانگین مربع جابجایی و ماتریس مجاورت است و نقش کلیدی دما را در کنترل رفتار رمبش زنجیره پلیمری تأیید می‌کند.

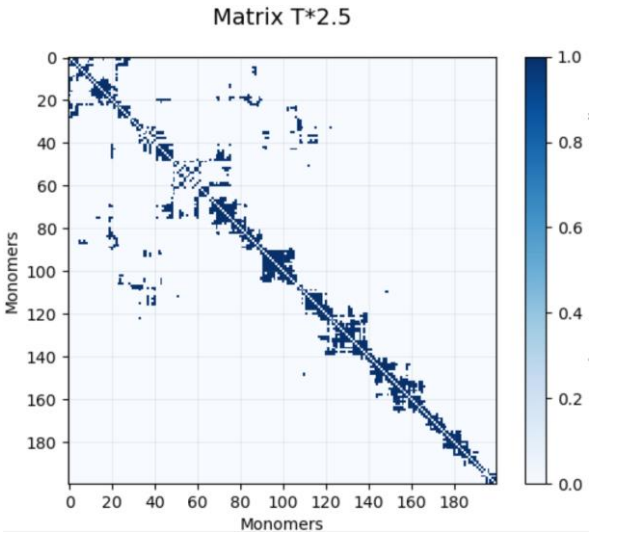


شکل ۲: با بدست آوردن میانگین شعاع ژیراسیون برحسب زمان خطای اندازه گیری در سه دما نشان داده شده است.

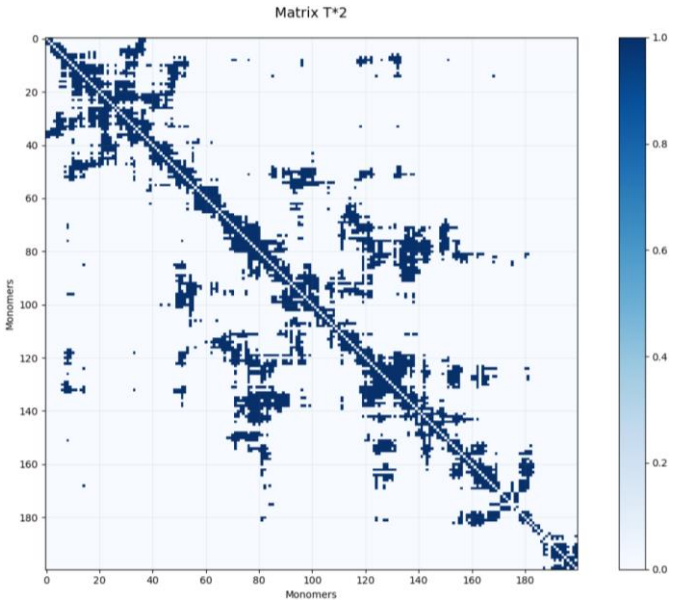
در ادامه، در شکل (۳.۱ و ۳.۲ و ۳.۳) ماتریس مجاورت زنجیره‌ی پلیمری در دماهای ۲، ۲.۵و۳.۵ مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاصل نشان می‌دهد که با کاهش دما، نه تنها مونومرهای مجاور در امتداد زنجیره با یکدیگر برهم‌کنش دارند، بلکه مونومرهای دورتر نیز به دلیل رمبش زنجیره وارد ناحیه‌ی برهم‌کنش می‌شوند. این رفتار ناشی از فشرده‌تر شدن زنجیره در دماهای پایین است که موجب افزایش تعداد تماس‌های بین مونومری می‌گردد.



شکل ۳.۱: نمایش ماتریس مجاورت در دمای ۳.۵ که نقاط آبی نشان دهنده برهم کنش بین مونومرها و نقاط سفید عدم برهم کنش بین آنها می باشد.



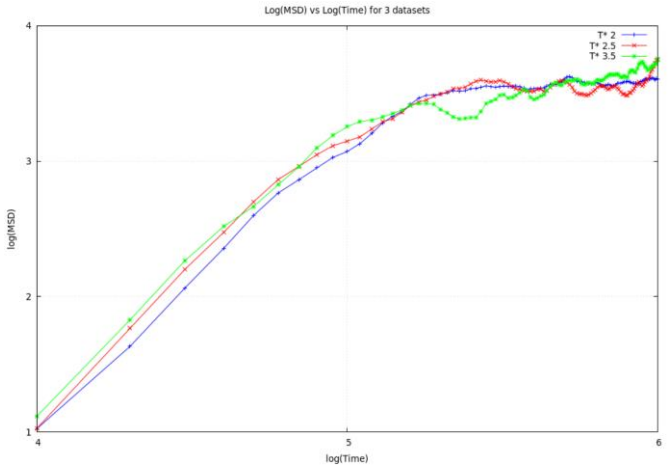
شکل ۳.۲: نمایش ماتریس مجاورت در دمای ۲.۵ که نقاط آبی نشان دهنده برهم کنش بین مونومرها و نقاط سفید عدم برهم کنش بین آنها می باشد.



شکل ۳.۳: نمایش ماتریس مجاورت در دمای ۲ که نقاط آبی نشان دهنده برهم کنش بین مونومرها و نقاط سفید عدم برهم کنش بین آنها می باشد.

در مقابل، با افزایش دما، زنجیره تمایل بیشتری به باز شدن پیدا کرده و ساختار گسترده‌تری به خود می‌گیرد؛ در نتیجه، برهم‌کنش‌ها عمدتاً به مونومرهای مجاور محدود می‌شود و تماس میان مونومرهای دورتر کاهش می‌یابد. این روند بیانگر تأثیر مستقیم دما بر ساختار فضایی و توزیع تماس‌های داخلی زنجیره است. برای

بررسی رفتار حرکتی ذرات در سیستم شبیه‌سازی شده، تغییرات لگاریتمی میانگین مربع جابجایی بر حسب لگاریتم زمان در دماهای بی‌بعد شده‌ی ۲ و ۲.۵ و ۳.۵ محاسبه و در شکل(٤) نمایش داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در تمامی دماها، رفتار اولیه‌ی سیستم به صورت یک ناحیه‌ی رشد وابسته به توان مشاهده می‌شود که نشان‌دهنده‌ی حرکت براونی محدود در زمان‌های کوتاه است.



شکل ٤: میانگین مربع جابجایی در سه دما ۲ و ۲.۵ و ۳.۵

مقایسه‌ی نمودارها در دماهای مختلف نشان می‌دهد که در دمای بالاتر (۳.۵) میانگین مربع جابجایی در زمان‌های میانی بیشتر از دماهای پایین‌تر است. این امر به دلیل بازتر بودن ساختار زنجیره در دماهای بالا و در نتیجه آزادی حرکتی بیشتر مونومرها می‌باشد. در مقابل، در دمای پایین‌تر (۲)، زنجیره رمبیده‌تر بوده و حرکت ذرات محدودتر شده است که در مقادیر پایین‌تر در طول زمان مشهود است. نتایج این بخش به خوبی با تحلیل‌های انجام شده بر اساس شعاع ژیراسیون و ماتریس مجاورت همخوانی دارد و نشان‌دهنده‌ی تأثیر قابل توجه دما بر دینامیک رمبش و میزان جابجایی ذرات در زنجیره‌ی پلیمری می‌باشد.

مرجع‌ها

[1] M. Rubinstein, R. Colby, Polymer physics

[2] R. Phillips, J. Kondev, J. Theriot, H. G. Garcia, Physical Biology of the Cell

[3] M. K. Hazra, Y. Levy, The Journal of PHYSICAL CHEMISTRY, https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcb.0c09975 Revised: February 12, 2021

[4] G. L. Dignon, W. Zheng, Y. C. Kim, R. B. Best, J. Mittal , PLoS Comput Biol 14(1): e1005941 (2018)

بررسی تأثیر زمان لایه‌نشانی و عملیات حرارتی بر خواص الکتروشیمیایی الکترود اکسی‌هیدروکسید نیکل

کارگر شاکر لنگرودی، عرفان[۱]؛ ظفرکیش، هانیه[۲]؛ عباس‌زاده، داود[۳]

[۱]گروه فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی زنجان، زنجان

چکیده

اکسی هیدروکسید نیکل به‌دلیل ظرفیت نظری بالای خود (حدود ۲۰۸۲ فاراد بر گرم) و وجود حالت‌های اکسایش چندگانه، به‌عنوان یک ماده‌ی امیدبخش برای الکترودهای شبه‌خازنی شناخته می‌شود. در این پژوهش، الکترودهای بر پایه‌ی اکسی هیدروکسید نیکل با استفاده از روش لایه‌نشانی الکتروشیمیایی تهیه گردیدند. زمان‌های مختلف لایه‌نشانی (۳ دقیقه، ۵ دقیقه، ۱۰ دقیقه، ۳۰ دقیقه و ۹۰ دقیقه) مورد بررسی قرار گرفتند. علاوه‌براین، تأثیر عملیات حرارتی در دمای ۱۸۰ درجه‌ی سانتی‌گراد بر خواص الکتروشیمیایی نمونه‌ها ارزیابی شد. نتایج حاصل از آزمون‌های ولتامتری چرخه‌ای نشان داد که کاهش زمان لایه‌نشانی منجر به افزایش ظرفیت شبه‌خازنی نمونه‌ها شده است. نمونه‌ی لایه‌نشانی‌شده به مدت ۳ دقیقه بالاترین ظرفیت ویژه را در میان نمونه‌های دیگر نشان داد. همچنین مقایسه‌ی نمونه‌های با جرم مشابه نشان داد که عملیات حرارتی ملایم در دمای ۱۸۰ درجه‌ی سانتی‌گراد باعث کاهش نسبی ظرفیت ویژه گردیده است. این نتایج تأکید می‌کند که کاهش زمان لایه‌نشانی تأثیر مثبت قابل توجهی بر بهبود خواص شبه‌خازنی دارد، درحالی‌که اثر عملیات حرارتی نیازمند بررسی بیشتر از منظر پایداری ساختاری می‌باشد.

واژگان کلیدی: الکترود اکسی‌هیدروکسید نیکل، ظرفیت شبه‌خازنی، الکترودیپوزیشن ، عملیات حرارتی، زمان لایه‌نشانی.

Investigation of the Effect of Deposition Time and Heat Treatment on the Electrochemical Properties of Nickel Oxyhydroxide Electrode

Kargar Shaker Langeroudi, Erfan [1]; Zafarkish, Haniyeh[2]; Abbaszadeh, Davood[3]

[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan

Abstract

Nickel oxyhydroxide, due to its high theoretical capacitance (~2082 F/g) and multiple oxidation states, is recognized as a promising material for pseudocapacitor electrodes. In this study, nickel oxyhydroxide-based electrodes were prepared using an electrochemical deposition method. Various deposition times (3, 5, 10, 30, and 90 minutes) were investigated. In addition, the effect of heat treatment at 180°C on the electrochemical properties of the samples was evaluated. The results of cyclic voltammetry tests showed that reducing the deposition time led to an increase in the pseudocapacitive performance of the samples. The electrode deposited for 3 minutes exhibited the highest specific capacitance among the studied samples. Furthermore, a comparison of samples with similar active material mass revealed that heat treatment at 180°C resulted in a decrease in specific capacitance. These findings emphasize that reducing deposition time significantly improves pseudocapacitive behavior, while the effect of heat treatment requires further investigation in terms of structural stability.

Keywords: Nickel oxyhydroxide electrode, Pseudocapacitance, Electrodeposition, Heat treatment, Deposition time.

مقدمه

شبه‌خازن‌ها با ذخیره‌ی بار از طریق واکنش‌های سریع اکسایش-کاهش سطحی، ظرفیت‌های بالاتری نسبت به خازن‌های لایه‌ی دوتایی ارائه می‌کنند [۱]. ترکیبات نیکل مانند هیدروکسید نیکل و اکسی‌هیدروکسید نیکل، به دلیل هزینه‌ی پایین، فراوانی و رفتار شبه‌خازنی قوی، مورد توجه بسیاری قرار گرفته‌اند [۲]. هیدروکسید نیکل با دارا بودن گذار اکسایش $Ni^{2+} \leftrightarrow Ni^{3+}$، ظرفیت نظری بالایی در حدود ۲۰۸۲ فاراد بر گرم دارد [۳]. در محیط قلیایی، واکنش اکسایش به صورت زیر انجام می‌شود:

$$Ni(OH)_2 + OH^- \leftrightarrow NiOOH + H_2O + e^- \qquad (۱)$$

در تست ولتامتری چرخه‌ای، قله‌های اکسایش و کاهش متناظر با این واکنش معمولاً در بازه‌ی ۰ تا ۰.٦ ولت نسبت به الکترود مرجع Ag/AgCl مشاهده می‌شوند.

عملکرد الکتروشیمیایی این مواد به شدت به ضخامت لایه و ریزساختار آن‌ها وابسته است؛ به طوری که لایه‌های بسیار نازک ظرفیت محدودی دارند، درحالی‌که لایه‌های بیش از حد ضخیم به دلیل محدودیت نفوذ یون، ظرفیت ویژه‌ی کمتری به ویژه در نرخ‌های جاروب بالا نشان می‌دهند [٤]. عملیات حرارتی نیز عامل مهم دیگری در بهینه‌سازی این ساختارها محسوب می‌شود؛ دمای بالا می‌تواند فرآیند دهیدروکسیلاسیون، بهبود هدایت الکترونی و یا حتی تبدیل ساختاری را القا کند. البته، برخی مطالعات نشان داده‌اند که حرارت‌دهی بیش از حد می‌تواند منجر به کاهش قله‌های شبه‌خازنی گردد [۵].

در این پژوهش، با هدف بهینه‌سازی رفتار الکتروشیمیایی، تأثیر زمان‌های مختلف لایه‌نشانی و همچنین عملیات حرارتی مناسب (۱۸۰ درجه سانتی‌گراد) بر خواص شبه‌خازنی اکسی‌هیدروکسید نیکل بررسی شده است.

روش انجام آزمایش

۱- تهیه محلول پیش‌ماده

در ابتدا ۲۵۰ میلی‌گرم نیترات نیکل شش‌آبه در ۱۰ میلی‌لیتر آب دیونیزه شده حل شد. این محلول به مدت ۵ دقیقه تحت همزدن مغناطیسی با سرعت ۱۰۰۰ دور بر دقیقه آماده‌سازی گردید.

۲- لایه‌نشانی الکتروشیمیایی هیدروکسید نیکل

لایه‌نشانی هیدروکسید نیکل روی فوم نیکل به ابعاد ۰.۵ × ۱ سانتی‌مترمربع انجام شد. فوم نیکل پیش از انجام لایه‌نشانی شسته و خشک شده و سپس جرم آن اندازه‌گیری شده است. فرایند لایه‌نشانی در حضور الکترود مرجع Ag/AgCl و الکترود مقابل پلاتین با استفاده از تکنیک کرونوآمپرومتری صورت گرفت. لایه‌نشانی در پتانسیل ثابت ۲.۲۳٦- ولت انجام شد. در طی فرایند، تشکیل یک لایه‌ی سبزرنگ بر سطح فوم نیکل مشاهده گردید که متعلق به هیدروکسید نیکل بود. زمان‌های مختلف لایه‌نشانی به منظور کنترل و قیاس جرم ماده‌ی فعال رسوب داده شده، در نظر گرفته شد.

۳- تبدیل هیدروکسید نیکل به اکسی‌هیدروکسید نیکل

پس از لایه‌نشانی، نمونه‌ها در محلول ۰.۱ مولار هیدروکسید پتاسیم قرار داده شدند و فرایند تبدیل هیدروکسید نیکل به اکسی‌هیدروکسید نیکل با اعمال پتانسیل ثابت ۰.٧٦٤ ولت به مدت ٦۰ دقیقه در حضور الکترودهای مرجع Ag/AgCl و مقابل پلاتین

انجام گردید. تغییر رنگ سطح نمونه‌ها به قهوه‌ای تیره تأییدی بر این تبدیل بود. این مرحله برای تمامی نمونه‌ها یکسان انجام داده شد.

٤- خشک‌کردن و عملیات حرارتی

تمامی نمونه‌ها پس از تبدیل، در دمای ٦٠ درجه سانتی‌گراد و به مدت ٤ ساعت در آون خشک شدند. بخشی از نمونه‌ها جهت بررسی اثر عملیات حرارتی، تحت حرارت‌دهی در کوره در دمای ۱۸۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۲ ساعت قرار گرفتند و اجازه داده شد که به صورت طبیعی درون کوره خنک شوند. تمامی نمونه‌ها پس از این مرحله، مجدداً وزن شدند تا جرم ماده فعال نشانده شده بر آن‌ها محاسبه گردد.

۵- اندازه‌گیری‌های الکتروشیمیایی

اندازه‌گیری‌های الکتروشیمیایی در محلول ۱ مولار هیدروکسید پتاسیم انجام شد. در این اندازه‌گیری‌ها از الکترود مرجع Ag/AgCl و الکترود مقابل پلاتین استفاده گردید. با دمیدن مداوم گاز نیتروژن در طول اندازه‌گیری‌ها در الکترولیت، حضور اکسیژن محلول به حداقل رسید. تست‌های ولتامتری چرخه‌ای در نرخ‌های جاروب ۵، ۱۰، ۲۰، ۵۰ و ۱۰۰ میلی‌ولت بر ثانیه در بازه‌ی ولتاژ ۰ تا ۰.٦ ولت ثبت شدند.

نتایج و بحث

۱- معرفی نمونه‌ها و شرایط سنتز

در این تحقیق، به منظور بررسی اثر زمان لایه‌نشانی و عملیات حرارتی بر خواص الکتروشیمیایی اکسی‌هیدروکسید نیکل، پنج نمونه تحت شرایط مختلف آماده شدند. متغیرهای اصلی در این فرآیند شامل زمان لایه‌نشانی (۳، ۵، ۱۰، ۳۰ و ۹۰ دقیقه) و وجود یا عدم وجود عملیات حرارتی در دمای ۱۸۰ درجه‌ی سانتی‌گراد بود. مشخصات کامل نمونه‌ها در جدول ۱ ارائه شده است.

پس از لایه‌نشانی و تبدیل الکتروشیمیایی، جرم ماده‌ی فعال هر نمونه اندازه‌گیری شد. نتایج نشان داد که با افزایش زمان لایه‌نشانی، جرم ماده‌ی فعال به طور کلی افزایش یافته است. در مقابل، عملیات حرارتی باعث کاهش نسبی جرم در برخی نمونه‌ها شد. این کاهش می‌تواند ناشی از فرآیندهای خشک شدن شدید، دهیدروکسیلاسیون ساختاری و یا ریزش مکانیکی بخش‌های ضعیف‌تر لایه‌ی نشانده شده طی حرارت‌دهی باشد. بنابراین، عملیات حرارتی علاوه‌بر تغییر ساختار کریستالی و بهبود هدایت، ممکن است منجر به تغییراتی در میزان جرم نهایی ماده‌ی فعال گردد.

همچنین دو نمونه‌ی ۳ (بدون عملیات حرارتی) و ۵ (با عملیات حرارتی) دارای جرم ماده‌ی فعال تقریباً یکسان (۱.٤٧ و ۱.٤٥ میلی‌گرم) بودند که باعث شد تا امکان ارزیابی اثر عملیات حرارتی بر رفتار شبه‌خازنی بدون دخالت متغیر جرم فعال فراهم شود.

جدول ۲: مشخصات نمونه‌های آماده شده.

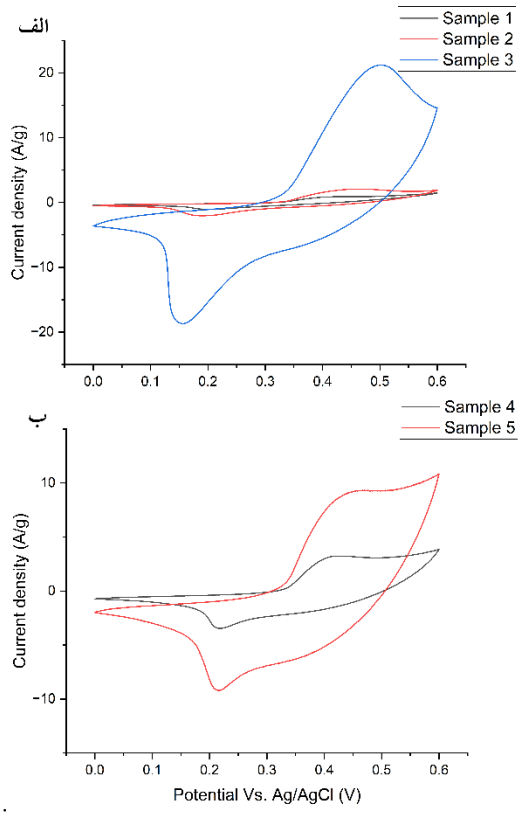
نام نمونه	زمان لایه‌نشانی (دقیقه)	کوره	جرم ماده فعال (میلی‌گرم)
نمونه ۱	۹۰	×	۱۵.۱
نمونه ۲	۳۰	×	۷.۲٤
نمونه ۳	۳	×	۱.٤٧
نمونه ٤	۱۰	✓	۳.۲
نمونه ۵	۵	✓	۱.٤٥

۲- اثر زمان لایه‌نشانی بر خواص الکتروشیمیایی

به منظور بررسی اثر زمان لایه‌نشانی، تست ولتامتری چرخه‌ای بر روی نمونه‌هایی با زمان‌های مختلف انجام شد.

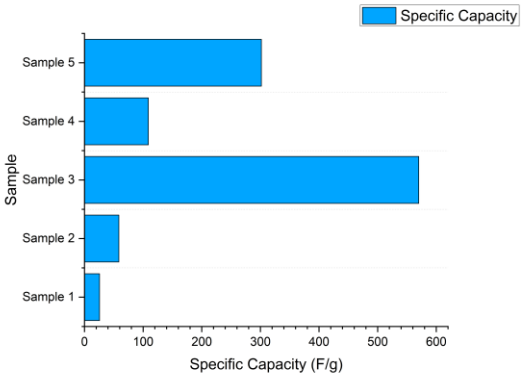
شکل ۱-الف و ۱-ب منحنی‌های ولتامتری چرخه‌ای نمونه‌های بدون عملیات حرارتی (نمونه‌های ۱ تا ۳) و عملیات حرارتی شده (نمونه‌های ٤ و ۵) را در نرخ جاروب ۱۰ میلی‌ولت بر ثانیه نشان می‌دهد. با کاهش زمان لایه‌نشانی، افزایش جریان برگشتی و مساحت

زیر منحنی‌ها مشاهده می‌شود که نشان‌دهنده‌ی بهبود رفتار شبه‌خازنی است. نمونه‌ی ۳ در شکل ۱–الف و نمونه‌ی ۵ در شکل ۱–ب بیشترین مساحت زیر منحنی را نشان می‌دهند که ناشی از تشکیل لایه‌ی نازک‌تر، کاهش مقاومت انتقال جرم و بهبود نفوذ یون‌های الکترولیت است. همچنین شکل ۱–ب نشان می‌دهد که کاهش زمان لایه‌نشانی حتی پس از عملیات حرارتی نیز تأثیر مثبتی بر رفتار شبه‌خازنی دارد.



شکل ۱: افزایش جریان برگشتی و مساحت زیر منحنی‌ها با کاهش زمان لایه‌نشانی. (الف) منحنی‌های ولتامتری چرخه‌ای نمونه‌های بدون عملیات حرارتی و (ب) نمونه‌های عملیات حرارتی در نرخ جاروب ۱۰ میلی‌ولت بر ثانیه.

برای تحلیل کمی‌تر، ظرفیت ویژه‌ی نمونه‌ها از منحنی‌های ولتامتری محاسبه شده و در شکل ۲ ارائه گردیده است. نتایج نشان می‌دهد که ظرفیت ویژه با کاهش زمان لایه‌نشانی افزایش یافته است؛ به گونه‌ای که نمونه‌ی ۳ (حدود ۵۷۰ فاراد بر گرم) و نمونه‌ی ۵ (حدود ۳۰۱ فاراد بر گرم) بالاترین ظرفیت ویژه را نسبت به سایر نمونه‌ها نشان داده‌اند. این یافته‌ها نشان می‌دهد که کاهش زمان لایه‌نشانی، با کاهش جرم ماده‌ی فعال و بهبود ساختار الکترودی، عملکرد الکتروشیمیایی را ارتقا داده و می‌تواند در توسعه‌ی الکترودهای شبه‌خازنی با کارایی بالا مورد استفاده قرار گیرد.



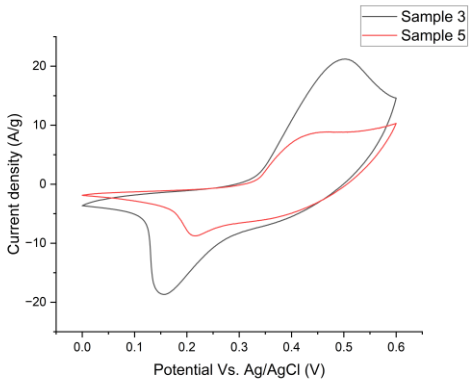
شکل ۲: ظرفیت ویژه نمونه‌های مختلف در نرخ جاروب ۱۰ میلی‌ولت بر ثانیه.

۳– اثر عملیات حرارتی بر خواص الکتروشیمیایی

به این منظور، نمونه‌های ۳ (بدون عملیات حرارتی) و ۵ (با عملیات حرارتی) که جرم ماده‌ی فعال آن‌ها مشابه است، با یکدیگر مقایسه شدند. با وجود اختلاف جزئی در زمان لایه‌نشانی این دو نمونه، مقایسه به دلیل نزدیکی جرم ماده‌ی فعال معتبر در نظر گرفته شده است (جدول ۱). بر اساس نتایج شکل ۳ و مقادیر ظرفیت ویژه‌ی ارائه شده در شکل ۲، مشاهده می‌شود که نمونه‌ی ۳ جریان برگشتی بالاتر و ظرفیت ویژه‌ی بیشتری نسبت به نمونه‌ی ۵ نشان می‌دهد. ظرفیت ویژه‌ی نمونه‌ی ۳ حدود ۵۷۰ فاراد بر گرم و ظرفیت ویژه‌ی نمونه‌ی ۵ حدود ۳۰۱ فاراد بر گرم است.

این نتایج نشان می‌دهد که عملیات حرارتی در دمای ۱۸۰ درجه سانتی‌گراد منجر به کاهش نسبی ظرفیت شبه‌خازنی شده است. این کاهش ممکن است ناشی از تغییر ساختار ماده‌ی فعال، کاهش تعداد گروه‌های هیدروکسیل فعال یا ریزش جزئی لایه‌ی الکترودی طی

فرآیند حرارت‌دهی باشد. از سوی دیگر، عملیات حرارتی می‌تواند با بهبود کریستالیته و افزایش پایداری ساختاری، عملکرد نمونه را در چرخه‌های طولانی مدت بهبود بخشد. برای تایید این اثرات، انجام تست‌های پایداری چرخه‌ای در آینده ضروری به نظر می‌رسد.



شکل ۳: مقایسه‌ی منحنی‌های ولتامتری چرخه‌ای نمونه‌ی ۳ (بدون عملیات حرارتی) و نمونه‌ی ۵ (با عملیات حرارتی) در نرخ جاروب ۱۰ میلی‌ولت بر ثانیه.

نتیجه گیری

در این تحقیق اثر زمان لایه‌نشانی و عملیات حرارتی بر رفتار شبه‌خازنی الکترودهای اکسی‌هیدروکسید نیکل بررسی شد. نتایج نشان داد که کاهش زمان لایه‌نشانی منجر به افزایش ظرفیت شبه‌خازنی نمونه‌ها شده است که ناشی از تشکیل لایه‌های نازک‌تر، کاهش جرم ماده‌ی فعال و بهبود نفوذ یون‌های الکترولیت بود.

همچنین عملیات حرارتی در دمای ۱۸۰ درجه سانتی‌گراد منجر به کاهش نسبی ظرفیت ویژه شد که می‌تواند ناشی از تغییرات ساختاری یا کاهش گروه‌های فعال سطحی باشد. با این حال، عملیات حرارتی پتانسیل بهبود پایداری ساختاری الکترودها را داراست که برای کاربردهای طولانی‌مدت اهمیت ویژه‌ای دارد. از این رو، مطالعه بیشتر عملیات حرارتی جهت بررسی خواص بلندمدت این الکترودها توصیه می‌شود.

مرجع‌ها

[۱] B. E. Conway, *Electrochemical Supercapacitors: Scientific Fundamentals and Technological Applications*, Springer Science & Business Media, 1999.

[۲] H. Wang, H. S. Casalongue, Y. Liang, and H. Dai, "$Ni(OH)_2$ nanoplates grown on graphene as advanced electrochemical pseudocapacitor materials," *Journal of the American Chemical Society*, **132**(21), 7472–7477, 2010.

[۳] Medway, S., Lucas, C., Kowal, A., Nichols, R., and Johnson, D., "In situ studies of the oxidation of nickel electrodes in alkaline solution," *Journal of Electroanalytical Chemistry*, **587**(1), 172–181, 2006.

[۴] Jusys, Z., and Wiesener, T., "Synthesis, characterization and electrochemical performance of battery grade NiOOH," *Journal of Applied Electrochemistry*, **22**(4), 325–331, 1992.

[۵] Horànyi, T. S., "Investigation of the effects of heat treatment on the β-$Ni(OH)_2$–β-NiOOH system using IR spectroscopy," *Thermochimica Acta*, **142**(1), 143–150, 1989.

بررسی تجربی و عددی نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای تابش صوتی

رامه، مهدی[۱]؛ احدی اخلاقی، احسان[۱و۲]؛ حاجی‌زاده، فائقه[۱و۲]

[۱] ایران، زنجان، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه، دانشکده فیزیک، کدپستی ۴۵۱۳۷۶۶۷۳۱

[۲] ایران، زنجان، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه، مرکز پژوهشی اپتیک، کدپستی ۴۵۱۳۷۶۶۷۳۱

چکیده

در این پژوهش نیروی صوتی برهم‌کنش بین‌ذره‌ای در ابعاد میکرون به روش عددی و تجربی بررسی شده است. برای این منظور نیروی برهمکنش یک ذره با دیگر ذرات تله‌اندازه شده در یک گره خطی فشار صوتی به صورت عددی محاسبه شد. برای بررسی تجربی، یک محفظه تله‌اندازی صوتی در ابعاد میلی‌متر برای تله‌اندازی خطی میکروذرات طراحی و ساخته شد. یک ذره توسط انبرک نوری به نزدیکی گره خطی فشار صوتی منتقل و رها شد و حرکت آن تحت نیروهای آکوستیکی تابشی و برهم‌کنش بین‌ذره‌ای بررسی شد. نتایج تجربی نشان داد نیروی برهم‌کنش نقش مهمی در دینامیک ذره داشته و با پیش‌بینی‌های عددی هم‌خوانی خوبی دارد. این یافته‌ها می‌تواند برای بهینه‌سازی سامانه‌های آکوستوفلوئیدیکی کمک می‌کند.

واژگان کلیدی: انبرک صوتی، میکروذرات، نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای، نیروی تابش صوتی.

Experimental and numerical investigation of the interparticle interaction acoustic radiation force

Rameh, Mahdi [1]; A. Akhlaghi, Ehsan [1,2]; Hajizadeh, Faegheh [1,2]

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

[2] *Optics Research Center, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan 45137-66731, Iran*

Abstract

In this study, the interparticle acoustic interaction force at the micron scale was investigated numerically and experimentally. For this purpose, the interaction force of a particle with other particles trapped at an acoustic pressure nodal line was calculated numerically. A millimeter-scale acoustic trapping chamber was designed and built for experimental investigation to create a linear trapping configuration for microparticles. A particle was moved near the acoustic pressure nodal line using optical tweezers and then released. Its motion was analyzed under the influence of acoustic radiation forces and interparticle interaction forces. The experimental results showed that the interaction force plays an important role in particle dynamics and showed good agreement with numerical predictions. These findings can help in the optimization of acoustofluidic systems.

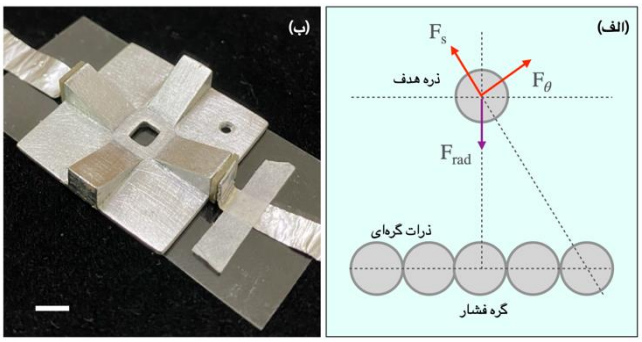
***Keywords**: Acoustic Radiation Force, Acoustic Tweezers, Interparticle Interaction Force, Microparticles.*

مقدمه

انبرک صوتی، روشی غیرتماسی برای تله‌اندازی و دستکاری ذرات با استفاده از نیروی تابش امواج صوتی است. در این روش، ذرات بر اساس ویژگی‌های فیزیکی مانند چگالی و تراکم‌پذیری در نواحی گره‌ای فشار صوتی به دام می‌افتند [۱]. به دلیل ماهیت غیرمخرب امواج صوتی، این فناوری زیست‌سازگار بوده و برای نگهداری و مطالعه‌ی نمونه‌های زنده، از جمله سلول‌های سرطانی، بسیار مناسب است [۲]. بهبود کارایی و توسعه‌ی بیشتر این فناوری، نیازمند درک دقیق نیروهای آکوستیکی مؤثر بر رفتار ذرات است.

امواج صوتی ایستاده، که توسط پیزوترانسدیوسرها در محفظه ایجاد می‌شوند، الگوهای میدان فشاری مشخصی را شکل می‌دهند. در این محفظه‌ها، میکروذرات و نمونه‌های زیستی تحت تأثیر نیروی تابش صوتی به سوی نواحی با حداقل فشار صوتی، گره‌های فشار، هدایت شده و در آنجا به دام می‌افتند. علاوه بر این، پراکندگی نیروی تابش صوتی توسط میکروذرات منجر به ایجاد نیروی برهمکنش بین ذره‌ای می‌شود. در مطالعات گذشته، نیروی برهمکنش بین دو ذره بررسی شده و آزمایشاتی در این زمینه انجام شده است [۳، ٤]. این نیرو در فواصل نزدیک اهمیت قابل توجهی پیدا کرده و امکان به دام انداختن ذرات در نواحی مجاور گره‌های اصلی، زیرگره‌های فشار، را فراهم می‌کند [۵]. در شرایط آزمایشگاهی، معمولاً چندین ذره به طور همزمان حضور دارند و نیروی برهمکنش از سوی تمام ذرات پیرامون به یک ذره وارد می‌شود. درک دقیق‌تر نیروهای تابش صوتی و برهمکنش‌های بین‌ذره‌ای می‌تواند به بهبود دقت انبرک‌های صوتی و گسترش کاربردهای آن‌ها در حوزه‌های بیوفیزیک، بیوتکنولوژی و علم مواد منجر شود.

در این پژوهش، هدف بررسی تجربی و تحلیل عددی نیروهای برهمکنش بین‌ذره‌ای وارد بر یک ذره از سوی تمام ذرات پیرامون است. بدین منظور، یک محفظه‌ی تله‌ی صوتی اختصاصی طراحی و ساخته شد که قادر به تله‌اندازی گروهی از ذرات در یک بعد و تشکیل آرایش‌های خطی می‌باشد. با اعمال تغییراتی در فرکانس و اختلاف فاز نسبی امواج صوتی، امکان جابه‌جایی نمونه‌های به دام افتاده فراهم شد و قدرت تله با تنظیم دامنه‌ی موج صوتی کنترل گردید. در آزمایش‌ها، میکروذرات سیلیکا با ابعاد چند میکرون به صورت خطی در گره‌های فشار صوتی به دام افتاده‌اند. برای مطالعه‌ی نیروهای بین‌ذره‌ای، یک میکروذره‌ی هدف توسط انبرک نوری در مجاورت ذرات به دام افتاده قرار داده شده و سپس از تله‌ی نوری رها گردید. مشاهده شد که ذره‌ی رها شده تحت تأثیر نیروی تابش صوتی به سمت گره‌ی فشار حرکت کرده و در نزدیکی ذرات موجود در گره (ذرات گره‌ای)، نیروی برهمکنش قابل توجهی را تجربه کرده و نهایتاً در مجاورت گره اصلی تثبیت می‌شود. با بهره‌گیری از معادلات حاکم بر نیروها، تحلیل عددی نیروی تابش صوتی و نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای تحت شرایط آزمایشگاهی انجام شد که نتایج حاصل تطابق خوبی با داده‌های تجربی نشان داد.



شکل۱ : (الف) ذره هدف تحت تأثیر نیروی تابش صوتی به سوی گره فشار حرکت می‌کند و در مجاورت ذرات به دام افتاده در گره، نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای قابل توجهی را تجربه می‌کند. (ب) محفظه تله‌انداز صوتی که شامل پیزوترنسدیوسرها، گوه‌ها و چمبر است. نوار مقیاس ۵ میلی‌متر است.

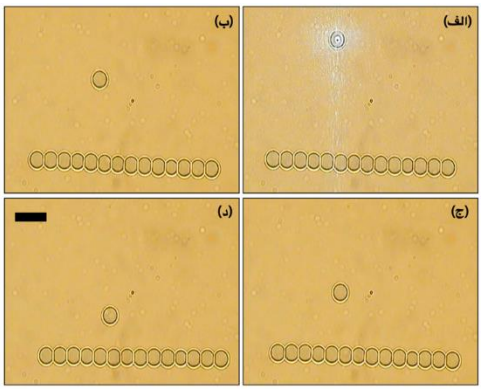
مبانی نظری

ذره‌ای که در یک محیط سیال معلق است و در معرض یک موج ایستاده صوتی قرار می‌گیرد، تحت تأثیر میانگین زمانی نیرویی قرار دارد که به آن نیروی تابش صوتی اولیه گفته می‌شود. این نیرو نقش کلیدی در جابه‌جایی، به دام‌اندازی و سازمان‌دهی ذرات در سامانه‌های آکوستوفلوئیدیک ایفا می‌کند. برای سیالی ایده‌آل و در چارچوب یک موج ایستاده صوتی تک‌بعدی، گورکوف[70] فرمول‌بندی تحلیلی این نیرو را ارائه داد [۶]. این بیان ریاضی، که مبتنی بر انرژی پتانسیل مؤثر میدان صوتی است، به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$F_{rad} = -4\pi\phi kEa^3 \sin(2ky). \qquad (۱)$$

در رابطه (۱)، $E = \frac{p^2}{4\rho_0 c_0^2}$ چگالی انرژی صوتی است (c_0 و ρ_0 سرعت صوت و چگالی در محیط پیرامون است. p میدان فشار صوتی است). a و k به ترتیب شعاع ذره و عدد موج صوتی را نمایش می‌دهند. y مکان ذره را نشان می‌دهد که گره فشار صوتی را به عنوان مبدا قرار می‌دهیم. $\phi = \frac{1}{3}\left[1 - \frac{\kappa_P}{\kappa_0}\right] + \left[\frac{\rho_P - \rho_0}{2\rho_P + \rho_0}\right]$، ضریب کنتراست صوتی را نمایش می‌دهد که ρ_P چگالی ذره است. κ_P و κ_0 به ترتیب تراکم‌پذیری ذره و محیط پیرامون را نشان می‌دهد.

علاوه بر نیروی تابش اولیه، در حضور چندین ذره، برهم‌کنش‌های دیگری نیز ظاهر می‌شود که ناشی از پراکندگی مجدد موج ایستاده از سطوح ذرات است. شکل ۱(الف) این رفتار را نمایش می‌دهد. این برهم‌کنش‌ها نیرویی ایجاد می‌کنند که به عنوان نیروی تابش ثانویه یا نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای شناخته می‌شود. مطابق با روابط۵ ارائه شده در مقاله‌ی منتشرشده توسط S. Z. Hoque، نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای برای دو ذره در موقعیت‌های دلخواه نسبت به گره فشار به صورت نوشته شده است [۳].



شکل۲ : ذره هدف با استفاده از انبرک نوری در مجاورت گره فشار قرار داده شده و سپس رها می‌شود. تحت تأثیر نیروی تابش صوتی، ذره با سرعت نسبتاً ثابتی به سمت گره فشار حرکت می‌کند. در نزدیکی گره فشار، نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای غالب شده و ذره را در یک فاصله تعادلی تثبیت می‌نماید. زمان سپری شده در هر فریم: (الف) ثانیه صفر، (ب) ثانیه اول، (ج) ثانیه دوم و (د) ثانیه پنجم. نوار مقیاس ۱۰ میکرون است.

مبانی تجربی

برای به دام‌اندازی میکروذرات، یک محفظه‌ی تله‌ی صوتی‌طراحی و ساخته شد (شکل ۱(ب)) [۵]. در این محفظه، دو منبع صوتی از نوع پیزوترنسدیوسر در مقابل یکدیگر قرار داده شدند تا یک میدان موج ایستاده صوتی ایجاد کنند. قالب آلومینیومی براساس ابعاد پیزوترنسدیوسرها واندازه‌ی ذرات هدف، به منظور بهینه‌سازی تله‌اندازی خطی طراحی شد. در این سامانه، از پیزوترنسدیوسرهایی از خانواده‌ی PZT-۵H با ابعاد ۵×۵ میلیمتر و ضخامت ۷۵۰ میکرومتر استفاده شد که در انتهای هر گوه نصب شدند. گوه‌ها به

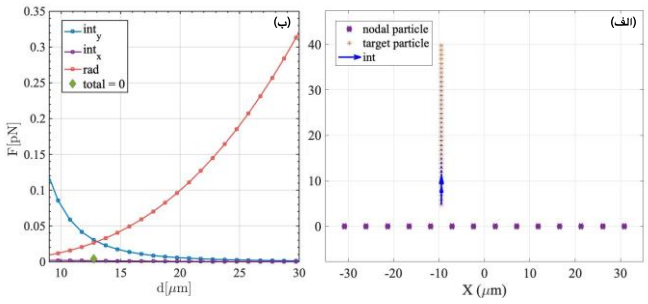
[70] Gor'kov

عنوان موجبر عمل کرده و انرژی صوتی را به ناحیه‌ی چمبر هدایت شد.

ولتاژ الکتریکی با فرکانس، دامنه و فاز مشخص توسط یک فانکشن ژنراتور به پیزوترنسدیوسرها اعمال می‌شود. پس از تحریک پیزوترنسدیوسرها، امواج صوتی تولیدشده توسط گوه‌ها انتقال یافته و با توجه به طراحی قالب، موج تخت صوتی در داخل چمبر شکل می‌گیرد. در مرکز این قالب، یک چمبر با ابعاد ۳×۳ میلی‌متر و ضخامت ۱ میلی‌متر تعبیه شده است. بخش بالایی و پایینی چمبر توسط لامل و لام پوشانده شده و سیال حامل ذرات درون آن محصور می‌شود.

نتایج و بحث

با اعمال یک موج سینوسی با دامنه ۱۳ ولت قله تا دره و فرکانس نزدیک به تشدید (۲٫۸ مگاهرتز) به هر دو پیزوترانسدیوسر، یک موج صوتی ایستاده در محفظه شکل می‌گیرد. ذرات سیلیکا با قطر ٤٫۷٤ میکرون، به دلیل اختلاف امپدانس آکوستیکی قابل توجه با محیط آب، در خطوط گره فشار به دام می‌افتند. همانطور که در شکل ۲ نشان داده شده است، با استفاده از انبرک نوری، یک ذره منفرد در مجاورت گره فشار قرار داده شده و سپس از تله‌نوری رها می‌شود. این ذره، تحت تأثیر نیروی تابش صوتی، ابتدا با سرعت نسبتاً ثابتی به سمت گره فشار حرکت می‌کند. در نزدیکی گره فشار، نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای غالب شده و ذره، در اثر تعادل بین نیروی تابش و نیروی برهمکنش، در یک فاصله تعادلی قرار می‌گردد.



شکل۳ : تحلیل عددی نیروهای وارد بر ذره هدف. (الف) بردار نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای ناشی از ذرات گره‌ای بر ذره هدف. طول و جهت بردارها نمایانگر بزرگی و راستای نیرو در موقعیت‌های مختلف ذره هدف نسبت به گره است. (ب) نمودار بزرگی نیروی تابش صوتی و نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای بر حسب فاصله ذره هدف از مرکز گره فشار. نقطه سبز، محل تعادل نیروهای تابش و برهمکنش را نشان می‌دهد که بیانگر موقعیت پایدار ذره هدف است.

با بهره‌گیری از معادلات مربوط به نیروی تابش صوتی و نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای، نیروی برایند ناشی از برهمکنش ذره هدف با ذرات به دام افتاده در گره فشار به صورت عددی تحلیل شد. شکل ۳(الف)، نمایانگر نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای وارد بر ذره هدف از سوی ذرات گره‌ای است و نشان می‌دهد که با کاهش فاصله بین ذرات در نزدیکی گره فشار، مقدار نیروی بین‌ذره‌ای افزایش می‌یابد. با وجود عدم تقارن هندسی ذره هدف نسبت به آرایش ذرات گره‌ای (شکل ۳(الف))، مولفه نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای در راستای x نسبت به نیروی برهمکنش در راستای y قابل صرف نظر کردن است. در نتیجه ذره هدف مطابق شکل ۲، تقریبا به صورت خط راست به گره فشار نزدیک می‌شود.

شکل ۳(ب) وابستگی بزرگی نیروی تابش صوتی و نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای در راستای x و y را به فاصله ذره هدف از ذرات گره‌ای (d) نمایش می‌دهد. نتایج حاکی از آن است که با کاهش فاصله ذره هدف از گره فشار، مقدار نیروی تابش صوتی و نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای به ترتیب کاهش و افزایش می‌یابد. محل تقاطع منحنی‌های نیروی تابش صوتی و نیروی برهمکنش بین‌ذره‌ای در مجاورت گره فشار، نقطه تعادل را مشخص می‌سازد که در آن

برایند نیروها صفر شده و با علامت سبز مشخص شده است. موقعیت این نقطه تعادل در نمودار شکل ۳(ب) و مکان نهایی ذره هدف در آزمایش (شکل ۲ (د))، به ترتیب ۱۳،۲۹ میکرون و ۱۲،۷٤ میکرون نسبت به مرکز گره فشار، تطابق خوبی را نشان می‌دهد که نتایج محاسباتی و تجربی را تایید می‌کند.

نتیجه گیری

در این پژوهش، نیروی برهم‌کنش بین‌ذره‌ای وارد بر یک ذره از سوی تمامی ذرات پیرامون در گره فشار به‌صورت تحلیل عددی و آزمایش تجربی بررسی شده است. اثر این نیروی برهم‌کنش در شرایطی که ذرات به‌صورت نامتقارن نسبت به ذره هدف در گره فشار قرار دارند و برای تعداد ذرات بیش از یک، تحلیل و نشان داده شده است. نتایج حاصل از تحلیل نیروها نشان می‌دهد که نیروی برهم‌کنش بین‌ذره‌ای نقش تعیین‌کننده‌ای در موقعیت تعادلی ذرات در مجاورت گره‌های فشار دارد و موقعیت نهایی ذره‌ی رها شده تطابق قابل توجهی با پیش‌بینی‌های عددی نشان می‌دهد. درک دقیق‌تر این نیروها می‌تواند گامی مؤثر در بهینه‌سازی طراحی تله‌های صوتی برای کاربردهای پیشرفته در زمینه‌های بیوفیزیک، بیوتکنولوژی و دستکاری ذرات زیستی فراهم آورد.

مرجع‌ها

[1]. K. Dholakia, B. W. Drinkwater, and M. Ritsch-Marte,“Comparing acoustic and optical forces for biomedical research,” Nat. Rev. Phys. 2, 480–491 (2020).
[2]. M. S. Gerlt, D. Haidas, A. Ratschat, P. Suter, P. S. Dittrich, and J. Dual, “Manipulation of single cells inside nanoliter water droplets using acoustic forces,” Biomicrofluidics 14, 064112 (2020).
[3]. Hoque, S. Z., and A. K. Sen. "Interparticle acoustic radiation force between a pair of spherical particles in a liquid exposed to a standing bulk acoustic wave." Physics of Fluids 32.7 (2020).
[4]. Baasch, Thierry, Wei Qiu, and Thomas Laurell. "Gap distance between pearl chains in acoustic manipulation." Physical Review Applied 18.1 (2022): 014021.
[5]. Rameh, Mahdi, Ehsan A Akhlaghi, and Faegheh Hajizadeh. "Pressure sub-node formation by interparticle acoustic radiation forces." Physics of Fluids 37.3 (2025).
[6]. H. Bruus, “Acoustofluidics 7: The acoustic radiation force on small particles”, Lab Chip 12, 1014–1021 (2012).

سازوکار کیبل-زورک در حضور نویز با رهیافت طیف توان

صادقی زاده ، سجاد[۱]؛ جعفری ، روح ا...[۲] ؛ لنگری، عبدالله[1]

[1]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شریف

[۲] دانشگاه تحصیلات تکمیلی زنجان

چکیده

در این مقاله با استفاده از رهیافت طیف توان نویز، به بررسی سازوکار کیبل-زورک در حضور نویز گاوسی پرداخته‌ایم. بدون حضور نویز، با عبور میدان مغناطیسی از نقطه بحرانی سامانه (سیستم)، چگالی برانگیختگی‌های ایجاد شده با کاهش سرعت تغییرات میدان مغناطیسی کاهش می یابد که این فرایند به سازوکار کیبل-زورک معروف است. وجود نویز می‌تواند باعث افزایش برانگیختگی‌های ایجاد شده با وجود کاهش سرعت تغییرات میدان شود. در این مقاله اثرات نویز فلیکر که یک نویز نزدیک به واقعیت است و در سیستم‌های الکترونیکی مشاهده می‌شود را بررسی کرده‌ایم. نشان می‌دهیم که برای این نویزها می‌توان با استفاده از تحلیل طیف توان، ایجاد برانگیختگی‌ها توسط نویز را تحلیل کرد و یک رابطه تحلیلی برای آن‌ها به‌دست آورد.

واژه های کلیدی: *گذار فاز کوانتومی دینامیکی، کیبل-زورک، نویز*

Kibble-Zurek Mechanism in the Presence of Flicker Noise Using Noise Power Spectrum

Sadeghizadeh, Sajad[1]; Jafari, Rouhollah[2]; Langari, Abdollah[1]

[1] Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran

[2]Institute for Advanced Studies in Basic Sciences, Zanjan

Abstract

We study the Kibble-Zurek mechanism (KZM) in the presence of noise using power spectrum of noise. According to KZM, slower quench through critical point, leads to less excitations, while the presence of noise can cause the opposite behavior of this mechanism. We consider flicker noise which is a realistic example of noise, which has been observed in electronic systems. We develop a method using noise power spectrum to analyze number of excitations created due to the noise.

***Keywords**: Dynamical Quantum Phase Transition, Kibble-Zurek, Noise*

مقدمه

سازوکار کیبل-زورک ساختاری منسجم برای بررسی دینامیک سامانه‌های کلاسیک و کوانتومی در گذار فازهای پیوسته (مرتبه دوم) است[1,2]. مطابق این سازوکار، در یک گذار فاز پیوسته در حد ترمودینامیکی، در نزدیکی نقطه بحرانی، تغییرات سامانه هر چقدر هم که به آرامی انجام شود، به دلیل بسته شدن گاف انرژی، سامانه نمی‌تواند به صورت بی دررو تحول یابد و تغییرات موجب ایجاد نقصان‌های (برانگیختگی‌های) توپولوژیکی در سامانه می‌شود. با این حال هر چقدر سرعت دگرگونی سامانه آهسته‌تر باشد، تعداد این نقصان‌ها کم‌تر خواهد بود که به سازوکار کیبل-زورک معروف است[2]. در سال‌های اخیر آزمایش‌هایی انجام شده که نتیجه آن‌ها بر خلاف سازوکار کیبل-زورک بوده است[3,4] . یکی از روشهایی که می‌تواند این نتیجه را توضیح دهد، در نظر گرفتن وجود نویز در پارامترهای کنترل سامانه است که می‌تواند منجر به بروز رفتاری مخالف با پیش‌بینی سازوکار کیبل-زورک شود[4]. بعلاوه در مطالعات اخیر، تاثیر نویز سفید و رنگی گاوسی بر مدل‌های آیزینگ و XY در میدان مغناطیسی عرضی بررسی شده است[4,5,6] که نتایج به دست آمده به صورت آزمایشگاهی نیز تایید شده است[7].

در این مقاله به توسعه یک راهکار روشمند بر اساس تحلیل طیف توان نویز پرداخته‌ایم که بر اساس آن می‌توان برانگیختگی‌هایی که بر اثر وجود نویز در سامانه ایجاد می‌شوند را پیش‌بینی کرد. با کمک این روش بدون نیاز به محاسبات عددی طولانی و پیچیده، می‌توان برانگیختگی‌های ایجاد شده بر اثر نویز را محاسبه کرد.

مدل و روش محاسباتی

هامیلتونی مدل XY در میدان مغناطیسی عرضی به صورت زیر تعریف می شود

$$H_0(t) = -\sum_j^N \left(\frac{1+\gamma}{2}\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x + \frac{1-\gamma}{2}\sigma_j^y\sigma_{j+1}^y\right)$$

$$-g(t)\sum_j^N \sigma_j^z, \qquad (1)$$

که در آن $\sigma_j^{x,y,z}$ ماتریس های پائولی و γ پارامتر ناهمسانگردی است. با استفاده از تبدیلات جوردن-ویگنر و فوریه [8]، می‌توان این هامیلتونی را در فضای تکانه به صورت

$$H(t) = 2\sum_{k>0}\{(g(t)-cos(k))(c_k^\dagger c_k + c_{-k}^\dagger c_{-k}) + \gamma \sin(k)(c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + c_{-k}c_k)\} \quad (2)$$

نوشت. با تعریف بردار $\Psi_k^\dagger \equiv \left(c_k^\dagger\ c_{-k}\right)$ هامیلتونی بالا به صورت

$$H(t) = \sum_{k>0}\Psi_k^\dagger \mathcal{H}(k)\Psi_k \qquad (3)$$

قابل بازنویسی است که در آن $\mathcal{H}(k)$ عبارت است از

$$\mathcal{H}(k) = 2(g(t)-\cos(k))\sigma^z + 2\gamma\sin(k)\sigma^x. \quad (4)$$

فرض می‌کنیم میدان مغناطیسی که به صورت خطی با زمان تغییر می‌کند، دارای نویز گاوسی نیز باشد

$$g(t) = g_0(t) + \eta(t), \qquad (5)$$

که در آن $g_0(t) = g_f + vt = g_f + (g_f - g_i)t/\tau_a$ تغییرات خطی میدان را در بازه $t_i = -\tau_a$ تا $t_f = 0$ نشان می‌دهد، v سرعت دگرگونی، τ_a زمان دگرگونی و $\eta(t)$ نویز گاوسی با متوسط صفر است که رابطه همبستگی زمانی آن می‌تواند فرم‌های متنوعی داشته باشد. در این جا نویز فلیکر را در نظر می‌گیریم که رابطه همبستگی زمانی آن به صورت

$$R(t) = \frac{\xi^2}{\tau_2-\tau_1}\int_{\tau_1}^{\tau_2}\frac{1}{2\tau}e^{-\frac{|t|}{\tau}}d\tau, \qquad (6)$$

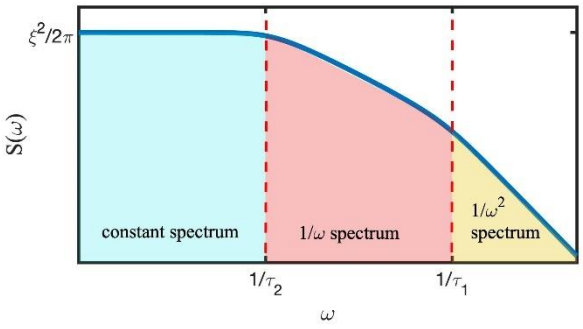
است. این نویز حالت عمومی و پیچیده‌تر نویز رنگی گاوسی Ornstein-Uhlenbeck است که می‌توان آن را حاصل

متوسط‌گیری روی تعداد زیادی از این نویزها با زمان‌های همبستگی متفاوت درنظر گرفت[9]. در حالت حدی $\tau_2 \to \tau_1$ ، نویز فلیکر به یک نویز Ornstein-Uhlenbeck تبدیل می‌شود که در مرجع [6] مورد بررسی قرار گرفته است.

با تبدیل فوریه گرفتن از رابطه همبستگی نویز، طیف توان آن به‌دست می‌آید

$$S(\omega) = \frac{\xi^2}{2\pi(\tau_2 - \tau_1)} \frac{\tan^{-1}(\omega\tau_2) - \tan^{-1}(\omega\tau_1)}{\omega}. \quad (7)$$

طیف توان نویز فلیکر در مقیاس لگاریتمی به صورت شکل ۱ است. توان نویز در فرکانس‌های پایین ثابت است، در فرکانس‌های میانی متناسب با معکوس فرکانس افت می‌کند و در فرکانس‌های بالا، متناسب با مربع فرکانس افت می‌کند. محدوده رفتارهای این نویز توسط زمان‌های همبستگی نویز مشخص می‌شوند.



شکل۱ : طیف توان نویز فلیکر که در فرکانس‌های کوچک‌تر از $1/\tau_2$ ثابت، در فرکانس‌های بین $1/\tau_2$ و $1/\tau_1$ متناسب با معکوس فرکانس و در فرکانس‌های بزرگ‌تر از $1/\tau_1$ متناسب با مربع معکوس فرکانس است.

با وجود نویز در میدان مغناطیسی وابسته به زمان، می‌توان هامیلتونی مدل XY را به صورت مجموع یک بخش بدون نویز و یک بخش تصادفی دارای نویز نوشت

$$H = H_0(t) + \eta(t)H_1, \quad (8)$$

که در رابطه بالا هامیلتونی بدون نویز به صورت

$$H_0 = \sum_{k>0} \Psi_k^\dagger \mathcal{H}_0(k) \Psi_k, \quad (9.a)$$

$$\mathcal{H}_0(k) = 2(g_0(t) - \cos(k))\sigma^z + 2\gamma sin(k)\sigma^x, \quad (9.b)$$

و هامیلتونی بخش تصادفی آن به صورت زیر نوشته می‌شود

$$H_1 = \sum_{k>0} \Psi_k^\dagger \mathcal{H}_1(k) \Psi_k, \quad (10.a)$$

$$\mathcal{H}_1 = 2\sigma^z. \quad (10.b)$$

برای بررسی تحول زمانی ماتریس چگالی هامیلتونی وابسته به زمان، با استفاده از معادله فون-نویمن و متوسط گیری (آنسامبلی) روی همه تحقق‌های نویز و استفاده از قضیه نویکوف، معادله مادر حاکم بر ماتریس چگالی هامیلتونی دارای نویز فلیکر به صورت زیر

$$d\rho(t)/dt = -i[H_0(t), \rho(t)] - \frac{\xi^2}{2(\tau_2 - \tau_1)} \left[H_1, \int_{t_i}^{t} \int_{\tau_1}^{\tau_2} \frac{e^{-|t-s|/\tau_n}}{\tau} [H_1, \rho(s)] d\tau ds \right] \quad (11)$$

به دست می آید[9,10].

محاسبه برانگیختگی‌ها برمبنای طیف نویز

برای سادگی حالت خاص مدل XY با پارامتر ناهمسانگردی برابر با یک را در نظر می‌گیریم که همان زنجیره آیزینگ در میدان مغناطیسی عرضی است. فرض می‌کنیم میدان مغناطیسی به صورت خطی از $g_i = -2$ تا $g_f = 0$ با سرعت $v = (g_f - g_i)/\tau_a$ از نقطه بحرانی $g_c = -1$ عبور می‌کند. به عبارت دیگر با تغییر میدان مغناطیسی، سامانه از فاز پارامغناطیس وارد فاز فرومغناطیس می‌شود. در حالت بدون نویز مطابق سازوکار کیبل-زورک، چگالی

برانگیختگی‌ها در پایان دگرگونی متناسب با $\tau_a^{-1/2}$ کاهش می‌یابد. اما وجود نویز موجب افزایش تعداد برانگیختگی‌های سیستم با افزایش τ_a می‌شود.

برای نویزهای ضعیف، می‌توان برانگیختگی‌های ایجاد شده را به صورت مجموع برانگیختگی‌های حاصل از سازوکار کیبل-زورک و برانگیختگی‌های حاصل از نویز درنظر گرفت.

$$n_W = n_{KZM} + n_{noise} \qquad (12)$$

برانگیختگی‌های حاصل از سازوکار کیبل زورک به صورت $n_{KZM} = \frac{1}{2\pi}\tau_a^{-1/2}$ است و برانگیختگی‌های ناشی از نویز متناسب با متوسط توان نویز در فرکانس‌های پایین و زمان دگرگونی است[6]. برای محاسبه این برانگیختگی‌ها یک فرکانس مشخصه به صورت $\omega_c = \frac{c}{\tau_a}$ در نظر می‌گیریم که c یک ضریب مثبت است و مولفه‌های توان نویز در فرکانس‌های پایین‌تر از آن سیستم را برانگیخته می‌کنند. برای نویز فلیکر، متوسط توان نویز برابر است با

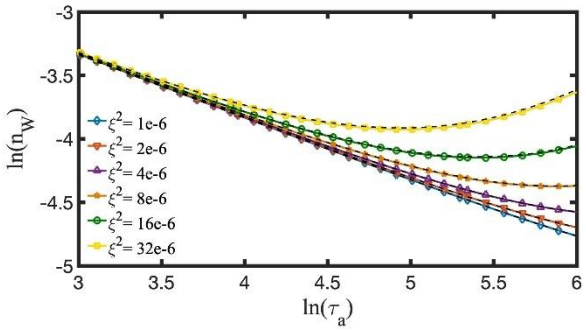
$$S_{av} = \frac{\int_0^{\omega_c} S(\omega)d\omega}{\omega_c} = \frac{-i\xi^2\tau_a}{4\pi c(\tau_2-\tau_1)}\{Li_2(i\tau_2 c/\tau_a) - Li_2(-i\tau_2 c/\tau_a) - Li_2(i\tau_1 c/\tau_a) + Li_2(-i\tau_1 c/\tau_a)\}, \qquad (13)$$

بنابراین چگالی برانگیختگی‌های ناشی از نویز به صورت

$$n_{noise} = \frac{-ib\xi^2\tau_a^2}{4(\tau_2-\tau_1)}\{Li_2(i\tau_2 c/\tau_a) - Li_2(-i\tau_2 c/\tau_a) - Li_2(i\tau_1 c/\tau_a) + Li_2(-i\tau_1 c/\tau_a)\}, \qquad (14)$$

به‌دست می‌آید که b ضریبی مثبت است. ضرایب b و c را در [6] محاسبه کرده‌ایم که در این‌جا هم از همان مقادیر b=0.88 و c=3.40 استفاده می‌کنیم.

برای بررسی اعتبار رابطه‌ی به‌دست آمده برای چگالی برانگیختگی‌ها، نتایج حل عددی معادله مادر (۱۱) را با نتایج معادلات (۱۲) و (۱۴) مقایسه می‌کنیم. شکل (۲) چگالی برانگیختگی‌ها را برای نویز فلیکر با زمان‌های همبستگی $\tau_1 = 1$ و $\tau_2 = 16$ با توان‌های مختلف نشان می‌دهد.



شکل۲ : چگالی برانگیختگی‌ها برای مدل آیزینگ برحسب زمان مشخصه دگرگونی برای نویزهایی با توان‌های مختلف. خط‌چین‌های سیاه پیش‌بینی حاصل از رهیافت طیف توان نویز را نشان می‌دهند.

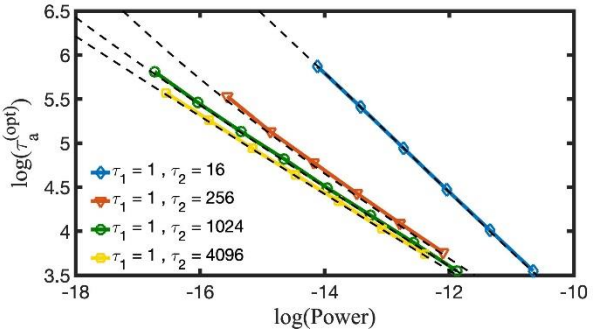
مطابق شکل (۲) پیش‌بینی حاصل از بررسی طیف توان نویز تطابق خوبی با نتیجه حل معادله مادر دارد. به عبارت دیگر با یک بار حل عددی معادله و یافتن ضرایب b و c، می‌توان برای تمام توان‌ها و زمان‌های همبستگی نویز، چگالی برانگیختگی‌ها را پیش‌بینی کرد.

محاسبه زمان بهینه دگرگونی برمبنای طیف نویز

با افزایش زمان دگرگونی، برانگیختگی‌های حاصل از سازوکار کیبل-زورک کم می‌شوند، زیرا تحول سیستم آرام‌تر شده و به تحول بی‌دررو نزدیک‌تر می‌شود، در حالی که با افزایش زمان دگرگونی، برانگیختگی‌های حاصل از نویز افزایش می‌یابند، زیرا نویز زمان بیشتری برای تبادل انرژی با سامانه در اختیار دارد. رقابت بین این دو سازوکار موجب می‌شود در یک زمان مشخصه دگرگونی $\tau_a^{(opt)}$، برانگیختگی‌ها کمینه شوند. با توجه به رابطه (۱۴)، می‌توان این زمان را با کمک طیف نویز محاسبه کرد

$$\frac{dn_W}{d\tau_a} = \frac{-b\xi^2\tau_a}{2(\tau_2-\tau_1)}(\arctan(c\tau_2/\tau_a) - \arctan(c\tau_1/\tau_a)) + \frac{b\xi^2\tau_a}{\tau_2-\tau_1}\int_{c\tau_1/\tau_a}^{c\tau_2/\tau_a}\frac{\arctan(y)}{y}dy - a\frac{1}{2}\tau_a^{-3/2} = 0. \quad (15)$$

با حل معادله (۱۵)، زمان بهینه برانگیختگی به‌دست می‌آید. شکل (۳) نتیجه حاصل از معادله (۱۵) و نتایج حاصل از محاسبات عددی را نشان می‌دهد که تطابق خوبی با یکدیگر دارند.



شکل۳ : زمان بهینه دگرگونی برحسب توان نویز فلیکر برای زمان‌های همبستگی نویز مختلف. خط‌چین‌های سیاه پیش‌بینی حاصل از طیف توان نویز را نشان می‌دهند.

نتیجه‌گیری

برمبنای تحلیل طیف توان نویز، روشی را برای بررسی برانگیختگی‌های ایجاد شده در یک سیستم دینامیکی، در حضور نویز در پارامترهای کنترل سامانه، توسعه دادیم. برای بررسی اعتبار این روش مدل XY با میدان مغناطیسی عرضی در حضور نویز فلیکر را درنظر گرفتیم. نویز فلیکر حالت عمومی‌تر نویزهای سفید و رنگی گاوسی است که اعتبار این روش برای آن نشان‌دهنده اعتبار آن برای نویزهای سفید و رنگی گاوسی نیز هست.

نشان دادیم با محاسبه توان متوسط نویز در فرکانس‌های پایین، می‌توان بدون حل معادلات پیچیده حاکم بر دینامیک سیستم، چگالی برانگیختگی‌ها را برای نویزهای ضعیف به‌دست آورد.

مرجع‌ها

[1] T. W. B. Kibble, Topology of cosmic domains and strings, *J. Phys. A* **9**, 1387 (1976).

[2] W. H. Zurek, Cosmological experiments in condensed matter systems, *Phys. Rep*. **276**, 177 (1996).

[3] S. M. Griffin, M. Lilienblum, K. T. Delaney, Y. Kumagai, M. Fiebig, and N. A. Spaldin. Scaling behavior and beyond equilibrium in the hexagonal manganites, *Phys. Rev. X* **2**,041022 (2012).

[4] A. Dutta, A. Rahmani, and A. del Campo, Anti-Kibble- Zurek Behavior in Crossing the Quantum Critical Point of a Thermally Isolated System Driven by a Noisy Control Field, *Phys. Rev. Lett.* **117**,144301 (2016).

[5] Z.-P. Gao, D.-W. Zhang, Y. Yu, and S.-L. Zhu, Anti- Kibble-Zurek behavior of a noisy transverse-field XY chain and its quantum simulation with two-level systems, *Phys. Rev. B* **95**, 224303 (2017).

[6] Sadeghizade, S., R. Jafari, and A. Langari. "Anti-Kibble-Zurek behavior in the quantum XY spin-1 2 chain driven by correlated noisy magnetic field and anisotropy." *Physical Review B* 111, no. 10 (2025): 104310.

[7] M.-Z. Ai, J.-M. Cui, R. He, Z.-H. Qian, X.-X. Gao, Y.-F. Huang, C.-F. Li, and G.-C. Guo, Experimentally verifying anti-Kibble-Zurek behavior in a quantum system under noisy control field, *Phys. Rev. A* **103**, 012608 (2021).

[8] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, Two soluble models of an antiferromagnetic chain, *Annals of Physics* **16**, 407 (1961).

[9] A. Kiely, Exact classical noise master equations: Applications and connections, *Europhysics Letters* **134**, 10001 (2021).

[10] Novikov, E. A, Functionals and the random-force method in turbulence theory. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, **20(5)**, 1290-1294., (1965).

تحول زمانی همدوسی کوانتومی اتم سه‌ترازه نوع-Λ داخل کاواک اتلافی

موسوی، سیده نفیسه[۱]؛ سعیدیان، شاهپور[۱]؛ نعیمی، قاسم[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی زنجان، زنجان

[۲] گروه فیزیک، واحد قزوین، دانشگاه آزاد اسلامی، قزوین،ایران

چکیده

در این مقاله تحول زمانی همدوسی کوانتومی یک اتم سه‌ترازه نوع-Λ که داخل یک کاواک نوری اتلافی قرار دارد، مطالعه می‌شود. در این مدل مابین ترازهای $|f\rangle$ و $|e\rangle$ اتم یک میدان کلاسیکی خارجی اعمال شده‌است. ابتدا به‌صورت تحلیلی تحول زمانی ماتریس چگالی سیستم، به کمک تبدیل لاپلاس به‌دست می‌آید و سپس اثر تغییرات واکوکی بر روی تحول زمانی همدوسی کوانتومی سیستم مورد بررسی قرار می‌گیرد. مشاهده می‌شود که با انتخاب مناسب جفت شدگی اتم-کاواک و ضریب اتلاف کاواک، همدوسی کوانتومی برای مدت زمان طولانی حفظ می‌شود و در واقع کاواک می‌تواند همانند یک محیط غیرمارکوفی رفتار کند.

واژگان کلیدی: *همدوسی کوانتومی ، اتم سه‌ترازه نوع-Λ، کاواک اتلافی، محیط غیر مارکوفی*

Dynamics of quantum coherence of a Λ -type three-level atom in a dissipative cavity

S. Nafise Mousavi [1]; Shahpoor Saeidian [1]; Ghasem Naeimi[2]

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

[2] *Department of Physics, Qa.c. , Islamic Azad University, Qazvin, Iran.*

Abstract

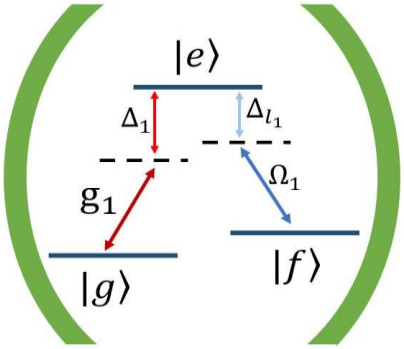
In this paper, the dynamics of quantum coherence in a three-level Λ-type atom placed inside a dissipative optical cavity is investigated. In this model, an external classical field is applied between the atomic levels |f⟩ and |e⟩. First, the time evolution of the system's density matrix is analytically derived using the Laplace transform method. Then, the effect of vacuum fluctuations on the time evolution of the system's quantum coherence is examined. It is observed that by appropriately selecting the atom-cavity coupling constant and the decay rate of cavity, quantum coherence can be preserved for an extended period, effectively allowing the cavity to behave as a non-Markovian environment.

Keywords*: Quantum coherence, Three-level Λ-type atom, Dissipative optical cavity, Non-Markovian environment*

مقدمه

همدوسی کوانتومی ناشی از برهم‌نهی حالت‌ها در سیستم‌های کوانتومی است و وجه تمایز میان مکانیک کوانتومی و مکانیک کلاسیک است و همواره منبعی برای پردازش اطلاعات کوانتومی درنظر گرفته می‌شود[۱-۵]. بامگراتز و همکارانش برای اولین بار در یک چارچوب دقیق، تابعی تحت عنوان اندازه نُرم l_1 همدوسی برای اندازه‌گیری همدوسی کوانتومی ارائه دادند[۶].

در مراحل ابتدایی مطالعه سیستم‌های کوانتومی، عمدتاً از کیوبیت‌ها به عنوان مدل‌های دو ترازه استفاده می‌شد و روش‌های تحلیلی و کنترلی بر این پایه توسعه یافت[۷-۹]. با گذر زمان و برای درک عمیق‌تر رفتارهای کوانتومی و غلبه کردن به محدودیت‌هایی که در



شکل ۱ : ترازهای انرژی یک اتم سه‌ترازه نوع-Λ داخل کاواک نوری اتلافی

محاسبات کوانتومی وجود دارند، به‌دلیل پیچیدگی‌های ناشی از ابعاد بالاتر فضای هیلبرت، پژوهش‌ها به سوی بررسی سیستم‌های چندترازه گسترش پیدا کرد[۱۰]. در سال‌های اخیر گروه‌های تحقیقاتی مختلفی پارامترهای متعددی را در سیستم‌های چند ترازه، از جمله: جمعیت، اطلاعات فیشر کوانتومی، درهم‌تنیدگی، آنتروپی کوانتومی، سرعت هیلبرت-اشمیت و همدوسی کوانتومی را بررسی کرده‌اند[۱۰-۱۴و۵].

در این مقاله، یک اتم سه‌ترازه نوع-Λ داخل یک کاواک نوری اتلافی را در حضور یک میدان کلاسیک خارجی، مطالعه می کنیم. ابتدا تحول زمانی اتم سه ترازه را در محیط‌های غیر مارکوفی، با استفاده از معادله شرودینگر بررسی می‌کنیم. سپس با معرفی پارامتر همدوسی کوانتومی، اثر واکوکی‌های ناشی از میدان‌ها را بر تحول زمانی همدوسی کوانتومی مورد بحث قرار می‌دهیم.

مدل و محاسبه ماتریس چگالی سیستم

یک کاواک اتلافی حاوی یک اتم سه‌ترازه نوع-Λ با ترازهای $|e\rangle$ ، $|f\rangle$ و $|g\rangle$ با بسامدهای گذار ω_e ، ω_f و ω_g، مطابق شکل ۱ در نظر می‌گیریم. برهم‌کنش اتم با کاواک (منبع ذخیره فوتونی) توسط ثابت جفت‌شدگی g نشان داده شده‌است. مابین ترازهای $|f\rangle$ و $|e\rangle$ اتم یک میدان کلاسیکی با ثابت جفت‌شدگی Ω وجود دارد. با فرض $(\hbar=1)$ هامیلتونی کاواک و محیط به‌صورت زیر خواهد بود:

$$H_c=\omega_c a^\dagger a+\int_0^\infty B^\dagger(\eta)B(\eta)d\eta + \int_0^\infty G(\eta)[a^\dagger B(\eta)+H.c.]d\eta, \quad (۱)$$

که در آن به‌ترتیب، جمله اول هامیلتونی کاواک، جمله دوم هامیلتونی محیط و جمله سوم هامیلتونی برهم‌کنش کاواک و محیط را نشان می‌دهد. در رابطه (۱) ω_c فرکانس میدان کاواک، $a^\dagger$ و a عملگرهای خلق و فنا برای مدهای کاواک، $B^\dagger(\eta)$ و $B(\eta)$ به‌ترتیب عملگرهای خلق و فنا برای مدهای محیط و $G(\eta)$ ثابت جفت‌شدگی میان میدان کاواک و محیط هستند.

با معرفی $A(\omega)=\alpha(\omega)a+\int_{-\infty}^{\infty}\beta(\omega,\eta)B(\eta)d\eta$ به‌عنوان عملگر پوشیده بر اساس قضیه فانو می‌توان هامیلتونی رابطه (۱) را به‌صورت زیر بازنویسی کرد[۱۵]:

$$H_c=\int_0^\infty \omega A^\dagger(\omega)A(\omega)d\omega \quad (۲)$$

که $\alpha(\omega)=\frac{\sqrt{\kappa/\pi}}{\omega-\omega_c+i\kappa}$ و κ نرخ اتلاف کاواک است. هامیلتونی کل اتم–میدان عبارت است از:

$$H=\int\omega A^{\dagger}(\omega)A(\omega)d\omega+\omega_e|e\rangle\langle e|+\omega_f|f\rangle\langle f| +\omega_g|g\rangle\langle g|+\int g[\alpha^*(\omega)A(\omega)|e\rangle\langle g|+H.c.]d\omega +\Omega[|e\rangle\langle f|e^{-i\omega_l t}+H.c.]. \quad (۳)$$

که ω_l بسامد میدان کلاسیکی است. در تصویر برهم‌کنش هامیلتونی از رابطه زیر به‌دست می‌آید:

$$H_I=\int_{-\infty}^{\infty}g[\alpha^*(\omega)A(\omega)|e\rangle\langle g|e^{i(\omega_e-\omega_g-\omega)t}+H.c.]d\omega +\Omega[|e\rangle\langle f|e^{-i\Delta_l t}+H.c.], \quad (۴)$$

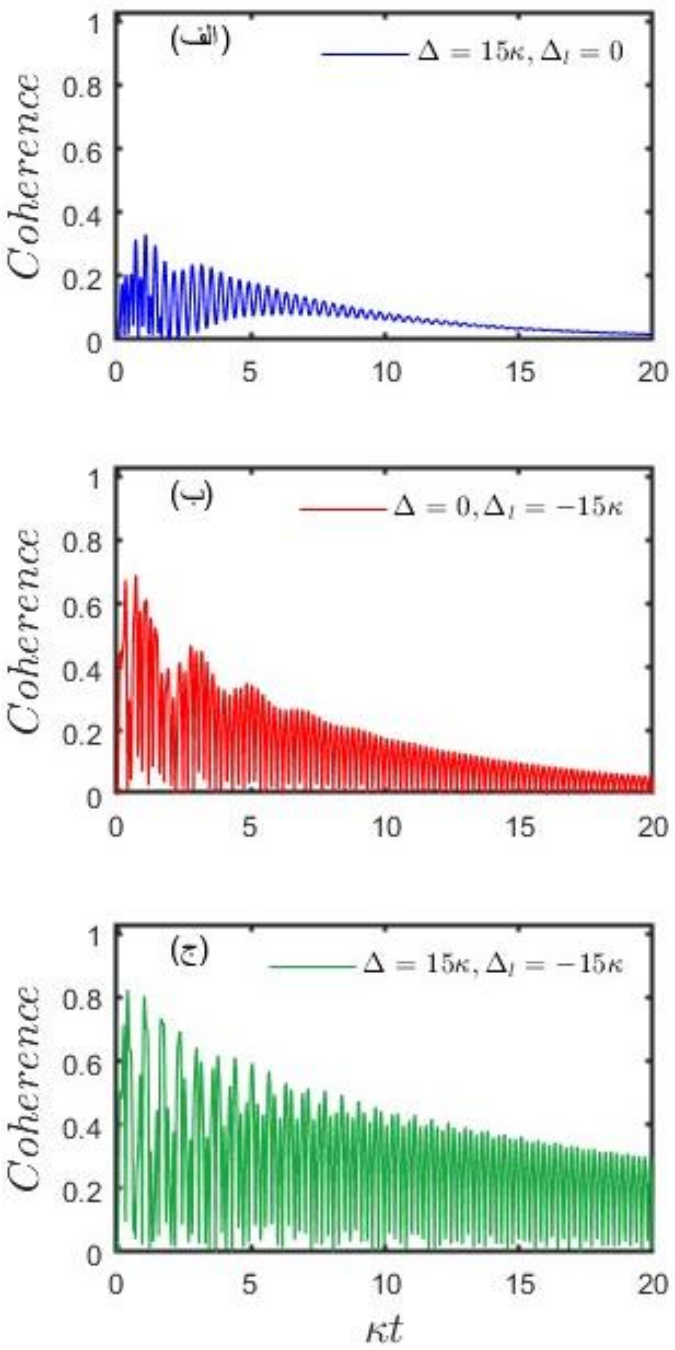
در رابطه بالا $\Delta_l=\omega_l-(\omega_e-\omega_f)$ واکوکی میدان کلاسیکی است. حالت اولیه سیستم را در زمان $t=0$ به‌صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$|\psi(0)\rangle=[\cos(\frac{\theta}{2})|f\rangle+\sin(\frac{\theta}{2})e^{i\varphi}|g\rangle]|0\rangle, \quad (۵)$$

که اتم در حالت برهم‌نهی آماده شده است و میدان کاواک در حالت خلا $|0\rangle$ قرار دارد. بردار حالت سیستم در زمان t از رابطه زیر به‌دست می‌آید:

$$|\psi(t)\rangle=[E(t)|e\rangle_a+F(t)|f\rangle+G(t)|g\rangle]|0\rangle +\int_{-\infty}^{\infty}U(t,\omega)|g\rangle|1_\omega\rangle d\omega. \quad (۶)$$

در رابطه (۶) ضرایب $E(t)$، $F(t)$ و $G(t)$ به‌ترتیب دامنه احتمال حضور اتم در ترازهای $|e\rangle$، $|f\rangle$ و $|g\rangle$ را نشان می‌دهند که میدان اتم در $|g\rangle$ به همراه یک تک فوتون با فرکانس ω در میدان کاواک است. با جای‌گذاری رابطه (۴) در معادله شرودینگر $i\hbar(\frac{\partial}{\partial t})|\psi(t)\rangle=H|\psi(t)\rangle$ تحول زمانی دامنه‌های احتمال به‌شکل معادلات جفت شده‌ای به‌دست می‌آیند:



$$\frac{dE(t)}{dt}=-ig\int_{-\infty}^{\infty}[\alpha^*(\omega)e^{i(\omega_e-\omega_g-\omega)t} \times U(t,\omega)]d\omega-i\Omega e^{-i\Delta_l t}F(t), \quad (۷)$$

$$\frac{dF(t)}{dt}=-i\Omega e^{-i\Delta_l t}E(t), \quad (۸)$$

$$\frac{dG(t)}{dt}=0, \quad (۹)$$

$$\frac{dU(t)}{dt} = -ig\alpha(\omega)e^{i(\omega_e-\omega_g-\omega)t}E(t). \quad (۱۰)$$

پاسخ معادله دیفرانسیل رابطه (۹) به‌صورت $G(t)=G(0)=\sin(\theta/2)e^{i\varphi}$ است. با انتگرال گرفتن از رابطه (۸) و (۱۰) و جای‌گذاری آن‌ها در رابطه (۷)، خواهیم داشت:

$$\frac{dE(t)}{dt} = -\int_0^t f(t-t_1)E(t_1)dt_1 - i\Omega F(0)e^{i\Delta_l t} \quad (۱۱)$$
$$-\Omega^2\int_0^t e^{-i\Delta_l(t-t_2)}E(t_2)dt_2,$$

در رابطه (۱۱) تابع $f(t-t_1)=\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)e^{i(\omega_e-\omega_g-\omega)(t-t_1)}d\omega$ گرین است که چگالی طیفی موجود در آن به شکل تابع توزیع لورنتزی زیر تعریف می‌شود[۱۱]:

$$J(\omega)=g^2|\alpha(\omega)|^2=\frac{1}{\pi}\frac{g^2\kappa}{(\omega-\omega_c)^2+\kappa^2}. \quad (۱۲)$$

در رابطه (۱۲) اگر $g \ll \kappa$ باشد، محیط رفتار غیرمارکوفی دارد و بالعکس. با جای‌گذاری چگالی طیفی در تابع گرین خواهیم داشت:

$$f(t-t_1)=g^2e^{-(\kappa+i\Delta)(t-t_1)}, \quad (۱۳)$$

که $\Delta=\omega_c-\omega_e-\omega_g$ واکوکی میدان کاواک است.

با جای‌گذاری رابطه (۱۳) در رابطه (۱۱) و استفاده از تبدیل لاپلاس می‌توان دامنه‌های احتمال را محاسبه کرد.

با گرفتن رد روی حالت میدان کاواک، ماتریس چگالی کاهش یافته اتم به‌دست می‌آید:

$$\rho(t)=\begin{pmatrix} |E(t)|^2 & E(t)F^*(t) & E(t)G^*(t) \\ F(t)E^*(t) & |F(t)|^2 & F(t)G^*(t) \\ G(t)E^*(t) & G(t)F^*(t) & |G(t)|^2 \end{pmatrix}. \quad (۱۴)$$

همدوسی کوانتومی

از ویژگی‌های شاخص مکانیک کوانتومی نسبت به مکانیک کلاسیک، وجود همدوسی کوانتومی است که به‌عنوان معیاری برای

شکل۲ : ترازهای انرژی یک اتم سه‌ترازه نوع-Λ داخل کاواک نوری اتلافی

برهم‌نهی حالت‌های سیستم‌های کوانتومی مطرح می‌شود. یک تعریف بنیادی برای اندازه‌گیری همدوسی کوانتومی با کمک گرفتن از نظریهٔ منبع، جمع تمام مقادیر قدرمطلق عناصر غیرقطری ماتریس چگالی کاهش یافته است[۱۶و ۳-۶] ،

$$C_{l_1}(\rho(t))=\sum_{i\neq j}|\rho_{ij}(t)|. \quad (۱۵)$$

شکل۲ تحول زمانی همدوسی کوانتومی را بر حسب تابعی از زمان مقیاس شده κt برای مقادیر مختلف واکوکی‌ها به ازای $g=\Omega=10\kappa$ و $\theta=0$ نشان می‌دهد.

شکل۲ (الف) تحول زمانی همدوسی کوانتومی را بر حسب تابعی از زمان مقیاس شده κtبرای واکوکی‌های $\Delta_l=0$ و $\Delta=15\kappa$ نشان می‌دهد. در زمان‌های اولیه از آنجایی که اتم در حالت برهم‌نهشتی از هر سه تراز قرار می‌گیرد، همدوسی کوانتومی از مقدار اولیه خود که صفر است، به یک مقدار بیشینه می‌رسد و در زمان‌های طولانی‌تر با وجود نوسان‌ها تحت تاثیر واهمدوسی محیط، به سمت صفر میل می‌کند. در روند مطالعه نمودارها نوسان‌هایی که مشاهده می‌کنیم، ناشی ازاثرات حافظه محیط غیرمارکوفی هستند.

شکل۲ (ب) تحول زمانی همدوسی کوانتومی را بر حسب تابعی از زمان مقیاس شده κt برای واکوکی‌های $\Delta_l=-15\kappa$ و $\Delta=0$ نشان می‌دهد. این نمودار نیز مشابه نمودار قسمت(الف) در زمان کوتاهی به مقدار بیشینه خود می‌رسد و در زمان‌های طولانی، همان‌گونه که سیستم دچار واهمدوسی می‌شود، با حفظ نوسانات ریز خود به سمت صفر میل می‌کند. تفاوتی که این حالت با حالت

قسمت (الف) دارد این است که حضور واکوکی میدان کلاسیکی در زمان‌های اولیه، برهم‌نهشت ترازها را نسبت به حالت قبل بیشتر می‌کند و در نتیجه بیشینه مقدار همدوسی کوانتومی در آن نسبت به حالت (الف) بیشتر است. همچنین همدوسی کوانتومی در این حالت آرام‌تر از حالت قبل به سمت صفر میل می‌کند.

شکل۲ (ج) تحول زمانی همدوسی کوانتومی را بر حسب تابعی از زمان مقیاس شده κt برای واکوکی‌های $\Delta_l=-15\kappa$ و $\Delta=15\kappa$ نشان می‌دهد. در این نمودار همان‌گونه که مشاهده می‌کنیم مقدار بیشینه نمودار نسبت به دو حالت (الف) و (ب) بیشتر است. همچنین نمودار به آرامی با حفظ نوسانات ریزی که دارد به مقدار ثابت نهایی خود نزدیک می‌شود. درواقع می‌توانیم بگوییم که حضور هر دو واکوکی عامل حفظ همدوسی کوانتومی تا زمان‌های بیشتری است.

نتیجه گیری

در این مقاله تاثیر واکوکی ناشی از حضور میدان را بر تحول زمانی همدوسی کوانتومی یک سیستم یه ترازه نوع- Λ که داخل یک کاواک نوری اتلافی قرار دارد، مطالعه شد. نشان دادیم که برای حفظ همدوسی کوانتومی در این سیستم‌ها، تنظیم دقیق واکوکی‌ها برای بهره‌گیری از اثرات غیر مارکوفی ضروری است. مشاهده شد با انتخاب مقادیر $\Delta_l=-15\kappa$ و $\Delta=15\kappa$ واکوکی‌ها، می‌توان به ویژگی‌های کوانتومی را برای زمان طولانی‌تری حفظ کرد. وجود واکوکی‌ها می‌توانند نرخ کاهش ویژگی‌های کوانتومی را در کاواک‌های نوری اتلافی کندتر کنند. این یافته‌ها نه تنها درک ما از دینامیک همدوسی در سیستم‌های کوانتومی باز را عمیق‌تر می‌کنند بلکه راهنمایی برای طراحی سیستم‌های کوانتومی پایدارتر در کاربردهای عملی مثل پردازش اطلاعات کوانتومی ارائه می‌دهد.

مرجع‌ها

[۱] C Radhakrishnan, et al., *Phys. Rev. Lett.* **116** (2016) 150504.

[۲] Y Yao, et al., *Phys. Rev.* A **92** (2015) 022112.

[۳] AStreltsov, G Adesso, and M B Plenio, *Rev. Mod. Phys.* **89** (2017) 041003.

[۴] A Mortezapour, G Naeimi, and R L Franco, *Opt. Commun.* **424** (2018) 26.

[۵] A Mortezapour and S Karami, *Iran. J. Phys. Res.* **18,** 4 (2019) 603.

[۶] T Baumgratz, M Cramer, and M B Plenio, *Phys. Rev. Lett.* **113** (2014) 140401.

[۷] Shen, H.Z., Shao, X.Q., Wang, G.C., Zhao, X.L. and Yi, X.X., *Physical Review E* **93**.1 (2016):

[۸] Entezar, S. R., *Physics Letters A* 373.38 (2009): 3413-3418.

[۹] Mortezapour, A., Naeimi, G. and Franco, R.L., *Optics Communications* **424** (2018): 26-31.

[۱۰] N N Yousefi, et al., *Phys. Rev.* A **105** (2022) 042212.

[۱۱] Li, C., Yang, S., Song, J., Xia, Y. and Ding, W., *Optics Express* 25.**10** (2017): 10961-10971.

[۱۲] Wang, J., Long, D., Wang, Q., Zou, H.M., Liu, C. and Ma, Q., *Annalen der Physik* **535**.7 (2023): 2200659

[۱۳] Mousavi, S.N., Naeimi, G., Saeidian, S. and Ahmadi, G., *Iranian Journal of Physics Research* **24**.2 (2024) 245-254.

[۱۴] Li, F., Wang, J., Zou, H.M., Pan, Q., Liu, C. and Qu, Z, *Physica Scripta* **99**.8 (2024): 085116.

[۱۵] A. Nourmandipour and M. K. Tavassoly, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **48**(16), 165502 (2015)

[۱۶] A Streltsov, et al., *Phys. Rev. Lett.* **115** (2015) 020403.

ظرفیت کوانتومی، رفتار الکتریکی و مغناطیسی M_2XO_2 تحت کرنش برای ابرخازن‌های نسل جدید و کاربردهای فتوولتائیک کارآمد: یک مطالعهٔ DFT

محمدی، سعیده*؛ شکری، علی اصغر*

گروه فیزیک نظری و نانو، دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا، تهران، ایران

چکیده

مکسن‌ها (MXene) دسته خاصی از مواد دوُبعدی هستند که به‌عنوان کاندیدای مناسبی برای الکترودها به‌دلیل فعالیت‌های فوتوکاتالیستی فوق العاده و رسانش بالای پیشنهاد شده‌اند. این ویژگی‌ها، آن‌ها را برای توسعهٔ پایدار و کاربردهای ذخیره انرژی مانند ساخت و طراحی ابرخازن‌ها و باطری‌های حالت جامد بسیار ارزشمند می‌کند. در این پژوهش، ما با استفاده از تئوری تابعی چگالی به بررسی ویژگی‌های الکتریکی، مغناطیسی و ظرفیت کوانتومی مواد MXeneها به فرم کلی M_2XO_2 که در آن M شامل فلزات واسطه Cr و Mn، X نشان‌دهندهٔ اتم‌های کربن یا نیتروژن هستند، تحت کرنش می‌پردازیم. محاسبات ما نشان می‌دهد که این MXeneها رفتار فلزی را از خود نشان می‌دهد. علاوه بر این، ما کشف کردیم که اثر کرنش نقش کلیدی در افزایش مغناطش این مواد دارند. همچنین، Mn_2XO_2 و Cr_2CO_2 تحت کرنش، مقدار مناسب $|Q_c|$ را نشان می‌دهد که آن‌ها را به عنوان مادهٔ کاتدی امیدوارکننده برای ساخت دستگاه‌های مانند باتری‌های و ابرخازن‌های یونی و عالی هستند. همچنین، Mn_2NO_2 نیز یک مادهٔ مناسب برای برای طراحی ابرخازن‌های متقارن پیشنهاد می‌شود.

واژگان کلیدی: *MXeneها، کرنش، ظرفیت کوانتومی، ابرخازن‌های نسل جدید، سیستم‌های توسعهٔ پایدار*

Quantum Capacitance, Electric and Magnetic Behavior of strain induced M_2XO_2 for Next-generation Supercapacitors, and Efficient Photovoltaic Applications: A DFT Study

Saeedeh, Mohammadi*; Shokri, Aliasghar*

Department of Theoretical and NanoPhysics, Faculty of Physics, Alzahra University, Tehran, Iran

Abstract

MXenes are a special class of two-dimensional materials that reveal great promise as electrode materials and exhibit outstanding electrical conductivity and photocatalytic activity. These properties make them highly valuable for sustainable development and energy storage applications. However, one challenge with MXenes is their lower stability compared to oxide-based materials. To address this, we investigated the electronic structure, and mechanical stability, also, mechanical, electrical, magnetic properties, and quantum capacitance of M_2XO_2 (where M = Mn, Cr and X = C, N) under strain. Our findings reveal that these MXenes have metallic behavior. Additionally, we discovered that strain effect plays a key role in enhancing the magnetic behavior of these materials. Furthermore, strain induced Mn_2XO_2 and Cr_2CO_2 reveal the largest $|Q_c|$ value, indicating it as cathode materials in devices such as

both aqueous and ionic or organic such as batteries and supercapacitors. Also, our results suggest that Mn_2NO_2 is a suitable material for designing of symmetric supercapacitors.

***Keywords**: MXenes, Strain, Quantum Capacitance, Next-generation Supercapacitors, Sustainable Development Systems*

مقدمه

امروزه به‌دلیل استفاده بیش از حد از منابع انرژی تجدیدناپذیر منجر به کاهش سریع این منابع انرژی شده است. این امر نه تنها آسیب‌های زیست‌محیطی را تشدید می‌کند، بلکه بحران جهانی انرژی را نیز بیشتر می‌کند. برای مقابله با این چالش‌ها، محققان در حال بررسی راه‌های ابتکاری و پیشرفته برای ذخیره انرژی با هدف ایجاد آینده‌ای پایدارتر هستند [۱]. در میان فناوری‌های مختلف ذخیره‌سازی انرژی، ابرخازن‌ها به‌دلیل ویژگی‌های استثنایی خود به‌عنوان گزینه‌ای بسیار امیدوارکننده و به سرعت در حال رشد ظاهر شده‌اند. مزایای کلیدی آن‌ها شامل قابلیت شارژ و تخلیهٔ سریع، طول عمر بیشتر و چگالی توان باعث شده که آن‌ها را در سیستم‌های انرژی مدرن ضروری می‌کند [۲]. در ابرخازن‌ها انتخاب مواد الکترود در افزایش چگالی انرژی کلی دستگاه بسیار مهم است و آن‌ها مستقیماً بر کارآیی ذخیره‌سازی بار تأثیر می‌گذارند.

مکسن‌ها (MXenes) یک گروه جدید از مواد دوبُعدی به صورت فرم کلی $M_{n+1}X_nT_{n+1}$ هستند که در آن M اتم‌های فلزات واسطه، X شامل اتم‌های کربن یا نیتروژن، T نشان دهنده گروه‌های عاملی مانند F، O، یا OH است. اخیراً این مواد به‌دلیل خواص منحصر به فردشان در کاربردهای مختلف توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده‌اند. رسانایی الکتریکی استثنایی، فاصله بین لایه‌های قابل تنظیم، قابلیت تغییر سطح، مکان‌های فعال ردوکس، رفتار شبه خازنی قوی را ممکن و آن‌ها را برای فناوری‌های ذخیره انرژی بسیار امیدوارکننده می‌سازد [۳]. با توجه به ساختار و خواص منحصر به فردشان، MXenes ها پتانسیل قابل توجهی را در زمینه‌های مختلف، از جمله ذخیره انرژی، ترموالکتریک، سیستم‌های مغناطیسی و جداسازی آب الکتروکاتالیستی نشان داده‌اند.

در این پژوهش، ما خواص مغناطیسی، الکتریکی و ظرفیت خازنی کوانتومی برای ترکیب‌هایی مانند Cr_2CO_2، Cr_2NO_2، Mn_2CO_2 و Mn_2NO_2 را تحت کرنش اعمالی بررسی می‌کنیم. علاوه بر این، ظرفیت کوانتومی این ساختارها را تجزیه و تحلیل می‌کنیم تا بینش عمیق‌تری در مورد پتانسیل آن‌ها برای توسعهٔ پایدار، ساخت ابرخازن‌های نسل جدید، سیستم‌های ذخیره انرژی به‌دست آوریم.

مدل و روش محاسباتی

در این پژوهش، محاسبات DFT با استفاده از بسته محاسباتی CASTEP با در نظر گرفتن قطبش اسپین در تقریب چگالی موضعی (LDA) اجرا شد. برای ترکیبات حاوی فلزات واسطه، مانند MXenes های مبتنی بر Cr و Mn در مطالعه ما، با استفاده از رویکرد DFT+U محاسبات انجام می‌شود که با مقدار U Hubbard برای الکترون‌های سه بُعدی Cr و Mn برابر با ۲٫۵eV اعمال شد. انرژی قطع موج صفحه ۶۳۰eV برای گسترش توابع ویژهٔ الکترون ظرفیت و نزدیک به ظرفیت استفاده شد. با مدل Monkhorst-Pack با فاصله $۰٫۰۷ Å^{-۱}$ شبکه‌های نقطه‌ها k برابر با ۶×۶×۱ (Mn_2CO_2 و Cr_2NO_2)، ۶×۶×۲ (Cr_2CO_2) و ۵×۵×۱ (Mn_2NO_2) تولید می‌شود.

ظرفیت کوانتومی را می‌توان از فرمول زیر محاسبه نمود [٤]

$$C_Q = e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} DOS(E) F_T(E - \Phi_G) dE, \quad (1)$$

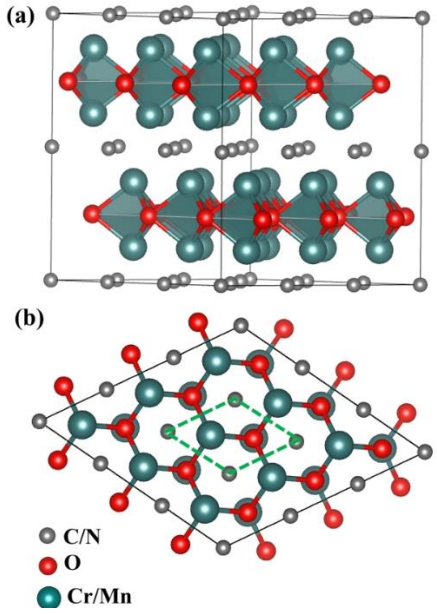
که $F_F = \frac{1}{4K_BT} Sech^2\left(\frac{E}{2K_BT}\right)$، K_B ثابت بولتزمن و T برابر با $300K$ هست. بار ذخیره‌شده سطحی به صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$\sigma = \int_{\cdot}^{\Phi_G} C_Q \, d\Phi_G. \quad (2)$$

تحلیل و بررسی نتایج

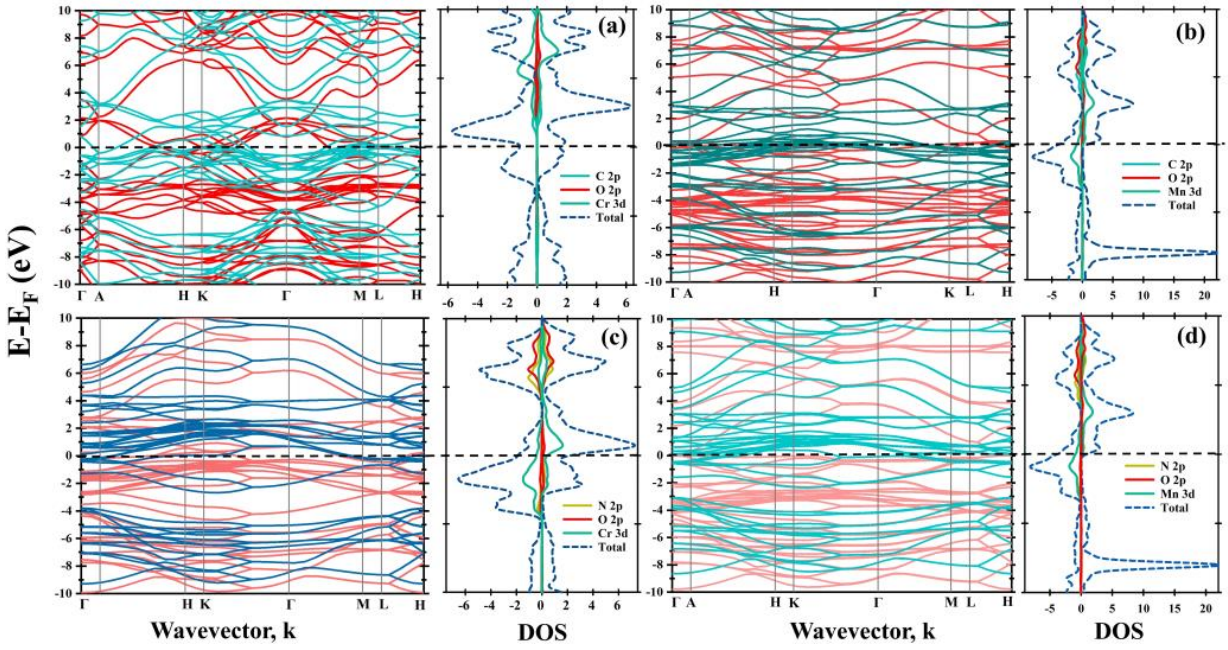
M_2XO_2 دارای یک ساختار کریستالی شش ضلعی است که با آرایش لایه‌ای متمایز می‌شود و مشابه سایر مواد دوبُعدی MXenes، این پیکربندی تقارن $P6_3/mmc$ را نشان می‌دهد. یک نمایش ابرشبکه ۱×۲×۲ از این ساختار در شکل ۱ نشان داده شده است که بینشی در مورد آرایش اتمی ارائه می‌دهد.

براساس آنالیز جمعیت Mulliken، مغناطش Cr_2CO_2 برابر با $3\mu_B$ به‌دست آمد. این نتیجه با گشتاور مغناطیسی Cr محاسبه شده توسط DFT که در مرجع [۵] گزارش شده است مطابقت کامل دارد و ۵۰٪ بیشتر از مقادیر به دست آمده برای i-MXenes در مرجع [۶] است. این نشان می‌دهد که در این ساختار اوربیتال d^5 مربوط به اکسیداسیون ۲+ با اسپین زیاد مشخص می‌شود.



شکل ۱ : نمایی از ابرشبکه‌ای از ساختار M_2XO_2.

به‌طور مشابه، گشتاور مغناطیسی Cr_2NO_2 برابر با $4.01\mu_B$ هست. یعنی، یک الکترون اضافی اتم نیتروژن با Cr برهمکنش داده است و گشتاور مغناطیسی را زیاد کرده هست. همچنین، برای ساختار Mn_2CO_2 گشتاور مغناطیسی برابر با $5.86\mu_B$ و برای Mn_2NO_2 مغناطش برابر با مقدار $6.74\mu_B$ به‌دست آمده هست. ساختار نواری، همچنین چگالی حالت‌های کل و موضعی برای همه ترکیبات با قطبش اسپینی در شکل ۲ ارائه شده است. ما تخلیهٔ الکترون‌های d را به‌دلیل اکسیداسیون مشاهده می‌کنیم که منجر به جابه‌جایی حالت‌های الکترونیکی بالاتر از سطح فرمی می‌شود. چگالی حالت‌های پیش‌بینی‌شده با اتم، هیبریداسیون قابل‌توجهی را بین اوربیتال‌های d فلزات واسطه، اوربیتال‌های p کربن در M_2CO_2 و p اوربیتال‌های اکسیژن در M_2NO_2 نشان می‌دهد.



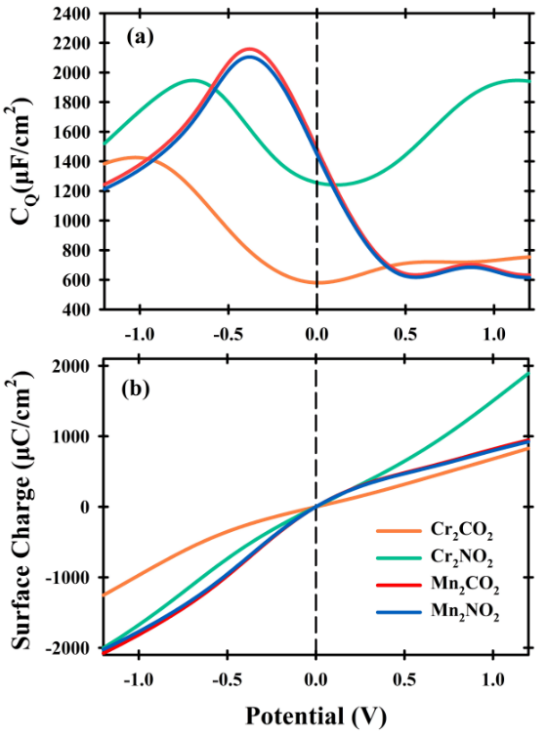
شکل۲ : ساختار نواری، چگالی حالت‌ها و چگالی حالت‌های موضعی برای ترکیب‌های M_2XO_2.

جدول۱ : ظرفیت کوانتومی بایاس مثبت (C_a)، بایاس منفی (C_c)، بار سطحی بایاس مثبت (Q_a)، بار سطحی بایاس منفی (Q_c) و نوع ترجیحی مواد الکترود در سیستم آبی.

ساختارها	$C_a(\mu F/cm^2)$	$C_c(\mu F/cm^2)$	$\lvert C_a\rvert/\lvert C_c\rvert$	$Q_a(\mu C/cm^2)$	$Q_c(\mu C/cm^2)$	$\lvert Q_a\rvert/\lvert Q_c\rvert$	نوع الکترود
Cr_2CO_2	۱۴۲۶٫۳۲	۵۸۰٫۲۱	۲٫۴۵	۸۲۸٫۳۵	−۱۲۵۳٫۷۹	۰٫۶۶	کاتد
Cr_2NO_2	۱۹۴۶٫۹۹	۱۲۴۱٫۲۷	۱٫۵۶	۱۸۹۱٫۰۰	−۲۰۰۰٫۵۳	۰٫۹۴	متقارن
Mn_2CO_2	۲۱۵۸٫۹۳	۶۳۱٫۴۸	۳٫۴۱۸	۹۴۶٫۸۸	−۲۰۷۶٫۱۹	۰٫۴۵	کاتد
Mn_2NO_2	۲۱۰۵٫۱۱	۶۱۵٫۷۴	۳٫۴۱۸	۹۲۳٫۲۷	−۲۰۲۴٫۴۴	۰٫۴۵	کاتد

در مقابل، برای ساختار Mn_2XO_2 با پیکربندی الکترونیکی d^5 نیمه پر است، محدودهٔ پهن نزدیک به صفر و نیمه پر را در اسپین بالا مشاهده می‌شود. این به برهمکنش تبادل مغناطیسی قوی بین حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین نسبت داده می‌شود.

ظرفیت کوانتومی یک عامل کلیدی در تعیین عملکرد ابرخازن، ارتباط نزدیکی با تغییرات چگالی حالت ناشی از جذب دارد. فرآیند جذب حالت‌های انرژی موضعی ایجاد می‌کند که ظرفیت ذخیره‌سازی بار مواد MXenes را افزایش می‌دهد.



شکل۳ : (الف) ظرفیت کوانتومی و (ب) توزیع بار سطحی به عنوان تابعی از پتانسیل ترکیب‌های M_2XO_2.

این افزایش از تشکیل حالت‌های الکترونیکی اضافی ناشی می‌شود که نه تنها خواص انتقال بار را بهبود می‌بخشد، بلکه به‌طور قابل‌توجهی بر فعالیت کاتالیزوری ماده و رسانایی الکترون تأثیر می‌گذارد. برای ارزیابی عملکرد خازنی، ظرفیت کوانتومی و توزیع بار سطحی برای ترکیب‌های M_2XO_2 در شکل ۳ نشان داده شده است. از شکل ۳ می‌توان مشاهده کرد که Mn_2XO_2 و Cr_2CO_2 دارای $|Q_c|$ مناسب برای ساخت مواد کاتد می‌باشد. بنابراین، این سه ترکیب را می‌توان ساختارهای مناسب برای الکترود کاتد معرفی نمود. این نتایج نشان می‌دهد که اثرات کرنش نقش مهمی در افزایش ظرفیت کوانتومی ساختارهای Mn_2XO_2 و Cr_2CO_2 ایفاء می‌کند. برای Cr_2NO_2، نوع الکترود در محدودهٔ وسیع ولتاژ بدون تغییر باقی مانده و آن را برای استفاده در ابرخازن‌های متقارن مناسب ساخت. همچنین، برای نمایش بهتر ظرفیت‌های کوانتومی و توزیع بار سطحی ساختارها در جدول ۱ ارائه شده است.

نتیجه‌گیری

در این مقاله ویژگی‌های مغناطیسی و الکتریکی ساختارهای M_2XO_2 (که M نشان‌دهندهٔ Cr و Mn، X همان اتم‌های کربن یا نیتروژن) بررسی شده است. همچنین برای کاربردهای مواد الکترودی برای این ساختارها، ظرفیت کوانتومی و بار سطحی آن‌ها نیز محاسبه شده است. نتایج نشان می‌دهد که یک الکترون اضافی نیتروژن باعث افزایش گشتاور مغناطیسی ساختارها شده است. از نظر الکتریکی همهٔ ساختارهای بیان شده رفتار فلزی دارند اما در ساختارهای مبتنی بر Mn به دلیل میدان تبادلی ایجاد شده اسپین بالا خالی‌تر از اسپین پایین است به طوری که قطبش اسپینی رخ داده است. علاوه براین، Mn_2XO_2 و Cr_2CO_2 ساختارهای مناسبی برای الکترود کاتد هستند. همچنین ترکیب Cr_2NO_2 را به عنوان مادهٔ مناسبی برای ساخت ابرخازن‌های متقارن پیشنهاد می‌دهیم.

مرجع‌ها

[۱] E. T. Sayed, A.G. Olabi, A.H. Alami, A. Radwan, A. Mdallal, A. Rezk and M.A. Abdelkareem; "Renewable energy and energy storage systems"; *Energies (Basel)* **16** (2023) 1415.

[۲] H. Kolavada, P. N. Gajjar, and Sanjeev K. Gupta; "Unraveling quantum capacitance in supercapacitors: Energy storage applications"; *J. Energy Storage* **81** (2024) 110354.

[۳] M. Wu, W. Zheng, X. Hu, F. Zhan, Q. He, H. Wang, Q. Zhang, L. Chen; "Exploring 2D Energy Storage Materials: Advances in Structure, Synthesis, Optimization Strategies, and Applications for Mono-valent and Multivalent Metal-Ion Hybrid Capacitors"; *Small* **18**, No. 50, (2022) 2205101.

[۴] E. Paek, A. J. Pak, G. S. Hwang; "A computational study of the interfacial structure and capacitance of graphene in ionic liquid;" *J. Electrochem. Soc.* **160**, No. 1 (2013) A1-A10.

[۵] C. Si, J. Zhou, and Z. Sun; "Half-metallic ferromagnetism and surface functionalization-induced metal-insulator transition in graphene-like two-dimensional Cr_2C crystals:" *ACS Appl. Mater. Interfaces* **7**, No. 31 (2015) 17510-17515.

[۶] H. S. Sarmah, and S. Ghosh; "In-plane ordering and tunable magnetism in Cr-based MXenes;" *arXiv preprint arXiv* **2402** (2024) 17577.

اثر فلزات واسطه آلاییده‌شده در آهن هیدروکسید دولایه با میان‌لایه آب

رضائی، نرگس[۷۱]؛ شکری، علی اصغر؛ محمدی، سعیده؛

گروه فیزیک نظری و نانو، دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا، تهران، ایران

چکیده

تولید هیدروژن از طریق تجزیهٔ الکتروکاتالیزی آب، به‌عنوان یکی از مؤثرترین مسیرها برای ذخیره‌سازی انرژی‌های تجدیدپذیر شناخته می‌شود. عملکرد این فناوری به‌شدت به کیفیت و کارایی الکتروکاتالیزورهای مورد استفاده در واکنش‌های تکامل اکسیژن و تکامل هیدروژن وابسته است که میزان گاف انرژی ساختارها و قطبش اسپینی این کارآیی را بهبود می‌بخشد. در این مطالعه، با بهره‌گیری از محاسبات تابعی چگالی، اثر نیکل و کبالت آلاییده شده بر ساختار آهن هیدروکسید دولایه مورد بررسی قرار می‌گیرد. نتایج ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی نشان داد که هر سه ساختار دارای گاف انرژی مناسب برای واکنش‌های الکتروکاتالیزی دارند و با آلایش نیکل و کبالت، مشاهده می‌شود که گشتاور مغناطیسی ساختارها بهبود یافته است. در نتیجه، اسپین‌های بالا و پایین در محدودهٔ انرژی فرمی قطبیده شده است. این قطبش اسپینی و مغناطش قوی در ترکیب‌ها، نقش مؤثری در تسهیل و بهبود واکنش‌های الکتروشیمیایی ایفاء می‌کند. این تنظیم گاف انرژی و قطبش اسپینی می‌توان کمک به‌سزای در ساخت و طراحی دستگاه‌های مبتنی بر الکتروشیمیایی، فتوولتائیک و تولید هیدروژن کند.

واژگان کلیدی: *هیدروکسیدهای دولایه، آلاییدن فلزات واسطه، نظریهٔ تابعی چگالی، سیستم‌های توسعهٔ پایدار*

Effect of Transition Metal Doping in Fe Layered Double Hydroxides with Water Interlayer

Rezaei, Narges[1]; Shokri, Aliasghar; Mohammadi, Saeedeh

Department of Theoretical and NanoPhysics, Faculty of Physics, Alzahra University, Tehran, Iran

Abstract

Hydrogen production through electrocatalytic water splitting is recognized as one of the most efficient pathways for storing renewable energy. The performance of this technology critically depends on the quality and efficiency of the electrocatalysts employed in the oxygen evolution reaction (OER) and hydrogen evolution reaction (HER), where the energy bandgap of the structures and spin polarization enhance this efficiency. In this study, we employ density functional theory (DFT) calculations to investigate the effect of Ni and Co doping on the electronic structure of Fe layered double hydroxides (LDH). The band structure and density of states (DOS) reveal that all three structures have a suitable bandgap for electrocatalytic reactions. Notably, doping with Ni and Co enhances the magnetic moment of the structures, leading to a pronounced spin polarization near the Fermi level. This spin-polarized and strong magnetization of structures play a crucial role in facilitating and improving electrochemical reactions. The

[71] Email: N.rezaei@student.alzahra.ac.ir

optimized bandgap and spin polarization could significantly contribute to the design of advanced electrochemical devices, photovoltaics, and hydrogen production systems.

***Keywords**: Layered Double Hydroxides (LDH), Transition Metal Doping, density functional theory (DFT), Sustainable Development Systems*

مقدمه

بحران‌های فزایندهٔ انرژی و آلودگی‌های زیست‌محیطی ناشی از سوخت‌های فسیلی، ضرورت توسعهٔ منابع انرژی جایگزین و پاک را بیش از پیش نمایان ساخته است. در این میان، هیدروژن (H_2) به‌دلیل فراوانی و سازگاری با محیط زیست، به عنوان یک حامل انرژی بسیار امیدوارکننده مطرح شده است که می‌تواند نقش کلیدی در ایجاد یک اقتصاد هیدروژنی پایدار و مبتنی بر انرژی‌های تجدیدپذیر ایفا کند [۱، ۲].

یکی از کارآمدترین و پایدارترین روش‌های تولید هیدروژن، فناوری تجزیهٔ الکتروکاتالیزوری آب است. این فرآیند شامل دو واکنش اساسی در الکترودها: واکنش تکامل هیدروژن در کاتد و واکنش تکامل اکسیژن در آند می‌شود. سرعت و کارایی کلی این فناوری به‌طور مستقیم به عملکرد کاتالیزورهای مورد استفاده برای تسریع این واکنش‌ها بستگی دارد [۳، ٤].

هیدروکسیدهای دولایه‌ای مبتنی بر فلزات واسطه، به دلیل ساختارهای لایه‌ای‌شان، مقرون به‌صرفه بودن و سطح ویژهٔ بالای این مواد، آن‌ها را به گزینه‌های امیدوارکننده‌ای برای جایگزینی کاتالیزورهای گرانبها تبدیل کرده است [۱– ۳]. هیدروکسیدهای دولایه‌ای، از صفحات هیدروکسیدهای فلزی با بار مثبت و لایه‌های آنیونی با بار منفی که در بین این صفحات قرار می‌گیرند، تشکیل شده‌اند. این آنیون‌های بین لایه‌ای که به آن‌ها میان‌لایه نیز گفته می‌شود، نقش مهمی در تعیین خواص این مواد ایفا می‌کنند. به صورت کلی، فرمول شیمیایی این مواد به صورت $[M^{3+}_{1-x}M^{2+}_{x}(OH)_2]^{x+}:[A^{n-}]_{x/n}\,mH_2O$ است که در آن M فلز و A آنیون است. تنوع در نوع فلزات (تک‌فلزی یا چندفلزی) و آنیون‌های میان‌لایه‌ای، امکان تنظیم خواص این مواد را فراهم می‌کند [۱، ۲]. هیدروکسیدهای دولایه‌ای بر پایهٔ آهن، کبالت و نیکل به عنوان یک دسته از مواد با مزایای هزینه پایین، سهولت ساخت و عملکرد الکتروکاتالیزوری مناسب، پتانسیل قابل توجهی برای کاربرد در فناوری جداسازی کاتالیستی آب و تولید هیدروژن پاک دارند. تحقیقات اخیر در این زمینه به طور فزاینده‌ای بر بهبود عملکرد و پایداری این مواد از طریق روش‌های مختلف از جمله آلایش با مواد مختلف، ایجاد نقص‌های ساختاری و بهینه‌سازی ریخت‌شناسی متمرکز شده است. اگرچه این مواد در حال حاضر عملکرد امیدوارکننده‌ای از نظر چگالی جریان و پایداری نشان می‌دهند، اما رسانایی الکتریکی نسبتاً پایین آن‌ها می‌تواند به‌عنوان یک عامل محدودکننده برای دستیابی به پتانسیل کامل آن‌ها مطرح شود و به همین دلیل، تحقیقات گسترده‌ای به منظور بهبود رسانایی این مواد در حال انجام است [۱]. در این مقاله با هدف بهبود خواص الکتریکی و مغناطیسی آن‌ها، نقش آلایش نیکل و کبالت با استفاده از میان‌لایه‌ای آب در ساختار هیدروکسید دولایه‌ای آهن مورد بررسی گرفته است.

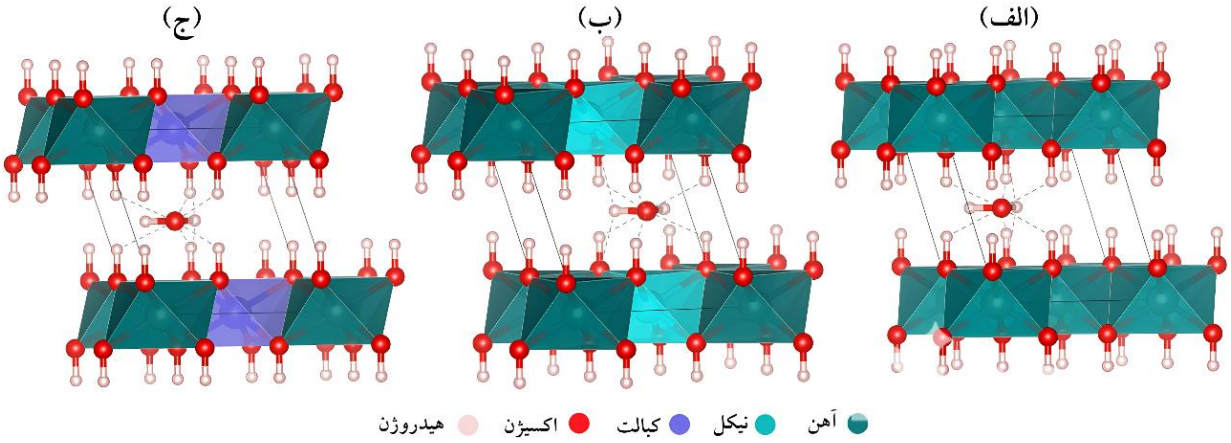
مدل و روش

در این مقاله از محاسبات مبتنی بر تئوری تابعی چگالی (DFT) با در نظر گرفتن قطبش اسپینی با استفاده از نرم افزار CASTEP استفاده شده است [۵]. انرژی تبادلی همبستگی الکترون با استفاده از

تقریب چگالی موضعی[72] با پارامترسازی CA-PZ برای محاسبه انرژی تبادلی همبستگی الکترون استفاده شده است. انرژی قطع برای تمام شبیه‌سازی‌ها ۶۳۰ eV، برای تعیین دقت محاسبات، انتخاب شده است. تابع چگالی موضعی گاهی در توصیف دقیق الکترون‌های اوربیتال‌های d و f فلزات واسطه دچار مشکل می‌شود. برای رفع این مشکل، از گزینه DFT + U استفاده می‌شود. مقدار U پارامتر هابارد در ساختار آهن هیدرواکسید دولایه برای اتم آهن برابر با ۵٫۳ eV و در ترکیب‌های هیدروکسیدهای دولایه‌ای با کبالت و نیکل آلاییده شده برابر با ۲٫۵ eV برای هر اتم فلز واسطه مشخص شده است. با مدل Monkhorst-Pack با فاصله ۰٫۰۷ $Å^{-1}$ شبکه‌های نقطه‌ها k برابر با ۳×۳×۴ برای همه ترکیب‌ها تولید کردیم.

تحلیل نتایج

ساختار هیدروکسید دولایه آهن با میان‌لایه آب ($Fe(OH)_2 : H_2O$)، ساختار هیدروکسید دولایه آهن با آلایش نیکل و کبالت با استفاده از میان‌لایه آب ($Fe(OH)_2 Ni : H_2O$، $Fe(OH)_2 Co : H_2O$)، همان‌گونه که در شکل ۱ نشان داده شده، مورد بررسی قرار گرفته است. مقادیر پارامترهای شبکه و حجم سلول واحد از ساختارهای بهینه شده در جدول ۱ بیان شده است.



شکل ۱ : شکل ساختاری، (الف) آهن هیدروکسید دولایه‌ای، (ب) آهن هیدروکسید دولایه‌ای با آلایش نیکل، (ج) آهن هیدروکسید دولایه‌ای با آلایش کبالت.

مشاهده می‌شود که افزودن نیکل و کبالت در ساختار هیدرواکسید دولایه آهن پارامترهای شبکه را به‌دلیل برهمکنش‌های اتم‌ها تغییر داده است.

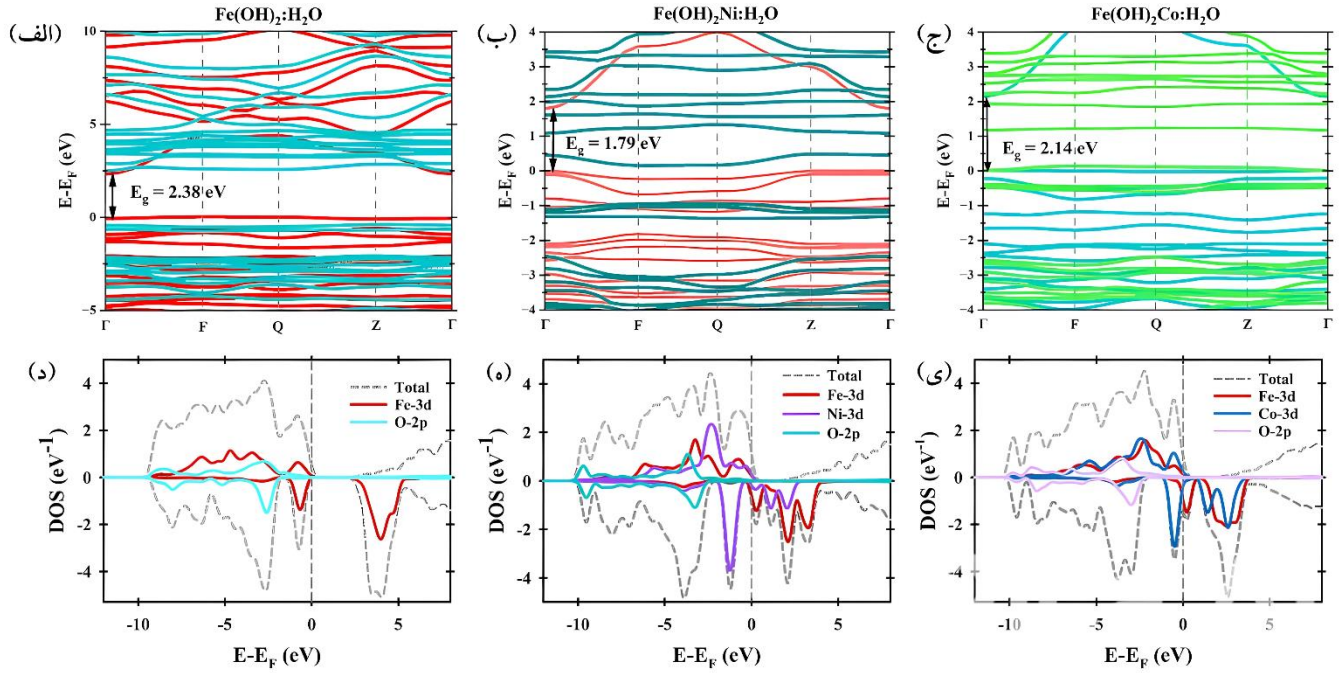
[72]. Local Density Approximation (LDA)

جدول۱ : پارامترهای شبکه برای ساختارهای خالص و آلاییدهٔ آهن هیدروکسید دولایه با فلزات واسطه Ni و Co.

ساختار	a(Å)	b(Å)	c(Å)	c/a	α	β	γ	V(Å)^3
$Fe(OH)_2 : H_2O$	۳٫۰۱	۵٫۴۰	۶٫۶۴	۲٫۲۰	۶۸٫۱۸	۸۷٫۲۹	۱۰۵٫۶۹	۹۵٫۴۹
$Fe(OH)_2Ni : H_2O$	۳٫۱۰	۵٫۱۲	۶٫۱۶	۱٫۹۸	۷۹٫۱۰	۱۰۰٫۰۳	۹۱٫۰۶	۹۴٫۷۰
$Fe(OH)_2Co : H_2O$	۳٫۰۸	۵٫۳۷	۶٫۱۰	۱٫۹۷	۷۳٫۸۸	۸۸٫۱۵	۸۷٫۳۹	۹۷٫۲۲

جهت تحلیل خواص الکترونی ساختارهای مورد مطالعه، ابتدا ساختار نواری آن‌ها در حالت اسپین بالا و پایین مورد بررسی قرار گرفت. همانطور که در شکل۲ الف-ج نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهند که با افزودن ناخالصی‌های فلزی مانند نیکل و کبالت به ساختار پایه آهن هیدروکسید دولایه، می‌توان گاف انرژی را کنترل نمود. مقدار گاف از ۲٫۳۸ eV در ساختار خالص به‌ترتیب به ۲٫۱۴ eV و ۱٫۷۹ eV در ساختارهای آلاییده با کبالت و نیکل می‌باشد که مطابقت خوبی با گاف انرژی مناسب برای سیستم‌های فتوولتائیک و الکتروکاتالیستی دارد. چگالی حالت‌های کلی و موضعی در شکل۲ د-ی برای نمایش بهتر ویژگی‌های الکتریکی نشان داده شده است. در ساختار آهن هیدروکسید دولایه خالص، اسپین بالا و پایین خالی هستند و باعث ایجاد گاف انرژی شده‌اند. با افزودن نیکل و کبالت به ساختار، تفاوت بارزی در اطراف سطح فرمی مشاهده می‌شود. به صورتی که اسپین بالا در این ناحیه خالی شده و گاف انرژی قابل توجهی در آن ناحیه ایجاد کرده است، در حالی که اسپین پایین هم‌چنان در رسانش سهیم هست. این جداشدن دو اسپین، بیانگر قطبش اسپینی در این ساختارها است. این قطبش اسپین منجر به افزایش سرعت انتقال حامل‌های بار و بهبود کارایی در واکنش‌های الکتروکاتالیزوری مانند واکنش‌های تکامل اکسیژن و هیدروژن می‌شود.

در نمودارهای چگالی حالت‌های موضعی برای هر سه ترکیب مشاهده می‌شود که سهیم بیشتر رسانش مربوط به اوربیتال‌های d است. براساس آنالیز جمعیت Mulliken، مغناطش برای آهن در ساختار آهن هیدروکسید دولایهٔ خالص، مقدار ٤ μ_B را نشان می‌دهد. عنصر آهن با آرایش الکترونی d^6 ختم شده و چیدمان اوربیتال‌های d به صورت $t_{2g}^3\uparrow t_{2g}^1\downarrow e_g^2\uparrow e_g^0\downarrow$ می‌باشد. در ترکیب آلایش‌یافته با نیکل، اتم نیکل با آرایش الکترونی d^8، مغناطش مقدار ۲ μ_B دارد. همچنین، توزیع الکترون‌ها در این حالت به صورت $t_{2g}^3\uparrow t_{2g}^3\downarrow e_g^2\uparrow e_g^0\downarrow$ می‌باشد. در حالی که در ساختار آلایش‌یافته با کبالت مغناطش برای کبالت، مقدار ۳ μ_B دارد. اتم کبالت به آرایش الکترونی d^7 ختم می‌شود و چیدمانی مشابه $t_{2g}^3\uparrow t_{2g}^2\downarrow e_g^2\uparrow e_g^0\downarrow$ دارد.



شکل۲ : (الف–ج) نمودارهای ساختار نواری الکترونی برای ساختارهای: (الف) آهن هیدروکسید دولایه (ب) آهن هیدروکسید دولایه آلاییده با نیکل و (ج) آهن هیدروکسید دولایه آلاییده با کبالت. (د–ی) چگالی حالات کل و جزئی به ترتیب برای: (د) آهن هیدروکسید دولایه، (ه) آهن هیدروکسید دولایه آلاییده با نیکل و (ی) آهن هیدروکسید دولایه آلاییده با کبالت.

هر سه ترکیب مورد مطالعه ما قطبش اسپینی قوی دارند که باعث می‌شود در کاربردهایی نظیر سیستم‌های مبتنی برالکتروشیمیایی و دستگاه‌های فتوولتائیک کاربرد به‌سزایی داشته باشند.

نتیجه‌گیری

در اینجا، اثر آلایش فلزات واسطه نیکل و کبالت بر روی ساختار و ویژگی‌های الکترونی و مغناطیسی آهن هیدروکسید دولایه با هدف بهبود عملکرد در واکنش‌های تکامل اکسیژن و هیدروژن انجام شده است. نتایج به‌دست آمده نشان داد که آلایش، نقش به‌سزایی در ایجاد قطبش اسپینی مؤثر در ناحیهٔ انرژی فرمی ایفا می‌کند. همچنین، این روش باعث کنترل گاف انرژی و خواص مغناطیسی ساختار شد. این قطبش قوی اسپین در ترکیب‌ها، قابلیت بالای آن‌ها برای تسهیل انتقال اسپین و تقویت فعالیت کاتالیزوری نشان می‌دهد. این نتایج ما، کاربرد فراوانی در ابرخازن‌ها، سیستم‌های الکتروشیمیایی، باتری‌ها، فتوولتائیک و انرژی پاک دارد.

مرجع‌ها

[۱] C. Li, Y. Bao, E. Liu, B. Zhao and T. Sun; "Recent advances of modified Ni (Co, Fe)-based LDH 2D materials for water splitting"; *Molecules* **28**, No. 3 (2023) 1475.

[۲] S. Li, C. Yue, H. Wang, J. Du, H. Cui, M. Pu and M. Lei; "Transition metal doped into layered double hydroxide as efficient electrocatalysts for oxygen evolution reaction: A DFT study." *Applied Surface Science* **679**, (2025) 161233.

[۳] R. Li, Y. Li, P. Yang, D. Wang, H. Xu, B. Wang, F. Meng, J. Zhang and M. An; "Electrodeposition: Synthesis of advanced transition metal-based catalyst for hydrogen production via electrolysis of water." *Journal of energy chemistry* **57**, (2021) 547-566.

[۴] T. Sun, S. Mitchell, J. Li, P. Lyu, X. Wu, J. Pérez-Ramírez and J. Lu; "Design of local atomic environments in single-atom

electrocatalysts for renewable energy conversions." *Advanced Materials* **33**, No. 5 (2021) 2003075.

[۵] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias and A. J. Joannopoulos; "Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients." *Reviews of modern physics* **64**, No. 4 (1992) 1045

ارزیابی تأثیر کرنش بر عملکردحرارتی InSe بااستفاده از شبیه‌سازی مونته‌کارلومعادله انتقال بولتزمن

بهادری، سیده آمنه[۱]؛ شمالی، زهرا[۱]؛ عسگری، رضا [۲]

[۱] دپارتمان فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ۱۷۵-۱۴۱۱۵، ایران

[۲] پژوهشکده فیزیک کوانتوم و ماده، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی(IPM)، تهران، ۵۵۳۱-۱۹۳۹۵، ایران

چکیده

مهندسی‌کرنش یک رویکرد بهینه برای بهبود خواص‌حرارتی مواد دوبعدی از جمله InSe است. ما با استفاده از شبیه‌سازی مونته‌کارلوی معادله‌ی انتقال بولتزمن فونونی، انتقال‌حرارت در InSe وهمچنین InSe با وجود٪ ٤ کرنش کششی را بررسی کرده‌ایم. با وجود کرنش‌کششی، کانال ماسفت InSe کانال خنک‌تری را تحت تاثیر ناحیه‌تولیدحرارت نشان می‌دهد. علاوه‌براین InSe تحت تأثیر کرنش، توانست سریع‌تر خنک شود و به بیشینه‌دمای پایین‌تری برسد. بنابراین؛ کرنش‌کششی با تغییر و کاهش بیشینه‌ی دما در InSe توانسته آن را به کاندیدای کارآمدتری برای کانال ماسفت تبدیل کند.

واژه های کلیدی: *مدی‌ری‌ت حرارتی، کرنش‌کششی، مونته کارلو، معادله انتقال بولتزمن ، کانال ماسفت.*

Evaluating the effect of strain on InSe thermal performance using Monte Carlo simulation of Boltzmann transport equation

Bahdori, Seyedeh ameneh[1]; Shomali, Zahra[1]; Asgari, Reza[2]

[1]*Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Tarbiat Modares University, Tehran 14115-175, Iran*

[2]*School of Quantum Physics and Matter, Institute for Research in Funamental Sciences(IPM), Tehran, 19395-5531, Iran*

Abstract

Strain engineering offers a promising strategy for enhancing the thermal performance of two-dimensional (2D) materials, including indium selenide (InSe). In this study, we investigated the thermal behavior of pristine InSe and InSe under 4% tensile strain using Monte Carlo simulations of the Boltzmann phonon transport equation. Interestingly, despite the applied strain, the InSe MOSFET channel exhibited a cooler temperature profile during the heating phase. Moreover, the strained InSe not only cooled more rapidly but also reached a lower peak temperature compared to its unstrained counterpart. These findings suggest that tensile strain can effectively reduce the maximum operating temperature of InSe, making it a more thermally efficient and viable candidate for use in MOSFET channels.

***Keywords**: Thermal management, tensile strain, Monte Carlo, Boltzmann transport equation, MOSFET channel.*

مقدمه

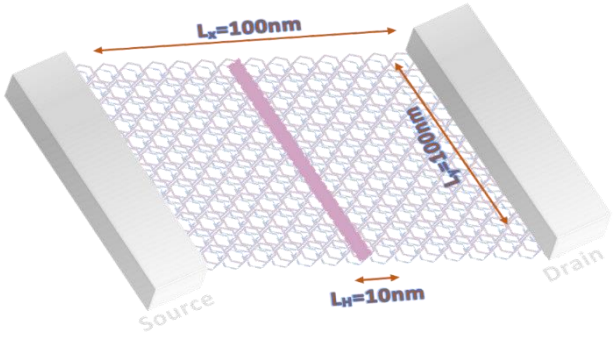
مدیریت‌حرارتی به طور کلی شامل استفاده از اصول انتقال‌حرارت برای حفظ دمای‌عملیاتی تجهیزات الکترونیکی و همچنین اطمینان از ایمنی، کارایی و انطباق با صنعت است. همان‌طور که پیشرفت‌های تکنولوژی منجر به تولید دستگاه‌های الکترونیکی فشرده‌تر و قدرتمندتر می‌شود، نیاز به دفع گرمای ناخواسته افزایش می‌یابد. پیشرفت‌های اخیر در فناوری نانو، امکانات جدیدی را برای مدیریت‌حرارتی ایجاد کرده‌است. نانومواد و نانوساختارها از نظر پتانسیل افزایش انتقال‌حرارت و هدایت‌حرارتی در کاربردهای مختلف در حال بررسی هستند. مهندسی‌کرنش یک رویکرد بهینه برای بهبود خواص مواددوبعدی باتوجه به طبیعت قابل کشش آنها است[۱]. تحقیقات نشان داده‌است که کرنش‌کششی تک‌محوری یا دومحوری، به‌ویژه در کانال ترانزیستورهای سیلیکونی، تغییرات قابل‌توجهی در تحرک الکترون و حفره نشان داده‌است. این روش می‌تواند برای مواد دوبعدی مانند InSe که ظرفیت بالایی برای تغییر شکل ازخود نشان می‌دهند و می‌توانند کشش قابل‌توجهی را بدون شکستگی تحمل کنند، موثر باشد[۲].

هندسه و شرایط مرزی

InSe یک ساختار تک‌لایه است که از چهار صفحه تک‌اتمی تشکیل شده‌است که در یک الگوی شش‌ضلعی قرار گرفته‌اند. این صفحات به‌صورت چهاروجهی در توالیSe–In–Se از طریق پیوندهای کووالانسی به‌هم متصل می‌شوند. به طوری که هر اتم ایندیم به سه سلنیوم مجاور متصل است. این پیکربندی منجر به یک ساختار لایه‌ای با شبکه لانه‌زنبوری از اتم‌های ایندیم و سلنیوم می شود. لایه‌های درون این ساختار توسط نیروهای نسبتا ضعیف واندروالس کنار هم قرار می‌گیرند. از نمای بالا، تک‌لایه InSe یک شبکه لانه‌زنبوری را نشان می‌دهد. ثابت شبکه InSe ، ۳/۹۵ آنگستروم می‌باشد[۳]. در این بررسی، ما از ٤ درصد کرنش بر روی تک‌لایه InSe استفاده می‌کنیم که تقارن کریستالی را با تغییر شبکه‌های آن به‌صورت

$$\delta = (a - a_0)/a_0 \times 100\% \quad (1)$$

که در آن از a و a_0 به‌ترتیب ثابت شبکه تک‌لایه InSe با٤٪ کرنش و بدون‌کرنش هستند، استفاده می‌کنیم [٤و٥]. تک‌لایه‌های موردبررسی ما دارای ابعاد با طول (L_X) و عرض (L_Y)، ۱۰۰ نانومتر و ضخامت۰/۷۵۷ نانومتر هستند. همچنین دمای‌اولیه سیستم ۲۹۹ کلوین است. یک شار حرارتی یکنواخت نیز به‌اندازه (W/m^3) 10^{12} به مرکز کانال در جهت x اعمال می‌شود.



شکل۱: ابعاد و هندسه کانال ترانزیستور

در شکل ۱ ابعاد و هندسه تک‌لایه‌های مورد بررسی ما به عنوان کانال ترانزیستور نشان داده‌شده‌است.

روش عددی

این مطالعه ازطریق معادله فونونی بولتزمن و بااستفاده از شبیه‌سازی مونته‌کارلو غیرتعادلی انجام شده‌است. در معادله انتقال‌بولتزمن فونونی v_g به عنوان سرعت گروهی فونونی و f تابع توزیع بوز–انشتین می باشد.

$$\partial f(r,q,t)/\partial t + v_g \cdot \nabla f(r,q,t) = \partial f(r,q,t)/\partial t \mid_{scat} \quad (۲)$$

در شبیه‌سازی مونته‌کارلو، مرحله‌اول در محاسبات، فونون‌ها ردیابی و توزیع می‌شوند. فونون‌ها اجازه دارند آزادانه با سرعت و جهت خود که مطابق با بردارموج در فضای تکانه‌ی رابطه پراکندگی فونون است، حرکت کنند[۶]. هردو تک‌لایه مورد بررسی ما دارای شش شاخه آکوستیکی و اپتیکی هستند. فونون‌های شاخه آکوستیک نقش مهم‌تری در انتقال‌حرارت دارند. علاوه‌براین، در پراکندگی فونون آکوستیک منحنی‌ها تقریباً همسانگرد هستند و می‌توانند چند جمله‌ای درجه‌دوم‌باشند.

$$\omega_b = c_b k^2 + v_b k \quad (۳)$$

ضرایبی که با معادله درجه‌دوم برازش داده شده‌اند، درجدول ۱ آمده‌است. محدوده فرکانس هر سه شاخه آکوستیک به ۱۰۰۰ بازه تقسیم می‌شود. سپس سرعت نسبی برای هر فرکانس محاسبه می‌شود. ما یک مش یکنواخت به‌اندازه ۱۰۰ در ۱۰۰ در صفحه XY در نظر گرفتیم. سپس، با تقسیم اندازه مش با سرعت هر مرحله، زمان سفر فونون به‌دست می‌آید. پوشش کل محدوده فرکانس، حداقل‌زمان سفر محاسبه‌شده به‌عنوان مرحله‌زمانی انتخاب می‌شود[۷].

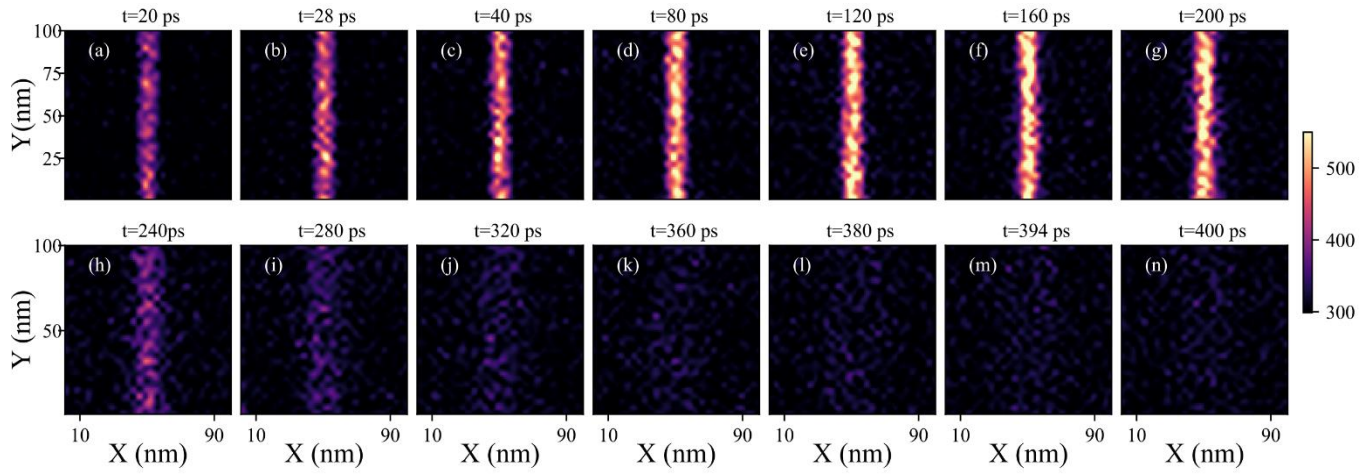
جدول ۱: داده های ورودی برای محاسبات زمان واهلش فونون(Θ دمای دبای ، M^- جرم اتمی متوسط و γ پارامتر گرونایسن)

موادوبعدی	InSe	InSe + 4% strain
Θ	۴۳۳/۳۳	۵۵۰
M^- (e−27 kg)	۴۲/۲۹	۵۱/۴۱
γ	۰/۴۹	۱/۰۵

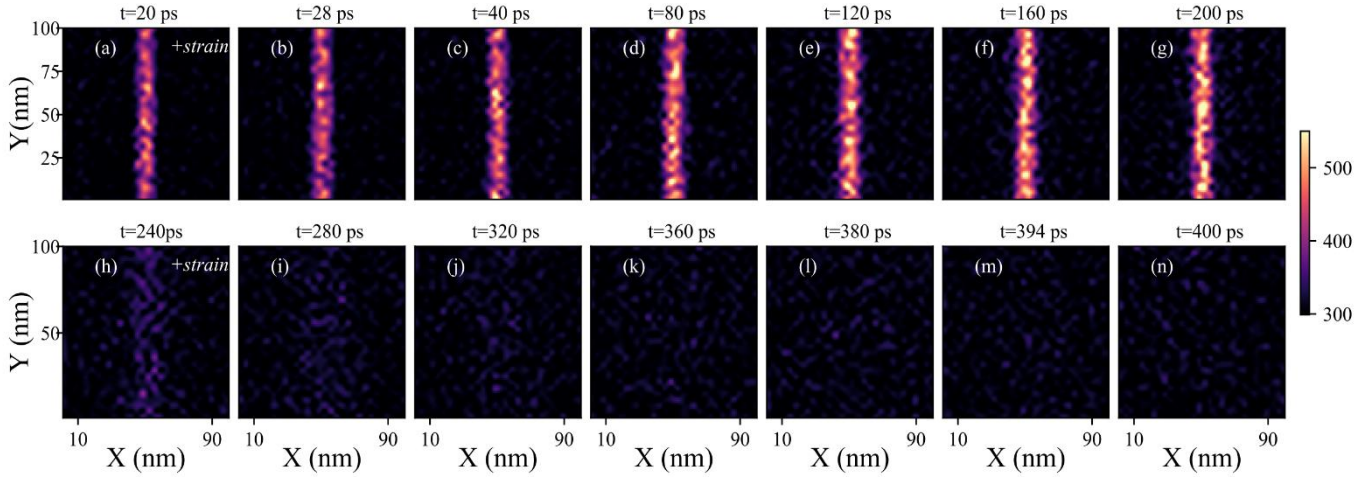
باتوجه به محاسبات گام‌زمانی $۳/۷۸\times ۱۰^{-۱۲}$ و $۳/۳۹۹\times ۱۰^{-۱۲}$ به‌ترتیب برای InSe باکرنش و InSe بدون‌کرنش به‌دست آمده‌است . نرخ پراکندگی برای فونون‌ها با تمام ۱۰۰۰ فرکانس در هرشاخه محاسبه می‌شوند. همچنین، نرخ پراکندگی با معکوس کردن زمان واهلش فونون به‌دست می‌آید.

نتایج و بحث

ریزابزارها در ابتدای شبیه‌سازی به‌مدت ۲۰۰پیکوثانیه طبق مکانیزم گرمایش ژول گرم می‌شوند و در ۲۰۰ پیکو ثانیه بعدی، ناحیه تولید گرما خاموش می‌شود. هردوتک‌لایه دمای بالایی را تجربه می‌کنند.

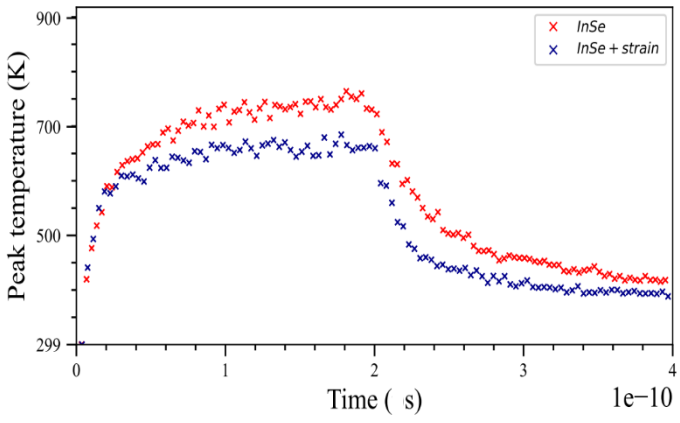


شکل۲: پروفایل توزیع دمایی InSe طی مرحله گرمایش در زمان های (a) t=۲۰ پیکوثانیه، (b) t=۲۸ پیکوثانیه و(c) t=۴۰ پیکوثانیه (d) t=۸۰ پیکوثانیه و(e) t=۱۲۰ پیکوثانیه (f) t=۱۶۰ پیکوثانیه و(g) t=۲۰۰ پیکوثانیه، طی مرحله سرمایش در زمان‌های (h) t=۲۴۰ پیکوثانیه، (i) t=۲۸۰ پیکوثانیه، (j) t=۳۲۰ پیکوثانیه، (k) t=۳۶۰ پیکوثانیه، (l) t=۳۸۰ پیکوثانیه، (m) t=۳۹۴ پیکوثانیه و (n) t=۴۰۰ پیکوثانیه.



شکل۳: پروفایل توزیع دمایی InSe با ٤٪ کرنش کششی طی مرحله گرمایش در زمان های (a) t=۲۰ پیکوثانیه، (b) t=۲۸ پیکوثانیه و(c) t=۴۰ پیکوثانیه (d) t=۸۰ پیکوثانیه و(e) t=۱۲۰ پیکوثانیه (f) t=۱۶۰ پیکوثانیه و(g) t=۲۰۰ پیکوثانیه، طی مرحله سرمایش در زمان‌های (h) t=۲۴۰ پیکوثانیه، (i) t=۲۸۰ پیکوثانیه، (j) t=۳۲۰ پیکوثانیه، (k) t=۳۶۰ پیکوثانیه، (l) t=۳۸۰ پیکوثانیه، (m) t=۳۹۴ پیکوثانیه و (n) t=۴۰۰ پیکوثانیه.

نمودار پروفایل‌دما برای تک‌لایه‌ها در زمان‌های مختلف استخراج شد. با توجه به اینکه ابزارهای شبیه‌سازی شده در مدت زمان ۲۰۰ پیکوثانیه گرم می‌شوند. اندکی بعد از شروع شبیه‌سازی نقاط داغ تشکیل می‌شود. فاز گرمایش و سرمایش در طول ۴۰۰ پیکوثانیه درهردو تک‌لایه موردمطالعه در شکل ۲و۳ نشان داده‌شده‌است. با وجود کرنش‌کششی، کانال ماسفت InSe توانست کانال خنک‌تری را در طول فاز گرمایش نشان دهد. به‌طورکلی، کرنش با تغییر و کاهش حداکثر دما در ایندیم‌سلنید توانسته آن را به کاندیدای کارآمدتری برای کانال ماسفت تبدیل‌کند. از سوی دیگر، در مرحله سرمایش یعنی از ۲۰۰ پیکوثانیه تا ۴۰۰ پیکوثانیه زمانی که تولیدگرما را خاموش‌کردیم، InSe با کرنش توانست سریع‌تر خنک شود و به حداکثر دمای پایین‌تری برسد. این نتیجه برای کاربردهای ترانزیستوری مطلوب‌تر است.



شکل ۴: بیشینه‌دما طی فازگرمایش و سرمایش در هردوتک‌لایه

شکل ٤ نمودار بیشینه‌دما رادر مقایسه با تک‌لایه مشابهش نشان می‌دهد. رفتار هردو تک‌لایه در مقابل گرمای االقاشده طی فاز

گرمایش و سرمایش یکسان است. در مرحله سرمایش، زمانی که تولیدگرما خاموش می‌شود، هر دو شروع به خنک شدن می‌کنند و رفتار مشابهی دارند. InSe زودتر شروع به خنک شدن می‌کند، زیرا در طول زمان گرم شدن دمای کمتری دارد و کمتر گرم می‌شود. می‌توان گفت، دمایی که توسط InSe بدون کرنش در پایان زمان خنک سازی به دست می آید، نزدیک به ۴۰۰ پیکوثانیه است، در حالی‌که InSe با کرنش آن دما را قبل از زمان ۳۰۰ پیکوثانیه تجربه می‌کند.

نتیجه گیری

انتقال حرارت گذرا را در دو تک‌لایه، InSe بدون کرنش و InSe تحت کرنش‌کششی ٤ درصد بااستفاده از شبیه‌سازی مونته‌کارلو غیرتعادلی معادله انتقال فونون بولتزمن بررسی کرده‌ایم. در طول مطالعه خود، ما بر تأثیر کرنش‌کششی بر مدیریت‌حرارتی InSe تأکید کرده‌ایم، رویکردی که یک نوآوری کلیدی در افزایش بازده‌حرارتی و عملکرد دستگاه‌الکترونیکی است. در این شبیه‌سازی به این نتیجه رسیدیم، که کانال ماسفتی که کرنش دارد، در مقایسه با دیگری کمتر گرم می‌شود و سریع‌تر سرد می‌شود. این واقعیت می‌تواند ایندیوم سلنید کرنش‌دار را به یک کانال کارآمد برای ماسفت تبدیل کند. با ترکیب مهندسی‌کرنش، تغییرات در خواص حرارتی InSe به اتلاف حرارت بهینه و بهبود پایداری مواد کمک می کند. این یافته‌ها نه تنها نقش مهم کرنش در پیشبرد راه‌حل‌های مدیریت حرارتی را روشن می‌کند، بلکه بر تعامل بین علم مواد و مهندسی حرارتی که برای بهبود دستگاه‌های الکترونیکی با کارایی بالا ضروری است، تأکید می‌کند.

مرجع‌ها

[1] W. Wan, Sh. Zhao, Y. Ge, Y. Liu, "Phonon and electron transport in Janus monolayers based on InSe." *J. Phys.: Condens. Matter*, **31**, 435501, 2019.

[2] Sh. Yang, Y.Chen, and Ch. Jiang, "Strain engineering of two dimensional materials: Methods, properties, and applications," *the National Natural Science Foundation of China*, Volume **3**, Issue 4, pp. 337-432, 2021.

[3] A. Politano, and et al, "Indium selenide: an insight into electronic band structure and surface excitations", *Scientific Reports*. **7** (1): 3445, 2017.

[4] A. I, Dmitriev, V. V, Vishnjak, G.V, Lashkarev, V.L, Karbovskyi, Z.D, Kovaljuk, A. P, Bahtinov, "Investigation of the morphology of the van der Waals surface of the InSe single crystal". *Physics of the Solid State*. **53** (3): 622–633, 2011.

[5] Q. Wang and et al."Strain Effect on Thermoelectric Performance of InSe Monolayer," *Nanoscale Res Lett* **14**, 287, 2019.

[6] X. J. Ge, K. L. Yao, and J. T. Lü, Comparative study of phonon spectrum and thermal expansion of graphene, silicene, germanene, and bluephosphorene, *Physical Review B*, **94**(16), 165433, 2016.

[7] S.A. Bahadori, Z. Shomali, "Thermal transport in thermoelectric materials of SnSSe and SnS2: A non-equilibrium Monte-Carlo simulation of Boltzmann transport equation" *Case Stud. Therm. Eng*, **57** , 104377, 2024.

بررسی قابلیت اطمینان ترانزیستورهای نسل جدید $ThSi_2N_4$

میرزایی، مریم[1]؛ بهادری، سیده آمنه[1]؛ شمالی، زهرا[1]

[1] *دپارتمان فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران*

چکیده

بهینه‌سازی مدیریت‌حرارتی در ادوات نانوالکترونیکی از مسائل چالش برانگیز در این حوزه است. در این مطالعه، فونون‌های شرکت‌کننده در انتقال‌حرارت به‌صورت عددی در شبیه‌سازی مونته‌کارلوی غیرتعادلی معادله فونون-بولتزمن بررسی شده‌است. در $ThSi_2N_4$ اکثریت فونون‌هایی که در انتقال‌حرارت شرکت می‌کنند، فونون‌های LA هستند که به‌دلیل فرکانس بسیار بالا باعث افزایش حداکثر دما در تک‌لایه می‌شوند. تک لایه مورد مطالعه ما دمای بالاتری را نسبت به تک‌لایه $MoSi_2N_4$ را کسب می‌کند. این خصوصیت تک‌لایه $ThSi_2N_4$ را نسبت به تک‌لایه های هم‌خانواده‌اش متمایز و کاربردی‌تر در حوزه ترموالکتریک می‌کند.

واژه های کلیدی: *مدیریت‌حرارتی، مونته‌کارلو، معادله انتقال بولتزمن ، نیم‌رساناهای دوبعدی*

Exploring the Reliability of Next-Generation $ThSi_2N_4$ FET Devices

Mirzaei,Maryam[1]; Bahdori, Seyedeh ameneh[1]; Shomali, Zahra[1]

[1] *Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Tarbiat Modares University, Tehran , Iran*

Abstract

Thermal management optimization in nanoelectronic devices is a challenging issue in this field. In this study, phonons participating in heat transfer are numerically investigated in non-equilibrium Monte Carlo simulations of the phonon-Boltzmann equation. In ThSi2N4, the majority of phonons participating in heat transfer are LA phonons, which, due to their very high frequency, increase the maximum temperature in the material. Our studied monolayer achieves a higher temperature than the $MoSi_2N_4$ monolayer. This property makes the ThSi2N4 monolayer distinct from its family monolayers and more applicable in the field of thermoelectrics.

***Keywords**: Thermal management, Monte Carlo, Boltzmann transport equation, two-dimensional semiconductor*

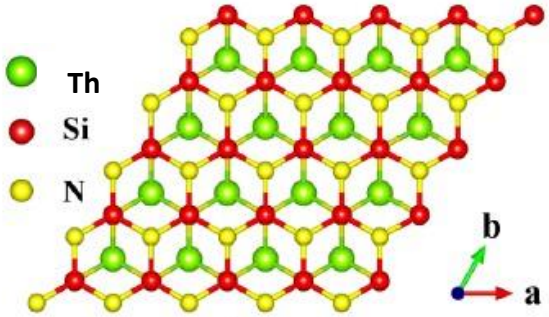
مقدمه

در سال ۲۰۲۰، نخستین تک‌لایه‌های نیمه‌رسانای دوبعدی نظیر WSi_2N_4 و $MoSi_2N_4$ به‌صورت تجربی و از طریق روش رسوب بخار شیمیایی سنتز و مشخصه‌یابی شدند. این ساختارهای دوبعدی متعلق به خانواده‌ی کلی MA_2Z_4 هستند که به‌دلیل تطبیق‌پذیری بالا و ویژگی‌های فیزیکی و الکترونیکی منحصربه‌فرد، توجه گسترده‌ای را در حوزه‌های مختلف جلب کرده‌اند. خواص امیدوارکننده‌ی این مواد، آن‌ها را به کاندیداهایی بسیار مناسب از نظر پتانسیل افزایش انتقال‌حرارت و کاربرد در ترانزیستورهای اثر میدانی، صرفه‌جویی در مصرف انرژی و بهینه‌سازی مدیریت‌حرارتی در ادوات نانوالکترونیکی تبدیل کرده‌است[۱و۲].

در این میان، $ThSi_2N_4$ به‌عنوان یکی از اعضای نوظهور و کمتر مطالعه‌شده‌ی این خانواده، اخیراً مورد توجه ویژه قرار گرفته‌است. ترکیب منحصربه‌فرد عناصر در این ماده، به‌ویژه حضور عنصر توریم با ویژگی‌های الکترونی خاص، موجب بروز رفتارهای گرمایی و ساختار متفاوتی نسبت به سایر هم‌خانواده‌های MA_2Z_4 شده است. مطالعات نظری و داده‌های تجربی اولیه حاکی از آن است که $ThSi_2N_4$ نه‌تنها از پایداری ترمودینامیکی مطلوبی برخورداراست، بلکه ساختارلایه‌ای آن امکان جداسازی و سنتز به‌صورت تک‌لایه‌ای را نیز فراهم می‌آورد[۳و۴].

هندسه و شرایط مرزی

معمولاً $ThSi_2N_4$ در سیستم بلوری شش‌وجهی متبلور می‌شود و مشابه برخی ترکیبات سیلید و نیترید ساختاری شبیه به وورتزیت دارد. پارامترهای شبکه‌ای این ترکیب a=۳/۶ Å و c=۹/۴ Å است که معمولاً گزارش شده‌است. اتم‌های توریم در مرکز ساختار قرار دارند و از طریق پیوندهای فلزی قوی، به پایداری شبکه کمک می‌کنند. اتم‌های سیلیسیم به‌صورت لایه‌ای آرایش یافته و پیوندهای Si تشکیل می‌دهند. اتم‌های نیتروژن در تشکیل پیوندها مشارکت دارند که موجب تقویت استحکام و پایداری گرمایی می‌شود[۵و۷]. تک‌لایه مورد مطالعه ما دارای ابعاد با طول (L_x) و عرض (L_y)، ۲۰۰ نانومتر و ضخامت ۰/۷۳۵ نانومتر هستند. در مرکز کانال و در جهت x ، منبع گرما شارگرمایی برابر با 10^{12} (W/m^3) Q= تولید می‌کند. تمام مرزها به جز مرز پایین، آدیاباتیک هستند و دمای آن برابر با دمای محیط است. این سیستم همچنین از مرز پایین با محیط تبادل انرژی می‌کند. دمای اولیه تمام قسمت‌های ریزابزار ۲۹۹ کلوین می‌باشد.



شکل۱: ساختار اتمی $ThSi_2N_4$

روش عددی

این بررسی با استفاده از شبیه‌سازی مونته‌کارلوی غیرتعادلی معادله فونونی بولتزمن انجام شده‌است. در معادله انتقال بولتزمن فونونی v_gبه عنوان سرعت گروهی فونونی و f تابع توزیع بوز- انشتین می باشد.

$$\partial f(r,q,t)/\partial t + v_g \cdot \nabla f(r,q,t) = \partial f(r,q,t)/\partial t \mid_{scat} \quad (۲)$$

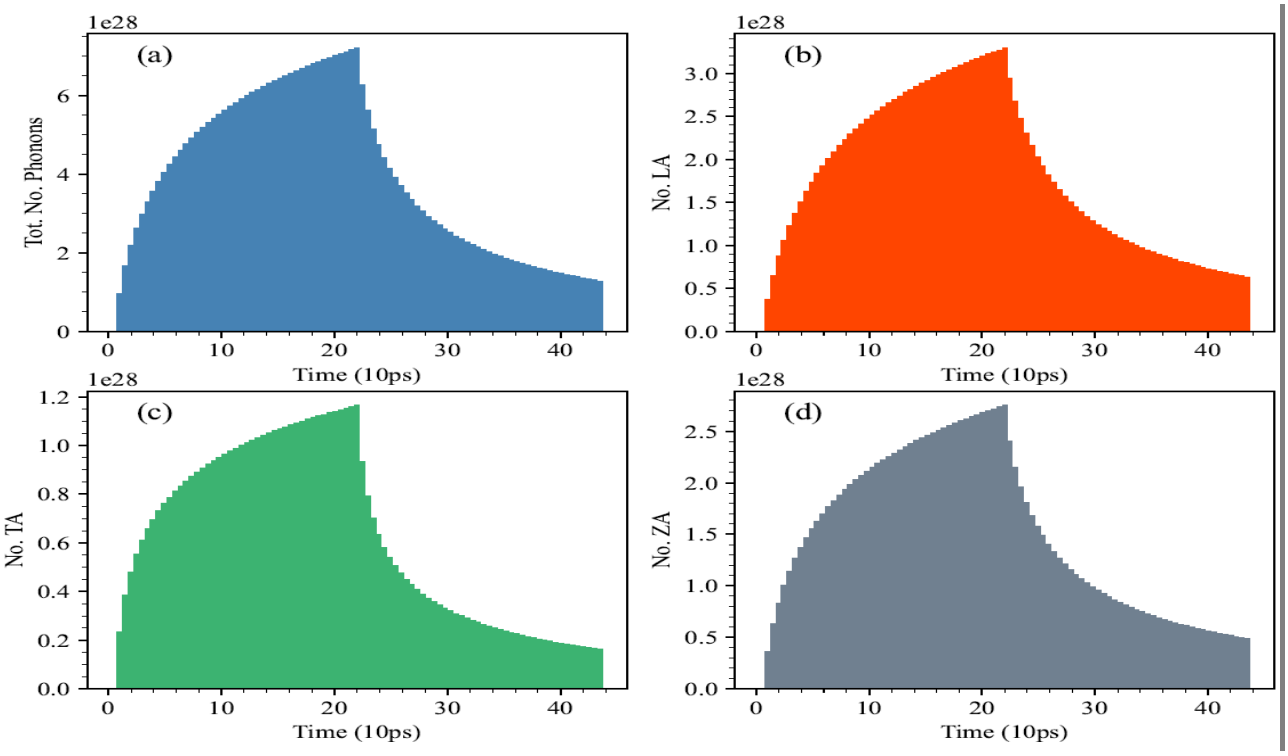
مرحله‌اول در محاسبات مونته‌کارلو، فونون‌ها توزیع و ردیابی می‌شوند. [۶]. منحنی‌های پراکندگی فونونی تک‌لایه موردنظر ما تقریباً همسانگرد هستند و می‌توانند با چند جمله‌ای درجه‌دوم زیر برازش داده‌شوند.

$$w_b = c_b k^2 + v_b k \quad (۳)$$

تک‌لایه‌ی مورد بررسی ما دارای شش شاخه آکوستیکی و اپتیکی هستند. از آن‌جا که فونون‌های آکوستیکی نقش مهم‌تری در انتقال حرارت دارند، محدوده‌فرکانس هر سه شاخه آکوستیک به ۱۰۰۰ بازه تقسیم می‌شود. سپس سرعت نسبی برای هر فرکانس محاسبه می‌شود. با در نظرگرفتن کل محدوده فرکانس، حداقل‌زمان سفر محاسبه‌شده به‌عنوان مرحله‌زمانی انتخاب می‌شود[۸].

ریزابزارها در ابتدای شبیه‌سازی به‌مدت ۲۰۰ پیکوثانیه طبق مکانیزم گرمایش‌ژول گرم می‌شوند و در ۲۰۰ پیکوثانیه بعدی، ناحیه تولید گرما خاموش می‌شود. اندکی بعد از شروع شبیه‌سازی نقاط داغ تشکیل می‌شود. تک‌لایه دمای بالایی را تجربه می‌کنند. نمودار پروفایل‌دمایی در زمان‌های مختلف استخراج شده‌است. در مدت زمان ۲۰۰ پیکوثانیه نقاط داغ فونون‌هایی با فرکانس بالا تولید می‌کنند، بنابراین فونون‌ها در نقاط داغ به دام افتاده و نمی‌توانند آن را ترک کنند. براین اساس دما در نقاط داغ به‌شدت افزایش می‌یابد.

نتایج و بحث

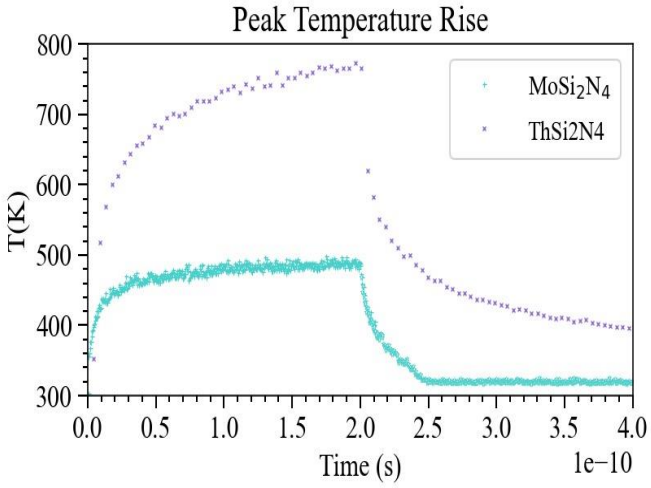


شکل۲: تعداد فونون‌های هرشاخه در واحد حجم، (a) مجموع فونون‌ها، (b) تعداد فونون‌های شاخه LA، (c) تعداد فونون‌های شاخه TA، (d) تعداد فونون‌های شاخه ZA

در شکل ۲ تعداد فونون های LA، TA و ZA و مجموع تعداد فونونهای شرکت‌کننده درانتقال‌حرارت در واحد حجم باتوجه به زمان بررسی شده‌است. همانطور که مشاهده می‌شود، بیشترین تعداد فونون در ۲۰۰ پیکوثانیه ظاهر می‌شود. سپس، به‌محض خاموش‌شدن منبع‌گرما، تعداد فونون‌های شرکت‌کننده در انتقال‌حرارت به‌وضوح کاهش می‌یابد. اکثریت فونون‌هایی که در انتقال‌حرارت شرکت می‌کنند، فونون‌های LA هستند که به‌دلیل فرکانس بسیار بالا باعث افزایش حداکثردما در ماده می‌شوند. همچنین کمترین فونون‌هایی که در انتقال‌حرارت شرکت می‌کنند، فونون‌های TA هستند. با توجه به ماهیت فونون های LA که بسیار سریع هستند و دارای سرعت گروهی بالاتر و فرکانس بالاتری هستند. به‌طورکلی حامل‌های گرما در تک‌لایه فونون‌های آکوستیک طولی هستند.

در ادامه بیشینه‌دما را برای تک‌لایه استخراج کردیم و با تک‌لایه هم‌خانواده‌اش مقایسه کردیم. با توجه به آن‌چه دیده می‌شود،

$ThSi_2N_4$ نسبت به تک‌لایه هم‌خانواده‌اش رفتار دمایی یکسان دارد، اما نبست به آن دمای بالاتری را تجربه کرده‌است. لازم‌به‌ذکر است که حداکثر دمای بالا نقطه مثبت استفاده از ماده به‌عنوان ترموالکتریک است و در عین حال آن را برای کانال ماسفت نامناسب می‌کند.



شکل۳: نمودار بیشینه دما در مقایسه با تک‌لایه مشابهش

نتیجه گیری

در این مطالعه، فونون‌های شرکت‌کننده در انتقال‌حرارت در کاندیدای استفاده کارآمد در ترموالکتریک، به‌صورت عددی در شبیه‌سازی مونته‌کارلوی غیرتعادلی معادله فونون-بولتزمن بررسی شده‌است. برای ماده مناسب ترموالکتربک، مشخصات‌دما در صفحه XY در طول زمان گرمایش و سرمایش بررسی شده‌است. اکثریت فونون‌هایی که در انتقال‌حرارت شرکت می‌کنند، فونون‌های LA هستند که به‌دلیل فرکانس بسیار بالا باعث افزایش حداکثر دما در ماده می‌شوند. تک لایه مورد مطالعه ما دمای بالاتری را نسبت به تک لایه هم خانواده‌اش را کسب می‌کند و با ایجاد گرادیان‌دمایی بالاتر باعث کارآمدی آن در کاربردهای ترموالکتریک می‌شود.

مرجع ها

[1] A. H. C. Neto, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim,and F. Guinea, The electronic properties of graphene, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).

[2] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene, Science **321**, 385 (2008).

[3] M. Liu, X. Yin, E. Ulin-Avila, B. Geng, T. Zentgraf, L. Ju, F. Wang, and X. Zhang, A graphene-based broadband optical modulator, Nature (London) **474**, 64 (2011).

[4] Y. L. Hong, Z. Liu, L. Wang, T. Zhou, W. Ma, C. Xu, S. Feng, L. Chen, M. L. Chen, D. M. Sun *et al.*, Chemical vapor deposition of layered two-dimensional $MoSi_2N_4$ materials, Science **369**, 670 (2020).

[5] A. Priydarshi, Y. S. Chauhan, S. Bhowmick, and A. Agarwal,

Large and anisotropic carrier mobility in monolayers of the

MA2Z4 series (M = Cr, Mo, W; A = Si, Ge; and Z = N, P),

Nanoscale **14**, 11988 (2022).

[6] Z. Shomali, B. Pedar, J. Ghazanfarian, A. Abbassi, Monte-Carlo parallel simulation of phonon transport for 3D silicon nano-devices, Int. J. Therm. Sci. 114, 139(2017).

[7] Cheng Lu , Chuyan Cui, Jingning Zuo, Hongxia Zhong, Shi He, Wei Dai, and Xin Zhong ,Monolayer ThSi2N4: An indirect-gap semiconductor with ultra-high carrier mobility, PHYSICAL REVIEW B **108**, 205427 (2023).

[8] S.A. Bahadori, Z. Shomali, "Thermal transport in thermoelectric materials of SnSSe and SnS2: A non-equilibrium Monte-Carlo simulation of Boltzmann transport equation" *Case Stud. Therm. Eng*, **57** , 104377(2024).

تاثیر تقارن‌های وارونی مکانی و زمانی بر روی برهم‌کنش RKKY درلایه نازک شبه فلزات وایل

دوشابچی ارثی ، سمیه[1] ؛ فیروزنیا، آرش[1]؛ محمدپور، حکیمه[1]

[1]دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز

چکیده

در این پژوهش تاثیر حضور یا عدم حضور تقارنهای وارونی زمانی و وارونی مکانی روی برهم‌کنش رودرمن-کیتل، کاسویا-یوشیدا (RKKY) بین اسپین‌های ناخالصی مغناطیسی در یک لایه بسیار نازک شبه فلز وایل مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که تقارنها نقش بسیار مهمی در قدرت برهمکنش RKKY بین مولفه‌های اسپین‌های موازی و نیز اسپین‌های عمود برهم در فواصل کوتاه برد و همینطور فواصل بلندبرد ایفا می‌کنند. به علاوه علامت این برهم‌کنش به ویژه در فواصل کوتاه برد از حضور یا عدم حضور تقارن وارونی زمانی متاثر می‌گردد.

واژه های کلیدی: شبه فلزات وایل، برهم‌کنش RKKY، تقارن وارونی زمانی ، تقارن وارونی مکانی ، ناخالصی مغناطیسی

Impact of time reversal and inversion symmetry on RKKY Interaction in a Thin Film of Weyl Semimetals

Doshabchi-Ersi, Somayeh[1]; Phirouznia, Arash[1]; Mohammadpour, Hakimeh[1]

[1] Department of Basic Science, Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz

Abstract

In this research, the effective RKKY(Ruderman-Kittel-Kasuia-Yushida) interaction between the spins of magnetic impurities in a thin film of a prototype Weyl semimetal is investigated when first the time-reversal symmetry is broken and then preserved and inversion symmetry is broken. The results demonstrate that time reversal and reversal symmetries play crucial roles in the strength of the RKKY interaction between parallel and perpendicular spin components, both at short and long ranges. Additionally, the sign of this interaction, particularly at short ranges, is influenced by the presence or absence of time-reversal symmetry.

***Keywords**: Weyl semimetals, RKKY interaction, Time reversal symmetry, Inversion symmetry, magnetic impurity*

مقدمه

ایده اسپینترونیک به‌کارگیری درجه آزادی اسپین الکترون به همراه گشتاور مغناطیسی ذاتی آن است[۲،۱]. انتظار می‌رود که این حیطه نقش بسیار مهمی در تکنولوژیهای آینده از جمله ابزارهای ذخیره اطلاعات با سرعت بالا و مصرف انرژی پایین داشته باشد[۳]. شبه فلزات وایل رده جالب توجهی از شبه فلزات توپولوژیک هستند که زمینه مهمی برای ظهور فرمیونهای وایل نسبیتی در حجم را بوجود می‌آورند بطوری که حالتهای سطحی قوس فرمی، دو نقطه وایل با کایرالیتی (دستوارگی) مخالف را روی مرز نمونه حجمی بهم متصل می‌کنند[۱]. این ذرات نوظهور نتیجه شکست تقارن وارونی[۵،٤] یا شکست تقارن وارونی زمان[۲،۱] هستند. شبه فلزات وایل با شکست تقارن وارونی زمان معمولا از مواد مغناطیسی بدست می‌آیند[۲،۱]، در مقایسه با شبه فلزات وایل با شکست تقارن وارونی، زمینه ای را برای مطالعه ارتباط مغناطش با همبستگی الکترون و نظمهای توپولوژیکی مهیا می‌کنند. در شبه فلزات وایل مغناطیسی، انحنای بری نامیرا که محصول شکست تقارن وارونی زمانی است؛ منجر به پدیده های نوینی مثل اثر هال غیر عادی و اثر هال اسپینی و بار غیر عادی کایرال شود. این ویژگی‌های خاص و شگفت انگیز، شبه فلزات وایل مغناطیسی را برای گستره وسیعی از کاربردهای اسپینترونیکی متمایز و بالقوه نموده است[٦].

برهمکنش تبادلی اسپین–اسپین، به عنوان یک عنصر اساسی در اسپینترونیک برای پیشرفتهای تکنولوژیکی در این زمینه بسیار ضروری است. در میان برهم کنشهای اسپین–اسپین، برهم کنش رودرمن–کیتل،کاسویا–یوشیدا(RKKY) یک معرف و شناسه مهم برای نظمهای فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیسی به شمار می‌رود[۷]. در سال ۱۹٥٤ رودرمن و کیتل برای اولین بار برهم‌کنش میان گشتاورهای مغناطیسی هسته با ناخالصیها در فلزات را توضیح دادند. برهم‌کنش به واسطه الکترون‌های رسانش انجام می‌شد و ویژگی بلندبرد داشت. آنها دریافتند که تصحیح درجه دوم انرژی گاز الکترون آزاد به سبب حضور دو هسته، متناسب با حاصلضرب دو عملگر اسپینی است و تابع بر به فاصله بین اسپین‌ها بستگی دارد. مدتی پس از آن کاسویا و یوشیدا دریافتند که دقیقا همان برهمکنش میان ناخالصیهای یک اتم مغناطیسی در فلزات به سبب هیبرید شدن اربیتالهای s-d و s-f ظهور پیدا می‌کند[۸].

توجه ویژه ای به سمت برهمکنش RKKY بر روی سطح شبه فلزات وایل شده است[۹]. حالتهای سطحی، در انرژی فرمی یک شبه فلز وایل با هندسه یک لایه نوعا در بردارهای موج که قوس‌هایی را در سطح منطقه بریلوئن تشکیل می‌دهند؛ قرار می‌گیرند. این قوسها یک گره وایل را به دیگری متصل می‌کند و در حالت عمود بر یک گره، توزیعی پرانرژی دارند که علامت توزیع یا پخش شدگی آنها برای هر یک از دو سطح فیزیکی مخالف یکدیگر است. اثرات جفت شدگی بین اسپین‌ها روی سطوح مختلف شبه فلز وایل، فیزیک جالب توجهی را بوجود می‌آورد. آثار چنین جفت شدگی بین سطحها به وسیله آنالیز هندسه لایه شبه فلز وایل با ضخامت مشخص در مقاله[۱۰] مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است. بخصوص، برهم‌کنش‌های اسپین–اسپین بر اساس مکانیزم RKKY برای دو موقعیت مختلف آزموده شده است. اول زمانی که هر دو اسپین در یک سطح شبه فلز وایل قرار گرفته‌اند، الکترونهای سطح مخالف میتوانند در جفت شدگی آنها شرکت داشته باشند. برهمکنش RKKY بوجود آمده، ناهمسانگردی سطح فرمی را بازتاب می‌کند و در حد ورقه ضخیم، میتوان نتایج حاصل را با نتایج پژوهش‌های قبل مقایسه کرد که در آنها فقط یک سطح مدل سازی شده بود[۹]. دوم زمانی که ناخالصیهای اسپین روی سطوح مخالف لایه هستند، جفت شدگی بوجود آمده قویا به همپوشانی حالتهای قوس فرمی بستگی دارد.

در پژوهش حاضر لایه نازکی از یک شبه فلز وایل در نظر گرفته شده است و برهم‌کنش RKKY بین ناخالصیهای مغناطیسی سطح شبه فلز وایل والکترونهای رسانش آن در نود وایل هنگام شکست تقارن

وارونی زمان و نیز حضور این تقارن و شکست تقارن وارونی مکانی مورد بررسی و مطالعه عددی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که قدرت برهم‌کنش بین مولفه‌های موازی و نیز عمود برهم اسپینی در فواصل کوتاه برد و بلندبرد به شدت تحت تاثیر حضور یا عدم حضور تقارنهای وارونی است.

توصیف سیستم و روش‌های محاسباتی

به طور کلی جفت گره‌های وایل با کایرالیتی مخالف توسط هامیلتونی زیر توصیف می‌شود:

$$H_0 = \chi[v_f \sigma.(k-\chi Q)+\sigma_0 Q_0] \qquad (۱)$$

در این رابطه، k بردار موج، v_f سرعت فرمی و نیز $\chi = \pm 1$ کایرالیتی گره‌های وایل می‌باشد. اگر $(Q,Q_0)=0$ در این‌صورت دو گره وایل با همدیگر همپوشانی کرده و H_0 یک شبه فلز دیراک را توصیف می‌کند. برای یک شبه فلز وایل بدون تقارن مرکزی که دارای تقارن وارونی زمان است؛ Q باید صفر و Q_0 می‌تواند غیر صفر باشد و در نتیجه دو گره وایل در یک نقطه k قرار می‌گیرند ولی می‌توانند انرژی‌های مختلفی داشته باشند. برای یک چگالی حامل مشخص، دو بردار موج فرمی نابرابر وجود دارد. به عبارتی دیگر برای شبه فلزات وایل با شکست تقارن وارونی زمان و با حفظ تقارن وارونی، $Q_0 = 0$ و $Q \neq 0$ است. در این صورت دو حالت وایل در دو نقطه متفاوت k برابر با $\pm Q$ در منطقه بریلوئن قرار می‌گیرند. در اینجا ماتریس‌های پائولی $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ به درجات آزادی اسپین الکترون‌ها در فضای واقعی اشاره دارند[۱۱].

مطابق برهم‌کنش RKKY دو ناخالصی مغناطیسی با اسپین‌های S_1 و S_2 که به صورت دو گشتاور مغناطیسی کلاسیکی در نظر گرفته می‌شوند و به فاصله r_{12} از هم قرار گرفته‌اند با اسپین الکترون‌های رسانش برحسب هامیلتونی $H_{sd} = JS_i.s(r_i),(i=1,2)$ جفت می‌شوند که در آن $s(r_i)$ اسپین الکترون رسانش در محل اسپین ناخالصی i است. نتیجه برهم‌کنش با اسپین ناخالصی بصورت زیر در می‌آید:

$$H_{RKKy} = \frac{-1}{\pi}\int_{-\infty}^{\varepsilon_f} d\varepsilon Tr[(S_1.s)G(r_{12};\varepsilon+i0^+)(S_2.s)\times G(-r_{12};\varepsilon+i0^+)] \qquad (۲)$$

$$\equiv \sum_{i,j=x,y,z} J_{ij} S_{1i} S_{2j} \qquad (۳)$$

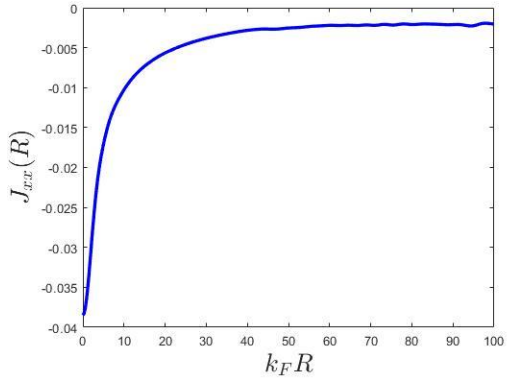
در اینجا $G(r_{12};\varepsilon+i0^+)$ تابع گرین در فضای واقعی برای سیستم الکترونی غیر اختلالی و J_{ij} ماتریس همبستگی الکترونی اسپین-اسپین است[۱۰].

الگوهای رفتاری قدرت برهم‌کنش بین مولفه های موازی اسپین، J_{xx} و همینطور قدرت برهم‌کنش بین مولفه های عمود برهم آن، J_{xy} به صورت عددی مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است و نتایج نشان می‌دهد که عدم حضور تقارن زمانی و همینطور شکست تقارن وارونی مکانی این دو مولفه را به شدت تحت تاثیر قرار می-دهد.

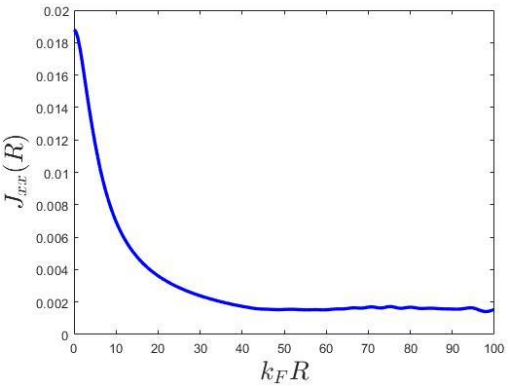
نمودارها و تحلیل نتایج

با توجه به شکلهای بدست آمده که از محاسبات مربوط به این مقاله و شخصی می‌باشد، قدرت برهم‌کنش بین مولفه‌های موازی اسپین J_{xx} و الگوی رفتاری آن شدیدا به حضور و یا عدم حضور تقارن وارونی مکانی که شاخص آن Q_{xy} است؛ وابسته می‌باشد. به این معنی که در عدم حضور تقارن وارونی مکانی $Q_{xy}=0$ قدرت برهمکنش J_{xx} در فواصل کوتاه برد بسیار قویتر از فواصل بلندبرد بوده به قسمی که نوسانات بلندبرد آنها در مقایسه با فواصل کوتاه چشم‌گیر نمی‌باشند. در همین حال علامت برهمکنش در فواصل

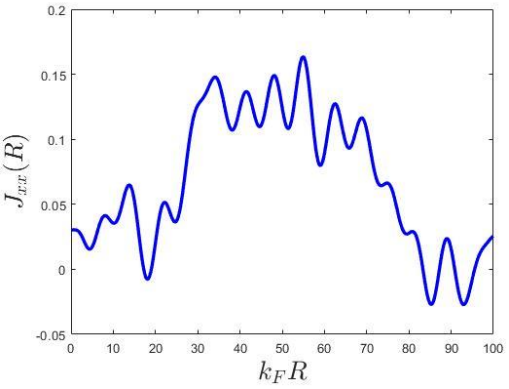
کوتاه به مقدار Q_0 که شاخص حضور یا عدم حضور تقارن وارونی زمانی است؛ وابسته است (شکل۲).



شکل۱: قدرت برهمکنش مولفه های موازی اسپین، J_{xx} با حضور تقارن وارونی زمان و شکست تقارن وارونی ($Q_{xy}=0, Q_0=0.5k_F$)



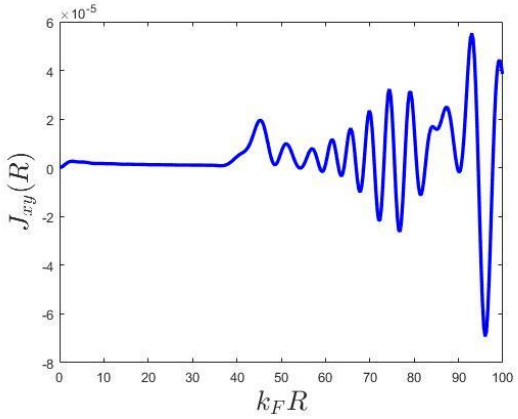
شکل۲: قدرت برهمکنش مولفه های موازی اسپین، J_{xx} با حضور تقارن وارونی و شکست تقارن وارونی زمان ($Q_{xy}=0.1k_F, Q_0=0$)



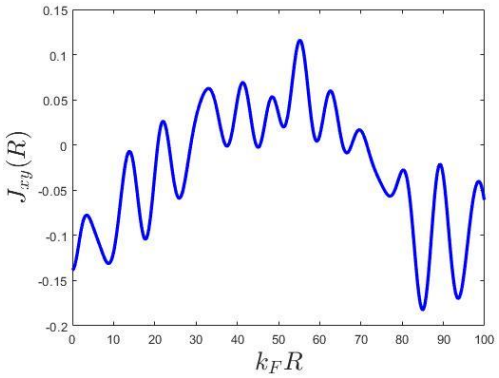
شکل۳: قدرت برهمکنش مولفه های موازی اسپین، J_{xx} با حضور تقارن وارونی و شکست تقارن وارونی زمان ($Q_{xy}=0.5k_F, Q_0=0$)

با افزایش Q_{xy} به $Q_{xy}=0.5k_F$ در حالت حضور تقارن وارونی و شکست تقارن وارونی زمانی ($Q_0=0$) قدرت برهم‌کنش J_{xx} کوتاه برد تقلیل یافته و الگوهای نوسانی بسیار واضح خواهند بود و در کل بازه فضای واقعی قدرت این برهم‌کنش نسبت به حالت قبلی افزایش چشم‌گیری خواهد داشت(شکل۳).

قدرت برهم‌کنش بین مولفه‌های عمود برهم J_{xy} در حالت حضور تقارن وارونی زمانی($Q_0\neq 0$) و عدم حضور تقارن وارونی مکانی($Q_{xy}=0$) الگوی رفتاری بسیار متمایزی نشان می‌دهد. به این شکل که بر خلاف برهم‌کنش مولفه‌های موازی در این حالت در فواصل کوتاه برد برهم‌کنش بسیار ضعیف و در فواصل بلندبرد برهم‌کنش دارای مقدار قابل مشاهده و نوسان خواهد بود که این رفتار کاملا در تضاد با رفتار برهم‌کنش بین مولفه‌های موازی است. با تغییر تقارن به حالتی که در آن تقارن وارونی برقرار($Q_0=0$) و تقارن وارونی زمانی از بین می‌رود($Q_{xy}\neq 0$) نوسانات از فواصل کوتاه برد تا بلند برد وجود خواهد داشت و مقدار برهم‌کنش چندین مرتبه در کل بازه مکانی افزایش خواهد داشت.



شکل٤: قدرت برهم‌کنش مولفه‌های عمودی، J_{xy} زمانی که $Q_{xy}=0$ و $Q_0=0.5k_F$ است.



شکل٥: قدرت برهم‌کنش مولفه‌های عمودی، J_{xy} زمانی که $Q_{xy}=0.5k_F$ و $Q_0=0$ است.

مرجع‌ها

[۱] X. G. Wan et al., Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates. *Phys. Rev. B* 83, 205101 (2011).

[۲] G. Xu et al., Chern Semimetal and the Quantized Anomalous Hall Effect in HgCr2Se4. *Phys. Rev. Lett.* 107, 186806 (2011).

[۳] Z. J. Wang et al., Dirac semimetal and topological phase transitions in A3Bi (A = Na, K, Rb). *Phys. Rev. B* 85, 195320 (2012).

[٤] H. M. Weng et al., Weyl Semimetal Phase in Noncentrosymmetric Transition-Metal Monophosphides. *Phys. Rev. X* 5, 011029 (2015).

[٥] S. M. Huang et al., A Weyl Fermion semimetal with surface Fermi arcs in the transition metal monopnictide TaAs class. *Nat. Commun.* 6, 7373 (2015).

[٦] S. Jia et al., Weyl semimetals, Fermi arcs and chiral anomalies. *Nat. Mater.* 15, 1140 (2016).

[۷] T. Kasuya, Prog. A Theory of Metallic Ferro- and Antiferromagnetism on Zener's Mode. *Theor. Phys.* 16, 45 (1956).

[۸] M. A. Ruderman, C. Kittel, Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons, *Phys. Rev.* 96, 99 (1954).

[۹] V. Kaladzhyan, et al., RKKY interaction on the surface of three-dimensional Dirac semimetals *Phys.Rev. B.* 99, 165302 (2019).

[۱۰] S.Verma, et al., RKKY coupling in Weyl semimetal thin films, *Phys. Rev. B.* 101,085419 (2020).

[۱۱] H.R.Chang, et al., RKKY interaction of magnetic impurities in Dirac and Weyl semimetals, *Phys. Rev. B.* 92, 241103 (2015).

بررسی نظریه تابعی چگالی کمپلکس نانولوله بورون نیترید به منظور استفاده در درمان سرطان

مشحون ، سارا[1] ؛ توحدی، علی[1]

[1]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی خواجه نصیر الدین طوسی ، خیابان کاویان شرقی، خ مجتبایی، خ شریعتی، تهران

چکیده

افزایش آمار مرگ و میر ناشی از سرطان نشان‌دهنده نیاز به درمان‌های دقیق‌تر و کارآمدتر است. نانوساختارها به عنوان انتخابهای نویدبخش در این زمینه شناخته شده‌اند. نانو لوله‌ها با مساحت سطح بزرگ می‌توانند نقش‌های متعددی از جمله بعنوان حامل دارو در دارورسانی هدفمند، ژن‌درمانی و غیره در روش‌های مختلف درمان سرطان از جمله فوتوترمال و هایپرترمیا ایفا کنند. در حالی که نانو لوله‌های کربنی (CNTs) سمی هستند، نانو لوله‌های بورون نیتریدی (BNNTs) دارای گاف انرژی پهن و زیست‌سازگاری هستند. در این تحقیق، خواص الکترونیکی و انحلال پذیری نانو لوله‌های بورون نیتریدی با کایرالیته‌های (۵,۵)، (۶,۶) و (۷,۷) به‌صورت محاسباتی با استفاده از نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. برای درمان چندوجهی، از آلایش BNNT با آهن (Fe) استفاده شده که به دلیل گشتاور مغناطیسی آهن می‌تواند در روش هایپرترمیا مفید باشد. نتایج این بررسی نشان می‌دهد که پس از آلایش، موقعیت‌های نواری بهبود یافته‌اند. علاوه بر این، یک مولکول آلی ضدسرطان به نام جنیستین، که یک مهارکننده متاستاز است، را به کار گرفتیم. تمامی پیکربندی‌های مؤثر که جنیستین را به صورت کوالانسی با BNNT پیوند می‌دهند، نسبت به BNNTهای خالص و آلاییده شده با آهن، انحلال پذیری بیشتری را در آب نشان دادند. نتایج نشان می‌دهد که کمپلکس (۷,۷) C3 پایدارترین ساختار و بهترین حامل دارو است.

واژه های کلیدی: نانولوله‌های بورون نیترید، دارورسانی، آلایش، نظریه تابعی چگالی

Investigation of Boron Nitride Nanotube Complexes for Cancer Treatment Using DFT Analysis

Mashhoun, Sara[1]; Tavahodi, Ali[2]

[1] Department of Physics, K.N. Toosi University of Technology, 15875-4416, Tehran, Iran

Abstract

The rising mortality rate from cancer highlights the urgent need for more precise and effective treatments. Nanostructures have emerged as promising solutions in this area. Nanotubes, with their large surface areas, can serve multiple roles, such as drug carriers in targeted drug delivery and gene therapy, among various cancer treatment methods, including photothermal therapy and hyperthermia. While carbon nanotubes (CNTs) are known to be toxic, boron nitride nanotubes (BNNTs) possess a wide energy gap and are biocompatible. In this study, we investigated the electronic properties and solubility of boron nitride nanotubes with chiralities (5,5), (6,6), and (7,7) using computational methods based on density functional theory. For multimodal therapy, we explored the effects of doping BNNTs with iron (Fe), which can enhance hyperthermia due to iron's magnetic moment. Our results indicate that doping improves the band positions of the nanotubes. Additionally, we utilized an anticancer organic molecule called genistein, known for its role as a metastasis inhibitor. All effective configurations that covalently bind genistein

to BNNTs demonstrated higher water solubility compared to pure and iron-doped BNNTs. The findings suggest that the (7,7) C3 complex is the most stable structure and represents the best drug carrier for this application.

***Keywords**: boron nitride nanotubes, drug delivery, doping, density functional theory*

مقدمه

امروزه میلیون‌ها نفر در سراسر جهان به دلیل ناکارآمد بودن داروها و روش‌های سنتی درمان سرطان، جان خود را از دست می‌دهند. همواره بین تجمع دارو در سلول هدف و دستیابی به توزیع، حلالیت و انتخاب‌پذیری مطلوب، چالش‌هایی وجود داشته است. در روش هدف‌گیری غیرفعال سلول‌های سرطانی، احتمال تجمع حامل‌های دارویی در محل هدف وجود دارد، اما اثربخشی آن تضمین شده نیست. پیشرفت‌های اخیر در قابلیت‌های تحویل دارو با استفاده از نسل‌های جدید داروها این مشکلات را به طور قابل توجهی حل کرده است. توسعه داروهای مبتنی بر نانوحامل‌ها روش‌های درمانی کارآمدتری را فراهم کرده است چرا که خواص نانوساختارها می‌تواند مهندسی و با دقت تنظیم شوند به نحوی که انتخاب‌پذیری بهتر و سمیت کمتر در پی داشته باشند. [۱][1]] نانو لوله‌ها به عنوان گزینه‌های ایده‌آل برای افزایش اثرات درمانی داروها شناخته می‌شوند. جنیستین، یکی از ایزوفلاون‌های طبیعی سویا، به دلیل خواص ضد توموری خود توجه زیادی را جلب کرده است. این ترکیب با غلظت‌های پایین و بالا در مدل‌های پیش‌بالینی مختلف، فعالیت‌های دارویی متنوعی را نشان می‌دهد. مطالعات پیشین نشان داده‌اند که مصرف جنیستین در غلظت‌های پایین می‌تواند مهاجرت و تهاجم سلول‌های سرطانی را مهار کند. خواص ضدسرطانی گسترده جنیستین شامل مهار پروتئین‌های مرتبط با تومورزایی و آپوپتوز است[2,3]. نانو لوله‌های بورون نیتریدی (BNNT) در سال ۱۹۹٤ پیش‌بینی و در سال ۱۹۹۵ سنتز شدند. این نانو لوله‌ها دارای ویژگی‌هایی مانند استحکام مکانیکی، پایداری شیمیایی و حرارتی، عایق الکتریکی و زیست سازگاری هستند که آن‌ها را برای کاربردهای مختلف از جمله داروسازی مناسب می‌سازد. BNNTها به دلیل ویژگی‌های برتر خود نسبت به نانو لوله‌های کربنی گزینه بهتری برای کاربردهای مختلف محسوب می‌شوند. این مطالعه نشان می‌دهد که دوپینگ نانو لوله‌های بورون نیتریدی با اتم آهن (Fe) خواص مغناطیسی ایجاد می‌کند و این سیستم می‌تواند به عنوان یک داروی کارآمد در رویکرد چند درمانی مورد استفاده قرار گیرد. دوپینگ آهن در محل اتم B باعث افزایش واکنش‌پذیری شیمیایی نسبت به BNNTهای خالص می‌شود و همچنین ساختار پایدارتر و قوی‌تری ایجاد می‌کند.

روش‌های محاسباتی

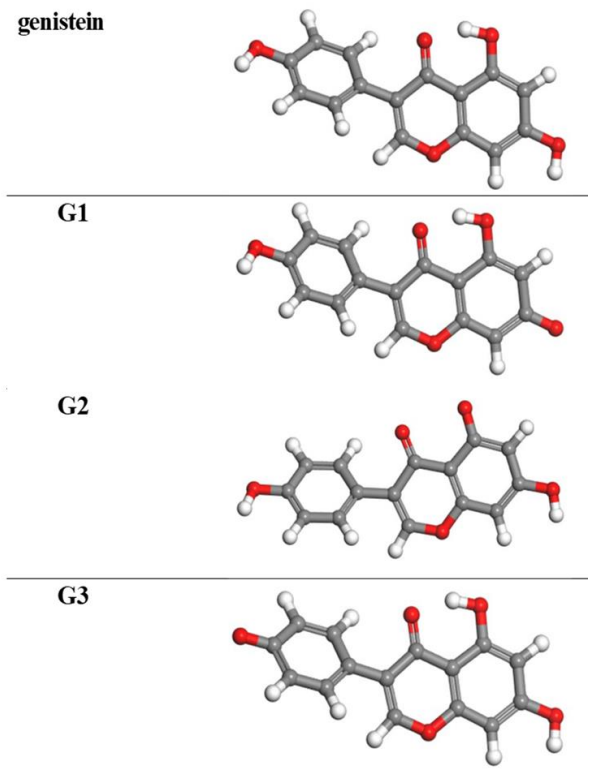
در این مطالعه از محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT) با استفاده از ماژول Dmol3 در نرم‌افزار Materials Studio استفاده شده است. هدف این تحقیق بررسی نانو لوله‌های بورون نیتریدی (BNNT) تک‌جداره با سه شاخص کایرالیته (۵,۵)، (٦,٦) و (۷,۷) است که یک اتم آهن در محل B آن‌ها آلاییده شده‌اند. این نانو لوله‌ها به ترتیب شامل ۸۰، ۹٦ و ۱۱۲ اتم و قطرهای حدود

٦/۸۸، ۸/۲۵ و ۹/٦۳ Å می‌باشند. طول این نانو لوله‌ها تقریباً ۷/٤۸ Å و طول پیوند B-N میانگین آن‌ها ۱/٤٤Å است. دو سر نانو لوله‌ها با اتم‌های هیدروژن اشباع شدند تا از بروز پیوندهای دیگر جلوگیری شود .برای تخمین تابع همبستگی-تعویض از تقریب گرادیان عمومی (GGA) استفاده شد. همچنین، DFT بدون محدودیت با پراکندگی (DFT-D) برای دقت بیشتر به کار رفت. مجموعه پایه دو عددی قطبی‌شده (DNP) برای محاسبات استفاده شد که یکی از بهترین پایه‌ها به شمار می‌رود. [4] اطلاعات الکترونیکی و خواص

شیمیایی این ترکیب با محاسبه انرژی بالاترین تراز اشغال شده (E_{HOMO}) و انرژی پایین ترین تراز اشغال نشده (E_{LUMO}) و سپس به دست آوردن پتانسیل الکتروشیمیایی (μ)، سختی کلی(η) و شاخص الکترون‌دوستی(ω) بر مبنای مقادیر E_{HOMO} و E_{LUMO} بررسی شد. مطالعه پایداری کمپلکس Gen/FeBNNT در فاز محلول از طریق محاسبات انرژی حلالیت انجام شد. کمپلکس پیشنهادی Gen/FeBNNT با اتصال یک مولکول فعال جنیستین به اتم آهن دوپ شده در ساختار BNNTs از طریق یک پیوند کوالانسی تشکیل می‌شود. در نهایت، انرژی جذب ساختار بهینه‌شده کمپلکس بررسی شد که شامل انرژی‌های مختلف مربوط به ترکیب Gen/FeBNNT است.

نتایج و بحث

به منظور بررسی دقیق تر برهم کنش جنیستین با نانولوله، سه پیکربندی مختلف از مولکول فعال جنیستین مطابق شکل ۱ در نظر گرفته شد. منظور از مولکول فعال جنیستین مولکولی است که یک اتم هیدروژن از گروه هیدروکسیل خود را از دست داده است. سه پیکربندی را با نام‌های G1، G2 و G3 نامگذاری شدند. بسته به اینکه کدام پیکربندی از جنیستین فعال با اتم آهن دوپ شده در نانولوله پیوند کوالانسی برقرار کند، کمپلکس تشکیل شده با C1، C2 و C3 نشان داده شدند.



شکل ۱ – پیکربندی های مختلف مولکول جنیستین

از مهم‌ترین شاخصه‌های مورد بررسی برای کمپلکس نانولوله و جنیستین، گاف انرژی، انرژی جذب و انرژی حلالیت هستند که طبق رابطه های (۱) تا (۳) به دست می‌آیند.

$$E_g = E_{LUMO} - E_{HOMO} \quad (۱)$$

$$E_{ads} = E_{Gen/FeBNNT} - (E_{FeBNNT} + E_{Gen}) \quad (۲)$$

$$E_{solvation} = E_{aqueous} - E_{gas} \quad (۳)$$

بر اساس محاسبات انجام شده، با دوپ شدن اتم آهن در نانولوله کاهش قابل ملاحظه انرژی گاف را شاهد هستیم. سختی کلی(η) کمپلکس نیز از روند مشابه پیروی می‌کند. همچنین، انرژی جذب در تمام کمپلکس‌ها منفی باقی می‌ماند که نشان‌دهنده قابلیت حسگری نانولوله‌ها نسبت به مولکول‌های Gen است. در فاز گازی، برهم‌کنش مشخصی بین Gen و BNNT مستقل از عوامل بیرونی مشاهده می‌شود، در حالی که در فاز آبی، حلال تأثیر قابل توجهی

بر برهمکنش انرژی دارد. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که پیکربندی C2 بیشترین فعالیت شیمیایی و کمترین پایداری شیمیایی را دارند. به طور کلی، کمپلکس C3 Gen-FeBNNT (7,7) بالاترین پایداری و یکی از بهترین حلالیت‌ها در آب را دارد و به عنوان بهترین گزینه برای استفاده در سیستم‌های بیولوژیکی در نظر گرفته می‌شود.

برای درک تأثیرات جذب مولکول جنیستین (Gen) بر خواص الکترونیکی نانو لوله‌های مورد مطالعه، ما چگالی حالت‌ها (DOS) را محاسبه کردیم. نتایج بدست آمده مرتبط با DOS نانو لوله‌های بورون نیتریدی خالص، نانو لوله‌های بورون نیتریدی آهن‌دار و کمپلکس‌های C1–C3 قابل ارائه است. نانو لوله‌های BNNT نیمه‌رسانا با شکاف باندی حدود ۵ eV. دوپینگ اتم آهن در این ساختارها به طور قابل توجهی گاف انرژی را به حدود ۱/۹ eV کاهش و پهنای نوار ظرفیت را افزایش می‌دهد و قله‌ای در بالای این باند اضافه می‌کند. بالاترین قله در نوار ظرفیت در همه پیکربندی‌ها به جز کایرالیته (۵,۵) تقریباً ۰/۷ eV– است. پس از برهمکنش مولکول Gen ، این قله به حدود ۰/۷ eV افزایش می‌یابد. پیوند کووالانسی بین مولکول Gen و اتم آهن در ساختارهای BNNT منجر به کاهش اندک گاف انرژی نسبت به ساختارهای دوپ شده می‌شود. در نتیجه، نانو لوله‌های BNNT دوپ شده با آهن که با مولکول Gen عاملدار شده‌اند، در بازه ۴ eV–۰ رسانایی الکتریکی بالاتری را ارائه می‌دهند که رفتار نیمه‌رسانایی آن‌ها را کاهش و خواص الکترونیکی آن‌ها را بهبود می‌بخشد.

نتیجه گیری

در این مطالعه، یک ترکیب نوین شامل نانو لوله‌های بورون نیتریدی و یک بیومولکول برای درمان سرطان از طریق روش‌های متعدد پیشنهاد داده‌ایم. از محاسبات DFT برای بررسی نانو لوله‌های بورون نیتریدی با ساختار آرم‌چیر و شاخص‌های کایرالیته (۵,۵)، (۶,۶) و (۷,۷) استفاده کردیم. این نانو لوله‌ها به عنوان حامل‌های مولکول ضدسرطانی، جنیستین، عمل می‌کنند. همچنین تأثیر دوپینگ اتم آهن (Fe) در نانو لوله‌ها را بررسی کردیم که خواص الکترونیکی و مغناطیسی آن‌ها را بهبود بخشید و پیوند با مولکول جنیستین را تسهیل کرد. سه پیکربندی مختلف از پیوند کوالانسی بین اکسیژن فعال در جنیستین و اتم دوپ شده آهن را بررسی کردیم. یافته‌های ما نشان داد که جذب جنیستین بر روی سطح نانو لوله منجر به کاهش گاف انرژی می‌شود که به افزایش طول موج تابش تحت تاثیر برانگیختگی در ناحیه مادون قرمز منجر می‌گردد. همچنین، افزودن آهن باعث ایجاد گشتاور مغناطیسی در ساختار می‌شود که می‌تواند نیاز به میدان مغناطیسی در درمان هایپرترمی را کاهش دهد و هدف‌گیری سلولی دقیق‌تری را ممکن سازد. نتایج بدست آمده نشان داده‌است که پیکربندی‌های C3 (۷,۷) و C3 (۶,۶) بیشترین پایداری و کمترین واکنش‌پذیری شیمیایی را در هر دو فاز داشتند. تمامی واکنش‌ها به صورت گرمازا و پایدار بودند و انرژی جذب بالایی برای کمپلکس‌های ذکر شده مشاهده شد. کمپلکس‌های جنیستئین–نانو لوله (۷,۷) بیشترین حل‌شوندگی را داشتند و رفتار آبدوستی آن‌ها بهبود یافته‌است.

مرجع‌ها

[1] P. Kumari, B. Ghosh, S. Biswas, Nanocarriers for cancer-targeted drug delivery, *J. Drug Target*. **24** (2016) 179–191.

[2] L. Xu, J. Liu, K. Li, S. Wang, S. Xu, Genistein inhibits Ang II-induced CRP and MMP-9 generations via the ER-p38/ERK1/2-PPARγ-NF-κB signaling pathway in rat vascular smooth muscle cells, *Life Sci.* **216** (2019) 140–146. doi:https://doi.org/10.1016/j.lfs.2018.11.036.

[3] J.M. Pavese, R.L. Farmer, R.C. Bergan, Inhibition of cancer cell invasion and metastasis by genistein, *Cancer Metastasis Rev.* **29** (2010) 465–482. doi:10.1007/s10555-010-9238-z.

[4] A. Klamt, G. Schüürmann, COSMO: a new approach to dielectric screening in solvents with explicit expressions for the screening energy and its gradient, *J. Chem. Soc. Perkin Trans.* **2**. (1993) 799–805.

بررسی پایداری حرارتی نانوساختار(PhhGraphene) با استفاده از رویکرد دینامیک مولکولی

مدنی ، سیده ملیحه[1]؛ داوودی، جمال[1]

[1] *گروه فیزیک، دانشگاه زنجان،زنجان*

چکیده

هدف از انجام این پروژه، بررسی پایداری حرارتی نانوساختار دوبعدی PhhGraphene با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و بسته‌ی محاسباتی لمپس می‌باشد. برای محاسبه انرژی برهمکنشی و نیروی وارد بر اتم‌های کربن از تابع پتانسیل AIREBO استفاده و شرایط مرزی دوره ای نیز در هر سه راستا اعمال شد. برای به تعادل رساندن سیستم از هنگرد NPT در شرایط ایده‌آل استفاده شد. بعد از به تعادل رسیدن سیستم دمای آن به تدریج افزایش داده شد و با بررسی منحنی تغییرات انرژی پتانسیل و شاخص میانگین مربع جابجایی برحسب تابعی از دما گذار فاز مورد مطالعه قرار گرفت. ملاحظه شد که ساختار در دمای ۳۸۲۸ کلوین دچار تغییر شکل و در دمای ۴۵۸۳ کلوین شروع به ذوب می کند.

واژه های کلیدی: *نانوساختار PhhGraphene، تعادل، ذوب، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی.*

Investigation of thermal stability of PhhGraphene nanostructured by using molecular dynamics approach

Madani, Seyedeh Malihe[1]; Davoodi, jamal[1]

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

Abstract

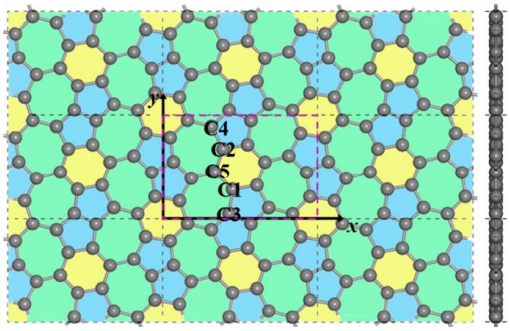
The purpose of this project is to investigate the thermal stability of the two-dimensional PhhGraphene nanostructure using molecular dynamics simulations and the LAMMPS computational package. The AIREBO potential function was utilized to calculate the interaction energy and forces acting on carbon atoms, with periodic boundary conditions applied in all three dimensions. To equilibrate the system, the NPT ensemble under ideal conditions was employed. Once the system reached equilibrium, its temperature was gradually increased, and by analyzing the curves of potential energy, enthalpy, and the mean square displacement index as functions of temperature, the phase transition was examined. It was noted that the structure deforms at 3828 Kelvin and begins to melt at 4583 Kelvin.

Keywords*: PhhGraphene nanostructure, the equilibrium, melting, molecular dynamics simulation*

مقدمه

از زمان کشف گرافن در سال ۲۰۰۴ چندین مطالعه نوری، مکانیکی، الکترونیکی وترمودینامیکی بر روی این ماده انجام شده است که ویژگی های منحصر به فرد آن را نشان می‌دهد و علت آن بیشتر مربوط به آرایش لانه زنبوری دو بعدی با ضخامت یک اتم است [1]. اخیراً محققان تمرکز خود را به سمت پیش‌بینی و بررسی مواد دو بعدی مبتنی بر کربن تغییر داده‌اند [2]. مواد دو بعدی مبتنی بر کربن از جمله سای-گرافن [2]، استون والز-گرافن [3]، تتا-گرافن [4]، ایکس-گرافن [5] و... هم به صورت تجربی و هم به صورت تئوری پیشنهاد شده‌اند. آلوتروپ جدید مبتنی برکربن PhhGraphene که از حلقه‌های کربنی ۵و۶و۷ تشکیل یافته با الهام از سنتز تجربی TPH-Graphene پیشنهاد شده است. این ساختار مشابه گرافن از یک صفحه مسطح با ضخامت یک اتم تشکیل شده است. شکل ۱ آرایش اتمی PhhGraphene را از نمای بالا و کنار نشان می‌دهد.

هر سلول واحد آن شامل ۲۰ اتم کربن است که تقارن D_{2d}^{9} (گروه فضایی ۵۵) را نشان می‌دهد. ثابت های شبکه آن بهینه شده و دارای ۵ اتم کربن غیر معادل است که در شکل ۱ با عنوان C_1-C_5 نشان داده شده است. طول پیوند بین C_1-C_5، C_2-C_5، C_1-C_3، C_3-C_4 تقریباً ۱/۴۲ آنگستروم است که شبیه پیوند کربن-کربن گرافن است. طول پیوند C_2-C_4 کمی بیشتر و حدود ۱/۴۷ آنگستروم می‌باشد که آن هم به دلیل ویژگی‌های پیوند تک‌گانه آن است. زوایای پیوند از ۱۰۵/۸ الی ۱۳۳/۸ درجه متغییر است. چگالی PhhGraphene بیشتر از گرافن می‌باشد. نتایج به‌دست آمده نشان می‌دهد که صفحه PhhGraphene دارای ثبات ترمودینامیکی بهتری در مقایسه با سایر آلوتروپ های گرافین است[6].



شکل ۱ :آرایش اتمی ام-گرافن را از بالا و کنار

یکی از پدیده‌های مهم در علوم نانو فرآیند گذار فاز است که مطالعه این پدیده در مقیاس نانو با توجه به محدودیت-های تجهیزات آزمایشگاهی بسیار مشکل است. روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یکی از تکنیک‌هایی است که میتوان خواص گرمایی مواد را با استفاده از آن محاسبه کرد [7]. از این رو در این تحقیق با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به مطالعه دقیق فرآیند تعادل و ذوب نانوساختار دوبعدی جدید PhhGraphene پرداخته شده است.

جزئیات شبیه‌سازی

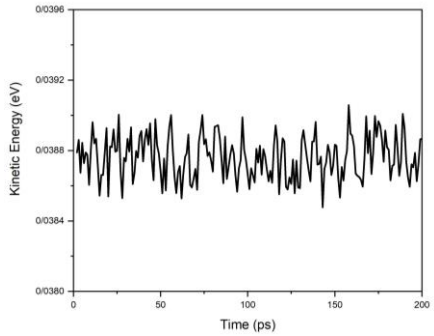
در این پژوهش با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به مطالعه‌ی پایداری حرارتی صفحه‌ی PhhGraphene می‌پردازیم برای این منظور از بسته نرم افزاری لمپس[73] استفاده شده است [8]. دینامیک مولکولی توصیف‌کننده تحول تدریجی سیستم با زمان است

[73] Lammps

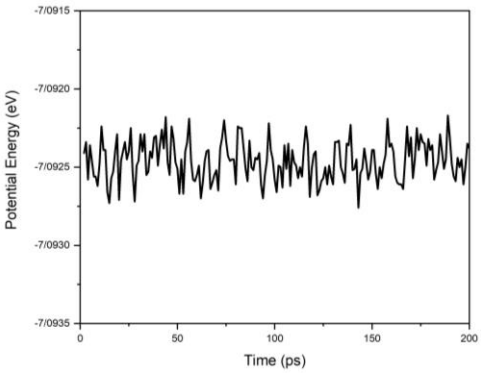
و اساس کار شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انتخاب پتانسیل برهمکنشی مناسب بین ذرات است [9]. در این پروژه تابع پتانسیل AIREBO برای مدل‌سازی پیوندهای بین اتمی صفحه PhhGraphene مورد استفاده قرارگرفته است که در اصل این تابع پتانسیل برای شبیه‌سازی‌های هیدروکربنی نوشته شده است[10].

ساختار PhhGraphene شامل ۵۲۰۰ ذره در داخل جعبه شبیه‌سازی چیده شده و برای جلوگیری از اثرات دیواره و لبه بر روی سیستم و هم‌چنین برای ثابت نگه داشتن تعداد ذرات، شرایط مرزی دوره‌ای در تمام جهات جعبه شبیه‌سازی اعمال شده است. همچنین از الگوریتم سرعت ورله برای حل معادلات حرکت استفاده شده است. قبل از افزایش تدریجی دما و بررسی تاثیر آن بر پایداری حرارتی نانوساختار، ساختار مورد نظر به وسیله‌ی باروستات و ترموستات نوز–هوور و در هنگرد NPT با گام زمانی ۱ فمتو ثانیه با دمای ۳۰۰ کلوین و فشار ۱ اتمسفر به مدت ۲۰۰ پیکوثانیه به تعادل ترمودینامیکی رسید.

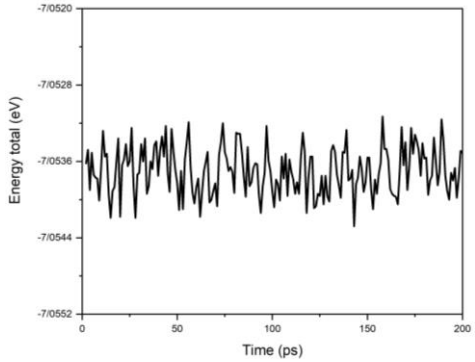
در شکل۲ به ترتیب نمودارهای تعادلی انـرژی جنبشی، انرژی پتانسیل، انرژی کل، دما و فشـار نانوساختار مورد مطالعه در حالت تعادل بر حسب زمان رسم گردیده است.



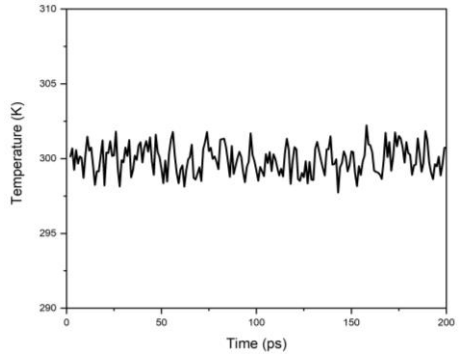
(الف): انرژی جنبشی بر حسب زمان



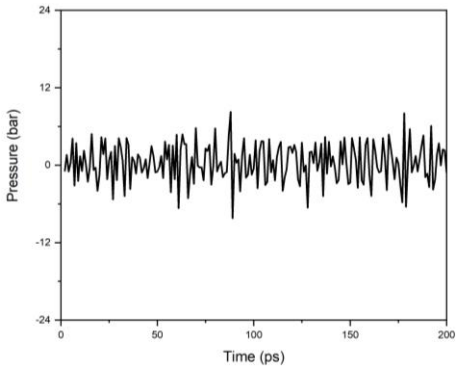
(ب): انرژی پتانسیل بر حسب زمان



(ج): انرژی کل سیستم بر حسب زمان



(د): دما بر حسب زمان

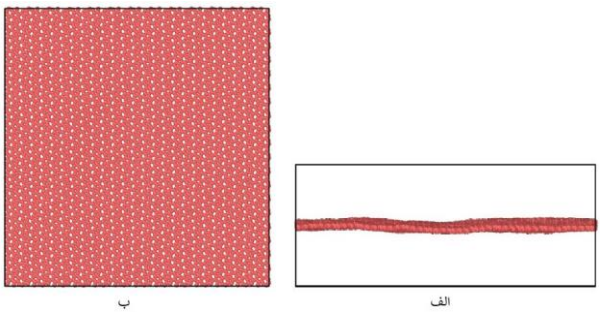


(ه): فشار بر حسب زمان

شکل ۸. نمودار الف) انرژی جنبشی، ب) انرژی پتانسیل، ج) انرژی کل، د) دما، و ه) فشار بر حسب زمان برای ساختار PhhGraphene در طول زمان تعادل.

افت و خیز کمیت‌های فیزیکی همانند انرژی، فشار، دما و ... برحسب زمان حول یک نقطه ثابت، نشان دهنده‌ی به تعادل رسیدن نانوساختار PhhGraphene می‌باشد.

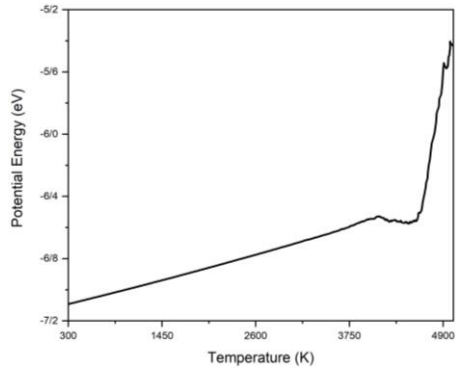
شکل ۳ تصویر نانوساختار را در حالت تعادل ترمودینامیکی نشان می‌دهد.



*شکل ۳ : نمایش نانو ساختار **PhhGraphene** در حالت تعادل ترمودینامیکی الف) نمای کنار ب) نمای بالا*

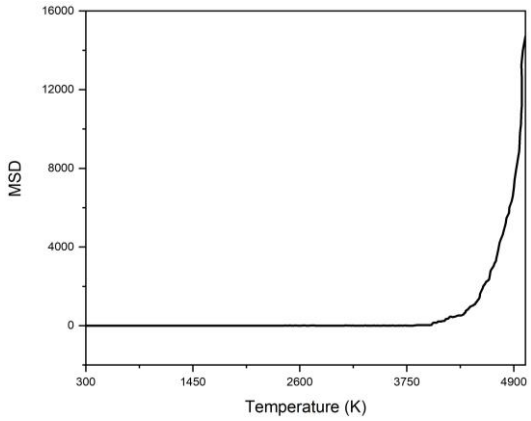
در ادامه شبیه‌سازی و پس از به تعادل رسیدن نانوساختار، دمای آن با استفاده از آنسامبل NVT و با نرخ ذوب ۰/۰۰۱ کلوین در هر گام زمانی، افزایش یافت و این افزایش دما تا زمان مشاهده گذار فاز و ذوب کامل نانوصفحه‌ی PhhGraphene ادامه پیدا می‌کند. برای اطلاع از گذار فاز سیستم می‌توان منحنی کمیت‌های گوناکونی از جمله انرژی پتانسیل، شاخص میانگین مربع جابجایی را برحسب دما رسم کرد.

شکل‌های ٤ و ٥ به ترتیب تغییرات انرژی پتانسیل و میانگین مربع جابجایی را برحسب دمای سیستم در طول فرآیند ذوب نشان می‌دهند. همه‌ی این نمودارها نشان دهنده‌ی گذار فاز سیستم می‌باشند.



*شکل ٤: نمودار تغییرات انرژی پتانسیل بر حسب دما در طول فرآیند ذوب برای ساختار **PhhGraphene***

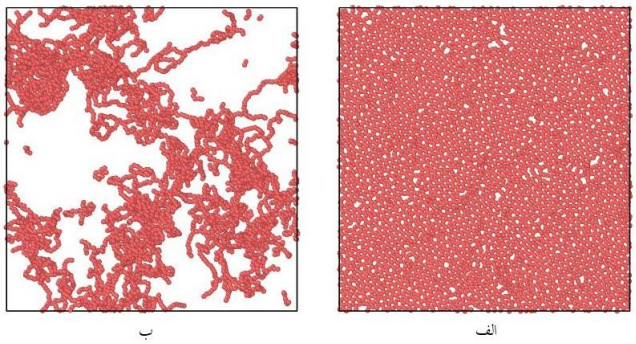
در شکل ٤ مشاهده می‌کنیم که با افزایش دما، انرژی پتانسیل سامانه تا زمانی که ساختار دچار تغییر فاز نشده افزایش می یابد و در نهایت ذوب می‌شود. سپس مقدار انرژی پتانسیل کاهش می‌یابد. در حقیقت پیوندها در این دما در حال گسسته شدن از یکدیگر هستند و سامانه شروع به تغییر فازکرده است و شکل اولیه خود را از دست داده است.



شکل ۵: نمودار شاخص میانگین مربع جابجایی بر حسب دما در طول فرآیند ذوب برای ساختار ام-گرافن

در شکل ۵ می‌بینیم PhhGraphene تا دمای ۳۸۲۸ کلوین پایداری و نظم بلوری خود را حفظ کرده و هیچ تغییر قابل ملاحظه‌ای در آن تا این دما قابل مشاهده نیست. با افزایش دما فرآیند تغییر فاز شروع می‌شود و در دمای حدود ٤٥٨٣ کلوین عمل ذوب برای نانوساختار شروع می‌شود.

شکل ٦ تصویر ساختار PhhGraphene درلحظه‌ی شروع فرآیند ذوب و بعد از ذوب کامل را نشان می‌دهد.



*شکل ٦: نمایش نانوساختار **PhhGraphene** در طول فرآیند ذوب الف) حالت گذار فاز و ب) حالت ذوب کامل*

نتیجه گیری

در این مقاله تعادل ترمودینامیکی و فرآیند ذوب نانوصفحه PhhGraphene به روش دینامیک مولکولی در بسته نرم‌افزاری لمپس و با استفاده از پتانسیل برهمکنشی AIREBO مورد بررسی قرار گرفت. ابتدا نانوساختار در دمای ۳۰۰ کلوین در هنگرد NPT به تعادل رسید و در ادامه با افزایش تدریجی دما پایداری حرارتی و فرآیند ذوب سیستم بررسی شد.

نتیجه حاصل به این صورت است که با افزایش دما وتجزیه و تحلیل داده‌ها نشان دادیم نانوساختار از دمای حدود ٤١٢٠ کلوین به تدریج از فاز بلوری خود در حال خارج شدن است و فرآیند ذوب در دمای ٤٥٨٣ کلوین شروع می‌شود و با افزایش دما در پایان ساختار به طور کامل ذوب می‌شود.

مرجع‌ها

[1] Tiras, E., Ardali, S., Tiras, T., Arslan, E., Cakmakyapan, S., Kazar, O., ... & Ozbay, E. (2013). Effective mass of electron in monolayer graphene: Electron-phonon interaction. Journal of Applied Physics, 113(4).

[2] Shi, X., Li, S., Li, J., Ouyang, T., Zhang, C., Tang, C., ... & Zhong, J. (2021). High-throughput screening of two-dimensional planar sp2 carbon space associated with a labeled quotient graph. The Journal of Physical Chemistry Letters, 12(47), 11511-11519.

[3] Yin, H., Shi, X., He, C., Martinez-Canales, M., Li, J., Pickard, C. J., ... & Zhong, J. (2019). Stone-Wales graphene: A two-dimensional carbon semimetal with magic stability. Physical Review B, 99(4), 041405.

[4] Wang, S., Yang, B., Chen, H., & Ruckenstein, E. (2019). Reconfiguring graphene for high-performance metal-ion battery anodes. Energy Storage Materials, 16, 619-624.

[5] Wang, S., Si, Y., Yang, B., Ruckenstein, E., & Chen, H. (2019). Two-dimensional carbon-based auxetic materials for broad-spectrum metal-ion battery anodes. The journal of physical chemistry letters, 10(12), 3269-3275.

[6] Wang, S., & Yang, B. (2024). Phhgraphene: an anisotropic Dirac material with intrinsic self-doping features and a tunable band structure. ACS Applied Electronic Materials, 6(5), 3110-3117.

[7] Peyvasteh, M., Setayeshi, S., Vaez Zadeh, M., & Afzal Zadeh, R. (2019). A study on melting process of perylene using molecular dynamics simulation. Iranian Journal of Physics Research, 14(2), 187-192.

[8] Wang, L., Bian, X., & Zhang, J. (2002). Structural simulation of amorphization and crystallization in liquid metals. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 35(16), 3575.

[9] Allen, M. P., & Tildesley, D. J. (1987). Computer simulation of liquids. Clarendon: Oxford.

[10] Stuart, S. J., Tutein, A. B., & Harrison, J. A. (2000). A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. *The Journal of chemical physics*, **112**(14), 6472-6486.

بررسی اثر CNT بر روی رسانندگی لایه ابررسانا YBCO ساخته شده روی زیرلایه نقره

مقدم[۱] ، زهرا ؛ دادرس[۱*]، صدیقه ؛ سنگ پور[۲]، پروانه

[۱] گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا، تهران، ایران

۲ پژوهشگاه مواد و انرژی ، پژوهشکده فناوری نانو و مواد پیشرفته ،کرج ،البرز

چکیده

ما در این پژوهش لایه ابررسانا YBCO و YBCO آلاییده به CNT را به روش چرخشی روی زیر لایه نقره ساختیم و رسانندگی این دو نمونه را با هم مقایسه کردیم. همانطور که از نتایج مشخص است،نمونه آلاییده به CNT دارای رسانندگی بیشتر و کیفیت بهتر نسبت به نمونه خالص است.

واژه های کلیدی: ابررسانای YBCO، لایه ،رسانندگی، نانو لوله های کربنی.

Investigation of the Effect of CNT on the Conductivity of the YBCO Superconducting film Made on the Ag Substrate

Moghaddam[1], Zahra; Dadras[1*], Sedigheh; Sangpour[2], Parvaneh

[1]Department of Condensed MatterPhysics, Faculty of Physics, ALzahra University, Tehran, Iran.

[2] Materials and Energy Research Center, Department of Nanotechnology and Advanced Materials

Abstract

In this study, we fabricated the superconducting film of YBCO and CNT-doped YBCO on a silver substrate by spin-coating and compared the conductivity of these two samples. As is clear from the results, the CNT-doped sample has higher conductivity and better quality than the pure.

***Keywords**: carbon nanotubes,Conductivity, spin coating, film, YBCO superconductors.*

مقدمه

نانولوله‌های کربنی به دلیل نسبت ابعاد بزرگ و رسانایی عالی، به عنوان پرکننده‌های رسانا در مواد کامپوزیتی توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند [1]. هنگامی که CNTها در مواد ابررسانایی مانند (YBCO) گنجانده می‌شوند، می‌توانند به طور بالقوه خواص الکتریکی کامپوزیت را افزایش دهند. فیلم‌های YBCO هنگام رشد روی زیرلایه‌های مناسب، مانند نوارهای نیکل با بافت نورد شده به روش ترمومکانیکی، چگالی جریان بحرانی بالایی را نشان داده‌اند [4].

جالب توجه است که افزودن CNTها به کامپوزیت‌های پلیمری، اثرات مثبت و منفی بر رسانایی الکتریکی نشان داده است. در حالی که مشخص شده است که CNTهای آبکاری شده با نقره، مقاومت کامپوزیت‌های نقره/پلیمر رسانا را تا ۸۳٪ کاهش می‌دهند [1]، کشش تک محوره کامپوزیت‌های CNTپلیمر می‌تواند رسانایی الکتریکی را در هر دو جهت طولی و عرضی کاهش دهد [3].رسانایی شبکه‌های CNT را می‌توان با استفاده از تکنیک‌های پوشش پلیمری لایه به لایه بیشتر تنظیم کرد [5].

در نتیجه، بررسی تأثیر CNTها بر رسانایی لایه‌های ابررسانای YBCO ساخته شده روی زیرلایه‌های نقره‌ای نیاز به بررسی دقیق عوامل مختلفی دارد. این عوامل شامل پراکندگی و پیوند بین سطحی CNTها [1]، تأثیر خواص زیرلایه بر خواص انتقال ابررسانایی [2] می‌شود. استفاده از نانوکامپوزیت‌های هیبریدی با نانوذرات فلزی ثانویه نیز می‌تواند برای افزایش رسانایی و اثربخشی محافظت در برابر تداخل الکترومغناطیسی بررسی شود [7].

تحقیقات در حال انجام بر روی بهینه سازی کیفیت فیلم، افزایش خواص ابررسانایی و کاوش در کاربردهای جدید متمرکز است.

تطبیق پذیری لایه های نازک YBCO و پتانسیل آنها برای کاربردهای میدانی بالا، آنها را به ماده ای امیدوارکننده برای فناوری های ابررسانا در آینده تبدیل می کند.

روش آزمایش:

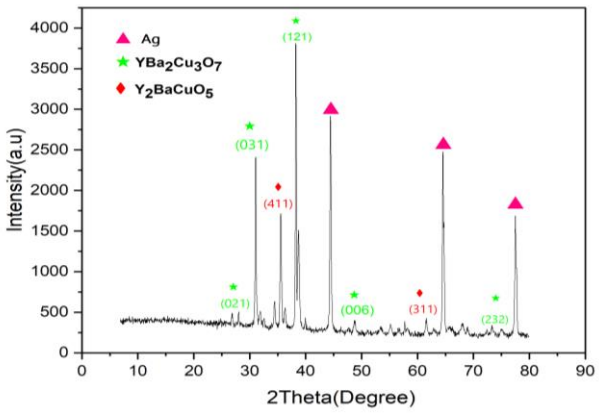
برای آماده سازی محلول جهت لایه نشانی از استات های فلزی با نسبت مولی Y:Ba:Cu=۱.۲.۳ و محلول (تری فلوئور استیک استات و آب به نسبت ۱ به۳) استفاده می‌کنیم.پس از تهیه محلول، آن را به مدت ٤ ساعت در دمای ۷٤ درجه سانتی‌گراد روی همزن مغناطیسی قرار می‌دهیم کاملاً همگن و خشک شود،پس از خشک شدن با هاونگ آن را کاملا می‌کوبیم تا پودر آبی رنگ به دست آید. برای تهیه محلولی که مناسب لایه نشانی باشد یک مقدار از پودر آبی رنگ را با مقداری متانول مخلوط می‌کنیم. غلظت محلول در حد یک مولار است محلول آبی رنگی را که درست کردیم وی زیر لایه نقره با ابعاد یک در دو سانتی‌متر که قبلاً با استون و اتانول تمیز شده بود می‌ریزیم و به مدت ۱۰ ثانیه با سرعت ۳۰۰۰rpmبه روش لایه نشانی چرخشی، لایه نشانی می‌کنیم. سپس لایه را به مدت ۱۰ دقیقه در دمای ۱۵۰ درجه سانتیگراد تحت خلا خشک می‌کنیم. لایه پس از خشک شدن،در دو مرحله تکلیس و پخت نهایی در دمای ۹۰۰ درجه آماده می شود.

برای اینکه نمونه‌ای داشته باشیم که آلاییده به CNT باشد را باید تمام مراحل فوق را برای آماده سازی آن انجام بدهیم در این آزمایش مقدار یک درصد وزنی از CNT را قبل از ریختن محلول آبی رنگ روی لایه، به آن اضافه کرده‌ایم. **اندازه گیری ها و**

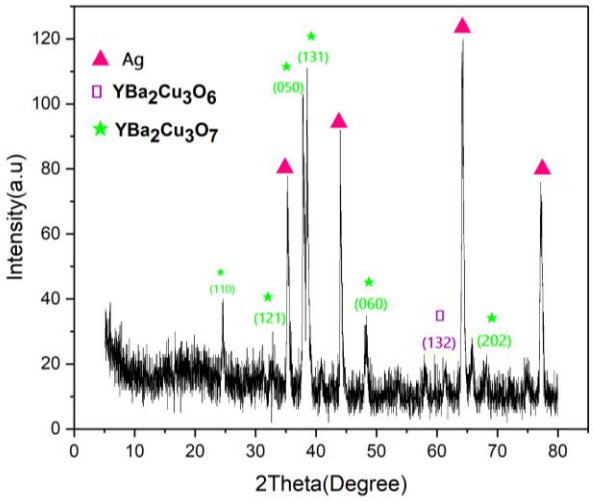
نتایج:

به منظور تعیین فاز نمونه‌ها و اندازه بلورک‌های هر یک از نمونه‌ها طیف ایکس XRD تهیه کردیم.

همانطور که در شکل ۱و۲ مشاهده می شود،نتایج طیف پراش اشعه ایکس اینگونه است که دو نمونه دارای فاز قالب اورتوروومبیک می‌باشند، در نمونه‌ای که آلاییده به CNT است،دو فاز تتراگونال و ارتوروومبیک دیده می‌شود ولی در نمونه خالص،ناخالصی نیز وجود دارد. به این نکته باید توجه کرد که CNT وارد ساختار نشده و فقط نقش بین دانه‌ای را ایفا کرده است. متوسط اندازه بلورک ها را با استفاده از رابطه دبای شرر بدست آوردیم، همانطور که می‌بینید با اضافه کردن CNT اندازه بلورک‌ها کاهش پیدا کرده است، اندازه بلورک‌ها به ترتیب نمونه خالص و نمونه آلاییده به CNT حدود ۲۷۰ و ۶۲ نانومتراست.

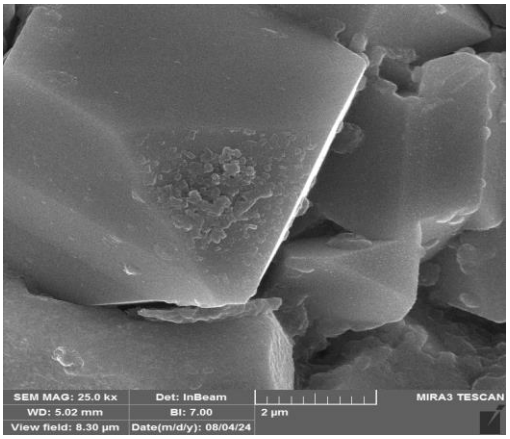


شکل۱ : الگوی پراش نمونه YBCO خالص روی زیرلایه نقره

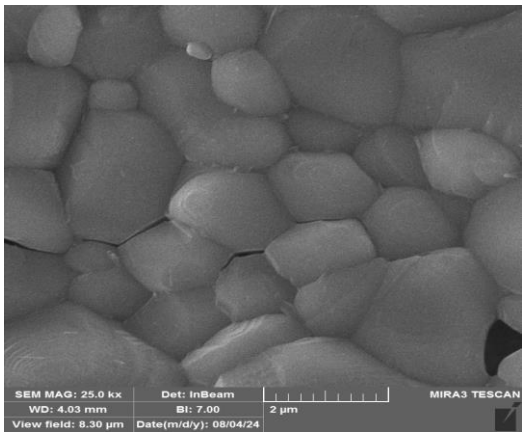


شکل۲ : الگوی پراش YBCO آلاییده به CNT روی زیرلایه نقره

به منظور بررسی همگنی، دانه‌بندی، ابعاد دانه‌ها، اتصالات بین دانه‌ای و تغییرات آنها با اضافه کردن ناخالصی آزمایش‌های FESEM روی نمونه‌ها انجام شد. شکل های ۳ و ٤ تصاویر FESEM نمونه ها را نشان می دهند.



شکل۳: تصاویر FESEM نمونه YBCO خالص روی زیر لایه نقره



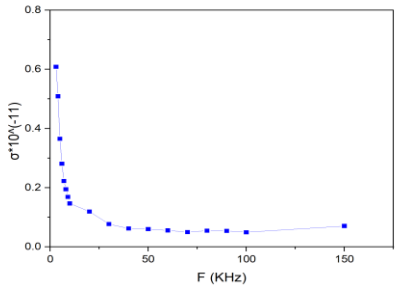
شکل ٤: تصاویر FESEM نمونه YBCO آلاییده به CNT روی زیر لایه نقره

میانگین اندازه دانه‌ها را با استفاده از بررسی FESEM نمونه‌ها به دست آوردیم، که برای هر کدام از نمونه‌ها به ترتیب نمونه خالص، ٤.٦٧ و نمونه آلاییده به CNT ، ٣.١١ میکرومتر است. همانطور که از مقادیر مشخص است، CNT باعث کوچک‌تر شدن دانه‌ها شده و این باعث افزایش سطح تماس آنها می‌شود و نمونه‌ای که در آن نانولوله‌های کربنی وجود دارد ارتباط خوبی بین دانه‌ها برقرار می‌شود.

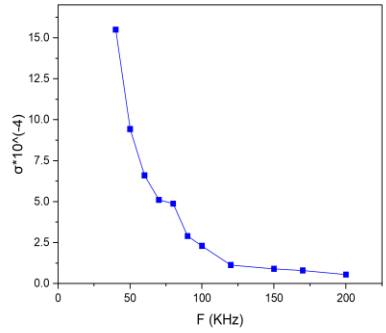
با توجه به فرمول (١) و داشتن ضخامت نمونه‌ها که برای نمونه خالص و آلاییده به CNT به ترتیب ٩٥.٧٥ و ١١.٣٨ میکرومتر است و با به دست آوردن قسمت موهومی و حقیقی ثابت دی الکتریک، توانستیم نمودار رسانندگی بر حسب فرکانس را رسم کنیم.

$$\sigma = 2\pi f \varepsilon'' \varepsilon_0 \qquad (١)$$

که با توجه به شکل های ٥و٦ با افزایش فرکانس رسانندگی کاهش پیدا می‌کند این به دلیل افزایش دمایی است که با افزایش فرکانس رخ می‌دهد اما همانطور که انتظار می‌رفت رسانندگی نمونه‌ای که دارای CNT بود،عدد بیشتری را نشان می‌دهد.

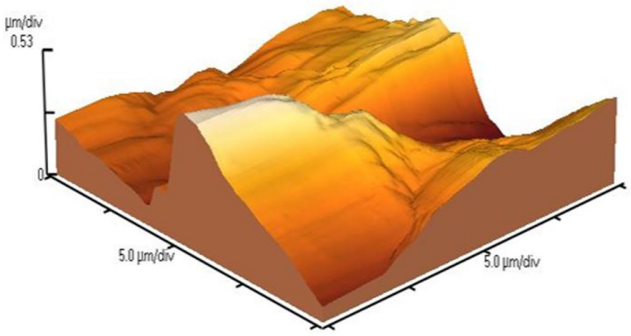


شکل ٥: رسانندگی بر حسب فرکانس YBCO-Ag

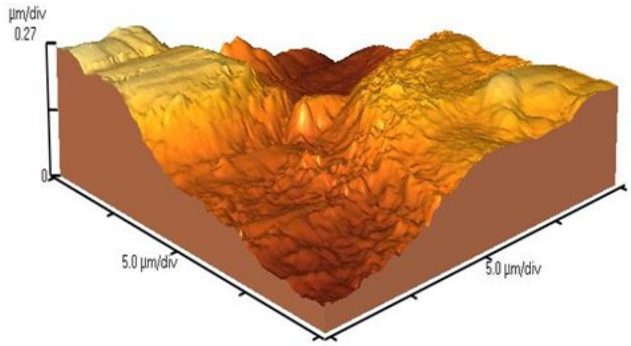


شکل ٦: نمودار رسانندگی بر حسب فرکانس YBCO-1% CNT- Ag

در کنار خصوصیات دیگر ماده، توپوگرافی سطحی نیز پارامتر بسیار مهمی است که معمولا برای بررسی آن از آزمون AFM استفاده می شود.در آنالیز AFM پستی و بلندی ها و به عبارت دیگر زبری سطح مورد مطالعه قرار گرفته می شود که این زبری روی رسانندگی نمونه اثر می گذارد.



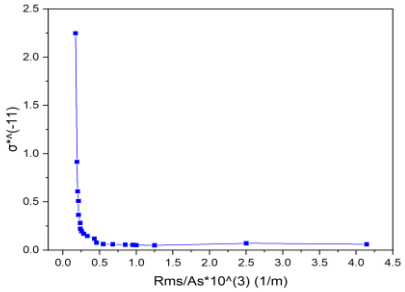
شکل۷: آنالیز AFM YBCO-Ag زبری برابر ۲۰۵نانومتر



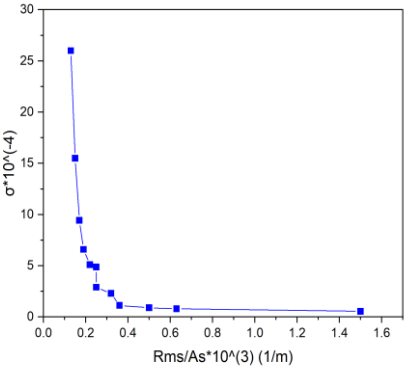
شکل۸: آنالیز AFM YBCO-1% CNT- Ag زبری برابر ۱۲۰.۲نانومتر

در شکل‌های ۷و۸ آنالیز AFM نمونه ها را می‌بینیم، همانطور که از اعداد زبری سطح ،مشخص است نمونه ی خالص با زبری سطح ۲۰۵ نانومتر دارای زبری سطح بیشتری نسبت به نمونه آلاییده به CNT که زبری آن مقدار ۱۲۰.۲ نانومتر را نشان می دهد و این باعث کاهش رسانندگی می‌شود.

ما با توجه به رسانندگی که در قسمت قبل بدست آوردیم توانستیم نمودار رسانندگی بر حسب زبری بر روی سطح کل را رسم کنیم که در شکل ۹و۱۰ نشان داده شده است.همان طور که انتظار می رفت رسانندگی در نمونه ای که آلاییده به CNT است بسیار بیشتر از نمونه خالص است و می توان نتیجه گرفت نانولوله های کربنی باعث کاهش تخلخل بین دانه ها شده و اتصالات قوی بین دانه ها ایجاد کرده اند و درطیف پراش اشعه ایکس خلوص نمونه آلاییده به CNT بیشتر از نمونه خالص بود که این را هم میتوان به رسانندگی مرتبط کرد.



شکل ۹: نمودار رسانندگی برحسب زبری بر روی سطح کل نمونه YBCO-Ag



شکل ۱۰: نمودار رسانندگی برحسب زبری بر روی سطح کل نمونه YBCO-1% CNT- Ag

نتیجه گیری

ساخت لایه ابررسانا به روش لایه نشانی چرخشی روی زیر لایه نقره مورد بررسی قرار گرفت.

در این پژوهش رسانندگی دو نمونه مورد بحث و مقایسه قرار گرفت لایه ای که آلاییده به CNT دارای خلوص بیشتری است و اندازه بلورک‌های کوچکتری را داراست و همچنین از اندازگیری دانه‌ها نتیجه گرفتیم لایه ابررسانا آلاییده به CNT دارای تخلخل کمتری است که این باعث رسانندگی بیشترمی شود و زبری سطح نمونه خالص بسیار بیشتر از نمونه دیگر است که این موجب کاهش رسانندگی است.

سپاسگزاری:

از حمایت های دانشـــگاه الزهرا (س) و پژوهشـــگاه مواد و انرژی تشکر می شود.

مرجع‌ها

[1] Oh, Y., Lee, E., Baik, S., Choi, J., Suh, D., Kim, Y., & Mok, J. S. (2008). Silver-plated carbon nanotubes for silver/conducting polymer composites. Nanotechnology, 19(49), 495602.

[2] Beck, A., Gerdemann, R., Villegier, J. C., Gerber, R., Alff, L., Marx, A., Stenzel, A., Gross, R., Mayer, B., Froehlich, O. M., & Moriceau, H. (1995). Fabrication and superconducting transport properties of bicrystal grain boundary Josephson junctions on different substrates. IEEE Transactions on Appiled Superconductivity, 5(2), 2192–2195.

[3] Feng, C., & Jiang, L. Y. (2014). Investigation of uniaxial stretching effects on the electrical conductivity of CNT–polymer nanocomposites. Journal of Physics D: Applied Physics, 47(40), 405103.

[4] Norton, D. P., Lee, D. F., He, Q., Klabunde, C. E., Sales, B. C., Kroeger, D. M., Saffian, B., Goyal, A., Budai, J. D.,…, (1996). Epitaxial YBa 2 Cu 3 O 7 on Biaxially Textured Nickel (001): An Approach to Superconducting Tapes with High Critical Current Density. Science, 274(5288), 755–757.

[5] Rivadulla, F., Mateo-Mateo, C., & Correa-Duarte, M. A. (2010). Layer-by-Layer Polymer Coating of Carbon Nanotubes: Tuning of Electrical Conductivity in Random Networks. *Journal of the American Chemical Society*, *132*(11), 3751–3755

[6] Shayesteh Zeraati, A., Mende Anjaneyalu, A., Sundararaj, U., Abouelmagd, A., & Pawar, S. P. (2020). Effect of secondary filler properties and geometry on the electrical, dielectric, and electromagnetic interference shielding properties of carbon nanotubes/polyvinylidene fluoride nanocomposites. Polymer Engineering & Science, 61(4), 959–970.

[7] Zare, Y., & Rhee, K. Y. (2020). Calculation of the Electrical Conductivity of Polymer Nanocomposites Assuming the Interphase Layer Surrounding Carbon Nanotubes. Polymers, 12(2), 404.

مدل کوراموتو مرتبه اول با اعمال نیروی میخکوبی و نوفه در شبکه جهان کوچک واتس استروگاتس

یداللهی فارسانی ، فاطمه ؛ شهبازی، فرهاد

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

برای بررسی همگامی، از مدل کوراموتو استفاده شد. در این مطالعه، اثر نیروی میخکوبی با ضرایب مختلف بر رفتار نوسانگرها در شبکه‌ی جهان کوچک تحلیل شد. سه نوع رفتار مشاهده گردید: همگامی ایستاتیک که در آن تمامی نوسانگرها در نزدیکی نقطه تعادل خود باقی می‌مانند؛ همگامی دینامیک که در آن تمام نوسانگرها همزمان با یکدیگر حرکت می‌کنند؛ و حالتی که نوسانگرها شلیک می‌کنند اما فاقد همگامی هستند. زمانی که نوفه اعمال شد، با افزایش ضریب نیروی میخکوبی همچنان افزایش همگامی را داریم و سیستم به سمت همگامی ایستاتیک پیش می‌رود.

واژه های کلیدی: *مدل کوراموتو، نیروی میخکوبی، همگامی ایستا، همگامی دینامیک، نوفه.*

First-order Kuramoto model with pinning force and noise in the Watts strogats small word network

Yadolldhi Farsani, Fatemeh; Farhad, Shahbazi

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan,

Abstract

In order to investigate synchronization, the Kuramoto model was employed. In this study, the effect of pinning forces with various strengths on the behavior of oscillators was analyzed. Three types of behavior were observed: static synchronization, in which all oscillators remain near their equilibrium points; dynamic synchronization, where all oscillators move simultaneously in a synchronized manner; and a state in which oscillator's fire but lack synchronization. When noise is applied, as the pinnig force coefficient increases, we continue to see an increase in synchronization, and the system moves towards static synchronization.

***Keywords**: Kuramoto model, pinning force, static synchronization, dynamic synchronization, noise.*

مقدمه

پدیده قابل توجهی که در طبیعت وجود دارد، همگام‌سازی جمعی است، که جمعیت زیادی از نوسانگرهای جفت‌شده به‌طور خودبه‌خود هماهنگ می‌شوند تا در یک فرکانس مشترک نوسان کنند، علیرغم اینکه هر جزء دارای فرکانس ذاتی نوسان متفاوتی است. برخی از نمونه‌های رایج عبارتند از: همزمانی متابولیک در سوسپانسیون سلول‌های مخمر، شلیک همزمان سلول‌های ضربان‌ساز قلب، چشمک‌زدن هم‌زمان گروه‌های کرم شب تاب، اتصالات شبکه جوزفسون، تشویق و رفتار گله حیوانات [۱].

مدل کوراموتو یک چارچوب نظری ساده برای مطالعه چگونگی همگام سازی‌ای است که به طور خودبه‌خود در دینامیک یک سیستم برهمکنشی بس ذره‌ای پدیدار می‌شود. یکی از راه‌های توسعه‌ی این مدل اضافه کردن نیروی میخکوبی و نوفه است [۲].

این احتمال مطرح شده است که تعدادی از سیستم‌های مختلف در طبیعت ممکن است ساختار توپولوژیکی مشابهی با شبکه‌های جهان کوچک داشته باشند، که ویژگی این شبکه‌ها میان شبکه‌های منظم و شبکه‌های کاملا تصادفی هستند. شبکه‌های جهان کوچک معمولاً با دو ویژگی جالب مشخص می‌شوند: ضریب خوشگی بالا که مشخصه شبکه‌های منظم است و طول مسیر کوتاه که معمولاً در شبکه‌های تصادفی مشاهده می‌شود [۳].

در این مقاله ما برای بررسی همگامی از مدل کوراموتو مرتبه‌ی اول در حضور نیروی میخکوبی و نوفه استفاده کردیم. شبکه‌ی مورد استفاده شبکه‌ی واتس استروگاتس جهان کوچک است. در واقع ما با تغییر ضریب نیروی میخکوبی، به‌دنبال پیدا کردن ضریبی هستیم که به ازای آن بیشترین همگامی را داریم و همچنین میخواهیم تاثیر نوفه بر روی همگامی را در این مدل بررسی کنیم.

مدل دینامیکی

مدل کوراموتو در حضور نیروی میخکوبی و نوفه به صورت رابطه‌ی (۱) است [٤]. در واقع مجموعه‌ای از نوسانگرهای فعال جفت‌شده در نظر گرفته می‌شود.

$$\dot{\varphi}_j = \omega_j + \frac{C}{N}\sum_{k=1}^{N}\sin(\varphi_k - \varphi_j) - \beta\sin\varphi_j + \sqrt{D}\xi_j. \qquad (۱)$$

$\sin\varphi_j$ نیروی میخکوبی β ضریب آن است. ω_j فرکانس ذاتی نوسانگر DJ شدت نوفه‌های گاوسی ξ_j با میانگین صفر و همبستگی C، $<\xi_j(t)\xi_k(t)>=\delta(t-t')\delta_{jk}$ شدت جفت‌شدگی و N تعداد نوسانگرها است. برای توصیف رفتار جمعی از دامنه‌ی عمومی وابسته به زمان $\rho(t)$ و فاز $\Psi(t)$ استفاده کردند. که ρ در واقع همان پارامتر نظم است که معیار خوبی برای بررسی همگام‌سازی نوسانگرهای جفت شده شناخته شده است. $\rho(t)$ به صورت رابطه‌ی (۲) نوشته می‌شود.

$$\rho e^{i\Psi(t)} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} e^{i\theta_j(t)} \qquad (۲)$$

$\rho=۰$ یعنی همگامی وجود ندارد و $\rho=۱$ یعنی همگامی کامل و $۰<\rho<۱$ یعنی قفل شدگی فاز داریم. دو حالت متفاوت وجود دارد که می‌توانند منجر به $\rho=۱$ شوند. اولین حالت یک حالت دینامیکی است که در آن نوسانگرها پالس‌های همگام را شلیک می‌کنند، این وضعیت مربوط به همگام‌سازی کامل است. حالت دیگر یک حالت ایستا است که در آن همه‌ی نوسانگرها در نقطه تعادل خود در حالت استراحت قرار می‌گیرند. همچنین می‌توانیم برای بررسی همگامی از پارامتر نظم معرفی شده توسط شیناماتو و کوراموتو که در رابطه‌ی (۳) آمده است، استفاده کنیم.

$$\zeta=<|\rho(t)e^{i\psi(t)}-<\rho(t)e^{i\psi(t)}>|> \qquad (۳)$$

این پارامتر زمانی غیر صفر است که همگامی کامل نداشته باشیم. برای تمایز بین همگامی استاتیک از همگامی دینامیکی، از معیاری به نام جریان J استفاده می‌کنیم. جریان معیاری برای فعالیت نوسانگرها است.

$$J = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} < \dot{\varphi}_k(t) >. \qquad (٤)$$

جریان غیر صفر، وضعیتی را توصیف می‌کند که در آن نوسانگرها در حال شلیک هستند (الزاما هماهنگ نیستند) و زمانی که در حالت استراحت هستند مقدار این پارامتر صفر است.

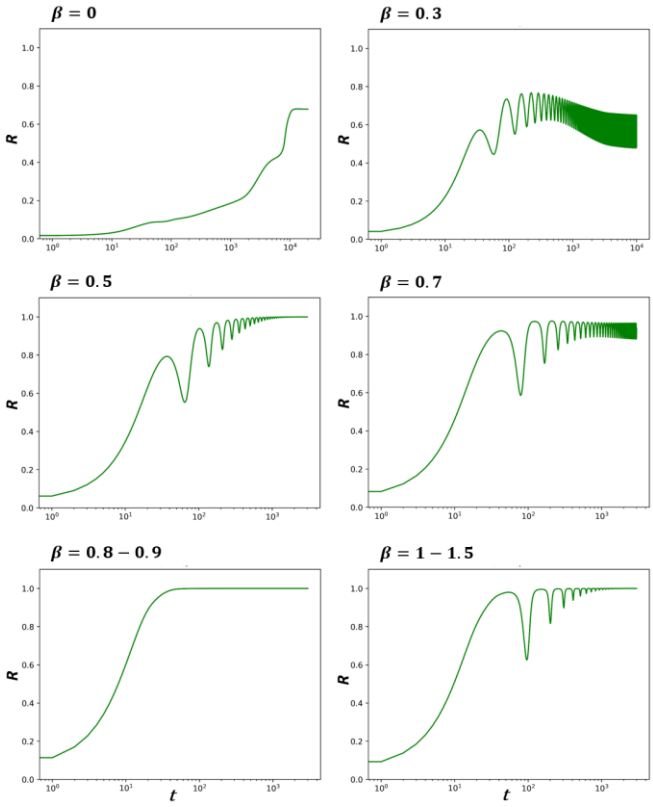
همچنین برای مطالعه‌ی رابطه بین هر عضو سامانه با اعضاء دیگر از ماتریس همبستگی استفاده می‌کنیم. مشاهده این ماتریس به ما کمک می‌کند که نقاط همگام سامانه وهمچنین نقاط ناهمگام را مشخص کنیم. این ماتریس به صورت رابطه‌ی (۵) تعریف می‌شود.

$$\dot{\varphi}_j = \omega_j + \frac{C}{N}\sum_{k=1}^{N}\sin(\varphi_k - \varphi_j) - \beta\sin\varphi_j + \sqrt{D}\xi_j. \quad (۵)$$

و τ_r همان زمانی است که سیستم به حالت پایدار می‌رسد.

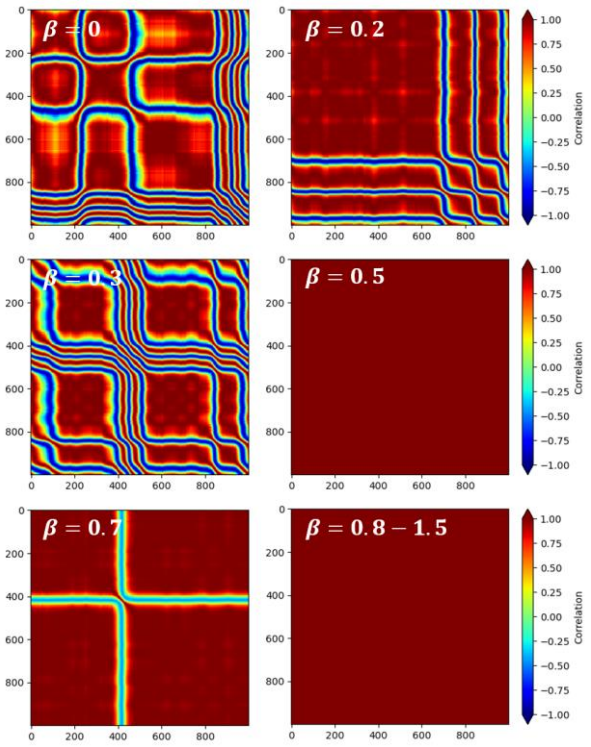
نتایج و بحث

ما ابتدا رابطه‌ی (۱) را برای ۱۰۰۰ نوسانگر در شبکه‌ی جهان کوچک با احتمال بازآرایی ۰/۰۳ به روش عددی حل کردیم. نمودار پارامتر نظم برای βهای مختلف در شکل ۱ آورده شده است، که همگامی کامل را برای β =(۰/۵,۰/۸,۰/۹–۱/۵) نشان می‌دهد. اما تشخیص نوع همگامی ممکن نیست. همچنین به ازای β= ۰ قفل شدگی فاز رخ داده است. اما تشخیص نوع آن که دینامیک است یا استاتیک است ممکن نیست.



شکل ۱ : نمودار پارامتر نظم به ازای βهای مختلف برای C=۱، D=۰، ω=۱ .

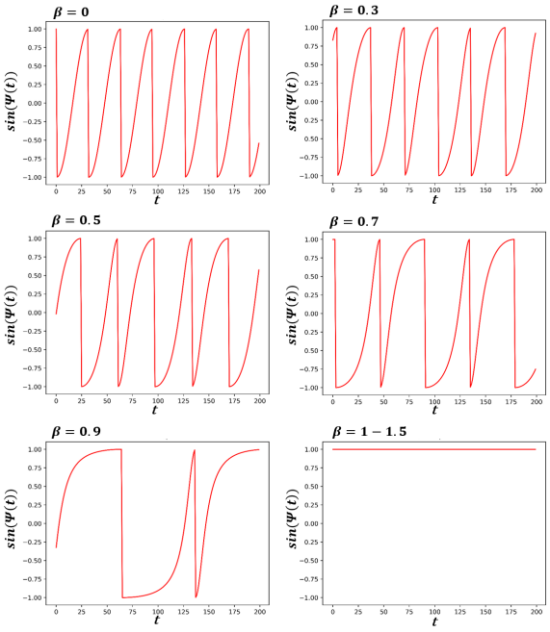
شکل۲ ماتریس همبستگی به ازای βهای مختلف را نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود با افزایش β نقص سیستم برای β =۰/۵ از بین رفته و بعد از آن دوباره به وجود آمده و برای β≥۰/۸ مجددا هیچ نقصی مشاهده نمی‌شود. اما با این حال تشخیص حالت های همگام استاتیک و دینامیک ممکن نیست. به همین دلیل ما تغییرات سینوسی فاز پارامتر نظم $\Psi(t)$ *را برحسب زمان* t *برای چندین* β *مختلف رسم کردیم. نتایج در شکل۳ آورده شده است.*



شکل۲ : ماتریس همبستگی به ازای βهای مختلف برای $C=1$، $D=0$ و $\omega=1$.

همانطور که در شکل۳ مشاهده می‌شود، با توجه به اینکه ما به ازای β =(۰/۵,۰/۸,۰/۹) هیچ نقصی نداشتیم و سیستم همگام بود اما تغییرات $sin(\Psi(t))$ نشان می‌دهد نوسانگرها در حالت حرکت هستند. در واقع فاز پارامتر نظم نسبت به زمان تحول دارد یا به عبارتی در دایره‌ی فاز دور کامل می‌زند. پس این حالت مربوط به همگامی دینامیک است. برای $\beta\geq1$ فاز پارامتر نظم تحول زمانی ندارد و گویا ساکن و در حالت استراحت است. پس به این معناست که برای این بازه ما همگامی استاتیک داریم. قابل ذکر است که این نتایج به شرایط اولیه حساس است و با هر بار اجرا نتایج متفاوتی به‌دست می‌آید. یعنی حالت همگام دینامیک در هر اجرا متفاوت می‌شود. با توجه به این مورد ما سیستم را با ۵۰ شرایط اولیه‌ی متفاوت اجرا گذاشتیم و میانگین ζ،ρ و J را به ازای β های مختلف بدست آوردیم. نتایج در شکل٤ آورده شده است.

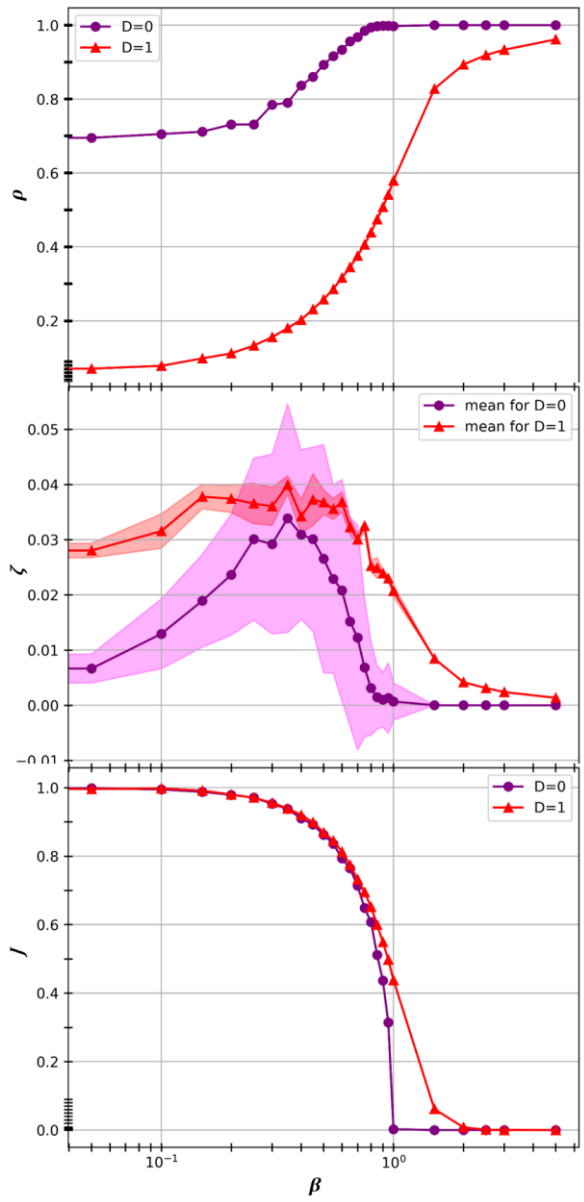
شکل٤ تغییرات ζ ،ρ و J را به عنوان تابعی از β در حضور نوفه (D=۱، نمودار قرمزرنگ) و عدم حضور نوفه (D=۰، نمودار بنفش رنگ) نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود، وقتی D=۰ است (نمودار بنفش) برای $\beta\geq$ ۰/۸ با توجه به نمودار ρ ما همگامی داریم و نمودار ζ نیز تایید کننده است. اما تشخیص حالت همگام استاتیک و دینامیک ممکن نیست. اما نمودار J به ازای $\beta\geq$۱ صفر است که نشان دهنده‌ی این است که سیستم تحرک ندارد و نوسانگرها در جای خود ثابت هستند و در حالت تعادل قرار دارند. یعنی سیستم در حالت همگامی ایستا قرار دارد و هیچ دینامیکی ندارد. همچنین به ازای $\beta\geq$۰/۸<۱ مقدار J غیر صفر است یعنی تحرک داریم و سیستم در حالت همگامی دینامیک قرار دارد. همانطور که مشاهده می‌شود با افزایش β مقدار جریان در حال کاهش است یعنی تحرک نوسانگرها کم می‌شود و به سمت سکون پیش می‌روند. که شکل۳ نیز تایید کننده است زیرا در یک بازه‌ی زمانی یکسان سیستم تعدار دورهایی که در دایره‌ی فاز می‌زند کم می‌شود که به معنای حرکت آهسته‌تر است. درواقع نیروی میخکوبی تمایل دارد سیستم را به حالت استراحت ببرد. با توجه به شکل٤ می‌توان گفت ماکزیمم مقدار ζ برای β=۰/۳۵ است که می‌توان گفت، برای این ضریب بیشترین دامنه‌ی نوسان و کمترین میزان همگامی وجود دارد. پس ماکزیمم ζ برای ضریبی رخ می‌دهد که پارامتر نظم آن بیشترین نوسان را دارد. همچنین به ازای β= ۰ قفل شدگی فاز دینامیک رخ داده است.



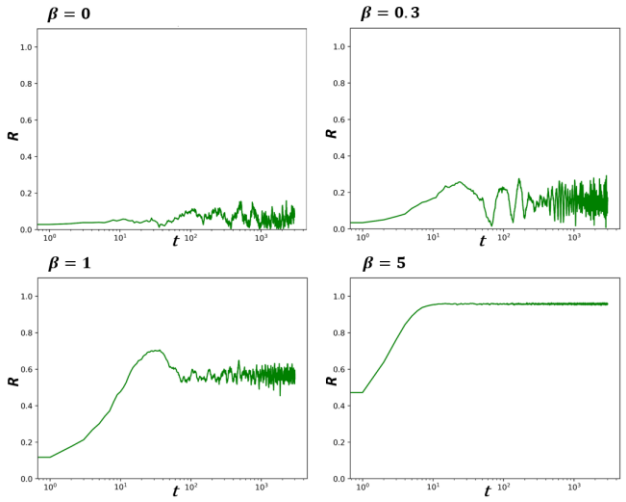
شکل۳ : نمودار تغییرات سینوس فاز پارامتر نظم به ازای βهای مختلف برای $C=1$، $D=0$ و $\omega=1$.

در حضور نوفه با اینکه برای βهای کوچک همگامی کوچکتر از حالت بدون نوفه است، اما همچنان با افزایش β افزایش همگامی را شاهد هستیم یعنی نیروی میخکوبی توانسته بر نوفه که عامل از بین برنده‌ی همگامی است مقابله کرده و سیستم را به سمت همگامی ایستاتیک ببرد. برای بررسی بیشتر، نمودار پارامتر نظم برای چند β در شکل۵ آورده شده است.

با توجه به شکل٤ برای β>۱/۵ چون همگامی یک نیست اما جریان صفر است میتوان گفت قفل شدگی فاز ایستاتیک رخ داده است. که نمودار پارامتر نظم شکل۵ برای β=۵ نیز تایید کننده است.



شکل٤ : نمودار میانگین پارامترهای نظم و جریان به ازای βهای مختلف برای $C=1$ و $\omega=1$. در حضور نوفه D=۱ و عدم حضور نوفه D=۰.



شکل ۵ : نمودار پارامتر نظم به ازای βهای مختلف برای $C=1$، $D=1$، $\omega=1$.

نتیجه گیری

رفتار جمعی سیستم نتیجه رقابت بین فرکانس‌ها، قدرت جفت‌شدگی، مقدار نوفه و نیروی میخکوبی است. با اعمال نیروی میخکوبی رقابتی مابین همگام شدن ذاتی (ناشی از جفت‌شدگی مابین نوسانگرها) و همگام‌شدن اجباری (ناشی از نیروی میخکوبی، که سیستم را به حالت ساکن می‌برد) به‌وجود می‌آید. شدت نیروی میخکوبی تعیین می‌کند سیستم به سمت کدام حالت همگامی برود. همانطور که مشاهده شد افزایش نیروی میخکوبی باعث کمتر شدن سرعت نوسانگرها می‌شود به گونه‌ای که در صورت عدم وجود نوفه وقتی β=۱ می‌شود نوسانگرها به طور کامل ساکن می‌شوند و ما شاهد همگامی ایستاتیک هستیم. نوفه نیز تمایل دارد همگامی را از بین ببرد که ما نیز این رفتار را شاهد بودیم با این حال با افزایش β باز هم سیستم به سمت همگامی ایستاتیک پیش می‌رود یعنی نیروی میخکوبی توانسته بر نوفه نیز غلبه کند.

مرجع‌ها

[۱] S. Gupta, A. Campa and S. Ruffo; “Kuramoto model of synchronization: equilibrium and nonequilibrium aspects”; *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, **2014** (2014) R08001

[۲] J. A. Acebrón, L. L. Bonilla, C. J. Pérez Vicente, F. Ritort and R. Spigler; “The Kuramoto model: A simple paradigm for synchronization phenomena”; *Reviews of Modern Physics*, **77** (2005) 137-185

[۳] C. J. Tessone, A. Scire, R. Toral and P. Colet; “Theory of collective firing induced by noise or diversity in excitable media”; *Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, **75** (2007) 016203

[٤] D. J. Watts and S. H. Strogatz; "Collective dynamics of ‘small-world’ networks"; *Nature* **393**, No. 6684 (1998) 440-442.

عارفه خوشخو

عنوان: انتقال حالت‌های کوانتومی در زنجیره‌های توپولوژیک با جفت‌شدگی‌های اسپین- مدار

چکیده: یکی از اهداف مهم در فناوریهای کوانتومی انتقال کیوبیت‌ها بدون از دست رفتن همدوسی آنهاست. لذا ایجاد فرآیندهایی که به حفظ همدوسی کیوبیت‌ها در حین انتقال کمک کند بسیار حایز اهمیت است. یکی از سیستم‌هایی که برای انتقال حالت‌های کوانتومی بطور امن و با دقت بالا مورد استفاده قرار می‌گیرد زنجیره‌های توپولوژیک سو-شریفر-هیگر (اس‌اس‌اچ) است. فاز توپولوژیک این زنجیره در این فرآیند نقش بسیار مهمی دارد. در این مقاله نشان می‌دهیم که حضور پرش‌های اسپین-وارون (پرش‌هایی که در آنها اسپین ذره وارون می‌شود) سبب ایجاد کانالی می‌شود که در آن یک کیوبیت می‌تواند از یک طرف زنجیره به طرف دیگر آن منتقل شود. این پرش‌ها به دلیل وجود جفت‌شدگی اسپین-مدار در سیستم بوجود می‌آیند. با بررسی تغییرات زمانی همانندی (فیدلیتی) حالت منتقل شده و حالت‌های ایده‌آل مورد نظر، در زنجیره‌های زوج و فرد، شرایط انتقال حالت‌های مختلف کوانتومی در داخل زنجیره را بررسی می‌کنیم. مطالعات ما می‌تواند از لحاظ آزمایشگاهی نیز مورد بهره‌برداری قرار گیرد.

Title: Quantum State Transfer in Topological Chains with Spin-Orbit Couplings

Abstract: One of the primary objectives in quantum technology is the reliable transfer of quantum states without loss of coherence. Developing processes that preserve state coherence during transfer is essential. The topological Su-Schrieffer-Heeger (SSH) chain is a prominent system used for high-fidelity quantum state transfer, with its topological phase playing a crucial role in facilitating this process. In this work, we demonstrate that the presence of spin-flip hopping terms creates a pathway enabling the transfer of a qubit from one edge of the chain to the other. These spin-flip hoppings arise due to spin-orbit coupling within the system. By analyzing the time evolution of the fidelity of the transferred state, as well as our target states, in both odd and even chains, we identify conditions that enable high-fidelity state transfer.

الهام رحمانی

عنوان: بررسی تاثیر دوپینگ فسفر بر خواص اپتیکی وساختاری لایه های نازک دی سولفید تنگستن سنتز شده به روش رسوب دهی بخار شیمیایی

چکیده: در سال های اخیر سنتز وآلایش لایه های نازک دی سولفید تنگستن(WS2) به علت مزایای فراوان آنها مورد توجه قرار گرفته است. در این پژوهش ، لایه های نازک WS2 و WS2 دوپینگ شده بافسفرروی زیرلایه های SiO2 با استفاده از کلرید سدیم وگاز هیدروژن به عنوان کاتالیزور، با روش رسوب دهی بخار شیمیایی رشد داده شده اند. تصاویر میکروسکوپی و میکروسکوپ الکترونی روبشی کیفیت بالا، یکنواختی و پیوستگی و ساختار مثلثی لایه های نازک را نشان دادند. طیف XRD وجود فسفر درشبکه بلوری را نشان دادو اینکه صفحات WS2 دارای رشد ترجیحی در راستای (۰ ۰ ۲) می باشند. حضور پیک واحد و بلند در طیف فوتولومینسانس تعداد لایه های کم وکیفیت بالای نانوساختارها را تایید می کند. همچنین آنالیز ها نشان دادند که دوپینگ فسفرویژگی های ساختاری و اپتیکی WS2 راتغییر می دهند. طیف جذب نیز تغییرات مکان پیک های جذب را براثر دوپینگ فسفر نشان داد.

Title: The effect of phosphorus doping on the optical and structural properties of WS_2 few-layers prepared by CVD

Abstract: In recent years, the synthesis and doping of tungsten disulfide (WS_2) thin films have attracted attention due to their numerous advantages. In this study, WS_2 thin films and phosphorus-doped WS_2 were grown on SiO_2 substrates using chemical vapor deposition with sodium chloride and hydrogen gas as catalysts. Optical microscopy and scanning electron microscopy images demonstrated the High-quality, uniformity, continuity, and triangular structure of the thin films. XRD spectra confirmed the presence of phosphorus in the crystal lattice and showed that the WS_2 planes exhibit preferential growth along the (0 0 2) direction. The presence of a sharp and strong peak in the photoluminescence spectrum confirmed a low number of layers and high quality of the nanostructures. Additionally, analyses showed that phosphorus doping alters the structural and optical properties of WS_2. The absorption spectra also indicated shifts in the positions of absorption peaks resulting from phosphorus doping.

مهران نوری

عنوان: اثر متقابل انتشار بیماری و پیدایش همکاری در اجتماع

چکیده: همکاری افراد در اتخاذ تدابیر حفاظتی در کنترل بیماری موثر است و ایمنی جمعی را به عنوان یک کالای عمومی ایجاد می کند. در مقابل، وجود اپیدمی یک عامل محرک برای پیدایش و تقویت همکاری در جامعه است. در این کار تلفیق دو مدل انتشار بیماری و بازی کالای عمومی را در نظر گرفته و اثر متقابل این دو دینامیک را بر یکدیگر مطالعه می کنیم. نشان می دهیم در حالی که اثر محافظت خودمحور باعث تقویت همکاری می شود در مقابل ویژگی نوع دوستی با اثر کاهش انتقال بیماری سود حاصل از همکاری را کاهش می دهد.

Title: The interplay between disease spreading and the emergence of cooperation in society

Abstract: Individual cooperation in adopting protective measures plays an important role in controlling diseases and creates herd immunity as a public good. Conversely, the presence of an epidemic acts as a driving force for the emergence and strengthening of cooperation within society. In this study, we consider the integration of two models — disease spreading and the public goods game — and investigate the mutual influence of these two dynamics on each other. We show that while self-interested protective behavior promotes cooperation, altruistic behavior, by reducing disease transmission, can diminish the benefits of cooperation.

عباس شجاع

عنوان: نگاشت مدل تپه های شنی BTW به شبکه پیچیده و تحلیل ویژگی‌های آن

چکیده: این مقاله به بررسی ارتباط بین سامانه‌های بحرانی خودسازمان‌یافته (SOC) و شبکه‌های پیچیده می‌پردازد. با استفاده از یک تابع انتقال مبتنی بر شباهت فعالیت‌های محلی و فرآیند فیلتراسیون با پارامترهای$\mathscr{R} = (r_1 , r_2)$ ، مدل تپه های شنی BTW به شبکه نگاشته می‌شود. توزیع درجات شبکه حاصل، از نوع گامای عمومی (GGD) است که تحت شرایطی خاص به قانون توان تبدیل می‌شود. پارامترهای GGDبه $\mathscr{R}$ وابسته‌اند و r_2 تأثیر بیشتری بر چگالی شبکه نسبت به r_1 دارد. آنتروپی شانون با افزایش r_2 به صورت خطی کاهش می‌یابد و با r_1 به‌طور ملایم تغییر می‌کند. ساختار شبکه با ضریب خوشه‌بندی، مرکزیت ویژه، مرکزیت نزدیکی و مرکزیت بینابینی مورد تحلیل قرار گرفته که اغلب این معیارها توزیعی دارای قله دارند، در حالی که مرکزیت بینابینی از قانون توان در بازه‌ای از درجات پیروی می‌کند.

Title: Mapping the BTW Sandpile Model to a Complex Network and Analyzing Its Features

Abstract: This paper examines the relationship between self-organized critical (SOC) systems and complex networks. Using a transfer function based on the similarity of local activities and a filtration process with parameters $\mathscr{R} = (r_1, r_2)$, the BTW sandpile model is mapped to a network. The degree distribution of the resulting network follows a generalized Gamma distribution (GGD), which under certain conditions, transforms into a power law. The parameters of the GGD are dependent on $\mathscr{R}$, and r_2 has a greater impact on network density compared to r_1. Shannon entropy decreases linearly with increasing r_2 and changes mildly with r_1. The network structure is analyzed using clustering coefficient, eigenvector centrality, closeness centrality, and betweenness centrality, where most of these measures exhibit peak distributions, while betweenness centrality follows a power law within a range of degrees.

سعیده موسی الرضایی

عنوان: بررسی حرکت سلول‌های کلامیدوموناس در میکرولوله‌های موئین تحت تابش با نور قطبیده

چکیده: این مقاله به بررسی تأثیر تابش نور قطبیده بر حرکت میکروجلبک‌های *کلامیدوموناس* در لوله‌های موئین می‌پردازد. *کلامیدوموناس*، جلبک تک‌سلولی-دو تاژکی است که نسبت به نور واکنش نشان می‌دهد و با استفاده از ویژگی نورگرایی و نیروی خودپیشران مسیر حرکت خود را تنظیم می‌کند. در این مطالعه، سلول‌های*کلامیدوموناس به همراه محیط کشت* در لوله‌های موئین قرار داده می‌شوند و حرکت آنها ابتدا تحت تابش نور سبز با قطبش خطی و در توان‌های تابشی مختلف، سپس تحت تابش همان نور بدون قطبش مورد بررسی قرار می گیرد. مسیر و سرعت حرکت سلول‌ها در دو راستا، یعنی در امتداد لوله موئین و در راستای عمود بر آن، به صورت تجربی اندازه‌گیری و مقایسه شده است. نتایج این بررسی نشان می‌دهد که سلول‌ها در داخل میکرولوله معمولا حرکت تناوبی از خود نشان می‌دهد و به نظر می‌رسد که قطبش نور بر روی رفتار حرکتی سلول‌ها مخصوصا مولفه‌های سرعت داخل میکرولوله تاثیرگذار است.

Title: The effect of polarized light on the velocity of Chlamydomonas cells in capillaries

Abstract: In this article, we study the influence of polarized light and non-polarized light on the motility of Chlamydomonas Reinhardtii[74] (CR) cells within capillaries. This unicellular, biflagellate Chlamydomonas responds to light in different conditions; directed by the phototaxis mechanism in the eyespot and self-propelled flagellate force allowing it to reorient in response to light. The cells are suspended in a TAP medium inside the capillary and exposed to different powers of green light with linear polarization, then under exposure to the same light without polarization. We measure and compare the velocities of CR microswimmers in two directions: parallel and perpendicular to the tube. The results show that polarized light influences the motile manners of cells inside capillaries.

[74] Chlamydomonas Reinhardtii(CR)

عبدالله لنگری

عنوان: سازوکار کیبل-زورک در حضور نویز با رهیافت طیف توان

چکیده: در این مقاله با استفاده از رهیافت طیف توان نویز، به بررسی سازوکار کیبل-زورک در حضور نویز گاوسی پرداخته‌ایم. بدون حضور نویز، با عبور میدان مغناطیسی از نقطه بحرانی سامانه (سیستم)، چگالی برانگیختگی‌های ایجاد شده با کاهش سرعت تغییرات میدان مغناطیسی کاهش می یابد که این فرایند به سازوکار کیبل-زورک معروف است. وجود نویز می‌تواند باعث افزایش برانگیختگی‌های ایجاد شده با وجود کاهش سرعت تغییرات میدان شود. در این مقاله اثرات نویز فلیکر که یک نویز نزدیک به واقعیت است و در سیستم‌های الکترونیکی مشاهده می‌شود را بررسی کرده‌ایم. نشان می‌دهیم که برای این نویزها می‌توان با استفاده از تحلیل طیف توان، ایجاد برانگیختگی‌ها توسط نویز را تحلیل کرد و یک رابطه تحلیلی برای آن‌ها به‌دست آورد.

Title: Kibble-Zurek Mechanism in the Presence of Flicker Noise Using Noise Power Spectrum

Abstract: We study the Kibble-Zurek mechanism (KZM) in the presence of noise using power spectrum of noise. According to KZM, slower quench through critical point, leads to less excitations, while the presence of noise can cause the opposite behavior of this mechanism. We consider flicker noise which is a realistic example of noise, which has been observed in electronic systems. We develop a method using noise power spectrum to analyze number of excitations created due to the noise.

میرفائز میری

عنوان: پراکندگی الکترونها از خوشه نقاط کوانتومی

چکیده: با الهام از پراکندگی می امواج الکترومغناطیسی از خوشه ذرات دی الکتریک به پراکندگی الکترونها از خوشه نقاط کوانتومی می‌پردازیم.

Title: Electron scattering from a cluster of quantum dots

Abstract: Guided by the generalized Mie theory of electromagnetic wave scattering from a cluster of dielectric spheres, we address electron scattering from a cluster of quantum dots.

سید ایمان میرزایی

عنوان: کاربرد اثر مگنتوکالری در خنک سازی در دماهای فوق پایین

چکیده: اثر مگنتوکالری به پدیده ای گفته می شود که در آن بعضی از مواد در اثر قرار گرفتن در میدان مغناطیسی گرما تولید می کنند. به همین ترتیب خارج شدن این مواد از میدان مغناطیسی می تواند منجر به کاهش دمای آنها شود. در این ارائه، پس از توضیح درباره مبانی فیزیکی این پدیده، به کاربردهای آن اشاره خواهد شد. سپس با توجه به افزایش اهمیت فناوری های کوانتومی و نیز فناوری دمای پایین، کاربرد این اثر در دستیابی به دماهای فوق پایین مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

Title: Application of magnetocaloric effect in ultra-low temperature refrigeration

Abstract: Magnetocaloric effect is the generation of heat in some materials as a result of being exposed to magnetic field. The reverse effect (cooling) can be achieved by removal of the field. In this talk, the physics behind this phenomenon will be introduced and then some applications of this effect will be covered. Then, considering the growing interest in quantum technology and low-temperature physics, the application of this effect in achieving ultra-low temperatures will be investigated.

مجتبی مددی‌اصل

عنوان: بازآرایی مغز از طریق شکل‌پذیری: بررسی سازوکارهای بنیادی و مداخلات عصبی

چکیده: نوسانات عصبی که محصول سازوکارهای بنیادی در مغز هستند، با تسهیل ارتباطات عصبی نقش مهمی در عملکردهای مغز مانند حافظه، یادگیری، شناخت، حرکت، توجه، ادراک و احساسات ایفا می‌کنند. اختلال در این نوسانات می‌تواند منجر به بروز گستره وسیعی از بیماری‌های مغز و اعصاب مانند بیماری پارکینسون، صرع، افسردگی، اختلال توجه و اوتیسم شود. درمان دارویی یکی از نقاط برجسته پزشکی نوین بوده است. حال آن که، استفاده از روش‌های غیرتهاجمی تحریک مغز توسط جریان الکتریکی، میدان مغناطیسی یا محرک‌های حسی‌حرکتی برای درمان بیماری‌های مغز و اعصاب در چند سال اخیر بسیار امید بخش بوده است. اما، سازوکارهای نحوه تاثیر تحریک خارجی بر روی شبکه‌های عصبی مغز به خوبی مشخص نیست. شکل‌پذیری یا توانایی مغز در بازتنظیم فعالیت و بازآرایی ارتباطات عصبی یکی از ویژگی‌های کاربردی مغز است. دست‌کاری خارجی این خاصیت نه تنها می‌تواند عملکردهای مغز سالم را ارتقا دهد، بلکه امکان بهبودی بیماران را نیز فراهم می‌کند. در این بین، مدل‌سازی‌های عصبی با الهام از سازوکارهای بنیادی مغز در کنار آزمایش‌های تجربی بر روی انسان یا مدل‌های حیوانی می‌توانند راه‌گشا باشند. در این سخنرانی، تلاش می‌کنم نشان دهم که چگونه برخی مفاهیم بنیادی و خاصیت شکل‌پذیری می‌توانند اثرات متنوع تحریک الکتریکی بر روی شبکه‌های عصبی مغز را توضیح دهند و به صورت هدفمند، تغییرات بلندمدت ایجاد کنند. از این روی، توسعه روش‌های درمانی تحریک مغزی و درک سازوکارهای تاثیر آن‌ها بر روی شبکه‌های عصبی نیازمند همگرایی بیشتری در مطالعات تجربی از یک سو و مدل‌سازی‌های نظری و محاسباتی از سوی دیگر است.

Title: Rewiring the Brain through Plasticity: From Neurotheory to Neuromodulation

Abstract: Neural oscillations, which are the result of fundamental mechanisms in the brain, play a crucial role in various brain functions such as memory, learning, cognition, movement, attention, perception, and emotions by facilitating neural communication. Disruptions in these oscillations can lead to a wide range of neurological disorders, including Parkinson's disease, epilepsy, depression, attention deficits, and autism. Pharmacological treatments have been the cornerstone of modern medicine. However, the use of non-invasive brain stimulation techniques through electrical currents, magnetic fields, or sensory stimuli for the treatment of brain disorders has shown great promise in recent years. Nevertheless, the mechanisms by which external stimulation affects neural networks in the brain are not yet well understood. Neuroplasticity, or the brain's ability to reorganize activity and rewire neural connections, is one of its essential characteristics. External manipulation of plasticity cannot only enhance the functions of a healthy brain but also facilitate the recovery of patients. In this context, neural modeling inspired by the brain's fundamental

mechanisms, alongside experimental studies on humans or animal models, can be instrumental. In this presentation, I will demonstrate how certain fundamental concepts and plasticity can elucidate the diverse effects of electrical stimulation on neural networks and systematically create long-term therapeutic effects. Therefore, the development and optimization of brain stimulation methods, as well as the understanding of their mechanisms of action on neural networks, necessitate greater convergence in experimental studies and theoretical and computational modelin

زهرا شمالی

عنوان: مواد دوبعدی؛ راه‌حلی نوین برای برداشت انرژی و بهینه‌سازی مدیریت حرارتی

چکیده: با ادامه‌ی روند مینیاتورسازی قطعات الکترونیکی، مدیریت حرارتی مؤثر به عاملی کلیدی در تضمین قابلیت اطمینان و عملکرد دستگاه‌های نانوالکترونیکی تبدیل شده است. عملکرد ترانزیستورهای نسل جدید، که امروزه به‌طور گسترده در فناوری‌های دیجیتال نظیر لپ‌تاپ‌ها، تبلت‌ها و تلفن‌های همراه به‌کار می‌روند، به‌شدت به رفتار حرارتی آن‌ها وابسته است. در این زمینه وجود نقاط داغ موضعی، استراتژی‌های خنک‌سازی را تعیین می‌کنند و بر طراحی پکیجینگ‌های الکترونیکی، انتخاب مواد، و طراحی پخش‌کننده‌ی حرارت تأثیر می‌گذارد. با افزایش چگالی توان، در صورت دفع ناکارآمد گرما، پدیده‌هایی مانند افت عملکرد گرمایی یا حتی خرابی دائمی دستگاه ممکن است رخ دهد. به همین دلیل، استفاده از موادی که بتوانند افزایش دمای موضعی را به حداقل برسانند، به‌ویژه در مقیاس نانو، اهمیت زیادی دارد. در بین گزینه‌های جدید، مواد دوبعدی به دلیل خواص حرارتی مطلوب‌شان، ظرفیت بالایی برای پخش مؤثر گرما و حفظ پایداری حرارتی در تراشه‌ها دارند. در کنار این، مواد دوبعدی در حوزه‌ی برداشت انرژی گرمایی نیز نقش بسیار امیدبخشی پیدا کرده‌اند. با توجه به نیاز فزاینده به کاهش وابستگی به منابع انرژی فسیلی و هسته‌ای، راهکارهای تجدیدپذیر بیش از پیش اهمیت یافته‌اند. ژنراتورهای ترموالکتریک، با تبدیل مستقیم گرادیان دما به انرژی الکتریکی از طریق اثر سیبک، و بالعکس اثر پلتیر، گزینه‌ای مناسب برای بازیابی انرژی گرمایی تلف‌شده هستند. تمرکز پژوهش‌های اخیر بر بهبود بازده ترموالکتریک از طریق افزایش ضریب شایستگی (zT) بوده و در این میان، مواد دوبعدی به‌خاطر ویژگی‌های منحصربه‌فرد الکترونی و گرمایی‌شان، بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. این مواد توان آن را دارند که هم در بهینه‌سازی مدیریت حرارتی دستگاه‌های الکترونیکی پیشرفته و هم در تولید پایدار انرژی نقش دوگانه‌ای ایفا کنند .در این سمینار، به معرفی نتایج تحقیقات خود در زمینه‌ی طراحی ترانزیستورهای کم‌مصرف مبتنی بر ساختارهای دوبعدی و توسعه‌ی ژنراتورهای ترموالکتریک با راندمان بالا برای برداشت مؤثر انرژی خواهیم پرداخت. تمرکز ما بر این خواهد بود که چگونه این مواد نوین می‌توانند به‌طور همزمان به دو چالش کلیدی—یعنی مدیریت گرما در نانوالکترونیک و تولید انرژی پایدار—پاسخ دهند.

Title: 2D Materials as Dual Solutions for Thermoelectric Energy Harvesting and Thermal Management

Abstract: With the continuous miniaturization of electronic components, effective thermal management has become critical to ensuring the reliability and performance of nano-electronic devices. The functionality of new-generation transistors, now widely used in digital technologies such as laptops, tablets, and

smartphones, heavily depends on their thermal behavior. The presence of localized hotspots—not average die temperature—governs the required cooling strategies, influencing packaging, material selection, and heat spreader design. As power density increases, inefficient heat dissipation may lead to thermal throttling or even irreversible failure. Consequently, materials capable of minimizing peak temperature rise are of great interest, particularly those that can replace traditional silicon in nano-devices. Among these, 2D materials offer promising thermal properties for spreading heat efficiently and maintaining device stability under increasing computational loads. Simultaneously, 2D materials have emerged as strong candidates for energy harvesting through thermoelectric generation. With growing urgency to reduce reliance on fossil and nuclear resources, renewable energy alternatives have become vital. Thermoelectric generators (TEGs), which convert temperature gradients directly into electrical power via the Seebeck effect—and in reverse operate through the Peltier effect—represent a sustainable solution to recover waste heat. Research into enhancing thermoelectric efficiency focuses on increasing the figure of merit (zT), and low-dimensional materials, particularly 2D materials, have shown significant promise due to their unique electronic and thermal transport properties. Thus, 2D materials are positioned as dual-purpose solutions—enabling both efficient thermal management in advanced electronics and sustainable thermoelectric energy harvesting systems. In this seminar, we will present our findings on ultra-low-power, energy-efficient field-effect transistors (FETs) based on structures of two-dimensional (2D) semiconductors, as well as high-performance thermoelectric generators (TEGs) designed for efficient energy harvesting. The focus will be on how these novel 2D materials can address the dual challenges of thermal management in nano-electronics and sustainable energy generation.

میروحید حسینی

عنوان: ویژگی‌های توپولوژیکی شبکه‌های دوپارش شده با ابعاد پایین

چکیده: در این ارائه، به بررسی ویژگی‌های توپولوژیکی شبکه‌های دوپارش شده با ابعاد پایین می‌پردازیم، که شامل زنجیره‌های یک‌بعدی و شبکه‌های دوبعدی با انرژی های هاپینگ متناوب می‌شود. با تمرکز بر مدل‌هایی مشابه مدل سو–شیفر–شریفر–هیگر، ظهور فازهای توپولوژیکی با ناورداهای کوانتیده و حالتهای لبه‌ای مقاوم را مورد بررسی قرار می‌دهیم. در این سخنرانی به تحلیل ساختار باند، حالت‌های لبه‌ای و گذارهای فاز توپولوژیکی پرداخته و نقش دوپارش شدگی شبکه در پایداری و بروز فازهای توپولوژیکی محافظت‌شده توسط تقارن برجسته خواهد شد. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که تغییرات ساده در ساختار شبکه می‌تواند منجر به ظهور پدیده‌های توپولوژیکی غیر بدیهی با کاربردهای بالقوه در دستگاه‌های کوانتومی گردد.

Title: Topological Properties of Low-Dimensional Dimerized Lattices

Abstract: In this presentation, we investigate the topological properties of low-dimensional dimerized lattices, which include one-dimensional chains and two-dimensional lattice structures with alternating hopping energies. Focusing on models analogous to the Su-Schrieffer-Heeger model, we explore the emergence of topological phases, characterized by quantized invariants and the presence of robust edge states. The discussion will cover the band structure, edge modes, and topological phase transitions, emphasizing how lattice dimerization influences the stability and manifestation of symmetry-protected topological phases. Our results shed light on how simple modifications in the lattice structure can lead to nontrivial topological phenomena with potential applications in quantum devices.

جهانفر ابویی

عنوان: سردسازی القایی مایکروویو در نقاط کوانتومی دوگانه: کاهش نویز حرارتی اطراف کیوبیت‌های اسپینی

چکیده: در محاسبات کوانتومی قابل اعتماد کیوبیت‌ها با زمان‌های همدوسی طولانی ضروری هستند، زیرا برهمکنش‌های محیطی–مانند فونون‌ها– می‌توانند باعث ناهمدوسی شوند. برای کاهش این اثرات و حفظ همدوسی کیوبیت، از تکنیک‌های سردسازی برای کاهش نویزهای حرارتی اطراف کیوبیت استفاده می‌شود. در این ارائه، ابتدا کیوبیت‌های اسپینی نقطه کوانتومی و چگونگی تأثیر عوامل محیطی بر همدوسی آنها را بررسی خواهم کرد. سپس، راهبرد (استراتژی) های مختلف سردسازی را مرور می‌کنم و در نهایت به بحث در مورد سردسازی مایکروویو با استفاده از یک نقطه کوانتومی دوگانه می‌پردازم که می‌تواند به دمای کیوبیت در حدود میکروکلوین دست یابد [۱].

در سیستم‌های سردکننده به طور کلی، همبستگی‌های کوانتومی و درهم‌تنیدگی در ویژه حالت‌های هامیلتونی می‌تواند بر دستیابی به دماهای مطلوب تأثیر منفی بگذارد. به عنوان مثال، در سیستم‌های سردکننده اسپین–ستاره، برهمکنش هایزنبرگ بین یک اسپین مرکزی و کیوبیت‌های اطراف شامل یک مؤلفه عرضی است که منجر به درهم‌تنیدگی بین کیوبیت‌های مرکزی و اطراف می‌شود. این تولید درهم‌تنیدگی برای فرآیند سردسازی مضر است [۲]. برعکس، وقتی برهمکنشها از مدل آیزینگ پیروی می‌کنند، حالت پایه و تمام حالت‌های برانگیخته سیستم حالتها ضربی با درهم تنیدگی صفر هستند و درنتیجه حداقل دمای قابل دستیابی در مدل آیزینگ کمتر از مدل هایزنبرگ است. در بخش دوم سخنرانی‌ام، در مورد اثرات برهمکنش‌های تبادلی مختلف بین کیوبیت‌ها بر درهم‌تنیدگی کیوبیت‌های اسپینی در نقاط کوانتومی بحث خواهم کرد [۳].

مراجع

[1] D. Vashaee, and J. Abouie, "*Microwave-induced cooling in double quantum dots: Achieving millikelvin temperatures to reduce thermal noise around spin qubits*", Phys. Rev. B **111**, 014305 (2025).

[2] O. Arisoy and O. E. Mustecaplioglu, "*Few-qubit quantum refrigerator for cooling a multi-qubit system*", Sci. Rep. 11, 12981 (2021).

[3] J. Abouie, and D. Vashaee, "*Entanglement in Quantum Dots: Insights from Dynamic Susceptibility and Quantum Fisher Information*", Adv. Quantum Technol., 2400117 (2024).

Title: Microwave-induced Cooling in Double Quantum Dots: Reducing Thermal Noise around Spin Qubits

Abstract: Qubits with extended coherence times are essential for reliable quantum computation, as environmental interactions-such as phonons-can cause decoherence over short timescales. To mitigate these effects and preserve qubit coherence, cooling techniques are employed to reduce thermal noise around spin qubits. In this presentation, I will first review quantum dot spin qubits and examine how environment influences their coherence. Subsequently, I will explore some cooling strategies, culminating in a discussion of microwave cooling using a double quantum dot, which can achieve qubit temperatures on the order of microkelvins-thereby significantly enhancing coherence times
[1].
Regarding cooling systems in general, quantum correlations and entanglement in the eigenstates of the Hamiltonian can negatively impact the achievement of desired temperatures. For instance, in spin-star cooling systems, the Heisenberg interaction between a central spin and surrounding ancilla qubits includes a transverse component, leading to entanglement between the central and ancilla qubits. This entanglement generation is detrimental to the cooling process [2]. Conversely, when qubit interactions follow the Ising model, the ground state and all excited states of the spin-star system are factorized, resulting in negligible entanglement. Consequently, the minimum achievable temperature in the Ising model is lower than that in the Heisenberg model. In the second part of my talk, I will discuss the effects of different exchange interactions between qubits on entanglement in spin qubits [3].

References

[1] D. Vashaee, and J. Abouie, "*Microwave-induced cooling in double quantum dots: Achieving millikelvin temperatures to reduce thermal noise around spin qubits*", Phys. Rev. B **111**, 014305 (2025).

[2] O. Arisoy and O. E. Mustecaplioglu, "*Few-qubit quantum refrigerator for cooling a multi-qubit system*", Sci. Rep. 11, 12981 (2021).

[3] J. Abouie, and D. Vashaee, "*Entanglement in Quantum Dots: Insights from Dynamic Susceptibility and Quantum Fisher Information*", Adv. Quantum Technol., 2400117 (2024).

ابوالفضل رمضان‌پور

عنوان: بهینه سازی با یک الگوریتم تقویت شده ی کوانتومی

چکیده: استفاده از یک مسیر مناسب در الگوریتم های سرمایش کوانتومی نقش کلیدی در پیدا کردن جواب‌های تقریبی خوب در مساله های بهینه سازی سخت دارد. یکی از استراتژی های مورد استفاده برای دور زدن گپ انرژی‌های خیلی کوچک در این مسا له ها تقویت الگوریتم کوانتومی است. ما از اطلاعات موجود در یک تابع انتروپی موضعی در فضای آرایش های سیستم برای تقویت الگوریتم سرمایش کوانتومی استفاده میکنیم. کارایی این الگوریتم تقویت شده را در چند مساله ی بهینه سازی که از نظر محاسباتی آسان یا سخت هستند را بررسی میکنیم.

Title: Optimization by a Reinforced Quantum Algorithm

Abstract: Providing an optimal path to a quantum annealing algorithm is key to find good approximate solutions to computationally hard optimization problems. Reinforcement is one of the strategies that can be used to circumvent the exponentially small energy gaps of the system in the annealing process. We take a local entropy in the configuration space for the reinforcement and apply the algorithm to a number of easy and hard optimization problems.

شاهپور سعیدیان

عنوان: مطالعه عوامل موثر بر دقت اندازه‌گیری فاز در حضور اتلاف با استفاده از مدار کوانتومی

چکیده: اهمیت اندازه‌گیری در فیزیک بر کسی پوشیده نیست. یکی از مهم‌ترین مباحث در اندازه‌گیری دقت آن است. دقت اندازه‌گیری به عوامل مختلفی بستگی دارد که از آن جمله می‌توان به کیفیت دستگاه اندازه‌گیری، تعداد ریسورس‌ها، حالت ریسورس بکار رفته و نیز نوع عملگر اندازه‌گیری اشاره کرد. با این حال قوانین بنیادی کوانتوم یک محدودیت ذاتی روی دقت اندازه‌گیری اعمال می‌کنند به طوری که هیچ‌گاه نمی‌توان خطای اندازه‌گیری را به صفر رساند. امروزه برای اندازه گیری‌های دقیق به روش‌ها و ابزارهای جدید (فناوری جدید) نیاز داریم. مترولوژی کوانتومی از ویژگی های کوانتومی مانند برهم نهی و درهم تنیدگی برای دستیابی به دقت‌های مورد نیاز استفاده می‌کند. ثابت شده است که استفاده از حالت‌های غیرکلاسیک می‌تواند دقت اندازه‌گیری را به مقدار زیادی بهبود ببخشد. یکی از مهم‌ترین دستگاه‌های اندازه‌گیری تداخل‌سنج‌ها هستند. تداخل‌سنج‌ها ابزار مناسبی برای اندازه‌گیری اختلاف فاز و سنجش کمیت‌های مرتبط با آن مانند طول و غیره هستند. یک مورد مشهور رصدخانه لایگو است که با استفاده از تداخل‌سنج لیزری امواج گرانش را آشکار می‌کند. در این سخنرانی ضمن معرفی دو حد مختلف برای اندازه‌گیری فاز، روشی برای شبیه‌سازی تداخل‌سنج با استفاده از مدارهای کوانتومی را پیشنهاد می‌کنیم. با این روش اختلاف فاز درون یک تداخل‌سنج را در حضور اتلاف مطالعه می‌کنیم. حالت‌های مختلف کوانتومی و عملگرهای مختلف اندازه‌گیری را بررسی کرده و دقت آنها را در اندازه‌گیری فاز با هم مقایسه می‌کنیم.

Title: Invastigation of factors affecting phase measurement precision in the prasence of losses using quantum circuits

Abstract: The importance of measurement in physics is well known. One of the most important issues in measurement is its precision which depends on various factors, including the quality of the measuring devices, the number of particles used, the state of the employed particles, and the type of measurement operator. However, the fundamental laws of quantum mechanics impose an inherent limit on measurement precision, making it impossible to reduce the measurement error to zero. High-precision measurements require novel methods and tools (new technologies). Quantum metrology leverages quantum features such as superposition and entanglement to achieve the required precision. It has been proven that non-classical states can significantly enhance measurement accuracy. Among the most important measuring devices are interferometers, which are ideal tools for measuring phase differences and related quantities such as length, etc. A prominent example is the LIGO observatory, which detects gravitational waves using laser interferometry. In this talk, we introduce two different limits for phase measurement and propose a method for simulating an interferometer using quantum circuits. With this method, we study the phase difference

within an interferometer in the presence of loss. We examine various quantum states and measurement operators and compare their accuracy in phase measurement.

فرهاد شهبازی

عنوان: همگامی نوسانگرهای فاز چرخدار در مدل کوراموتوی مرتبه‌ی دو

چکیده: همگام‌سازی به فعالیت هماهنگ چندین عامل اشاره دارد که سامانه‌ها را قادر می‌سازد تا به طور منسجم عمل کنند. همگامی کاربردهای متعددی در حوزه‌های مختلف از جمله زیست‌شناسی، فناوری و سیستم‌های اجتماعی دارد. مدل کوراموتو که توسط یوشیکی کوراموتو توسعه یافته است، گروهی از نوسانگرهای فاز را توصیف می‌کند که از طریق سینوس اختلاف فازشان با هم در برهمکنش هستند. ما اثر تأخیر زمانی را بر روی دو نوسانگر فاز جفت‌شده در نوسانگرهای فاز یکسان در یک شبکه حلقه، با استفاده از مدل کوراموتوی مرتبه‌ی دو بررسی می‌کنیم. این تحقیق مربوط به شبکه‌های دنیای واقعی است که تحت تأثیر محدودیت‌های سرعت انتقال سیگنال قرار دارد. درمطالعه دو نوسانگر جفت شده، متوجه شدیم که تأخیر زمانی می‌تواند منجر به پایداری چندگانه در جواب‌های قفل‌شده فاز شود، که با افزایش اینرسی، پایداری آنها کاهش می‌یابد. علاوه بر این، جواب‌های غیرقفل‌شده بسته به مقدار اینرسی و تأخیر زمانی، رفتارهای تناوبی و آشوبناک از خود نشان می‌دهند. نتایج تحلیلی و عددی ما برای شبکه ای از نوسانگرهای فاز یکسان، رفتارهای متنوعی را در رژیم‌های تاخیر زمانی مختلف، از جمله حالت های کاملاً همگام، الگوهای مارپیچی، حالتهای ناهمگام و قفل فاز تصادفی نشان می‌دهند. بین مناطق همگام ممکن و همگام ممنوع، حالت‌های کیمرا را مشاهده می‌کنیم که با همزیستی مجموعه ای از نوسانگرهای همگام و غیر همگام مشخص می‌شوند ما نوع این حالتهای کیمرا را متلاطم-رونده تعیین کردیم.

Title: Synchronization of massive phase oscillators in the second-order Kuramoto model

Abstract: Synchronization refers to the coordinated activity of multiple agents, enabling systems to function cohesively across various domains, including biology, technology, and social systems. The Kuramoto model, developed by Yoshiki Kuramoto, describes a group of phase oscillators that are interconnected through the sine of their phase differences. We present the effect of time delay on two coupled phase oscillators and an array of identical oscillators in a ring network, using the second-order Kuramoto model. This research is relevant to real-world networks affected by signal transmission speed constraints. In the study of two coupled oscillators, we found that time delay can lead to multistability in phase-locked solutions, which become less stable with increased inertia. Additionally, non-phase-locked solutions exhibit periodic and chaotic behaviors depending on inertia and time delay. Our analytical and numerical results for a network of identical phase oscillators show varied synchronization behaviors across

different time delay regimes, including fully synchronized states, helical patterns, incoherent states, and random phase-locking. Between the synchrony-possible and synchrony-forbidden zones, we observe Chimera states, characterized by the coexistence of synchronized and unsynchronized dynamics. We identified the type of the Chimera states as moving-turbulent.