بررسی چگالی حالت الکترونی(DOS) اربیتالهای s و p فلوئور(F) و کلسیم(Ca) در ترکیب دزیمتر ترمولومینسانس کلسیم فلوراید(CaF_2)

مهدی غلام‌پور*[۱و۳]، لیلا شکاری[۲]، علی رضا معینی[۳] ، پروفسور جعفر قیصری[۳]
[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه افسری امام علی(ع)(تهران)
[۲]گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس(تهران)
[۳] دانشکده فیزیک، ، دانشگاه یزد(یزد

چکیده

*در این پژوهش ترکیب کلسیم فلوراید (CaF_2) توسط کد کامپیوتری **Wien2k** شبیه سازی شد و چگالی حالات الکترونی[۴] (DOS) اربیتالهای s، p و کل اتم فلوئور و کلسیم را در ملکول کلسیم فلورایدمورد بررسی قرار گرفت. نمودارهای بدست آمده نشان می‌دهد که در ملکول کلسیم فلوراید چگالی حالت الکترونی (DOS) مقید به هسته، از اتم فلوئور بیشتر تاثیر پذیرفته و چگالی حالت الکترونها در مدار ظرفیت یا رسانایی بیشترتحت تاثیر اتم کلسیم قرار گرفته است. اربیتالهای s و p شبیه سازی شده نشان می‌دهد که چگالی الکترونی اربیتال p اتم فلوئور و چگالی الکترونی اربیتال s اتم کلسیم در چگالی حالت الکترونی کلی ملکول کلسیم فلوراید تاثیر گذار است. به علت وجود چگالی الکترونی منظم در ترکیب کلسیم فلوراید است که به عنوان دزیمتر ترمولومینسانس می‌توان از آن استفاده کرد. در این پژوهش منحنی درخشندگی ناشی از دز جذبی 1Gy از پرتو گاما (کبالت) آنالیز شده و با انرژی بدست آمده از نرم افزار مورد بررسی قرار گرفتند، مشاهده شد که با هم کطابقت دارند.*

کلمات کلیدی: کلسیم فلوراید، دزیمتر ترمولومینسانس، چگالی حالت الکترونی، اربیتال s,p

[4] Density Of State

مقدمه

کلسیم فلوراید به علت ساختار شبکه‌ای باز به عنوان دزیمتر ترمولومینسانس[5] برای سنجش دز جذبی ناشی از پرتو گاما، الکترون و بتا استفاده می‌شود[1,2]. ساختار الکترونی بعضی از مواد مانند $ErSi_{(2-x)}$ توسط کد Wien2k ترسیم شده است[3] . در مقاله‌ای چگالی الکترونی YMn_2H_x نیز ترسیم شده است و تغییر چگالی الکترونی را با تغییر هیدروژن مورد بررسی قرار داده است[4]. رسانایی الکتریکی Bi_2Te_3 را نیز به کمک ساختار الکترونی این ماده مورد تحقیق قرار گرفته است[5]. با توجه به تحقیقات انجام شده تاکنون شبیه سازی ساختار الکترونی اربیتالهای s و p کلسیم فلوراید مطلبی ارائه نشده است منحنی‌های درخشندگی ناشی از دز جذبی توسط کلسیم فلوراید با چگالی حالت الکترونی(DOS) کاملا قابل توجیه است. در این پژوهش چگالی حالت الکترونی اربیتالهای s و p اتم فلوئور و کلسیم شبیه سازی شده و تاثیر چگالی حالت الکترونها در مدارهای ظرفیت، رسانایی و مقید به هسته (زیر تراز فرمی) در ترکیب کلسیم فلوراید مورد تحقیق قرار گرفته است.

*mahdi.gholampoor@gmail.com

روش کار

چگالی حالت الکترونی و اربیتالهای s و p ترکیب کلسیم فلوراید توسط کامپیوتر به روش موج تقویت شده خطی[6] (LAPW) با تقریب GGA شبیه سازی شد. بلور کلسیم فلوراید در گروه فضایی Fm-3m قرار دارد. نقش الکترون‌های هر اتم در ترکیب کلسیم فلوراید مورد بررسی قرار گرفت. این نرم افزار قابلیت های بسیار مفیدی را در زمینه محاسبه خصوصیات فیزیکی سیستم های کریستالی دارد و در آن تقریب های مورد نیاز گنجانده شده که می توان با توجه به نوع مساله مورد استفاده قرار داد..

نتایج و شبیه سازی

نتیجه‌ی محاسباتی که توسط کامپیوتر انجام شده است، نشان می دهد که حالات الکترونی اربیتال s، p و کل هر اتم یا ترکیب سه دسته تقسیم می شوند:

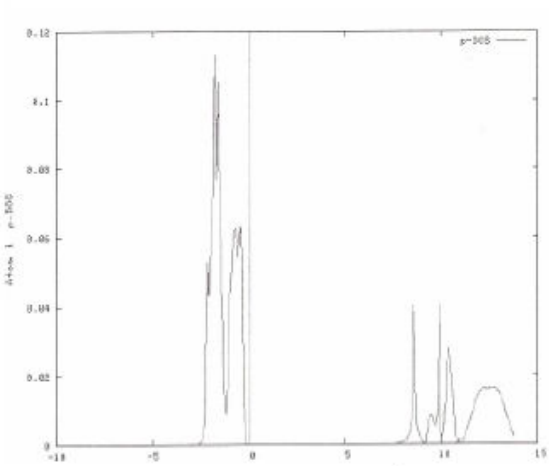
۱- چگالی حالات الکترون های باند رسانایی
۲- چگالی حالات الکترون های باند ظرفیت
۳- چگالی حالات الکترون های در قید هسته

در شکل ۱ و ۲ به ترتیب چگالی حالت الکترونی اربیتال p و s اتم کلسیم در ترکیب کلسیم فلوراید را نشان داده شده است. که محور افقی برحسب انرژی (eV) و محور عمودی چگالی حالت الکترونها در اربیتال

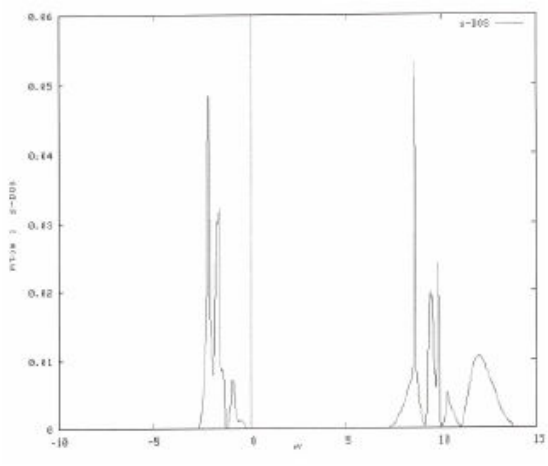
[5] ThemoLuminescence Dosimeter

[6] Linearized Augmented Plane Wave

مربوطه است. نقطه صفر در محور افقی سطح انرژی فرمی E_f با مقدار ۰۷۵۷۰Ry/. است که تمام چگالی حالتها به آن به صفر کالیبره شده‌اند. زیر سطح فرمی را الکترونهای مقید به هسته تشکیل می‌دهند و بالاتر از آن را الکترونهای مدار ظرفیت و رسانایی. انرژی کل ترکیب کلسیم فلوراید محاسبه شده توسط کامپیوتر ۱۷۶۰/۹۱۲۸۹۶Ry– تخمین زده شده است (در تمامی شکلها به بازه محور عمودی توجه کنید).

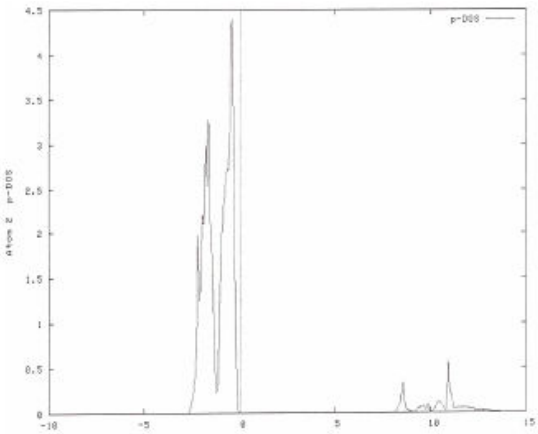


شکل۱ :چگالی حالت الکترونی اربیتال p اتم کلسیم درترکیب کلسیم فلوراید.

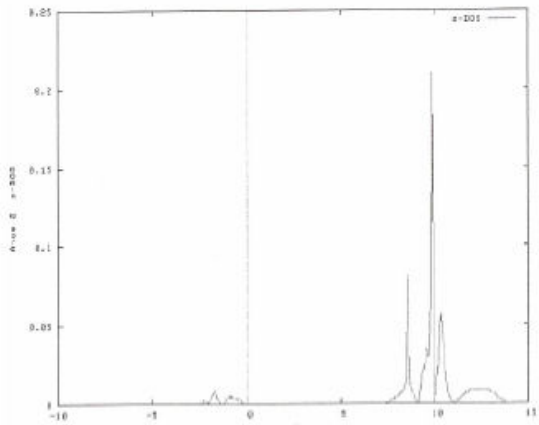


شکل۲ : چگالی حالت الکترونی اربیتال s اتم کلسیم در ترکیب کلسیم فلوراید.

در شکل ۳ و۴ نیز چگالی الکترونی اربیتالهای p و s اتم فلوئور در کلسیم فلوراید را نشان می‌دهد.

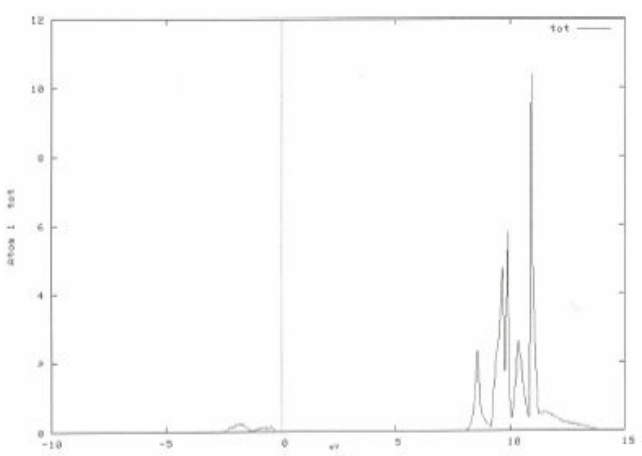


شکل ۳ : چگالی حالت الکترونی اربیتال p اتم فلوئور در ترکیب کلسیم فلوراید.

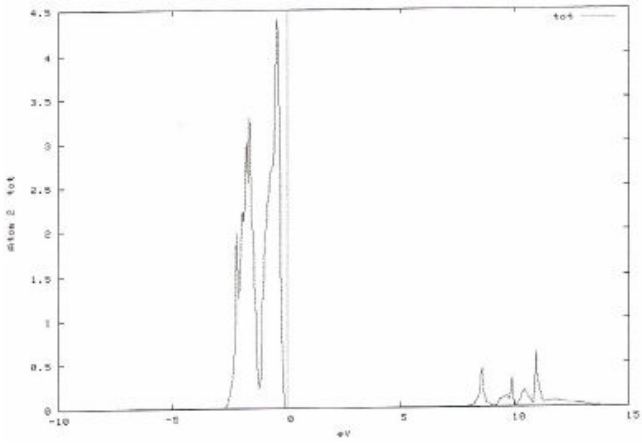


شکل۴ : چگالی حالت الکترونی اربیتال s اتم فلوئور در ترکیب کلسیم فلوراید.

با توجه به نمودارهای مذکور و شکل ۵ و ۶ که چگالی حالت الکترون کلی اتم کلسیم و فلوئور را در ترکیب کلسیم فلوراید، مشاهده می‌شود که میزان تاثیر اربیتال s اتم کلسیم و اربیتال p اتم فلوئور به مراتب خیلی بیشتر از اربیتال دیگر در چگالی حالت الکترونی کلی هرکدام از اتمها دارد.



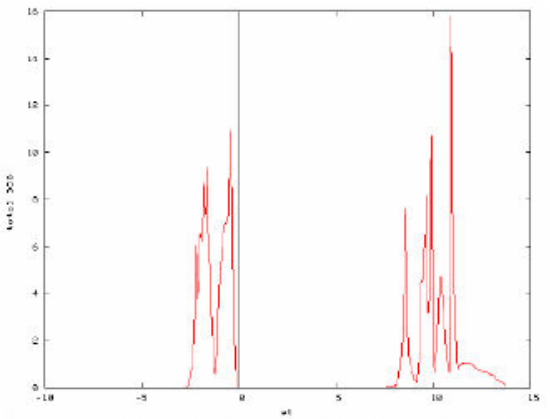
شکل۵ : چگالی حالت الکترونی اتم کلسیم در ترکیب کلسیم فلوراید.



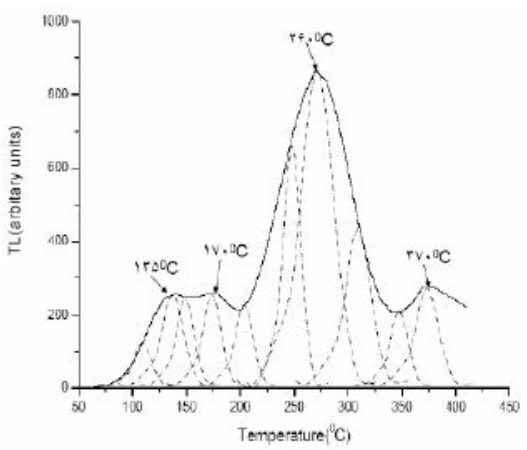
شکل۶ : چگالی حالت الکترونی کلی اتم فلوئور در ترکیب کلسیم فلوراید.

با توجه به شکل ۷ که چگالی حالت کلی ترکیب کلسیم فلوراید است به راحتی می‌توان شدت اثر گذاری اربیتالهای هراتم را بررسی نمود به این ترتیب اربیتال s اتم کلسیم واربیتال p اتم فلوئور بیشترین تاثیر را در چگالی حالت الکتردنها در ترکیب کلسیم فلوراید نشان داده است. با مقایسه چگالی الکترونی بلور کلسیم با دیگر بلورهای بررسی شده [3,4,5] به راحتی ارتفاع قله‌های آنالیز شده قابل مشاهده است[6] به همین علت است که از کلسیم فلوراید به عنوان دزیمتر ترمولومینسانس در سنجش دز جذبی پرتوها استفاده می‌شود. می-توان با توجه به این نکته انرژی‌های کسیلی از باز ترکیب الکترونها با حفره در زمان از مدار رسانایی به مدار

ظرفیت را محاسبه نمود. بیشترین انرژی گسیلی از الکترونهای موجود در مدار ظرفیت و رسانایی حدود ۲/۵eV است،



شکل۷ : چگالی حالت الکترونی کلی کلسیم فلوراید.

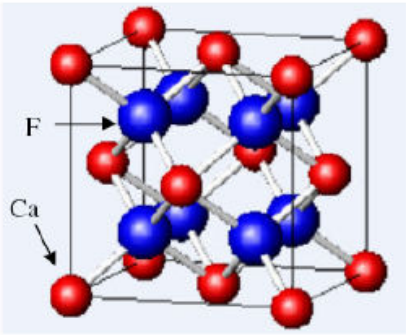


شکل۸: منحنی درخشندگی دزیمتر ترمولومینسانس کلسیم فلوراید بعد از جذب ۱Gy از چشمه کبالت[6].

که اگر به الکترونهای مقید به هسته بیش از ۷ eV داده شود به مدار رسانایی و ظرفیت برانگیخته می‌شوند. ساختار ارتورمبیک ترکیب کلسیم فلوراید که توسط Wien2k شبیه سازی شده، به صورت شکل ۹ است. مقادیر انرژی گسیل شده (باند انرژی) در جدول بطور دقیق برابر با تعداد قله‌های درخشندگی آنالیز شده است که نتیجه را تایید می‌کند.

جدول ۱: انرژی‌های بدست آمده از چگالی حالت الکترونی کلسیم[6].

انرژی تراز(eV)	۸/۶	۹/۷۳	۹/۹۳	۱۰/۴	۱۱
۸/۶	۰	۱/۱۳	۱/۳۳	۱/۸	۲/۴
۹/۷۳	۱/۱۳	۰	۰/۲	۰/۶۷	۱/۲
۹/۹۳	۱/۳۳	۰/۲	۰	۰/۴۷	۱/۰۷
۱۰/۴	۱/۸	۰/۶۷	۰/۴۷	۰	۰/۶
۱۱	۲/۴	۱/۲	۱/۰۷	۰/۶	۰



شکل ۹ : ساختار ارتورمبیک کلسیم فلوراید.

نتیجه گیری

نمودارهای ارائه شده.نشان می‌دهد که چگالی حالت الکترونی اتم کلسیم در مدارهای ظرفیت و رسانایی و چگالی حالت الکترونی اتم فلوئور در الکترونهای مقید به هسته ترکیب کلسیم فلوراید بیشترین تاثیر را داشته‌اند. با توجه به منظم و جدا بودن قله‌های الکترونی، انرژی الکترونهای گسیلی از کلسیم فلوراید به

عنوان دزیمتر ترمولومینسانس استفاده می‌شود. انرژی‌های محاسبه شده ترکیب کلسیم فلوراید توسط نرم افزار با منحنی درخشندگی این دزیمتر مطابقت کامل دارد.

سپاسگزاری

از همکاری آقای مهندس غلامحسین شکاری وخانم مهندس منیر خواجه‌حسینی صمیمانه تشکر می‌کنیم.

مرجع‌ها

[۱] S.W.S.McKEEVER, M. MOSCIVITCH, P.D.TOWNSEND, "THERMOLUMINESCENCE DOSIMETRY MATERIALS: PROPERTIES AND USES", Nuclear Technology Publishing, ashford,kent, (1995)74-79,109-111.

[۲] غلام‌پورمهدی، معینی‌علیرضا، جعفرقیصری، غضنفرمیرجلیلی، لیلاشکاری ، "ساخت دزیمتر ترمولومینسانس کلسیم فلوراید ئ بررسی منحنی درخشندگی،حساسیت و تاثیر ناخالصی Dy درآن" ، *کنفرانس‌هسته‌ای‌ایرن* ۱۳۸۵، صفحه ۶۰.

[۳] E. Duverger, F. Palmino,E. Ehret,J.-C. Labrune “Investigation of the geometric and electronic structures of ErSi(2_x) with the density functional theory and comparison with STM images”, Surface Science 595 (2005) 40–48.

[٤] S. Osuchowski, H. Figiel, A. Paja “Electronic density of states of YMn2Hx compounds”, Journal of Alloys and Compounds xxx (2007) xxx–xxx.

[٥] R. Sathyamoorthy, J. Dheepa, A. Subbarayan “ Electrical conduction studies on Bi2Te3 thin films” Journal of Crystal Growth 281 (2005) 563–570.

[۶] غلام‌پورمهدی، لیلاشکاری، معینی‌علیرضا،"آنالیز منحنی درخشندگی با چگالی حالت الکترونی(DOS) دزیمتر ترمولومینسانس کلسیم فلوراید"، سیزدهمین گردهمایی ماده چگال مرکز تحصیلات تکمیلی زنجان خرداد ۱۳۸۶، صفحه ۲۳۹– ۲۴۳.