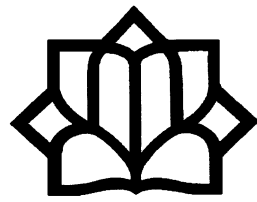


بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ  
الْحَمْدُ لِلَّهِ الَّذِي  
خَلَقَ السَّمَوَاتِ وَالْأَرْضَ  
وَالَّذِي جَعَلَ الْمَوْتَ  
وَالْحَيَاةَ وَالَّذِي  
يَعْلَمُ الْغُيُوبَ  
يَا أَيُّهَا النَّبِيُّ  
صَلِّ عَلَى مُحَمَّدٍ  
وَالْحَقُّ عَلَى آلِهِ  
وَأَقْبَلِ الْبَرَكَاتِ  
وَالْحَمْدُ لِلَّهِ



دانشگاه کاشان

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

**پایان نامه**

جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

در رشته فیزیک - حالت جامد

**عنوان**

بررسی انتقال فاز ساختاری در YBCO در مدل

**ASYNNNI**

**استاد راهنما**

دکتر بهرام خوشنویسان

**به وسیله**

سمیه بهشتی

اسفند ۸۴

## باسمه تعالی



تاریخ:

شماره:

پیوست:

شماره دانشجویی: ۸۲۱۷۹۰۰۱

نام و نام خانوادگی دانشجو: سمیه بهشتی

دانشکده: علوم

رشته: فیزیک

عنوان پایان نامه: بررسی انتقال فاز ساختاردر YBCO در مدل ASYNNNI

این پایان نامه به مدیریت تحصیلات تکمیلی به منظور بخشی از فعالیتهای تحصیلی لازم برای اخذ

درجه کارشناسی ارشد ارایه می گردد. دفاع از پایان نامه در تاریخ ۱۳/۱۲/۸۴ مورد تأیید و

ارزیابی هیأت داوران قرار گرفت و با شماره ۱۹/۲۴ به عدد: ۱۹/۲۴ و درجه عالی به تصویب رسید.

به حروف: نوزده بیست و چهار و چهارم

### اعضای هیأت داوران

عنوان	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	اعضاء
۱. استاد راهنما:	دکتر بهرام خوشنویسان	استادیار	
۲. استاد مشاور:	دکتر بهرام جزئی	استادیار	
۳. متخصص و صاحب نظر از داخل دانشگاه:	دکتر عبدالعلی رضائی	استادیار	
۴. متخصص و صاحب نظر خارج از دانشگاه:	دکتر منوچهر بابایی پور	استادیار	
۵. نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه:	دکتر عباس طاهر	استادیار	

با عنایت از الطاف خداوند سبحان

پروژه پایان‌نامه دوره کارشناسی ارشد خود را

به پدر و مادر بزرگوار

این دو شمع پرفروغ و همیشه جاوید زندگیم

که در رشد و پویایی استعدادهای من تلاشی بی‌وقفه نمودند

و در طول این مدت همراه با نصایح خویش راه چگونگی زیستن را به من

آموختند، تقدیم می‌دارم.

## تشکر و قدردانی

حمد و سپاس خدای را که توفیق کسب دانش و معرفت را به ما عطا فرمود. در اینجا بر خود لازم می‌دارم از تمامی اساتید بزرگوار بویژه اساتید دوره کارشناسی ارشد که در طول سالیان گذشته مرا در تحصیل علم و معرفت و فضائل اخلاقی یاری نموده‌اند تقدیر و تشکر نمایم. از استاد گرامی و بزرگوار جناب آقای دکتر بهرام خوشنویسان که راهنمایی اینجانب را در انجام تحقیق، پژوهش و نگارش این پایان نامه تقبل نموده‌اند نهایت تشکر و سپاسگزاری را دارم.

از جناب آقای دکتر جزئی بعنوان مشاور و همچنین از تشریک مساعی آقای دکتر رضوانی بعنوان استاد داور داخل دانشگاه و آقای دکتر بابایی‌پور بعنوان استاد داور مدعو خارج از دانشگاه که این پایان نامه را مورد مطالعه قرار داده و در جلسه دفاعیه شرکت نموده‌اند تشکر می‌نمایم.

از جناب آقای دکتر طاهر که بعنوان نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه قبول زحمت نموده‌اند سپاسگزاری می‌نمایم.

در پایان از جناب آقای مهندس رحیمی که در یادگیری و فهم زبان برنامه‌نویسی C مرا یاری نمودند تشکر و سپاس فراوان دارم.

## چکیده

در این پایان نامه خواص ساختاری نظم‌یابی اکسیژن در  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) بوسیله شبیه‌سازی مونت کارلو با استفاده از روش ASYNINI مورد بررسی قرار گرفته است. در این شبیه‌سازی، فرآیند مرتب‌سازی اکسیژن در YBCO، بر پایه مدل آیزینگ دو بعدی می‌باشد، همچنین تاثیر پتانسیل شیمیایی روی پخش اکسیژن در داخل صفحات لایه‌ای Cu-O ابررسانای YBCO نیز مطالعه شده است.

برای مجموعه خاصی از پتانسیل‌های برهم‌کنش نمودارهای، متوسط انرژی سایت، پتانسیل شیمیایی و غیره را محاسبه کرده‌ایم، فاز ساختاری منظم بلندبرد ارتورمبیک، ارتو I و فازهای ابرساختاری کوتاه برد ارتو II و ارتو III به صورت موضعی و همچنین شکل گذار ارتو I به تتراگونال مشاهده گردیده‌اند.

برای انجام این مدل‌سازی، دو برنامه نوشته شده که آنها دینامیک‌های کاواساکی و گلوبر (کاواساکی یک آنسامبل کانونیک را شبیه‌سازی می‌کند که تنها جهش به مکان نزدیک‌ترین همسایگی را مجاز می‌دارد اما گلوبر یک آنسامبل گراندکانونیک را شبیه‌سازی می‌کند و پرش بر روی فواصل اختیاری را مجاز می‌دارد). را برای پخش اکسیژن در صفحات پایه‌ای Cu-O در YBCO به کار می‌گیرند.

## فهرست مطالب

صفحه

عنوان

### فصل اول: مقدمه

۱-۱) زمینه تاریخی ..... ۱

۲-۱) ساختار کریستالی YBCO ..... ۳

۳-۱) آماده سازی YBCO ..... ۷

### فصل دوم: زمینه تئوری

۱-۲) مدل آیزینگ ..... ۹

۲-۲) مدل (گاز- شبکه) ..... ۱۲

۳-۲) متد مونت کارلو ..... ۱۴

۱-۳-۲) مقدمه ..... ۱۴

۲-۳-۲) شیوه‌های شبیه‌سازی مونت کارلو ..... ۱۵

۳-۳-۲) توصیف روش مونت کارلو ..... ۱۷

۴-۳-۲) الگوریتم متروپولیس در روش مونت کارلو ..... ۱۸

۵-۳-۲) تولید پیکربندی‌ها ..... ۱۹

۶-۳-۲) تعداد ذرات ..... ۲۰

۷-۳-۲) شرایط مرزی ..... ۲۱

۸-۳-۲) نمایش زمان در یک شبیه‌سازی مونت کارلو ..... ۲۱



۴-۲) پارامترهای نظم

۲۲

۵-۲) پتانسیل شیمیائی

۲۳

۶-۲) فشار تعادلی اکسیژن

۲۳

## فصل سوم: برنامه کامپیوتری

۱-۳) شبیه‌سازی شبکه

۲۸

۲-۳) برآورد متوسط سیستم

۳۱

۳-۳) نمایش کامپیوتری سیستم

۳۲

۴-۳) انتخاب پارامترهای برهم‌کنش

۳۳

۵-۳) انتخاب اندازه شبکه و شرایط مرزی

۳۴

۶-۳) تغییر زنجیره اعداد تصادفی

۳۵

۷-۳) نگرشی بر روی عملکرد برنامه

۳۵

۱-۷-۳) بررسی کلی

۳۵

۲-۷-۳) تست تولید اعداد تصادفی

۳۷

۱-۲-۷-۳) یکنواختی

۳۷

۸-۳) نتایج

۳۸

۱-۸-۳) زمان لازم برای رسیدن به تعادل

۳۸

۱-۱-۸-۳) بررسی برنامه کاواساکی

۳۸

۲-۱-۸-۳) بررسی برنامه گلوبر

۴۴

۴۷..... ۲-۸-۳) برخی نتایج به دست آمده از آنسامبل کانونیک

۵۰..... ۳-۸-۳) برآورد خطا

۵۵..... ۴-۸-۳) نتایج به دست آمده از آنسامبل کانونیک بزرگ

۵۵..... ۱-۴-۸-۳) دمای میانی

۵۷..... ۲-۴-۸-۳) دمای پائین

۵۹..... ۹-۳) جمع‌بندی و نتیجه‌گیری کلی

### ضمیمه

۶۰..... \_ مستند سازی تکنیکی کاواساکی و گلوبر

۶۱..... \_ مدل‌های برنامه

۶۳..... \_ متغیرهای برنامه

۶۴..... منابع و مأخذ

## فهرست جداول

صفحه

عنوان

جدول ۱-۳) تغییر پارامترهای عمده در آنسامبل کانونیک، در دمای ۵۴۰ کلوین و

غلظت اکسیژن ۵۰٪..... ۵۱

جدول ۲-۳) مقادیر متوسط و انحراف استاندارد پارامترها..... ۵۱

## فهرست شکل‌ها

عنوان	صفحه
شکل ۱-۱) ساختار ابررسانای دما بالای YBCO	۲
شکل ۲-۱) نمودار شماتیکی YBCO	۳
شکل ۳-۱) نمودار شماتیکی از سلول واحد YBCO	۳
شکل ۴-۱) جایگاه‌های اکسیژن در دسترس روی صفحه پایه‌ای اکسیژن-مس	۴
شکل ۵-۱) فازهای عمده سیستم، فاز تتراگونال، فاز ارتو I و فاز ارتو II	۶
شکل ۶-۱) فاز ارتو III	۷
شکل ۱-۲) نمایش طرح دو فاز ارتورمبیک ایده‌آل	۲۲
شکل ۱-۳) حمام گرمایی	۳۰
شکل ۲-۳) پتانسیل‌های برهم‌کنش برای مدل ASYNNNI در صفحه پایه‌ای YBCO	۳۳
شکل ۳-۳) پیکربندی اکسیژن در غلظت ۲۵٪ (پیکربندی اولیه و پیکربندی بعد از ۵۰۰۰ دوره مونت کارلو)، به دست آمده از یک آنسامبل کانونیک در دمای پائین	۳۶
شکل ۴-۳) پیکربندی اکسیژن در غلظت ۵۰٪ (پیکربندی اولیه و پیکربندی بعد از ۵۰۰۰ دوره مونت کارلو)، به دست آمده از یک آنسامبل کانونیک در دمای پائین	۳۶

شکل ۳-۵) تغییر شکل سیستم برای یک آنسامبل کانونیک (محاسبه انرژی به شیوه ۱) در

غلظت ۲۵٪ و دمای پائین ۳۸۰ درجه کلوین..... ۴۱

شکل ۳-۶) تغییر شکل سیستم برای یک آنسامبل کانونیک (محاسبه انرژی به شیوه ۲) در

غلظت ۲۵٪ و دمای پائین ۳۸۰ درجه کلوین..... ۴۲

شکل ۳-۷) نمونه‌ای از نظم ارتورمبیک III که با استفاده از این روش در غلظت ۳۵٪ و دمای

خیلی پائین ۳۲۵ کلوین به دست آمده..... ۴۳

شکل ۳-۸) نمونه‌ای از نظم ارتورمبیک I که با استفاده از این روش در غلظت ۵۰٪ و دمای ۵۴۰

کلوین به دست آمده..... ۴۳

شکل ۳-۹) نظم‌یابی کوتاه برد OII در آنسامبل کانونیک بزرگ در

دمای پائین ۳۸۰ کلوین..... ۴۴

شکل ۳-۱۰) نظم‌یابی کوتاه برد OIII در آنسامبل کانونیک بزرگ

در دمای خیلی پائین ۳۲۵ کلوین..... ۴۴

## فهرست نمودارها

صفحه	عنوان
۳۸.....	نمودار ۱-۳) توزیع فرکانسی برای تولید اعداد تصادفی.....
	نمودار ۲-۳) انرژی کل شبکه در غلظت ۵۰٪ و دمای میانی ۵۴۰ کلوین
۳۹.....	(محاسبه انرژی به شیوه ۱).....
	نمودار ۳-۳) متوسط انرژی جایگاه در غلظت ۵۰٪ و دمای میانی ۵۴۰ کلوین
.....۴۰	(محاسبه انرژی به شیوه ۱).....
	نمودار ۴-۳) متوسط انرژی جایگاه در غلظت ۵۰٪ و دمای میانی ۵۴۰ کلوین
۴۰.....	(محاسبه انرژی به شیوه ۲).....
	نمودار ۳-۵) متوسط انرژی جایگاه بر حسب دوره‌های مونت کارلو در $HB=4000$ و
.....۴۵	$T=540$ کلوین
	نمودار ۳-۶) غلظت اکسیژن بر حسب دوره‌های مونت کارلو در $HB=4000$ و
.....۴۵	$T=540$ کلوین
	نمودار ۳-۷) متوسط انرژی جایگاه بر حسب دوره‌های مونت کارلو در $HB=4000$ و
.....۴۵	$T=380$ کلوین

.....۴۶

نمودار ۳-۸) غلظت اکسیژن در  $HB=4000$  و  $T=380$  کلوین

نمودار ۳-۹) تغییر میانگین انرژی جایگاه با دما در غلظت اکسیژن  $x = 50\%$

برای جایگاه اکسیژن .....۴۸

نمودار ۳-۱۰) تغییر اولین پارامتر نظم کوتاه برد با دما در غلظت اکسیژن  $x = 50\%$

برای جایگاه اکسیژن .....۴۸

نمودار ۳-۱۱) تغییر دومین پارامتر نظم کوتاه برد با دما در غلظت اکسیژن  $x = 50\%$

برای جایگاه اکسیژن .....۴۹

نمودار ۳-۱۲) تغییر سومین پارامتر نظم کوتاه برد با دما در غلظت اکسیژن  $x = 50\%$

برای جایگاه اکسیژن .....۴۹

نمودار ۳-۱۳) تغییر چهارمین پارامتر نظم کوتاه برد با دما در غلظت اکسیژن  $x = 50\%$

برای جایگاه اکسیژن .....۴۹

نمودار ۳-۱۴) تغییر پنجمین پارامتر نظم کوتاه برد با دما در غلظت اکسیژن  $x = 50\%$

برای جایگاه اکسیژن .....۵۰

نمودار ۳-۱۵) تأثیر اندازه شبکه  $120 \times 120$  ( $N=7200$ )، بر روی متوسط انرژی

جایگاه در غلظت  $50\%$  .....۵۲

نمودار ۳-۱۶) تأثیر اندازه شبکه  $100 \times 100$  ( $N=5000$ )، بر روی متوسط انرژی

جایگاه در غلظت  $50\%$  .....۵۳

نمودار ۳-۱۷) تأثیر اندازه شبکه  $60 \times 60$  ( $N=1800$ )، بر روی متوسط انرژی

جایگاه در غلظت ۵۰٪..... ۵۳

نمودار ۳-۱۸) تأثیر اندازه شبکه  $120 \times 120$  ( $N=7200$ )، بر روی غلظت اکسیژن تعادلی در

دمای پائین ۳۸۰ کلوین (آنسامبل کانونیک بزرگ)..... ۵۴

نمودار ۳-۱۹) تأثیر اندازه شبکه  $100 \times 100$  ( $N=5000$ )، بر روی غلظت اکسیژن تعادلی در

دمای پائین ۳۸۰ کلوین (آنسامبل کانونیک بزرگ)..... ۵۴

نمودار ۳-۲۰) تأثیر اندازه شبکه  $60 \times 60$  ( $N=1800$ )، بر روی غلظت اکسیژن تعادلی در دمای

پائین ۳۸۰ کلوین (آنسامبل کانونیک بزرگ)..... ۵۴

نمودار ۳-۲۱) تغییرات غلظت با پتانسیل محرک در دمای ۵۴۰ کلوین..... ۵۶

نمودار ۳-۲۲) تغییرات متوسط انرژی با پتانسیل محرک در دمای ۵۴۰ کلوین..... ۵۶

نمودار ۳-۲۳) تغییرات غلظت با پتانسیل محرک در دمای ۵۴۰ کلوین..... ۵۷

نمودار ۳-۲۴) تغییرات متوسط انرژی با پتانسیل محرک در دمای ۵۴۰ کلوین..... ۵۷

نمودار ۳-۲۵) تغییرات غلظت با پتانسیل محرک در دمای ۳۸۰ کلوین..... ۵۸

نمودار ۳-۲۶) تغییرات متوسط انرژی با پتانسیل محرک در دمای ۳۸۰ کلوین..... ۵۸



## پیشگفتار

در گذشته‌ای نه چندان دور تجربه کسر بالایی از دانش بشر را تشکیل می‌داد و سعی می‌شد رویدادها و پدیده‌های گوناگون بدون شناخت مکانیزم حاکم کنترل گردند.

باگذشت زمان و بروز مسائل اقتصادی در جهت افزایش بهره‌وری و بهینه کردن تولید، انسانها مجبور به درک واقعی‌تری از تحولات شده و لذا به مرور مکانیزم‌ها، شناسایی و برخورد عمیق‌تری نسبت به رویدادها صورت پذیرفت.

در این راستا در بسیاری موارد، نیاز به پردازش سریع انبوهی از اطلاعات در زمان‌های کم احساس می‌شد و لذا کامپیوترها پا به عرصه وجود نهادند.

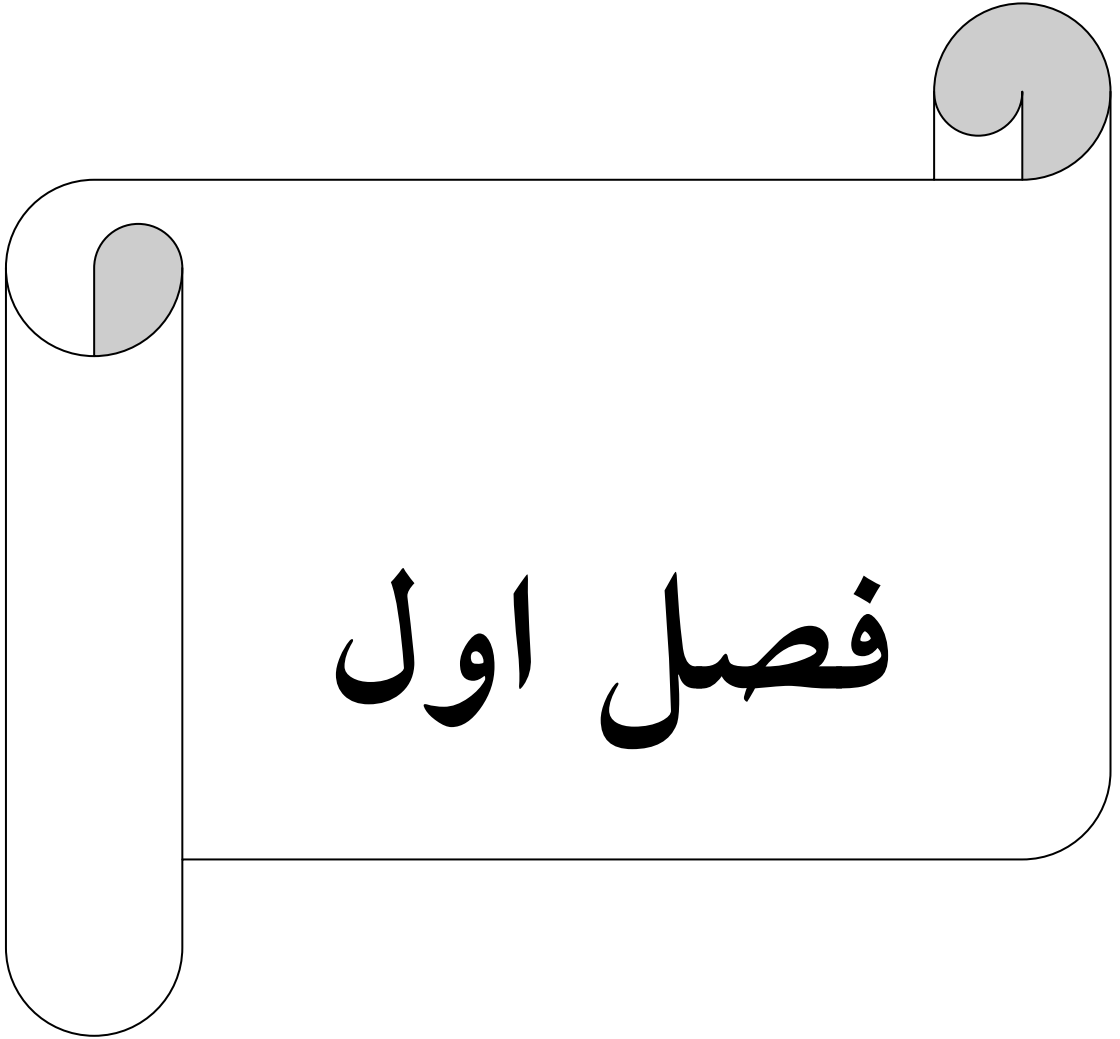
در علوم مهندسی نیز در جهت حل مسائل گوناگون و تجزیه و تحلیل داده‌ها، از کامپیوترها استفاده می‌شود. امروزه کامپیوتر به عنوان ابزاری قدرتمند در زمینه تمام علوم جایگاه تازه‌ای یافته است.

حجم بالای اطلاعات و نیاز به پردازش سریع آنها، انسان‌ها را مجبور به استفاده از این وسیله نموده است.

پایداری نظام فعلی در علوم و تکنولوژی، بدون حضور کامپیوتر قابل تصور نمی‌باشد. بدین ترتیب بررسی رفتار پدیده‌های گوناگون میسر شد.

روابط حاکم بر فرایندهای گوناگون مورد شناسایی قرار گرفته و به کمک کامپیوتر، رفتار و عملکردهای آنها پیشگوئی می‌گردد. در این راستا ممکن است از روش‌های عددی و تکنیک‌های محاسباتی متفاوتی استفاده گردد.

حاصل این تلاش در بیشتر موارد نرم افزاری خواهد بود که مشخصات سیستم را خوانده و نتایج مورد نظر را ارائه می‌دهد. در مجموع به این عملیات شبیه سازی گویند.



# فصل اول

## فصل اول ( مقدمه

### ۱-۱) زمینه تاریخی

ابرساناها ابتدا" در سال ۱۹۱۱ شناخته شدند وقتیکه فیزیکدان هلندی H.Onnes نوشت: " مقاومت ویژه جیوه چنانچه ماده ( جیوه ) تا زیر  $4/2\text{k}$  سرد شوند ناگهان به صفر میل می کند". بیش از ۶ دهه است که پژوهشگران کشف کرده اند، تعدادی از عناصر فلزی و مواد مرکب دارای این خواص می باشند.

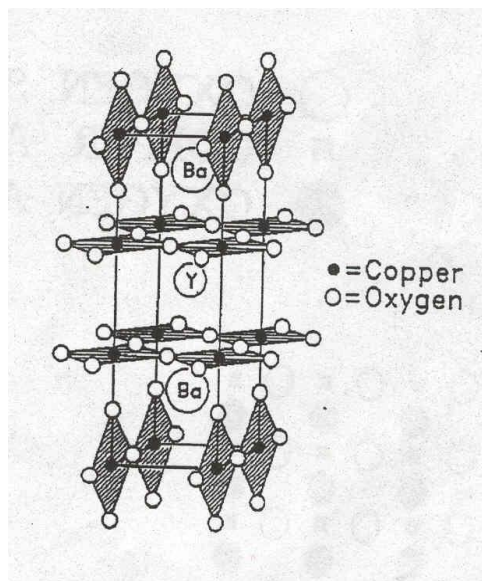
کاربردهای بسیاری از ابرساناها متداول می باشند: از جمله استفاده گسترده ای از کابل های انتقالی ابرساناها، موتورها و آهنرباها.

در ۱۹۸۷ گروه های پژوهشگر (Wue در Chu , Alabama در Houston) این کشف کلیدی را انجام دادند که سرامیک  $\text{YBCO}^1$  ابرسانای دمای بالا با دمای انتقال ابرسانائی حدود  $90\text{k}$  می باشد.

بر اساس تحقیقات، این کشف در نتیجه شیوه های پردازش متفاوت و جانشین کردن عنصر بر روی ساختار سیستم  $\text{La-Ba-Cu-O}$  صورت گرفت. [۱] طرح عمده ساختار  $\text{YBCO}$  در شکل ۱-۱ نشان داده شده.

---

<sup>1</sup>) Yttrium Barium Copper Oxide



شکل ۱-۱ : ساختار ابررسانای دما بالای YBCO

شاخص استوکیومتری  $x^1$  ، وابسته به غلظت اکسیژن، در صفحه پایه‌ای اکسیژن- مس (صفحه بین لایه‌های باریم) می‌باشد. (شکل ۱-۱)

رفتار ساختاری و ابررسانایی YBCO شدیداً به غلظت اکسیژن ( $x$ ) وابسته می‌باشد. مقدار  $x$  که بدلیل ورود و خروج اتم‌های اکسیژن، در صفحه پایه‌ای  $\text{CuO}_x$  تغییر می‌کند، به خوبی قابل کنترل است. [ ۲ ]

ویژگی‌های نظم‌یابی اکسیژن در YBCO (که در دمای بالای نقطه جوش ازت مایع، ابررساناست) از زمان کشف این ماده مورد توجه شایانی قرار گرفته است [۳] یک دلیل این امر، این شاهد تجربی است که نه تنها محتوی اکسیژن [۴] ، بلکه ساختارهای نظم‌یابی اکسیژن نیز برای دمای گذار ابررسانش ( $T_c$ ) دارای اهمیت می‌باشد. [ ۵ ]

ذکر این مطلب جالب توجه است که YBCO یک سیستم مدل ایده‌آل برای بررسی پدیده‌های نظم‌یابی ساختاری دویعدی می‌باشد.

<sup>1</sup>) stoichiometric index