

Jordan Journal of P H Y S I C S

An International Peer-Reviewed Research Journal

Volume 5, No. 3, 2012, 1434 H

Jordan Journal of Physics (JJP): An International Peer-Reviewed Research Journal issued by the support of the Scientific Research Support Fund, Ministry of Higher Education & Scientific Research, Jordan, and published quarterly by the Deanship of Research & Graduate Studies, Yarmouk University, Irbid, Jordan.

EDITOR-IN-CHIEF:

Ibrahim O. Abu Al-Jarayesh

Department of Physics, Yarmouk University, Irbid, Jordan.

ijarayesh@yu.edu.jo

EDITORIAL BOARD:

Dia-Eddin M. Arafah

Department of Physics, University of Jordan, Amman, Jordan.

darafah@ju.edu.jo

Nabil Y. Ayoub

Department of Physics, Yarmouk University, Irbid, Jordan.

nayoub@yu.edu.jo

Hisham B. Ghassib

Princess Sumaya University for Technology, Amman, Jordan.

ghassib@psut.edu.jo

Jamil M. Khalifeh

Department of Physics, University of Jordan, Amman, Jordan.

jkalifa@ju.edu.jo

Sami H. Mahmood

Department of Physics, University of Jordan, Amman, Jordan.

s.mahmood@ju.edu.jo

Marwan S. Mousa

Department of Physics, Mu'tah University, Al-Karak, Jordan.

mmousa@mutah.edu.jo

Nihad A. Yusuf

Department of Physics, Yarmouk University, Irbid, Jordan.

nihadyusuf@yu.edu.jo

Khalaf A. Al-Masaid

Department of Applied Physical Sciences, Jordan University Of Science And Technology, Irbid, Jordan.

khalaf@just.edu.jo

EDITORIAL SECRETARY: Majdi Al-Shannaq.

Manuscripts should be submitted to:

Prof. Ibrahim O. Abu Al-Jarayesh
Editor-in-Chief, Jordan Journal of Physics
Deanship of Research and Graduate Studies
Yarmouk University-Irbid-Jordan
Tel. 00 962 2 7211111 Ext. 2075
E-mail: jjp@yu.edu.jo
Website: <http://Journals.yu.edu.jo/jjp>

Jordan Journal of
PHYSICS
An International Peer-Reviewed Research Journal

Volume 5, No. 3, 2012, 1434 H

INTERNATIONAL ADVISORY BOARD

Prof. Dr. Ahmad Saleh

Department of Physics, Yarmouk University, Irbid, Jordan.
salema@yu.edu.jo

Prof. Dr. Aurore Savoy-Navarro

LPNHE Université de Paris 6/IN2P3-CNRS, Tour 33, RdC 4,
Place Jussieu, F 75252, Paris Cedex 05, France.
aurore@lphnhe.in2p3.fr

Prof. Dr. Bernard Barbara

Laboratoire Louis Neel, Salle/Room: D 108, 25, Avenue des
Martyrs BP 166, 38042-Grenoble Cedex 9, France.
Barbara@grenoble.cnrs.fr

Prof. Dr. Bruno Guiderdoni

Observatoire Astronomique de Lyon, g, avenue Ch. Antre-F-69561,
Saint Genis Laval Cedex, France.
Bruno.guiderdoni@olos.univ-lyon1.fr

Prof. Dr. Buford Price

Physics Department, University of California, Berkeley, CA 94720,
U. S. A.
bprice@berkeley.edu

Prof. Dr. Colin Cough

School of Physics and Astronomy, University of Birmingham, B15
2TT, U. K.
c.gough@bham.ac.uk

Prof. Dr. Desmond Cook

Department of Physics, Condensed Matter and Materials Physics
Research Group, Old Dominion University, Norfolk, Virginia
23529, U. S. A.
Dcook@physics.odu.edu

Prof. Dr. Evgeny Sheshin

MIPT, Institutskij per. 9, Dogoprudnyi 141700, Russia.
sheshin@lafaet.mipt.ru

Prof. Dr. Hans Ott

Laboratorium Fuer Festkorperphysik, ETH Honggerberg, CH-
8093 Zurich, Switzerland.
ott@solid.phys.ethz.ch

Prof. Dr. Herwig Schopper

President SESAME Council, Chairman Scientific Board UNESCO
IBSP Programme, CERN, 1211 Geneva, Switzerland.
Herwig.Schopper@cern.ch

Prof. Dr. Humam Ghassib

Department of Physics, Jordan University, Amman, Jordan.
humam@atf.org.jo

Prof. Dr. Ingo Hofmann

GSI Darmstadt, Planckstr. 1, 64291, Darmstadt, Germany.
i.hofmann@gsi.de

Prof. Dr. Jozef Lipka

Department of Nuclear Physics and Technology, Slovak University
of Technology, Bratislava, Ilkovicova 3, 812 19 Bratislava,
Slovakia.
Lipka@elf.stuba.sk

Prof. Dr. Khalid Touqan

Chairman of Jordan Atomic Energy Commission, Amman, Jordan.

Prof. Dr. Mark J. Hagmann

Desert Electronics Research Corporation, 762 Lacey Way, North
Salt Lake 84064, Utah, U. S. A.
MHagmann@NewPathResearch.Com

Prof. Dr. Nasr Zubeidey

President: Al-Zaytoonah University of Jordan, Amman, Jordan.
President@alzaytoonah.edu.jo

Prof. Dr. Patrick Roudeau

Laboratoire de l'Accelérateur, Lineaire (LAL), Université Paris-
Sud 11, Batiment 200, 91898 Orsay Cedex, France.
roudeau@mail.cern.ch

Prof. Dr. Paul Chu

Department of Physics, University of Houston, Houston, Texas
77204-5005, U. S. A.
Ching-Wu.Chu@mail.uh.edu

Prof. Dr. Peter Dowben

Nebraska Center for Materials and Nanoscience, Department of
Physics and Astronomy, 255 Behlen Laboratory (10th and R
Streets), 116 Brace Lab., P. O. Box 880111, Lincoln, NE 68588-
0111, U. S. A.
pdowben@unl.edu

Prof. Dr. Peter Mulser

Institute fuer Physik, T.U. Darmstadt, Hochschulstr. 4a, 64289
Darmstadt, Germany.
Peter.mulser@physik.tu-darmstadt.de

Prof. Dr. Rasheed Azzam

Department of Electrical Engineering, University of New Orleans
New Orleans, Louisiana 70148, U. S. A.
razzam@uno.edu

Dr. Richard G. Forbes

University of Surrey, FEPS (X1), Guildford, Surrey GU2 7XH,
U. K.
R.Forbes@surrey.ac.uk

Prof. Dr. Roy Chantrell

Physics Department, York University, York, YO10 5DD, U. K.
Rc502@york.ac.uk

Prof. Dr. Shawqi Al-Dallal

Department of Physics, Faculty of Science, University of Bahrain,
Manamah, Kingdom of Bahrain.

Prof. Dr. Susamu Taketomi

Matsumoto Yushi-Seiyaku Co. Ltd., Shibukawa-Cho, Yao City,
Osaka 581-0075, Japan.
staketomi@hotmail.com

Prof. Dr. Wolfgang Nolting

Institute of Physics / Chair: Solid State Theory, Humboldt-
University at Berlin, Newtonstr. 15 D-12489 Berlin, Germany
Wolfgang.nolting@physik.hu-berlin.de



The Hashemite Kingdom of Jordan



Yarmouk University

Jordan Journal of PHYSICS

An International Peer-Reviewed Research Journal issued by the
support of the Scientific Research Support Fund

Volume 5, No. 3, 2012, 1434 H

Instructions to Authors

Instructions to authors concerning manuscript organization and format apply to hardcopy submission by mail, and also to electronic online submission via the Journal homepage website (<http://jjp.yu.edu.jo>).

Manuscript Submission

1- **Hardcopy:** The original and three copies of the manuscript, together with a covering letter from the corresponding author, should be submitted to the Editor-in-Chief:

Professor Ibrahim O. Abu Al-Jarayesh
Editor-in-Chief, Jordan Journal of Physics
Deanship of Scientific Research and Graduate Studies
Yarmouk University, Irbid, Jordan.
Tel: 00962-2-7211111, Ext. 2075
Fax: 00962-2-7211121
E-mail: jjp@yu.edu.jo

2- **Online:** Follow the instructions at the journal homepage website.

Original *Research Articles*, *Communications* and *Technical Notes* are subject to critical review by minimum of two competent referees. Authors are encouraged to suggest names of competent reviewers. *Feature Articles* in active Physics research fields, in which the author's own contribution and its relationship to other work in the field constitute the main body of the article, appear as a result of an invitation from the Editorial Board, and will be so designated. The author of a *Feature Article* will be asked to provide a clear, concise and critical status report of the field as an introduction to the article. *Review Articles* on active and rapidly changing Physics research fields will also be published. Authors of *Review Articles* are encouraged to submit two-page proposals to the Editor-in-Chief for approval. Manuscripts submitted in *Arabic* should be accompanied by an Abstract and Keywords in English.

Organization of the Manuscript

Manuscripts should be typed double spaced on one side of A4 sheets (21.6 x 27.9 cm) with 3.71 cm margins, using Microsoft Word 2000 or a later version thereof. The author should adhere to the following order of presentation: Article Title, Author(s), Full Address and E-mail, Abstract, PACS and Keywords, Main Text, Acknowledgment. Only the first letters of words in the Title, Headings and Subheadings are capitalized. Headings should be in **bold** while subheadings in *italic* fonts.

Title Page: Includes the title of the article, authors' first names, middle initials and surnames and affiliations. The affiliation should comprise the department, institution (university or company), city, zip code and state and should be typed as a footnote to the author's name. The name and complete mailing address, telephone and fax numbers, and e-mail address of the author responsible for correspondence (designated with an asterisk) should also be included for official use. The title should be carefully, concisely and clearly constructed to highlight the emphasis and content of the manuscript, which is very important for information retrieval.

Abstract: A one paragraph abstract not exceeding 200 words is required, which should be arranged to highlight the purpose, methods used, results and major findings.

Keywords: A list of 4-6 keywords, which expresses the precise content of the manuscript for indexing purposes, should follow the abstract.

PACS: Authors should supply one or more relevant PACS-2006 classification codes, (available at <http://www.aip.org/pacs/pacs06/pacs06-toc.html>)

Introduction: Should present the purpose of the submitted work and its relationship to earlier work in the field, but it should not be an extensive review of the literature (e.g., should not exceed 1 ½ typed pages).

Experimental Methods: Should be sufficiently informative to allow competent reproduction of the experimental procedures presented; yet concise enough not to be repetitive of earlier published procedures.

Results: should present the results clearly and concisely.

Discussion: Should be concise and focus on the interpretation of the results.

Conclusion: Should be a brief account of the major findings of the study not exceeding one typed page.

Acknowledgments: Including those for grant and financial support if any, should be typed in one paragraph directly preceding the References.

References: References should be typed double spaced and numbered sequentially in the order in which they are cited in the text. References should be cited in the text by the appropriate Arabic numerals, enclosed in square brackets. Titles of journals are abbreviated according to list of scientific periodicals. The style and punctuation should conform to the following examples:

1. Journal Article:

- a) Heisenberg, W., Z. Phys. 49 (1928) 619.
- b) Bednorz, J. G. and Müller, K. A., Z. Phys. B64 (1986) 189
- c) Bardeen, J., Cooper, L.N. and Schrieffer, J. R., Phys. Rev. 106 (1957) 162.
- d) Asad, J. H., Hijjawi, R. S., Sakaji, A. and Khalifeh, J. M., Int. J. Theor. Phys. 44(4) (2005), 3977.

2. Books with Authors, but no Editors:

- a) Kittel, C., "Introduction to Solid State Physics", 8th Ed. (John Wiley and Sons, New York, 2005), chapter 16.
- b) Chikazumi, S., C. D. Graham, JR, "Physics of Ferromagnetism", 2nd Ed. (Oxford University Press, Oxford, 1997).

3. Books with Authors and Editors:

- a) Allen, P. B. "Dynamical Properties of Solids", Ed. (1), G. K. Horton and A. A. Maradudin (North-Holland, Amsterdam, 1980), p137.
- b) Chantrell, R. W. and O'Grady, K., "Magnetic Properties of Fine Particles" Eds. J. L. Dormann and D. Fiorani (North-Holland, Amsterdam, 1992), p103.

4. Technical Report:

Purcell, J. "The Superconducting Magnet System for the 12-Foot Bubble Chamber", report ANL/HEP6813, Argonne Natl. Lab., Argonne, III, (1968).

5. Patent:

Bigham, C. B., Schneider, H. R., US patent 3 925 676 (1975).

6. Thesis:

Mahmood, S. H., Ph.D. Thesis, Michigan State University, (1986), USA (Unpublished).

7. Conference or Symposium Proceedings:

Blandin, A. and Lederer, P. Proc. Intern. Conf. on Magnetism, Nottingham (1964), P.71.

8. Internet Source:

Should include authors' names (if any), title, internet website, URL, and date of access.

9. Prepublication online articles (already accepted for publication):

Should include authors' names (if any), title of digital database, database website, URL, and date of access.

For other types of referenced works, provide sufficient information to enable readers to access them.

Tables: Tables should be numbered with Arabic numerals and referred to by number in the Text (e.g., Table 1). Each table should be typed on a separate page with the legend above the table, while explanatory footnotes, which are indicated by superscript lowercase letters, should be typed below the table.

Illustrations: Figures, drawings, diagrams, charts and photographs are to be numbered in a consecutive series of Arabic numerals in the order in which they are cited in the text. Computer-generated illustrations and good-quality digital photographic prints are accepted. They should be black and white originals (not photocopies) provided on separate pages and identified with their corresponding numbers. Actual size graphics should be provided, which need no further manipulation, with lettering (Arial or Helvetica) not smaller than 8 points, lines no thinner than 0.5 point, and each of uniform density. All colors should be removed from graphics except for those graphics to be considered for publication in color. If graphics are to be submitted digitally, they should conform to the following minimum resolution requirements: 1200 dpi for black and white line art, 600 dpi for grayscale art, and 300 dpi for color art. All graphic files must be saved as TIFF images, and all illustrations must be submitted in the actual size at which they should appear in the journal. Note that good quality hardcopy original illustrations are required for both online and mail submissions of manuscripts.

Text Footnotes: The use of text footnotes is to be avoided. When their use is absolutely necessary, they should be typed at the bottom of the page to which they refer, and should be cited in the text by a superscript asterisk or multiples thereof. Place a line above the footnote, so that it is set off from the text.

Supplementary Material: Authors are encouraged to provide all supplementary materials that may facilitate the review process, including any detailed mathematical derivations that may not appear in whole in the manuscript.

Revised Manuscript and Computer Disks

Following the acceptance of a manuscript for publication and the incorporation of all required revisions, authors should submit an original and one more copy of the final disk containing the complete manuscript typed double spaced in Microsoft Word for Windows 2000 or a later version thereof. All graphic files must be saved as PDF, JPG, or TIFF images.

Allen, P.B., “.....”, in: Horton, G.K., and Muradudin, A. A., (eds.), “Dynamical.....”, (North.....), pp....

Reprints

Twenty (20) reprints free of charge are provided to the corresponding author. For orders of more reprints, a reprint order form and prices will be sent with the article proofs, which should be returned directly to the Editor for processing.

Copyright

Submission is an admission by the authors that the manuscript has neither been previously published nor is being considered for publication elsewhere. A statement transferring copyright from the authors to Yarmouk University is required before the manuscript can be accepted for publication. The necessary form for such transfer is supplied by the Editor-in-Chief. Reproduction of any part of the contents of a published work is forbidden without a written permission by the Editor-in-Chief.

Disclaimer

Opinions expressed in this Journal are those of the authors and neither necessarily reflects the opinions of the Editorial Board or the University, nor the policy of the Higher Scientific Research Committee or the Ministry of Higher Education and Scientific Research. The publisher shoulders no responsibility or liability whatsoever for the use or misuse of the information published by JJP.

Indexing

JJP is currently applying for indexing and abstracting to all related International Services.

Table of Contents:

English Articles	Pages
Amending the LCAO Basis Set in the Hartree-Fock-Roothaan Approximation to First-Order Perturbation Theory	105-112
B. Anak, T. Benlecheb, Y. Djebli, Y. Belhocine and M. Bencharif	
Networks of Identical Capacitors with a Substitutional Capacitor	113-118
M.Q. Owaidat	
Effect of Water Absorption on Some Mechanical Properties of Unsaturated Polyester Resin/Natural Rubber Blends	119-127
Awtham M. Hameed	
Solution of a Fractional Undamped Forced Oscillator	129-134
F. Y. Alzoubi, M. K. Alqadi, H. M. Al-Khateeb, S. M. Saadeh and N. Y. Ayoub	
Arabic Article	Pages
تشكيل حساس غازي من أكسيد القصدير ذي بنية نانوية يعمل بمبدأ الفعل الكهحراري ودراسة حساسيته لبعض الغازات محمد أنور بطل، غسان ناشد وفارس حاج جنيد	135-147
Preparation of a Gas Sensor of Nanostructure Tin Oxide Working on the Principle of Thermoelectric Effect and Studying Its Sensitivity to Some Gases	
M. A. Batal, Gh. Nashed and F. H. Jneed	
تأثير أشعة كاما على عمل نبيلة شوتكي من نوع Au/n-Si نوفل يوسف جميل ومحمدنور خضر	149-157
Effect of Gamma Rays on Schottky Diodes of Au/n-Si type	
Nawfal yousif Jamil and Mohammed Noor Khader	

Jordan Journal of Physics

ARTICLE

Amending the LCAO Basis Set in the Hartree-Fock-Roothaan Approximation to First-Order Perturbation Theory

B. Anak^a, T. Benlecheb^b, Y. Djebli^a, Y. Belhocine^a and M. Bencharif^a

^a*Faculté des Sciences Exactes, Département de Chimie, Université Mentouri Constantine, Algeria.*

^b*Faculté des Sciences, Département de Chimie, Université A. Laghrour, Khenchela, Algeria.*

Received on: 13/11/2011; Accepted on: 9/5/2012

Abstract: We have formulated the first-order Hartree-Fock equations for multielectron systems exposed to an external perturbation in the LCAO (Linear Combination of Atomic Orbital) approximation. The perturbation theory corrections to these equations have been found in the form of expansions in unperturbed equations and terms which depend explicitly on this perturbation. The ideas leading to this amendment are implicit in previous studies, but the significance of its existence has not yet been sufficiently emphasized and its simple explicit form has not been presented. With the proposed approach, one may obtain the first-order correction perturbation energy in the presence of any perturbation, knowing merely the overlap. This may further facilitate linear scaling computation of the energy correction.

Keywords: Hartree-Fock; LCAO; Perturbation; Energy correction.

Introduction

For multielectronic systems, the calculation used is the algebraic form of Hartree-Fock (HF) method like Hartree-Fock-Roothaan (HFR) [1, 2]. In this formalism, the minimum energy of the system is a function of the orbital coefficients and nonlinear parameters of the basis functions. The physical properties of a system under external field are described with the aid of polarizabilities, susceptibilities and other parameters based on the framework of quantum mechanics expressed in terms of perturbation theory which represents a very complex problem in computational and formalism aspect [3]. The equations of Hartree-Fock perturbation theory lead to the equations of McWeeny formulae with all orders, obtained in terms of the unperturbed Hamiltonian and density matrix. It is also shown that the perturbation may be obtained directly, without separating the orders, and that the approach is related to earlier steepest-descent methods [4]. The coupled-perturbation theory [5]

leads to good accuracy [6–10]. However, there is a dispersion in the values of calculated polarizability [7]. In [6, 11], the optimum basis set of atomic orbitals to calculate polarizabilities can be found by minimization methods of the first and second orders. In the magnetic case of perturbation, all spectral states are needed in Vanvleck formulation which leads to calculation limit and invariant problems [12, 14].

It has been seen that orders are not explicit or separated from all variants of the perturbation method derived from McWeeny formulae [13]. In the present work, we use the London unperturbed base with Gauge factor bypass invariant problem [14] to achieve the separated order perturbation method. It is an original way to formulate the theory of first-order perturbation taking account of the effect of perturbation on the basis set. From the formalism developed by MacWeeny, we show explicitly the action of a perturbation on the different quantities that are

associated with it. The special feature of the writing in our equations lies in the fact to recover the unperturbed state just in quashing the terms relating to the perturbation. To illustrate this, we have attached an annex with the case of a magnetic perturbation in which the basis set is represented by the perturbed GIAO introduced by London [14].

Hartree–Fock–Roothaan equations

The Hartree-Fock-Roothaan [1-3] method is constructed on the MO (Molecular Orbital) theory [4, 5] and the LCAO (Linear Combination of Atomic Orbital) approach, where the OM $\{\Psi_i\}$ are simply expressed in terms of a basis set of atomic orbitals $\{\phi_r\}$ as follows:

$$\Psi_i = \sum_{r=1}^n C_{ir} \cdot \phi_r ; \quad (1)$$

where n represents the dimensional basis used and the set $\{C_{ir}\}$ the OM $\{\Psi_i\}$ coefficients of development.

The pseudo-secular equations of the method are expressed as:

$$FC_i = e_i SC_i ; \quad (2)$$

where F represent the Fock operator and can be expressed by the relation $F = h + G$, in which h and G are respectively the core operator and the bioelectronic repulsion operator; $\{e_i\}$ is a set of the OM energies and S signifies the overlap matrix whose elements are written as follows:

$$S_{ij} = \langle \phi_i^* | \phi_j \rangle . \quad (3)$$

The coefficient vectors of the molecular orbital are pseudo-normalized, so:

$$C_i^+ SC_j = \delta_{ij} . \quad (4)$$

In this notation, the exposing label + means the adjunction operation and δ_{ij} represents the Krönecker symbol.

In general, we note $Z_{ij} = X_i^+ Z X_j$ any scalar product, where X_i and X_j are vector-columns and Z represents a matrix.

For example, in eq. (4), S_{ij} is defined as:

$$S_{ij} = C_i^+ SC_j .$$

Finally, the system to be resolved is expressed as follows:

$$(F - e_i \cdot S) C_i = 0 ; \quad (5.a)$$

$$C_i^+ SC_j = \delta_{ij} . \quad (5.b)$$

The energy orbital e_i is obtained by using eq. (2).

Multiplying at left by C_i^+ yields

$$C_i^+ FC_i = e_i C_i^+ SC_i .$$

Based on the normalization condition, we have:

$$e_i = C_i^+ FC_i ; \quad (6.a)$$

$$e_i = F_{ii} . \quad (6.b)$$

The total electronic energy can be expressed by:

$$E = \sum_{i=1}^M C_i^+ H C_i .$$

With $H = h + F$ and $F = h + G$, we obtain $H = 2h + G$.

M indicates the label of the HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital).

We can rewrite:

$$E = \sum_{i=1}^M 2C_i^+ h C_i + \sum_{i=1}^M C_i^+ G C_i .$$

Taking:

$$E_1 = \sum_{i=1}^M 2C_i^+ h C_i \quad (7.a)$$

$$E_2 = \sum_{i=1}^M C_i^+ G C_i , \quad (7.b)$$

we obtain

$$E = E_1 + E_2 . \quad (7)$$

Note that $C_i^+ h C_i$ corresponds to a scalar product which can be developed meaning the property:

$$X_i^+ Z Y_i = \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n X_{ir} Z_{rs} Y_{is} .$$

So:

$$E = \sum_i^M (2h_{ii} + G_{ii}) . \quad (8)$$

By using LCAO basis $\{\phi_r\}$ and development (1), the expression of E is obtained as follows:

$$E = \sum_{i=1}^M \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n 2C_{ir}^* h_{rs} C_{is} + \sum_{i=1}^M \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n C_{ir}^* G_{rs} C_{is}$$

or:

$$E = \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n h_{rs} \left(\sum_{i=1}^M 2C_{ir}^* C_{is} \right) + \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n \left(\sum_{i=1}^M 2C_{ir}^* C_{is} \right).$$

Defining the matrix density by:

$$P_{rs} = \sum_{i=1}^M 2C_{ir}^* C_{is}, \quad (9)$$

we can write:

$$E = \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n P_{rs} \left(h_{rs} + \frac{1}{2} F_{rs} \right), \quad (10)$$

with:

$$\begin{cases} F_{rs} = h_{rs} + G_{rs} \\ G_{rs} = \sum_{t=1}^n \sum_{u=1}^n P_{tu} \cdot g_{rstu} \\ g_{rstu} = \gamma_{rstu} - \frac{1}{2} \gamma_{ruts} \end{cases}$$

The matrix elements F_{rs} , h_{rs} and γ_{rstu} are respectively the Fock integrals, the Hamiltonian core integrals and the bi-electronic repulsion integrals, defined by:

$$\begin{cases} F_{rs} = \langle \phi_r^* (1) | F(1) | \phi_s (1) \rangle \\ h_{rs} = \langle \phi_r^* (1) | h(1) | \phi_s (1) \rangle \\ \gamma_{rstu} = \left\langle \phi_r^* (1) \phi_s (1) \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \phi_t^* (2) \phi_u (2) \right\rangle. \end{cases}$$

Effects of perturbation

Our theoretical approach is applied to any physical phenomenon where a perturbation modifies the basis set in the framework of HFR method, allowing the calculation of the parameters related to the presence of an external electric or magnetic field.

In principle, all equations stay formally unchanged, but they will be evaluated by passing the new perturbed basis $\{\chi_r\}$.

The introduction of an external field induces a perturbation that affects all sizes (F , C , e_i , E , H , S) and can develop into a series of perturbation in the following way:

$$\begin{bmatrix} F = \sum_{p \geq 0} F^p & C_i = \sum_{p \geq 0} C_i^p & e_i = \sum_{p \geq 0} e_i^p \\ E = \sum_{p \geq 0} E^p & H = \sum_{p \geq 0} H^p & S = \sum_{p \geq 0} S^p \end{bmatrix}.$$

The exposing notation signifies the different orders of development, where $p = 0, 1, 2, \dots$ represent respectively the unperturbed state, the first perturbation order, the second perturbation order, and so on.

The decomposition in perturbation series of relations (5.a) and (5.b) gives:

$$\sum_{p \geq 0} \sum_{q \geq 0} F^p C_i^q - \sum_{p \geq 0} \sum_{q \geq 0} \sum_{t \geq 0} e_i^p S^q C_i^t = 0; \quad (11.a)$$

$$\sum_{p \geq 0} \sum_{q \geq 0} \sum_{t \geq 0} C_i^p S^q C_j^t = \delta_{ij}. \quad (11.b)$$

Orders' separation

For the physical meaning, the sizes in the equation must be in the same order, and hence an order separation is required. The calculation technique of the separation process is summarized as follows:

We call $m = p + q$ the perturbation order with $m \geq 0$; then $q = m - p$ where $q \geq 0$, so $m - p \geq 0$ and $p \leq m$; since $p \geq 0$, finally $0 \leq p \leq m$. Then, we simply replace the couple of variables (p, q) by (p, m) . So, the double summation can be expressed by:

$$\sum_{p \geq 0} \sum_{q \geq 0} F^p C_i^q = \sum_{m \geq 0} \sum_{p=0}^m F^p C_i^{m-p}.$$

In the same manner $m = p + q + t$; then $t = m - (p + q)$ with $t \geq 0$, so $m - (p + q) \geq 0$ or $q \leq m - p$; since $q \geq 0$, finally $0 \leq q \leq m - p$. As before, we replace the variables (p, q, t) by (p, q, m) . So, the triple summation is expressed as:

$$\sum_{p \geq 0} \sum_{q \geq 0} \sum_{t \geq 0} e_i^p S^q C_i^t = \sum_{m \geq 0} \sum_{p=0}^m \sum_{q=0}^{m-p} e_i^p S^q C_i^{m-(p+q)}.$$

The pseudo-secular eqs. (11.a) are written as:

$$\sum_{m \geq 0} \left\{ \sum_{p=0}^m F^p C_i^{m-p} - \sum_{p=0}^m \sum_{q=0}^{m-p} e_i^p S^q C_i^{m-(p+q)} \right\} = 0 \quad (12.a)$$

So, it is clear that the perturbed HF equation in the order m is given by:

$$\sum_{p=0}^m F^p C_i^{m-p} - \sum_{p=0}^m \sum_{q=0}^{m-p} e_i^p S^q C_i^{m-(p+q)} = 0. \quad (12.b)$$

The same way applied to pseudo-orthonormality condition (11.b) leads to:

$$\sum_{m \geq 0} \sum_{p=0}^m \sum_{q=0}^{m-p} C_i^{+p} S^q C_j^{m-(p+q)} = \delta_{ij}. \quad (13.a)$$

By extracting the term of zero order ($m = 0$), we can write:

$$C_i^{+0} S^0 C_j^0 + \sum_{m \geq 1} \sum_{p=0}^m \sum_{q=0}^{m-p} C_i^{+p} S^q C_j^{m-(p+q)} = \delta_{ij}.$$

Based on the orthonormality condition (eq.4), we obtain:

$$\sum_{m \geq 1} \sum_{p=0}^m \sum_{q=0}^{m-p} C_i^{+p} S^q C_j^{m-(p+q)} = 0.$$

Separating the orders, we have:

$$\sum_{p=0}^m \sum_{q=0}^{m-p} C_i^{+p} S^q C_j^{m-(p+q)} = 0. \quad (13.b)$$

Note that in the case of zero order ($m = 0$), we find the solutions corresponding to the absence of any perturbation:

$$F^0 C_i^0 = e_i^0 S^0 C_i^0;$$

$$C_i^{+0} S^0 C_j^0 = \delta_{ij}.$$

With respect to first-order perturbation ($m = 1$), eqs. (12.b) and (13.b) take the following form:

$$\left. \begin{aligned} F^1 C_i^0 + F^0 C_i^1 - \\ (e_i^1 S^0 C_i^0 + e_i^0 S^1 C_i^0 + e_i^0 S^0 C_i^1) = 0 \end{aligned} \right\}; \quad (14.a)$$

$$C_i^{+1} S^0 C_j^0 + C_i^{+0} S^1 C_j^0 + C_i^{+0} S^0 C_j^1 = 0. \quad (14.b)$$

First-order correction to energy orbital e_i^I

Multiplying the left expression of eq. (14.a) by C_i^{+0} gives the form:

$$\left. \begin{aligned} C_i^{+0} F^1 C_i^0 + C_i^{+0} F^0 C_i^1 - \\ (e_i^1 C_i^{+0} S^0 C_i^0 + e_i^0 C_i^{+0} S^1 C_i^0 + e_i^0 C_i^{+0} S^0 C_i^1) \end{aligned} \right\} = 0.$$

Taking into account the conditions $C_i^{+0} S^0 C_i^0 = 1$, $C_i^{+0} F^0 = e_i^0 C_i^{+0} S^0$ and with $C_i^{+0} F^1 C_i^0 = F_{ii}^1$; $C_i^{+0} S^1 C_i^0 = S_{ii}^1$, we obtain:

$$\left. \begin{aligned} F_{ii}^1 + e_i^0 C_i^{+0} S^0 C_i^1 - \\ (e_i^1 + e_i^0 S_{ii}^1 + e_i^0 C_i^{+0} S^0 C_i^1) = 0 \end{aligned} \right\},$$

from which, we can write the e_i^I expression

$$\left. \begin{aligned} e_i^1 &= F_{ii}^1 - e_i^0 S_{ii}^1 \\ e_i^1 &= C_i^{+0} F^1 C_i^0 - e_i^0 C_i^{+0} S^1 C_i^0 \end{aligned} \right\}. \quad (15)$$

Principles of calculating S_{ii}^I

In this method, the perturbation changes the basis set; then it is possible to develop S in a series of perturbation with:

$$S = \sum_{p \geq 0} S^p.$$

In addition, we can develop S near a given value of perturbation, following a series of Mac-Laurin. By identifying these two developments, one can express the analytical forms of S^p with $p \geq I$.

Calculation of F_{ii}^I

Its expression is given by:

$$\left. \begin{aligned} F^1 &= h^1 + G^1(P^1) \\ F_{rs}^1 &= h_{rs}^1 + \sum_{t=1}^n \sum_{u=1}^n (P_{tu}^1 g_{rstu}^0 + P_{tu}^0 g_{rstu}^1) \end{aligned} \right\}. \quad (16)$$

The elements of the density matrix are expressed as:

$$P_{tu}^1 = \sum_{i=1}^M 2 (C_{it}^{*1} \cdot C_{iu}^0 + C_{it}^{*0} \cdot C_{iu}^1). \quad (17)$$

Then, the correction of the density matrix in first order requires C_i^I calculation. The technique consists of developing C_i^I on a basis of eigenvectors of zero order $\{C_j^0\}$:

$$C_i^1 = \sum_{j=1}^n a_{ij}^1 \cdot C_j^0. \quad (18)$$

All $\{C_j^0\}$ are known as the corresponding eigenvectors of the unperturbed system and the knowledge of all $\{a_{ij}^1\}$ determines fully C_i^I .

Determination of coefficients $\{a_{ij}^1\}$

Substituting (18) in (14.a) gives the form:

$$\left. \begin{aligned} & F^1 C_i^0 + F^0 \sum_{j=1}^n a_{ij}^1 C_j^0 - \\ & \left(e_i^1 S^0 C_i^0 + e_i^0 S^1 C_i^0 + e_i^0 S^0 \sum_{j=1}^n a_{ij}^1 C_j^0 \right) \end{aligned} \right\} = 0.$$

Multiplying the left expression by C_k^{+0} and with linearity and hermitic properties of F^0 and S^0 , we obtain:

$$\left. \begin{aligned} & F_{ki}^1 + \sum_{j=1}^n a_{ij}^1 e_j^0 \delta_{kj} - \\ & \left(e_i^1 \delta_{ki} + e_i^0 S_{ki}^1 + \sum_{j=1}^n e_i^0 a_{ij}^1 \delta_{kj} \right) \end{aligned} \right\} = 0$$

Taking into account the following relations:

$$\begin{cases} F^0 C_j^0 = e_j^0 S^0 C_j^0 \\ C_i^{+0} S^0 C_j^0 = \delta_{ij} \\ F_{ik}^1 = C_i^{+0} F^1 C_k^0 \\ S_{ik}^1 = C_i^{+0} S^1 C_k^0 \end{cases}$$

we can write:

$$(F_{ki}^1 - e_i^0 S_{ki}^1) + a_{ik}^1 (e_k^0 - e_i^0) - e_i^1 \delta_{ki} = 0.$$

We have two options for consideration by the indices i and k .

When $i \neq k$ ($\delta_{ki} = 0$), then:

$$\begin{cases} a_{ik}^1 = \frac{F_{ki}^1 - e_i^0 S_{ki}^1}{e_i^0 - e_k^0} \\ C_k^1 = \sum_{i=1, i \neq k}^n a_{ik}^1 C_i^0 \end{cases}$$

If $i = k$ ($\delta_{ki} = 1$), we obtain the previous expression (15).

Applying the relation between $\{a_{ik}^1\}$ with the decomposition of orthonormality condition (14.b) in the first order of full basis set, we obtain:

$$a_{ij}^{*1} + a_{ji}^1 = -S_{ij}^1 \quad i \neq j; \quad (19.a)$$

$$a_{ii}^{*1} + a_{ii}^1 = -S_{ii}^1 \quad i = j. \quad (19.b)$$

Determination of the matrix P^1

First-order ($m = 1$) correction of the density matrix P is expressed by:

$$P_{rs}^1 = \sum_{i=1}^M 2(C_{ir}^{*1} C_{is}^0 + C_{ir}^{*0} C_{is}^1).$$

The components r and s of the vector C_i^1 are given by $C_{ir}^1 = \sum_{j=1}^n a_{ij}^1 C_{jr}^0$ and $C_{is}^1 = \sum_{j=1}^n a_{ij}^1 C_{js}^0$; in P_{rs}^1 we obtain a new expression:

$$P_{rs}^1 = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^n 2(a_{ij}^{*1} C_{jr}^{*0} C_{is}^0 + a_{ij}^1 C_{ir}^{*0} C_{js}^0).$$

The relationship (19.a) allows to write $a_{ji}^{*1} = -(a_{ji}^1 + S_{ij}^1)$ and the expression above becomes:

$$P_{rs}^1 = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^n 2 \left(-a_{ji}^1 C_{jr}^{*0} C_{is}^0 - S_{ij}^1 C_{jr}^{*0} C_{is}^0 + a_{ij}^1 C_{ir}^{*0} C_{js}^0 \right).$$

Finally, after some transformations, the correction to the first order of the matrix density P is given by the following form:

$$\begin{aligned} P^1 = & - \left[\sum_{i=1}^M 2 C_i^{+0} S_{ii}^1 C_i^0 + \sum_{i \neq j}^M 2 (C_j^{+0} S_{ij}^1 C_i^0 + C_i^{+0} S_{ji}^1 C_j^0) \right] + \\ & \sum_{i=1}^M \sum_{j=M+1}^n 2 \left[\frac{F_{ij}^1 - e_i^0 S_{ij}^1}{e_i^0 - e_j^0} C_j^{+0} C_i^0 + \frac{F_{ji}^1 - e_i^0 S_{ji}^1}{e_i^0 - e_j^0} C_i^{+0} C_j^0 \right] \\ P_{rs}^1 = & - \left[\sum_{i=1}^M 2 C_{ir}^{*0} C_{is}^0 S_{ii}^1 + \sum_{i \neq j}^M 2 (S_{ij}^{*0} C_{jr}^0 C_{is}^0 + S_{ji}^1 C_{ir}^{*0} C_{js}^0) \right] + \\ & \sum_{i=1}^M \sum_{j=M+1}^n 2 \left[\frac{F_{ij}^1 - e_i^0 S_{ij}^1}{e_i^0 - e_j^0} C_{jr}^{*0} C_{is}^0 + \frac{F_{ji}^1 - e_i^0 S_{ji}^1}{e_i^0 - e_j^0} C_{ir}^{*0} C_{js}^0 \right] \end{aligned} \quad (20)$$

The relations in expression (20) show that the elements of P^1 are expressed in terms of those of F^1 which depend themselves on P^1 according to relations (16).

The resolution process is to initialize the matrix density to the first order with $P^1 = 0$, which allows us to calculate in the first round $F^1 = h^1$. P^1 is determined by the expression (20) which is then used to calculate $G^1(P^1)$ then F^1 . The iterative process is thus repeated until the system is in coherence.

Expression of F^I

With $F_{ij}^I = C_i^{+0} F^I C_j^0$ and $F^I = h^I + G^I$, then:

$$F_{ij}^I = \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n C_{ir}^{*0} (h_{rs}^1 + G_{rs}^1) C_{js}^0.$$

Developing $G_{rs} = \sum_{t=1}^n \sum_{u=1}^n P_{tu} \cdot g_{rstu}$ in terms of the first order yields:

$$G_{rs}^1 = \sum_{t=1}^n \sum_{u=1}^n P_{tu}^0 \cdot g_{rstu}^1 + \sum_{t=1}^n \sum_{u=1}^n P_{tu}^1 \cdot g_{rstu}^0. \quad (21)$$

Defining:

$$\bar{G}_{rs}(P^0, g^1) = \sum_{t=1}^n \sum_{u=1}^n P_{tu}^0 \cdot g_{rstu}^1 \quad (21.a)$$

$$\bar{\bar{G}}_{rs}^1(P^1) = \sum_{t=1}^n \sum_{u=1}^n P_{tu}^1 \cdot g_{rstu}^0, \quad (21.b)$$

eq. (21) becomes: $G_{rs}^1 = \bar{G}_{rs}^1(P^0, g^1) + \bar{\bar{G}}_{rs}^1(P^1)$.

Then

$$F_{ij}^1 = \left\{ \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n C_{ir}^{*0} C_{js}^0 \left[h_{rs}^1 + \bar{G}_{rs}^1(P^0, g^1) + \bar{\bar{G}}_{rs}^1(P^1) \right] \right\}.$$

So, we can write:

$$F_{ij}^1 = C_i^{+0} \left[h^1 + \bar{G}^1(P^0, g^1) + \bar{\bar{G}}^1(P^1) \right] C_j^0.$$

Taking into account the relations $C_i^{+0} h^1 C_j^0 = h_{ij}^1$, $C_i^{+0} \bar{G}^1 C_j^0 = \bar{G}_{ij}^1$ and $C_i^{+0} \bar{\bar{G}}^1 C_j^0 = \bar{\bar{G}}_{ij}^1$, we can write:

$$F_{ij}^1 = h_{ij}^1 + \bar{G}_{ij}^1 + \bar{\bar{G}}_{ij}^1. \quad (22)$$

Expression of the electronic energy E^I

The expressions of E_1^I and E_2^I derived from (7.a) and (7.b) are as follows:

$$E_1^I = \sum_{i=1}^M 2(h_{ii}^1 + C_i^{+1} h^0 C_i^0 + C_i^{+0} h^0 C_i^1); \quad (23.a)$$

$$E_2^I = \left\{ \sum_{i=1}^M (C_i^{+0} G^0 C_i^1 + C_i^{+1} G^0 C_i^0) + \sum_{i=1}^M \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n C_{ir}^{*0} G_{rs}^1 C_{is}^0 \right\}, \quad (23.b)$$

with:

$$E^I = E_1^I + E_2^I. \quad (23)$$

In developing $C_i^{+0} h^0 C_i^1 + C_i^{+1} h^0 C_i^0$ and taking into account that h^0 is hermetic, we have:

$$\left. \begin{aligned} &C_i^{+0} h^0 C_i^1 + C_i^{+1} h^0 C_i^0 = \\ &e_i^0 (C_i^{+0} S^0 C_i^1 + C_i^{+1} S^0 C_i^0) \\ &- (C_i^{+0} G^0 C_i^1 + C_i^{+1} G^0 C_i^0) \end{aligned} \right\}.$$

After the relationship of ortho-normalization at first order, we can write by replacing in expression (23.a):

$$\left. \begin{aligned} E_1^I &= \sum_{i=1}^M 2(h_{ii}^1 - e_i^0 S_{ii}^1) \\ &- \sum_{i=1}^M 2(C_i^{+0} G^0 C_i^1 + C_i^{+1} G^0 C_i^0) \end{aligned} \right\}. \quad (23.c)$$

Replacing expressions (23.c) and (23.b) in (23), we obtain:

$$\left. \begin{aligned} E^I &= \sum_{i=1}^M 2(h_{ii}^1 - e_i^0 S_{ii}^1) \\ &- \sum_{i=1}^M (C_i^{+0} G^0 C_i^1 + C_i^{+1} G^0 C_i^0) \\ &+ \sum_{i=1}^M \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n C_{ir}^{*0} G_{rs}^1 C_{is}^0 \end{aligned} \right\}. \quad (24)$$

Taking:

$$X = \sum_{i=1}^M \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n C_{ir}^{*0} G_{rs}^1 C_{is}^0 \quad (25)$$

and knowing the relation:

$$G_{rs}^1 = \sum_{j=1}^M \sum_{t=1}^n \sum_{u=1}^n 2 \begin{pmatrix} C_{jt}^{*1} C_{ju}^0 g_{rstu}^0 \\ + C_{jt}^{*0} C_{ju}^1 g_{rstu}^0 \\ + C_{jt}^{*0} C_{ju}^0 g_{rstu}^1 \end{pmatrix},$$

and replacing in (25), we will have:

$$X = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n \sum_{t=1}^n \sum_{u=1}^n 2 C_{ir}^{*0} C_{is}^0 \begin{pmatrix} C_{jt}^{*1} C_{ju}^0 g_{rstu}^0 \\ + C_{jt}^{*0} C_{ju}^1 g_{rstu}^0 \\ + C_{jt}^{*0} C_{ju}^0 g_{rstu}^1 \end{pmatrix}. \quad (26)$$

This relationship is divided into three terms: $X1$, $X2$ and $X3$.

$$X_1 = \sum_{i,j}^M \sum_{rstu}^n 2C_{ir}^{*0} C_{is}^0 C_{jt}^{*1} C_{ju}^0 g_{rstu}^0 ; \quad (26.a)$$

$$X_2 = \sum_{i,j}^M \sum_{rstu}^n 2C_{ir}^{*0} C_{is}^0 C_{jt}^{*0} C_{ju}^1 g_{rstu}^0 ; \quad (26.b)$$

$$X_3 = \sum_{i,j}^M \sum_{rstu}^n 2C_{ir}^{*0} C_{is}^0 C_{jt}^{*0} C_{ju}^1 g_{rstu}^1 . \quad (26.c)$$

In performing a permutation of indices according to $r \leftrightarrow t$, $s \leftrightarrow u$, $i \leftrightarrow j$ and knowing the property of indiscernible electrons ($g_{turs}^0 = g_{rstu}^0$) and through the definitions presented, we obtain:

$$X_1 = \sum_{i=1}^M C_i^{+1} G^0 C_i^0 ; \quad (27.a)$$

$$X_2 = \sum_{i=1}^M C_i^{+0} G^0 C_i^1 ; \quad (27.b)$$

$$X_3 = \sum_{i=1}^M C_i^{+0} \bar{G}^1 C_i^0 . \quad (27.c)$$

The relationship (26) becomes:

$$X = \sum_{i=1}^M \left(C_i^{+1} G^0 C_i^0 + C_i^{+0} G^0 C_i^1 + C_i^{+0} \bar{G}^1 C_i^0 \right).$$

Replacing this expression in (24), we obtain:

$$E^1 = \sum_{i=1}^M \left[2 \left(h_{ii}^1 - e_i^0 S_{ii}^1 \right) + \bar{G}_{ii}^1 \right] . \quad (28.a)$$

And in view of a matrix sense:

$$E^1 = \sum_{i=1}^M 2C_i^{+0} \left(h^1 - e_i^0 S^1 + \frac{1}{2} \bar{G}^1 \right) C_i^0 . \quad (28.b)$$

Expression of energy of first order on a basis LCAO

The expression (28.b) of energy E^1 can be rewritten as:

$$E^1 = \left\{ \begin{aligned} & \sum_{i=1}^M 2C_i^{+0} h^1 C_i^0 \\ & + \sum_{i=1}^M C_i^{+0} \bar{G}^1 C_i^0 \\ & - \sum_{i=1}^M 2e_i^0 C_i^{+0} S^1 C_i^0 \end{aligned} \right\} .$$

The term $C_i^{+0} h^1 C_i^0$ is a scalar product which develops according to:

$$C_i^{+0} h^1 C_i^0 = \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n C_{ir}^{*0} h_{rs}^1 C_{is}^0 .$$

Then, applying this development to all of the terms, we have:

$$E^1 = \left\{ \begin{aligned} & \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n h_{rs}^1 \left(\sum_{i=1}^M 2C_{ir}^{*0} C_{is}^0 \right) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n \bar{G}_{rs}^1 \left(\sum_{i=1}^M 2C_{ir}^{*0} C_{is}^0 \right) \\ & - \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n S_{rs}^1 \left(\sum_{i=1}^M 2C_{ir}^{*0} C_{is}^0 e_i^0 \right) \end{aligned} \right\} .$$

Introducing:

$$Q_{rs}^0 = \sum_{i=1}^M 2C_{ir}^{*0} C_{is}^0 e_i^0 \quad (29)$$

and knowing that $P_{rs}^0 = \sum_{i=1}^M 2C_{ir}^{*0} C_{is}^0$, we obtain finally:

$$E^1 = \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n \left[P_{rs}^0 \left(h_{rs}^1 + \frac{1}{2} \bar{G}_{rs}^1 \right) - Q_{rs}^0 S_{rs}^1 \right] . \quad (30)$$

Conclusion

In this work, we developed a new formalism of the McWeeny perturbation theory for expressing the first-order energy correction under external perturbation in the LCAO scheme.

The dependence of the LCAO basis on an external perturbation was taken into account and treated as a perturbation amending the basis set LCAO.

We have established the expressions of the first-order perturbed energies, and our results show that McWeeny approach is a particular case of our global formalism.

Annex: Particularities related to an applied external magnetic field

In the presence of an external perturbation represented by a magnetic field $\vec{B}$, the basis set is built on an ensemble of GIAO (Gauge Invariant Atomic Orbital), proposed by London [14], and expressed as follows:

$$\chi_{k(K)}(\vec{\rho}_K, \vec{B}) = \phi_{k(K)}(\vec{\rho}_K) \eta_{k(K)}(\vec{\rho}_K, \vec{B}) ;$$

where $\chi_{k(K)}(\vec{\rho}_K, \vec{B})$ and $\phi_{k(K)}(\vec{\rho}_K)$ represent respectively the atomic orbital in presence and in absence of perturbation, centered on the K nucleus, and $\eta_{k(K)}(\vec{\rho}_K, \vec{B})$ the term introduced by London defined as:

$$\eta_{k(K)}(\vec{\rho}_K, \vec{B}) = \exp\left\{-\frac{ie}{\hbar c} \cdot \vec{A}_K \cdot \vec{r}\right\},$$

where $\vec{r}$ represents the position vector of the electron compared with an origin, $\vec{\rho}_K = \vec{r} - \vec{R}_K$ is its position vector compared with the K nucleus and $\vec{A}_K = \frac{1}{2} \vec{B} \wedge \vec{R}_K$ signifies the potential-vector on this nucleus, centered on $\vec{R}_K$.

On the other hand, for a weak perturbation, one knows that the energy can be developed in Mac-Laurin-Taylor's series, according to:

$$E = E^0 + E^1 + E^2 + \dots$$

where E^0 , E^1 , E^2 ... represent respectively the unperturbed energy and the first, second, ... etc perturbed energies.

The size of the first perturbation corresponds to the components of magnetic dipolar moment and is defined as follows:

$$\mu_u = -\left(\frac{\partial E}{\partial B_u}\right)_{B_u=0}.$$

The label u means one of the three orientations of space x , y or z .

References

- [1] Roothaan, C.C.J., Rev. Phys. Mod., 23(1) (1951) 69.
- [2] Roothaan, C.C.J., Rev. Phys. Mod., 32(2) (1960) 179.
- [3] Malykhanov, Y.B., Meshkov, V.V. and Chadin, R.M., Journal of Applied Spectroscopy, 7 (2003) 5.
- [4] Dalgarno, A., London, Proc. Roy. Soc. A, 251 (1959) 282.
- [5] Stiehler, J. and Hinze, J., J. Phys. B, 28 (1995) 4055.
- [6] Malykhanov, Y.B. and Pravosudov, R.N., Prikl. Spektrosk. Zh., 67(1) (2000) 5.
- [7] Stiehler, J. and Hinze, J., J. Phys. B, 28 (1995) 4071.
- [8] Brattsev, V.F. and Khodyreva, N.V., Opt. Spektrosk., 50(2) (1981) 22.
- [9] Brattsev, V.F. and Khodyreva, N.V., Opt. Spektrosk., 54(5) (1983) 927.
- [10] Stewart, R.F., Mol. Phys., 30(4) (1975) 1288.
- [11] Malykhanov, Y.B., Meshkov, V.V. and Chadin, R.M., Prikl. Spektrosk. Zh., 70(5) (2003) 588.
- [12] Van Vleck, J.H., Electric and Magnetic Susceptibilities, (Oxford University Press, Oxford, 1932) 275.
- [13] McWeeny, R., Phys. Rev., 126 (1962) 1034.
- [14] London, F., J. Phys. Radium, 8 (1937) 397.

Jordan Journal of Physics

ARTICLE

Networks of Identical Capacitors with a Substitutional Capacitor

M.Q. Owaidat

Department of Physics, Al-Hussein Bin Talal University, Ma'an, 20, 71111, Jordan.

Received on: 29/1/2012; Accepted on: 30/5/2012

Abstract: The effective capacitance between two arbitrary lattice points in a finite or infinite network of identical capacitors is investigated for a perturbed lattice, by substituting a single capacitor, using lattice Green's function. The relation between the capacitance and the lattice Green's function for the perturbed lattice is derived. Solving Dyson's equation, the Green's function and the capacitance of the perturbed lattice are expressed in terms of those of the perfect lattice. Numerical results for a square lattice are presented.

Keywords: Capacitance; Substitutional; Lattice Green's Function.

PACS (2003): 61.50.Ah, 63.20.-e, 71.15.-m, 84.37.+q.

Introduction

The central problem in electric circuit theory is calculating the resistance between two arbitrary nodes in an infinite square lattice of identical resistors [1, 2]. Over many years, numerous authors have studied this problem and its extension to several infinite lattice structures such as d-dimensional hypercubic, rectangular, triangular and honeycomb lattices of resistors [3, 4, 5].

Recently, Cserti demonstrated how the Green's function method can be applied to find the resistance of an infinite resistor network [5]. Excellent introductions to Green's functions can be found in [6-8]. A great deal of research has been conducted on lattice Green's function over the last fifty years or so and other introductions do exist, see for example [9], and for more works on this topic, see references in [5]. The Green's function method can be a very efficient way to study the resistance in a perturbed lattice in which one of the bonds is missing in the lattice [10]. The theory of perturbed lattices developed in [10] can be extended to other perturbations such as replacing one resistor with another one [11] or introducing an extra resistor in the perfect lattice [12].

The problem of a capacitor network is equally interesting in circuit theory. The behavior of the impedance of a standard ladder network of capacitors and inductors is studied in [13]. Wu has developed a theory to compute two-point resistances for a finite network of resistors [14], [15] for impedance networks. Recently, the two-point capacitance is evaluated in an infinite perfect network of identical capacitances using Green's function method [16].

In references [17, 18], this method is also used for calculating the capacitance of an infinite network when it is perturbed by removing one bond and by removing two bonds from the perfect lattice. These problems have been studied only for infinite networks. More recently, the impedance of infinite perfect and perturbed lattice networks is investigated using the Green's function method [19].

In the present work, the lattice Green's function approach [17] is used to compute the capacitance of a perturbed lattice which can be either finite or infinite that is obtained by replacing one capacitor in the perfect lattice by another. The capacitance across the

substitutional capacitor equals the parallel combination of the capacitance between the two ends of the missing bond and the substitutional capacitor.

The paper is arranged as follows. In the next section, a review for the perfect lattice is given for completeness [5, 10, 16]. Then, the perturbed lattice is considered. Numerical results for perturbed square lattice and discussion are then presented. The paper is ended with a brief conclusion.

Lattice Green's function and capacitance for perfect lattice

Consider an infinite d -dimensional lattice of identical capacitances C . Let $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots, \hat{x}_d$ be a set of orthogonal unit vectors, so that $\hat{x}_i, \hat{x}_j = \delta(i, j)$. If the primitive lattice vectors are $\mathbf{a}_i = a_i \hat{x}_i$, then all points in the lattice are given by the lattice vectors $\mathbf{r}_n = \sum_{i=1}^d n_i \mathbf{a}_i$, where n_i is an integer (positive or negative or even zero). We wish to find the capacitance between two arbitrary lattice points of an infinite perfect lattice. We denote the charge that can enter at site $\mathbf{r}_n$ by $Q(\mathbf{r}_n)$ from a source outside the lattice and the potential at site $\mathbf{r}_n$ will be denoted by $V(\mathbf{r}_n)$. Using Kirchhoff's law and the electrical charge/potential relationship for a capacitor, the charge at node $\mathbf{r}_n$ is given by:

$$Q(\mathbf{r}_n) = C \sum_{i=1}^d (2V(\mathbf{r}_n) - V(\mathbf{r}_n + \mathbf{a}_i) - V(\mathbf{r}_n - \mathbf{a}_i)). \quad (1)$$

Using Dirac vector space notation, let $|n\rangle$ denote the lattice basis vector associated with the lattice point $\mathbf{r}_n$; then:

$$V(\mathbf{r}_n) = \langle n|V\rangle \text{ and } Q(\mathbf{r}_n) = \langle n|Q\rangle. \quad (2)$$

It is assumed that $|\mathbf{r}\rangle$ forms a complete orthonormal set, i.e., $\langle l|m\rangle = \delta(l, m)$ and $\sum_l |l\rangle \langle l| = \mathbf{1}$. In the lattice basis, the vectors $|V\rangle$ and $|Q\rangle$ are:

$$|V\rangle = \sum_n V(\mathbf{r}_n) |n\rangle \text{ and } |Q\rangle = \sum_n Q(\mathbf{r}_n) |n\rangle. \quad (3)$$

Eq. (1) can be written as the Poisson-like equation:

$$L_0 |V\rangle = -\frac{1}{C} |Q\rangle; \quad (4)$$

where L_0 is the so-called lattice Laplacian operator:

$$L_0 = \left\{ \sum_{m,n} \sum_{i=1}^d |m\rangle \left(-2\delta(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_n) - \delta(\mathbf{r}_m + \mathbf{a}_i, \mathbf{r}_n) - \delta(\mathbf{r}_m - \mathbf{a}_i, \mathbf{r}_n) \right) \langle n| \right\}. \quad (5)$$

Here, one needs to solve Eq. (4) for $|V\rangle$ for a given charge configuration $|Q\rangle$ formally as:

$$|V\rangle = \frac{1}{C} G_0 |Q\rangle; \quad (6)$$

where G_0 is the perfect lattice Green's function defined by:

$$L_0 G_0 = -1. \quad (7)$$

To calculate the capacitance between the sites $\mathbf{r}_l$ and $\mathbf{r}_m$, we assume that the charge Q enters at site $\mathbf{r}_l$ and $-Q$ exits at site $\mathbf{r}_m$ and that the charge is zero at all other sites. Hence, the charge at lattice point $\mathbf{r}_n$ can be written as:

$$Q(\mathbf{r}_n) = Q(\delta(l, n) - \delta(m, n)), \text{ for all } n. \quad (8)$$

Using Eqs. (7) and (8), the electric potential at any point $\mathbf{r}_k$ is given by:

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}_k) &= \frac{1}{C} \sum_n G_0(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_n) Q(\mathbf{r}_n) \\ &= \frac{Q}{C} (G_0(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) - G_0(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_m)) \end{aligned} \quad (9)$$

The effective capacitance between sites $\mathbf{r}_l$ and $\mathbf{r}_m$ in the perfect lattice, the quantity we wish to compute, is by definition the ratio:

$$\begin{aligned} C_0(\mathbf{r}_l, \mathbf{r}_m) &= \frac{Q}{V(\mathbf{r}_l) - V(\mathbf{r}_m)} \\ &= \frac{C}{2(G_0(\mathbf{r}_l, \mathbf{r}_l) - G_0(\mathbf{r}_l, \mathbf{r}_m))} \end{aligned} \quad (10)$$

where the symmetry properties of the Green's function G_0 have been used.

Lattice Green's function and capacitance for perturbed lattice

In this section, we consider the perturbed capacitor network. As the perfect lattice, the combination of Kirchhoff's law and charge/potential relationship for a capacitor

again results in a Poisson-like equation involving a lattice Laplacian operator. This operator is a sum of a lattice Laplacian L_0 associated with the perfect lattice and an operator L' corresponding to the perturbation arising from a substitutional capacitor. A relation between the capacitance and Green's function for the perturbed lattice is given in the following part of this section. Green's function satisfies the so-called Dyson equation, which can be solved exactly for the perturbed Green's function in terms of the perfect Green's function. Finally, an explicit formula can be derived for the capacitance of the perturbed lattice in terms of the capacitance of the perfect lattice.

The charge contribution $\delta Q(\mathbf{r}_i)$ at lattice point $\mathbf{r}_i$ due to the bond $(\mathbf{r}_{l_0}, \mathbf{r}_{m_0})$ in the perfect lattice is given by:

$$\frac{\delta Q(\mathbf{r}_i)}{C} = \left(\delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{l_0}) - \delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{m_0}) \right) \left(V(\mathbf{r}_{l_0}) - V(\mathbf{r}_{m_0}) \right). \quad (11)$$

As mentioned in section 1, if we replace the bond $(\mathbf{r}_{l_0}, \mathbf{r}_{m_0})$ with a substitutional capacitor C' , the equivalent capacitance between $\mathbf{r}_{l_0}$ and $\mathbf{r}_{m_0}$ in the perturbed lattice will be equal to the parallel combination of the capacitance between the missing bond $(\mathbf{r}_{l_0}, \mathbf{r}_{m_0})$ and the substitutional capacitor. Thus, the charge contribution $\delta Q'(\mathbf{r}_i)$ at lattice point $\mathbf{r}_i$ due to the substitutional capacitor C' in the perturbed lattice is given by:

$$\begin{aligned} \frac{\delta Q'(\mathbf{r}_i)}{C} &= \frac{C'}{C} \frac{\delta Q(\mathbf{r}_i)}{C} \\ &= \frac{C'}{C} \left(\delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{l_0}) - \delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{m_0}) \right) * \\ &\quad \left(V(\mathbf{r}_{l_0}) - V(\mathbf{r}_{m_0}) \right). \end{aligned} \quad (12)$$

The net contribution of the charge at site $\mathbf{r}_i$ is:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta Q(\mathbf{r}_i)}{C} &= \frac{\delta Q'(\mathbf{r}_i)}{C} - \frac{\delta Q(\mathbf{r}_i)}{C} \\ &= \frac{(C' - C)}{C} \left(\delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{l_0}) - \delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{m_0}) \right) \\ &\quad * \left(V(\mathbf{r}_{l_0}) - V(\mathbf{r}_{m_0}) \right). \end{aligned} \quad (13)$$

Using Dirac notation in the above equation, we get:

$$\Delta Q(\mathbf{r}_i) = \langle i | L' | V \rangle; \quad (14)$$

where the operator L' is the perturbation arising from the substitutional capacitor:

$$L' = a |\alpha\rangle \langle \alpha|, \quad (15)$$

with

$$a = \frac{(C' - C)}{C} \quad \text{and} \quad |\alpha\rangle = |l_0\rangle - |m_0\rangle. \quad (16)$$

Now, the charge $Q(\mathbf{r}_i)$ in the perturbed lattice at site $\mathbf{r}_i$ is given by:

$$\frac{Q(\mathbf{r}_i)}{C} = (-L_0 V)(\mathbf{r}_i) + \frac{\Delta Q(\mathbf{r}_i)}{C}. \quad (17)$$

Substituting Eq. (14) into Eq. (17), one can write Kirchhoff's law for perturbed lattice as:

$$L | V \rangle = -\frac{1}{C} | Q \rangle; \quad (18)$$

where L is the lattice Laplacian operator for the perturbed lattice:

$$L = L_0 - L'. \quad (19)$$

Similar to the perfect lattice, the perturbed Green's function G is defined as:

$$LG = -1. \quad (20)$$

Using Eq. (19) in (20), we obtain Dyson's equation [8]:

$$G = G_0 - G_0 L' G_0 + G_0 L' G_0 L' G_0 - \dots - G_0 L' G_0 L' G_0 L' G_0 + \dots \quad (21)$$

Substituting Eq. (15) into (21) and performing the summation exactly, one obtains:

$$\begin{aligned} G &= G_0 - a G_0 |\alpha\rangle \langle \alpha| \\ &\quad \sum_{n=0}^{\infty} (-a \langle \alpha | G_0 | \alpha \rangle)^n \langle \alpha | G_0 \\ &= G_0 - \frac{a G_0 |\alpha\rangle \langle \alpha| G_0}{1 + a \langle \alpha | G_0 | \alpha \rangle}. \end{aligned} \quad (22)$$

After inserting (16) into (22), the matrix elements of G can be written in terms of the matrix elements of G_0 :

$$\begin{aligned} G(l, m) &= G_0(l, m) + \\ &\quad \frac{(G_0(l, l_0) - G_0(l, m_0))(G_0(m, l_0) - G_0(m, m_0))}{\frac{C}{C' - C} - 2(G_0(l_0, l_0) - G_0(l_0, m_0))}. \end{aligned} \quad (23)$$

Note that the denominator in the above equation is never equal to zero and is always positive.

In order to calculate the capacitance for the perturbed lattice, one can follow the same steps for the perfect lattice. However, the capacitance between sites $\mathbf{r}_l$ and $\mathbf{r}_m$ in the perturbed lattice is:

$$C(l, m) = \frac{Q}{V(\mathbf{r}_l) - V(\mathbf{r}_m)} = \frac{C}{(G(l, l) + G(m, m) - 2G(l, m))}. \quad (24)$$

Substituting (23) into (24) and using (10), we obtain (after some simple algebraic manipulations) the perturbed capacitance between sites $\mathbf{r}_l$ and $\mathbf{r}_m$ in terms of the perfect capacitance C_0 :

$$C(l, m) = \frac{1}{C_0(l, m)} + \left\{ \frac{\left(\frac{1}{C_0(l, l_0)} + \frac{1}{C_0(m, m_0)} - \frac{1}{C_0(l, m_0)} - \frac{1}{C_0(m, l)} \right)^2}{4 \left(\frac{1}{C - C'} - \frac{1}{C_0(l_0, m_0)} \right)} \right\}. \quad (25)$$

This is the final result for the capacitance between two arbitrary sites of the perturbed lattice (finite or infinite) in which the capacitor between the sites $\mathbf{r}_{l_0}$ and $\mathbf{r}_{m_0}$ in the perfect lattice is replaced by capacitor C' .

As a special case, letting C' go to zero, the problem reduces to broken bond case [16], so we have:

$$C(l, m) = \frac{1}{C_0(l, m)} + \left\{ \frac{\left(\frac{1}{C_0(l, l_0)} + \frac{1}{C_0(m, m_0)} - \frac{1}{C_0(l, m_0)} - \frac{1}{C_0(m, l)} \right)^2}{4 \left(\frac{1}{C} - \frac{1}{C_0(l_0, m_0)} \right)} \right\}. \quad (26)$$

One can show from Eq. (25) that when $C' = C$, the problem reduces to the perfect lattice (i.e., $C(l, m) = C_0(l, m)$). It is easy to find the capacitance across the substitutional

capacitor in the perturbed lattice. Using Eq. (25), the capacitance between sites $\mathbf{r}_{l_0}$ and $\mathbf{r}_{m_0}$ is:

$$C_{sub}(l_0, m_0) = C_0(l_0, m_0) - C + C' \quad (27)$$

From Eq. (26), the capacitance between the ends of the missing bond is:

$$C_{broken}(l_0, m_0) = C_0(l_0, m_0) - C. \quad (28)$$

Thus,

$$C_{sub}(l_0, m_0) = C_{broken}(l_0, m_0) + C' \quad (29)$$

as mentioned previously.

Finally, one can note that the perfect lattice Laplacian given in Eq. (6) was not used in the derivation of Eq.(25). Therefore, the expression in Eq. (25) is valid for any lattice structure, finite or infinite, in which each cell has only one lattice point such as simple cubic and triangular lattices.

Numerical results and discussion

Below we present some numerical results for infinite and finite perturbed square lattices. In the case of an infinite square lattice, we used the known results [16] for the unperturbed infinite lattice for calculating the effective capacitance between sites $\mathbf{r}_l = (0,0)$ and $\mathbf{r}_m = (m_x, m_y)$ in the infinite perturbed square lattice using Eq. (25). As an example, we show the results when the capacitor between the nodes $\mathbf{r}_{l_0} = (0,0)$ and $\mathbf{r}_{m_0} = (1,0)$ is replaced by the substitutional capacitor $C' = 4C$. In another example, we consider $C' = C/4$ is substituted between the origin and the node (1,0). Fig. 1 shows the capacitance between the origin and a point on the x -axis with and without substitutional capacitor. One can see that the perturbed capacitance is always larger than the perfect capacitance if $C' > C$ and smaller than that if $C' < C$. This is obvious from the second term in Eq. (25). The capacitance is not symmetric as $m_x \rightarrow -m_x$ because translational symmetry is broken in the perturbed lattice.

In the case of a finite square lattice, one can obtain the effective capacitance between the origin (center of lattice) and the node (m_x, m_y) in an $M \times N$ perfect square lattice of identical capacitances C [15]:

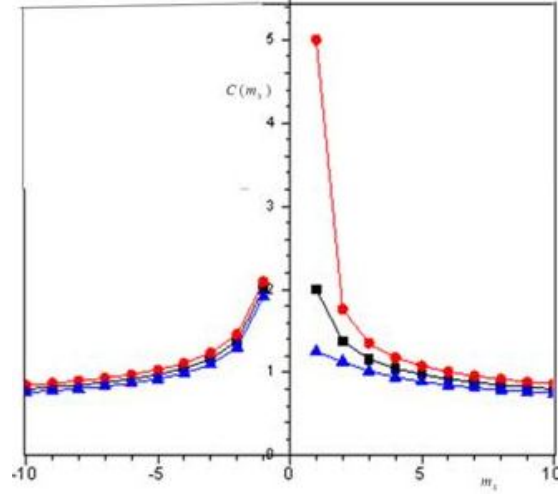


FIG.1. The equivalent capacitance in units of C in the perfect (■) and perturbed infinite square lattices measured between the origin and $(m_x, 0)$. The cases of substitution: $C' = 4C$ (●) between the origin and the node $(1, 0)$ and $C' = C/4$ (▲) between the origin and the node $(1, 0)$.

$$\frac{C}{C(m_x, m_y)} = \frac{1}{M}|m_x| + \frac{1}{N}|m_y| + \frac{2}{MN} \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{m=1}^{M-1} \frac{\left(\cos \frac{m\pi}{2} \cos \frac{n\pi}{2} - \cos \left(m_x + \frac{M}{2} \right) \frac{m\pi}{M} \cos \left(m_y + \frac{N}{2} \right) \frac{n\pi}{N} \right)^2}{2 - \cos \frac{m\pi}{M} - \cos \frac{n\pi}{N}}; \quad (30)$$

where M and N are the number of nodes in x and y - coordinates, respectively. Using Mathematica 5, we calculate the capacitance between the origin and the point (m_x, m_y) in a 21×21 perfect square lattice, then we repeat the calculations for a 21×21 perturbed square lattice. In Fig. 2, the capacitances for the infinite

and a 21×21 perturbed square lattices are plotted as functions of m_x . It can be seen that the finiteness of the perturbed network causes the equivalent capacitances to be greater than the values for an infinite network, which is expected because the charge has fewer paths.

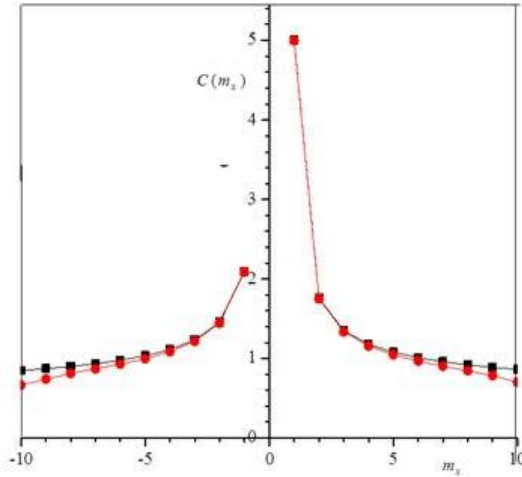


FIG.2. The equivalent capacitance in units of C in the infinite (●) and a 21×21 (■) perturbed square lattices measured between the origin and the point $(m_x, 0)$. The substitutional capacitor is $C' = 4C$, with its ends at $r_{l_0} = (0, 0)$ and $r_{m_0} = (1, 0)$.

Conclusion

In this work, using the Green's function method, we calculated the capacitance between arbitrary lattice points of a perturbed capacitor lattice obtained by replacing one capacitor with another one. We derived a formula for the matrix elements of the lattice Green's function for the perturbed lattice in terms of that for the perfect lattice by solving Dyson's equation. We expressed the capacitance between arbitrary lattice points of the perturbed network in terms of the capacitances of the unperturbed lattice.

We computed the increase ($C' > C$) and decrease ($C' < C$) of the capacitances for the

perturbed square lattice along the substitutional capacitor.

A similar calculation can be performed for simple cubic and triangular lattices. Finally, it is worth mentioning that when more than one substitutional capacitor are inserted, the method outlined above is still valid.

Acknowledgment

I would like to thank Prof. Jamil Khalifeh and Dr. Raed Hijjawi for helpful discussions throughout this work.

References

- [1] Van Der Pol, B. and Bremmer, H., "Operational Calculus Based on the Two-Sided Laplace Integral", 2nd Ed., (Cambridge: Cambridge University Press, 1955), 371.
- [2] Aitchison, R.E., Am. J. Phys., 32 (1964) 566.
- [3] Venezian, G., Am. J. Phys., 62 (1994) 1000.
- [4] Atkinson, D. and Van Steenwijk, F.J., Am. J. Phys., 67 (1999) 486.
- [5] Cserti, J., Am. J. Phys., 68 (2000) 896.
- [6] Barton, G., "Elements of Green's Function and Propagation: Potential, Diffusion and Waves", (Oxford University Press, 1989).
- [7] Duffy, D.G., "Green's Function with Applications", (Chapman and Hall / CRC, 2001).
- [8] Economou, E.N., "Green's Function in Quantum Physics", 3rd Ed., (Berlin: Springer, 2006).
- [9] Katsura, S., Morita, T., Inawashiro, S., Horiguchi, T. and Abe, Y., J. Math. Phys., 12 (1971) 892.
- [10] Cserti, J., David, G. and Piroth, A., Am. J. Phys., 70 (2002) 153.
- [11] Owaidat, M.Q., Hijjawi, R.S. and Khalifeh, J.M., Modern Physics Letters B, 19 (2010) 2057.
- [12] Owaidat, M.Q., Hijjawi R.S. and Khalifeh, J.M., J. Phys. A: Math. Theor., 43 (2010) 375204.
- [13] Van Enk, S.J., Am. J. Phys., 68 (9) (2000) 854.
- [14] Wu, F.Y., J. Phys. A: Math. Gen., 37 (2004) 6653.
- [15] Tzeng, W.J. and Wu, F.Y., J. Phys. A: Math. Gen., 39 (2006) 8579.
- [16] Asad, J.H., Sakaji, A.J., Hijjawi, R.S. and Khalifeh, J.M., Int. J. Mod. Phys. B., 19 (24) (2005) 3713.
- [17] Hijjawi, R.S., Asad, J.H., Sakaji, A.J. and Khalifeh, J.M., Int. J. Mod. Phys. B, 21 (2) (2007) 199.
- [18] Asad, J.H., Sakaji, A.J., Hijjawi, R.S. and Khalifeh, J.M., Eur. Phys. J. B, 52 (2) (2006) 365.
- [19] Al-Owaidat, M.Q., Ph.D. Thesis, University of Jordan (2010), Amman, Jordan (Unpublished).

Jordan Journal of Physics

ARTICLE

Effect of Water Absorption on Some Mechanical Properties of Unsaturated Polyester Resin/Natural Rubber Blends

Awham M. Hameed

Applied Science Department, University of Technology, Baghdad, Iraq.

Received on: 19/7/2011; Accepted on: 2/9/2012

Abstract: Binary polymer blend (UPE/ NR) with a weight ratio of (95/5)% was prepared by mixing of unsaturated polyester resin (UPE) with natural rubber (NR). Standard dimensions of specimens were prepared from the polymer blend. Compression, bending and impact tests were carried out on the prepared specimens. This investigation was conducted before and after the immersion of the specimens into three types of water (distilled, tap and rain water) for different periods of time (1, 2... 5 weeks). The (stress-strain) curves were obtained from compression test; while the Young's modulus values (E) were obtained from three-point bending test. The impact strengths (I.S.) were found from the impact test before and after immersion into water. The results have exhibited that the mechanical behavior of the prepared blend is affected by the nature of water and immersion time. In general, the strain rates and the impact strength of the polymer blend have increased after immersion; while the Young's modulus has decreased at the same conditions.

Keywords: Polymer blend; Unsaturated polyester; Natural rubber; Compression; Bending; Impact strength.

Introduction

An advance in science and technology requires a variety of modified polymers with demanded performance properties at lower cost. However, it has become more difficult to find all the requested mechanical properties in the existing homopolymer; thus polymer blends or alloys and composite materials have been considered to be the more promising approach to the production of new materials and have been extensively studied [1].

The term polyester is analogous to the term steel in metals. Just as there are many types of steels with widely varying properties, so too there are a multitude of polyesters with a significant range of properties. Unsaturated polyesters are sold in a liquid form that requires catalyzation in order to cure [2].

Unsaturated polyesters are manufactured by condensation and polymerization of dicarboxylic

acid (maleic acid) and dihydric alcohol (e.g., glycol) followed by curing with a cross-linking agent (styrene). They have good resistance to heat and most chemicals except strong acids and alkalies. They are affected by sunlight unless stabilized [3].

Natural rubber is an elastic material present in the latex of certain plants. More than 95 percent of this rubber is obtained from the latex of rubber trees. It is polymerized from isoprene. The polyhydro-carbon chain rubber consists of 2000-3000 monomer links. The polymerization occurs by a biochemical reaction in which a particular type of enzyme acts as a catalytic agent [3].

The important properties of cured resins which determine their service life are resistance to deformation and fracture under different time / temperature or sudden loading conditions.

Among the curable resins, the unsaturated polyesters, particularly multi-component, polymaleate compounds, have the lowest stress-strain indices. This is probably due to deficiencies at the supermolecular level in their microheterogeneous structure when cured. The defects distributed between the dense network globules or particles, serve as points of stress concentration. In the defective areas, weak regions are formed where the basic processes responsible for the deformation and fracture of cured polyester resins take place [4].

Blends and alloys are made by physical mixing of two or more polymers (also called homopolymers). At least 5% of another polymer is necessary to create a blend or an alloy, and a number of microstructures can result. If the homopolymers are miscible, a single-phase blend or alloy will result. If the component polymers are immiscible, a multi-phase alloy or blend results. The additive polymers can form spheres in the host matrix; they can form cylinders that are usually oriented in the direction of flow in processing; or they can form lamella (alternating layers, like plywood) [2].

The addition of elastomeric components improves some mechanical properties; particularly the fracture toughness of cured polyester resins. Several authors have shown that the improvement of the fracture toughness of thermosetting resins depends on three factors [5]:

- (a) The miscibility of the rubber with the modified resin in the liquid phase.
- (b) The particle size of the rubber.
- (c) The selectivity and reactivity of the functional groups in the rubber.

Cao *et al.* [6] studied the mechanical properties of an epoxy resin toughened by polyester. The results showed that the impact strength and tensile strength of the modified epoxy resin were remarkably greater than those of the unmodified cured epoxy resin. And the mechanical properties depended greatly on the congregating state of the polyester added.

LaPlante and Sullivan [7] investigated the behavior of cured FM300 epoxy; a structural film adhesive, subjected to partial and full moisture saturation. In this investigation, three separate but interrelated test methods were used: stress relaxation, fracture toughness and dynamic mechanical testing. Fracture testing showed that

the material toughness increased with increasing moisture concentration; plasticization effects were dominant.

In a previous publication [8], a preliminary work was carried out for preparing and evaluating the mechanical properties of polymer blend obtained from unsaturated polyester resin (UPE) compound with synthetic rubbers (Styrene Butadiene Rubber (SBR), Nitrile Butadiene Rubber (NBR) and Butadiene Rubber (BR)). In the present work, Natural Rubber (NR) was replaced as an addition material for the same resin (UPE) to study the mechanical behavior of the prepared polymer blend (UPE/ NR). The aim of this work is to study some mechanical properties of (UPE/NR) blend before and after immersion into (distilled, tap and rain) water for different periods of time.

Experimental part

Procedure of sample preparation

(UPE/ NR) polymer blend with a weight ratio of (95/5) % was prepared by mixing of unsaturated polyester resin (UPE) with natural rubber (NR). The (NR) was supplied by Babylon Tires Factory in Babylon, Iraq; while the (UPE) resin was supplied by Saudi Industrial Resins (SIR) Company, Saudi Arabia. The curing agent (hardener) was methylethylketone peroxide (MEKP); while the catalyst system was a solution of cobalt octoate in dibutyl phthalate as accelerator of reaction. After mixing the two liquid polymers (UPE with NR), the hardener was added to the mixture with 2% ratio; while the ratio of the accelerator was 0.5%.

This binary polymer blend was poured into a metal mould (Aluminum) with dimensions of (14x12x5) cm at room temperature; then after solidification, the resulting cast was put into an oven with a set temperature of 50°C for (1 hour) to ensure that full curing was achieved. Post-curing treatment reduces weight loss significantly; while higher temperature and relative humidity increase the weight loss rate [12].

The compression and bending test specimens were prepared from the casted sheet according to ASTM-D695 and ASTM-D790 standards respectively; while the impact test specimens were prepared according to (ISO-179) standard.

In addition to the points mentioned above, it is vital to mention the following:

- An addition more than 5% of NR reduces the stiffness of resin and makes it behave as a ductile material, therefore the addition ratio of (5%) was selected.
- The surfaces of all specimens were polished by a grinding machine before testing.
- The total dissolved salts (TDS) and the (pH) of each type of water were measured and the data presented in Table (1).

TABLE 1. The values of (TDS) and (pH) of each type of water.

Type of water	TDS (ppm) ± 2	pH ± 0.1
Distilled water	121	7
Rain water	103	7.7
Tap water	426	7.1

Fig. 1 shows photographic images for some prepared samples under study.

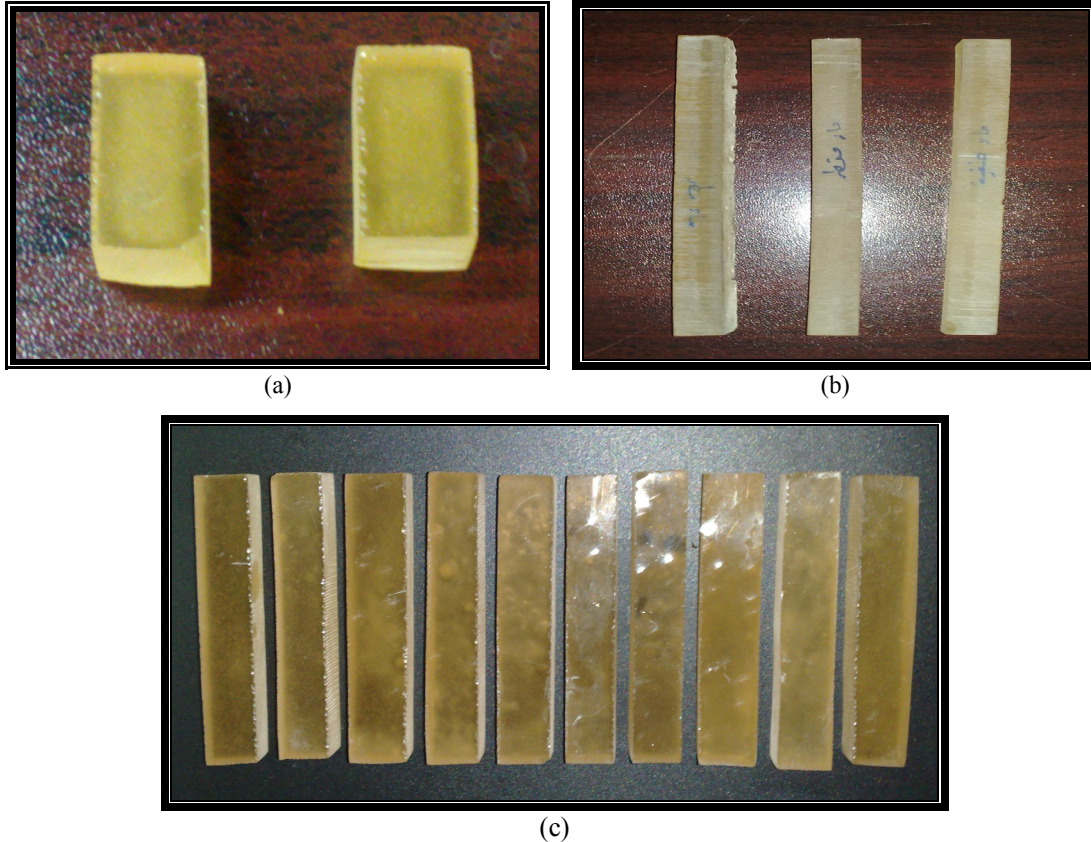


FIG. 1. Photographic images of (a) compression, (b) bending and (c) impact test specimens.

Compression test

Hydraulic press type (Leybold Harris/ Germany) was used to perform the compression test; as shown in Fig. 2a. This test was carried out before and after the immersion of the samples into three types (distilled, tap and rain) of water. The relationship between (F - ΔL) was obtained which could be modified to obtain the (σ - ε) relationship; so as to study the mechanical behavior of the blend under the effect of compression loading; where:

F is the applied force on the specimen.

ΔL is the change in the length of the specimen.

(σ - ε) is the (stress- strain) relationship.

Bending test

Three-point bending test was carried out to obtain the Young's modulus values for all specimens at similar conditions. Bending test instrument type (PHYWE/ Germany) was used; see (Fig. 2b).

The values of Young's modulus (E) were calculated from the following equation [9]:

$$E = \frac{MgL^3}{48(IS)} \quad (\text{N/m}^2) ; \quad (1)$$

where (M) is the applied mass on the sample, (S) is the elastic deflection of the sample, (M/S) is the slope of the curve obtained from the

relationship between the mass and the deflection of each sample, $g = 9.81\text{m/s}^2$, L is the distance between two supports of the instrument. (I) is the area moment of inertia:

$$I = \frac{bd^3}{12} \quad (\text{mm}^4) ; \quad (2)$$

where (b) is the width; while (d) is the thickness of the specimen.

Impact test

Charpy impact tests were conducted on the specimens at room temperature before and after immersion into the mentioned three types of water. The standard specimen was held as a horizontal cantilever beam, broken by a single

swing of a pendulum, the energy to failure was measured by the measurement fixed on an instrument.

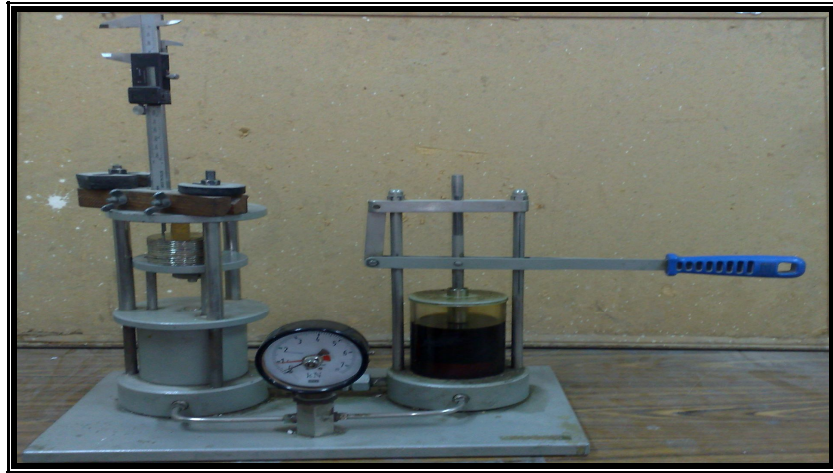
The impact strength ($I.S$) was calculated as follows [3]:

$$I \cdot S = \frac{Uc}{A} \quad (\text{J/m}^2) ; \quad (3)$$

where (Uc) is the required energy for breaking the specimen, (A) is the cross-sectional area of the specimen.

$$A = b \times d \quad (\text{m}^2) . \quad (4)$$

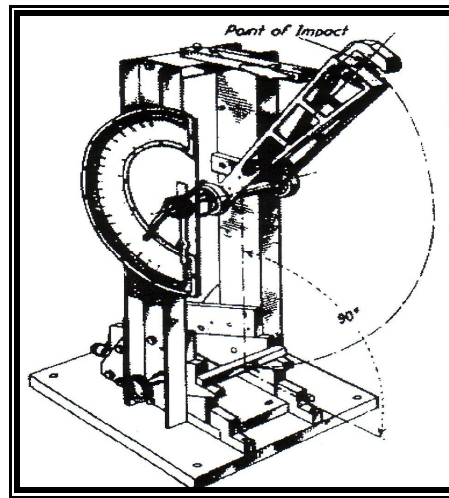
Fig. 2c is a schematic drawing of Charpy impact test instrument.



(a)



(b)



(c)

FIG. 2. Photographic images of (a) compression, (b) bending test instrument and (c) schematic drawing of Charpy impact test instrument.

Optical microscopy

Optical microscope (15X) type (73346/digital camera, Japan) was used to study the morphology and microstructure of specimens before and after immersion into the three types of water.

Results and discussion

(Stress- Strain) curves

To study the mechanical behavior under the effect of compression load, (stress-strain) relationships were obtained for all prepared specimens. Fig. 3 shows this relation for the blend before immersion into water; while Fig. 4 illustrates the effect of immersion into three types of water (distilled, tap and rain water) for periods of time ranging from (1-5) weeks. From

those curves, the effect of water type and period of immersion can be clearly noted. These behaviors were already expected due to the plasticization phenomenon of the polymer resulting from immersion into water; however, the results clearly indicate that the changes in stress-strain behavior were not proportional to the immersion time. When Figs. (3, 4) are compared with the typical (stress-strain) curves of polymer materials generally [10,11], it can be noticed that the behavior of material transformed from (hard and tough) to (soft but tough) with increasing time of immersion. This means that the polymer blend under work transformed from a material with high modulus, high strain and high stress at break to behave as a material with low modulus but high strain and high stress at break [10, 11].

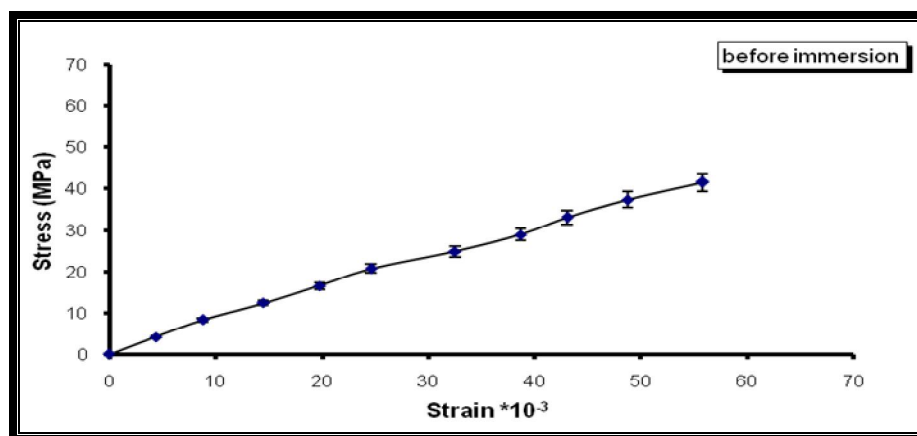


FIG. 3. (Stress-strain) curve for (UPE/NR) blend under the compression load before immersion.

Young's modulus

Young's modulus is indicative of the property called stiffness; small values of (E) indicate flexible materials and large values of (E) reflect stiffness and rigidity [3]. Fig. 5 illustrates the change in the Young's modulus values as a function of immersion time. It can be noticed that the Young's modulus values had a remarkable drop after 4 weeks of immersion for all three types of water. This may be attributed to the influence of water which acts as plasticizer factor for polymer, which decreases T_g and elasticity moduli [9, 12].

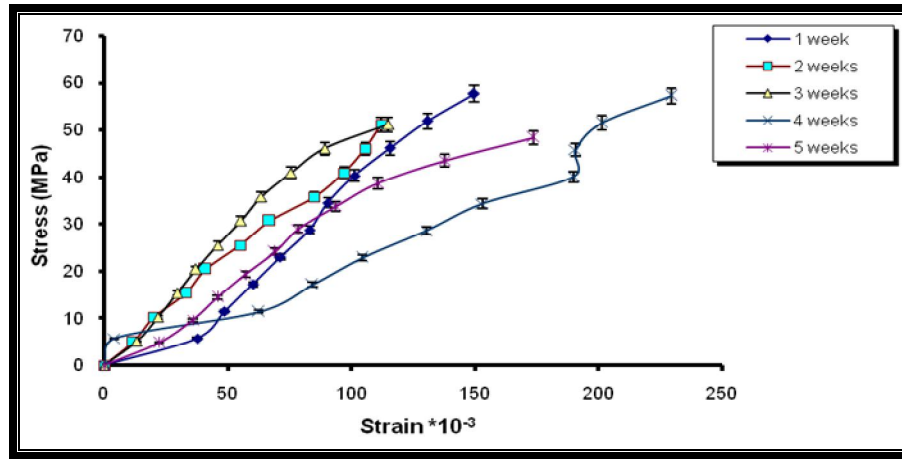
Impact strength

Fig. 6 shows the values of impact strength for all specimens as a function of immersion times. It can be seen that at the first stage of immersion, the prime effects of distilled and tap water are similar and decrease the impact strength value

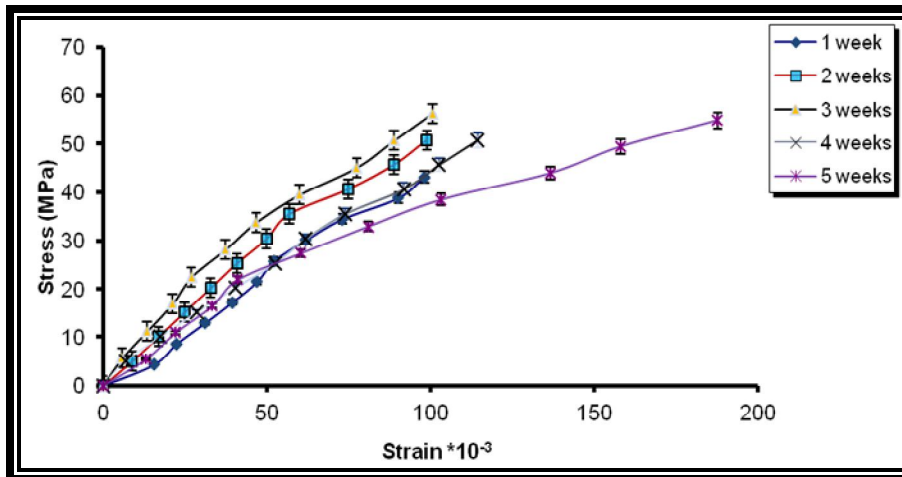
which then increases gradually with increasing the immersion time; while this behavior is different for specimens immersed into rain water; where the value of impact strength increases at the first stage of immersion and then decreases at the second stage and finally returns to increase again. This behavior may be related to the nature of rain water (weak alkaline medium, pH = 7.7 as shown in Table (1)), this medium attacks the ester linkage, thus breaking the polyester chain [13], this phenomenon reflects negatively on the impact strength of polymer blend after 2 weeks of immersion; whereas it is interesting to note that the immersion into tap water (salt environment as shown in Table (1)) records higher impact strength at the same period of immersion. This could be possibly explained, if NaCl molecules act as an interphase between the two phases (UPE/NR) causing the reduction in interfacial

shear. This will increase the energy absorption capability at the interface resulting in the increase of fracture energy and then the impact strength will be increased [14]. Other previous

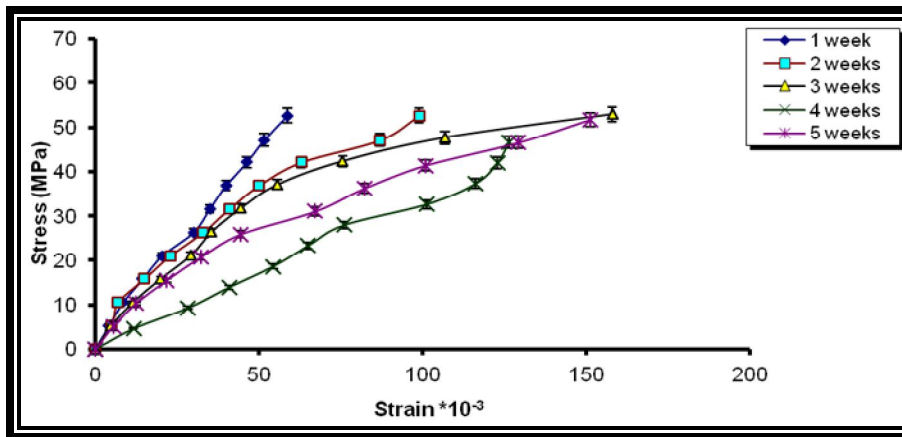
studies indicated that the increase in the impact strength of polymers after the immersion into water is expected as a result of the plasticization when partially saturated with moisture [7, 12].



(a)



(b)



(c)

FIG. 4. The effect of immersion into (a) distilled water, (b) tap water and (c) rain water on (stress-strain) behavior for (UPE/NR) blend under compression load.

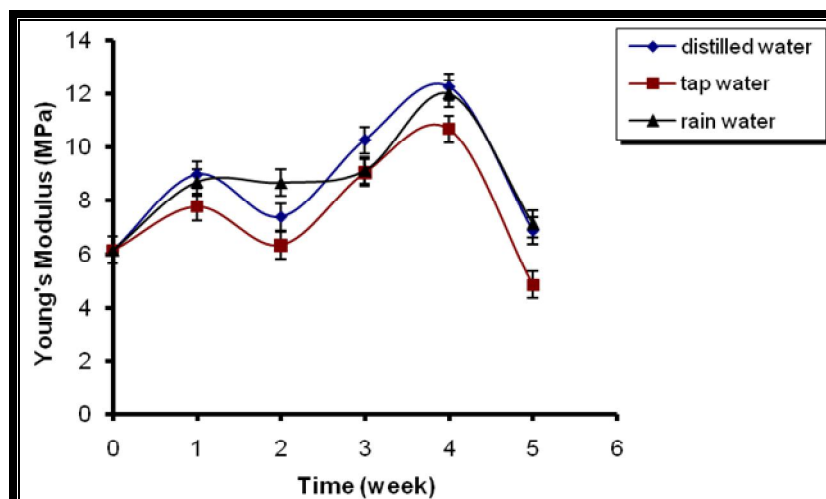


FIG. 5. Effect of immersion time on values of Young's modulus for(UPE/NR) blend.

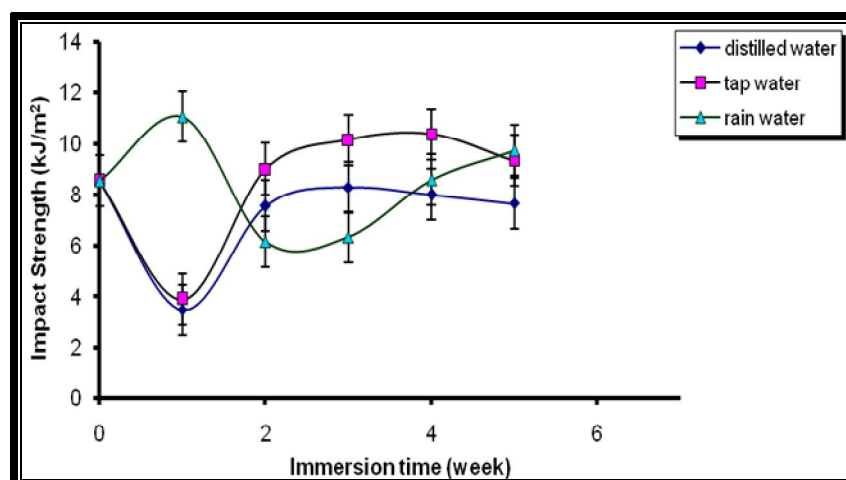


FIG. 6. Effect of immersion time on values of impact strength for (UPE/NR) blend.

Morphology study

Some changes and flaws were noticed after the immersion of the samples into three types of water as shown in Fig. 7. It can be also observed from the optical micrographs that the polymer blend under study seems as a single phase (miscible) which means that the two polymers (UPE and NR) are compatible to form a new material with new properties.

Conclusions

In the current study, UPE resin was used as a matrix material due to its availability at cheaper prices compared with Epoxy resin used in most previous works. In addition to that, the mechanical properties of the prepared blend can compete with that of Epoxy; this would lead to a new industrial material at lower cost. Furthermore, this study is distinguished by the

investigation of the effects resulting from absorption of three types of water on the blend's mechanical properties; while previous studies were limited to the behavior at the dry case of material. This work leads to a conclusion that the added value of the present investigation is a significant modification in the properties of the UPE resin resulting from the adding of an optimum percentage of NR, without changing the hardness and rigidity of the original UPE. Other related conclusions are shown below:

- 1- After blending the two polymers (UPE and NR) with a ratio of (95/5)%, it was found that the blend is homogenous to the eye.
- 2- It is clear that the deflection rates increase greatly after immersion of the (UPE/NR) blend specimens into the different types of water compared with the case before immersion.

- 3- The (stress-strain) behavior of the blend under study was found to be affected by the sort of water depending on the (pH) value and the percentage of total dissolved salts (TDS) in each type of water.
- 4- Rain water has a higher effect on the mechanical behavior of the prepared blend compared with distilled and tap water. The samples immersed in rain water missed their color and became discolored.
- 5- It can be concluded that the penetration of water into the polymer blend has a limited effect on its nature. In other words, the general external appearance of the immersed material reveals that the soaked specimens do not undergo any swelling, but they are plasticized.

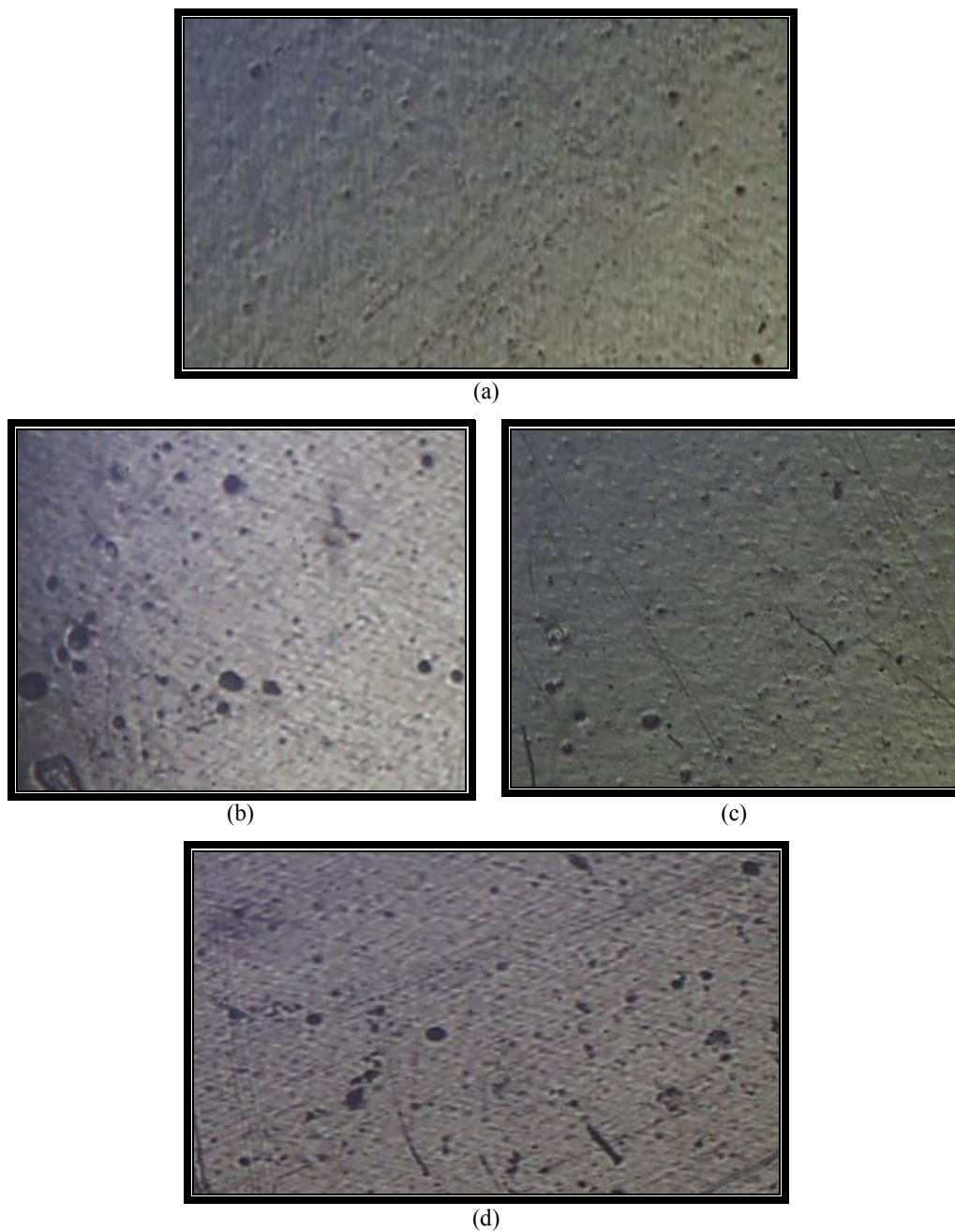


FIG. 7. Optical micrographs (15X) of (UPE/NR) polymer blend (a) before immersion and (b), (c) and (d) after immersion into distilled water, tap water and rain water, respectively.

References

- [1] Raghi, S.E., Zahran, R.R. and Gebril, B.E., *Mater. Lett.*, 46 (2000) 332.
- [2] Budinski, K.G. and Budinski, M.K., "Eng. Mater., Properties and Selection", 9th Ed., (Pearson, USA, 2010).
- [3] Rajput, R.K., "Eng. Mater.", Revised Edition, S. Chand, (New Delhi, 2008).
- [4] Babaevskaya, N.Y. and Shatalov, V.K., *Internat. Polym. Sci. & Technol.*, 11 (1984) 70.
- [5] Kostanski, L.K. and Krolikowski, W., *Internat. Polym. Sci. & Technol.*, 12 (1985) 133.
- [6] Cao, Y., Shao, Y., Sun, J. and Lin, S., *J. of Appl. Polym. Sci.*, 90 (2003) 3384.
- [7] LaPlante, G. and Sullivan, P., *J. of Appl. Polym. Sci.*, 95 (2005) 1285.
- [8] Hameed, A.M., Ph.D. Thesis, (Applied Science Department, University of Technology, Baghdad, Iraq, 2006).
- [9] Sobrinho, L.L., Ferreira, M. and Bastian, F.L., *Mater. Research*, 12 (2009) 353.
- [10] Hibbeler, R.C., "Mechanics of Mater.", 6th Ed in SI Units, (Pearson, Singapore, 2005).
- [11] Rodriguez, F., "Principles of Polym. Systems", 2nd Ed, (McGraw- Hill, Singapore, 1985).
- [12] Abot, J.L., Yasmin, A. and Daniel, I.M., *J. of Reinforced Plast. and Compos.*, 24 (2005) 195.
- [13] Iskander, M.G. and Hassan, M., *J. of Compos. for Construction*, 5 (3) (2001).
- [14] Garg, A.C. and Pawar, S.K., *Fibre Sci. Technol.*, 17 (1982) 133.

Jordan Journal of Physics

ARTICLE

Solution of a Fractional Undamped Forced Oscillator

F. Y. Alzoubi^a, M. K. Alqadi^a, H. M. Al-Khateeb^a, S. M. Saadeh^a
and N. Y. Ayoub^b

^a Department of Physics, Jordan University of Science and Technology, Irbid, Jordan.

^b Dean of Graduate Studies, German Jordanian University, Amman, Jordan.

Received on: 18/4/2012; Accepted on: 1/10/2012

Abstract: We propose a fractional differential equation for an undamped forced oscillator. A series solution is obtained for this equation by employing the Laplace transform technique for solving differential equations. The behavior of the system is discussed for various fractional orders of the differential equation ranging from first order to second order.

Keywords: Forced oscillator; Fractional differentiation; Laplace transform; Elasticity; Order of differentiation.

Introduction

It is well known that differentiations and integrations of integral order have clear physical and geometrical interpretations which help in solving problems in various fields of science. However, when the order of differentiation or integration is not an integer, interpretations were not acceptable for more than 300 years. Nowadays, the field of fractional calculus is gaining more attention and researchers were able to employ this field to discuss real world problems such as electromagnetic theory, diffusion, viscosity and even finance problems.

In a previous published work [1], a study of a fractional LC - RC electrical circuit showed that simple harmonic oscillations of an LC circuit (inductor-capacitor circuit) and a discharging RC circuit (resistor-capacitor circuit) can be combined in one fractional differential equation depending on the order of differentiation. This equation allows us to see how the system evolves from an oscillatory behavior to a damping behavior and suggests the idea of the evolution of a resistive property in the inductor. Another group of researchers employed

fractional calculus to study gravitational fields [2]. They found that the uniform semi-infinite linear mass distribution and its potential are the integrals (differentiation of order -1) of a point mass distribution and its potential.

Fractional calculus principles were applied to several electromagnetic problems by several researchers and results were promising [4]. Some of these problems include the concept of fractional multipoles in electromagnetism, electrostatic fractional image methods for perfectly conducting wedges and cones and fractional solution of the Helmholtz equation.

In the field of classical mechanics, researchers tried to present a new Lagrangian and a new Lagrange equation of motion that includes the nonconservative forces by making use of the concept of fractional derivatives [5, 6]. Another branch of mechanics in which fractional calculus was of interest is the behavior of oscillatory systems such as the harmonic oscillator. For example, Rousan *et al.* studied the problem of a fractional harmonic oscillator with a damping term proportional to a fractional order

time derivative. A series solution of the fractional differential equation was obtained for both damped and undamped cases [7]. Using Laguerre integral formula, Yuan and Agrawal [8] applied numerical techniques to solve a fractionally damped single degree-of-freedom spring-mass-damper forced system of the order 0.5. It was believed that this order of differentiation is the best representation of the damping materials. Therefore, many studies focused on investigating the behavior of physical systems that are represented by fractional differential equation of order 0.5 [9, 10]. However, one of the advantages of our proposed work is that the technique which will be used enables us to figure out the behavior of solutions of fractional differential equations for a variety of orders of differentiation. The results of the above - mentioned work motivated us to investigate the role of fractional calculus in understanding and analyzing some famous systems in classical mechanics. The forced oscillator is an example of such systems for which fractional calculus may provide further understanding of the nature of these oscillatory systems.

Recently, a considerable interest was devoted to explore the behavior of oscillatory systems when they are represented by differential equations of fractional order. For example, Aguilar et al. analyzed the damped mass-spring system for different fractional orders of differentiation and their analytical solutions were written in terms of Mittag-Leffler functions [11]. Achar et al. studied the motion of the driven harmonic oscillator using integrals of fractional orders. They employed Laplace transform technique to provide solutions of the fractional equations in terms of Mittag-Leffler functions [12]. A recent review article was published to provide a detailed presentation of the Mittag-Leffler functions and their applications in different areas of science and engineering [13].

In this work, we provide a series solution of a fractional undamped forced oscillator. The solution was plotted for different fractional orders of differentiation and the results are in agreement with the analytical solutions that are obtained in terms of the Mittag-Leffler functions.

Theory

In this proposed work, we intend to discuss some physical systems such as the forced spring-mass oscillator. This system is usually represented by the ordinary differential equation:

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} + kx(t) = F(t) ; \quad (1)$$

where m is the mass, k is the spring constant and $F(t)$ is the applied external force. The solution of this equation depends on the form of the external force.

In our study, we will try different types of forces such as sinusoidal and step-functions. The above equation will be transformed into a fractional differential equation of arbitrary order of differentiation:

$$c(\alpha) \frac{d^{1+\alpha} x(t)}{dt^{1+\alpha}} + \omega^2 x(t) = F(t) / m ; \quad (2)$$

where $\omega = \sqrt{k/m}$ is the frequency of the spring-mass system and $c(\alpha)$ is introduced for the equation to be dimensionally consistent. In other words:

$$c(\alpha) = \begin{cases} 1 & \alpha = 1 \\ \omega & \alpha = 0 \end{cases} .$$

Simply, we can express the function $c(\alpha)$ by $c(\alpha) = \omega^{1-\alpha}$.

There are different definitions of the fractional derivative which appeared in Eq. 2: Riemann-Liouville, Grünwald-Letnikov, Weyl, Riesz and Caputo representations. For example, in the Caputo representation the fractional derivative for a function of time is given by:

$$\frac{d^q f}{dt^q} = \frac{1}{\Gamma(n-q)} \int_0^t \frac{f^{(n)}(\eta)}{(t-\eta)^{q-n+1}} d\eta ; \quad (3)$$

where $n = 1, 2, \dots \in N$ and $n-1 < q \leq n$. In this derivative, q is the order of differentiation and can have noninteger values [11].

As is clear, Eq. 2 can have any fractional order between 1 and 2 depending on the fractional parameter α which takes values between 0 and 1, respectively. The solution of this equation for different fractional orders will show how the system evolves. In each case, the solution will be plotted in order to figure out the

patterns of variations in the behavior of the proposed system as a function of the order of differentiation. It is well known that Eq. 2 has a solution of the homogenous part that is discussed thoroughly in terms of the Mittag-Leffler functions elsewhere [11, 12]. In this work, we use Laplace transform technique for solving differential equations that will result in the particular solution of the differential equation that is related to the type of the external applied force. One may seek analytical solution of Eq. 2 in terms of Mittag-Leffler functions. For example, in our case the solution of the homogenous part of Eq. 2 in terms of Mittag-Leffler functions can be written as [13]:

$$x(t) = x_o E_{1+\alpha} = x_o \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-\omega^{1+\alpha} t^{1+\alpha})^m}{\Gamma((1+\alpha)m+1)} ; \quad (4)$$

where $E_{1+\alpha}$ is the Mittag-Leffler function. It is worth mentioning that most of the solutions of fractional oscillatory systems were discussed within the frame of Mittag-Leffler functions; while in our study we followed a different approach to obtain a series solution to the problem and the results of the two approaches are comparable.

Dividing Eq. 2 by $c(\alpha)$ and applying the Laplace transform to both sides result in:

$$L\left\{\frac{d^{1+\alpha}x}{dt^{1+\alpha}}\right\} + \omega^{1+\alpha} L\{x\} = \frac{1}{m\omega^{1-\alpha}} L\{F(t)\}. \quad (5)$$

In solving the above differential equation, Laplace transform and the inverse Laplace transform techniques will be applied making use of formula [3]:

$$\left. \begin{aligned} L\left\{\frac{d^q f}{dx^q}\right\} &= \\ s^q L\{f\} - \sum_{k=0}^{q-1} s^k \frac{d^{q-1-k} f}{dx^{q-1-k}}(0), \\ 0 < q \neq 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \right\}. \quad (6)$$

As a result, applying the above formula to Eq. 5, we end up with the following equation:

$$\left. \begin{aligned} s^{1+\alpha} X(s) - \frac{d^\alpha x}{dt^\alpha}(0) \\ - s \frac{d^{1+\alpha} x}{dt^{1+\alpha}}(0) + \omega^{1+\alpha} X(s) \end{aligned} \right\} ; \quad (7)$$

$$= \frac{1}{m\omega^{1-\alpha}} L\{F(t)\}$$

where $X(s)=L\{X(t)\}$, i.e., $X(s)$ is the Laplace transform of $x(t)$. In Eq. 7, we have two initial conditions which can take a variety of initial values. We will discuss the case when the two initial values are zeros and leave the other cases for further studies:

$$\frac{d^\alpha x}{dt^\alpha}(0) = 0, \text{ and } \frac{d^{1+\alpha} x}{dt^{1+\alpha}}(0) = 0. \quad (8)$$

Therefore, Eq. 7 becomes:

$$(s^{1+\alpha} + \omega^{1+\alpha})X(s) = \frac{1}{m\omega^{1-\alpha}} L\{F(t)\}. \quad (9)$$

Eq. 9 can be used to find the solution of the differential equation for different types of external applied force $F(t)$.

Results and discussion

Based on Eq. 9, the solution of the differential equation depends on the form of the external force. We will choose first a force that varies sinusoidally as a function of time (i.e.,

$F(t) = F_0 \sin \omega_0 t$). Assuming that $A = \frac{F_0}{m}$ is a constant, the solution of equation 9 is given by:

$$X(s) = \frac{A\omega_0}{\omega^{1-\alpha}} \frac{1}{(s^{\alpha+1} + \omega^{\alpha+1})(s^2 + \omega_0^2)}. \quad (10)$$

In this case, taking the highest power of s as a common factor from the denominator and then expanding the denominator in an alternating geometric series:

$$\left. \begin{aligned} X(s) &= \\ \frac{A\omega_0}{\omega^{1-\alpha}} \frac{1}{s^{\alpha+3}} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \left(\frac{\omega^{\alpha+1}}{s^{\alpha+1}}\right)^m \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\omega_0}{s}\right)^{2n} \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

this equation can be written as:

$$X(s) = A \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{(-1)^{m+n} \omega^{m(\alpha+1)+\alpha-1} \omega_0^{2n+1}}{s^{\alpha(m+1)+m+2n+3}}. \quad (12)$$

Finally, applying the inverse Laplace transform to equation 12 results in the following solution of the differential equation:

$$x(t) = \left. A \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{(-1)^{m+n} \omega^{m(\alpha+1)+\alpha-1} \omega_0^{2n+1}}{\Gamma(\alpha(m+1)+m+2n+3)} t^{\alpha(m+1)+m+2n+2} \right\}. \quad (13)$$

Note that when $\alpha = 0$, Eq. 13 is the solution of a first-order differential equation and when $\alpha = 1$ the equation gives the solution of a second-order differential equation. Fig. 1 shows the variation of the solution as a function of the order of differentiation α . The plot shows a resonance case where the frequency of the applied external force matches the natural frequency of the mass-spring system and this is clear from the gradual increase of the amplitude for the case of second-order differential equation ($\alpha = 1$). When $\alpha = 0$, we have the case of a first-order nonhomogenous linear differential equation and the solution is a combination of sine and cosine functions as expected. In this case, the overall behavior is dominated by the external force. However, when $\alpha = 1$, we have a

second-order nonhomogenous linear differential equation and the amplitude is building up due to the resonance between the applied and natural frequencies. In this case, the effect of the elastic force is clear and both forces share the result. The figure shows also that the solution evolves smoothly between the two extremes. One may say that as the order of differentiation increases from 1 to 2, the elasticity of the spring is building up smoothly. It is worth mentioning that the concept of intermediate stages has been introduced by many authors [1, 4].

A second case of interest is the step function as an external force. The force in this case can be represented by:

$$F(t) = \begin{cases} 0 & , \quad t \leq 0 \\ 1 & , \quad 0 \leq t \leq 1 \\ 0 & , \quad t \geq 1 \end{cases}. \quad (14)$$

Following the same steps conducted for the case of sinusoidal function, the solution of the differential equation as a function of the order of differentiation will be:

$$x(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \omega^{n(\alpha+1)+\alpha-1}}{\Gamma(n(\alpha+1)+\alpha+2)} (t^{n(\alpha+1)+\alpha+1} - (t-1)^{n(\alpha+1)+\alpha+1}). \quad (15)$$

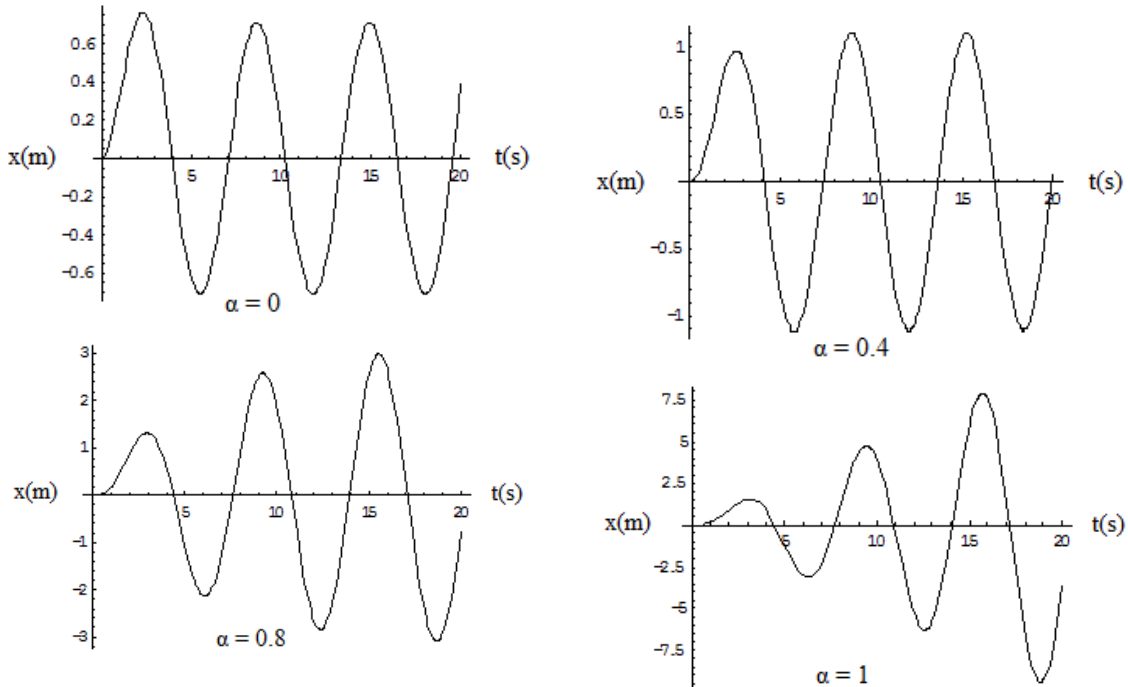


FIG. 1. The variation of the solution as a function of the order of differentiation for the case of sinusoidal external force.

This solution is plotted in Fig. 2. For the case of $\alpha = 0$, the solution has a damping behavior and no oscillations are expected for the case of linear first-order equation. For $\alpha = 1$, the solution is completely oscillatory, since the system is jerked by the external force and there are no damping terms in the equation. For the intermediate stages as α increases from 0 to 1,

the system starts to develop an oscillatory behavior accompanied by an attenuation. This indicates that the elasticity of the spring evolves as the order of differentiation increases from 1 to 2 and becomes completely oscillatory when α becomes exactly 2 and the motion is a simple harmonic one.

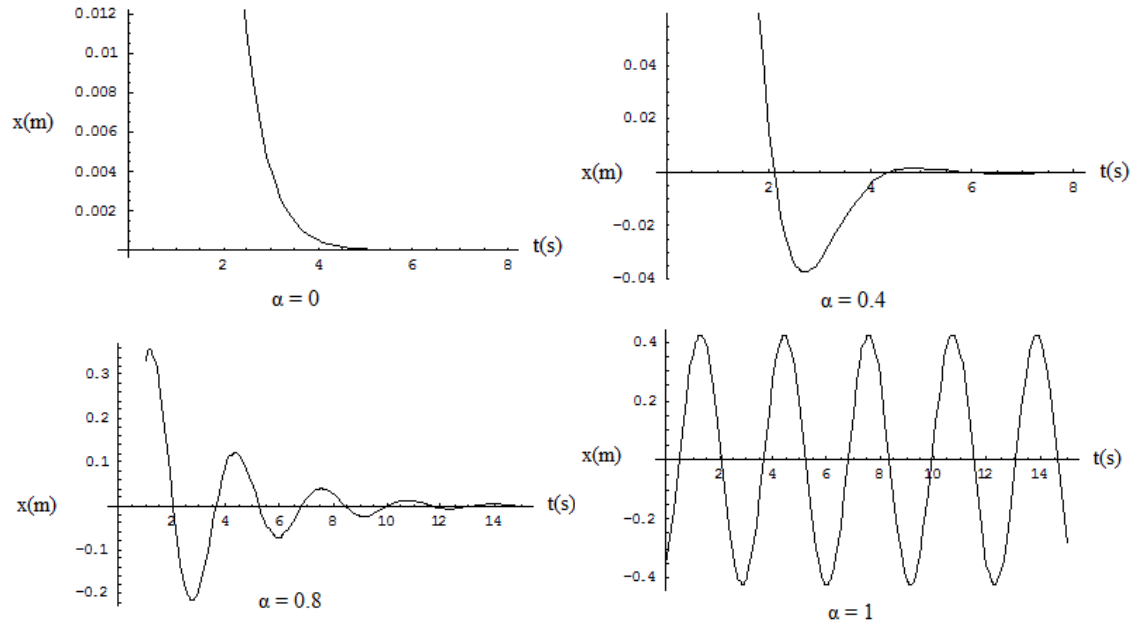


FIG. 2. The variation of the solution as a function of the order of differentiation for the case of step function.

Conclusion

A series solution of the fractional forced oscillator problem as a function of the order of differentiation is obtained. Intermediate stages between the first-order and second-order differential equation are plotted and discussed. The results show that the solution evolves smoothly between these two extremes. One may suggest that the elasticity of the spring in a spring mass system develops as the order of differentiation increases from 1 (first order) to 2 (second order). The results for the case of

second-order differential equation are in agreement with the exact solution obtained by other methods.

Acknowledgment

The author (F. Y. Alzoubi) thanks Jordan University of Science and Technology for the sabbatical leave during which this work was conducted.

References

- [1] Rousan, A.A., Ayoub, N.Y., Alzoubi, F.Y., Khateeb, H., Al-Qadi, M., Hasan (Qaseer), M.K. and Albiss, B.A., *Fractional Calculus & Applied Analysis*, 9 (2006) 33.
- [2] Rousan, A.A., Malkawi, E., Rabei, E.M. and Widyan, H., *Fractional Calculus & Applied Analysis*, 5 (2002) 155.
- [3] Oldham, K.B. and Spanier, J., "The Fractional Calculus", 1st Ed. (Academic Press, Inc., New York, 1974), Chapter 8.
- [4] Engheta, N., *IEEE Transactions on Antenna and Propagation*, 44 (1996) 554.
- [5] Riewe, F., *Physical Review E*, 55 (1997) 3581.

- [6] Riewe, F., *Physical Review E*, 53 (1996) 1890.
- [7] Rousan, A.A., Ayoub, N.Y. and Khasawneh, K., *International Journal of Applied Mathematics*, 19 (2006) 33.
- [8] Yuan, L. and Agrawal, O.P., *Proceedings of DETC'98, 1998 ASME Design Engineering Technical Conference*, Georgia (1998), 1.
- [9] Koh, C.G. and Kelly, J.M.A., *Earthquake Engineering and Structural Dynamics*, 19 (1990) 229.
- [10] Soares, L.E. and Shokooh, A., *J. Applied Mechanics*, 64 (1997) 629.
- [11] Aguilar, J.F., Garcia, J.J., Alvarado, J.J., Fraga, T. and Cabrera, R., *Revista Mexicana de Fisica*, 58 (2012) 348.
- [12] Achar, B.N., Hanneken, J.W. and Clarke, T., *Physica A*, 309 (2002) 275.
- [13] Haubold, H.J., Mathai, A.M. and Saxena, R.K., *Journal of Applied Mathematics*, 2011 (2011) 51.

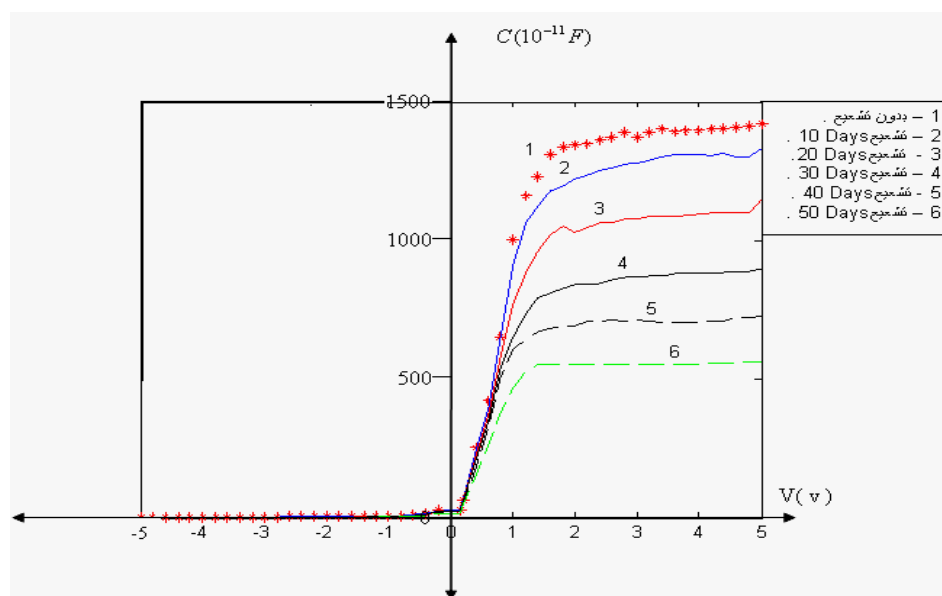
الخلاصة

القصيرة (I_{SC}) فقد أعطت أفضل النتائج عند تشعيع يوم واحد بحيث كانت فولتية الدارة المفتوحة $300mV$ وتيار الدارة القصيرة $80mA$ وكفاءة التحويل 19.32% . ومع زيادة مدة التشعيع بدأت هذه القيم بالانخفاض السريع. من قياسات (السعة - الفولتية) للنبايط المشععة في مدد زمنية مختلفة قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي وبعده، ظهر انخفاض السعة مع زيادة مدة التشعيع وبشكل منتظم لكلتا الحالتين.

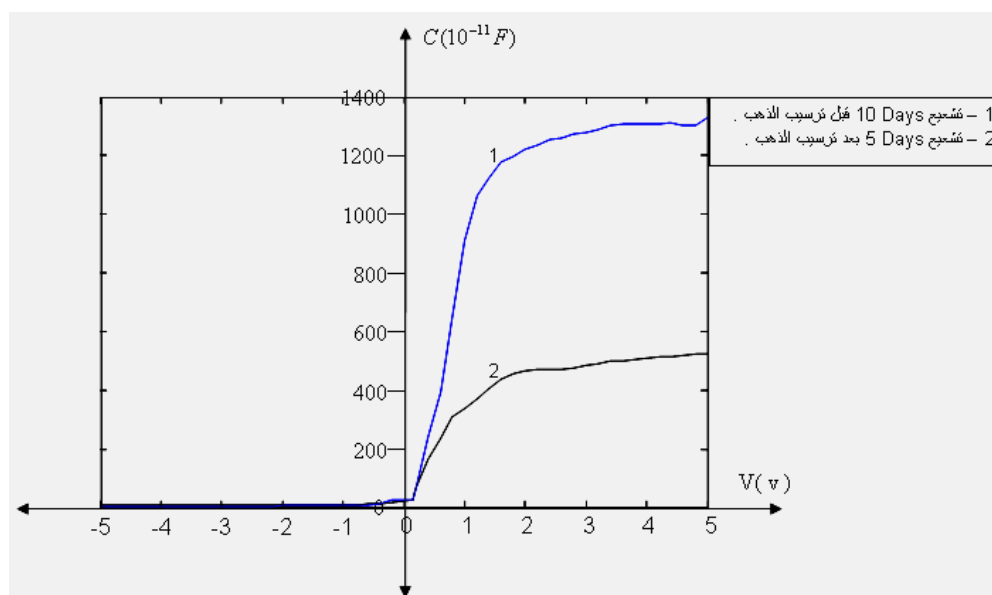
إن خواص (التيار - الفولتية) للنماذج المشععة بأشعة كاما في مدد زمنية مختلفة اظهرت انخفاضاً واضحاً في قيمة التيار للفولتيات نفسها من تلك النماذج غير المشععة. ولوحظ أيضاً أن النماذج المشععة بعد ترسيب الذهب أعطت قيماً للتيار أقل من تلك المشععة قبل ترسيب الذهب. كما تبين أن قيمة حاجز الجهد تزداد مع زيادة مدة التشعيع. أما نتائج خواص النبيطة $Au/n-Si$ كخلية شمسية (فولتية الدارة المفتوحة V_{OC} وكذلك تيار الدارة

المصادر

- [6] Ghaffin, R.J., "Microwave Semiconductor Device: Fundamentals and Radiation Effects", (John Wiley and Sons, Inc., New York, 1973).
- [7] Ashry, M.F. and Ayek, A., "Radiation Effects on Fabricated (Cu_2S/CdS) Heterojunction Photovoltaic Cells", (National Center for Radiation Research and Technology [NCRRT]. Atomic Energy Authority [AEA], Cairo, Egypt, 2006).
- [8] معروف، بهاء الدين حسين، "الوقاية من الإشعاعات المؤينة"، (منظمة الطاقة الذرية العراقية، 1989).
- [9] Murr, M. and Lawrence, K., Academic Press., 17 (1980) 640.
- [10] Ashok, S. and Pand, K.P., Solar Cells, 14 (1985).
- [1] Glinchuk, K.D. and Prokhorovich, A.V., Cryst Res. Techno., 32(3) (1997) 391.
- [2] Andrew, H.S. and Adams, I., "Handbook of Radiation Effects", Second Edition, (Oxford University Press, Inc., New York, 2004).
- [3] Mitchell, J.P. and Wilson, D.K., The Bell System Technical J., 1 (1967) 1.
- [4] Vavilov, V.S. and Lin, N.A., "Radiation Effect in Semiconductor and Semiconductor Devices", (New York, 1976).
- [5] Kuhnke, M., Fretwurst, E. and Lindstroem, G., "Defect Generation in Crystalline Silicon Irradiated with High-Energy Particles", (Brunel University, Germany, <http://www.Martin.com>, 2001).



الشكل 7. مقارنة خواص (السعة - الفولتية) لثنائي شوتكي لنماذج غير مشععة ومشععة بمدة زمنية (10, 20, 30, 40 and 50) أيام قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي وعند التردد $f = 10kHz$.



الشكل 8. مقارنة خواص (السعة - الفولتية) لثنائي شوتكي لنموذج مشعع لمدة 10 أيام قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي مع نموذج مشعع لمدة 5 أيام بعد ترسيب الذهب في القطب العلوي وعند التردد $f = 10kHz$.

ونعتقد أن أرضية السليكون قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي وبعده تحصل فيها عيوب. ولكن الذي نعتقده أيضاً هو تأثير أشعة كاما على المناطق التي يترسب فيها الذهب بحيث يؤدي التأثير في منطقة الاتصال بين السليكون والذهب إلى زيادة نسبة العيوب في حالة نماذج السليكون المشععة بعد ترسيب الذهب. لهذا كانت قيمة السعة في هذه النماذج أقل منها في حالة النماذج المشععة قبل ترسيب الذهب.

الشكل 7 يوضح خواص (السعة - الفولتية) للنبائط غير المشععة والمشععة لمدة زمنية مختلفة قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي عند درجة حرارة المختبر.

وعند مقارنة النبائط المشععة قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي وبعده كما هو مبين في الشكل 8، يظهر أن قيمة سعة النبائط المشععة بعد ترسيب الذهب في القطب العلوي أقل منها في النبائط المشععة قبل ترسيب الذهب.

الجدول 2. معلمات الخلية الشمسية Au/n-Si باختلاف زمن التشعيع قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي لمدة تتراوح بين يوم واحد و5 أيام.

نبائط غير مشععة ومشععة قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي						
	Unradiated	Radiated 1 Day	Radiated 2 Days	Radiated 3 Days	Radiated 4 Days	Radiated 5 Days
$I_{sc}(mA)$	0.489	80	73	9.5	1.5	0.44
$V_{oc} mV$	280.4	300	295	289	284	246
$I_{Max}(mA)$	0.287	66.8	56.7	5.49	0.83	0.256
$V_{Max}(mV)$	194.1	134.4	137.8	182.1	184	148.7
$F.F$	0.407	0.374	0.363	0.362	0.358	0.351
$\eta \%$	0.12	19.32	16.82	2.15	0.33	0.09

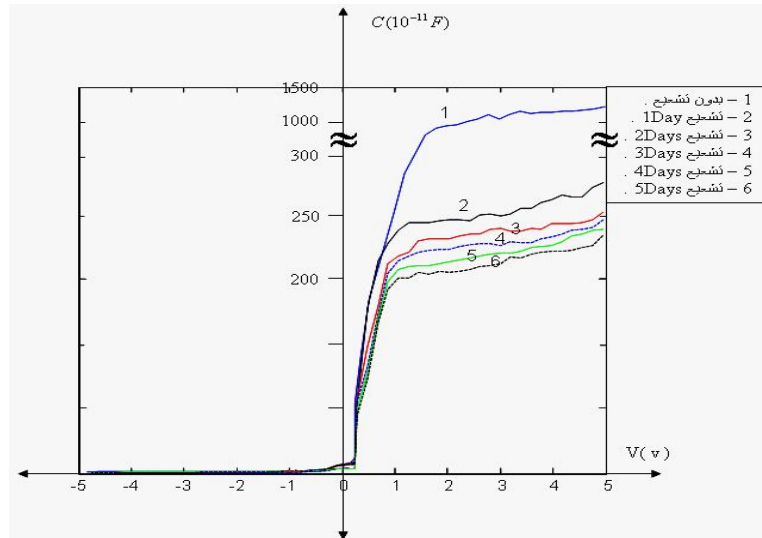
تيار الدارة القصيرة I_{sc} وفولتية الدارة المفتوحة V_{oc} ، ولهذا تنخفض قيمة كفاءة التحويل لهذه النماذج. وتتفق هذه النتائج مع تفسير الباحثين [7].

خواص السعة – الفولتية (C-V)

تم إجراء قياسات السعة – الفولتية. وتم حساب سعة النباط Au/n-Si عند تردد مقداره $10kHz$. الشكل 6 يوضح نتائج قياس (السعة – الفولتية) للنماذج غير المشععة والمشععة ضمن المدة (1, 2, 3, 4 and 5) أيام قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي. ومنها يتضح أن قيمة السعة في النماذج المشععة لمدد (1, 2, 3 and 4) أيام، أظهرت تناقصاً عن قيمة السعة للنماذج غير المشععة، على عكس الحالة في خصائص (التيار – الفولتية) في حالتي الظلام والإضاءة للنماذج نفسها.

ويلاحظ أيضاً في هذا الجدول أن قيمة تيار الدارة القصيرة I_{sc} وقيمة فولتية الدارة المفتوحة V_{oc} وكفاءة التحويل η تزداد إلى أعلى قيمة عند تشعيع يوم واحد ثم تنخفض بشكل واضح مع زيادة مدة التشعيع. والسبب قد يعود إلى تهيج الإلكترونات بشكل كبير بسبب تأين الذرات وانتقالها إلى مراكز القنص الموجودة كعيوب في البلورة، وعند سقوط الضوء عليها تتهيج هذه الإلكترونات مما يؤدي إلى زيادة واضحة في تيار الدارة القصيرة وفولتية الدارة المفتوحة. وتسهم هذه الإلكترونات في عملية التوصيل قبل إعادة الاتحاد في المراكز القانصة المتكونة من العيوب الإشعاعية.

ومع زيادة مدة التشعيع، تزداد المراكز القانصة كعيوب إضافية نتيجة التشعيع. لذا فإن قسماً أكبر من الإلكترونات الحرة يتحد في هذه المراكز المتزايدة، وبذلك يقل زمن ديمومة الإلكترونات الحرة. وعندها تنخفض قيمة كل من

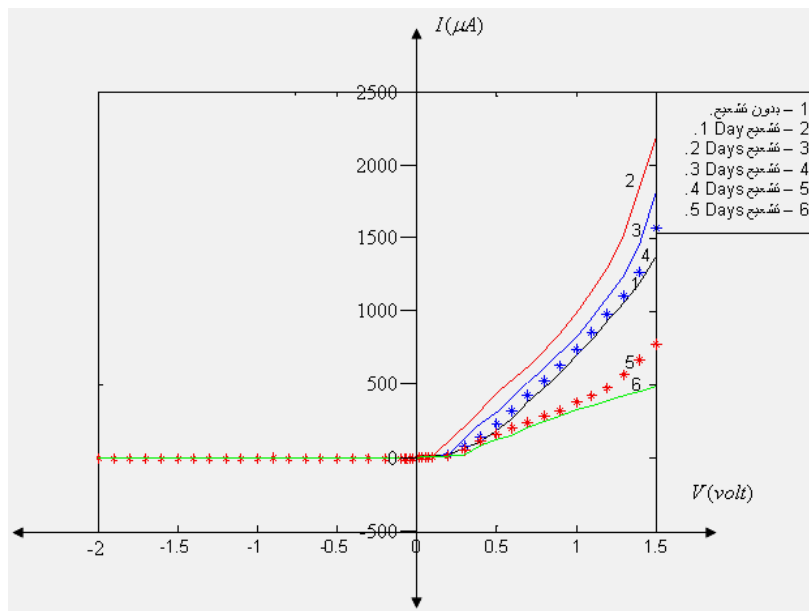


الشكل 6. مقارنة خواص (السعة – الفولتية) لثنائي شوتكي لنماذج غير مشععة ومشععة بمدد زمنية (1, 2, 3, 4 and 5) أيام قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي وعند التردد $f = 10kHz$.

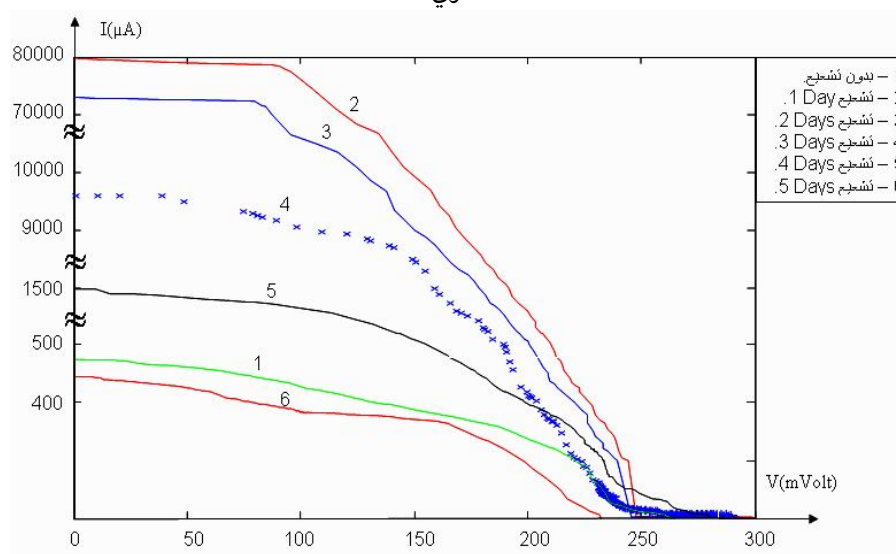
في التيار. ومع زيادة مدة التشيع تنخفض قيمة التيار بشكل كبير كما هو موضح في الشكل 4.

تم قياس خواص (تيار - فولتية) في حالة الإضاءة بعد تشيع نبائط السليكون ضمن المدة (1, 2, 3, 4 and 5) أيام قبل ترسيب الذهب كغشاء كما هو مبين في الشكل 5، وحساب معالم الخلية كما هو موضح في الجدول (2).

تم إجراء قياسات الخواص الكهربائية في حالة الظلام للنماذج غير المشعة والمشعة ضمن مدة تشيع من يوم واحد إلى خمسة أيام قبل ترسيب الذهب عليها كغشاء في القطب العلوي كما هو مبين في الشكل 4. يظهر من الشكل أن أعظم قيمة لخاصية التقويم تظهر عند تشيع يوم واحد؛ إذ إن زيادة التيار في تلك النبائط تدل على أن التأثير الايجابي للإشعاع يمكن أن ينتج زيادة في مستويات المراكز في الحزمة، يناظرها إنخفاض في زمن ديمومة الحاملات، لذلك فإن مثل هذا التأثير يؤدي إلى زيادة كبيرة



الشكل 4. مقارنة النماذج غير المشعة والمشعة في مدد زمنية (1, 2, 3, 4 and 5) أيام في حالة الظلام قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي.



الشكل 5. مقارنة النماذج غير المشعة والمشعة في مدد زمنية (1, 2, 3, 4 and 5) أيام في حالة الإضاءة قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي.

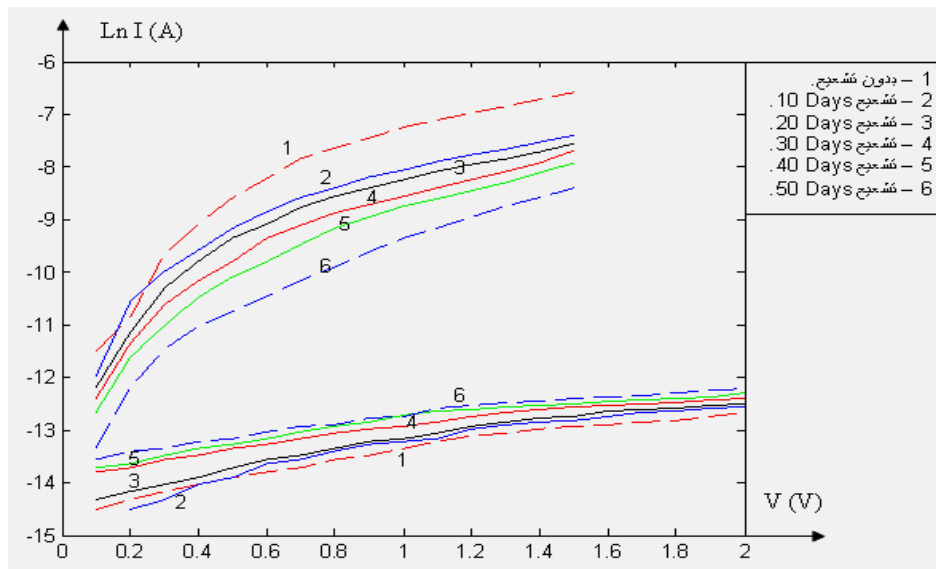
ترسيب الذهب كغشاء مع النماذج غير المشععة كما هو مبين في الشكل 3، نلاحظ أن هناك انخفاضاً واضحاً في قيمة التيار عند جميع فولتيات الانحياز، ويزداد ذلك الانخفاض مع زيادة مدة التشعيع، وذلك بسبب زيادة منطقة التلف المتكونة ذات المقاومة العالية التي تؤدي إلى زيادة في ارتفاع الحاجز. وكذلك يوضح هذا الشكل تغير قيم n مع زيادة مدة التشعيع. وعلى العكس من ذلك، نلاحظ من الشكل 3 أن قيمة التيار العكسي تزداد بشكل كبير مع زيادة التشعيع، وسبب ذلك هو تيارات التسرب Leakage Currents المتولدة بالإشعاع.

نتيجة الانبعاث الحراري الأيوني Thermonic Emission. ومن معرفة قيمة عامل المثالية n يمكن تحديد ميكانيكية مرور التيار خلال النيبيطة [9]. إذا كانت قيمة $(n = 1)$ فيكون التيار ناتجاً عن آلية الانتشار وآلية اتحاد الحاملات في المنطقة المتعادلة. أما إذا كانت $(n \geq 1)$ فإن التيار يكون نتيجة الانبعاث الحراري الأيوني Thermonic Emission. وأما إذا كانت $(n \leq 2)$ فإن التيار يكون ناتجاً عن توليد وإعادة اتحاد الحاملات في منطقة النضوب [10].

من مقارنة خصائص $(\ln I - V)$ في حالة الظلام للنماذج المشععة بمدد تتراوح بين (10) و(50) يوماً قبل

الجدول 1. قيم عامل المثالية وارتفاع حاجز الجهد لنماذج غير مشععة، ومشععة قبل ترسيب الذهب لمدد تتراوح بين (10) أيام و(50)، يوماً وبعده لمدد تتراوح بين (5) أيام و(60) يوماً.

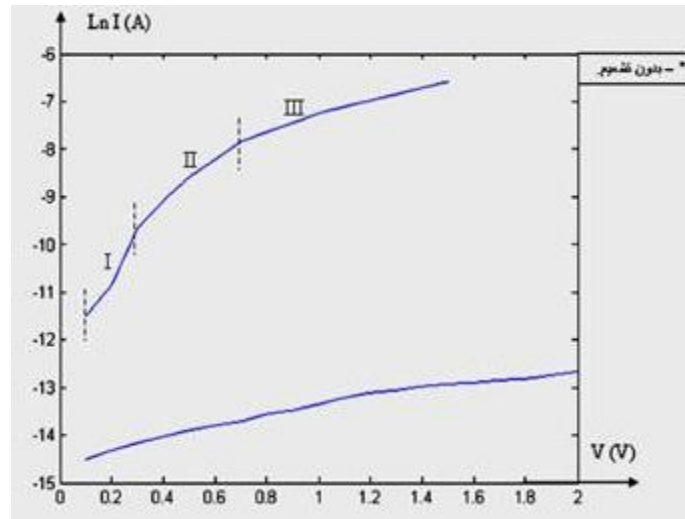
نبائط غير مشععة ومشععة قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي		
عامل المثالية n	ارتفاع حاجز الجهد ϕ_B	
1.05	0.81	Unradiated
1.28	0.806	Radiated(10 days)
1.17	0.816	Radiated (20 days)
1.17	0.824	Radiated (30 days)
1.05	0.835	Radiated (40 days)
1.17	0.84	Radiated (50 days)
نبائط مشععة بعد ترسيب الذهب في القطب العلوي		
عامل المثالية n	ارتفاع حاجز الجهد ϕ_B	
1.2	0.837	Radiated(5 days)
1.17	0.844	Radiated (15 days)
1.12	0.848	Radiated (30 days)
1.07	0.853	Radiated (45 days)
1.11	0.858	Radiated (60 days)



الشكل 3. مقارنة خصائص $\ln I - V$ لنماذج غير مشععة ومشععة في مدد زمنية (10, 20, 30, 40 and 50) يوماً في حالة الظلام قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي.

إن خصائص ($\ln I - V$) في حالة الظلام لنبيطة Au/n-Si قبل التشيع موضحة في الشكل 2. وتستعمل هذه الخصائص لإيجاد متغيرات النبيطة مثل تيار الإشباع I_S ، وعامل المثالية n ، وارتفاع الحاجز ϕ_{Bn} ، وتفسير ميكانيكية انتقال التيار في الخلية.

تمت دراسة آلية التوصيل، وذلك بتقسيم المنحنيات المرسومة في الشكل 2 في حالة الانحياز الأمامي إلى عدة مناطق؛ ففي المنطقة الأولى عند الفولتية ($0.1 < V < 0.3$) تظهر بوضوح العلاقة الخطية للتيار مع الفولتيات الواطئة $I \propto V^m$ (تخضع إلى قانون أوم)، وتكون $m=1$ ، وتتبع هذه المنطقة عند الفولتية ($0.3 < V < 0.7$) بمنطقة التربيع العكسي $I \propto V^m$ ، وتكون $m=2$. وبزيادة الفولتية المسطرة فان التيار يزداد بشكل مفاجيء وهذه النقطة تدعى نقطة الانتقال عند فولتية ($V > 0.7$)؛ إذ تبدأ عندها المنطقة التي تخضع إلى قانون القوى $I \propto V^m$ وتكون فيها $m > 2$.



الشكل 2. خصائص ($\ln I - V$) للاتجاهين الأمامي والخلفي لنبيطة Au/n-Si لنموذج غير مشع في حالة الظلام قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي.

كذلك نجد أن قيمة ارتفاع الحاجز في النباط المشعة بعد ترسيب الذهب أكبر من قيمته في النباط المشعة قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي. ومن ميل المنحني ($\ln I - V$) يمكن إيجاد عامل المثالية n ، وذلك بتطبيق المعادلة $n = \frac{e}{k_B T} * (\frac{d(\ln I)}{dV})$ ، كما تم حساب عامل المثالية لكافة النماذج المشعة وغير المشعة كما في الجدول (1). ويظهر من هذا الجدول أيضاً أن قيمة عامل المثالية $n > 1$ وهذا يدل على أن التيار الناتج يكون

ويعتقد أن زيادة قيمة التيار عند فولتية معينة في كافة النماذج المشعة قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي يمكن أن تعزى إلى العيوب المتكونة داخل النماذج التي تسببها فوتونات الإشعاع. هذه العيوب تسبب عادة تغيراً في عدد مراكز التوليد وإعادة الاتحاد بنسبة أكبر [8] مقارنة بعدد مراكز التوليد وإعادة الاتحاد المتكونة في كافة النماذج المشعة بعد ترسيب الذهب في القطب العلوي نتيجة وجود غشاء الذهب. وبذلك تكون قيمة التيار في النماذج المشعة قبل ترسيب الذهب أكبر من قيمته في النماذج المشعة بعد ترسيب الذهب في القطب العلوي. ويعتقد أن السبب في ذلك حصول عيوب إضافية على سطح الذهب المرسلب تؤدي إلى خسران جزء من الفولتية المسطرة على هذه المنطقة التي مما يؤدي فيما بعد إلى زيادة في قيمة الفولتية مما يجعل انخفاض قيمة التيار أمراً واضحاً.

تم إيجاد كثافة تيار الإشباع العكسي I_S الذي يمثل امتداد الخط المستقيم عند الانحياز الأمامي إلى $V = 0$. ومن تيار الإشباع I_S مباشرة، يمكن حساب ارتفاع حاجز الجهد ϕ_B باستخدام المعادلة $\phi_B = \frac{k_B T}{e} \ln(A * \frac{T^2}{I_S})$ ، وقد استخدمت هذه الصيغة لإيجاد ارتفاع حاجز الجهد لكافة النماذج غير المشعة والمشعة قبل ترسيب الذهب كغشاء وبعده، كما هو مبين في الجدول (1). ويظهر من هذا الجدول أن ارتفاع الحاجز يزداد بزيادة مدة التشيع.

الذهب Au كتوصيل علوي، وبعده، في مدد زمنية مختلفة ومقارنتها مع النبائط غير المعرضة للإشعاع، ومدى تأثيرها على الخواص الكهربائية والبصرية، تم إجراء قياسات الخواص الكهربائية (سعة - فولتية) و(تيار - فولتية) في حالة الظلام وفي حالة الإضاءة كخلية شمسية قبل التشعيع ومقارنتها مع القياسات بعد التشعيع بأشعة كاما ضمن مدد زمنية مختلفة.

النتائج والمناقشة

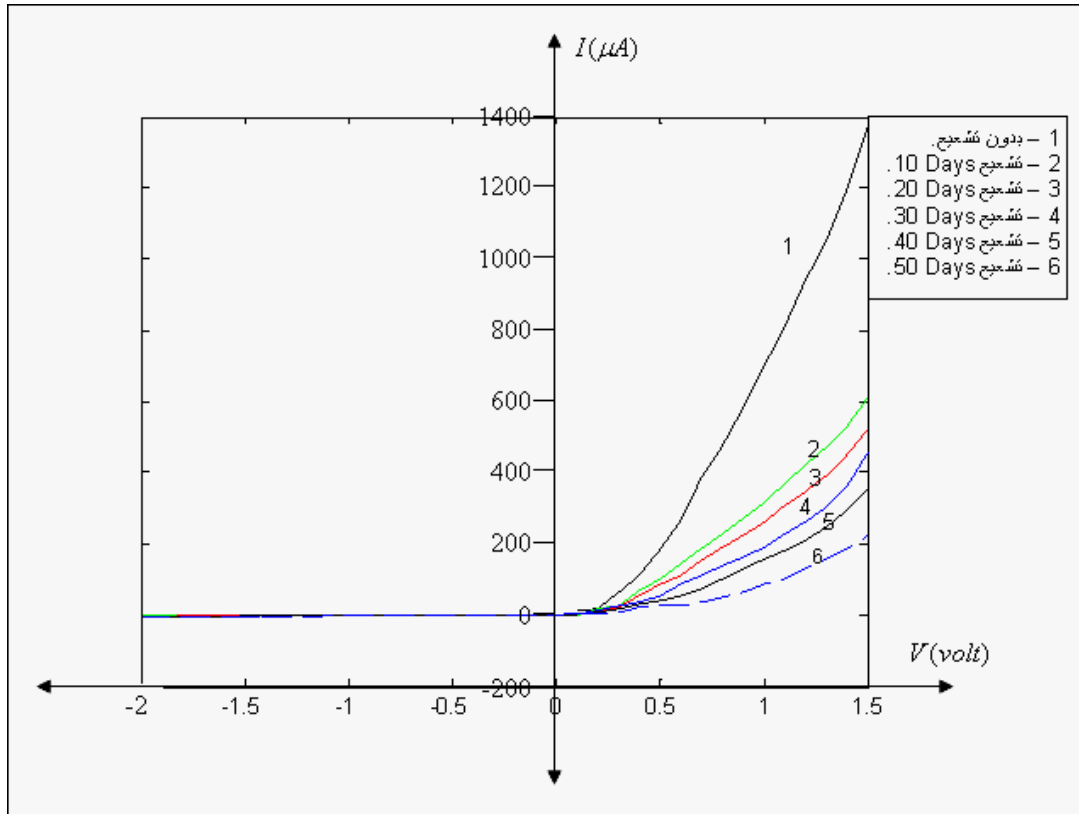
الشكل 1 يوضح علاقة (تيار - فولتية) لنموذج غير مشع، ولنماذج مشعة قبل ترسيب الذهب لمدد زمنية مختلفة. ويلاحظ انخفاض قيمة التيار بزيادة مدة التشعيع مع وجود زيادة في فولتية ظهور التيار. وهذه العلاقة نفسها تظهر للنماذج المشعة بعد ترسيب الذهب مع وجود اختلاف؛ إذ إن قيمة التيار تكون أقل نوعاً ما من تلك التي تظهر في حالة التشعيع قبل ترسيب الذهب.

عنصر الذهب Au على سطح السليكون بطريقة التبخير الحراري.

تم تشعيع النماذج بأشعة كاما لمدد زمنية تراوحت بين يوم واحد و60 يوماً ولعدة نماذج مختلفة؛ إذ تم تشعيع نماذج قبل ترسيب عنصر الذهب ونماذج أخرى بعد ترسيب الذهب، وقد وضعت النماذج فوق مصادر الإشعاع تماماً وداخل تركيب صندوق من حواجز الرصاص بسلك 5cm.

تعرضت النبائط لأشعة كاما من خلال استخدام المصادر المشعة ^{60}Co , 5.27y, ^{133}Ba , 10.5y, ^{137}Cs , 30.07y المنتجة في (30-6-2006) وكانت الفعالية الابتدائية Initial Activity لهذه المصادر تقدر بـ ($A_0 = 1.0\mu\text{Ci}$). فكانت جرعة الامتصاص من قبل العينات لكل ساعة من أشعة كاما تساوي ($270.97\mu\text{Rad}$).

لغرض معرفة مدى العيوب (defects) التي سببها الإشعاع في النبائط المعرضة لأشعة كاما قبل ترسيب معدن



الشكل 1. مقارنة النماذج غير المشعة والمشعة في مدد زمنية (10, 20, 30, 40 and 50) يوماً في حالة الظلام قبل ترسيب الذهب في القطب العلوي.

المقدمة

الغرفة) بعد إزالة المصدر الإشعاعي. وتعزى إليها إزاحة ذرات الشبكة من مواقعها عند حالة الاتزان الابتدائية. أما تأثيرات الإشعاع المؤقتة فهي تلك التأثيرات التي تختفي بعد مدة قصيرة من إزالة المصدر الإشعاعي وتعزى إليها تأثيرات التأين في بلورة أشباه الموصلات [6]. أما [7] فقد وجد أن تأثير أشعة كاما على الخلية الشمسية هو أن تيار الدارة القصيرة يزداد بزيادة الجرعة الإشعاعية فوق 300 mrad.

في هذا البحث تمت دراسة تأثير أشعة كاما منخفضة الشدة ولمدد تشعيع متباينة من 1-60 يوما على الخواص الكهربائية لنبيطة شوتكي من خلال قياس I-V و C-V وتيار الدارة القصيرة وفولتية الدارة المفتوحة.

الجزء العملي

استخدمت في هذه الدراسة شرائح من السليكون (111) أحادي التركيب البلوري من نوع n وذات مقاومة نوعية تتراوح قيمتها بين $(4.3-5.6) \Omega \text{ cm}$ ألمانية الصنع. تم تقطيع شرائح السليكون إلى قطع صغيرة أبعاد كل شريحة في حدود 1 cm^2 باستخدام آلة الماسة التي تستخدم لقطع الزجاج.

تم تنظيف النماذج بغسلها بالماء، ثم وضع النموذج في محلول ايزوبروبانول (Isopropanol) لمدة (2-3 min). ثم غسل النموذج بالماء المقطر ثم وضعه في محلول الميثانول (Methanol) لمدة (2-3 min). وغسل النموذج بالماء المقطر مرة أخرى، ثم وضع النموذج في حامض الهيدروفلوريك HF بتركيز 10% لمدة (1-2 min) لإزالة أي طبقة أكسيد (SiO_2) موجودة على سطح السليكون، ثم غسل النموذج بالماء المقطر لمدة (5-10 min). ومن أجل الحصول على اتصال أومي جيد تم تبخير الألمنيوم Al ذي النقاوة العالية على السطح الخلفي لشبه الموصل باستخدام جهاز التبخير من نوع Balzer Chamber تحت ضغط 10^{-5} torr .

أجريت بعد ذلك عملية التلدين الحراري على هذه العينات تحت ضغط 10^{-5} torr عند درجة الحرارة $300 \pm 10^\circ \text{C}$ ولمدة 60 min. ولإتمام صناعة النبيطة معدن - شبه موصل بشكل كامل، تم تثبيت النماذج على حامل وثبتت فوقها قناع يحتوي على فتحات دائرية بقطر 1mm، بعدها تم ترسيب غشاء رقيق للتوصيل العلوي من

للسليكون أهمية كبيرة من خلال استخداماته في كثير من الأجهزة الالكترونية البسيطة والمعقدة من خلال تصنيع الثنائيات Diodes والترانزستورات Transistors والدوائر المتكاملة Integrated Circuits. إن احد الأسباب في تشعيع بنائط السليكون هو معرفة مدى استطاعة النباط الأساسية المصنعة منه على العمل في محيط إشعاعي [1]. وعملية التشعيع هذه تؤدي إلى توليد مستويات قنص Trap-Levels لكل من الإلكترونات والفجوات في فجوة الطاقة Energy Gap وهذا يغير من الخواص التوصيلية للسليكون ويقلل زمن الديمومة Life Time لكل من حاملات الشحنة الأغلبية Majority والأقلية Minority.

وعند تشعيع بنائط أشباه الموصلات بفوتونات أشعة كاما التي لها طاقة عالية، فإن هذه الفوتونات سوف تفقد طاقتها للذرات المنفردة مما يؤدي إلى إزاحة هذه الذرات عن مواقعها الطبيعية في الشبكة الأصلية وتحويلها إلى مواقع بينية. هذه العملية تخلق مواقع شبكية شاغرة (holes) وذرات بينية مكونة بذلك زوج فراغ-ذرة بينية (Interstitial-Vacancy) يدعى عيب فرنكل (Frenkel Defec) [2].

ومن خلال الدراسات تبين أن العيوب الرئيسية التي يولدها الإشعاع داخل شبه الموصل هي الفراغات والذرات البينية [3، 4]، وأن طاقة الفوتون الساقط اللازمة لإحداث عيب فرنكل تكون مساوية 20 eV طاقة إزاحة العتبة Threshold displacement energy. (وهي اقل طاقة لازمة لإزاحة الذرات من مواقعها [5]).

ومن الجدير بالذكر أن فوتونات أشعة كاما المنبعثة من ^{60}Co التي تصطدم بشبه الموصل (السليكون في هذا البحث) تؤدي إلى تكوين عيوب نقطية (عازلة) نسبياً عندما تكون طاقة الفوتون الساقط أقل من 2 MeV ، وان هذه الطاقة تمثل طاقة إزاحة العتبة Threshold displacement energy اللازمة لإحداث مثل هذا النوع من العيوب.

ونظراً لأن طاقة فوتون أشعة كاما أكبر من 5 MeV ، فهي تؤدي لتكوين عيوب عنقودية. لذا فإن التأثيرات الإشعاعية غالباً ما تحدث بإحدى الطريقتين الآتيتين؛ فالتأثيرات إما أن تكون تأثيرات دائمة Permanent أو تأثيرات مؤقتة Transient؛ إذ إن تأثيرات الإشعاع الدائمة هي تلك التأثيرات التي تبقى لمدة طويلة (عند درجة حرارة

المجلة الأردنية للفيزياء

ARTICLE

تأثير أشعة كاما على عمل نبیطة شوتكي من نوع Au/n-Si

نوفل يوسف جمیل ومحمدنور خضر

قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة الموصل، الموصل، العراق.

Received on: 8/4/2012;

Accepted on: 16/9/2012

الملخص: يتضمن هذا البحث دراسة تأثير أشعة كاما على الخواص الكهربائية لنبیطة شوتكي Au/n-Si بترسيب أغشية رقيقة من الذهب على سطح السليكون (n-Si) ذي الاتجاه (111) باستخدام تقنية التبخير الحراري في الفراغ. كانت مدة التشعيع (1-60) يوما، قبل ترسيب الذهب وبعده. من خواص التيار - الفولتية (I-V) في حالة الظلام، أظهرت النتائج نقصانا في قيمة التيار للانحياز الأمامي، وعلى العكس من ذلك، فإنه تحدث زيادة بسيطة في قيمة تيار الانحياز العكسي يعتقد أنها تحصل بسبب تيار التسريب السطحي المتولد بسبب التلف الشعاعي للنبائط غير المشععة. كان عامل المثالية $n = 1.05$ وارتفاع حاجز شوتكي $\phi_{Bn} = 0.81$ eV. أما في النبائط المشععة في مدد زمنية مختلفة فإن عامل المثالية وجد متغيرا بين 1.05 و 1.17 وارتفاع حاجز شوتكي كان متغيرا أيضا بين 0.81 و 0.858 إلكترون فولت مع زيادة مدة التشعيع. وتبين أن آلية التيار في النبائط كافة هي آلية الانبعاث الحراري الأيوني. من قياسات التيار-الفولتية (I-V) في حالة الإضاءة كانت قيم $I_{sc} = 0.489$ mA، $V_{oc} = 280.4$ mV. أما بالنسبة للنماذج المشععة فقد أظهرت قياسات I_{sc} و V_{oc} زيادة إلى أعظم قيمة عند التشعيع ليوم واحد بحيث كانت كفاءة التحويل للخلية الشمسية 19.32%. ومن قياسات السعة - الفولتية، فإن النتائج أظهرت انخفاض قيمة السعة مع زيادة مدة التشعيع في جميع النماذج المشععة.

Effect of Gamma Rays on Schottky Diodes of Au/n-Si type

Nawfal Yousif Jamil and Mohammed Noor Khader

Physics Department, College of Science, Mosul University, Iraq.

Abstract: This work includes studying the effect of gamma radiation on the electrical properties of Au/n-Si Schottky diode by depositing a thin layer of gold on (111) n-Si by thermal evaporation under vacuum. The device was radiated for variable periods as (1-60) days. From (I - V) characteristics in the dark, the results show a reduction in the forward bias current value, and there was a small increase in the reverse bias current. Also, the forward current of the devices radiated before depositing the gold was larger than the forward current of those radiated after depositing the gold. For non- radiated device, the values of ideality factor and barrier height potential were equal to 1.05 and 0.81eV respectively, while for devices radiated before and after depositing the gold , the values ranged between (1.05- 1.17) for ideality factor and (0.81-0.858)eV for barrier height potential. This concludes that the current mechanism for all non-radiated and radiated devices is thermionic emission. For non-radiated devices the values of the short circuit current and the open circuit voltage were equal to 0.489 mA and 280.4 mV, respectively, while for devices radiated for periods between (1-60) days before and after gold deposition on top surface, the measurements show that the value of short circuit current and open circuit voltage increased to the maximum value within the irradiated devices, while for one day (80mA, 300mV), respectively, for which the efficiency is equal to 19.32%. The values of (V_{oc} , I_{sc}) reduced sharply with increasing radiation periods. The short circuit current and open circuit voltage values in radiated devices before gold deposition are bigger than those of radiated devices after gold deposition on the top surface. From (C - V) measurements, the results show a reduction in the capacity value with increasing radiation periods for all devices before and after gold deposition.

2- معامل سيبك يزداد بازدياد درجة الحرارة، وهو أكبر للأفلام المحضرة على ركائز من أكسيد الألمنيوم منه للأفلام المحضرة على ركائز زجاجية.

3- تزداد الحساسية مع زيادة نسبة التركيز المئوية للغاز ومع درجة الحرارة، وهي أكبر للأفلام المحضرة على ركائز من أكسيد الألمنيوم منها للأفلام المحضرة على ركائز زجاجية.

4- عامل النوعية لغاز كبريتيد الهيدروجين H_2S ينخفض مع زيادة التركيز بينما عامل النوعية لغاز الهيدروجين H_2 يرتفع مع زيادة التركيز، وهو أفضل للأفلام المحضرة على ركائز من أكسيد الألمنيوم منه للأفلام المحضرة على ركائز زجاجية.

نلاحظ من الشكل (11) أن عامل النوعية لغاز كبريتيد الهيدروجين H_2S ينخفض مع زيادة التركيز بينما عامل النوعية لغاز الهيدروجين H_2 يزداد مع زيادة التركيز. وهذا طبيعي لأن حساسية الأفلام المحضرة لغاز H_2S أكبر ما يمكن وحساسيتها لغاز H_2 أصغر ما يمكن بينما تقع حساسيتها نحو مزيج الغازيين (H_2S-H_2) معاً بين الحساسية لغازي H_2 و H_2S .

الاستنتاجات

1- يلاحظ ازدياد جهد سيبك بزيادة درجة الحرارة للعينات المحضرة، وهو أكبر للأفلام المحضرة على ركائز من أكسيد الألمنيوم منه للأفلام المحضرة على ركائز زجاجية.

المراجع

- [8] Moseley, P.T. and Tofield, B.C., Solid State Gas Sensors (Philadelphia, 1987).
- [9] McAleer, J.F., Moseley, P.T., Bourke, P., Norris, J.O.W. and Stephan, R., Sens. Actuators, 8 (1985) 251.
- [10] Dughaish, Z.H., Physica B, 322 (2002) 205.
- [11] Boyer, E.C., Mater. Sci. Eng. B, (1992) 103.
- [12] Bagherim, M., Shahtahmasebi, N., Alinejad, A., Youssefi, M. and Shokoo-Saremi, M., Solid State Sciences, 11 (2009) 233.
- [13] Pichanusakorn, P. and Bandaru, P., Materials Science and Engineering, 67 (2010) 19.
- [14] Patil, R. and Patil, A., Sensors and Transducers Journal, 811 (2007) 354.
- [1] Kanan, S.M., El-Kadri, O.M., Abu-Yousef, I.A. and Kanan, M.C., Sensors, 9 (2009) 8158.
- [2] Zhang, G. and Liu, M., Sensors and Actuators, B69 (2000) 144.
- [3] Young, H., Popovich, N., Chason, E. and Ppaine, D., Thin Solid Films, 411 (2002) 17.
- [4] Kotsika, D., Ivanovskay, M., Orlifa, D. and Falasconi, M., Sensors and Actuators, B101 (2004) 199.
- [5] Vaishampayan, M.V., Deshmukh, R.G., Walke, P. and Mulla, I.S., Materials Chemistry and Physics, 109 (2008) 230.
- [6] Bulusua, A. and Walkerb, D.G., Superlattices and Microstructures, 44 (2008) 1.
- [7] Anuradha, S. and Rajanna, K., International Journal on Smart Sensing and Intelligent Systems, 1 (2008) 498.

عامل النوعية (الاختيارية):

يعبر عامل النوعية (Selectivity Factor) عن إمكانية الحساس للاستجابة لغاز معين بوجود أكثر من غاز. ويعرف عامل النوعية لغاز ضمن عدة غازات بأنه: نسبة الحساسية العظمى (الاستجابة العظمى) للغاز الهدف إلى الحساسية العظمى للغازات الأخرى عند درجة حرارة التشغيل، ويعطى بالعلاقة التالية [14]:

$$K = S_{\text{target gas}} / S_{\text{gas}}$$

حيث K : عامل النوعية (الاختيارية) لغاز ما.

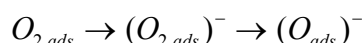
$S_{\text{target gas}}$: الحساسية العظمى للغاز الهدف.

S_{gas} : الحساسية العظمى للغازات الأخرى.

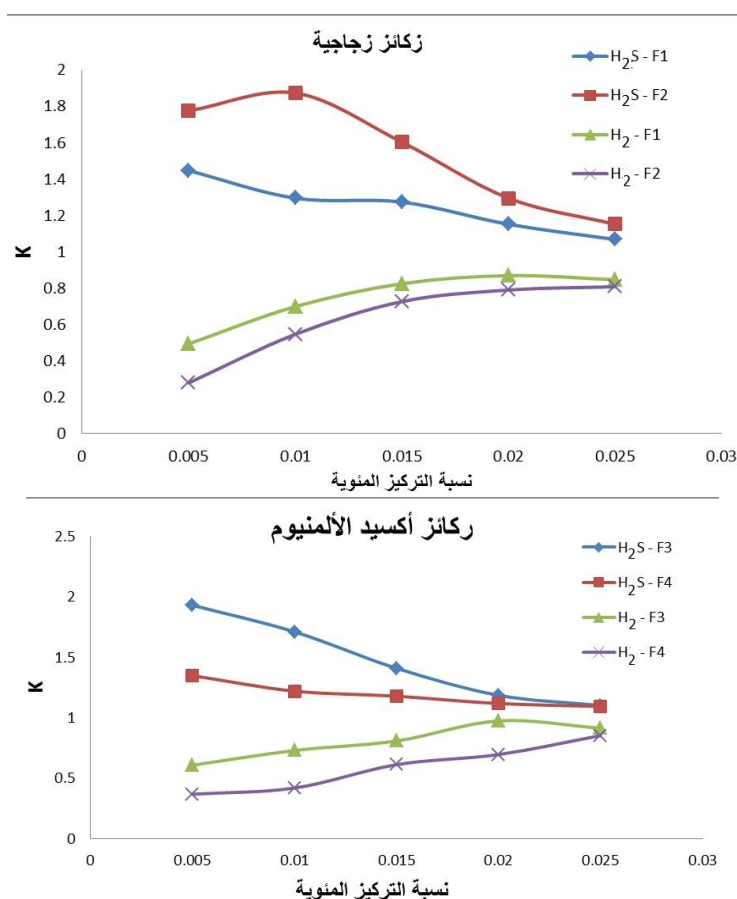
وبرسم العلاقة بين عامل النوعية ونسبة التركيز المئوية للغاز كما في من الشكل (11) نلاحظ أن عامل النوعية للأفلام المحضرة على ركائز أكسيد الألمنيوم المسامي أكبر منه للأفلام المحضرة على ركائز زجاجية.

إن لدرجة الحرارة تأثيرات على حساسية أكسيد القصدير كما لها تأثير على الخواص الفيزيائية لأنصاف النواقل (تغير تركيز حوامل الشحنة بطول ديبي...)، ولها تأثيرات على الامصاص والمج (عكس الامصاص)؛ إذ هي عمليات تنشط بارتفاع درجة الحرارة، كما تعتمد الخواص الديناميكية للحساسات (مثل زمن الاستجابة وزمن الاستعادة) والخواص المستقرة للحساس على درجة حرارة التشغيل التي تكون عندها حساسية الحساس عظمى دائماً.

ويحول الأكسجين المدمص إلى سطح الأكسيد وفق المخطط العام التالي:



لذلك يصبح السطح تدريجياً غنياً بالإلكترونات، ومع زيادة درجة الحرارة يتحول $(O_{2\text{ ads}})^-$ إلى $(O_{\text{ads}})^-$ بأخذ إلكترون واحد من البنية الداخلية لأكسيد القصدير، ومن ثم تزداد كثافة الشحن السطحية مما يؤدي لزيادة الناقلية.



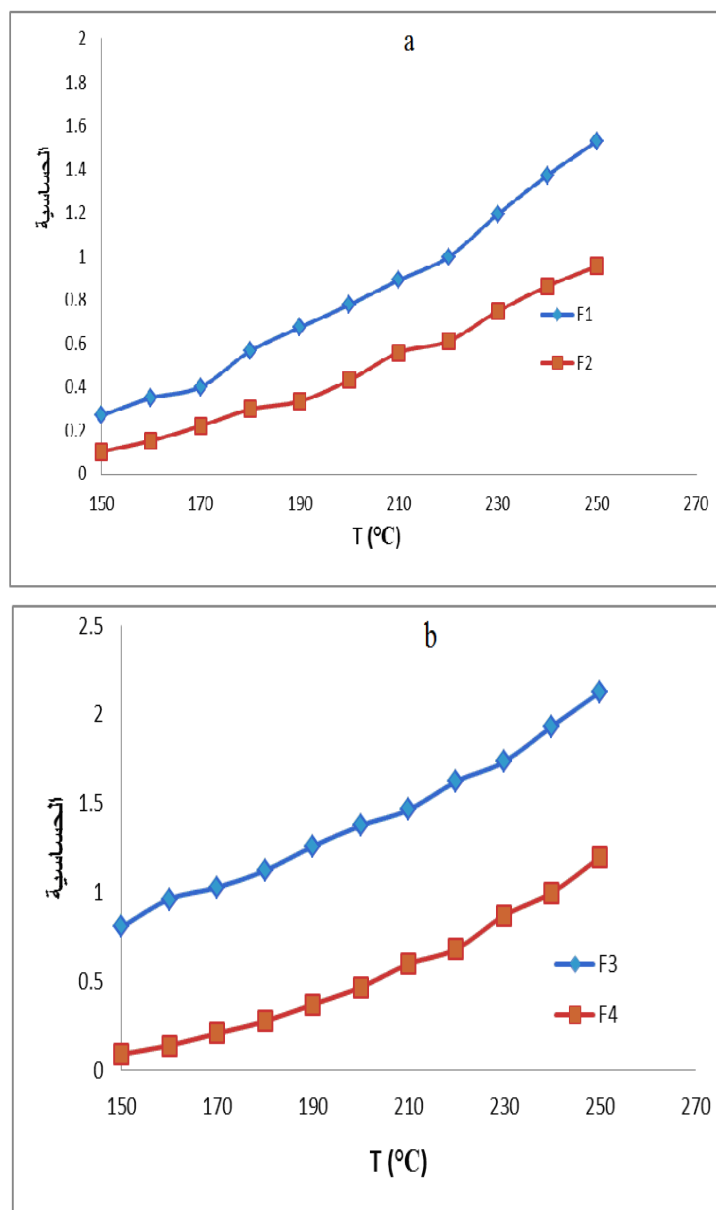
الشكل 11. تغير عامل النوعية مع تغير نسبة تركيز الغاز المئوية للعينات المحضرة على ركائز زجاجية والعينات المحضرة على ركائز من أكسيد الألمنيوم لغاز الهيدروجين وغاز كبريتيد الهيدروجين.

الغازات التي تعطي إلكترونات إلى SnO_2 خلال إنتاج فراغات الأكسجين تعطي سويا تمانحة.

تغير الحساسية للأفلام بتغير درجة الحرارة

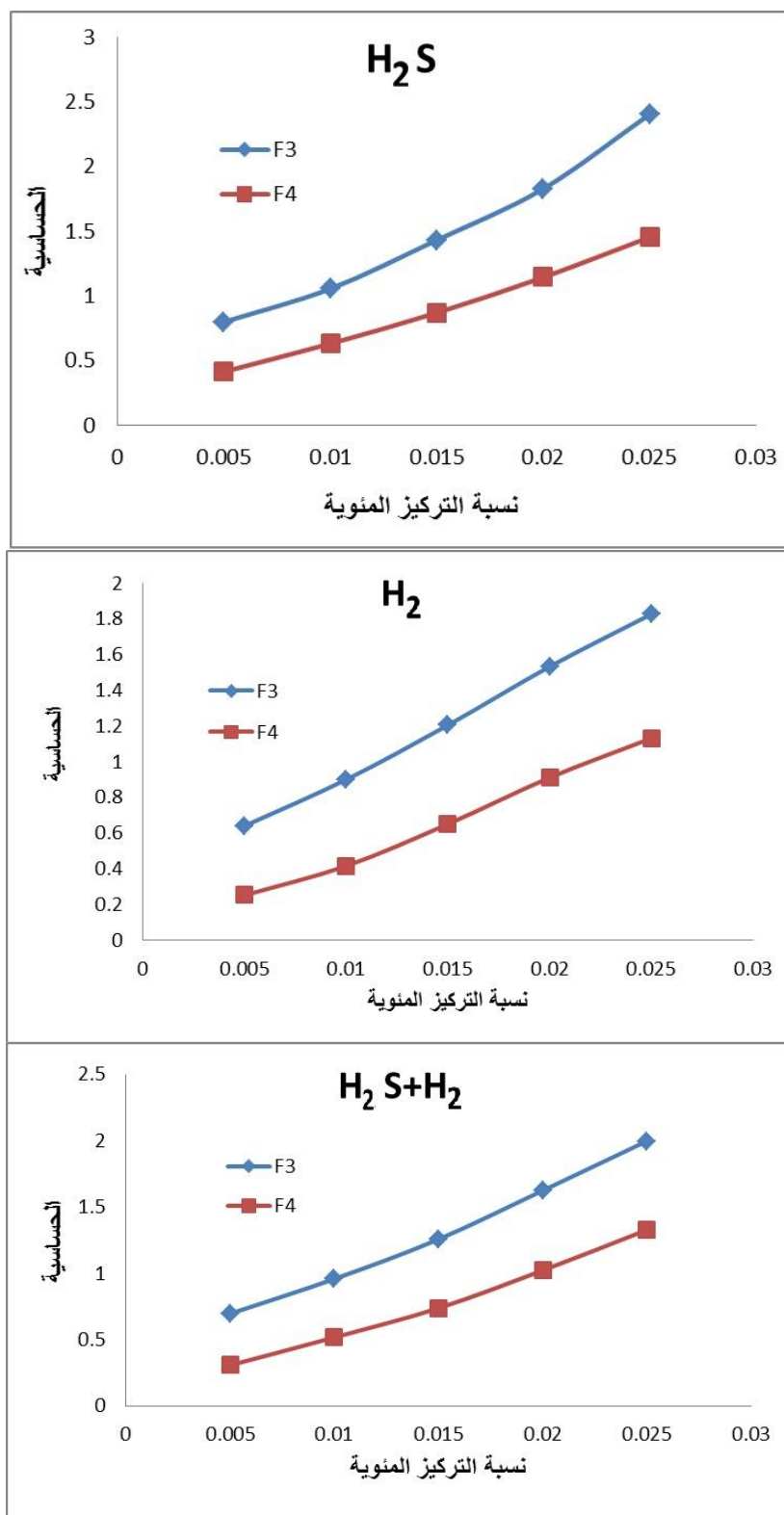
درس تغير الحساسية مع تغير درجة الحرارة للأفلام بالنسبة لغاز كبريتيد الهيدروجين عند نسبة تركيز للغاز ثابتة مقدارها (0.03) كما في الشكل (10)، حيث نلاحظ زيادة الحساسية مع ارتفاع درجة الحرارة عند تركيز ثابت.

نلاحظ أنه عندما يتعرض أكسيد القصدير للغازات يحدث مايلي: ادمصاص غاز نتيجة للتفاعلية العالية لسطح SnO_2 أو تفاعل بتأثير متبادل لجزيئات الغاز مع الجزيئات المدمصة كيميائياً (Chemisorbed) على سطح SnO_2 ، وادمصاص الغاز هو عبارة عن تأثير متبادل كيميائي مباشر بين جزيئات الغاز وسطح نصف الناقل مصحوب بتبادل شحنة، وإن سلوك الأخذات والمانحات يعتمد على نوع الجزيء المدمص؛ فالغازات التي تأسر أو تصطاد إلكترونات من SnO_2 عند ادمصاصها تنتج سويا تمانحة، بينما



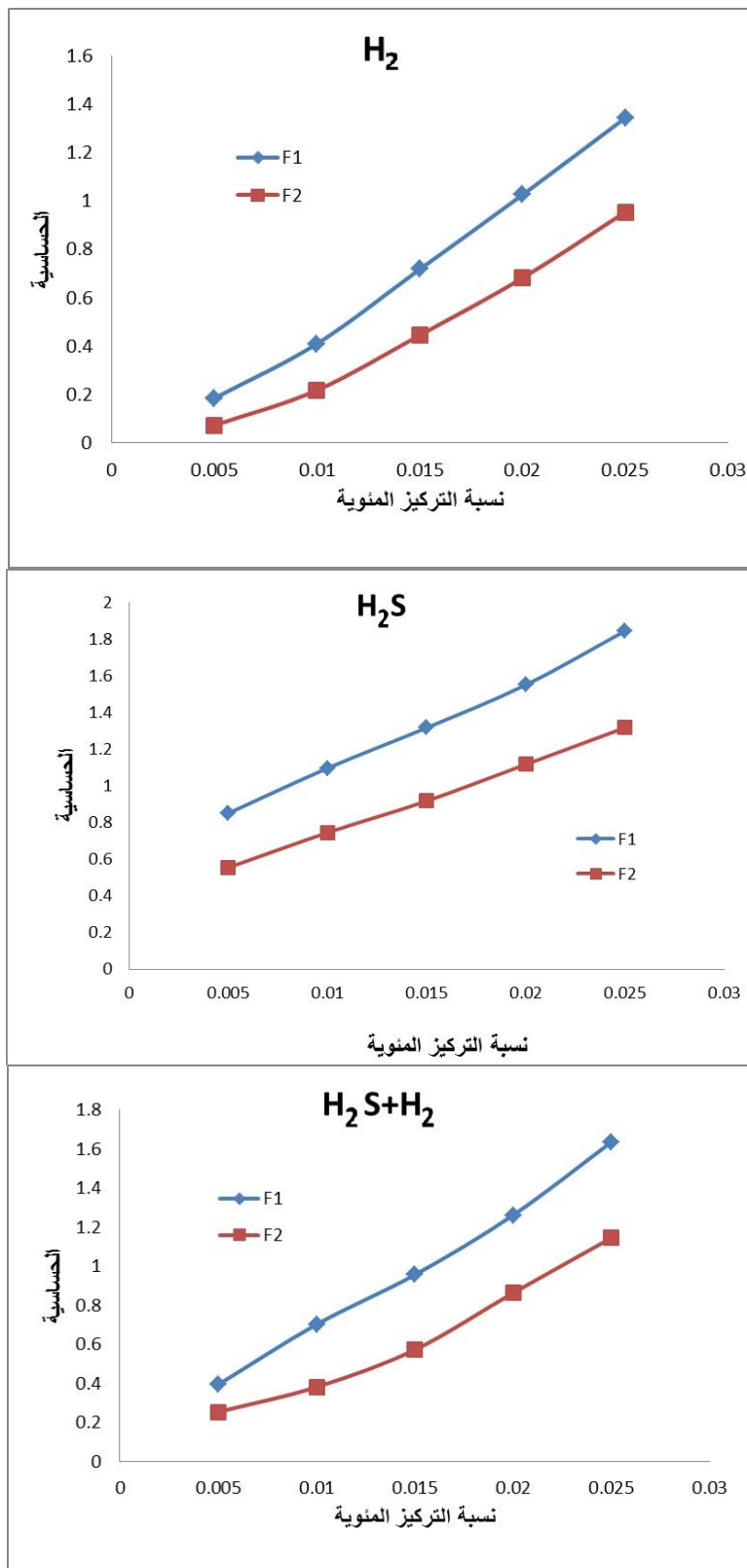
الشكل 10. تغير الحساسية مع تغير درجة الحرارة للعينات (a) F2, F1 والعينات (b) F4, F3 لغاز كبريتيد الهيدروجين.

ومن أجل تحسين الحساسية للأفلام المحضرة، تم ترسيب الأفلام على ركائز من أكسيد الألمنيوم المسامي، حيث تم حساب الحساسية وفقاً للعلاقة (6) ورسمت العلاقة بين الحساسية وتركيز الغاز كما في الشكل (9).

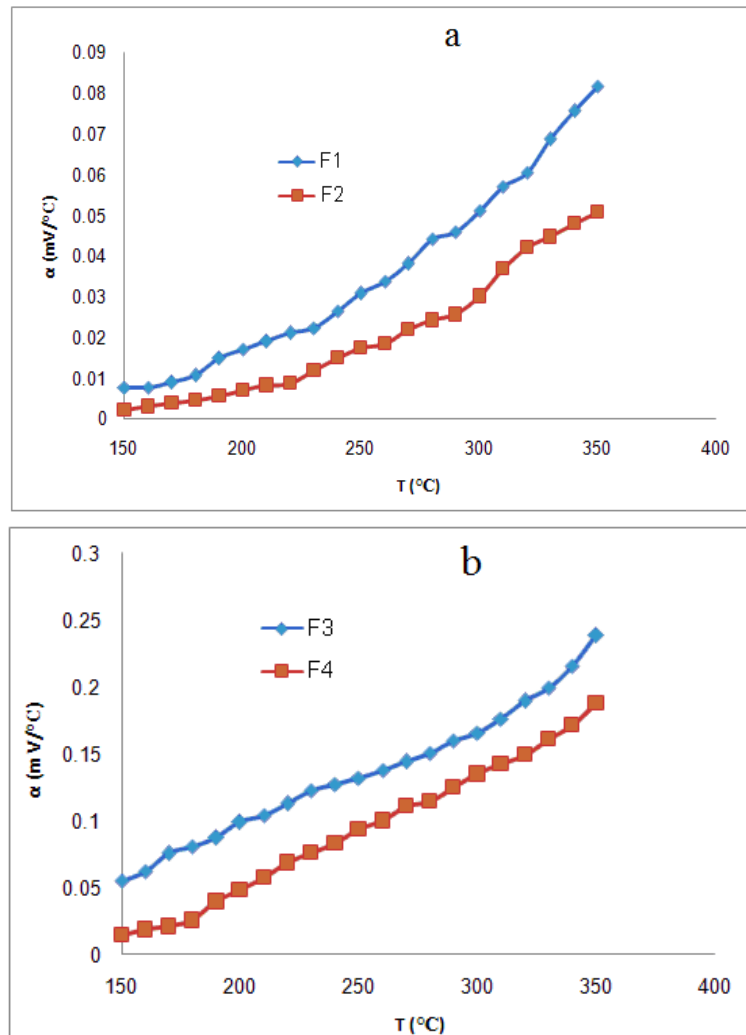


الشكل 9. تغير الحساسية مع تغير نسبة تركيز الغاز المئوية للعينات F3، F4 المحضرة على ركائز أكسيد الألمنيوم لغاز كبريتيد الهيدروجين وغاز الهيدروجين ومزيج من غازي الهيدروجين وكبريتيد الهيدروجين.

تشكيل حساس غازي من أكسيد القصدير ذي بنية نانوية يعمل بمبدأ الفعل الكهحراري ودراسة حساسيته لبعض الغازات



الشكل 8. تغير الحساسية مع تغير نسبة تركيز الغاز المئوية للعينات F1، F2 المحضرة على ركائز زجاجية لغاز الهيدروجين وغاز كبريتيد الهيدروجين ومزيج من غازي الهيدروجين وكبريتيد الهيدروجين.



الشكل 7. تغير معامل سيبك مع تغير درجات الحرارة للعينات F1، F2 (a) والعينات F3، F4 (b).

حساسية الأفلام المحضرة بمبدأ الفعل الكهحراري

درست حساسية الأفلام المحضرة على ركائز زجاجية بوجود الغازات، حيث تم حساب حساسية الأفلام من العلاقة التالية:

$$S = \frac{\alpha_{gas} - \alpha_{air}}{\alpha_{air}} \quad (6)$$

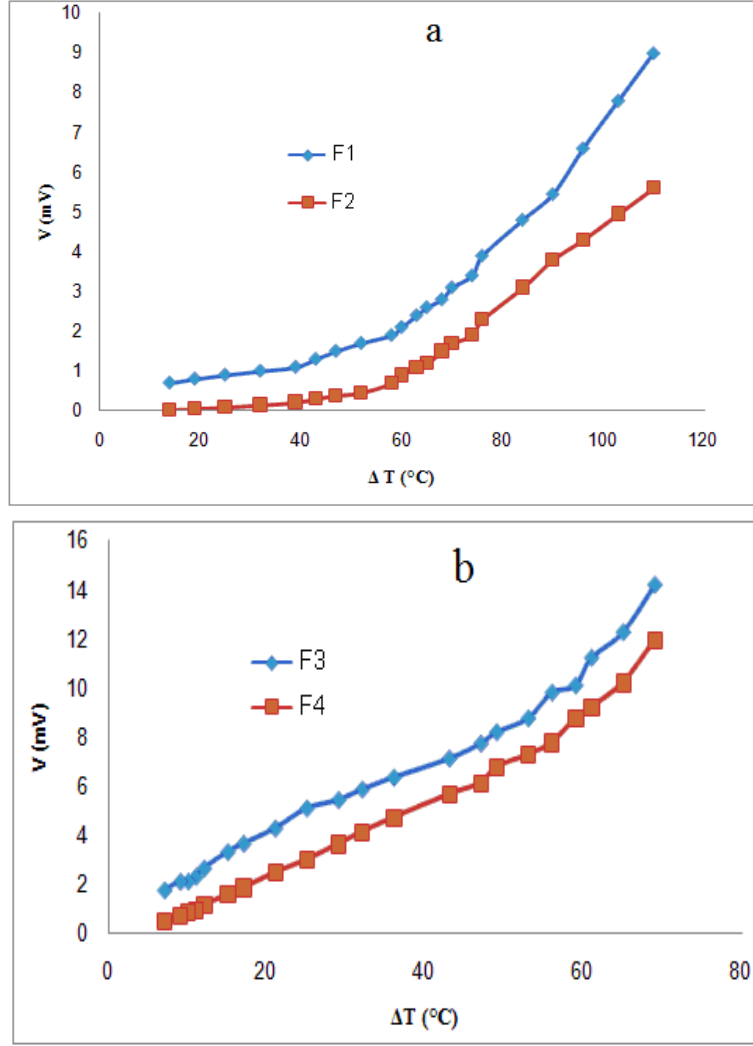
α_{air} : معامل سيبك بدون وجود الغاز (الخلاء).

α_{gas} : معامل سيبك بوجود الغاز.

وبرسم العلاقة بين الحساسية ونسبة التركيز المئوية للغاز، نلاحظ زيادة الحساسية مع زيادة نسبة تركيز الغاز كما في الشكل (8).

نلاحظ أن العلاقة بين معامل سيبك ودرجة الحرارة هي لاقطية غالباً، حيث نميز بين منطقتين: المنطقة الأولى عند درجات حرارة منخفضة، حيث يزداد معامل سيبك بشكل خطي مع درجة الحرارة والمنطقة الثانية عند درجات حرارة عالية، حيث تكون الزيادة فيها لاقطية. وهذا منطقي لأن معامل سيبك مرتبط بصورة أساسية بالناقلية الكهربائية.

تشكيل حساس غازي من أكسيد القصدير ذي بنية نانوية يعمل بمبدأ الفعل الكهحراري ودراسة حساسيته لبعض الغازات



الشكل 6. جهد سيبك مع تغير فرق درجات الحرارة للعينات F1، F2 (a) والعينات F3، F4 (b).

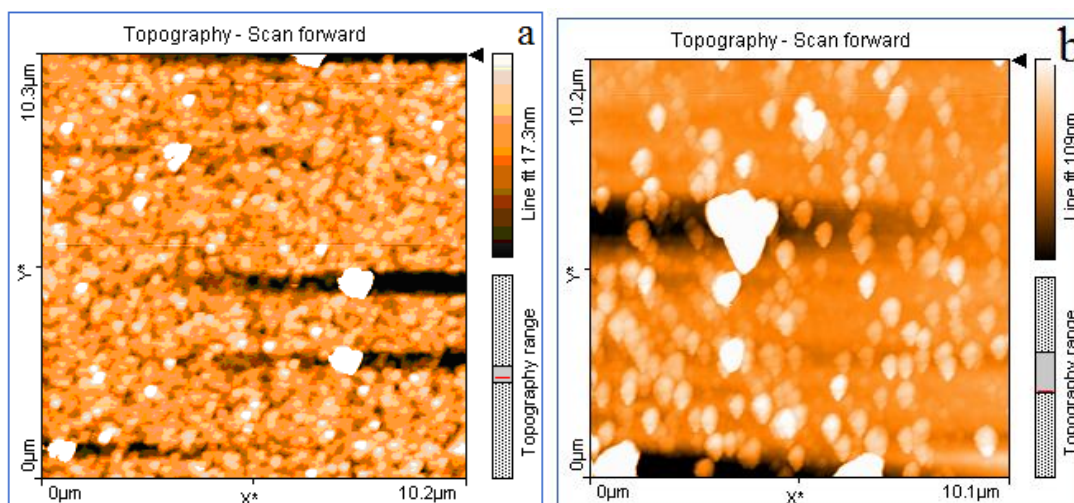
معامل سيبك وبين الحساسية التي يرمز لها بالرمز S أيضاً.

وبرسم العلاقة بين معامل سيبك ودرجة الحرارة كما في الشكل (7)، نلاحظ أن معامل سيبك يزداد بازدياد درجة الحرارة.

نلاحظ من الشكل (6) ازدياد جهد سيبك مع زيادة فرق درجات الحرارة بين الطرفين الساخن والبارد. وتم حساب

$$\alpha = \frac{V}{\Delta T} \quad [13]:$$

α : معامل سيبك الذي يرمز له بالرمز S أيضاً في بعض المراجع، إلا أننا استخدمنا الرمز α للتمييز بين



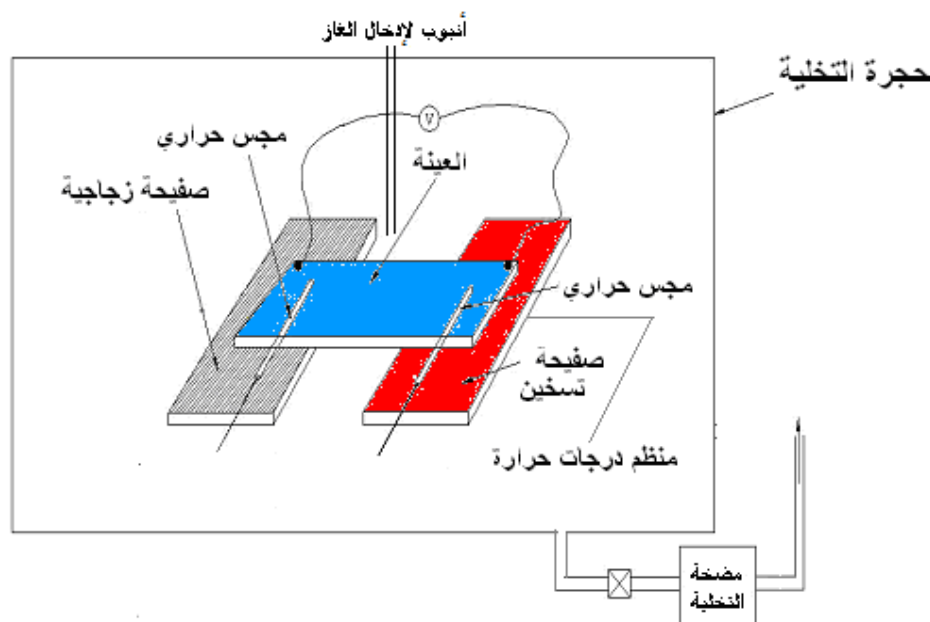
الشكل 4. صورة AFM لأوكسيد القصدير المحضر على ركائز زجاجية والمطعم بالحديد (a) والنحاس (b).

الهواء بمرحلتين تعطي ضغطاً يصل إلى 10^{-3} mbar مع مقياس ضغط Pirani gauge.

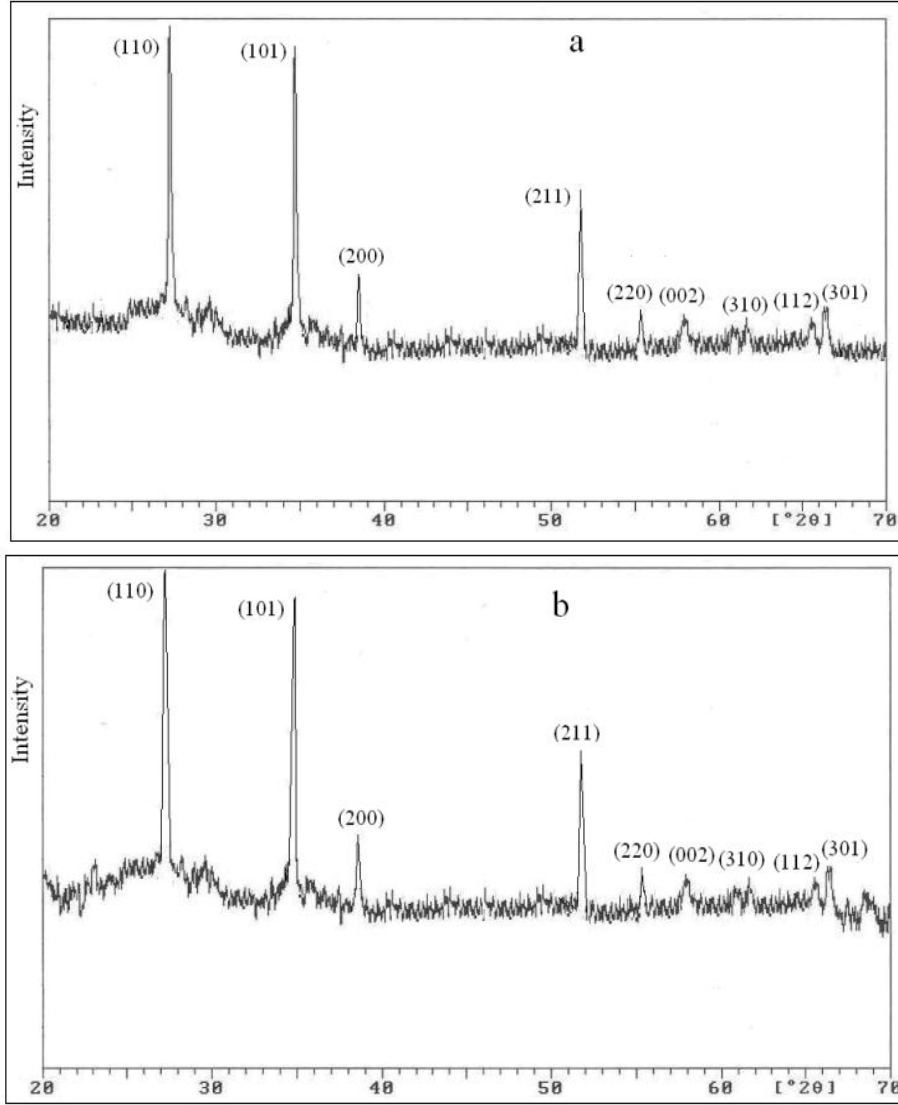
درس تغير جهد سيبك (V) مع تغير فرق درجة الحرارة (ΔT) للطرفين الساخن والبارد تحت ضغط جوي منخفض مقداره 10^{-3} bar كما هو موضح في الشكل (6).

4- مفعول سيبك

من أجل قياس معامل سيبك، تم تصميم منظومة تخلية مكونة من ناقوس زجاجي قطره 27cm وارتفاعه 35cm مزود بفتحات لإدخال المجسات الحرارية وأسلاك الأجهزة الكهربائية لأخذ النتائج. وتم عزل هذه الفتحات بشكل جيد لمنع التسريب أو حدوث خلل في التخلية كما هو موضح في الشكل (5)، حيث استخدمت مضخة ميكانيكية لسحب



الشكل 5. نظام التخلية الذي تم فيه أخذ القياسات التجريبية للفعل الكهحراري على العينات المحضرة.



الشكل 3. طيف انعراج الأشعة السينية لأكسيد القصدير المطعم بالحديد (a) والنحاس (b).

حيث D : حجم التبلور، K : ثابت قيمته تقريباً تساوي الواحد، λ : طول موجة الأشعة المستخدمة ($\lambda = 0.14 \text{ nm}$)، θ : زاوية الانعراج.

وبيين الجدول (3) حجم التبلور للأفلام المحضرة على ركائز زجاجية.

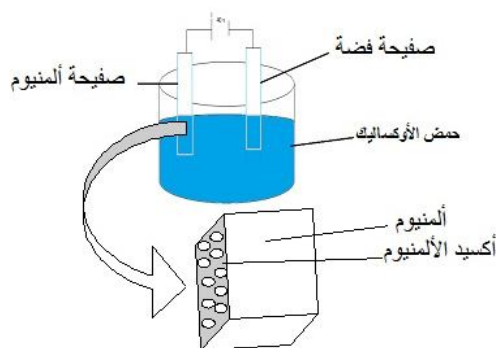
الجدول 3. حجم الحبيبات للعينات المحضرة على الركائز الزجاجية لتوجهات بلورية مختلفة.

	crystallite size (nm)		
Peak	110	101	211
F1	19.75	28.13	47.36
F2	26.57	41.25	59.47

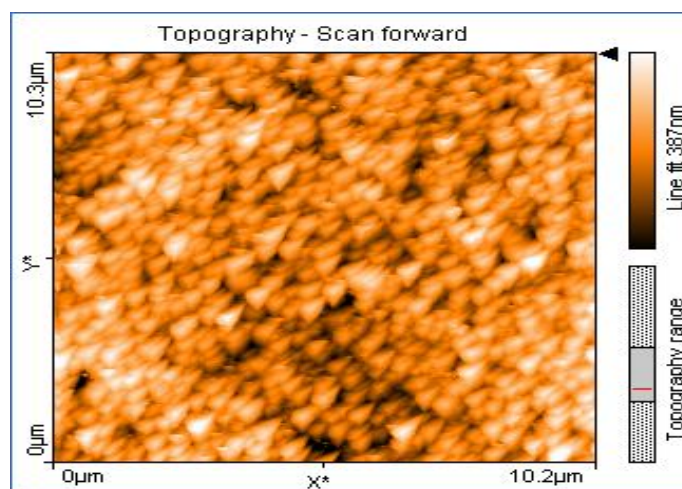
وللتأكد من البنية النانوية للأفلام المحضرة تم فحصها بواسطة مجهر القوى الذرية (AFM) كما في الشكل (4).

نلاحظ من الشكل (3) أن المادة السيراميكية المتشكلة من $(\text{SnO}_2\text{-Cu})$ أو $(\text{SnO}_2\text{-Fe})$ هي متعددة التبلور بسبب التآلف الحاصل بين العناصر المكونة للمادة المحضرة والتوجهات البلورية لأكسيد القصدير هي $(110 - 101 - 200 - 211 - 220 - 002 - 310 - 112 - 301)$. إن إضافة $(\text{Cu}$ أو $\text{Fe})$ بنسب ضئيلة إلى (SnO_2) تؤثر على حجم التبلور وعلى حجم الجزيئات للمركب السيراميكي المحضر. إن الشدة النسبية لكل قمم طيف انعراج الأشعة السينية تتناقص عند التطعيم بالحديد أو النحاس، ويعزى ذلك إلى مساهمة إدخال شوارد الحديد أو النحاس في الشبكة البلورية مسببة نقصان حجم التبلور. تم حساب حجم التبلور للأفلام المحضرة من علاقة شيرر [12]:

$$D = k\lambda / (\delta w \cos \theta)$$



الشكل 1. مراحل تحضير أكسيد الألومنيوم المسامي.



الشكل 2. صورة AFM لأكسيد الألومنيوم.

فيلم سميك، وبعد الانتهاء من عملية الترسيب المتكررة عولجت العينات حرارياً عند الدرجة (600°C) لمدة ساعتين، وبذلك حصلنا على عدة أفلام مطعمة بنسبة من Fe أو Cu مقدارها (5%) وتمت تسميتها كما في الجدول (2).

الجدول 2. أكسيد القصدير المطعم بالنحاس والحديد والمرسب على ركائز زجاجية وركائز أكسيد الألومنيوم المسامي.

Substrate	SnO ₂ : Fe	SnO ₂ : Cu
glass	F1	F2
porosity alumina	F3	F4

3- دراسة البنية النانوية

تمت دراسة بنية أكسيد القصدير المطعم بالحديد أو بالنحاس باستخدام جهاز انعراج الأشعة السينية (XRD). ويمثل الشكل (3) طيف انعراج الأشعة السينية للعينات المحضرة.

نلاحظ من الشكل أن حجم المسامات المتشكلة نانوي وأن المسامات شبه منتظمة.

2- تحضير الأفلام الرقيقة

تم حل كلوريد القصدير الرباعي $\text{SnCl}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ مع كلوريد الحديد $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ أو كلوريد النحاس $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ في الإيثانول $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ وبتحريك المزيغ بواسطة خلاط مغناطيسي لمدة ساعتين بشكل قوي حتى يتم انحلال المواد المتفاعلة انحلالاً كاملاً، ثم رسب المحلول الجلاتيني على ركائز زجاجية وركائز من أكسيد الألومنيوم المسامي المحضرة بالأكسدة المصعدية بطريقة الغمس (Dip Coating-SOL-GEL) باستخدام جهاز بسرعة سحب قدرها (7 cm/min)، وبعد إخراج الركيزة من المحلول تم وضعها في الفرن عند الدرجة (80°C) لمدة (15 min) ثم أخرجت الركيزة من الفرن وتركت حتى تبرد، ثم أعيدت عملية الترسيب عشر مرات للحصول على

آخر. والجدول التالي يوضح تحول بعض الغازات المرجعة وحرارة الاحتراق لها [8-11]:

الجدول (1). حرارة الاحتراق لبعض الغازات		
gas	Product	Heat (kJ/mol)
H ₂	H ₂ O	244
CO	CO ₂	284
CH ₄	CO ₂ .H ₂ O	800
Acetone	CO ₂ .H ₂ O	1760

وبالنسبة للغازات القابلة للاحتراق عند معدل مقبول أقل أو أكثر من 100°C، فإن الحساسات الغازية ذات مبدأ الفعل الكهحراري تكون ناعمة ومفيدة.

القسم العملي

1- تحضير أكسيد الألمنيوم

تم تحضير أكسيد الألمنيوم المسامي كما في الشكل (1)، وذلك وفق الخطوات التالية:

1- معالجة صفيحة الألمنيوم بالحرارة (T = 500 °C) لمدة أربع ساعات، وذلك للتخلص من الإجهادات في أثناء عمليات تصنيع الصفائح وللحصول على حبيبات خشنة وللحصول على شروط التجانس لنمو المسامات على مناطق واسعة.

2- تنظيف صفيحة الألمنيوم في جهاز الاهتزاز الصوتي بمزيج من الماء المقطر والأسيتون وحمض الخل.

3- غمس صفيحة الألمنيوم في مزيج من حمض الكبريت وحمض الفوسفور والماء المقطر.

4- تطبيق جهد مستمر مقداره 40V في محلول (0.3M) من حمض الأوكساليك لمدة 40 min حيث تكون صفيحة الألمنيوم على القطب الموجب والفضة على القطب السالب كما في الشكل (1)، وذلك من أجل أكسدة صفيحة الألمنيوم في درجة حرارة الغرفة (27°C).

5- غمس صفيحة الألمنيوم في مزيج من حمض الكروم (1.8wt%) وحمض الفوسفور (6wt%) في درجة حرارة 65°C لزمّن مقداره (10-20min)، للحصول على ثقب نانوية في ركيزة الألمنيوم.

6- غمس صفيحة الألمنيوم في حمض الفوسفور (5wt%).

بعد تحضير عينات من أكسيد الألمنيوم المسامي، أخذت لها صورة بواسطة مجهر القوى الذرية (AFM) كما يوضح ذلك الشكل (2):

حيث K_m ($m = 0, 1, 2, \dots$) هي تكاملات النقل مأخوذة من [8]:

$$K_m = \frac{1}{4\pi^3} \iiint \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \varepsilon^m v^2 d^3k$$

حيث f_0 : تابع توزيع فيرمي المتوازن، v و ε : هما السرعة والطاقة للإلكترونات الناقلة، k الشعاع الإلكتروني، ε_f : طاقة فيرمي، q : شحنة الإلكترونات، E : المجال الكهربائي. بترتيب المعادلتين (1) و (2) وبايجاد المجال الكهربائي E والتدفق الحراري J_Q كتتابع لتدفق التيار J_e [8]:

$$E = \frac{J_e}{q2k_0} + \left(\frac{K - \varepsilon_f K_0}{qK_0 T} \right) \frac{dT}{dz} \quad (3)$$

$$J_Q = \left(\frac{K - \varepsilon_f K_0}{qK_0 T} \right) J_e + \left(\frac{k_1^2 - k_0 k_2}{k_0 T} \right) \frac{dk}{dz} \quad (4)$$

من هاتين المعادلتين وبربط مناسب يمكن إيجاد العلاقات (الناقلية الكهربائية متساوية درجة الحرارة: J_e عندما $\frac{dT}{dz} = 0$ ، الناقلية الحرارية متساوية الإلكترونات: J_Q عندما $J_e = 0$ ، مفعول بلتيير: J_e عندما $\frac{dT}{dz} = 0$ ، مفعول سيبيك: E عندما $J_e = 0$).

وفي حالة مفعول سيبيك فإن:

$$E = \frac{dV}{dz} = S \frac{dT}{dz} \quad \text{حيث: } S = \left(\frac{K - \varepsilon_f K_0}{qK_0 T} \right)$$

من المعادلة السابقة، نلاحظ أن تغير درجة الحرارة سيترافق مع تولد فرق كمون dV بين منطقتين يكون فرق درجة الحرارة بينهما dT . في الحالة البسيطة، عندما يسبب التسخين المحلي انتشار الحوامل بعيداً عن منطقة درجات الحرارة الأعلى مع نشوء حقل توازن، فإن حجم استجابة فرق الكمون dV الناشئ بواسطة الحساس من هذا النوع سيكون حاصل ضرب ارتفاع درجة الحرارة ومعامل سيبيك [8].

$$dV = (const) \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \Delta H S \quad (5)$$

حيث ΔH حرارة الاحتراق للغاز (الانتالبية) عندما يدمص (Adsorb) الغاز على السطح ويتحول إلى مركب

المقدمة

وهذه تزيد في سرعة الاستجابة وتساعد في تفرغ الغاز في أثناء العمل، وتزداد أهمية طرق تصنيع أكسيد القصدير ذي حجم جزيئي من مرتبة النانومتر. من جهة أخرى توجد ثلاثة أنواع للفعل الكهرحراري هي: مفعول سيبيك ومفعول بلتير ومفعول تومسون. مفعول سيبيك (Seebeck Effect) ينتج عن فرق الكمون في ناقل عندما يكون هناك اختلاف في درجة الحرارة بين طرفي الناقل، وهذا الفرق في الكمون ناتج عن حركة حوامل الشحنة (الإلكترونات أو الثقوب) من الطرف الساخن إلى الطرف البارد. مفعول بلتير (Peltier Effect) هو عكس مفعول سيبيك، حيث يصف كيفية نقل الحرارة خلال نوعين مختلفين من أنصاف النواقل (p-n) عند مرور التيار الكهربائي فيهما. ومفعول تومسون (Thomson Effect) هو الإصدار أو الامتصاص داخل الناقل عند مرور التيار الكهربائي مع وجود التدرج الحراري. للفعل الكهرحراري تطبيقات عديدة منها [2-7] مايلي: يستخدم الفعل الكهرحراري في الملابس الذكية المشغلة بحرارة الجسم، حيث يعتمد على اختلاف درجات الحرارة بين الملابس والجسم. ويستعمل لتشغيل حساسات طبية في جسم الإنسان (حساسات نبضات القلب ودرجة الحرارة). ويستخدم في المركبات الفضائية لتشغيل المسابر الفضائية. ويستخدم في شحن البطاريات، حيث تزود البطارية بمولد فعل كهرحراري لإنتاج فرق الكمون اللازم لشحنها.

عمل الحساسات الغازية بمبدأ الفعل الكهرحراري

توجد علاقة بين تدفق الشحنة الكهربائية J_e وتدفق الحرارة J_Q عبر الناقل [8]:

1- بالنسبة للتدفق الكهربائي [8]:

$$J_e = q \left[K_0 \left(qE - \frac{d\varepsilon_f}{dz} \right) - (K_1 - \varepsilon_f K_0) \frac{1}{T} \frac{dT}{dX} \right] \quad (1)$$

2- بالنسبة للتدفق الحراري [8]:

$$J_Q = \left\{ (K_1 - \varepsilon_f k_0) \left[qE - \frac{d\varepsilon_f}{dZ} \right] - \left(k_2 - 2\varepsilon_f K_1 + \varepsilon_h 2k_0 \right) \frac{1}{T} \frac{dT}{dX} \right\} \quad (2)$$

إن لغاز كبريتيد الهيدروجين تأثيراً ضاراً كبيراً على جسم الإنسان، حيث يؤدي التعرض لغاز كبريتيد الهيدروجين إلى تهيج المسالك التنفسية وفقدان حاسة الشم مؤقتاً، وعند التعرض لتركيزات أعلى من 550 جزءاً في المليون يحدث تدافع سريع للهواء خارج الرئة مما يؤدي للاختناق. كما يؤدي التعرض لكبريتيد الهيدروجين إلى الغثيان والسعال والصداع والالتهاب الحاد للعيون. ويوجد غاز كبريتيد الهيدروجين بصورة طبيعية في البترول الخام والغاز الطبيعي وغازات البراكين وكذلك في ينابيع المياه الساخنة. كما أنه ينطلق في العديد من المصانع وينطلق في العديد من الأنشطة الصناعية مثل تفكك النفايات العضوية وإنتاج الأغذية وأفران الطبخ والمطاحن ومصافي تكرير النفط، ولذلك فإن تحديد موقع وكمية غاز كبريتيد الهيدروجين مهم جداً ولاسيما في القطاع الصناعي. يتسبب اشتعال غاز كبريتيد الهيدروجين في حدوث انفجارات، ويؤدي احتراقه إلى انبعاث الغازات السامة مثل ثاني أكسيد الكبريت ومركبات كبريتية أخرى. أما غاز الهيدروجين فهو من الغازات الصناعية المهمة، وهو يتولد في الصناعات النفطية أو في أثناء عملية الاستخراج النفطي. إن الهيدروجين من الغازات الخطرة جداً لأنه سهل الاشتعال والانفجار إضافة إلى أنه يسبب تآكلاً شديداً للخزانات النفطية [1]. ينصب جهد الباحثين على تصنيع كواشف مختلفة لهذه الغازات السامة، ومجموعة المركبات SnO_2 ، Fe_2O_3 ، ZnO هي أكاسيد تستخدم لكشف الغازات السامة، ويظهر أكسيد القصدير حساسية عالية وانتقائية للغازات السامة الناتجة عن الانفجارات. لذلك فإن الأفلام الرقيقة من أكسيد القصدير ذات أهمية كبيرة ولها تطبيقات واسعة جداً، وحديثاً تم استخدامها كواشف للغازات التي تحتوي على عنصر الأكسجين أو أي مادة قابلة للتبخر مثل الإيثانول والميثانول، وهي مواد تحوي في تركيبها عنصر الأكسجين. تعتبر الأفلام الرقيقة من أكسيد القصدير من المواد المهمة تقنياً ولها تطبيقات واسعة في مجالات مختلفة، وتبين حديثاً أن حساسية الأفلام الرقيقة من أكسيد القصدير ككاشف للغازات تزداد كلما تناقص حجم الجزيء (الحبيبة)، وذلك حسب طريقة التحضير المتبعة، وهذا يؤدي إلى تحسين الاستجابة وسرعة تغطية الزمن (أي سرعة عودة الحساس إلى وضعه الأصلي قبل وجود الغاز)، ويمكن أن تزداد حساسية الكاشف والميزات الديناميكية بوجود مسامات في الأفلام الرقيقة توفر أفضلية لنقل الغاز،

المجلة الأردنية للفيزياء

ARTICLE

تشكيل حساس غازي من أكسيد القصدير ذي بنية نانوية يعمل بمبدأ الفعل الكهحراري ودراسة حساسيته لبعض الغازات

محمد أنور بطل، غسان ناشد وفارس حاج جنييد
قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة حلب، سوريا.

Received on: 13/12/2011;

Accepted on: 20/5/2012

الملخص: رسيت أفلام رقيقة من أكسيد القصدير المطعم بالحديد أو النحاس على ركائز زجاجية وعلى ركائز من أكسيد الألومنيوم المسامي المحضرة بالأكسدة المصعدية باستخدام الترسيب المشترك بطريقة الغمس (Dip Coating-SOL-GEL). طعمت الأفلام بنسبة من الحديد أو النحاس مقدارها 5 % وهي أفضل نسبة تطعيم حصلنا عليها من خلال دراسة نسب تطعيم مختلفة في أبحاث سابقة. وبعد ذلك عولجت حرارياً لمدة ساعتين عند الدرجة 600°C . تمت تسمية العينات كما في الجدول (2). قيس جهد سيبك للعينات المحضرة، كما تم حساب معامل سيبك. قيس حساسية الأفلام المحضرة نحو غاز كبريتيد الهيدروجين H_2S وغاز الهيدروجين H_2 ونحو مزيج غازي من ($\text{H}_2\text{S}-\text{H}_2$) تحت ضغط منخفض مقداره 10^{-3} bar كتابع لعدة وسائط (درجة الحرارة، نسبة التركيز المئوية للغاز)، حيث لوحظت زيادة الحساسية مع ارتفاع درجة الحرارة وأيضاً مع ازدياد النسبة المئوية لتركيز الغاز. وقيس عامل النوعية لغازي كبريتيد الهيدروجين والهيدروجين، حيث وجد أن حساسية الأفلام المحضرة نحو غاز كبريتيد الهيدروجين H_2S هي الأفضل.

الكلمات الدالة: أكسيد القصدير؛ مفعول سيبك؛ البنية النانوية.

Preparation of a Gas Sensor of Nanostructure Tin Oxide Working on the Principle of Thermoelectric Effect and Studying Its Sensitivity to Some Gases

M. A. Batal, Gh. Nashed and F. H. Jneed

Department of Physics, College of Science, University of Aleppo, Aleppo, Syria.

Abstract: Tin oxide thin films doped with iron or copper were deposited on glass and porous alumina substrates, using co-deposition dip coating sol-gel technique. The films were doped with iron oxide at a concentration of 5%. Alumina substrates were prepared by anodizing technique. Samples were sintered for 2 hours at a temperature of 600°C . The XRD of deposited samples showed a polycrystalline structure with clear characteristic peak of SnO_2 cassiterite phase. Thermoelectric effect was measured with change of temperature for the prepared samples under a low pressure of 1mbar. Seebeck coefficient for the prepared samples was measured under a low pressure of 1mbar. Seebeck coefficient was improved when films were deposited on porous alumina. Film sensing towered H_2S and H_2 gases and ($\text{H}_2\text{S}-\text{H}_2$) mixture was measured as function of gas concentration and temperature. It is noted that film sensing increased with increasing gas concentration and temperature. Selectivity factor was calculated to H_2S and H_2 gases.

Keywords: Tin oxide; Seebeck effect; Nanostructure.

Authors Index

Al-Khateeb H. M.	129
Alqadi M. K.	129
Alzoubi F. Y.	129
Anak B.	105
Ayoub N. Y.	129
Batal M. A.	135
Belhocine Y.	105
Bencharif M.	105
Benlecheb T.	105
Djebli Y.	105
Hameed A. M.	119
Jamil N. Y.	149
Jneed F. H.	135
Khader M. N.	149
Nashed Gh.	135
Owaidat M.Q.	113
Saadeh S. M.	129

Subject Index

Bending	119
Capacitance	113
Compression	119
Elasticity	129
Energy correction	105
Forced oscillator	129
Fractional differentiation	129
Hartree–Fock	105
Impact strength	119
Laplace transform	129
Lattice Green's Function	113
LCAO	105
Nanostructure	135
Natural rubber	119
Order of differentiation	129
Perturbation	105
Polymer blend	119
Seebeck effect	135
Substitutional	113
Tin oxide	135
Unsaturated polyester	119

طرائق البحث (التجريبية / النظرية): يجب أن تكون هذه الطرائق موضحة بتفصيل كاف لإتاحة إعادة إجرائها بكفاءة، ولكن باختصار مناسب، حتى لا تكون تكرارا للطرائق المنشورة سابقا.

النتائج: يستحسن عرض النتائج على صورة جداول وأشكال حيثما أمكن، مع شرح قليل في النص ومن دون مناقشة تفصيلية.

المناقشة: يجب أن تكون موجزة وتركز على تفسير النتائج.

الاستنتاج: يجب أن يكون وصفا موجزا لأهم ما توصلت إليه الدراسة ولا يزيد عن صفحة مطبوعة واحدة.

الشكر والعرفان: الشكر والإشارة إلى مصدر المنح والدعم المالي يكتبان في فقرة واحدة تسبق المراجع مباشرة.

المراجع: يجب طباعة المراجع بأسطر مزدوجة ومرقمة حسب تسلسلها في النص. وتكتب المراجع في النص بين قوسين مربعين. ويتم اعتماد اختصارات الدوريات حسب نظام Wordlist of Scientific Reviewers.

الجدول: تعطى الجداول أرقاما متسلسلة يشار إليها في النص. ويجب طباعة كل جدول على صفحة منفصلة مع عنوان فوق الجدول. أما الحواشي التفسيرية، التي يشار إليها بحرف فوقي، فتكتب أسفل الجدول.

الرسوم التوضيحية: يتم ترقيم الأشكال والرسومات والرسومات البيانية (المخططات) والصور، بصورة متسلسلة كما وردت في النص.

تقبل الرسوم التوضيحية المستخرجة من الحاسوب والصور الرقمية ذات النوعية الجيدة بالأبيض والأسود، على أن تكون أصيلة وليست نسخة عنها، وكل منها على ورقة منفصلة ومعرفة برقمها بالمقابل. ويجب تزويد المجلة بالرسومات بحجمها الأصلي بحيث لا تحتاج إلى معالجة لاحقة، وألا تقل الحروف عن الحجم 8 من نوع Times New Roman، وألا تقل سماكة الخطوط عن 0.5 وبكثافة متجانسة. ويجب إزالة جميع الألوان من الرسومات ما عدا تلك التي ستنتشر ملونة. وفي حالة إرسال الرسومات بصورة رقمية، يجب أن تتوافق مع متطلبات الحد الأدنى من التمايز (1200 dpi Resolution) لرسومات الأبيض والأسود الخطية، و 600 dpi للرسومات باللون الرمادي، و 300 dpi للرسومات الملونة. ويجب تخزين جميع ملفات الرسومات على شكل (jpg)، وأن ترسل الرسوم التوضيحية بالحجم الفعلي الذي سيظهر في المجلة. وسواء أرسل المخطوط بالبريد أو عن طريق الشبكة (Online)، يجب إرسال نسخة ورقية أصيلة ذات نوعية جيدة للرسومات التوضيحية.

مواد إضافية: تشجع المجلة الباحثين على إرفاق جميع المواد الإضافية التي يمكن أن تسهل عملية التحكيم. وتشمل المواد الإضافية أي اشتقاقات رياضية مفصلة لا تظهر في المخطوط.

المخطوط المنقح (المعدل) والأقراص المدمجة: بعد قبول البحث للنشر وإجراء جميع التعديلات المطلوبة، فعلى الباحثين تقديم نسخة أصلية ونسخة أخرى مطابقة للأصلية مطبوعة بأسطر مزدوجة، وكذلك تقديم نسخة إلكترونية تحتوي على المخطوط كاملا مكتوبا على Microsoft Word for Windows 2000 أو ما هو استجد منه. ويجب إرفاق الأشكال الأصلية مع المخطوط النهائي المعدل حتى لو تم تقديم الأشكال إلكترونيا. وتخزن جميع ملفات الرسومات على شكل (jpg)، وتقدم جميع الرسومات التوضيحية بالحجم الحقيقي الذي ستظهر به في المجلة. ويجب إرفاق قائمة ببرامج الحاسوب التي استعملت في كتابة النص، وأسماء الملفات على قرص مدمج، حيث يعلم القرص بالاسم الأخير للباحث، وبالرقم المرجعي للمخطوط للمراسلة، وعنوان المقالة، والتاريخ. ويحفظ في مغلف واقٍ.

الفهرسة: تقوم المجلة الأردنية للفيزياء بالإجراءات اللازمة لفهرستها وتلخيصها في جميع الخدمات الدولية المعنية.

حقوق الطبع

يُشكّل تقديم مخطوط البحث للمجلة اعترافاً صريحاً من الباحثين بأن مخطوط البحث لم يُنشر ولم يُقدّم للنشر لدى أي جهة أخرى كانت وبأي صيغة ورقية أو إلكترونية أو غيرها. ويُشترط على الباحثين ملء أنموذج ينصّ على نقل حقوق الطبع لتصبح ملكاً لجامعة اليرموك قبل الموافقة على نشر المخطوط. ويقوم رئيس التحرير بتزويد الباحثين بأنموذج نقل حقوق الطبع مع النسخة المُرسلة للتنقيح. كما ويُمنع إعادة إنتاج أي جزء من الأعمال المنشورة في المجلة من دون إذن خطي مُسبق من رئيس التحرير.

إخلاء المسؤولية

إن ما ورد في هذه المجلة يعبر عن آراء المؤلفين، ولا يعكس بالضرورة آراء هيئة التحرير أو الجامعة أو سياسة اللجنة العليا للبحث العلمي أو وزارة التعليم العالي والبحث العلمي. ولا يتحمل ناشر المجلة أي تبعات مادية أو معنوية أو مسؤوليات عن استعمال المعلومات المنشورة في المجلة أو سوء استعمالها.

معلومات عامة

المجلة الأردنية للفيزياء هي مجلة بحوث علمية عالمية متخصصة مُحكمة تصدر بدعم من صندوق دعم البحث العلمي، وزارة التعليم العالي والبحث العلمي، عمان، الأردن. وتقوم بنشر المجلة عمادة البحث العلمي والدراسات العليا في جامعة اليرموك، إربد، الأردن. وتُنشر البحوث العلمية الأصلية، إضافة إلى المراسلات القصيرة Short Communications، والملاحظات الفنية Technical Notes، والمقالات الخاصة Feature Articles، ومقالات المراجعة Review Articles، في مجالات الفيزياء النظرية والتجريبية، باللغتين العربية والإنجليزية.

تقديم مخطوط البحث

تُرسل نسخة أصلية وثلاث نسخ من المخطوط، مُرفقة برسالة تغطية من جانب الباحث المسؤول عن المراسلات، إلى رئيس التحرير:

أ.د. ابراهيم أبو الجرايش،

رئيس التحرير، المجلة الأردنية للفيزياء،

عمادة البحث العلمي والدراسات العليا،

جامعة اليرموك، إربد، الأردن.

هاتف : 00 962 2 72 11 111 / فرعي: 2075

فاكس : 00 962 2 72 11 121

بريد إلكتروني : jjp@yu.edu.jo

تقديم المخطوطات إلكترونياً: اتبع التعليمات في موقع المجلة على الشبكة العنكبوتية.

ويجري تحكيم البحوث الأصلية والمراسلات القصيرة والملاحظات الفنية من جانب مُحكمين اثنين في الأقل من ذوي الاختصاص والخبرة. وتشجّع المجلة الباحثين على اقتراح أسماء المحكمين. أما نشر المقالات الخاصة في المجالات الفيزيائية النشطة، فيتم بدعوة من هيئة التحرير، ويُشار إليها كذلك عند النشر. ويُطلب من كاتب المقال الخاص تقديم تقرير واضح يتسم بالدقة والإيجاز عن مجال البحث تمهيداً للمقال. وتُنشر المجلة أيضاً مقالات المراجعة في الحقول الفيزيائية النشطة سريعة التغير، وتشجّع كاتبي مقالات المراجعة أو مُستكثبيها على إرسال مقترح من صفحتين إلى رئيس التحرير. ويُرفق مع البحث المكتوب باللغة العربية ملخص (Abstract) وكلمات دالة (Keywords) باللغة الإنجليزية.

ترتيب مخطوط البحث

يجب أن تتم طباعة مخطوط البحث ببنط 12 نوعه Times New Roman، وبسطر مزدوج، على وجه واحد من ورق A4 (21.6 × 27.9 سم) مع حواشي 3.71 سم، باستخدام معالج كلمات ميكروسوفت وورد 2000 أو ما استُجد منه. ويجري تنظيم أجزاء المخطوط وفق الترتيب التالي: صفحة العنوان، الملخص، رموز التصنيف (PACS)، المقدمة، طرق البحث، النتائج، المناقشة، الخلاصة، الشكر والاعتراف، المراجع، الجداول، قائمة بدليل الأشكال والصور والإيضاحات، ثمّ الأشكال والصور والإيضاحات. وتُكتب العناوين الرئيسية بخط غامق، بينما تُكتب العناوين الفرعية بخط مائل.

صفحة العنوان: وتشمل عنوان المقالة، أسماء الباحثين الكاملة وعناوين العمل كاملة. ويكتب الباحث المسؤول عن المراسلات اسمه مشاراً إليه بنجمة، والبريد الإلكتروني الخاص به. ويجب أن يكون عنوان المقالة موجزاً وواضحاً ومعبراً عن فحوى (محتوى) المخطوط، وذلك لأهمية هذا العنوان لأغراض استرجاع المعلومات.

الملخص: المطلوب كتابة فقرة واحدة لا تزيد على مائتي كلمة، موضحة هدف البحث، والمنهج المتبع فيه والنتائج وأهم ما توصل إليه الباحثون.

الكلمات الدالة: يجب أن يلي الملخص قائمة من 4-6 كلمات دالة تعبر عن المحتوى الدقيق للمخطوط لأغراض الفهرسة.

PACS: يجب إرفاق الرموز التصنيفية، وهي متوفرة في الموقع <http://www.aip.org/pacs/pacs06/pacs06-toc.html>.

المقدمة: يجب أن توضّح الهدف من الدراسة وعلاقتها بالأعمال السابقة في المجال، لا أن تكون مراجعة مكثفة لما نُشر (لا تزيد المقدمة عن صفحة ونصف الصفحة مطبوعة).

Jordan Journal of PHYSICS

An International Peer-Reviewed Research Journal issued by the
Support of the Scientific Research Support Fund

Published by the Deanship of Research & Graduate Studies, Yarmouk University, Irbid, Jordan

Name: الأسم:
Specialty: التخصص:
Address: العنوان:
P.O. Box: صندوق البريد:
City & Postal Code: المدينة/الرمز البريدي:
Country: الدولة:
Phone: رقم الهاتف:
Fax No: رقم الفاكس:
E-mail: البريد الإلكتروني:
No. of Subscription: عدد الاشتراكات:
Method of Payment: طريقة الدفع:
Amount Enclosed: المبلغ المرفق:
Signature: التوقيع:

Cheques should be paid to Deanship of Research and Graduate Studies - Yarmouk University.

I would like to subscribe to the Journal
For

- ☐ One Year
☐ Two Years
☐ Three Years

One Year Subscription Rates

	Inside Jordan	Outside Jordan
Individuals	JD 8	€ 40
Students	JD 4	€ 20
Institutions	JD 12	€ 60

Correspondence

Subscriptions and Sales:

Prof. Ibrahim O. Abu-AlJarayesh
Deanship of Research and Graduate Studies
Yarmouk University
Irbid – Jordan
Telephone: 00 962 2 711111 Ext. 2075
Fax No.: 00 962 2 7211121



جامعة اليرموك



المملكة الأردنية الهاشمية

المجلة الأردنية للفيزياء

مجلة بحوث علمية عالمية متخصصة محكمة
تصدر بدعم من صندوق دعم البحث العلمي

المجلة الأردنية
للفيزياء
مجلة بحوث علمية عالمية محكمة

المجلد (5)، العدد (3)، 2012م / 1434هـ

المجلة الأردنية للفيزياء: مجلة علمية عالمية متخصصة محكمة تصدر بدعم من صندوق دعم البحث العلمي، وزارة التعليم العالي والبحث العلمي، الأردن، وتصدر عن عمادة البحث العلمي والدراسات العليا، جامعة اليرموك، إربد، الأردن.

رئيس التحرير:

ابراهيم عثمان أبو الجرايش

قسم الفيزياء، جامعة اليرموك، إربد، الأردن.
ijaraysh@yu.edu.jo

هيئة التحرير:

ضياء الدين محمود عرفة

قسم الفيزياء، الجامعة الأردنية، عمان، الأردن.
darafah@ju.edu.jo

نبيل يوسف أيوب

قسم الفيزياء، جامعة اليرموك، إربد، الأردن.
nayoub@yu.edu.jo

هشام بشارة غصيب

جامعة الأميرة سمية للتكنولوجيا، عمان، الأردن.
ghassib@psut.edu.jo

جميل محمود خليفة

قسم الفيزياء، الجامعة الأردنية، عمان، الأردن.
jkaliifa@ju.edu.jo

سامي حسين محمود

قسم الفيزياء، الجامعة الأردنية، عمان، الأردن.
s.mahmood@ju.edu.jo

مروان سليمان موسى

قسم الفيزياء، جامعة مؤتة، الكرك، الأردن.
mmousa@mutah.edu.jo

نهاد عبد الرؤوف يوسف

قسم الفيزياء، جامعة اليرموك، إربد، الأردن.
nihadysuf@yu.edu.jo

خلف عبد العزيز المساعيد

قسم الفيزياء التطبيقية، جامعة العلوم والتكنولوجيا الأردنية، إربد، الأردن.
khalaf@just.edu.jo

سكرتير التحرير: مجدي الشناق

ترسل البحوث إلى العنوان التالي:

الأستاذ الدكتور إبراهيم عثمان أبو الجرايش
رئيس تحرير المجلة الأردنية للفيزياء
عمادة البحث العلمي والدراسات العليا، جامعة اليرموك
إربد، الأردن

هاتف 00 962 2 7211111 فرعي 2075

E-mail: *jpp@yu.edu.jo*

Website: <http://Journals.yu.edu.jo/jpp>

