

الخلاصة

باعتباره سخانا، يتم اقتراح بنية النقطة الكمية المزدوجة – الجسيم النانوي المعدني (DQD–MNP) نظرياً. تم تنفيذ العمل باستخدام برنامج MATLAB الخاص بمختبرنا MAOUD-37، والذي يُعرف بتمثيله الدقيق لخصائص المواد. يميّز هذا العمل توصيف خصائص المواد عن الأعمال الأخرى، حيث يتم حساب مستويات طاقة النقطة الكمومية (QD) وطبقة الترطيب (WL) وكذلك عزوم الانتقال بين WL–QD و QD باستخدام تقريب الموجة المستوية المتعامدة (orthogonalized plane-wave approximation). تمت دراسة هياكل مختلفة هي: $GaAs$ ، ZnO ، HfO_2 و SiO_2 ، حيث يُنمى نظام DQD–MNP عليها.

أولاً، تتم دراسة فرق درجة الحرارة (ΔT) لعدة من الهياكل التي استخدمت لإنماء نظام DQD–MNP، ويتم ترتيب ΔT وفقاً لزيادة ثابت العزل الكهربائي لمادة المصفوفة. تعطي مصفوفة $GaAs$ أعلى قيمة لـ ΔT بسبب تشابهها مع مادة QD. يتم الحصول على ΔT عالية عند نصف قطر كبير للجسيم النانوي المعدني وكذلك عند مسافة فصل قصيرة بين DQD و MNP (اقتران قوي). إن ΔT هنا أكبر بأكثر من مرتبتين عشرين مقارنة ببنية MNP وحدها عند نفس القدرة الداخلة، مما يُظهر تفوق بنية DQD–MNP على بنية MNP وحدها. هنا، باستخدام زمن نبضة قدره 100ns عند $5 \times 10^2 \text{ W/cm}^2$ ، فإن فرق درجة الحرارة ΔT المتحصل عليه أعلى بسبع مرات من ذلك الناتج من بنية MNP باستخدام نبضة بـ 1000 ns عند 10^4 W/cm^2 . ويمكن توقع أن ΔT أعلى بثلاث مراتب عشرية يمكن الحصول عليه من بنية DQD–MNP. إن الحصول على درجات حرارة أعلى باستخدام نبضة منخفضة القدرة وخلال زمن تعريض قصير له أهمية كبيرة في التطبيقات الطبية الحيوية. إن قدرة النبضة أكثر كفاءة من زمن النبضة في زيادة ΔT .

في الجزء الثاني من العمل، تمت المحاكاة باستخدام تركيب DQD–MNP كمصدر حراري في نظام الماء–الجليد. تم اشتقاق علاقات تحليلية لدرجة الحرارة المتولدة لنموذج هذا التركيب. تُظهر النتائج أن درجة حرارة عالية يتم الحصول عليها من نظام DQD–MNP تحت تأثير الضوء المسلط. وتزداد هذه الدرجة مع زيادة نصف قطر MNP. إن الاقتران القوي بين DQD و MNP يعطي درجة حرارة عالية. ويتم الحصول

على أعلى درجة حرارة من مصفوفة ذات ثابت عزل عالٍ وتُظهر تشابهاً مع بنية DQD. في هذه الحالة يُفضّل ZnO. يقترح هذا العمل استخدام طاقة نبضة ليزر منخفضة (10^{-4} J/cm^2) للجراحة النانوية، وهي أقل من أصغر قدرة مستخدمة في أبحاث أخرى بثلاث مراتب عشرية. تُعد هذه النتيجة ذات أهمية سريرية. يزداد عرض غلاف الماء المحيط بنظام DQD-MNP مع زيادة نصف قطر MNP.

في الجزء الأخير من العمل، يتم اشتقاق نموذج لدرجة حرارة DQD (T_{DQD}) باستخدام نظرية مصفوفة الكثافة، مقترناً بدرجة حرارة الحوامل، حيث تؤخذ درجة حرارة الشبكة ودرجة حرارة الحاملات في الحالة الأرضية وكذلك تأثير الفونون بنظر الاعتبار. هذا النوع من النمذجة تم إنجازه لأول مرة. عند القدرة البصرية المنخفضة والاقتران القوي، تزداد درجة حرارة DQD مع زيادة نصف قطر MNP. وتحت قدرة بصرية مسلطة عالية، تزداد درجة الحرارة بأكثر من ١٠ مراتب، مع زيادة بمقدار مرتبتين في القدرة البصرية المسلطة. إن مثل هذه الدرجة العالية من الحرارة تفتح مجالاً لتطبيقات طموحة. في حالة الاقتران الضعيف، تتضاعف درجة حرارة DQD مقارنة بحالة الاقتران القوي. تمت دراسة درجة حرارة DQD في نظام DQD-MNP المزروع على هياكل مختلفة. تكون T_{DQD} أعلى في مصفوفة ذات ثابت عزل أعلى، باستثناء أنه في هذا الترتيب، عندما ينمى التركيب على مصفوفة من مادة لها نفس التركيب DQD تكون (T_{DQD}) أعلى. إن ثابت زمن الفونون المتوسط عند الاقتران الضعيف يعطي T_{DQD} أعلى من ذلك عند الاقتران القوي.