



Original Article

Mass Attenuation Coefficient and Optical Phonon Modes of Cysteine-Functionalized Graphene Oxide Nanoclusters

Zahra Deghani^{1*} , Maryam Asaee¹ , Alireza Vajdani Noghreiyani¹ , Hakimeh Zare² ,
Ahad Amiri² 

¹Department of Physics, University of Neyshabur, Neyshabur, Iran

² Department of Physics, Yazd University, Yazd,

Received: 2025-03-25

Revised: 2025-10-19

Accepted: 2025-11-26

Abstract: In this study, graphene oxide nanoclusters with a cysteine-capping agent, having a particle size of approximately 1 nm, were synthesized and analyzed. Gamma-ray spectroscopy revealed that these nanoclusters exhibit high mass attenuation coefficients across different gamma-ray energy ranges, indicating their potential for shielding applications against high-energy radiation. Fourier Transform Infrared (FTIR) spectroscopy confirmed that the presence of cysteine modifies the chemical properties of the nanoclusters, including alterations in existing bonds and an increased incorporation of nitrogen and sulfur within the graphene structure. These modifications can significantly influence the electronic and optical properties of the material. Furthermore, using the Kramers-Kronig method, the optical parameters, including refractive index, extinction coefficient, and dielectric function of these nanoclusters, were determined. A detailed analysis of these coefficients enabled the extraction of transverse optical (TO) and longitudinal optical (LO) phonon modes, which were found at 1670 cm^{-1} and 1730 cm^{-1} , respectively. These findings confirm the influence of the cysteine ligand on the electronic and optical structure of graphene oxide nanoclusters.

Keywords: Nanocluster, Graphene oxide, Cysteine, Mass attenuation coefficients, Kramers-Kronig method, Optical phonon modes.

*Corresponding Author. Email: zahra.deghani1982@gmail.com

How to Cite This Article:

Deghani, Z, Asaee, M, Vajdani Noghreiyani, A, Zare, H, Amiri, A. Mass Attenuation Coefficient and Optical Phonon Modes of Cysteine-Functionalized Graphene Oxide Nanoclusters. *Nanomeghyas*. 2025; 12(2): 229-239. DOI: [10.22034/ns.2025.2056610.1384](https://doi.org/10.22034/ns.2025.2056610.1384)





ضریب تضعیف جرمی و مدهای فونونی نوری نانوخوشه‌های اکسید گرافن عامل دار شده با سیستمین

زهرا دهقانی^{۱*}، مریم آسایی^۱، علیرضا وجدانی نقره ئیان^۱، حکیمه زارع^۲، احد امیری^۲

^۱گروه فیزیک، دانشگاه نیشابور، نیشابور، ایران
^۲دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد، ایران

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۰۹/۰۵

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۴/۰۷/۲۷

تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۰۱/۰۵

چکیده: در این پژوهش، نانوخوشه‌های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستمین با اندازه ذرات در حدود ۱ نانومتر سنتز و بررسی شدند. طیف‌نگاری گاما نشان داد که این نانوخوشه‌ها دارای ضرایب تضعیف جرمی بالایی در محدوده انرژی‌های مختلف پرتوهای گاما هستند که نشان‌دهنده پتانسیل آن‌ها در کاربردهای حفاظتی اشعه‌های پرانرژی است. بررسی طیف‌سنجی مادون قرمز تبدیل فوریه (FTIR) تأیید کرد که حضور سیستمین منجر به اصلاح خواص شیمیایی نانوخوشه‌ها، از جمله تغییر در پیوندهای موجود و افزایش ترکیب نیتروژن و گوگرد در ساختار گرافنی می‌شود. چنین اصلاحاتی می‌تواند بر روی خواص الکترونیکی و اپتیکی ماده تأثیر بسزایی داشته باشند. علاوه بر این، با استفاده از روش کرامرز-کرونینگ، ضرایب اپتیکی شامل ضریب شکست، ضریب خاموشی و ضریب دی‌الکتریک این نانوخوشه‌ها تعیین شدند. تحلیل دقیق این ضرایب، امکان استخراج مدهای فونونی نوری عرضی (TO) و طولی (LO) را فراهم کرد که به ترتیب در 1670 cm^{-1} و 1730 cm^{-1} قرار دارند. این نتایج، تأییدکننده تأثیر حضور لیگاند سیستمین بر ساختار الکترونی و اپتیکی نانوخوشه‌های اکسید گرافن است.

واژگان کلیدی: نانو خوشه، اکسید گرافن، سیستمین، ضریب تضعیف جرمی، روش کرامرز-کرونینگ، مدهای فونونی نوری.

* نویسنده مسئول. ایمیل: zahra.dehghani1982@gmail.com

نحوه استناد به این مقاله:

دهقانی، زهرا، آسایی، مریم، وجدانی نقره ئیان، علیرضا، زارع، حکیمه، امیری، احد. ضریب تضعیف جرمی و مدهای فونونی نوری نانوخوشه‌های اکسید گرافن عامل دار شده با سیستمین. *نانو مقیاس*، ۲۰۲۵، ۱۲(۲)، ۲۳۹-۲۲۹.

DOI: [10.22034/ns.2025.2056610.1384](https://doi.org/10.22034/ns.2025.2056610.1384)



۱- مقدمه

که به‌عنوان تفکیک LO-TO شناخته می‌شود، شاخصی از پایداری شبکه و شدت برهم‌کنش‌های الکترونی در ماده است؛ به‌طوری‌که افزایش این اختلاف معمولاً با پایداری ساختاری و کارایی حفاظتی بیشتر همراه است [۱۲-۱۴].

تحقیقات اخیر نیز نشان داده‌اند که پدیده‌ی تفکیک مدهای فونونی طولی و عرضی نقش مهمی در خواص دی‌الکتریک و اپتیکی مواد دارد. در مواد قطبی سه‌بعدی، این تفکیک ناشی از برهم‌کنش بلندبرد الکترون-فونون است و با اعمال اصلاحات غیرتحلیلی در طیف فونونی، دقت محاسبات و همچنین پیش‌بینی رسانایی گرمایی بهبود می‌یابد [۱۵]. در مقابل، در مواد دوبعدی قطبی مانند گرافن و مشتقات آن، این تفکیک در نقطه گاما ناپدید می‌شود اما مد LO همچنان دارای شیب غیرصفر است که به ویژگی‌های دی‌الکتریک محیط بستگی دارد [۱۶]. همچنین مشاهدات تجربی جدید در تک‌لایه‌های قطبی نظیر h-BN نشان داده‌اند که مدهای LO و TO در نقطه گاما هم‌فرکانس هستند اما با افزایش عدد موج از هم جدا می‌شوند، پدیده‌ای که به‌عنوان تفکیک شیبی شناخته می‌شود [۱۷].

با توجه به این زمینه، پژوهش حاضر برای نخستین بار سنتز نانوخوشه‌های اکسید گرافن عامل‌دار با سیستمین را با اندازه‌گیری هم‌زمان ضرایب تضعیف جرمی و ضرایب اپتیکی (ϵ , k , n) ترکیب کرده است. تحلیل داده‌ها با استفاده از روش کرامرز-کرونینگ امکان استخراج مدهای فونونی TO و طولی LO را فراهم کرد و نشان داد که رفتار فونونی ماده می‌تواند به‌طور مستقیم با ویژگی‌های حفاظتی آن در برابر پرتوهای پرانرژی مرتبط باشد. این رویکرد ترکیبی، دیدگاه جدیدی درباره‌ی ارتباط بین ساختار فونونی، ویژگی‌های دی‌الکتریک و عملکرد حفاظتی مواد گرافنی عامل‌دار ارائه می‌دهد و نقطه‌ی تمایز این تحقیق از پژوهش‌های پیشین است.

اکسید گرافن (GO) را می‌توان به‌عنوان ماده‌ی پیش‌ساز اصلی در سنتز گرافن در نظر گرفت. این ماده در واقع تک‌لایه‌ای از اکسید گرافیت است که از طریق فرآیندهای شیمیایی توزیع و لایه‌برداری در محیط‌های آبی یا حلال‌های آلی به‌دست می‌آید [۱،۲]. همچنین، گرافن را می‌توان به‌صورت مستقیم از طریق فرآیند کاهش شیمیایی یا حرارتی اکسید گرافن تولید کرد [۳]. یکی از مشتقات مهم این ماده، اکسید گرافن عامل‌دار با سیستمین است که از ترکیب لایه‌های گرافنی (کربن با ساختار دوبعدی لایه‌ای) و سیستمین، به‌عنوان یک اسیدآمین‌ی حاوی گوگرد، حاصل می‌شود [۴].

حضور گروه‌های عاملی نیتروژن و گوگرد در این ترکیب، همراه با اثر pH محیط، خواص شیمیایی و فیزیکی ویژه‌ای به آن می‌بخشد [۵ و ۶]. اکسید گرافن سیستمین به‌دلیل ویژگی‌هایی نظیر رسانایی الکتریکی بالا، وزن سبک، استحکام مکانیکی چشمگیر و پایداری شیمیایی، در رده‌ی مواد چندکاره‌ی نانو‌ساختاری قرار می‌گیرد که در حوزه‌های مختلف فناوری کاربرد دارد [۷]. از جمله کاربردهای بالقوه‌ی آن می‌توان به افزایش کارایی ادوات الکترونیکی، ساخت حسگرهای زیستی و پزشکی، مواد روانکار، باتری‌های نسل جدید، کاتالیست‌ها و همچنین حفاظت تابشی برای چشمه‌های گاما و کاربردهای زیست‌محیطی اشاره کرد [۸-۱۱].

یکی از مکانیسم‌های فیزیکی مؤثر در رفتار جذب و انتقال انرژی در مواد، برهم‌کنش میان پرتوهای الکترومغناطیسی و ارتعاشات شبکه‌ای (فونون‌ها) است. به‌ویژه، مدهای فونونی نوری طولی (LO) و عرضی (TO) از طریق پراکندگی الکترون-فونون و تغییر تابع دی‌الکتریک فرکانسی می‌توانند نقش مهمی در جذب و تضعیف تابش‌های پرانرژی مانند پرتوهای گاما ایفا کنند. اختلاف بین این دو مد،

26.3 keV, 26.3 keV, 59.6 keV, 1173 keV و keV 1333 کالیبره شده است. فاصله‌ی چشمه و آشکارساز به گونه‌ای تنظیم گردید که زمان مرده آشکارساز در بازه قابل قبول کمتر از ۲ درصد در همه طیف نگاری‌ها باقی بماند.

ضریب تضعیف جرمی و خطی نمونه‌ها با استفاده از معادله‌ی زیر مشخص می‌شود:

$$I = I_0 e^{-\mu x} \quad (1)$$

در این رابطه، شمارش پرتوهای گاما در واحد زمان و بدون حضور جاذب است. I تعداد پرتوهای شمارش شده در واحد زمان با وجود یک جاذب با ضخامت X بین چشمه پرتوزا و سیستم طیف سنجی است. و μ ضریب تضعیف خطی می‌باشد. ضریب تضعیف جرمی به صورت زیر بر حسب ضریب تضعیف خطی تعریف می‌شود:

$$\mu_m = \mu / \rho \quad (2)$$

باید توجه نمود که در این تحقیق چگالی همه‌ی قرص‌ها به دلیل ضخامت و جرم متفاوت آن‌ها اندکی با هم تفاوت داشت، بنابراین در محاسبه‌ی ضریب تضعیف خطی و جرمی از چگالی معادل استفاده شده است.

۲- فعالیت آزمایشگاهی و تئوری محاسبات

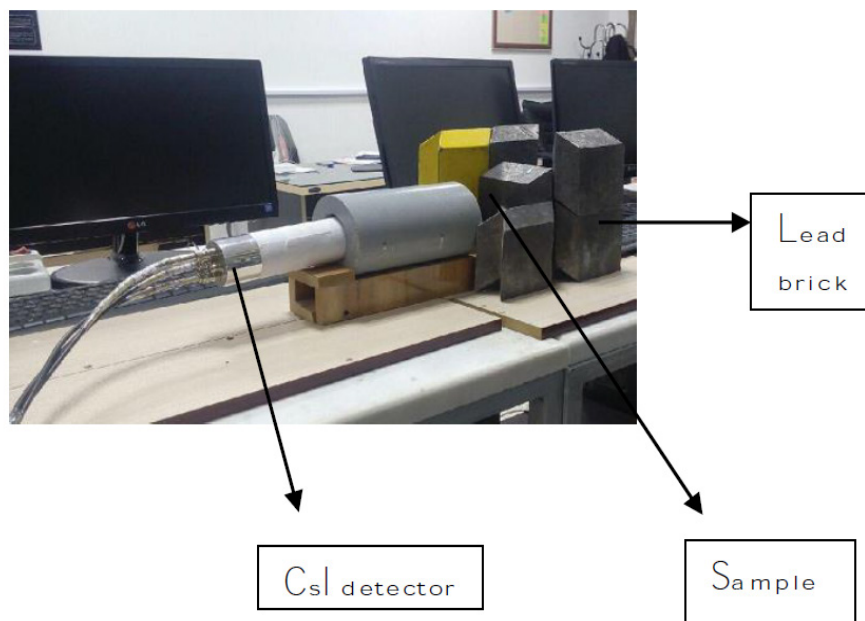
۲-۱- روش ساخت خوشه‌های اکسید گرافن

با استفاده از روش پیرولیز، اسید سیتریک، سیستمین و سدیم هیدروکسید در دمای ۱۸۰ درجه خوشه‌های اکسید گرافن ساخته شد [۶].

۲-۲- طرح آزمایش و روش شناسی اندازه‌گیری ضریب تضعیف جرمی

این روش مبتنی بر سنجش کاهش شدت پرتوهای گاما پس از عبور از نمونه و ارتباط آن با ضخامت و چگالی ماده است. سیستم طیف نگاری مورد استفاده شامل یک آشکارساز سوسوزن "۲×۲" CsI(Tl)، موازی ساز پرتوهای گاما برای چشمه و حفاظ‌های سربی استوانه‌ای شکل اطراف آشکارساز می‌باشد. شکل ۱ سامانه آزمایشگاهی مورد استفاده را نشان می‌دهد.

سیستم طیف‌سنجی گاما با استفاده از چشمه‌های پرتوزا ^{241}Am ، ^{137}Cs و ^{60}Co و گاما‌های با انرژی



شکل ۱. سامانه آزمایشگاهی مورد استفاده برای اندازه‌گیری ضریب تضعیف جرمی

۲-۳- روش کرامرز کرونینگ

می گردد:

$$\bar{\varepsilon}(\omega) = [\tilde{N}(\omega)]^2 = [n(\omega) + ik(\omega)]^2 \quad (6)$$

که قسمت حقیقی ضریب دی الکتریک $\varepsilon(\omega)$ و قسمت موهومی ضریب دی الکتریک ω () به صورت زیر به دست می آیند:

$$\begin{cases} \varepsilon_1(\omega) = n^2(\omega) - k^2(\omega) \\ \varepsilon_2(\omega) = 2n(\omega)k(\omega) \end{cases} \quad (7)$$

۳- نتایج و بحث

برای اندازه گیری ضریب تضعیف جرمی، طیف سنجی آزمایش ها برای نمونه های مورد مطالعه با ضخامت های مختلف و منبع انرژی های ^{241}Am ، ^{137}Cs و ^{60}Co انجام شد. به منظور بررسی اثر اشعه ی گاما بر روی ضریب تضعیف جرمی، ضخامت های مختلف از نمونه آماده شد. مشخصات نمونه های آماده شده در جدول 1 آورده شده است. پس از آن، برای هر نمونه با ضخامت خاص دو آزمایش طیف سنجی انجام شده است. در ابتدا، بدون نمونه تعداد شمارش های پرتوهای گاما (I_0) برای ۱۵۰۰ ثانیه اندازه گیری شد. سپس با نگاه داشتن نمونه بین منبع گاما و آشکارساز، شمارش اشعه های گامای منتقل شده از طریق نمونه، بدون هرگونه برهم کنشی (I) برای ۱۵۰۰ ثانیه اندازه گیری شد. پس از آن لگاریتم مقادیر شدت $\ln(I_0/I)$ برای همه ی ضخامت های نمونه محاسبه شد. در نهایت، ضرایب تضعیف خطی با رسم نمودارهای $\ln(I_0/I)$ بر حسب ضخامت نمونه محاسبه شده است. جدول تغییرات ضریب تضعیف جرمی نمونه ها با انرژی در جدول 2 نشان داده است.

نتایج ارائه شده در جدول ۲ همچنین نشان می دهند که نانوخوشه های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستئین به عنوان گزینه مناسبی برای حفاظ گذاری گاما می تواند استفاده شود.

برای تعیین یک معیار شفاف از عملکرد حفاظتی نانوخوشه های سنتز شده، ضرایب تضعیف جرمی آنها

تئوری با توجه به اصل لامبرت، جذب (A) توسط معادله زیر محاسبه شد [۱۸]:

$$A(\omega) = \log_{10} \frac{I_0}{I} = \log_{10} \frac{1}{T(\omega)} = \tau - \log(T(\omega)\%) \rightarrow R(\omega) = 100 - [T(\omega) + A(\omega)] \quad (3)$$

که در آن T درصد انتقال، R بازتاب، شدت نور فرودی، I شدت نور عبوری از نمونه، و نسبت I/I_0 تراگسیلی (T) است. با داشتن طیف بازتابی $R(\omega)$ از نمونه ی مورد نظر می توان زاویه فاز $\varphi(\omega)$ را به کمک روابط کرامرز-کرونینگ محاسبه کرد و نهایتاً به کمک آنها پارامترهای نوری را به دست آورد. تحقیقات گذشته به طور وسیع و گسترده درستی روش و دقت نتایج حاصل از آن را بررسی کرده اند. به طور کلی ضریب شکست مختلط از رابطه زیر به دست می آید [۱۹]:

$$\tilde{N}(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$$

$$n(\omega) = \frac{1-R(\omega)}{1+R(\omega)-2\sqrt{R(\omega)}\cos\varphi(\omega)}$$

$$k(\omega) = \frac{-2\sqrt{R(\omega)}\sin\varphi(\omega)}{1+R(\omega)-2\sqrt{R(\omega)}\cos\varphi(\omega)}$$

$$\varphi(\omega) = -\frac{\omega}{\pi} \int_0^\infty \frac{\ln R(\omega') - \ln R(\omega)}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (4)$$

قسمت حقیقی و قسمت موهومی ضریب شکست مختلط می باشد. از رابطه پراکندگی KK به دست می آید و تغییر فاز بین نور فرودی و سیگنال های بازتابی برای یک عدد موج خاص است [۲۰]. روش های متعددی برای محاسبه $\varphi(\omega)$ گزارش شده است. با استفاده از روش Maclaurin، با توجه به معادله زیر به صورت دقیق محاسبه می شود:

$$\varphi(\omega_j) = \frac{4\omega_j}{\pi} \times \Delta\omega \times \sum_i \frac{\ln(\sqrt{R(\omega)})}{\omega_i^2 - \omega_j^2} \quad (5)$$

که در آن، اگر j فرد باشد، $i=2,4,\dots,j-1,j+1,\dots$ و اگر زوج باشد، $i=1,3,\dots,j-1,j+1,\dots$ ضریب دی الکتریک مختلط به صورت زیر معرفی

جدول 1. مشخصات قرص‌های ساخته شده برای اندازه‌گیری ضریب تضعیف خطی و جرمی

شماره قرص	جرم (گرم)	قطر (میلی متر)	ضخامت (میلی متر)	چگالی ($\frac{g}{cm^3}$)
۱	3.6279	13.35	3,75	6.911
۲	4.1022	13.35	4,24	6.912
۳	7.1303	13.35	7,36	6.921
۴	7.7301	13.35	8,00	6.903
۵	11.2325	13.35	11,61	6.912

جدول 2. مشخصات قرص های ساخته شده برای اندازه گیری ضریب تضعیف خطی و جرمی

	۱۳۳۳ keV	۱۱۷۳ keV	keV۶۶۲
μ (l/cm)	۰/۲۲۸	۰/۳۵۱	۰/۷۱۴
μ_m (cm ² /gr)	۰/۰۳۳	۰/۰۵۱	۰/۱۰۳

جدول 3. مقایسه ضرایب تضعیف جرمی (cm²/g) نانوخوشه‌های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستین با تنگستن به عنوان حفاظ استاندارد

ماده	662 keV (¹³⁷ Cs)	1173 keV (⁶⁰ Co)	1333 keV (⁶⁰ Co)
نانوخوشه‌های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستین	0.103	0.051	0.033
تنگستن (W)	0.092	0.061	0.055

کلیدی نسبت داد. نخست، سطح مؤثر بالا است؛ ابعاد نانومتری این ساختارها نسبت سطح به حجم را به‌طور چشمگیری افزایش داده و چگالی محل‌های برهم‌کنش با فوتون‌های گاما را تقویت می‌کند. دوم، ساختار پیوندی بهینه است؛ پیوندهای کووالانسی میان سیستین و شبکه اکسید گرافن، توزیع یکنواخت و پایدار اتم‌های جاذب را در سطح ماده ایجاد کرده و در نتیجه سطح مقطع برهم‌کنش را بهینه می‌سازد. این ویژگی‌ها سبب می‌شوند این نانوخوشه‌ها به‌طور مؤثری با فوتون‌های پرانرژی تعامل داشته و بازده تضعیف قابل توجهی ایجاد کنند.

یافته‌های این پژوهش با نتایج مطالعات پیشین نیز هم‌راستا است؛ به‌ویژه پژوهش‌های Filak-Mędon [۲۲] و همکاران Rusli و همکاران [۲۳] که بر قابلیت کامپوزیت‌های گرافنی در دستیابی به ضرایب تضعیف جرمی قابل مقایسه با مواد مرجع تأکید کرده‌اند. این هم‌خوانی، پتانسیل بالای

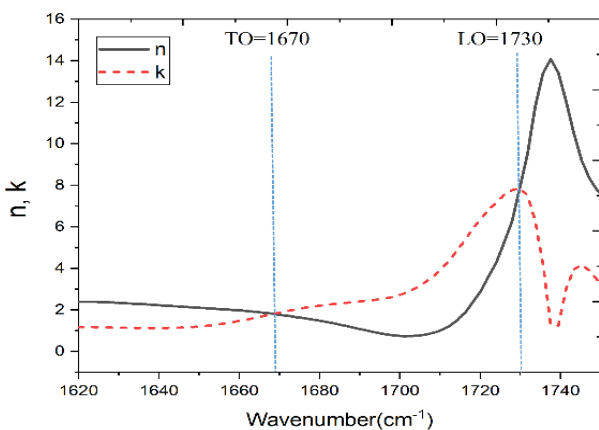
مستقیماً با تنگستن مقایسه شد. تنگستن به دلیل چگالی بالا و ماهیت غیرسمی و کارایی اثبات شده در کاربردهای حفاظت در برابر پرتوهای گاما در بخش‌های پزشکی و صنعتی به عنوان ماده مرجع انتخاب شد. داده‌های مرجع تنگستن از پایگاه داده استاندارد NIST XCOM استخراج شد [۲۱]. تجزیه و تحلیل تطبیقی نشان می‌دهد که نانوخوشه‌های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستین کارایی رقابتی در تضعیف جرمی نشان می‌دهند که این ویژگی به‌ویژه در انرژی ۶۶۲ کیلو الکترون‌ولت قابل توجه است، جایی که عملکرد بهتری نسبت به تنگستن دارند، در حالی که مزایای قابل توجهی در قابلیت انعطاف‌پذیری بالقوه برای کاربردهای حفاظتی تخصصی حفظ می‌کنند. این نتایج در جدول 3 ارائه شده است.

عملکرد رقابتی و مطلوب نانوخوشه‌های اکسید گرافن عامل‌دار با سیستین را می‌توان به دو عامل

و رزونانس فونون نوری طولی (LO) که مربوط به افزایش شدید بازتابی است را کاهش می‌دهد. LO و TO را می‌توان از ردیابی ضریب خاموشی و شکست با دو نقطه تقاطع برای نمودارهای n و k محاسبه کرد [۲۶ و ۲۷]. این نقاط، با عدم‌موج پایین تر و بالاتر، مربوط به TO و LO هستند که به ترتیب در شکل ۳ نشان داده شده است.

با توجه به طیف‌های ضریب شکست n و ضریب خاموشی k نانوخوشه‌های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستین می‌توان طیف‌های مربوط به ضرایب حقیقی و موهومی ضریب دی‌الکتریک این نمونه‌ها را به صورت شکل زیر به دست آورد. دانشمندان و محققین از قسمت حقیقی ضریب دی‌الکتریک به عنوان عامل ذخیره‌کننده انرژی یا عامل ظرفیتی و از قسمت موهومی ضریب دی‌الکتریک به عنوان اتلاف دی‌الکتریک سیستم یاد می‌کنند چرا که اتلاف‌های گرمایی، اثرات قطبش‌پذیری و رسانایی الکتریکی را در خود جای می‌دهد. قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک برای نانوخوشه‌های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستین در شکل ۴ نشان داده شده است.

علاوه بر این، هنگامی که علامت تابع دی‌الکتریک حقیقی از مثبت به منفی تغییر می‌کند، نقطه متوسط این دو ناحیه، مد فرکانس TO است. در وضعیت



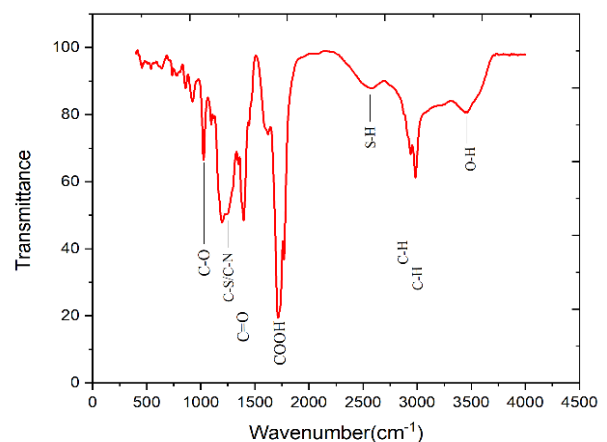
شکل ۳: ضریب شکست (خط جامد) و ضریب خاموشی (خط چین) برای نانوخوشه‌های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستین.

نانوخوشه‌های اکسید گرافن عامل‌دار را برای طراحی نسل جدید حفاظ‌های تابشی سبک‌وزن و کارآمد برجسته می‌سازد.

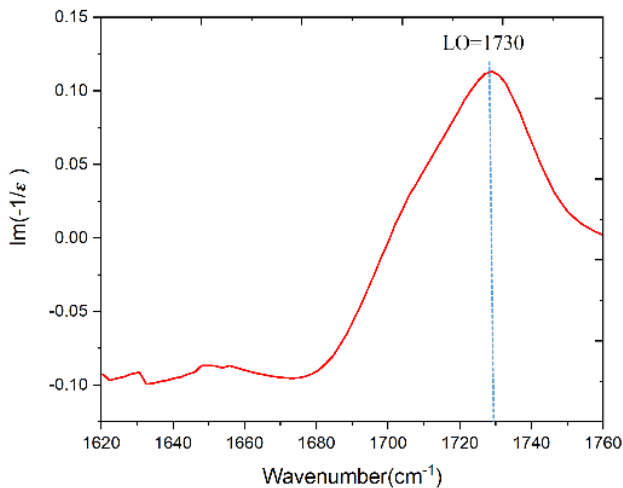
طیف مادون قرمز تبدیل فوریه نانوخوشه‌های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستین در شکل ۲ نشان داده شده است [۲۴ و ۲۵]. یک پیک در cm^{-1} ۳۴۴۸ با پیوند OH مطابقت دارد. قله‌های تقریباً cm^{-1} ۱۰۲۵، cm^{-1} ۱۳۹۶ و cm^{-1} ۱۷۱۴ به ترتیب مربوط به C-O، C=O و COOH هستند. علاوه بر این، گروه‌های CH در cm^{-1} ۲۹۸۳ و cm^{-1} ۲۹۳۸ وجود دارند. شواهد وجود سیستین دو پیک در cm^{-1} ۲۵۷۰ و cm^{-1} ۱۲۴۹ است که به ترتیب با پیوندهای SH و C-S/C-N مطابقت دارند.

ضرایب نوری و پارامترهای دی‌الکتریک نانوخوشه‌های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستین با استفاده از داده‌های طیف تبدیل فوریه مادون قرمز FTIR، روابط کرامرز-کرونینگ و برنامه نویسی به یکی از زبان‌های فرترن یا مطلب به دست آمد. شکل ۳ ضریب شکست، n و ضریب خاموشی، k نانوخوشه‌های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستین را نشان می‌دهد.

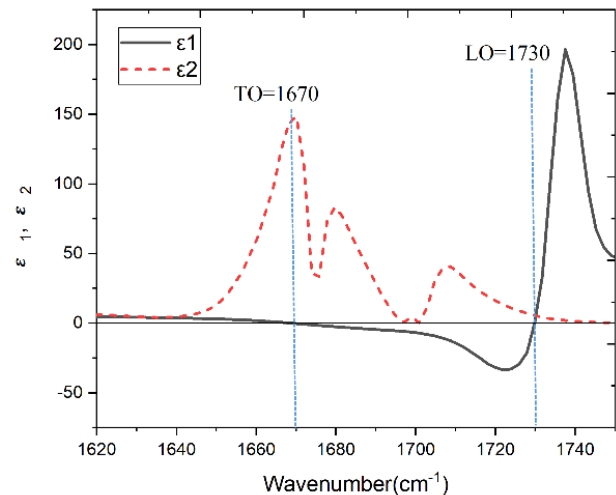
در مطالعه طیف IR، مدهای فونون‌های نوری می‌تواند برهمکنش نوری با شبکه را توضیح دهد. این برهمکنش‌ها منجر به یک مشخصه نوری، یعنی رزونانس فونون نوری عرضی (TO) می‌شود



شکل ۲: طیف مادون قرمز تبدیل فوریه نانوخوشه‌های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستین



شکل ۵: مقدار $Im(-1/\epsilon)$ نانوخوشه \leftarrow های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستمین



شکل ۴: قسمت‌های حقیقی (خط جامد) و موهومی (خط چین) از تابع دی-الکتریک برای نانوخوشه های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستمین

Filak-Mędon و همکاران [۲۲] نشان دادند که نانو کامپوزیت‌های گرافنی می‌توانند ضریب تضعیف جرمی قابل توجهی در برابر پرتوهای گاما و پرتو ایکس ایجاد کنند و نتایج آن‌ها با پیش‌بینی مدل XCOM مطابقت دارد. همچنین، Rusli و همکاران [۲۳] گزارش کردند که افزودن گرافن یا اکسید گرافن به ماتریس‌های پلیمری موجب بهبود چشمگیر عملکرد محافظتی در برابر تابش فوتونی می‌شود. از سوی دیگر، در پژوهش‌های Tam و همکاران [۴] و Milinkovic و همکاران [۲۵]، نانوذرات گرافنی عامل‌دار با سیستمین عمدتاً از منظر خواص زیستی و فتولومینسانس بررسی شده‌اند و جنبه‌های فیزیکی و حفاظتی آن‌ها مورد توجه قرار نگرفته است. همچنین، مطالعات Amiri و همکاران [۲۴] و [۲۸] بیشتر بر ویژگی‌های دی‌الکتریک و غیرخطی ترکیبات گرافنی متمرکز بوده‌اند، بدون آنکه پارامترهای تضعیف جرمی یا برهم‌کنش فوتونی در آن‌ها بررسی شود.

همچنین، یافته‌های نظری جدید نشان می‌دهند که در مواد دوبعدی مانند گرافن، مدهای LO و TO در نقطه گاما هم‌فرکانس‌اند ولی با افزایش عدد موج دچار تفکیک شیبی می‌شوند؛ این پدیده با تغییر ویژگی‌های دی‌الکتریک محیط مرتبط است [۱۵] و [۱۷]. نتایج حاضر با این مشاهدات هم‌راستا است و

مشابه، نقطه میانی از داده‌های منفی به مثبت تابع دی‌الکتریک حقیقی مربوط به مد فرکانس LO است [۲۰]. در بعضی مقالات، مد TO به راحتی از موقعیت بیشینه قسمت موهومی ضریب دی‌الکتریک و LO از موقعیت بیشینه مقدار تابع اتلاف $Im(-1/\epsilon)$ که در شکل ۵ نشان داده شده است. به دست می‌آید. مدهای LO و TO به وسیله سه روش به دست آمد که نتایج، تایید کننده یکدیگرند.

یافته‌ها حاکی از آن است که نانوخوشه‌های اکسید گرافن عامل‌دار با سیستمین، علاوه بر داشتن ضرایب تضعیف جرمی بالا، از نظر مدهای فوتونی نوری نیز رفتار قابل توجهی نشان می‌دهند. مقادیر نوری به دست آمده برای مدهای (LO و TO) به ترتیب ۱۷۳۰ و 1670 cm^{-1} بیانگر وجود تفکیک قابل ملاحظه LO-TO است که می‌تواند به پایداری شبکه و افزایش جذب پرتوهای گاما مرتبط باشد. این رفتار با یافته‌های کلاسیک در مواد اکسیدی و نیمه‌رساناها هم‌خوانی دارد، جایی که اختلاف بزرگ‌تر LO-TO منجر به افزایش ضریب دی‌الکتریک و بهبود ویژگی‌های جذب نوری می‌شود [۱۳] و [۱۴].

مطالعات اخیر نشان می‌دهد که کاربرد مواد گرافنی و نانو کامپوزیت‌های مبتنی بر گرافن در بازدارندگی تابش‌های گاما و پرتو ایکس به طور فزاینده‌ای مورد توجه قرار گرفته است. برای مثال،

می‌تواند بر انتقال انرژی تأثیر بگذارد. از این رو، در پژوهش‌های آینده استفاده از روش‌های دینامیک مولکولی و شبیه‌سازی‌های اولیه اصول برای بررسی اثر نقص‌های شبکه، ناهمگنی‌های موضعی و پدیده‌های پراکندگی الکترون-فونون پیشنهاد می‌شود [۳۰].

به‌طور کلی، توسعه‌ی تحقیقات آتی در جهت استفاده از پوشش‌های متفاوت، انجام آزمون‌ها در بازه‌ی انرژی گسترده‌تر، و به‌کارگیری مدل‌های محاسباتی پیشرفته می‌تواند زمینه‌ساز طراحی مواد گرافنی بهینه برای کاربردهای حفاظتی و اپتوالکترونیکی باشد.

۴- نتیجه‌گیری

از تحلیل داده‌ها به‌دست آمد که نانوخوشه‌های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستین، دارای خواص نوری و فیزیکی منحصر به فردی هستند که می‌توانند آن‌ها را به گزینه‌ای مناسب برای کاربردهای متنوع تبدیل کنند. اندازه‌گیری ضرایب تضعیف جرمی با استفاده از طیف‌نگاری گاما، نشان داد که این نانوخوشه‌ها می‌توانند به عنوان یک ماده حفاظتی مؤثر در برابر اشعه‌های پرانرژی گاما به کار روند. علاوه بر این، با بهره‌گیری از روابط کرامرز-کرونینگ، تحلیل ضرایب اپتیکی نانوخوشه‌ها نشان داد که مدهای فونونی نوری عرضی (TO) و طولی (LO) آن‌ها در 1670 cm^{-1} و 1730 cm^{-1} قرار دارند. این مقادیر بیانگر برهم‌کنش قوی بین ساختار گرافنی و لیگاند سیستین است که تأثیر مستقیم بر روی خواص اپتیکی و الکترونیکی نانوخوشه‌ها دارد. بررسی طیف‌سنجی FTIR نیز تأیید کرد که حضور سیستین در ترکیب این نانوخوشه‌ها، منجر به تغییرات قابل توجهی در ساختار شیمیایی و افزایش ترکیب نیتروژن و گوگرد در ساختار آن‌ها شده است. در مجموع، نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که نانوخوشه‌های اکسید گرافن با عامل پوششی سیستین، علاوه بر ویژگی‌های حفاظتی، دارای

نشان می‌دهد که تفکیک LO-TO می‌تواند یکی از پارامترهای کلیدی در کنترل رفتار جذب تابش و بهینه‌سازی عملکرد حفاظتی مواد گرافنی باشد. با این حال، باید توجه داشت که پژوهش حاضر تنها یک نوع عامل پوششی (سیستین) و تعداد محدودی انرژی پرتو گاما را بررسی کرده است. از این رو، پیشنهاد می‌شود در مطالعات آینده، اثر انواع لیگاندها، ضخامت‌های مختلف، و گستره‌ی وسیع‌تری از انرژی‌ها بر رفتار فونونی و ویژگی‌های حفاظتی بررسی شود تا دید جامع‌تری از نقش فونون‌ها در عملکرد این مواد حاصل گردد.

با وجود نتایج این پژوهش در زمینه‌ی بررسی هم‌زمان ضرایب تضعیف جرمی و ویژگی‌های اپتیکی نانوخوشه‌های اکسید گرافن عامل‌دار با سیستین، این تحقیق دارای چند محدودیت است که باید در تحلیل نتایج در نظر گرفته شود. نخست آنکه، در این مطالعه تنها از یک نوع عامل پوششی (سیستین) استفاده شده است. بررسی پوشش‌های متنوع‌تر یا ترکیبات چندعاملی می‌تواند در آینده به درک جامع‌تری از تأثیر نوع لیگاند بر پایداری شبکه و پاسخ حفاظتی مواد منجر شود. دوم، بازه‌ی انرژی تابش‌های بررسی‌شده محدود بوده و صرفاً شامل چند انرژی مشخص از منابع ^{137}Cs و ^{241}Am است؛ بنابراین در مطالعات آتی پیشنهاد می‌شود نمونه‌ها در گستره‌ی وسیع‌تری از انرژی‌های گاما، در محدوده‌ی چند صد کیلوالکترون‌ولت تا چند مگاالکترون‌ولت، مورد آزمون قرار گیرند تا وابستگی انرژی تضعیف جرمی با دقت بیشتری تعیین شود. علاوه بر این، تأثیر ضخامت، تخلخل و میزان یکنواختی توزیع عامل پوششی بر روی جذب تابش به‌صورت سیستماتیک بررسی نشده است؛ در حالی که این پارامترها می‌توانند نقش تعیین‌کننده‌ای در کارایی حفاظتی و پاسخ فونونی ماده داشته باشند [۲۹]. از سوی دیگر، در مدل‌سازی‌های تحلیلی فرض شده است که پیوند میان شبکه‌ی گرافنی و عامل پوششی کاملاً هم‌بنیاد است؛ در صورتی که در شرایط واقعی، وجود نقص‌های سطحی و ناهمسانی‌های موضعی

- [5] A. Z. Sherzad, H. Zare, Z. Shahedi, F. Ostovari, Y. Fazaeli, "One-step preparation and characterization of graphene oxide quantum dots and investigation of the effect of thiourea and ammonia (S,N) on the optical properties of the synthesized quantum dots," *Nanomeghyas*, 2020, 7(3) 48-54, 2020.
- [6] A. Sherzad, H. Zare, Z. Shahedi, F. Ostovari, Y. Fazaeli, Z. Pourghobadi, "Effect of pH on Optical Properties of Graphene Oxide Quantum Dots," *Int. J. Opt. Photonics*, vol. 14, pp. 135-142, 2020. <https://doi.org/10.52547/ijop.14.2.135>
- [7] M. R. Younis, G. He, J. Lin, P. Huang, "Recent Advances on Graphene Quantum Dots for Bioimaging Applications," *Front. Chem.*, vol. 8, pp. 1-25, 2020. <https://doi.org/10.3389/fchem.2020.00424>
- [8] G. Muruganandi, M. Saravanan, G. Vinitha, M. B. Jessie Raj, T. C. Sabari Girisun, "Barium borate nanorod decorated reduced graphene oxide for optical power limiting applications," *Opt. Mater. (Amst.)*, vol. 75, pp. 612-618, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2017.11.017>
- [9] S. Bak, D. Kim, H. Lee, "Graphene quantum dots and their possible energy applications: A review," *Curr. Appl. Phys.*, vol. 16, pp. 1192-1201, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.cap.2016.03.026>
- [10] S. Chung, R. A. Revia, M. Zhang, "Graphene Quantum Dots and Their Applications in Bioimaging, Biosensing, and Therapy," *Adv. Mater.*, vol. 33, 2021. <https://doi.org/10.1002/adma.201904362>
- [11] S. A. Ansari, "Graphene Quantum Dots: Novel Properties and Their Applications for Energy Storage Devices," *Nanomaterials*, vol. 12, p. 3814, 2022. <https://doi.org/10.3390/nano12213814>
- [12] J. A. Van Vechten, T. K. Bergstresser, "Electronic Structures of Semiconductor Alloys," *Phys. Rev. B*, vol. 1, pp. 3351-3358, 1970. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.1.3351>
- [13] F. Gervais, B. Piriou, "Temperature dependence of transverse- and longitudinal-optic modes in TiO₂ (rutile)," *Phys. Rev. B*, vol. 10, pp. 1642-1654, 1974. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.10.1642>
- [14] J. A. Ridley, N. A. Zakhleniuk, C. R. Bennett, M. Babiker, D. R. Anderson, "Piezoelectric Scattering in Large-Bandgap Semiconductors and Low-Dimensional Heterostructures," *MRS Proc.*, vol. 572, p. 507, 1999. <https://doi.org/10.1557/PROC-572-507>
- [15] S. P. D., M. Srinivasan, K. Fujiwara, "Understanding the role of non-analytical corrections in phonon transport and thermal conductivity in half-Heusler alloys," *J. Appl. Phys.*, vol. 137, 2025. <https://doi.org/10.1063/5.0271643>

پتانسیل بالایی در حوزه‌های نانوفناوری، از جمله سنسورهای زیستی، اپتوالکترونیک، فناوری‌های تصویربرداری پیشرفته و حتی مواد زیست‌سازگار برای کاربردهای پزشکی هستند. پیشنهاد می‌شود که در پژوهش‌های آینده، تأثیر این نانوخوشه‌ها بر روی بازدهی سایر سیستم‌های اپتیکی و الکترونیکی بررسی شده و عملکرد آن‌ها در محیط‌های مختلف مورد آزمایش قرار گیرد.

تقدیر و تشکر

نویسندگان مراتب قدردانی خود را از کلیه همکاران و مراکز تحقیقاتی که در این پژوهش همکاری کرده اند، اعلام می‌دارند.

تعارض منافع

نویسندگان این مقاله بدین‌وسیله اعلام می‌دارند که در ارتباط با انجام، تحلیل، نگارش و انتشار این پژوهش، هیچ‌گونه تعارض منافع مالی، شخصی، علمی یا سازمانی وجود ندارد.

منابع

- [1] D. Chen, H. Feng, J. Li, "Graphene Oxide: Preparation, Functionalization, and Electrochemical Applications," *Chem. Rev.*, vol. 112, pp. 6027-6053, 2012. <https://doi.org/10.1021/cr300115g>
- [2] P. Gozali Balkanloo, K. M. Sharifi, A. Poursattar Marjani, "Graphene quantum dots: synthesis, characterization, and application in wastewater treatment: a review," *Mater. Adv.*, vol. 4, pp. 4272-4293, 2023. <https://doi.org/10.1039/D3MA00372H>
- [3] C. Zhao, X. Song, Y. Liu, Y. Fu, L. Ye, N. Wang, F. Wang, L. Li, M. Mohammadniaei, M. Zhang, Q. Zhang, J. Liu, "Synthesis of graphene quantum dots and their applications in drug delivery," *J. Nanobiotechnol.*, vol. 18, p. 142, 2020. <https://doi.org/10.1186/s12951-020-00698-z>
- [4] T. Van Tam, S. H. Hong, W. M. Choi, "Facile synthesis of cysteine-functionalized graphene quantum dots for a fluorescence probe for mercury ions," *RSC Adv.*, vol. 5, pp. 97598-97603, 2015. <https://doi.org/10.1039/C5RA18495A>

- [24] A. Amiri, H. Zare, Y. Fazaeli, Z. Dehghani, M. Eslami-Kalantari, "Investigating the optical and magnetic properties of engineered multifunctional graphene oxide and potential application in medical physics and nonlinear optics," *J. Mol. Struct.*, vol. 1319, p. 139396, 2025. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2024.139396>
- [25] M. Milenković, J. C. da Silva, S. D. Kovačević, D. V. Jovanović, "Facile Synthesis of L-Cysteine Functionalized Graphene Quantum Dots as a Bioimaging and Photosensitive Agent," *Nanomaterials*, vol. 11, p. 1879, 2021. <https://doi.org/10.3390/nano11081879>
- [26] A. Amiri, H. Zare, Y. Fazaeli, Z. Dehghani, M. Eslami Kalantari, "Investigations on Synthesis, Structural, Dielectric and Nonlinear Optical Properties of GO@MgFe₂O₄-TMSP-CdTe QDs for Optoelectronic Devices," *J. Nonlinear Opt. Phys. Mater.*, 2025. <https://doi.org/10.1142/S0218863525500122>
- [27] Z. Dehghani, F. Ostovari, M. Nadafan, "Investigation of the structural, dielectric, and optical properties of MoSe₂ nanosheets," *J. Appl. Phys.*, vol. 131, 2022. <https://doi.org/10.1063/5.0088016>
- [28] A. Amiri, H. Zare, Y. Fazaeli, Z. Dehghani, M. Eslami-Kalantari, "Investigations on synthesis, structural, dielectric and nonlinear optical properties of GO@MgFe₂O₄-TMSP-CdTe QDs for optoelectronic devices," *J. Nonlinear Opt. Phys. Mater.*, 2025. <https://doi.org/10.1142/S0218863525500122>
- [29] Nurhasmi, E. S. Wibowo, H. Harmami, "Study on optical phonon vibration and gamma ray shielding properties of composite geopolymers fly ash-metal," *Radiat. Phys. Chem.*, vol. 180, p. 109250, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2020.109250>
- [30] S. Lyu, W. R. L. Lambrecht, "First-principles calculations of phonons and Raman and infrared spectra in Cd-IV-N₂ compounds," *J. Appl. Phys.*, vol. 123, 2018. <https://doi.org/10.1063/1.5030216>
- [16] T. Sohler, M. Gibertini, M. Calandra, F. Mauri, N. Marzari, "Breakdown of Optical Phonons' Splitting in Two-Dimensional Materials," *Nano Lett.*, vol. 17, pp. 3758-3763, 2017. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b01090>
- [17] J. Li, T. Qiao, Q. Wu, Y. Li, W. Du, J. Li, H. Xu, "Observation of the nonanalytic behavior of optical phonons in monolayer hexagonal boron nitride," *Nat. Commun.*, vol. 15, p. 1938, 2024. <https://doi.org/10.1038/s41467-024-46229-4>
- [18] T. Zaki, K. I. Kabel, H. Hassan, "Using modified Pechini method to synthesize α -Al₂O₃ nanoparticles of high surface area," *Ceram. Int.*, vol. 38, pp. 4861-4866, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2012.02.076>
- [19] Kramers-Kronig Relations in Optical Materials Research, vol. 110, Springer-Verlag, 2005.
- [20] Z. Dehghani, F. Ostovari, S. Sharifi, "A comparison of the crystal structure and optical properties of reduced graphene oxide and aminated graphene nanosheets for optoelectronic device applications," *Optik (Stuttg.)*, vol. 274, p. 170551, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2023.170551>
- [21] National Institute of Standards and Technology (NIST), "XCOM: Photon Cross Sections Database," Available online.
- [22] K. Filak-Mędoń, M. Dąbrowski, A. M. Olszewska, M. Kremzer, "Graphene-based nanocomposites as gamma- and X-ray radiation shield," *Sci. Rep.*, vol. 14, p. 18998, 2024. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-69628-5>
- [23] H. M. Rusli, N. A. S. Mohd Sabri, N. A. Abdullah, M. Z. A. Rahman, "Fabrication and evaluation of graphene oxide-enhanced polymer composites for effective radiation shielding in medical applications," *Radiat. Phys. Chem.*, vol. 239, p. 113331, 2026. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2025.113331>