



جامعة الموصل  
كلية العلوم

## دراسة نظرية لمادتي النانو كبريتيد الرصاص و نتريد الالمنيوم تحت الضغط العالي

مدلول محمد تيبين السويفي

رسالة ماجستير

علوم الفيزياء

بإشراف

الاستاذ المساعد

الدكتور عدنان محمد الشيخ حسين



جامعة الموصل  
كلية العلوم

## دراسة نظرية لمادتي النانو كبريتيد الرصاص و نتريد الالمنيوم تحت الضغط العالي

رسالة تقدم بها الطالب  
مدلول محمد تبين ختلان السويفي

الى

مجلس كلية العلوم في جامعة الموصل وهي جزء من متطلبات

درجة الماجستير في

علوم الفيزياء

بإشراف

الاستاذ المساعد

الدكتور عدنان محمد الشيخ حسين

## بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

وَإِذْ قَالَ رَبُّكَ لِلْمَلَائِكَةِ إِنِّي جَاعِلٌ فِي الْأَرْضِ خَلِيفَةً قَالُوا أَتَجْعَلُ

فِيهَا مَنْ يَفْسِدُ فِيهَا وَيَسْفِكُ الدِّمَاءَ وَنَحْنُ نُسَبِّحُ بِحَمْدِكَ وَنُقَدِّسُ لَكَ  
قَالَ إِنِّي أَعْلَمُ مَا لَا تَعْلَمُونَ (٣٠) وَعَلَّمَ آدَمَ الْأَسْمَاءَ كُلَّهَا ثُمَّ عَرَضَهُمْ

عَلَى الْمَلَائِكَةِ فَقَالَ أَنْبِئُونِي بِأَسْمَاءِ هَؤُلَاءِ إِنْ كُنْتُمْ صَادِقِينَ  
(٣١) قَالُوا سُبْحَانَكَ لَا عِلْمَ لَنَا إِلَّا مَا عَلَّمْتَنَا إِنَّكَ أَنْتَ الْعَلِيمُ الْحَكِيمُ (٣٢) قَالَ يَا

آدَمُ أَنْبِئْهُمْ بِأَسْمَائِهِمْ فَلَمَّا أَنْبَأَهُمْ بِأَسْمَائِهِمْ قَالَ أَلَمْ أَقُلْ لَكُمْ إِنِّي أَعْلَمُ الْغَيْبَ  
السَّمَوَاتِ وَالْأَرْضِ وَأَعْلَمُ مَا تُبْدُونَ وَمَا كُنْتُمْ تَكْتُمُونَ (٣٣)

صَدَقَ اللَّهُ الْعَظِيمُ

البقرة (٣٠-٣٣)

## إقرار المشرف

أشهد ان اعداد هذه الرسالة قد جرى تحت اشرافي في جامعة الموصل، وهي جزء من متطلبات شهادة الماجستير في علوم الفيزياء .

التوقيع

المشرف: أ. م. د. عدنان محمد الشيخ حسين

المرتبة العلمية: أستاذ مساعد

التاريخ: / / 2021

## إقرار المقوم اللغوي

أشهد ان هذه الرسالة الموسومة بـ "دراسة نظرية لمادتي النانو كبريتيد الرصاص و نتريد الالمنيوم تحت الضغط العالي" قد تم مراجعتها من الناحية اللغوية، وتصحيح ما ورد فيها من اخطاء لغوية وتعبيرية، وبذلك اصبحت الرسالة مؤهلة للمناقشة بقدر تعلق الامر بسلامة الاسلوب وصحة التعبير.

التوقيع

الاسم: أ. م. د. مثنى عبدالله محمد علي

المرتبة العلمية: أستاذ مساعد

التاريخ: / / 2021

## إقرار رئيس لجنة الدراسات العليا

بناء على التوصيتين المقدمتين من قبل المشرف والمقوم اللغوي، ارشح هذه الرسالة للمناقشة .

التوقيع:

الاسم: أ. م. د. مازن احمد عبد غزال

المرتبة العلمية: استاذ مساعد

التاريخ: / / 2021

## إقرار رئيس القسم

بناء على التوصيات المقدمة من قبل رئيس لجنة الدراسات العليا ارشح هذه الرسالة للمناقشة .

التوقيع:

الاسم: أ. م. د. مازن احمد عبد

المرتبة العلمية: استاذ مساعد

التاريخ: / / 2021

## قرار لجنة المناقشة

نشهد باننا اعضاء لجنة التقويم والمناقشة قد اطلعنا على هذه الرسالة وناقشنا الطالب "مدلول محمد تبين " في محتوياتها وفيما له علاقة بها بتاريخ / 2021 / 2021 / وانها جديرة لنيل شهادة الماجستير في اختصاص الفيزياء .

عضو اللجنة

رئيس اللجنة

التوقيع

التوقيع

الاسم : م. د. سهام جاسم عبدالله

الاسم: أ. م. د. ممتاز محمد صالح

المرتبة العلمية: مدرس

المرتبة العلمية: أستاذ مساعد

التاريخ: / / 2021

التاريخ: / / 2021

عضو اللجنة (المشرف)

عضو اللجنة

التوقيع:

التوقيع:

الاسم: أ. م. د. عدنان محمد الشيخ حسين

الاسم: أ. م. د. محمد خيرى زكى عبد

المرتبة العلمية: استاذ مساعد

المرتبة العلمية: أستاذ مساعد

التاريخ: / / 2021

التاريخ: / / 2021

## قرار مجلس الكلية

اجتمع مجلس كلية العلوم بجلسته.....المنعقدة في / / 2021 وقرر التوصية بمنح الطالب شهادة الماجستير في الفيزياء

عميد كلية العلوم

مقرر مجلس كلية العلوم

التوقيع:

التوقيع:

الاسم: أ. م. د. هيام عادل ابراهيم الطائي

الاسم:

التاريخ: / / 2021

التاريخ: / / 2021

شكر

وامتتان

\*الحمد لله رب العالمين والصلاة والسلام على سيدنا محمد اشرف الانبياء والمرسلين وعلى اهل بيته الطيبين الطاهرين والتابعين ومن تبعهم باحسان الى يوم الدين، وبعد.. فإني أشكر الله تعالى على فضله إذ اتاح لي اجاز هذا العمل بفضلته فله الحمد أولاً وآخراً، كما أشكر من مد لي يد المساعدة، وفي مقدمتهم أساتذتي الفاضل المشرف على الرسالة الدكتور (عدنان محمد الشيخ) الذي لم يدخر جهداً في مساعدتي، فله من الله الاجر ومني كل تقديس واحترام. والشكر موصول الى عمادة كلية العلوم عموماً و اساتذتي الكرام في قسم الفيزياء خصوصاً على ما بذلوه من اهتمام، كما أقدم بالشكر الجزيل إلى اسرتي (والدي ووالدتي واخوتي وجميع اقاربي) وزملائي وزميلاتي وإلى كل من ساندني في إتمام هذه الرسالة وخص بالشكر رفيتي (الاساتذ مرائق مرائع عمس النعمة و عبد الوهاب ابراهيم الغزال) اللذين رافقاني طيلة ايام الدراسة.

الباحث:

مدلول محمد السويفي

## الخلاصة

تقدم هذه الرسالة دراسة نظرية تحت الضغط العالي لاستقصاء خصائص المرونة الحرارية لجسيمات نانو كبريتيد الرصاص (Nano PbS) بثلاثة احجام مختلفة وهي (2.6, 5.4, 8.8)nm وجسيمات نانو نتريد الالمنيوم AlN من خلال حساب تغيرات الحجم ( $\frac{V}{V_0}$ ) وتغيرات معامل المرونة الحجمي عند ثبوت درجة الحرارة ( $B_T$ ) ومعامل التمدد النسبي الحراري ( $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$ ) تحت الضغط العالي باستخدام معادلات حالة مختلفة والتي تستند الى أسس مختلفة في اشتقاقها. فضلاً عن حساب تغير فجوة الطاقة تحت الضغط العالي في نتريد الالمنيوم العياني.

تم حساب تغيرات الحجم ( $\frac{V}{V_0}$ ) ومعامل المرونة الحجمي  $B_T$  ومعامل التمدد النسبي الحراري تحت الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة لكل من بيرخ - مرنكهان (B-M EOS) ولينارد-جونس المحورة (ml-J EOS)، وباردين (Bardeen EOS)، وهذه المعادلات هي من معادلات الحالة الشائعة الاستخدام في دراسة المواد العيانية. فضلاً عن استخدام معادلة الحالة سينغ-كاو (S-K EOS) ومعادلة الحالة لـ Kumar وهما من معادلات الحالة الخاصة بمواد النانو.

تم مقارنة النتائج المتحصلة مع البيانات التجريبية المتاحة. وأظهرت هذه المقارنة امكانية استخدام معادلات الحالة المعروفة للمواد العيانية مثل معادلة الحالة بيرخ-مرنكهان (B-M EOS) ومعادلة الحالة لينارد-جونس المحورة (mL-J EOS) ومعادلة الحالة (Bardeen EOS) في اجراء الحسابات لمواد النانو من خلال توافق النتائج التي تم الحصول عليها باستخدام هذه المعادلات مع البيانات التجريبية. كما جاءت النتائج التي تم التوصل اليها باستخدام معادلة الحالة كومر (Kumar EOS)، وهي من معادلات الحالة الخاصة بمواد النانو، متوافقة مع البيانات التجريبية ومع نتائج معادلات الحالة المستخدمة. في حين اظهرت النتائج التي تم الحصول عليها باستخدام معادلة الحالة سينغ-كاو (S-K EOS)، تفاوتاً عن البيانات التجريبية وعن نتائج بقية المعادلات المستخدمة، وخاصة عند اجراء حسابات نانو PbS إذ كان هذا التفاوت يزداد كلما ازداد حجم جسيمات نانو PbS. إن التفاوت الذي أظهرته نتائج حسابات معادلة الحالة S-K EOS يمكن أن يُعزى الى اعتبار ان مشتقة معامل المرونة الحجمي بالنسبة إلى الضغط ( $B'_0$ ) لديها قيمة ثابتة ( $B'_0 = 4$ ) خلال اشتقاق هذه المعادلة. علماً ان هذا التفاوت لم يظهر عند إجراء حسابات AlN.

عند حساب تغير فجوة الطاقة لنتريد الالمنيوم العياني تحت الضغط العالي ظهر أن فجوة الطاقة تزداد مع زيادة الضغط العالي. وهذه النتيجة تترادف مع ما هو معروف عن اشباه الموصلات التي تزداد توصيليتها (ضيق فجوة الطاقة مع ارتفاع درجة الحرارة).

# ثبت المحتويات

الصفحة	عنوان الفقرة	رقم الفقرة
I	ثبت المحتويات	
V	ثبت الأشكال	
VII	ثبت الجداول	
IX	ثبت الرموز	
<b>الفصل الاول</b> <b>مقدمة في مواد النانو والضغط العالي</b>		
1	تمهيد	(1-1)
1	مواد النانو	(1-2)
2	طرائق تصنيع مواد النانو	(1-2-1)
3	أشكال مواد النانو	(1-2-2)
4	أهمية مواد النانو	(1-2-3)
4	تطبيقات مواد النانو	(1-2-4)
5	التحليل النوعي لجسيمات النانو	(1-2-5)
6	الضغط والضغط العالي	(1-3)
6	الضغط	(1-3-1)
6	الضغط العالي	(1-3-2)
7	طرائق إنتاج الضغط العالي	(1-3-3)
7	خلية سندان الماس	(1-3-4)
9	المصاعب والعراويل في الضغط العالي	(1-3-5)
10	قياس الضغوط العالية	(1-3-6)
11	بعض تطبيقات الضغط العالي	(1-3-7)

13	تأثير الضغط العالي على مواد النانو	(1-3-8)
14	الدراسات السابقة	(1-4)
17	الهدف من البحث	(1-5)
<b>الفصل الثاني</b> <b>التفاصيل النظرية</b>		
18	معادلة الحالة	(2-1)
19	معادلات الحالة للمواد الصلبة	(2-2)
19	معادلة الحالة لـ بيرخ - مرنكهان (B - M EOS)	(2-2-1)
20	معادلة الحالة المحورة لـ لينارد - جونز (mL - J EOS)	(2-2-2)
21	معادلة الحالة لـ سينغ - كاو (S - K EOS)	(2-2-3)
21	معادلة الحالة لـ باردين (Bardeen EOS)	(2-2-4)
22	معادلة الحالة لـ كومر (Kumar EOS)	(2-2-5)
23	معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ )	(2-3)
23	تغير معامل المرونة الحجمي تحت الضغط العالي	(2-4)
23	تغير معامل المرونة الحجمي مع الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ بيرخ - مرنكهان (B-M EOS)	(2-4-1)
24	تغير معامل المرونة الحجمي مع الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ لينارد جونز المحورة (mL-J EOS)	(2-4-2)
25	تغير معامل المرونة الحجمي مع الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ سينغ-كاو (Singh-Kao EOS)	(2-4-3)
26	تغير معامل المرونة الحجمي مع الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ باردين (Bardeen EOS)	(2-4-4)
27	تغير معامل المرونة الحجمي مع الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ كومر (Kumar EOS)	(2-4-5)
28	معامل التمدد النسبي الحراري عند ثبوت درجة الحرارة $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$	(2-5)
30	تغير فجوة الطاقة تحت الضغط العالي	(2-6)

الفصل الثالث		
حساب نانو كبريتيد الرصاص (Nano PbS) تحت الضغط العالي		
31	تمهيد	(3-1)
31	نانو PbS	(3-2)
32	حساب تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) للنانو (2.6, 5.4, 8.8)nm تحت تأثير الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة المختلفة	(3-3)
38	حساب تغير معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) للنانو (2.6, 5.4, 8.8)nm تحت تأثير الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة المختلفة.	(3-4)
46	حساب تغير معامل التمدد النسبي الحراري ( $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$ ) للنانو (2.6, 5.4, 8.8)nm تحت تأثير الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة المختلفة	(3-5)
54	المناقشة	(3-6)
الفصل الرابع		
حساب نانو نتريد الالمنيوم (Nano AlN) تحت الضغط العالي		
56	تمهيد	(4-1)
56	نانو نتريد الالمنيوم AlN	(4-2)
57	شبه التوصيل في نتريد الالمنيوم AlN	(4-3)
58	حساب نانو نتريد الالمنيوم Nano AlN تحت الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة المختلفة.	(4-4)
58	حساب تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) للنانو AlN باستخدام معادلات الحالة المختلفة تحت الضغط العالي	(4-4-1)
61	حساب تغير معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) للنانو AlN وفق معادلات الحالة المختلفة تحت الضغط العالي	(4-4-2)
64	حساب تغير معامل التمدد النسبي الحراري ( $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$ ) للنانو AlN وفق معادلات الحالة المختلفة تحت الضغط العالي	(4-4-3)

67	حساب تغير فجوة الطاقة $(E_g)$ لـ AIN العياني تحت الضغط العالي	(4-5)
70	المنافشة	(4-6)
<b>الفصل الخامس</b> <b>الاستنتاجات والأعمال المستقبلية</b>		
71	الاستنتاجات	(5-1)
71	الأعمال المستقبلية	(5-2)
72	المصادر	
78	الخلاصة	
	الملحق	

ثبت  
الاشكال

الصفحة	اسم الشكل	رقم الشكل
3	طرائق الحصول على حجم نانوي من الأسفل الى الأعلى وبالعكس	(1-1)
8	مخطط توضيحي لخلية سندان الماس DAC	(1-2)
34	تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) تحت الضغط العالي لجسيمات النانو PbS (2.6nm) باستخدام معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية	(3-1)
36	تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) تحت الضغط العالي لجسيمات النانو PbS (5.4nm) باستخدام معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية	(3-2)
38	تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) تحت الضغط العالي لجسيمات النانو PbS (8.8nm) باستخدام معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية	(3-3)
42	تغير معامل المرونة الحجمي $B_T$ تحت الضغط العالي لجسيمات نانو PbS (2.6nm) وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.	(3-4)
44	تغير معامل المرونة الحجمي $B_T$ تحت الضغط العالي لجسيمات نانو PbS (5.4nm) وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.	(3-5)
46	تغير معامل المرونة الحجمي $B_T$ تحت الضغط العالي لجسيمات نانو PbS (8.8nm) وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.	(3-6)

50	تغير معامل التمدد النسبي الحراري $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$ تحت الضغط العالي لجسيمات نانو PbS (2.6nm) وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية	(3-7)
52	تغير معامل التمدد النسبي الحراري $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$ تحت الضغط العالي لجسيمات نانو PbS (5.4nm) وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية	(3-8)
54	تغير معامل التمدد النسبي الحراري $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$ تحت الضغط العالي لجسيمات نانو PbS (8.8nm) وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية	(3-9)
56	التركيب البلوري لتتريد الألمنيوم	(4-1)
61	تغير الحجم النوعي $(\frac{V}{V_0})$ تحت الضغط العالي لجسيمات النانو AIN باستخدام معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية	(4-2)
64	تغير معامل المرونة الحجمي $B_T$ تحت الضغط العالي لجسيمات النانو AIN وفق معادلات الحالة المختلفة	(4-3)
67	تغير معامل التمدد النسبي الحراري $(\frac{V}{V_0})$ تحت الضغط العالي لجسيمات النانو AIN وفق معادلات الحالة المختلفة	(4-4)
68	التركيب الحزمي لتتريد الألمنيوم العياني AIN	(4-5)
79	تغير فجوة الطاقة لتتريد الألمنيوم العياني AIN تحت الضغط العالي	(4-6)

رقم الجدول	عنوان الجدول	الصفحة
(3-1)	قيم معامل المرونة الحجمي لنانو كبريتيد الرصاص $B_0$ ومشتقة معامل المرونة الحجمي $B'_0$ ، بأحجام (2.6, 5.4, 8.8)nm عند درجة حرارة الغرفة وتحت الضغط الجوي الاعتيادي	31
(3-2)	نتائج تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) للنانو PbS (2.6nm) تحت الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة المختلفة، مقارنة مع البيانات التجريبية	33
(3-3)	نتائج تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) للنانو PbS (5.4nm) تحت الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة المختلفة، مقارنة مع البيانات التجريبية	35
(3-4)	نتائج تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) للنانو PbS (8.8nm) تحت الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة المختلفة، مقارنة مع البيانات التجريبية	37
(3-5)	نتائج تغير معامل المرونة الحجمي $B_T$ للنانو PbS (2.6nm) تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية	41
(3-6)	نتائج تغير معامل المرونة الحجمي $B_T$ للنانو PbS (5.4nm) تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية	43
(3-7)	نتائج تغير معامل المرونة الحجمي $B_T$ للنانو PbS (8.8nm) تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية	45
(3-8)	نتائج تغير معامل التمدد النسبي الحراري $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$ للنانو (PbS 2.6nm) تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية	49
(3-9)	نتائج تغير معامل التمدد النسبي الحراري $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$ للنانو (PbS 5.4nm) تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية	51

53	نتائج تغير معامل التمدد النسبي الحراري $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$ للنانو (PbS 8.8nm) تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية	(3-10)
58	قيم معامل المرونة الحجمي $B_0$ ومشتقته $B'_0$ لنانو نتريد الالمنيوم AIN عند درجة حرارة الغرفة وتحت الضغط الجوي	(4-1)
60	نتائج تغير الحجم النوعي $(\frac{V}{V_0})$ للنانو AIN تحت الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة المختلفة، مقارنة مع البيانات التجريبية.	(4-2)
63	نتائج تغير معامل المرونة الحجمي $(B_T)$ للنانو AIN تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة	(4-3)
66	نتائج تغير معامل التمدد النسبي الحراري $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$ للنانو AIN تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة	(4-4)
69	نتائج تغير طاقة الفجوة لـ AIN العياني مع الضغط العالي	(4-5)

## ثبت الرموز

الرمز	المعنى
$P$	الضغط
$N$	نيوتن
$dF$	عنصر تفاضلي للقوة
$dA$	عنصر تفاضلي للمساحة
$Pa$	باسكال
$GPa$	كبيكا باسكال
$bar$	البار
$kbar$	كيلو بار
$U$	الطاقة الكامنة للشبيكة
$V$	الحجم عند ضغط معين
$n$	عدد المولات
$R$	الثابت العام للغازات
$T$	درجة الحرارة المطلقة
$V_0$	الحجم عند الضغط الجوي الاعتيادي
$\eta = V / V_0$	الحجم النوعي (الانضغاطية)
$EOS$	معادلة الحالة
$B_0$	معامل المرونة الحجمي عند الضغط الجوي الاعتيادي ودرجة حرارة الغرفة
$B_T$	معامل المرونة الحجمي عند ضغط معين ودرجة حرارة معينة
$B'_0$	مشتقة معامل المرونة الحجمي نسبة الى الضغط
$E_g$	طاقة الفجوة عند ضغط معين
$E_g(0)$	طاقة الفجوة عند درجة حرارة الغرفة
$\frac{dE_g}{dP}$	معدل تغير فجوة الطاقة نسبة الى الضغط

معامل التمدد الحراري عند ضغط معين	$\alpha(P)$
معامل التمدد الحراري عند درجة حرارة الغرفة	$\alpha_0$
كلفن	$K$
التغير في الطول الموجي	$\Delta\lambda$
معامل التمدد النسبي الحراري عند ثبوت درجة الحرارة	$\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$
دالة	$f$
ثوابت في متسلسلة اويلر	$a_0, a_1, a_2$
الضغط الحراري	$P_{Th}$
دالة الجهد	$E(r)$
الموضع	$r$
الكترن - فولت	$eV$
ثوابت في دالة الجهد	$a, b, c$
مقياس اندرسون - كرونا يشن عند درجة حرارة الغرفة	$\delta_{T_0}$
درجة حرارة الغرفة	$T_0$
ثابت قيمته 5	$A$
مول	$mole$
معامل الضغط	$\beta$

# الفصل الاول

مقدمة في مواد النانو والضغط العالي

***Introduction To Nano***

***materials and High***

***Pressure***

## الفصل الاول

### مقدمة في مواد النانو والضغط العالي

## Introduction To Nano Materials and High Pressure

### Preamble

### (1-1) تمهيد

منذ أن تعامل الإنسان مع المادة وهو يحاول ان يفهم كنهها ويسبر أغوار تكوينها. وسلك في ذلك كسرهما وتفتيتها في حالتها الصلبة، فضلاً عن خلطها وتفاعلها مع بعضها في حالتها الصلبة والسائلة وحصرتها في حالتها الغازية.

وإذا كانت دراسة المادة بالتسخين متاحة وسهلة التنفيذ. فإن تعريض المادة للضغط العالي ليس بالسهولة نفسها، اذ يتطلب الأمر توفير مستلزمات توليد الضغط العالي ورصد العينة تحت الضغط العالي دون ارباك منظومة توليد الضغط. وهذا ما جعل أبحاث تأثير الحرارة على المادة تسبق أبحاث تأثير الضغط العالي على المادة.

يتناول هذا الفصل استعراض مواد النانو وأنواعها وطرائق الحصول عليها هذا من جانب، والضغط العالي ووسائل الحصول عليه من جانب آخر.

### Nano Materials

### (1-2) مواد النانو

النانومتر هو وحدة قياس الطول ويساوي  $10^{-9}$  m. وعلى الرغم من انه ليس أصغر وحدة مستخدمة في القياسات الفيزيائية، إذ أن الأنكستروم ( $10^{-10}$  m) والفيرمي ( $10^{-15}$  m) الشائع الاستخدام في تقدير أنصاف أقطار نوى الذرات، الا أن النانومتر هو وحدة قياس أبعاد العينات المادية وليس الذرات المنفردة.

من حيث التصغير المستمر للنبائط الإلكترونية، تعد تقنية النانو شعاع أمل لصناعات أشباه الموصلات بسبب الخصائص المميزة لمواد النانو التي تغير بشكل كبير من كفاءة الأجهزة. يبدأ البحث في مواد النانو بسبب الخصائص الفريدة التي يتم الحصول عليها في هذا المقياس، عن طريق تغيير شكل أو حجم هذه المواد. في مقياس النانو، يتغير سلوك المواد بشكل جذري وبالتالي خصائصها. لقد أولى المجتمع العلمي اهتماماً كبيراً لدراسة الجوانب المختلفة لمجموعة متنوعة من المواد ذات بنية النانو مثل ؛ الفوليرين، وأنابيب النانو (NT)، وأسلاك النانو (NW)، ومؤخراً بلورات النانو (NC). كما يشير الاسم ، فإن NC هي التراكيب التي تظهر بنية بلورية ولكن ذات بعد واحد أو بعدين أو كلها ضمن نطاق من

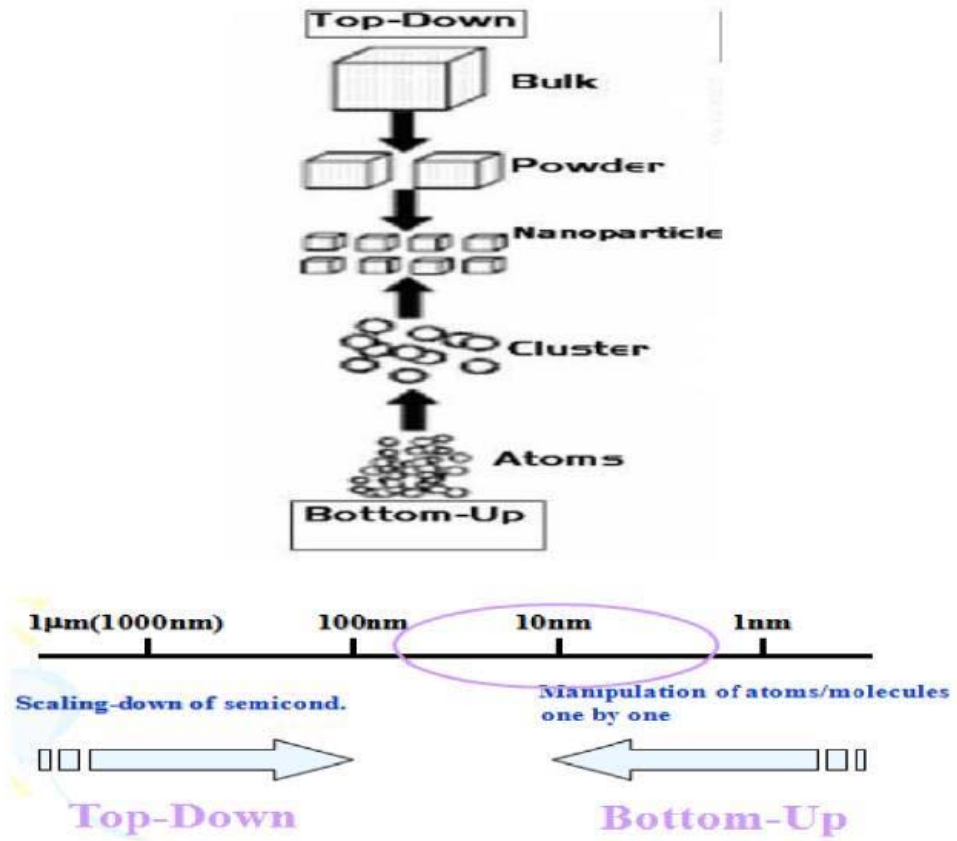
(1-100)nm. تتمتع NCs بتقدم في الدورية البلورية في نظام النانو ( $10^{-9}$ m) وغالبًا ما تمتلك خصائص جديدة، في معظم الأحيان تنعكس عن تلك الخاصة بالمواد العيانية المكافئة نظرًا لنسبة الذرات في السطح إلى الذرات في عموم الحجم، وتأثير الحجم الكمي، وتأثيرات الحصر الكمي. ان تأثير الحصر الكمي هو من الظواهر الرئيسية التي لوحظت غالبًا في NC، والتي تتعامل مع التضمين المكاني لحاملات الشحنة الإلكترونية داخل NC. يعتبر تأثير حجم الكم مشابهًا لمشكلة ميكانيكا الكم المعروفة، أي عندما يتم وضع الجسم في صندوق، إذ يرتفع مستوى الطاقة مع تقليل أبعاد الصندوق. نتيجة ذلك، يمكننا ملاحظة زيادة فجوة الطاقة في أشباه الموصلات إذ يقل حجم البلورة. (Srivastava and Tyagi, 2014).

وننتج عن استخدام هذه المواد قفزة هائلة في فروع العلوم والتكنولوجيا فضلاً عن تطبيقات عديدة في المجالات الطبية والالكترونية والحواسيب والطاقة. ومن المحتمل، في غضون بضع سنوات، ستكون متاحة في اجهزة التلفزيون ذات الشاشات المسطحة والنوافذ ذاتية التنظيف (Keiper, 2003).

## طرائق تصنيع مواد النانو Nano materials manufacturing methods

عند تصنيع المواد بحجم النانو فإن التركيب الفيزيائي والتركيز الكيميائي للمواد الخام المستخدمة في التصنيع تلعب دوراً مهماً في خصائص مادة النانو الناتجة، وهذا خلافاً لما يحدث عند تصنيع المواد العادية، وتتركب المواد عادة من مجموعة من الجسيمات والتي تحتوي على عدد من الذرات وقد تكون هذه الجسيمات مرئية أو غير مرئية للعين المجردة بناءً على حجمها، ويمكن ملاحظتها بواسطة الميكروسكوب، ففي هذه المواد يتفاوت حجم الجسيمات من مئات الميكرو ميتر إلى سنتيمترات. أما في مواد النانو فإن حجم الحبيبات يكون في حدود (1-100)nm. هناك طريقتان لتصنيع مواد نانو، إحداهما من الأعلى للأسفل (top-down) الشكل (1-1)، إذ تبدأ هذه الطريقة بحجم محسوس من المادة محل الدراسة وتُصَغَّر شيئاً فشيئاً حتى الوصول إلى مقياس النانو. ومن التقانات المستخدمة في ذلك الحفر الضوئي، القطع، القشط والطحن. وقد استخدمت هذه التقنيات للوصول إلى مركبات إلكترونية مجهرية كشرائح الكمبيوتر وغيرها، وأصغر حجم أمكن الوصول إليه في حدود 100nm ولازال البحث مستمراً في الحصول على أحجام أصغر من ذلك. أما الطريقة الثانية فهي من الأسفل للأعلى (bottom-up)، إذ تبدأ هذه الطريقة بجزيئات منفردة كأصغر وحدة وتُجمَع في تركيب أكبر، وغالباً ما تكون هذه الطرائق كيميائية، وتتميز بصغر حجم النواتج (نانومتر واحد) وقلة هدر للمادة الأصلية والحصول على قوة ترابط بين جسيمات مادة النانو الناتجة.

يمكن فحص ودراسة خصائص مواد النانو والتأكد من تركيبها باستخدام عدد من الأجهزة والتقنيات العلمية من أهمها: المجهر الإلكتروني الإنفاذي (TEM)، المجهر الإلكتروني الماسح (SEM)، مجهر القوى الذرية (AFM)، وحيود الأشعة السينية (XRD) (Albrithen, 2021).



شكل (1-1) طرائق الحصول على حجم نانوي من الاسفل الى الاعلى وبالعكس (Singh, 2004)

## Nano materials forms

## (1-2-2) أشكال مواد النانو

تتكون مواد النانو بأشكال متعددة منها (Albrithen, 2021).

- |                |                  |
|----------------|------------------|
| Quantum dots   | 1- النقاط الكمية |
| Fullerene      | 2- الفلورين      |
| Nano balls     | 3- كرات النانو   |
| Nano particles | 4- جسيمات النانو |
| Nano tubes     | 5- أنابيب النانو |
| Nano fibers    | 6- ألياف النانو  |
| Nano wires     | 7- أسلاك النانو  |

### The importance of Nano materials (1-2-3) اهمية مواد النانو

تكتسب المواد خصائص فريدة ومهمة عندما تتم معالجتها وهندستها على نطاق صغير جداً، هذه الخصائص قد تكون بصرية، مغناطيسية، كهربائية، أو أي خصائص أخرى. على سبيل المثال:

1- يمكن استخدام هذه التقنية في تصميم بعض الادوية والعقاقير المستخدمة لمرض السرطان، إذ يمكن جعلها تستهدف أعضاء أو خلايا أو أنسجة معينة في جسم الكائن الحي، وبالتالي تقلل من التأثيرات الجانبية وترفع من كفاءة العلاج .

2- يُمكن إضافتها إلى الإسمنت، الملابس ومُختلف المواد الأخرى لجعلها أقوى بوزن أخف.

3- يجعلها حجمها الصغير عملية جُداً في صناعة الإلكترونيات. (Gamal, 2016)

### Applications of Nano materials (1-2-4) تطبيقات مواد النانو

تعتبر تقنية النانو تقنية حديثة وتمتلك الكثير من التطبيقات، التي تتضمن تصنيع جسيمات أو جزيئات في مدى مقياس النانو. وعرفت تقنية النانو بأنها مجال متطور يتضمن تجهيز و تصنيع وتطبيق العديد من الأجهزة والتركيبات والأنظمة المتألفة من وحدات متناهية في الصغر. انبثقت فكرة تقنية النانو هذه من الكلمة اليونانية Nano بمعنى القزم، كما أن جسيمات النانو عرفت بأنها الجسيمات المنفردة التي تقل أبعادها عن 100nm. وترجع الخصائص والميزات الفريدة من نوعها لجسيمات النانو إلى صغر حجمها، فضلاً عن بنيتها السطحية وتركيبها الكيميائي. ومما أدى الى تطوير خواص المنتجات الصناعية هو الخصائص المميزة والتغيرات الفيزيائية للمواد المختلفة في مقياس النانو، الأمر الذي نتج عنه زيادة فعلية ومؤثرة في التطبيقات الصناعية والطبية. إن التقدم الهائل الذي حدث في هذه التقنية وضع خطة للاستفادة من تطبيقاتها في المجالات المختلفة؛ فتقنية النانو تحل العديد من المشاكل الصحية وتساعد في تنظيف البيئة والمحافظة عليها وامتلاك الإمكانية لزيادة كفاءة استهلاك الطاقة، كما أن تقنية النانو لها القدرة على زيادة كمية الإنتاج الصناعي بشكل كبير وبتكاليف واطئة جداً. ومن المحتمل أن تسهم تقنية النانو في انجاز تقدم في مجالات عدة؛ مثل: المجال الطبي، والطاقة، والصناعة، والزراعة، والبيئة، والغذاء، والفضاء بالإضافة إلى المجال العسكري (Ahmeda et al., 2017).

## (1-2-5) التحليل النوعي لجسيمات النانو

### Qualitative analysis of Nano particles

وهو من أهم التحاليل والتقنيات المستخدمة لتعيين المواد وجسيمات النانو في البيئات المختلفة ويشتمل على:

#### 1- استخدام المجاهر

لقد استُخدمت عدة مجاهر للتعرف على جسيمات النانو، بالإضافة إلى تحريكها وتصويرها وغير ذلك من العمليات. ومن أمثلة هذه المجاهر: المجاهر الإلكترونية، ومنها المجهر الإلكتروني الماسح (Scanning Electron Microscope) والمجهر الانفاذي الماسح (Scanning Tunneling Microscope) ومجهر القوة الذرية، (Atomic Force Microscope).

#### 2- استخدام تقنية المطيافية الضوئية:

لقد استُخدمت عدة تقنيات ضوئية في التحليل النوعي لجسيمات ومواد النانو، ومن أهم هذه التقنيات: مطيافية الرنين النووي المغناطيسي، إذ تم استخدامها لتحديد التركيب بثلاثة أبعاد للعينات؛ ومطيافية أشعة X، التي تعطي معلومات عن البنية البلورية للطبقات السطحية وكذلك المطيافية لجسيمات النانو، واخيرا مطيافية رامان، وهي التقنية الأفضل والمناسبة لتحديد خواص جسيمات النانو التركيبية. وقد تم دمج تقنيات ضوئية عدة مع بعضها البعض، لتحديد أنابيب النانو للكربون في المياه السطحية كما استُخدمت عدة طرائق وتقنيات لتعيين وفصل خصائص جسيمات النانو. ومن هذه الطرائق طريقة الطرد المركزي، والفصل التجزيئي باستخدام الأغشية، والترشيح، وقياسات المساحة السطحية وقياسات السطح والشحنة وغيرها. (Ahmeda et al., 2017).

## Pressure and High Pressure

## (1-3) الضغط والضغط العالي

### Pressure

### (1-3-1) الضغط

يعرف الضغط بأنه القوة المسلطة عموديا على وحدة المساحة، ويعبر عنه رياضيا بالصيغة التالية

$$P = \frac{dF}{dA} \quad (1.1)$$

وأشهر أنواع الضغط هو الضغط الجوي (Atmospheric pressure) الناتج عن ضغط عمود الهواء في الغلاف الجوي على الكرة الأرضية، وضغط الموائع الساكنة (hydrostatic pressure) المتولد من تأثير وزن عمود المائع على مساحة معينة وضغط موجة الصدمة (shock wave pressure) نتيجة الانفجارات او اختراق حاجز سرعة الصوت.

وأول ما يتبادر الى الذهن من وحدات قياس الضغط هي الجو (Atmosphere) الذي يمثل وزن عمود من الزئبق ارتفاعه 76cm عند مستوى سطح البحر. وتمثل وحدة الجو 760mm<sub>Hg</sub>، إذ أن

$$1 \text{ atm} = 760 \text{ mm}_{\text{Hg}}$$

$$1 \text{ atm} = 760 \text{ mm}_{\text{Hg}} \text{ (torr)}$$

$$1 \text{ torr} = 1 \text{ mm}_{\text{Hg}}$$

والوحدات الأساسية لقياس الضغط في النظام الدولي للوحدات SI هي N/m<sup>2</sup> (الباسكال - Pa)

او dyne/cm<sup>2</sup> ومنه نجد أن البار (bar) يساوي 10<sup>6</sup> dyne/cm<sup>2</sup> أي أن

$$1 \text{ bar} = 10^5 \text{ N/m}^2 \text{ (Pascal)}$$

$$1 \text{ bar} = 10^6 \text{ dyne/cm}^2$$

$$1 \text{ pascal} = \text{N/m}^2$$

$$1 \text{ kbar} = 1000 \text{ bar}$$

### High Pressure

### (1-3-2) الضغط العالي

الضغط العالي هو الضغط الذي تزيد قيمته عن 1kbar. ومن وحدات الضغط المستخدمة في

دراسات الضغط العالي هي الكيكا باسكال (GPa)

$$1 \text{ GPa} = 10^9 \text{ Pa}$$

$$= 10^9 \text{ N/m}^2$$

$$1\text{GPa} = 10^4 \text{ bar}$$

$$1\text{GPa} = 10 \text{ kbar}$$

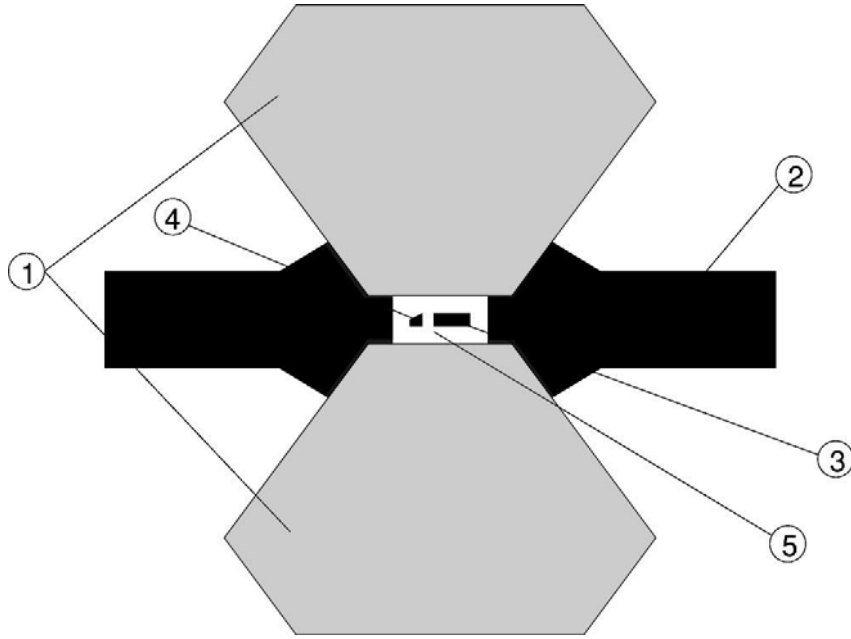
### High Pressure Production Methods (1-3-3) طرائق انتاج الضغط العالي (Sonntage *et al.*, 1998)

- 1 - طرائق الجاذبية
- 2 - طرائق المكبس
- 3 - طرائق موجة الصدمة
- 4 - الطرائق الترموديناميكية

### Diamond Anvil Cell (1-3-4) خلية سندان الماس (DAC)

إن تسليط الضغط العالي على العينات المختبرية ضمن منظومات مسيطر عليها يتم باستخدام أجهزة الضغط العالي مثل خلية سندان الماس للضغط العالي (Diamond Anvil Cell- DAC) التي تقع ضمن طرائق المكبس.

توفر خلية سندان الماس وسيلة مختبرية لدراسة المواد تحت ضغوط عالية مستقرة تتجاوز (100GPa) في ظروف امنة وغير معقدة نسبيا. لقد كانت بداية تطور خلية سندان الماس على يد كل من (Jamieson *et al.*, 1959 ; Weir *et al.*, 1959). الشكل (1-2) يوضح مخطط توضيحي للتركيب الاساس لخلية سندان الماس.



الشكل (1-2) مخطط توضيحي لخلية سندان الماس: 1- قطعتي الماس، 2- شريحة (وسادة)، 3- العينة، 4- مادة قياسية مثل الياقوت، 5- مانع ناقل للضغط (Mujica et al., 2003)

إن مبدأ عمل خلية سندان الماس، وجميع خلايا الضغط العالي بصورة عامة، يبقى واحداً، إذ يتم تسليط قوة  $F$  على مساحة صغيرة  $S$  للحصول على ضغط  $P=F/S$  الذي يمكن زيادة مقداره بتصغير مساحة سطح التماس. ويقاس الضغط بوحدات القوة مقسومة على وحدة المساحة .

إن العوائق التي تعترض تطور أجهزة الضغط العالي هي التشوهات والتكسرات التي تصيب المواد المكونة لهذه الاجهزة نتيجة الضغوط العالية المسلطة عليها، فحتى خلايا سندان الماس عالية الجودة التي يمكنها توليد وتحمل ضغوط عالية جدا بسبب صلابة مادة الماس، فإنها هي الاخرى لها حدود لتحمل الضغوط العالية المتزايدة.

توضع العينة في خلية سندان الماس بين مقطعين صقيلين من الماس يفصل بينهما شريحة معينة رقيقة (وسادة) مدمجة مسبقا مع قطعتي الماس، في وسط منطقة التقاء قطعتي الماس تتولد فجوة صغيرة تشكل حجرة الضغط (الكبسولة) التي توضع فيها العينة المراد تسليط الضغط عليها، تغمر العينة عادة بمائع يملأ حجرة الضغط (الكبسولة) ويعمل كوسط ناقل للضغط لضمان تسليط ضغط هيدروستاتيكي أو شبه هيدروستاتيكي متجانس على العينة.

إن نفاذية الماس للإشعاعات الكهرومغناطيسية على مدى واسع من ترددات الأشعة السينية والترددات فوق البنفسجية الى منطقة الترددات تحت الحمراء تتيح استخدام هذه الإشعاعات لدراسة العينات تحت الضغط العالي.

## Experimental challenges

## (1-3-5) المصاعب والعراقيل في الضغط العالي

تواجه عملية توليد وقياسات الضغط العالي بعض المصاعب والعراقيل التي يمكن تلخيصها بما يأتي :

### The pressurizing medium

### 1- الوسط الناقل للضغط

إن الوسط الناقل للضغط الذي يكون مائعاً له تأثير كبير على ظروف حجرة الضغط. ومن المفترض بهذا الوسط الناقل للضغط أن يبقى مائعاً تحت الضغوط العالية، لذا ينبغي اختيار مواد من قبيل زيت السيليكون، أو محاليل مثل خليط (4:1 ميثانول- ايثانول). ومع ذلك فإنه عند الضغوط المرتفعة جداً فإن مثل هذه المواد تتصلب، وعندئذٍ فإن الضغط داخل الحجرة لا يبقى هيدروستاتيكياً، فضلاً عن انه لا يكون متجانساً. وفي هذه الحالة سيكون من الصعوبة بمكان تحديد مقدار الضغط في الحجرة، فضلاً عن تأثير أنماط حيود الأشعة السينية. وإذا كان استخدام النتروجين أو الهيليوم أو الاركون السائل كوسط ناقل يزيد من امكانية تسليط ضغوط عالية جداً دون ان تتأثر هذه السوائل، الا ان استخدام مثل هذه السوائل يتطلب استخدام تقنيات معقدة تجعل التصاميم التجريبية تحت الضغط العالي اكثر تعقيداً.

### Coexistence of Phase

### 2- تواجد الأطوار المختلفة

إن تواجد اكثر من طور في الوقت الواحد يعد من الأمور الشائعة في تجارب الضغط العالي وعليه فإن نموذج الحيود يشتمل على ذروات متعددة تعود للأطوار المختلفة.

### The effect of microstructures(texture)

### 3- تأثيرات التراكيب المجهرية

إن نماذج الحيود لعينات المساحيق تكون معقدة نتيجة لتأثيرات التراكيب الدقيقة. يتم تسليط الاجهاد في خلية سندان الماس باتجاه أحد المحاور، لذلك فإن البلورات الميكروية اللاكروية (nonspherical micro crystals) تتراص بحيث تكون محاورها الاطول عمودية على محور الخلية. إن تأثير هذا الاتجاه هو الأكثر شيوعاً في عينات الضغط العالي ويمكنه تغيير شدة الذروات تغييراً جوهرياً. إن تأثير الخصائص الميكروية الأخرى كالعيوب الطبقيّة (planer defects) يمكن أن

يكون لها هي الأخرى تأثيرات مهمة إذ في هذه الحالات تفيد نماذج الحيود ببعدين في الكشف عن التأثيرات في التراكيب الميكروية، وتتيح فرصة لتصحيحها من خلال احتساب معدل حلقات الحيود .

#### 4- تموضع الذرات في المركبات الثنائية Site order in binary compounds

إن صعوبة تمييز أنماط تشتت الأشعة السينية للايزوميرات المتعددة تتطلب استخدام مطيافية امتصاص مدى واسع من الأشعة السينية (extended x-ray absorption fine structure – EXAFS) لدراسة التراكيب الدقيقة لغرض الحصول على معلومات عن تموضع الذرات في الايزوميرات المتعددة.

#### (1-3-6) قياس الضغوط العالية High pressures measurement

##### 1- المعايرة المباشرة للضغط Direct calibration of the pressure

يعرف الضغط المسلط على جسم بانه القوة العمودية المسلطة على وحدة المساحة. إلا أنه عند الاخذ بنظر الاعتبار انتقال القوة المسلطة على عينة ضمن أجهزة الضغط العالي لابد من مراعاة الاحتكاك والتشوه الذي يطرأ على المواد الذي تتركب منها هذه الخلايا. ففي خلايا الضغط العالي التي تعمل في الضغوط الهيدروستاتيكية التي تتراوح بين (0-10GPa) ، إذ يستخدم مكبس للضغط على سائل معبأ في أسطوانة (منظومة اسطوانة – مكبس piston - cylinder devices)، يمكن نمذجة سلوك الجهاز بدقة واحتساب الضغط داخل خلية الضغط العالي من خلال قياس الأثقال العيانية المسلطة على المكبس.

أما في خلايا سندان الماس أو أية خلايا ضغط عالٍ أخرى تعمل تحت ضغوط أكبر من (10 GPa) ، فإن القوة العيانية الخارجية المسلطة على الجهاز تنتقل إلى حجرة الضغط الداخلية ومن ثم إلى العينة بطريقة أكثر تعقيداً مما هو عليه الحال في الخلايا التي تعمل دون (10 GPa). إذ لا يمكن نمذجة عملية انتقال القوة في هذه الحالة نظراً لاعتماد انتقال القوة على تصحيح الجهاز والخواص الميكانيكية للمواد التي تتركب منها خلية الضغط .

وعلى الرغم من ان (Eremets, 1996) قد عرض حسابات تفصيلية معقدة لتوزيع الإجهاد في خلية سندان الماس الناتج عن أفعال خارجية، إلا أن هذا المدخل المباشر لحساب الضغط في خلية سندان الماس لم يكن عملياً.

## 2- معادلات الحالة والمقاييس الأولية

### Equations of State and Primary Scales

إن نقطة البداية في قياس الضغوط العالية هي في وضع مقاييس ضغط قابل للتحويل، فعند ادخال عينة صغيرة من مادة ما مثل ملح الطعام (NaCl) في منظومة اسطوانة - مكبس التي تحتوي قدرا لا بأس به من سائل ماء، وقياس تغير ثابت الشبيكة للعينة (NaCl) باستخدام تقنية حيود الأشعة السينية يمكننا انشاء علاقة بين ثابت الشبيكة والضغط المسلط، إن مثل هذا المقياس يمكن أن يستخدم لقياس الضغط في بعض الخلايا التي تعمل تحت ضغوط دون (10GPa).

أما بالنسبة للضغوط التي تتجاوز (10GPa) فإن القياسات تعتمد على معادلات الحالة أو على منحنيات الضغط كدالة لتغير الحجم  $P(V)$  لبعض المواد المرجعية مثل (Cu, Ag, Au, Pt أو NaCl)، ويطلق على معادلات الحالة هذه المقاييس الأولية أو معايير الضغط (pressure standard)، ونحصل عليها عادة من جميع بيانات ونتائج قياسات موجة الصدمة أو الموجات فوق الصوتية، كما ويمكن اشتقاقها واستخدامها كمعايير للضغط. ومن بين هذه المعادلات معادلة بيرخ مرنكهان Birch-Murnaghan ومعادلة لينارد جونز العامة المحورة mGL-J ومعادلة سينغ-كاو S-K ومعادلة باردين Bardeen ومعادلة كومر Kumar إذ ظهر لنا ان هذه المعادلات تعطي نتائج متوافقة مع البيانات التجريبية.

### The ruby technique

### 3- تقنية الياقوت

تستخدم في خلايا الضغط العالي مقاييس ضغط ثانوية تتم معايرتها بموجب مقاييس الضغط الشائعة، فمثلا تحت الضغوط العالية جدا لا يكون من السهل قياس معاملات الشبيكة للمادة المرجعية فتستخدم الفلورة لهذا الغرض. ويعد مقياس الياقوت واحداً من المقاييس الثانوية الشائعة، إذ تستخدم حبيبات ياقوت صغيرة ( $Al_2O_3:Cr^{+3}$ ) داخل الخلية ويتم تحفيز اشعاع الفلورة بواسطة الليزر أو بوسائل أخرى. إذ يتم احتساب التغير في الطول الموجي ( $\Delta\lambda$ ) لإشعاع الفلورة نتيجة للضغط العالي المسلط. (Piermarini *et al.*, 1975).

### 7-3-1) بعض تطبيقات الضغط العالي Some applications of high pressure

#### 1- حفظ الغذاء بتقنية الضغط العالي High pressure food preservation

معالجة الضغط العالي (HPP) (Jay *et al.*, 2009) أو المعالجة العالية للضغط الهيدروستاتيكي (HHP) (Rubio and Teresa, 2016) هي طريقة لحفظ وتعقيم الغذاء، إذ يتم

معالجة المنتج تحت ضغط مرتفع للغاية، مما يؤدي إلى تعطيل بعض الكائنات الحية الدقيقة والإنزيمات في الطعام. (Brown *et al.*, 2007) له تأثير محدود على الروابط التساهمية داخل المنتج الغذائي ، وبالتالي الحفاظ على كل من الجوانب الحسية والغذائية للمنتج (Indrawati *et al.*, 2008) ، سميت هذه التقنية على اسم العالم الفرنسي بلايز باسكال في القرن السابع عشر والذي تضمن عمله تفاصيل تأثير الضغط على السوائل. من خلال هذه التقنية، يمكن تطبيق أكثر من 50000 رطل لكل بوصة مربعة (3.4kbar ، 340MPa) لمدة 15 دقيقة تقريبًا، مما يؤدي إلى تعطيل الخميرة والعفن والبكتيريا (Brown and Corrie, 2007) ، (Moss and Ralph, 2007).

في عام 1992، حدثت ثورة كبيرة في HPP في اليابان من خلال إطلاق أول منتج معالج بالضغط العالي في السوق. المربي المعالج بالضغط الذي تم كشف النقاب عنه لأسواق المواد الغذائية من قبل شركة واحدة في البداية، أدى لاحقًا إلى النجاح الملحوظ لـ HPP عندما تبعتها ست شركات أخرى في السنوات الثلاث التالية.

على مدار الثلاثين عامًا الماضية، تم بالفعل تنفيذ المعالجة بالضغط العالي بشكل فعال في صناعة الأغذية إذ تم إجراء العديد من الدراسات لفهم التطورات الكبيرة في تقنية HPP، والتي أنتجت منتجات غذائية آمنة وطازجة ومغذية ومبتكرة (Elamin *et al.*, 2015).

## 2- استخدام الضغط العالي في العلوم الأساسية والمواد

### The use of high pressure in basic and materials science

فيما يأتي تطبيقان مهمان على الأقل لتكنولوجيا الضغط العالي في علوم المواد الأساسية:

(أ) لجمع مواد جديدة لا يمكن الوصول إليها بواسطة تقنيات أخرى.

(ب) لتحويل مادة معينة من مرحلة إلى أخرى.

ان الضغط مثل درجة الحرارة متغير ديناميكي حراري أساسي يمكن استخدامه لنقل المادة من حالة إلى أخرى. إن الممارس الأكثر إبداعًا والأكثر إنتاجًا لمتغير الضغط هو الطبيعة نفسها التي جلبت لآلاف السنين مجموعة هائلة من الضغوط ودرجات الحرارة لتحملها لإنشاء عنصر واحد من آخر، لتوليد النجوم أو تدميرها، لتعدين الهيدروجين داخل كوكب المشتري، لتحويل الجرافيت الأساسي إلى ماس جميل، وكذلك للمساعدة في توليد الظروف الملائمة للحياة نفسها على الأرض، وبشكل شبه مؤكد على الكواكب الأخرى. لذلك من الطبيعي أن تكون الوظيفة الأساسية لتجارب الضغط العالي هي فهم العالم من حولنا بشكل أفضل. في حين أن ظروف الضغط / درجة الحرارة في مركز الشمس ( $10^8$  K و  $10^5$  Mbar) تقع بعيدًا عن تلك التي يمكن الوصول إليها حاليًا في المختبر، فإن الظروف في مركز الأرض

(5Mbar) و (5000K) ، لحسن الحظ ، يمكن أن تكون مكررة. هذا هو عالم علم الجيوفيزياء. (Schilling, 1998)

### (1-3-8) تأثير الضغط العالي على مواد النانو

#### The effect of high pressure on Nano materials

من المتوقع أن تكون مواد النانو هي نقطة التحول للثورة التكنولوجية القادمة في إلكترونيات الحالة الصلبة، لتظهر على شكل مواد إنشائية جديدة، لتكون بمثابة أنظمة للتحكم في توصيل الأدوية ويكون لها تأثير كبير في جميع مجالات العلوم تقريباً. مواد النانو حساسة للغاية للمعاملات الخارجية مثل الضغط ودرجة الحرارة. تعتبر دراسة جسيمات النانو تحت ضغط مرتفع مدخلا واعدة لتوسيع نطاق مواد الحالة الصلبة المتاحة. تطبيقات الضغط لديها القدرة على استكشاف العديد من المسارات لتجميع مواد النانو أو تحويل الطور في طريقة مسيطر عليها وتشكل طريقاً فريداً للتطوير من المواد الجديدة (Sharma and Kumar, 2010).

مواد النانو البلورية ذات الحجم الجزيئي من 1 إلى 100nm هي ذات أهمية في الوقت الحالي في اكتشاف خواص جديدة وكيميائية للمواد التي قد تختلف عن تلك الخاصة بالمواد العيانية المقابلة. يُنظر إلى بلورات النانو عموماً على أنها تتكون من مكونين متميزين هيكلياً، مكون بلوري يتكون من بلورة مفردة صغيرة ذات اتجاه بلوري عشوائي وطبقة سطحية تتميز بجزء كبير من الذرات عند حدود الجسيمات. يسمح تطبيق الضغط، كما هو الحال بالنسبة للمواد العيانية، بالتعديل المستمر للتفاعل بين الذرات لعنصر النانو ويشكل أداة لا تقدر بثمن لاستكشاف التفاعلات الكيميائية الفيزيائية على مقياس النانو وارتباطها بالخصائص الفيزيائية ذات الأهمية. الخصائص الفيزيائية للمواد تعتمد بشدة على التركيب والمسافات بين الذرات. يمكن أن يغير الضغط العالي هذه المسافات، مما يعني أنه يمكننا دراسة العلاقات بين بنية وخصائص المواد. تحدث الانضغاطية العالية بسبب الضغط العالي. تحدث العديد من التأثيرات بسبب الضغط، مثل تأين الضغط، وتعديل الخواص الإلكترونية، وتغير الطور، والعديد من الظواهر في المجالات التطبيقية.

إن معرفة الخصائص الحرارية للمعادن في درجات الحرارة والضغط المرتفعين مطلوبة لفهم عمق باطن الأرض. الدراسة القائمة على معادلة الحالة عند الضغط المرتفع ودرجة الحرارة المرتفعة ذات أهمية أساسية لأنها تسمح بالاستكمال والاندراج الرياضي في المناطق التي لا تتوفر فيها البيانات التجريبية بشكل كافٍ، فهي تساعد في التخطيط لتجارب الضغط المرتفع المستقبلية وهي أيضاً مهمة في مقارنة تجارب الضغط العالي المستقر مع تجارب موجات الصدمة، إذ يكون علاج التأثير الحراري مهماً بشكل خاص. كما تمت دراسة الخصائص الفيزيائية والإلكترونية للمواد مع التغيير في حجم الجسيمات (Bhatt et al., 2013).

بسبب الضغط العالي على مواد النانو، تحدث كثير من الظواهر، مثل

(1) تحول المادة من حالة الى اخرى

(2) تحولات التفاعل بين عناصر النانو

(3) تعديل التفاعلات بين كائن نانو ووسيط ناقل الضغط.

بسبب هذه التطبيقات جذبت تأثيرات الضغط على مواد النانو انتباه الباحثين.

وبالتالي تم إجراء العديد من الدراسات التجريبية لفهم سلوك الضغط العالي لمواد النانو علاوة على ذلك الجهود النظرية مفقودة وبالتالي قد يكون من المفيد تقديم طريقة نظرية بسيطة لدراسة سلوك مواد النانو تحت الضغط العالي، وفي هذه الرسالة نقدم تحليلاً نظرياً بسيطاً لدراسة سلوك الانضغاط لأنظمة النانو ومقارنتها ببعض الصيغ السابقة. (Sharma and Kumar, 2010)

يمكن لدراسات الانضغاطية وانتقالات الطور التي يسببها الضغط لمواد النانو البلورية أن تحسن فهمنا لاستقرار المواد عند مقياس النانومتر. أجريت معظم أبحاث الضغط العالي على مواد النانو البلورية على أشباه الموصلات، على الرغم من الإبلاغ مؤخراً عن بعض الأعمال المتعلقة بالعوازل والمعادن. (Chandra and Kholiya, 2016)

## Previous Studies

### (1-4) الدراسات السابقة

تناولت العديد من الدراسات تأثير الضغط العالي على مواد النانو.

إذ قام (Balasubramanian *et al.*, 2004) بتحضير اسلاك وجسيمات النانو لنتريد الألمنيوم AIN المكعبي عن طريق الذوبان الناجم عن قوس البلازما (DC arc-plasma melting) للألمنيوم في محيط النتروجين - اركون.

في حين قام (Lu *et al.*, 2005) بتصنيع جسيمات النانو PbS وهذه الجسيمات كروية الشكل تقريباً، يبلغ قطر كل منها حوالي 5nm .

وقدم (Tripathi *et al.*, 2006) دراسة وعرض معادلات الحالة للمركبات من نوع IV-IV والتي صنفوا فيها معادلات الحالة الى ثلاث فئات أي حسب الخواص الميكانيكية والجهود بين الذرات والعلاقة المتبادلة بين المتغيرات الترموديناميكية الثلاث (P, V, T) .

وقام (Guisbiers and Buchailot, 2008) بدراسة الخصائص الميكانيكية الحرارية للبنى النانوية AIN، والتي تعد مادة واعدة لتطبيقات M/NEMS (الانظمة الكهرو ميكانيكية النانوية /الدقيقة) والتي يمكن استخدامها كمستشعرات (Sensors) في بعض السيارات إذ تعمل على نشر الوسائد الهوائية

لحماية السائق أثناء وقوع حادث. في حين قدم (Chandra *et al.*, 2008) دراسة نظرية لاستخدام صيغة التكامل لمعادلات الحالة (IFEOS) لدراسة مواد النانو في درجات الحرارة المرتفعة.

كما درس (Zhang *et al.*, 2009) الخواص الترموديناميكية لكالكوجينيدات الرصاص والتي هي PbTe, PbSe ومن ضمنها PbS من خلال التجارب على مدى العقود العديدة الماضية.

وحضر (Keller *et al.*, 2012) نتريد الألمنيوم باستخدام موجة الصدمة مع تركيب الملح الصخري ووضح أن انتقال الطور لتركيب الملح الصخري (rs) تم اكتشافه من قبل Kondo *et al.*, (1982).

وتم الحصول على أغشية رقيقة من نانو كبريتيد الرصاص المتبلور بالتوصيل الضوئي عن طريق ترسيب الحمام الكيميائي من قبل (Kotadiya *et al.*, 2012) إذ تظهر دراسات حيود الأشعة السينية (XRD) أن هذه الأغشية عبارة عن مكعب بلوري نانوي PbS بحجم بلوري 10nm. كشف مجهر القوة الذرية (AFM) ومجهر المسح الإلكتروني (SEM) أن الأغشية تتكون من حبيبات كروية بأحجام (100 – 200nm). وعرض (Singh *et al.*, 2012) معادلة حالة جديدة لحساب تأثير الضغط على تغير الحجم لمواد النانو.

وقدم (Singh & Kao, 2013) دراسة لمواد النانو تحت ضغط عالٍ لمجموعة من المواد مثل CdSe (4.2nm), Fe-Cu (14nm), Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (67, 37nm), Ni (20nm), Fe (10nm), CeO<sub>2</sub> وغيرها ومن بين هذه المواد نتريد الألمنيوم AlN في طور الفورتزاييت السداسي (10nm) وطور الملح الصخري المكعب بنفس الحجم. حيث دونوا في بحثهم هذا قيم معامل المرونة الحجمي ومشتقته وكانت على التوالي  $B_0 = 321, 359$  GPa و  $B'_0 = 4$ . وقام (Chandra and Kholiya, 2013) بدراسة اعتماد الحجم وتقنية النانو لـ PbS ولثلاث أحجام مختلفة (2.6, 5.4, 8.8nm)، إذ تمت دراسة تغير الحجم النوعي ومعامل المرونة الحجمي ومعامل التمدد النسبي مع الضغط وتدوين قيم كل من معامل المرونة الحجمي  $B_0 = (33.5, 46.51, 75)$  GPa و  $B'_0 = 4$  للأحجام المذكورة أعلاه على التوالي.

وتمكن (Bian *et al.*, 2014) من تحقيق الانضغاطية المرنة المعتمدة على الحجم ودرجة حرارة ديبياي لبلورات PbS النانوية المضغوطة في خلية سندان الماس وفحص الهيكل في وقت واحد باستخدام حيود الأشعة السينية القائمة على السنكروترون.

وتمت مراقبة النطاق الزمني بالمللي ثانية لتكوين الجسيمات النانوية PbS والنمو باستخدام موائع ميكروية تعتمد على القطيرات من قبل (Lignos *et al.*, 2015) إذ تم فحص الخواص الحركية الأولية (أقل من 1 ثانية) لتشكيل النقطة الكمومية لكبريتيد الرصاص (PbS) باستخدام منصة موائع ميكروية فريدة من نوعها تعتمد على القطيرات، مما يسمح بتحليل بصري عالي الإنتاجية وفي الوقت الفعلي للعملية التفاعلية بدقة زمنية بالمللي ثانية .

وقام ( Chandra and Kholiya, 2016 ) بدراسة انضغاطية عدد من المواد النانوية تحت الضغط العالي مثل  $Fe_2O_3, CeO_2, CuO, TiO_2, CNT, Al_2O_3, Ni$  (20nm) وغيرها وكانت من بين هذه المواد نانو كبريتيد الرصاص PbS وناونو AlN إذ كانت هذه الدراسة مبنية على أساس أن حاصل ضرب معامل التمدد النسبي مع معامل المرونة الحجمي يعطي كمية ثابتة اي ان  $\alpha B_T = Const.$

وقام (Knorr *et al.*, 2018) بدراسة انتقال الطور  $\alpha - \beta$  بالضغط العالي في كبريتيد الرصاص إذ تم استقصاء في سلوك الضغط العالي لـ PbS عن طريق حيود مسحوق الأشعة السينية المشتتة حتى ضغوط 6.8GPa .

كذلك كانت هناك دراسة من قبل (Patra *et al.*, 2019) في هيكل التحكم في ديناميكيات الترابط والمرونة وسلوك الضغط العالي للشبكات الفائقة لجسيمات النانو (NPSLs) ومنها كبريتيد الرصاص .

وقام (Mohamad *et al.*, 2020) بدراسة تأثير الجسيمات النانوية الدقيقة جدًا ودرجة الحرارة على الخواص الكهربائية والعزل الكهربائي لأغشية مركب البوليمر النانوي MC-PbS. وتمت تنمية أحجام الجسيمات الدقيقة جدًا من البنية النانوية لـ PbS داخل ميثيل سيليلوز (MC) باستخدام اختزال كيميائي بسيط في الموقع من محلول مائي ووجد ان الزيادة في تركيز PbS تؤدي إلى تعزيز كل من المعلمات الكهربائية والعازلة للبوليمر .

وقام (Al-suwaifi & Al-sheikh, 2021) بدراسة تأثير حجم جسيمات النانو على خصائص المرونة الحرارية لجسيمات نانو PbS تحت الضغط العالي .

## (1-5) الهدف من البحث

تهدف الرسالة الحالية الى دراسة تأثير الضغط العالي على سلوك بعض المواد النانوية، نانو كبريتيد الرصاص PbS بثلاث أحجام مختلفة (2.6, 5.4, 8.8nm) ونانو نتريد الالمنيوم AIN وعلى خصائصها الترموديناميكية (معامل المرونة الحجمي، معامل التمدد النسبي، الحجم النوعي) وذلك باستخدام معادلات حالة متنوعة (B-M, mGL-J, S-K, Bardeen, Kumar) بحيث تم مقارنة نتائج هذه المعادلات مع بعضها البعض ومع البيانات التجريبية للحصول على نتائج أفضل، فضلا عن دراسة تغير طاقة الفجوة لـ AIN العياني مع الضغط العالي.

الفصل الثاني

التفاصيل النظرية

Theoretical

Details

## Equation of State (EOS)

## (2-1) معادلة الحالة:

إن معادلة الحالة هي صيغة رياضية تصف الارتباط بين الخواص المتنوعة التي يمكن قياسها عياناً وللحالات الفيزيائية عادة ما تربط هذه العلاقة بين المتغيرات الديناميكية الحرارية مثل الحجم ودرجة الحرارة والضغط مع بعضها البعض.

في علم المواد عادة ما تسمى الخواص الفيزيائية بالخواص الميكانيكية ومن الأمثلة على الخواص الميكانيكية المرنة والصلابة والاجهاد والاستطالة الانفعال وغيرها . (Young, 2007)

تعطى معادلة الحالة للغاز المثالي بالعلاقة التالية :

$$PV = nRT \quad (2.1)$$

إذ أن

$P$  هو الضغط المطلق (Pa)،  $V$  الحجم ( $m^3$ )،  $n$  عدد المولات في الغاز (mole)،  $T$  درجة الحرارة المطلقة (K) و  $R$  الثابت العام للغاز وقيمته  $8.3145 \text{ J/mole} \cdot \text{K}$ .

إن معادلة الحالة توفر علاقة مفيدة بين المتغيرات الترموديناميكية المذكورة سابقاً والتي تساعدنا على فهم سلوك مواد النانو تحت تأثير الضغط العالي ودرجة الحرارة العالية. حتى الآن، سعى عدد من الباحثين (Singh and Kumar, 2004) عن صيغة بسيطة من EOS، والتي تحتوي على عدد قليل من المعلمات، يتم تحديد المعلمات باستخدام بيانات الضغط الجوي المتاحة مثل حجم التوازن  $V_0$ ، ومعامل المرونة الحجمي ( $B_0$ ) تحت الضغط الجوي الاعتيادي ودرجة حرارة الغرفة، ومشتقاته بالنسبة إلى الضغط ( $B'_0$ ) و ( $B''_0$ ). تُعرف EOS التي تعبر عن العلاقة بين الضغط والحجم عند درجة حرارة ثابتة باسم (Isothermal EOS)، وتُعرف تلك التي تربط بين الحجم ودرجة الحرارة عند ضغط ثابت باسم (Isochoric EOS)، أما التي تربط بين درجة الحرارة والضغط عند الحجم الثابت باسم (Isobaric EOS) متساوية الحجم. معادلة الحالة من الرتبة الثانية عند ثبوت درجة الحرارة EOS هي دالة لمعلمتين قابلتين للقياس (سوية عند  $P=0$ )، بحيث يكون  $P = f(\eta, B_0)$  إذ أن  $\eta = \frac{V}{V_0}$  تسمى الانضغاطية و  $B_0$  معامل المرونة الحجمي عند الضغط الجوي وكذلك فإن معادلة الحالة عند ثبوت درجة الحرارة من الرتبة الثالثة والرابعة لها الصيغ  $P = f(B_0, \eta, B'_0, B''_0)$  و  $P = f(B_0, \eta, B'_0)$  على التوالي. بذلت محاولات مختلفة في الماضي لتطوير أشكال تجريبية وظاهرية لمعادلة الحالة للمواد .

يمكن تصنيف معادلة الحالة للمواد الصلبة إلى ثلاثة أصناف :

- 1-معادلة الحالة المبنية على اساس الخواص الميكانيكية للمواد الصلبة مثل معادلة بيرخ -مرنكهان وثومسون واولمان - بانكوف (Ullmann and Pan'kov, 1976).
- 2-معادلة الحالة المبنية على الجهود بين الذرات مثل معادلة باردين ومعادلة لينارد- جونس المحورة.
- 3-معادلة الحالة المبنية على العلاقات المفترضة بين المتغيرات الترموديناميكية مثل معادلة بيرخ-مرنكهان. (Tripathi et al., 2006)

## (2-2) معادلات الحالة للمواد الصلبة

تم في هذه الرسالة استخدام عدد من معادلات الحالة في الحسابات النظرية لمواد النانو PbS وAIN، وهذه المعادلات هي:

### (2-2-1) معادلة الحالة لـ بيرخ - مرنكهان (B-M EOS)

معادلة الحالة المعروفة على نطاق واسع، والمبنية على افتراض أن معامل المرونة الحجمي عند ثبوت درجة الحرارة يعتبر كدالة خطية للضغط عند اي درجة حرارة هي معادلة بيرخ - مرنكهان. (Birch, 1947)

في معادلات الحالة EOSs عند ثبوت درجة الحرارة، يتم التعبير عن الضغط ( $P$ ) كدالة للحجم ( $V$ ). ومن الديناميكا الحرارية، فان الضغط هو مشتقة دالة هيلمهولتز ( $F$ ) بالنسبة الى الحجم ، و على النحو التالي: (Katsura and Tange, 2019)

$$P = -V \left( \frac{dF}{dV} \right)_T \quad (2.2)$$

يجب أن تزداد الطاقة الحرة Helmholtz للمادة مع الضغط ويمكن التعبير عنها بمتسلسلة اويلر Eulerian المحدودة:

$$F = a_0 + a_1 f + a_2 f^2 + \dots \quad (2.3)$$

يمكن التعبير عن معادلة بيرخ- مرنكهان من الدرجة الثانية كالتالي:

$$P_{(B-M)} = \frac{3B_0}{2} [\eta^{-7/3} - \eta^{-5/3}] \quad (2.4)$$

اشتق بيرخ هذه المعادلة من نظرية مرنكهان للمطاوعة المحدودة، على فرض أن طاقة الإجهاد لجسم مرن تتناسب من الدرجة الأولى مع مربع المطاوعة، (Gilvarry, 1957) . تحتوي هذه المعادلة على صيغة فروق وأسس سالبة. لو اخذنا الفرق بين الأسس لوجدنا الناتج

$$\frac{-7}{3} - \frac{-5}{3} = -\frac{2}{3}.$$

وهي قيمة الأس نفسه الموجود في المعادلة التالية والتي تمثل سلسلة اويلر المحدودة

$$f = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-2/3} - 1 \right] \quad (2.5)$$

يمكن التعبير عن معادلة بيرخ - مرنكهان من الدرجة الثالثة كالتالي:

$$P_{B-M} = \frac{3B_0}{2} \left[ \eta^{-7/3} - \eta^{-5/3} \right] \left[ 1 + \frac{3}{4} (B_0' - 4) (\eta^{-2/3} - 1) \right] \quad (2.6)$$

إذ أن

$P_{B-M}$  الضغط بحساب معادلة الحالة لـ (بيرخ - مرنكهان)

$B_0$  معامل المرونة الحجمي عندما يكون الضغط صفر (عند درجة حرارة الغرفة)

$B_0'$  مشتقة معامل المرونة الحجمي نسبة الى الضغط

$\eta$  هي النسبة بين الحجم المولي عند ضغط معين ( $V$ ) والحجم عند الضغط المسلط صفر ( $V_0$ ).

### (2-2-2) معادلة الحالة المحورة لـ لينارد - جونس (mL-J EOS):

يُشار إلى أن هذه المعادلة ليست تحليلية للحجم كما أن الأسس المحتوات في الدالة المحتملة تأخذ قيما عشوائية عند جعل الأسس تحقق العلاقة عندها تصبح هذه العلاقة تحليلية للحجم باستخدام معلمين ويمكن التعبير عنها كما يأتي: (Jiuxun, 2005)

$$P_{mL-G} = \frac{B_0}{n} \eta^{-n} \left[ \eta^{-n} - 1 \right] \quad (2.7)$$

إذ أن

$$n = \frac{1}{3} B_0' \quad (2.8)$$

### (2-2-3) معادلة الحالة لـ سينغ - كاو (S - K EOS)

اشتق (Singh *et al.*, 2012) معادلة حالة بسيطة واستخدموها لدراسة التمدد الحجمي لبعض مواد النانو تحت ضغط عالٍ. فقط معلما ادخال ونعني معامل التمدد الحجمي ومشتقته الاولى بالنسبة للضغط مطلوبين لإجراء الحسابات.

لقد عرض (Singh & Kao, 2013) معادلة باستخدام نظرية معادلة الحالة لـ (كرونايشن) والتي تعرف الضغط كما يأتي:

$$P = -\frac{\partial U}{\partial V} + P_{th} \quad (2.9)$$

حيث  $P_{th}$  الضغط الحراري و  $U$  الطاقة الكامنة للشبيكة

ويعبر عنها بالمعادلة التالية:

$$P_{S-K} = B_0[1-\eta] + \frac{B_0(B'_0+1)}{2}[1-\eta]^2 \quad (2.10)$$

### (2-2-4) معادلة الحالة لـ باردين (Bardeen EOS)

تم اشتقاق معادلة باردين من دالة الجهد  $E(r)$  (Bardeen, 1938)

$$E(r) = \frac{a}{r^3} + \frac{b}{r^2} - \frac{c}{r} \quad (2.11)$$

إذ أن  $a, b, c$  هي ثوابت و  $r$  هو الموضع .

يمكن كتابة هذه المعادلة بالصيغة التالية: (Butler & Anderson, 1978):

$$P_{Bar} = 3B_0[\eta^{-5/3} - \eta^{-4/3}] \left[ 1 + \frac{3}{2}(B'_0 - 3)(\eta^{-1/3} - 1) \right] \quad (2.12)$$

### (2-2-5) معادلة الحالة لـ كومر (Kumar EOS)

حصل كومر (Kumar, 1995) و (Kumar, 1996) على نوع مقلوب من معادلة الحالة (المعتمدة على درجة الحرارة) تحتوي على حد لدرجة الحرارة وبالتالي فهو صالح لدرجة حرارة الغرفة حتى درجة حرارة الانصهار، وعند ضغط يتفاوت من الضغط الجوي حتى ضغط تحول الطور .

تعطى معادلة كومر العامة بالعلاقة التالية :

$$\frac{V}{V_0} = 1 - \frac{1}{A} \ln \left[ 1 + \frac{A}{B_0} [P - \alpha_0 B_0 (T - T_0)] \right] \quad (2.13)$$

أو

$$P = \frac{B_0}{A} \left[ \exp \left\{ A \left( 1 - \frac{V}{V_0} \right) - 1 \right\} \right] + \alpha_0 B_0 (T - T_0) \quad (2.14)$$

إذ أن  $A = \delta_T + 1$  وأن  $(\delta_T)$  معامل اندرسون كرونائشن، و  $(\alpha_0)$  معامل التمدد الحجمي الحراري عند درجة حرارة الغرفة  $(T_0)$  وان مقياس اندرسون - كرونائشن يعطى بالعلاقة التالية :

(Singh and Kumar, 2004)

$$\delta_T = \delta_{T_0} \left( \frac{T}{T_0} \right)^s \cong B_0' \quad (2.15)$$

إذ أن  $\delta_{T_0}$  هو قيمة معامل اندرسون - كرونائشن عند درجة حرارة الغرفة  $(T_0)$  و  $s$  هي معلمة لدائن حرارية عديمة الأبعاد تبلغ قيمتها حوالي (1.4-1.5)، كما ورد في (Anderson *et al.*, 1992) و (Anderson and Isaak, 1993) لبعض الهاليدات القلوية (من درجة حرارة الغرفة إلى درجة حرارة الذوبان). في هذه الدراسة نأخذ  $s = 1.5$

لو افترضنا أن درجة الحرارة عند ضغط معين تساوي درجة حرارة الغرفة أي أن  $(T = T_0 = 300K)$  فان المعادلة (2.13) تصبح :

$$\frac{V}{V_0} = 1 - \frac{1}{A} \ln \left[ 1 + \frac{A}{B_0} P \right] \quad (2.16)$$

أو

$$P_{Kum} = \frac{B_0}{A} \left[ \exp A \left( 1 - \frac{V}{V_0} \right) - 1 \right] \quad (2.17)$$

وهذه المعادلة هي علاقة الضغط ( $P$ ) مع الانضغاطية ( $\frac{V}{V_0}$ ) عند درجة حرارة ثابتة ولذلك فإن هذه المعادلة تسمى معادلة الحالة عند ثبوت الحرارة وتسمى معادلة كومر الخاصة .

## Bulk Modulus

### (2-3) معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ )

هو النسبة بين الإجهاد الحجمي (الإجهاد الناتج من تأثير ضغط هيدروستاتيكي) الى المطاوعة الحجمية ووحدة قياسه هي نفس وحدة قياس الضغط (GPa)، ويعبر عنه بالمعادلة التالية :

(Aritan, 2006)

$$B = - \frac{\Delta P}{\Delta V / V_0} \quad (2.18)$$

أو

$$B_T = -V \frac{\partial P}{\partial V} \quad (2.19)$$

إذ أن المطاوعة الحجمية هي النسبة بين التغير في الحجم الى الحجم الاصيلي وهي كمية خالية من الوحدات.

الإشارة السالبة تدل على أن كل زيادة في الضغط يقابله نقصان في الحجم ويكون دائماً موجب والإشارة السالبة تؤخذ بنظر الاعتبار.

### (2-4) تغير معامل المرونة الحجمي تحت الضغط العالي

لقد تم حساب الصيغ الرياضية لمعامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) تحت تأثير الضغط العالي باستخدام معادلات حالة مختلفة على اساس تعريف معامل المرونة الحجمي المعطى في معادلة (2.19) .

#### (2-4-1) تغير معامل المرونة الحجمي مع الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ

#### بيرخ-مرتكهان (B-M EOS)

يمكن إعادة صياغة المعادلة (2.6) لتصبح

$$P_{B-M} = \frac{3}{2} B_0 \left[ \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-7/3} + \frac{3}{4} (B'_0 - 4) \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-9/3} - \frac{3}{4} (B'_0 - 4) \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-7/3} - \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-5/3} - \frac{3}{4} (B'_0 - 4) \times \right. \\ \left. \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-7/3} + \frac{3}{4} (B'_0 - 4) \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-5/3} \right] \quad (2.20)$$

بحساب مشتقة الضغط بالنسبة الى الحجم

$$\frac{dP_{(B-M)}}{dV} = \frac{3}{2} B_0 \left[ -\frac{7}{3} \left( \frac{V^{-7/3-1}}{V_0^{-7/3}} \right) - \frac{9}{4} (B'_0 - 4) \left( \frac{V^{-3-1}}{V_0^{-3}} \right) + \frac{7}{4} (B'_0 - 4) \left( \frac{V^{-7/3-1}}{V_0^{-7/3}} \right) + \frac{5}{3} \left( \frac{V^{-5/3-1}}{V_0^{-5/3}} \right) + \frac{7}{4} \right. \\ \left. (B'_0 - 4) \left( \frac{V^{-7/3-1}}{V_0^{-7/3}} \right) - \frac{5}{4} (B'_0 - 4) \left( \frac{V^{-5/3-1}}{V_0^{-5/3}} \right) \right] \quad (2.21)$$

$$\frac{dP_{(B-M)}}{dV} = \frac{3}{2} B_0 \left[ -\frac{7}{3} \left( \frac{V^{-7/3-1}}{V_0^{-7/3}} \right) - \frac{9}{4} (B'_0 - 4) \left( \frac{V^{-3-1}}{V_0^{-3}} \right) + \frac{7}{2} (B'_0 - 4) \left( \frac{V^{-7/3-1}}{V_0^{-7/3}} \right) + \frac{5}{3} \left( \frac{V^{-5/3-1}}{V_0^{-5/3}} \right) \right. \\ \left. - \frac{5}{4} (B'_0 - 4) \left( \frac{V^{-5/3-1}}{V_0^{-5/3}} \right) \right] \quad (2.22)$$

بتعويض المعادلة (2.22) في المعادلة (2.19) نحصل على

$$B_{T(B-M)} = -V \left( \frac{dP_{B-M}}{dV} \right)_T = \frac{3}{2} B_0 \left[ \frac{7}{3} \eta^{-7/3} - \frac{5}{3} \eta^{-5/3} + \frac{9}{4} (B'_0 - 4) \eta^{-3} - \frac{7}{2} (B'_0 - 4) \eta^{-7/3} + \frac{5}{4} \right] \times (B'_0 - 4) \eta^{-5/3} \quad (2.23)$$

(2-4-2) تغير معامل المرونة الحجمي مع الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ

لينارد جونز المحورة (mL-J EOS)

يمكن كتابة معادلة (2.7) بالشكل التالي

$$P_{mL-J} = \frac{B_0}{n} \left[ \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-2n} - \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-n} \right] \quad (2.24)$$

وبنفس الطريقة بأخذ مشتقة معادلة (2.24) نسبة الى الحجم

$$\frac{dP_{mL-J}}{dV} = \frac{B_0}{n} \left[ -2n \frac{V^{-2n-1}}{V_0^{-n}} + n \frac{V^{-n-1}}{V_0^{-n}} \right] \quad (2.25)$$

$$B_{T(mL-J)} = -V \frac{dP_{mL-J}}{dV} \quad (2.26)$$

بتعويض معادلة (2.25) في معادلة (2.26) نحصل على

$$B_{T(mL-J)} = \frac{B_0}{n} \left[ 2n \frac{V^{-2n}}{V_0^{-2n}} - n \frac{V^{-n}}{V_0^{-n}} \right] \quad (2.27)$$

$$B_{T(mL-J)} = B_0 \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-n} \left[ 2 \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-n} - 1 \right] \quad (2.28)$$

**(2-4-3) تغير معامل المرونة الحجمي مع الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ سينغ**

**– كاو (Singh – Kao EOS)**

بإعادة صياغة معادلة سينغ-كاو، معادلة (2.10) بعد استخدام قانون مربع الحدانية بالشكل التالي

$$P_{S-K} = B_0 \left[ 1 - \frac{V}{V_0} \right] + \frac{B_0(B'_0 + 1)}{2} \left( 1 - 2 \frac{V}{V_0} + \frac{V^2}{V_0^2} \right) \quad (2.29)$$

نحصل على

$$P_{S-K} = B_0 - \frac{B_0 V}{V_0} + \frac{B_0(B'_0 + 1)}{2} - B_0(B'_0 + 1) \frac{V}{V_0} + \frac{B_0(B'_0 + 1)}{2} \frac{V^2}{V_0^2} \quad (2.30)$$

يمكن ايجاد معامل المرونة الحجمي حسب معادلة سينغ-كاو بأخذ مشتقة المعادلة أعلاه

$$\frac{dP_{S-K}}{dV} = -\frac{B_0}{V_0} - \frac{B_0(B'_0 + 1)}{V_0} + B_0(B'_0 + 1) \frac{V}{V_0^2} \quad (2.31)$$

بما ان

$$B_{T(S-K)} = -V \frac{dP_{S-K}}{dV} \quad (2.32)$$

بتعويض م (2.31) في م (2.32) ينتج

$$B_{T(S-K)} = B_0 \frac{V}{V_0} + B_0 (B'_0 + 1) \frac{V}{V_0} - B_0 (B'_0 + 1) \frac{V^2}{V_0^2} \quad (2.33)$$

$$B_{T(S-K)} = B_0 \frac{V}{V_0} \left[ 1 + (B'_0 + 1) - (B'_0 + 1) \frac{V}{V_0} \right] \quad (2.34)$$

بالتالي نجد أن

$$B_{T(S-K)} = B_0 \frac{V}{V_0} \left[ 1 + (B'_0 + 1) \left( 1 - \frac{V}{V_0} \right) \right] \quad (2.35)$$

#### (2-4-4) تغير معامل المرونة الحجمي مع الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ باردين (Bardeen EOS)

يمكن كتابة معادلة باردين، معادلة (2.12) بعد فك الأقواس كما يأتي:

$$P_{Bar} = 3B_0 \left[ \left( \frac{V^{-5/3}}{V_0^{-5/3}} - \frac{V^{-4/3}}{V_0^{-4/3}} \right) \left( 1 + 1.5(B'_0 - 3) \frac{V^{-1/3}}{V_0^{-1/3}} - 1.5(B'_0 - 3) \right) \right] \quad (2.36)$$

$$P_{Bar} = 3B_0 \left[ \frac{V^{-5/3}}{V_0^{-5/3}} + 1.5(B'_0 - 3) \frac{V^{-2}}{V_0^{-2}} - 1.5(B'_0 - 3) \frac{V^{-5/3}}{V_0^{-5/3}} - \frac{V^{-4/3}}{V_0^{-4/3}} - 1.5(B'_0 - 3) \frac{V^{-5/3}}{V_0^{-5/3}} \right. \\ \left. + 1.5(B'_0 - 3) \frac{V^{-4/3}}{V_0^{-4/3}} \right] \quad (2.37)$$

$$P_{Bar} = 3B_0 \left[ \frac{V^{-5/3}}{V_0^{-5/3}} + 1.5(B'_0 - 3) \frac{V^{-2}}{V_0^{-2}} - 3(B'_0 - 3) \frac{V^{-5/3}}{V_0^{-5/3}} - \frac{V^{-4/3}}{V_0^{-4/3}} + 1.5(B'_0 - 3) \frac{V^{-4/3}}{V_0^{-4/3}} \right] \quad (2.38)$$

الآن بأخذ المشتقة

$$\frac{dP_{Bar}}{dV} = 3B_0 \left[ -\frac{5}{3} \frac{V^{-5/3-1}}{V_0^{-5/3}} + \frac{4}{3} \frac{V^{-4/3-1}}{V_0^{-4/3}} - 2 \times 1.5(B'_0 - 3) \frac{V^{-2-1}}{V_0^{-2}} + 5(B'_0 - 3) \frac{V^{-5/3-1}}{V_0^{-5/3}} - 2(B'_0 - 3) \frac{V^{-4/3-1}}{V_0^{-4/3}} \right] \quad (2.39)$$

وبما أن

$$B_{T(Bar)} = -V \frac{dP_{Bar}}{dV} \quad (2.40)$$

فإن

$$B_{T(Bar)} = 3B_0 \left[ \frac{5}{3} \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-5/3} - \frac{4}{3} \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-4/3} + 3(B'_0 - 3) \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-2} - 5(B'_0 - 3) \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-5/3} + 2(B'_0 - 3) \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-4/3} \right] \quad (2.41)$$

#### (2-4-5) تغير معامل المرونة الحجمي مع الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ كومر (Kumar EOS)

إن معادلة معامل المرونة الحجمي ذات النوع المقلوب، (أي المعتمدة على درجة الحرارة)، يمكن صياغتها من معادلة الحالة العامة لكومر معادلة (2.13) بالشكل التالي (Alkammash, 2013)

$$B_{T(Kum)} = B_0 \left[ 1 - \frac{1}{A} \ln \left\{ 1 + \frac{AP}{B_0} - A\alpha_0(T - T_0) \right\} \left\{ 1 + \frac{AP}{B_0} - A\alpha_0(T - T_0) \right\} \right] \quad (2.42)$$

ولكن ما يهمنا هو إيجاد معامل المرونة الحجمي عند ثبوت درجة الحرارة وذلك من معادلة كومر الخاصة

$$(T = T_0) \text{ أي على فرض أن} \quad (2.17)$$

$$B_{T(Kum)} = -V \frac{dP_{(Kum)}}{dV} \quad (2.43)$$

بإيجاد مشتقة معادلة (2.17)

$$\frac{dP_{(Kum)}}{dV} = \frac{B_0}{A} \left[ -\frac{A}{V_0} \exp \left\{ A \left( 1 - \frac{V}{V_0} \right) \right\} \right] \quad (2.44)$$

$$\frac{dP_{(Kum)}}{dV} = -\frac{B_0}{V_0} \left[ \exp \left\{ A \left( 1 - \frac{V}{V_0} \right) \right\} \right] \quad (2.45)$$

والان بتعويض معادلة (2.45) في معادلة (2.43) نحصل على

$$B_{T(Kum)} = B_0 \frac{V}{V_0} \left[ \exp \left\{ A \left( 1 - \frac{V}{V_0} \right) \right\} \right] \quad (2.46)$$

### (2-5) معامل التمدد النسبي الحراري عند ثبوت درجة الحرارة $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$

التمدد الحراري هو خاصية للمادة إذ يوجد ميل لزيادة الحجم بسبب زيادة درجة الحرارة، عندما يتم تسخين مادة ما، تبدأ جزيئاتها في التحرك أكثر وبالتالي تحافظ عادةً على متوسط فصل أكبر، أما المواد التي تنقلص مع زيادة درجة الحرارة نادرة. هذا التأثير محدود الحجم ويحدث فقط في نطاقات درجات حرارة محدودة. تسمى درجة التمدد الحراري لمادة مقسومة على التغير في درجة الحرارة بمعامل التمدد الحراري للمادة وتتغير مع درجة الحرارة.

يصف معامل التمدد الحراري كيف يتغير حجم شيء ما مع تغير درجة الحرارة. على وجه التحديد، يقيس التغير النسبي في الحجم عندما تتغير درجة الحرارة بدرجة واحدة تحت ضغط ثابت.

إذا توفرت معادلة الحالة، فيمكن استخدامها للتنبؤ بقيم التمدد الحراري في جميع درجات الحرارة والضغط المطلوبة (Paul et al., 2008).

في هذه الرسالة تم تقييم معامل التمدد الحراري النسبي  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$ ، وهو النسبة بين معامل التمدد عند ضغط معين ومعامل التمدد عند الضغط الجوي، تحت ضغط عالٍ باستخدام معادلات حالة مختلفة EOSs على النحو التالي:

1- حسب معادلة بيرخ - مرنكهان فإن معامل التمدد النسبي الحراري

$$\left( \frac{\alpha(P)}{\alpha_0} \right)_{B-M} = \frac{B_0}{B_{T(B-M)}} \quad (2.47)$$

بتعويض معادلة (2.23) في معادلة (2.47) ينتج

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{B-M} = \frac{2}{3} \left[ \frac{7}{3} \eta^{-7/3} - \frac{5}{3} \eta^{-5/3} + \frac{9}{4} (B'_0 - 4) \eta^{-3} - \frac{7}{2} (B'_0 - 4) \eta^{-7/3} + \frac{5}{4} (B'_0 - 4) \eta^{-5/3} \right]^{-1} \quad (2.48)$$

2- حسب معادلة لينارد-جونس المحورة فإن معامل التمدد النسبي الحراري

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{mL-J} = \frac{B_0}{B_{T(mL-J)}} \quad (2.49)$$

وبتعويض معادلة (2.28) في معادلة (2.49) ينتج

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{mL-J} = \eta^{4/3} \times [2\eta^{-4/3} - 1]^{-1} \quad (2.50)$$

3- حسب معادلة سينغ – كاو فإن معامل التمدد النسبي الحراري

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{S-K} = \frac{B_0}{B_{T(S-K)}} \quad (2.51)$$

وبتعويض معادلة (2.35) في معادلة (2.51) ينتج

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{S-K} = [\eta[1 + (1 + B'_0)(1 - \eta)]]^{-1} \quad (2.52)$$

4- حسب معادلة باردين يُعطى معامل التمدد النسبي الحراري بالعلاقة التالية

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{Bar} = \frac{B_0}{B_{T(Bar)}} \quad (2.53)$$

وبتعويض معادلة (2.41) في معادلة (2.53) ينتج

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{Bar} = \frac{1}{3} \left[ \frac{5}{3} \eta^{-5/3} - \frac{4}{3} \eta^{-4/3} + (B'_0 - 3) (3\eta^{-2} - 5\eta^{-5/3} + 2\eta^{-4/3}) \right]^{-1} \quad (2.54)$$

5- واخيرا حسب معادلة كومر فان

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{Kum} = \frac{B_0}{B_{T(Kum)}} \quad (2.55)$$

بتعويض المعادلة (2.46) في المعادلة (2.55) نحصل على

$$\left( \frac{\alpha(P)}{\alpha_0} \right)_{Kum} = \eta^{-1} [\exp\{A(1-\eta)\}]^{-1} \quad (2.56)$$

## (2-6) تغير فجوة الطاقة تحت الضغط العالي

### Variation of Energy Gap Under High Pressure

يعبر عن تغير فجوة الطاقة لأشباه الموصلات تحت الضغط العالي بالصيغة *Levinshtein et al.*, (2001)

$$E_g(P) = E_g(0) + \beta P$$

إذ أن  $E_g(0)$  هي قيمة فجوة الطاقة عند  $P = 0, T = 0$ .

$\beta$  معامل الضغط  $\frac{dE_g}{dP}$  (pressure coefficient)

من المعروف ان فجوة الطاقة في اشباه الموصلات تكون اكبر منها في الموصلات واقل منها في العوازل. فعند درجات الحرارة العالية تكون هذه المواد موصلة حيث تنتقل الشحنات الحرة (الالكترونات) من حزمة التكافؤ الى حزمة التوصيل عبر فجوة الطاقة هذه مخلفة ورائها فجوة في حزمة التكافؤ. بينما عند درجات الحرارة الاعتيادية فتكون غير موصلة بمعنى اخر تتصرف وكأنها مواد عازلة .

## الفصل الثالث

حساب نانوكبريتيد الرصاص (Nano  
PbS) تحت الضغط العالي

*Calculation of  
Nano PbS under  
high pressure*

## الفصل الثالث

### حساب نانو كبريتيد الرصاص (Nano PbS) تحت الضغط العالي

#### Preamble

#### (3-1) تمهيد

تم في هذا الفصل حساب تغير كل من الحجم النوعي  $\frac{V}{V_0}$ ، معامل المرونة الحجمي عند ثبوت درجة الحرارة  $B_T$ ، معامل التمدد النسبي الحراري عند ثبوت درجة الحرارة  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$ ، تحت الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة بيرخ - مرنكهان، لينارد جونس المحورة، سينغ - كاو، بارددين وكومر لجسيمات النانو PbS لثلاث احجام مختلفة (2.6, 5.4, 8.8) nm .

#### (3-2) نانو PbS

كبريتيد الرصاص مركب غير عضوي له الصيغة الكيميائية PbS ويُعرف أيضًا باسم galena ، وهو خام رئيسي ومركب مهم للرصاص. يعتبر كبريتيد الرصاص سامًا إذا تم تسخينه ليتحلل، مما يؤدي إلى تكوين أكاسيد الرصاص والكبريت.

لكبريتيد الرصاص تطبيقات في ما يلي: كواشف في الاجهزة الالكترونية الضوئية التي تعمل في نطاق الأشعة تحت الحمراء، فقد أظهر (Jahromi and Moaddel, 2019) أن كبريتيد الرصاص يمكن أن يكون أيضًا أحد أشباه الموصلات المرشحة للنبائط الضوئية في الأشعة فوق البنفسجية، تطبيقات الصور البصرية، معدل خاصية الانزلاق المستخدم في صناعة الاحتكاك لتعزيز التوصيل الحراري وتنظيم معامل الاحتكاك، فجوة الطاقة ضيقة تبلغ 0.37eV.

الجدول (3-1) يعرض قيم معامل المرونة الحجمي لنانو كبريتيد الرصاص  $B_0$  ومشتقة معامل المرونة الحجمي  $B'_0$ ، بأحجام (2.6, 5.4, 8.8) nm عند درجة حرارة الغرفة وتحت الضغط الجوي الاعتيادي (Chandra and Kholiya, 2013).

الجدول (3-1): قيم معامل المرونة الحجمي لنانو كبريتيد الرصاص  $B_0$  ومشتقة معامل المرونة الحجمي  $B'_0$ ، بأحجام (2.6, 5.4, 8.8) nm عند درجة حرارة الغرفة وتحت الضغط الجوي الاعتيادي.

Parameter	Size in nm			Ref.
	2.6	5.4	8.8	
$B_0$	33.5	46.51	75	Chandra and Kholiya, 2013
$B'_0$	4.0	4.0	4.0	

(3-3) حساب تغير الحجم النوعي  $\left(\frac{V}{V_0}\right)$  للنانو (2.6, 5.4, 8.8)nm PbS تحت تأثير الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة المختلفة

باستخدام معادلات الحالة:

(Birch-Murnaghan EOS)( Birch, 1947)

(i) معادلة الحالة بيرخ - مرنكهان

$$P_{B-M} = \frac{3B_0}{2} \left[ \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-7/3} - \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-5/3} \right] \left[ 1 + \frac{3}{4}(B'_0 - 4) \left\{ \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-2/3} - 1 \right\} \right] \quad (3.1)$$

(m L-J EOS)(Jiuxun, 2005)

(ii) معادلة الحالة لينارد جونز المحورة

$$P_{mL-G} = \frac{B_0}{n} \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-n} \left[ \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-n} - 1 \right] \quad (3.2)$$

إذ أن

$$n = \frac{1}{3} B'_0 \quad (3.3)$$

(Singh-Kao EOS)(Singh & Kao, 2013)

(iii) معادلة الحالة سينغ-كاو

$$P_{S-K} = B_0 \left[ 1 - \left( \frac{V}{V_0} \right) \right] + \frac{B_0(B'_0 + 1)}{2} \left[ 1 - \left( \frac{V}{V_0} \right) \right]^2 \quad (3.4)$$

(Bardeen EOS)(Bardeen, 1938)

(iv) معادلة الحالة باردين

$$P_{Bar} = 3B_0 \left[ \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-5/3} - \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-4/3} \right] \left[ 1 + \frac{3}{2}(B'_0 - 3) \left\{ \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-1/3} - 1 \right\} \right] \quad (3.5)$$

(Kumar EOS)(Kumar, 1995, 1996)

(v) معادلة الحالة كومر

$$P_{Kum} = \frac{B_0}{A} \left[ \exp \left\{ A \left( 1 - \frac{V}{V_0} \right) - 1 \right\} \right] \quad (3.6)$$

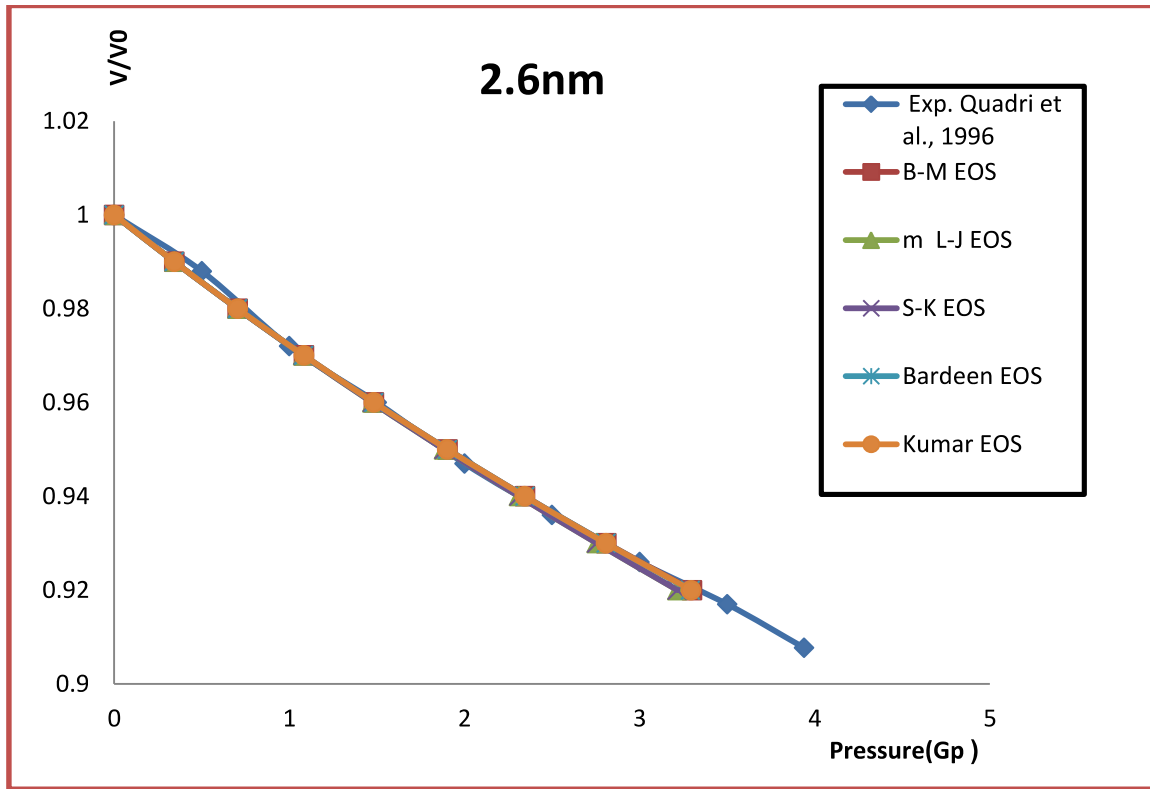
وتعويض قيم  $B_0$  و  $B'_0$  من الجدول (3-1) في معادلات الحالة المختلفة (3.1, 3.2, 3.4, 3.5, 3.6).  
تم الحصول على تغير  $\frac{V}{V_0}$  تحت تأثير الضغط العالي لنانو PbS للأحجام المختلفة وكما يلي:

اولا: حسابات تغير  $\frac{V}{V_0}$  لنانو PbS الحجم 2.6nm باستخدام معادلات الحالة المختلفة.

الجدول (3-2) يبين تغير لنانو PbS (2.6nm) باستخدام معادلات حالة مختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية، وكما موضح في الشكل (3-1).

الجدول(3-2): نتائج تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) للنانو PbS (2.6nm) تحت الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة المختلفة، مقارنة مع البيانات التجريبية.

Exp.(Quadri <i>et al.</i> , 1996)		Pressure (GPa) /Present Work (2.6nm)					
$\frac{V}{V_0}$	$P_{Exp} / GPa$	$\frac{V}{V_0}$	$P_{B-M}$	$P_{mL-J}$	$P_{S-K}$	$P_{Bar}$	$P_{Kum}$
1	0	1	0	0	0	0	0
0.99	0.5	0.99	0.3435	0.3434	0.3434	0.34341	0.3435
0.98	1	0.98	0.7047	0.7035	0.7035	0.7054	0.7046
0.97	1.5	0.97	1.0845	1.0804	1.0804	1.0843	1.0843
0.96	2	0.96	1.4839	1.474	1.474	1.4837	1.4834
0.95	2.5	0.95	1.9041	1.884	1.8844	1.9037	1.903
0.94	3	0.94	2.3461	2.3115	2.3115	2.3455	2.3441
0.93	3.5	0.93	2.8111	2.7554	2.7554	2.81	2.8078
0.92	3.94	0.92	3.3006	3.216	3.216	3.29	3.2952



الشكل (3-1): تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) تحت الضغط العالي لجسيمات نانو PbS (2.6nm) باستخدام معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.

ثانيا: حساب تغير  $\frac{V}{V_0}$  لنانو PbS الحجم 5.4nm باستخدام معادلات الحالة المختلفة.

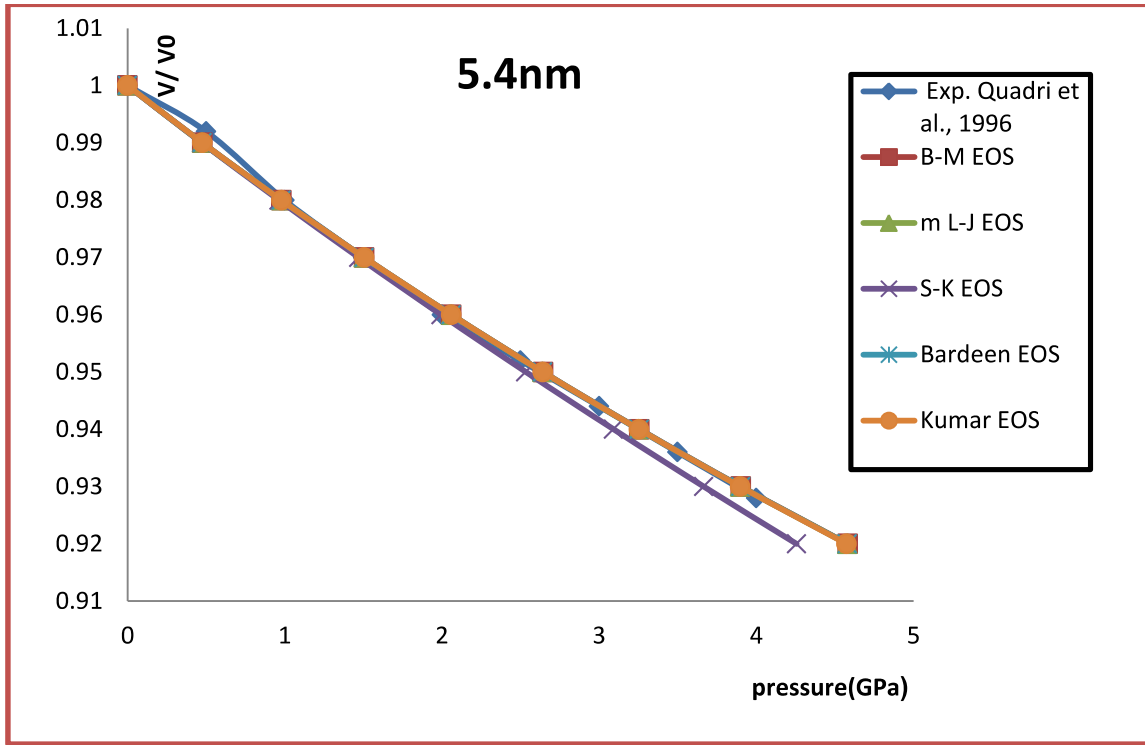
الجدول (3-3) يبين تغير  $\frac{V}{V_0}$  لنانو PbS (5.4nm) باستخدام معادلات حالة مختلفة مقارنة مع البيانات

التجريبية، وكما موضح في الشكل (3-2).

الجدول (3-3): نتائج تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) للنانو PbS (5.4nm) تحت الضغط العالي باستخدام

معادلات الحالة المختلفة، مقارنة مع البيانات التجريبية

Exp. (Quadri <i>et al.</i> , 1996)		Pressure (GPa)/Present Work 5.4nm					
$\frac{V}{V_0}$	$P_{Exp} / GPa$	$\frac{V}{V_0}$	$P_{B-M}$	$P_{mL-J}$	$P_{S-K}$	$P_{Bar}$	$P_{Kum}$
1	0	1	0	0	0	0	0
0.99	0.5	0.99	0.4769	0.4736	0.4735	0.4767	0.4769
0.98	1	0.98	0.9784	0.9782	0.9637	0.9781	0.9783
0.97	1.5	0.97	1.5057	1.5039	1.4707	1.5054	1.5054
0.96	2	0.96	2.0602	2.0589	1.9944	2.0599	2.0595
0.95	2.5	0.95	2.6435	2.6405	2.5349	2.643	2.642
0.94	3	0.94	3.2572	3.2537	3.0921	3.2564	3.2544
0.93	3.5	0.93	3.9092	3.899	3.6661	3.9013	3.8982
0.92	4	0.92	4.5824	4.5802	4.2568	4.5795	4.575



الشكل (3-2): تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) تحت الضغط العالي لجسيمات نانو PbS (5.4nm)

باستخدام معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.

ثالثاً: حساب تغير  $\frac{V}{V_0}$  لنانو PbS الحجم 8.8nm باستخدام معادلات الحالة المختلفة.

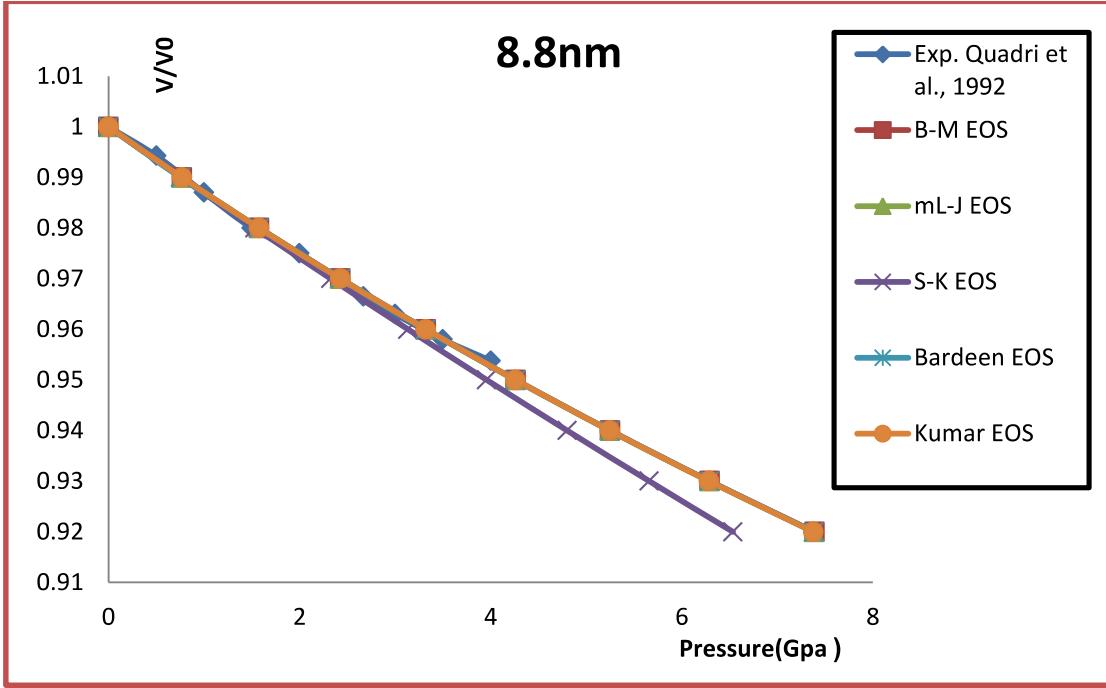
الجدول (3-4) يبين تغير  $\frac{V}{V_0}$  لنانو PbS (8.8nm) باستخدام معادلات حالة مختلفة مقارنة مع البيانات

التجريبية، وكما موضح في الشكل (3-3).

الجدول (3-4): نتائج تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) لنانو PbS(8.8nm) تحت الضغط العالي باستخدام

معادلات الحالة المختلفة، مقارنة مع البيانات التجريبية.

Exp. (Quadri <i>et al.</i> , 1996)		Pressure (GPa)/present work					
$\frac{V}{V_0}$	$P_{Exp} / GPa$	$\frac{V}{V_0}$	$P_{B-M}$	$P_{mL-J}$	$P_{S-K}$	$P_{Bar}$	$P_{Bar}$
1	0	1	0	0	0	0	0
0.99	0.5	0.99	0.7691	0.7638	0.7584	0.7552	0.7691
0.98	1	0.98	1.5777	1.5775	1.5335	1.5773	1.5776
0.97	1.5	0.97	2.428	2.4251	2.3254	2.4276	2.4275
0.96	2	0.96	3.3222	3.3201	3.134	3.3217	3.321
0.95	2.5	0.95	4.2628	4.258	3.9594	4.262	4.2604
0.94	3	0.94	5.2524	5.2469	4.8015	5.25114	5.2479
0.93	3.5	0.93	6.2936	6.288	5.6604	6.29107	6.286
0.92	4	0.92	7.3894	7.385	6.536	7.38477	7.3774



الشكل (3-3): تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) تحت الضغط العالي لجسيمات نانو PbS (8.8nm) باستخدام معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.

إن النتائج التي تم الحصول عليها في الأشكال (3-1, 3-2, 3-3) تظهر اعتماد تغير ( $\frac{V}{V_0}$ ) للنانو PbS تحت الضغط العالي على حجم الجسيمات. إذ تظهر النتائج التي تم الحصول عليها باستخدام معادلات الحالة المختلفة توافقاً أفضل فيما بينها ومع البيانات التجريبية أيضاً كلما ازداد حجم جسيمات النانو PbS. ويمكن أن يعزى هذا إلى زيادة التأثير السطحي كلما قل حجم جسيمات نانو PbS. من جانب آخر أظهرت نتائج معادلة سينغ-كاو (S-K) توافقاً أقل كلما ازداد حجم جسيمات نانو PbS.

(3-4) حساب تغير معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) للنانو PbS (2.6, 5.4, 8.8)nm تحت تأثير الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة المختلفة.

باستخدام معادلات تغير ( $B_T$ ) تحت تأثير الضغط العالي، والتي تم اشتقاقها في الفصل الثاني من هذه الرسالة بتوليف تعريف معامل المرونة الحجمي مع معادلات حالة مختلفة، والتي يمكن عرضها كما يأتي:

(i) حساب تغير معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) تحت الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ بيرخ-مرتكهان (B-M EOS)

$$B_{T(B-M)} = -V \left( \frac{dP_{B-M}}{dV} \right)_T = \frac{3}{2} B_0 \left[ \frac{7}{3} \eta^{-7/3} - \frac{5}{3} \eta^{-5/3} + \frac{9}{4} (B'_0 - 4) \eta^{-3} - \frac{7}{2} (B'_0 - 4) \eta^{-7/3} + \frac{5}{4} \right] \times (B'_0 - 4) \eta^{-5/3} \quad (3.7)$$

(ii) حساب تغير معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) تحت الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ لينارد جونز المحورة (mL-J EOS)

$$B_{T(mL-J)} = B_0 \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-n} \left[ 2 \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-n} - 1 \right] \quad (3.8)$$

(iii) حساب تغير معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) تحت الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ سينغ - كاو (Singh-Kao EOS)

$$B_{T(S-K)} = B_0 \frac{V}{V_0} \left[ 1 + (B'_0 + 1) \left( 1 - \frac{V}{V_0} \right) \right] \quad (3.9)$$

(iv) حساب تغير معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) تحت الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ باردين (Bardeen EOS)

$$B_{T(Bar)} = 3B_0 \left[ \frac{5}{3} \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-5/3} - \frac{4}{3} \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-4/3} + 3(B'_0 - 3) \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-2} - 5(B'_0 - 3) \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-5/3} + 2(B'_0 - 3) \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-4/3} \right] \quad (3.10)$$

(v) حساب تغير معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) تحت الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ كومر (Kumar EOS)

$$B_{T(Kum)} = B_0 \frac{V}{V_0} \left[ \exp \left\{ A \left( 1 - \frac{V}{V_0} \right) \right\} \right] \quad (3.11)$$

بتعويض قيم  $B_0$  و  $B_0'$  من الجدول (3-1) في المعادلات (3.7, 3.8, 3.9, 3.10, 3.11). تم الحصول على تغير  $B_T$  تحت تأثير الضغط العالي لنانو PbS للأحجام المختلفة وكما يأتي:

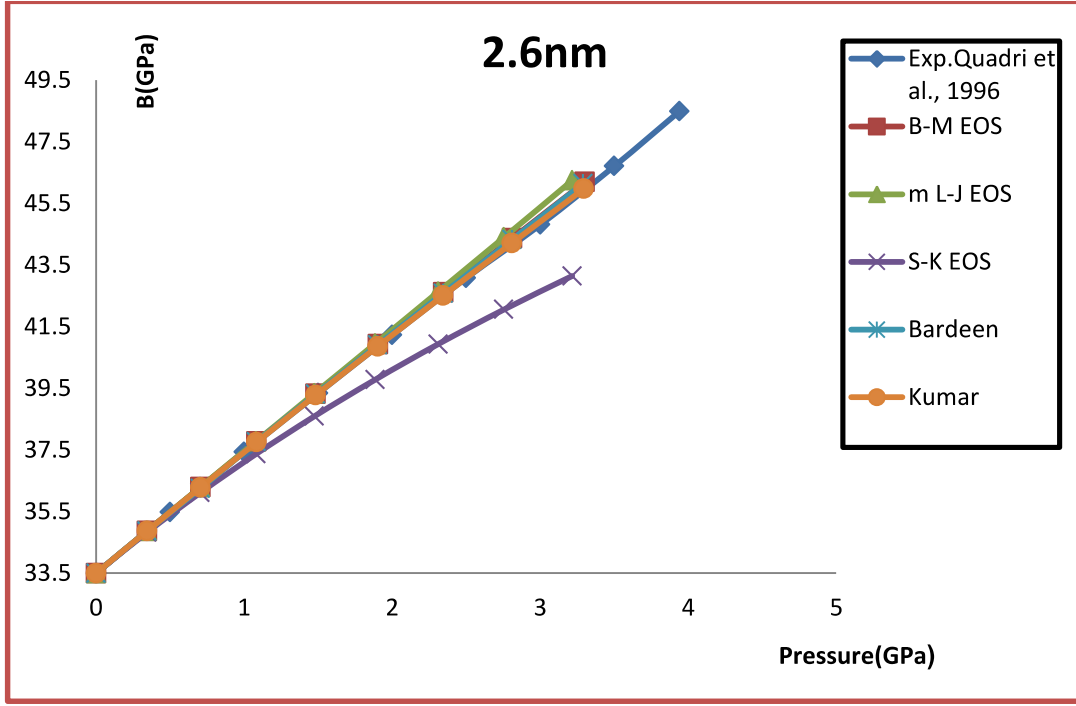
اولاً: حساب تغير  $B_T$  لنانو PbS الحجم 2.6nm وفق معادلات الحالة المختلفة.

باستخدام قيم  $\frac{V}{V_0}$  من الجدول (3-2) في المعادلات (3.7, 3.8, 3.9, 3.10, 3.11) كل حسب

معادلة الحالة الخاصة به. تم الحصول على نتائج تغير معامل المرونة الحجمي  $B_T$  لنانو PbS(2.6nm) كما مدون في الجدول (3-5) وموضح في الشكل (3-4) مقارنة مع البيانات التجريبية.

الجدول (3-5): نتائج تغير معامل المرونة الحجمي  $B_T$  للنانو PbS (2.6nm) تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.

Exp. (Quadri <i>et al.</i> , 1996)		Present Work									
		$B-M$ EOS		$mL-J$ EOS		$S-K$ EOS		$Bar$ EOS		$Kum$ EOS	
$P_{Exp}$ GPa	$B_{T(Exp)}$ GPa	$P_{B-M}$ GPa	$B_{T(B-M)}$ GPa	$P_{(mL-J)}$ GPa	$B_{T(mL-J)}$ GPa	$P_{(S-K)}$ GPa	$B_{T(S-K)}$ GPa	$P_{Bar}$ GPa	$B_{T(Bar)}$ GPa	$P_{Kum}$ GPa	$B_{T(Kum)}$ GPa
0	33.5	0	33.5	0	33.5	0	33.5	0	33.5	0	33.5
0.5	35.48	0.3435	34.8674	0.3434	34.8679	0.3434	34.82325	0.3434	34.8654	0.3435	34.8654
1	37.43	0.7047	36.2915	0.7035	36.2938	0.7035	36.113	0.7054	36.25437	0.7046	36.28276
1.5	39.34	1.0845	37.775	1.0804	37.7806	1.0804	37.36925	1.0843	37.7689	1.0843	37.7538
2	41.23	1.4839	39.321	1.474	39.3313	1.474	38.592	1.4837	39.30957	1.4834	39.2803
2.5	43.08	1.9041	40.9326	1.8844	40.9494	1.8844	39.78125	1.9037	40.91535	1.903	40.8641
3	44.81	2.3461	42.6133	2.3115	42.6384	2.3115	40.937	2.3455	42.58788	2.3441	42.507
3.5	46.71	2.8111	44.3664	2.7554	44.402	2.7554	42.05925	2.81	44.33055	2.8078	44.211
3.94	48.49	3.3006	46.1959	3.216	46.2443	3.216	43.148	3.29	46.14779	3.2952	45.978



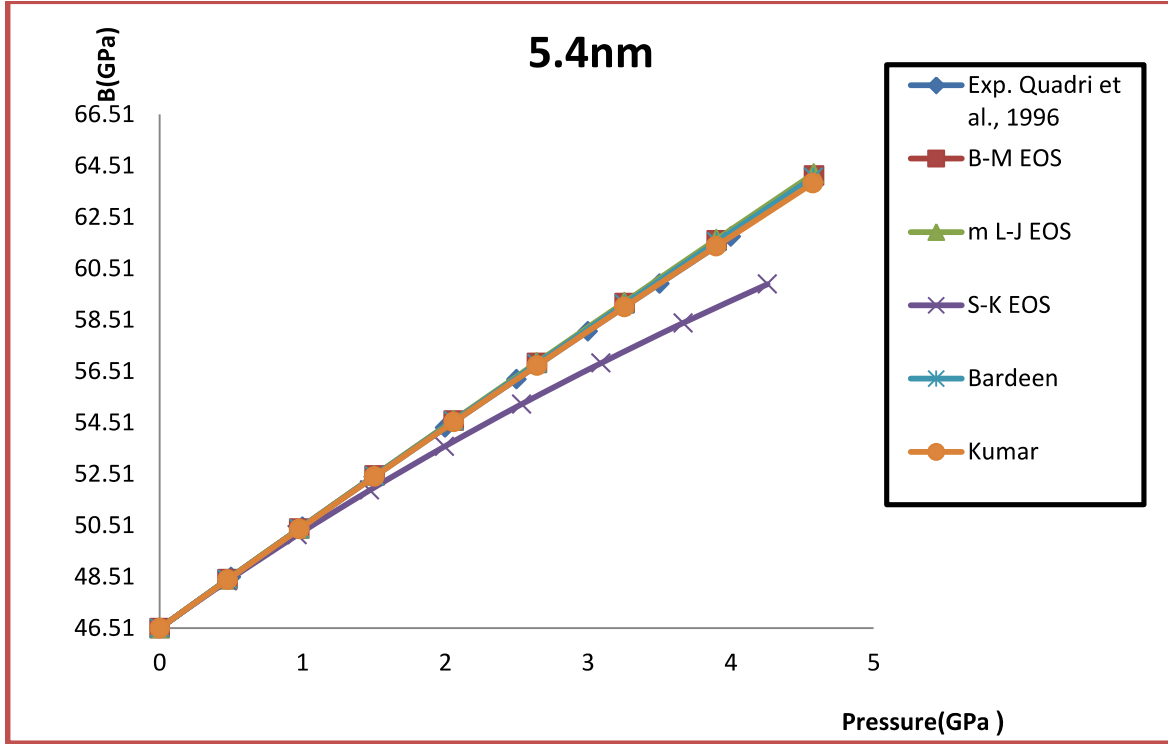
الشكل (3-4): تغير معامل المرونة الحجمي  $B_T$  تحت الضغط العالي لجسيمات نانو PbS(2.6nm) وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.

ثانياً: حساب تغير  $B_T$  لنانو PbS الحجم 5.4nm وفق معادلات حالة مختلفة.

باستخدام قيم  $\frac{V}{V_0}$  من الجدول (3-3) في المعادلات (3.7, 3.8, 3.9, 3.10, 3.11) كل حسب معادلة الحالة الخاصة به. تم الحصول على نتائج تغير معامل المرونة الحجمي  $B_T$  لنانو PbS (5.4nm) كما مدون في الجدول (3-6) وموضح في الشكل (3-5) مقارنة مع البيانات التجريبية.

الجدول (3-6) نتائج تغير معامل المرونة الحجمي  $B_T$  للنانو PbS (5.4nm) تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.

Exp. (Quadri <i>et al.</i> , 1996)		Present Work									
		$B - M$ EOS		$mL - J$ EOS		$S - K$ EOS		$Bar$ EOS		$Kum$ EOS	
$P_{Exp}$ GPa	$B_{T(Exp)}$ GPa	$P_{(B-M)}$ GPa	$B_{T(B-M)}$ GPa	$P_{(mL-J)}$ GPa	$B_{T(mL-J)}$ GPa	$P_{(S-K)}$ GPa	$B_{T(S-K)}$ GPa	$P_{Bar}$ GPa	$B_{T(Bar)}$ GPa	$P_{Kum}$ GPa	$B_{T(Kum)}$ GPa
0	46.51	0	46.51	0	46.51	0	46.51	0	46.51	0	46.51
0.5	48.5	0.4769	48.4085	0.4736	48.4092	0.4735	48.34714	0.4767	48.407 7	0.4769	48.4051
1	50.46	0.9784	50.3856	0.9782	50.3889	0.9637	50.13778	0.9781	50.382 3	0.9783	50.3734
1.5	52.4	1.5057	52.4453	1.5039	52.453	1.4707	51.8819	1.5054	52.437 5	1.5054	52.4158
2	54.31	2.0602	54.5917	2.0589	54.606	1.9944	53.5795	2.0599	54.577 4	2.0595	54.5351
2.5	56.2	2.6435	56.8292	2.6405	56.8525	2.5349	55.2306	2.643	56.806 1	2.642	56.734
3	58.07	3.2572	59.1625	3.2537	59.1974	3.0921	56.8352	3.2564	59.128	3.2544	59.015
3.5	59.92	3.9029	61.5965	3.899	61.6459	3.6661	58.3933	3.9013	61.547 8	3.8982	61.3807
4	61.75	4.5824	64.1365	4.5802	64.2037	4.2568	59.9048	4.5795	64.070 5	4.575	63.8339



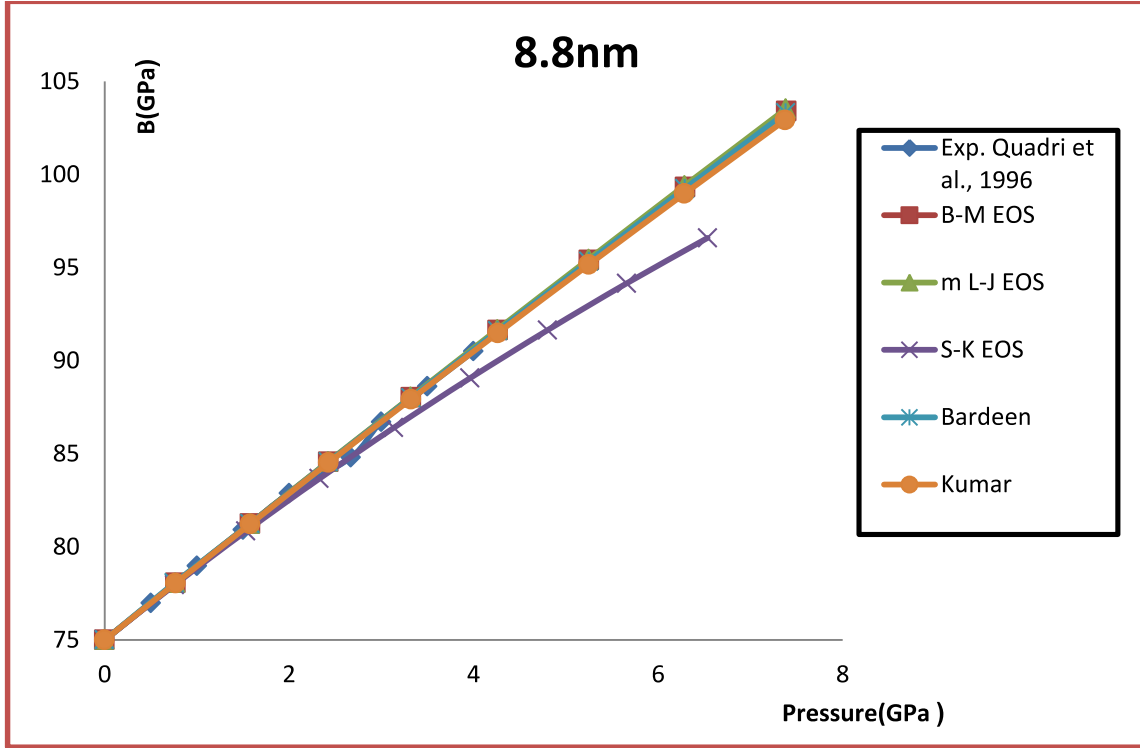
الشكل (3-5): تغير معامل المرونة الحجمي  $B_T$  تحت الضغط العالي لجسيمات النانو PbS(5.4nm) وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.

ثالثاً: حساب تغير  $B_T$  لنانو PbS الحجم 8.8nm وفق معادلات حالة مختلفة.

باستخدام قيم  $\frac{V}{V_0}$  من الجدول (3-4) في المعادلات (3.7, 3.8, 3.9, 3.10, 3.11) كل حسب معادلة الحالة الخاصة به. تم الحصول على نتائج تغير معامل المرونة الحجمي  $B_T$  لنانو PbS 8.8nm كما مدون في الجدول (3-7) وموضح في الشكل (3-6) مقارنة مع البيانات التجريبية.

الجدول (3-7) نتائج تغير معامل المرونة الحجمي  $B_T$  للنانو PbS (8.8nm) تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع النتائج التجريبية.

Exp. (Quadri <i>et al.</i> , 1996)		Present Work									
		$B-M$ EOS		$mL-J$ EOS		$S-K$ EOS		$Bar$ EOS		$Kum$ EOS	
$P_{Exp}$ GPa	$B_{T(Exp)}$ GPa	$P_{(B-M)}$ GPa	$B_{T(B-M)}$ GPa	$P_{(mL-J)}$ GPa	$B_{T(mL-J)}$ GPa	$P_{S-K}$ GPa	$B_{T(S-K)}$ GPa	$P_{Bar}$ GPa	$B_{T(Bar)}$ GPa	$P_{Kum}$ GPa	$B_{T(Kum)}$ GPa
0	75	0	75	0	75	0	75	0	75	0	75
0.5	76.99	0.7691	78.0614	0.7638	78.0626	0.7584	77.9625	0.7552	78.0601	0.7691	78.05687
1	78.97	1.5777	81.2496	1.5775	81.2549	1.5335	80.85	1.5773	81.2443	1.5776	81.23
1.5	80.92	2.428	84.571	2.4251	84.5835	2.3254	83.6625	2.4276	84.5585	2.4275	84.5234
2	82.88	3.3222	88.0322	3.3201	88.0553	3.134	86.4	3.3217	88.0091	3.321	87.9409
2.5	84.81	4.2628	91.6403	4.258	91.6779	3.9594	89.0625	4.262	91.603	4.2604	91.4868
3	86.72	5.2524	95.4028	5.2469	95.4592	4.8015	91.65	5.25114	95.3472	5.2479	95.165
3.5	88.62	6.2936	99.3278	6.288	99.4076	5.6604	94.1625	6.29107	99.2493	6.286	98.9799
4	90.51	7.3894	103.4237	7.385	103.5321	6.536	96.6	7.38477	103.3173	7.3774	102.9359



الشكل (3-6) تغير معامل المرونة الحجمي  $B_T$  تحت الضغط العالي لجسيمات النانو PbS(8.8nm) وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.

الأشكال (3-4, 3-5, 3-6) توضح أن معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) يزداد تحت الضغط العالي، وأن ( $B_0$ ) يزداد مع زيادة حجم جسيمات نانو PbS. النتائج التي تم الحصول عليها تظهر توافقاً مع البيانات التجريبية فضلاً عن توافق نتائج المعادلات المختلفة، التي تم الحصول عليها مع بعضها البعض.

النتائج المتحصلة من معادلة الحالة لـ (سينغ - كاو) توضح اختلاف طفيف عن النتائج التجريبية فضلاً عن النتائج المتحصلة باستخدام معادلات الحالة (B-M, mL-J, Bardeen, Kumar).

(3-5) حساب تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)$  للنانو PbS(2.6, 5.4, 8.8)nm تحت تأثير الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة المختلفة.

باستخدام معادلات تغير  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  تحت تأثير الضغط العالي، والتي تم اشتقاقها في الفصل الثاني من هذه الرسالة بتوليف تعريف معامل التمدد النسبي الحراري مع معادلات حالة مختلفة، والتي يمكن عرضها كما يأتي:

(i) حساب تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  تحت الضغط العالي باستخدام معادلة

الحالة لـ بيرخ-مرنكهان (B-M EOS)

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{B-M} = \frac{2}{3} \left[ \frac{7}{3} \eta^{-7/3} - \frac{5}{3} \eta^{-5/3} + \frac{9}{4} (B'_0 - 4) \eta^{-3} - \frac{7}{2} (B'_0 - 4) \eta^{-7/3} + \frac{5}{4} (B'_0 - 4) \eta^{-5/3} \right]^{-1} \quad (3.12)$$

(ii) حساب تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  تحت الضغط العالي باستخدام

معادلة الحالة لـ لينارد جونز المحورة (m L-J EOS)

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{mL-J} = \eta^{4/3} \times [2\eta^{-4/3} - 1]^{-1} \quad (3.13)$$

(iii) حساب تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  تحت الضغط العالي باستخدام

معادلة الحالة لـ (Singh - Kao EOS)

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{S-K} = [\eta [1 + (1 + B'_0)(1 - \eta)]]^{-1} \quad (3.14)$$

(v) حساب تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  تحت الضغط العالي باستخدام

معادلة الحالة لـ (Bardeen EOS)

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{Bar} = \frac{1}{3} \left[ \frac{5}{3} \eta^{-5/3} - \frac{4}{3} \eta^{-4/3} + (B'_0 - 3) (3\eta^{-2} - 5\eta^{-5/3} - 2\eta^{-4/3}) \right]^{-1} \quad (3.15)$$

(iv) حساب تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  تحت الضغط العالي باستخدام

معادلة الحالة لـ (Kumar EOS)

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{Kum} = \frac{V_0}{V} [\exp\{A(1-\eta)\}]^{-1} \quad (3.16)$$

بتعويض قيم  $B_0$  و  $B'_0$  من الجدول (3-1) في المعادلات المختلفة (3.12, 3.13, 3.14, 3.15, 3.16)

. تم الحصول على تغير  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  تحت تأثير الضغط العالي لنانو PbS للأحجام المختلفة وكما يأتي:

اولاً: حساب تغير  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  لنانو PbS الحجم 2.6nm وفق معادلات حالة مختلفة.

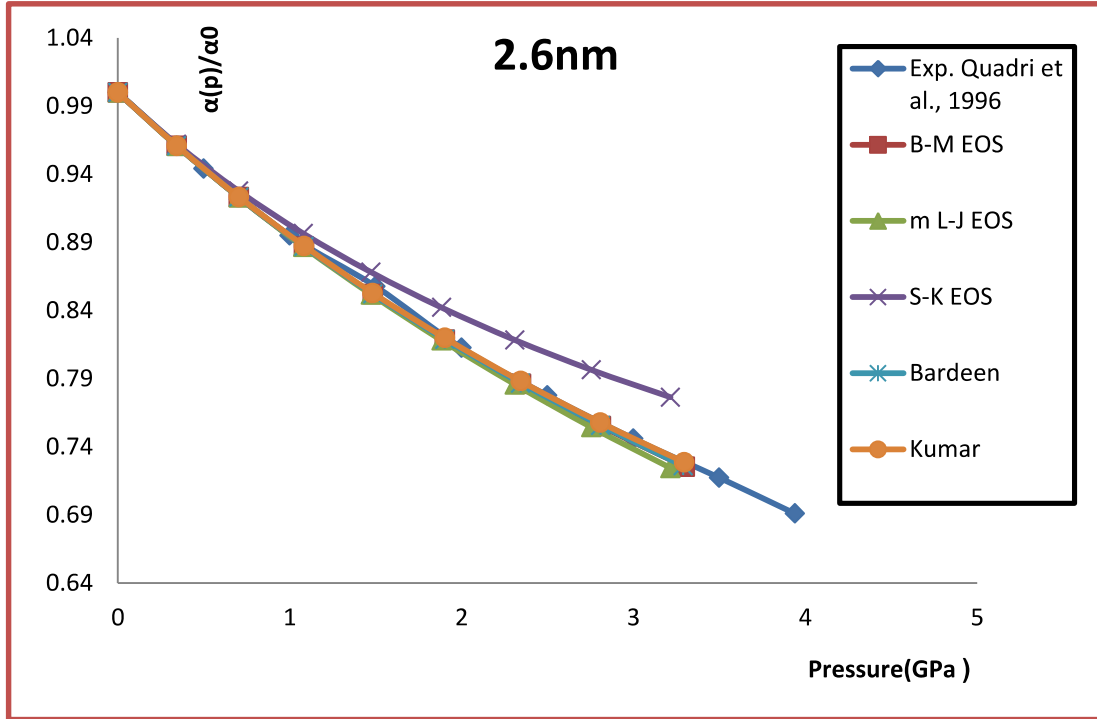
باستخدام قيم  $\frac{V}{V_0}$  من الجدول (3-2) في المعادلات (3.12, 3.13, 3.14, 3.15, 3.16) كل حسب

معادلة الحالة الخاصة به. تم الحصول على نتائج تغير معامل التمدد النسبي  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  لنانو PbS

2.6nm كما مدون في الجدول (3-8) وموضح في الشكل (3-7) مقارنة مع البيانات التجريبية.

الجدول (3-8): نتائج تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  للنانو (PbS 2.6nm) تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.

Exp. Quadri et al., 1996		Present Work									
		<i>B – M EOS</i>		<i>mL – J EOS</i>		<i>S – K EOS</i>		<i>Bar EOS</i>		<i>Kum EOS</i>	
$P_{Exp}$ GPa	$\alpha_{r(Exp)}$	$P_{B-M}$ GPa	$\alpha_{r(B-M)}$	$P_{mL-J}$ GPa	$\alpha_{r(mL-J)}$	$P_{S-K}$ GPa	$\alpha_{r(S-K)}$	$P_{Bar}$ GPa	$\alpha_{r(Bar)}$	$P_{Kum}$ GPa	$\alpha_{r(Kum)}$
0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1
0.5	0.9442	0.3435	0.9608	0.3434	0.9607	0.3434	0.962	0.34341	0.96079	0.3435	0.96084
1	0.895	0.7047	0.9231	0.7035	0.923	0.7035	0.9276	0.7054	0.92314	0.7046	0.9233
1.5	0.8576	1.0845	0.8868	1.0804	0.8866	1.0804	0.8964	1.0843	0.8869	1.0843	0.88732
2	0.8125	1.4839	0.852	1.474	0.8517	1.474	0.868	1.4837	0.8521	1.4834	0.85284
2.5	0.7776	1.9041	0.8184	1.8844	0.81808	1.8844	0.8421	1.9037	0.81875	1.903	0.81979
3	0.7459	2.3461	0.7861	2.3115	0.7857	2.3115	0.8183	2.3455	0.78659	2.3441	0.7881
3.5	0.7172	2.8111	0.7551	2.7554	0.7544	2.7554	0.7964	2.81	0.75567	2.8078	0.75772
3.94	0.6909	3.3006	0.7252	3.216	0.7244	3.216	0.7763	3.29	0.72591	3.2952	0.7286



الشكل (3-7): تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  تحت الضغط العالي لجسيمات نانو PbS (2.6nm) وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.

ثانياً: حساب تغير  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  لنانو PbS الحجم 5.4nm وفق معادلات حالة مختلفة.

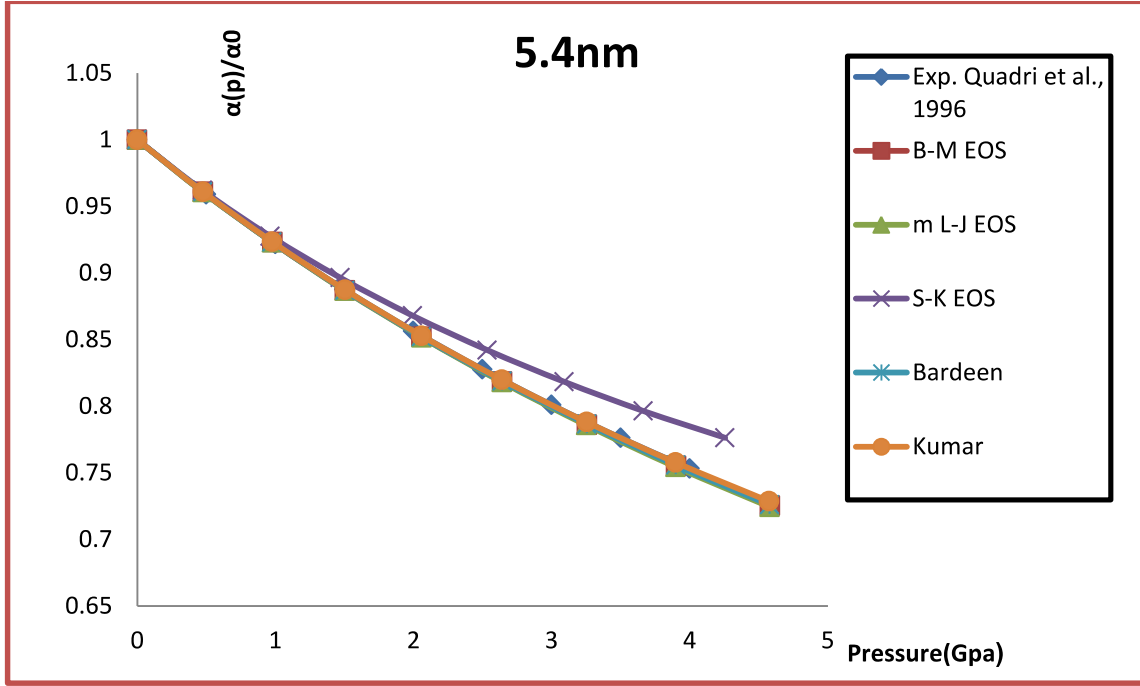
باستخدام قيم  $\frac{V}{V_0}$  من الجدول (3-3) في المعادلات (3.12, 3.13, 3.14, 3.15, 3.16) كل حسب

معادلة الحالة الخاصة به. تم الحصول على نتائج تغير معامل التمدد النسبي  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  لنانو PbS

5.4nm كما مدون في الجدول (3-9) وموضح في الشكل (3-8) مقارنة مع البيانات التجريبية.

الجدول (3-9): نتائج تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  للنانو PbS(5.4nm) تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع النتائج التجريبية.

Exp. Quadri <i>et al.</i> , 1996		Present Work <i>GPa</i>									
		<i>B-M EOS</i>		<i>mL-J EOS</i>		<i>S-K EOS</i>		<i>Bar EOS</i>		<i>Kum EOS</i>	
$P_{Exp}$ <i>GPa</i>	$\alpha_{r(Exp)}$	$P_{B-M}$ <i>Gpa</i>	$\alpha_{r(B-M)}$	$P_{mL-J}$ <i>GPa</i>	$\alpha_{r(mL-J)}$	$P_{S-K}$ <i>GPa</i>	$\alpha_{r(S-K)}$	$P_{Bar}$ <i>GPa</i>	$\alpha_{r(Bar)}$	$P_{Kum}$ <i>GPa</i>	$\alpha_{r(Kum)}$
0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1
0.5	0.9589	0.4769	0.9608	0.4736	0.9607	0.4735	0.962	0.4767	0.96079	0.4769	0.96084
1	0.9217	0.9784	0.9231	0.9782	0.923	0.9637	0.9276	0.9781	0.92314	0.9783	0.9233
1.5	0.8876	1.5057	0.8868	1.5039	0.8866	1.4707	0.8964	1.5054	0.8869	1.5054	0.88732
2	0.8564	2.0602	0.852	2.0589	0.8517	1.9944	0.868	2.0599	0.8521	2.0595	0.85284
2.5	0.8276	2.6435	0.8184	2.6405	0.81808	2.5349	0.8421	2.643	0.81875	2.642	0.81979
3	0.8009	3.2572	0.7861	3.2537	0.7857	3.0921	0.8183	3.2564	0.78659	3.2544	0.7881
3.5	0.7762	3.9029	0.7551	3.899	0.7544	3.6661	0.7964	3.9013	0.75567	3.8982	0.75772
4	0.7532	4.5824	0.7252	4.5802	0.7244	4.2568	0.7763	4.5795	0.72591	4.575	0.7286



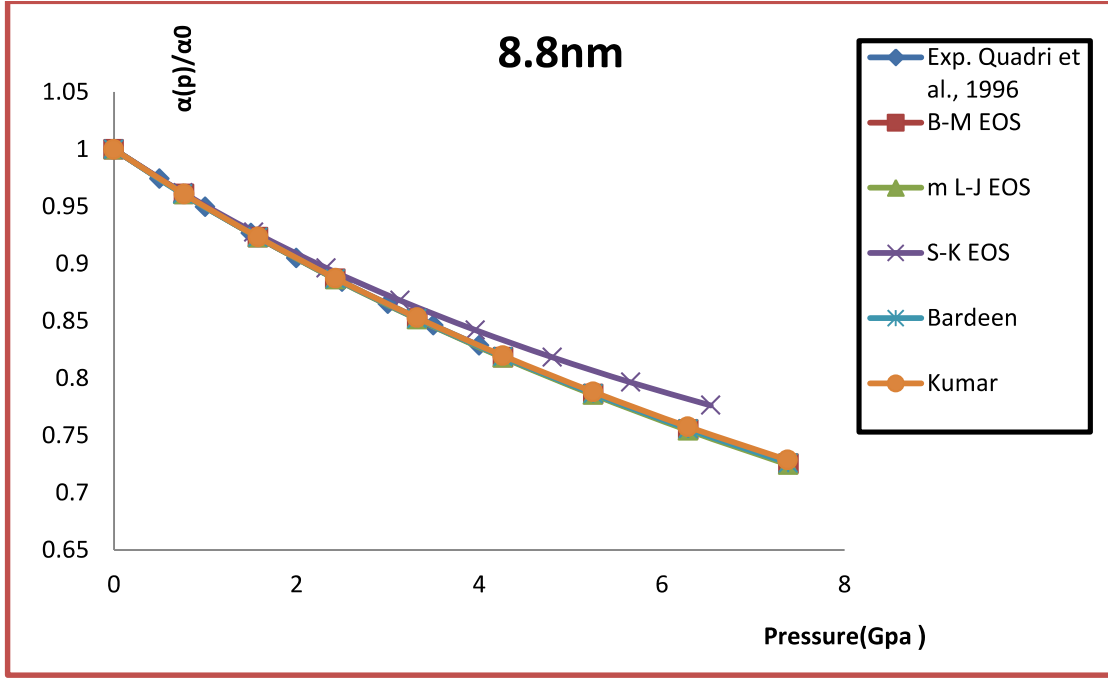
الشكل (3-8) تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  تحت الضغط العالي لجسيمات نانو PbS (5.4nm) وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع النتائج التجريبية.

ثالثاً: حساب تغير  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  لنانو PbS الحجم 8.8nm وفق معادلات حالة مختلفة.

باستخدام قيم  $\frac{V}{V_0}$  من الجدول (3-4) في المعادلات (3.12, 3.13, 3.14, 3.15, 3.16) كل حسب معادلة الحالة الخاصة به. تم الحصول على نتائج تغير معامل التمدد النسبي  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  لنانو PbS 8.8nm كما مدون في الجدول (3-10) وموضح في الشكل (3-9) مقارنة مع البيانات التجريبية.

الجدول (10-3): نتائج تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  للنانو (8.8nm) PbS تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.

Exp. Quadri <i>et al.</i> , 1996		Present Work									
		<i>B – M EOS</i>		<i>m L – J EOS</i>		<i>S – K EOS</i>		<i>Bar EOS</i>		<i>Kum EOS</i>	
$P_{Exp}$ GPa	$\alpha_{r(Exp)}$	$P_{B-M}$ GPa	$\alpha_{r(B-M)}$	$P_{mL-J}$ GPa	$\alpha_{r(mL-J)}$	$P_{S-K}$ GPa	$\alpha_{r(S-K)}$	$P_{Bar}$ GPa	$\alpha_{r(Bar)}$	$P_{Kum}$ GPa	$\alpha_{r(Kum)}$
0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1
0.5	0.9742	0.7691	0.9608	0.7638	0.967	0.7584	0.962	0.7552	0.96079	0.7691	0.96084
1	0.9497	1.5777	0.9231	1.5775	0.923	1.5335	0.9276	1.5773	0.92314	1.5776	0.9233
1.5	0.9268	2.428	0.8868	2.4251	0.8866	2.3254	0.8964	2.4276	0.8869	2.4275	0.88732
2	0.9049	3.3222	0.852	3.3201	0.8517	3.134	0.868	3.3217	0.8521	3.321	0.85284
2.5	0.8843	4.2628	0.8184	4.258	0.81808	3.9594	0.8421	4.262	0.81875	4.2604	0.81979
3	0.8649	5.2524	0.7861	5.2469	0.7857	4.8015	0.8183	5.25114	0.78659	5.2479	0.7881
3.5	0.8463	6.2936	0.7551	6.288	0.7544	5.6604	0.7964	6.29107	0.75567	6.286	0.75772
4	0.8286	7.3894	0.7252	7.385	0.7244	6.536	0.7763	7.38477	0.72591	7.3774	0.7286



الشكل (3-9): تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  تحت الضغط العالي لجسيمات نانو PbS (8.8nm) وفق معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.

الأشكال (3-7, 3-8, 3-9) تظهر توافق نتائج معادلات الحالة مع بعضها البعض ومع البيانات التجريبية باستثناء النتائج المتحصلة باستخدام معادلة الحالة S-K إذ تتفاوت نتائج هذه المعادلة مع نتائج بقية معادلات الحالة ومع النتائج التجريبية.

## Discussion

### (3-6) المناقشة

1- إن النتائج التي تم الحصول عليها في الأشكال (3-1, 3-2, 3-3) تظهر اعتماد تغير  $(\frac{V}{V_0})$  للنانو PbS تحت الضغط العالي على حجم الجسيمات، كما تظهر هذه النتائج، المتحصلة باستخدام معادلات الحالة المختلفة، توافقاً أفضل فيما بينها ومع البيانات التجريبية، ويلاحظ هذا التوافق كلما ازداد حجم جسيمات النانو PbS. ويمكن ان يعزى هذا الى زيادة التأثير السطحي كلما قل حجم جسيمات نانو PbS. من جانب اخر اظهرت نتائج معادلة سينغ-كاو (S-K) توافق اقل مع البيانات التجريبية ومع النتائج المتحصلة من بقية معادلات الحالة المستخدمة.

2- الاشكال (3-4, 3-5, 3-6) توضح أن معامل المرونة الحجمي  $(B_T)$  يزداد تحت الضغط العالي، وأن  $(B_0)$  يزداد مع زيادة حجم جسيمات نانو PbS. والنتائج التي تم الحصول عليها تظهر توافقاً مع البيانات التجريبية، فضلاً عن توافق نتائج المعادلات المختلفة، التي تم الحصول عليها مع بعضها البعض. النتائج المتحصلة من معادلة الحالة لـ (سينغ - كاو) توضح اختلاف طفيف عن النتائج

التجريبية، فضلاً عن النتائج المتحصلة باستخدام معادلات الحالة (B-M, mL-J, Bardeen, Kumar).

3- الأشكال (3-7, 3-8, 3-9) تظهر توافق نتائج معادلات الحالة مع بعضها البعض ومع البيانات التجريبية باستثناء النتائج المتحصلة باستخدام معادلة الحالة S-K إذ تتفاوت نتائج هذه المعادلة مع نتائج بقية معادلات الحالة ومع النتائج التجريبية.

4- تفاوت النتائج المتحصلة باستخدام معادلة الحالة S-K EOS مع النتائج التجريبية ومع نتائج بقية معادلات الحالة عند حساب تغير كل من  $(\frac{V}{V_0}$  و  $B_7$  و  $\alpha_r$ ). يزداد مع زيادة الضغط ومع حجم جسيمات نانو PbS. ويمكن أن يعزى هذا التفاوت في نتائج معادلة الحالة S-K لاعتبار  $B'_0$  قيمة ثابتة ( $B'_0=4$ ) منذ بداية اشتقاق هذه المعادلة.

5- الجدول (3-1) يظهر اعتماد قيمة  $B_0$  لنانو PbS على حجم الجسيمات إذ تزداد قيمة  $B_0$  مع زيادة حجم جسيمات نانو PbS ويمكن تفسير ذلك بالتأثير السطحي لجسيمات النانو.

الفصل الرابع

حساب نانوتريد الالمنيوم (Nano AlN)

تحت الضغط العالي

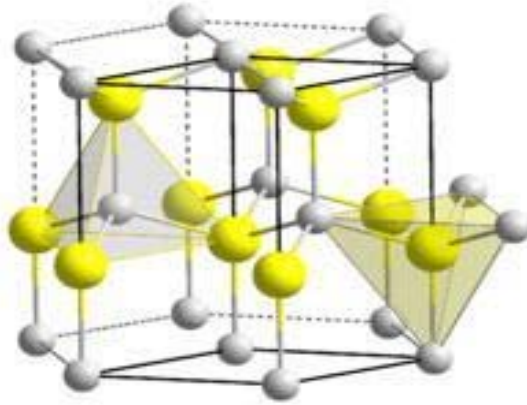
*Calculation of Nano  
AlN under high  
pressure*

تم في هذا الفصل حساب تغير كل من، الحجم النوعي  $\frac{V}{V_0}$ ، معامل المرونة الحجمي  $B_T$ ، معامل التمدد النسبي  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$ ، وفجوة الطاقة، لنانو نتريد الألمنيوم (Nano AlN) تحت الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة بيرخ - مرنكهان (B-M EOS) ومعادلة الحالة لينارد جونز المحورة (mL-J EOS) ومعادلة سينغ-كاو (Singh-Kao EOS) ومعادلة باردين (Bardeen EOS) ومعادلة كومر (Kumar EOS).

### Nano Aluminum Nitride

### (4-2) نانو نتريد الألمنيوم AlN

يعتبر نتريد الألمنيوم أحد مركبات أشباه الموصلات للزمرتين III-V، ويمتاز بامتلاكه اواصر تساهمية وفجوة طاقة كبيرة (6.2eV) (Fu, 2016 ; Fraga et al., 2014) وهو مادة خزفية ذات صلابة وتوصيلية عالية للحرارة وخصائص عزل كهربائي ممتازة ومعامل تمدد حراري واطئ متوافق مع السيليكون Si وزرنيخيد الغاليوم GaAs (Teke and Morkoç, 2006)، وهذا ما يجعله صالحاً للاستخدام في تطبيقات الطاقة والالكترونيات الدقيقة وانايب موجات المايكروويف (Kranzmann & Brook, 1991). ويمتلك نتريد الألمنيوم نفس التركيب البلوري للفورترزيت كما مبين في الشكل (4-1).



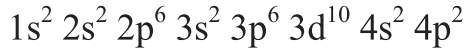
شكل (4-1) التركيب البلوري لنتريد الألمنيوم (Fu, 2016)

## Semi conductivity in Aluminum Nitride AlN

## (4-3) شبه التوصيل في نتريد الألمنيوم العياني

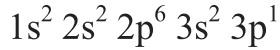
من وجهة نظر التوصيل الكهربائي تكون المواد شبه الموصلة وسطا بين العوازل والمواد الموصلة. أن وضع تعريف دقيق للمواد شبه الموصلة ليس امرا سهلا لأنه يعتمد على الخاصية قيد البحث. ومع ذلك فإن ما يميز معظم المواد شبه الموصلة هي الزيادة الملحوظة في التوصيلية الكهربائية مع ارتفاع درجة الحرارة، اي عكس ما يحصل في المواد الموصلة. ومع ذلك فحتى هذه الخاصية لا تعد قاعدة عامة في جميع درجات الحرارة. ويمكن تفسير ظاهرة شبه التوصيل باعتماد نموذج الجمع الخطي للمدارات الذرية (Linear combination of atomic orbitals model- LCAO model).

فذرة الجرمانيوم المنفردة ذات العدد الذري 32 والترتيب الإلكتروني



تمتلك اربعة الكترونات في الغلاف الخارجي  $n=4$ . عند تاصر ذرة الجرمانيوم المنفردة مع بقية ذرات الجرمانيوم ينتقل الكترون واحد من 4s الى 4p ليعطي الترتيب الإلكتروني للغلاف الخارجي  $4s 4p^3$ . ان هذ التهجين في المدارات الإلكترونية ينشأ عنه ارتباط كل ذرة جرمانيوم بأربع ذرات جرمانيوم اخرى ويكون سمة خاصة بالمواد شبه الموصلة.

في المركب AlN. يمتلك الألمنيوم Al العدد الذري 13 والترتيب الإلكتروني



بينما يمتلك النتروجين N العدد الذري 7 والترتيب الإلكتروني



عند تاصر ذرة الألمنيوم مع ذرة النتروجين يحصل تهجين في المدارات الذرية لجزيئة المركب نتريد الألمنيوم AlN. اذ ينتقل الكترون في ذرة الألمنيوم من 3s الى 3p ويتبع ذلك انتقال الكترون اخر من ذرة النتروجين من 2s الى 3p في ذرة الألمنيوم، ليصبح الترتيب الإلكتروني للغلاف الخارجي لجزيئة AlN بالصيغة  $sp^3$  وهو بذلك يحاكي الترتيب الإلكتروني للغلاف الخارجي للجرمانيوم واشباه الموصلات.

(Hameed and Al-sheikh, 2011)

#### (4-4) حساب نانو نتريد الالمنيوم Nano AlN تحت الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة المختلفة.

الجدول (4-1) يعرض قيم معامل المرونة الحجمي  $B_0$  ومشتقته  $B'_0$  لنانو نتريد الالمنيوم AlN عند درجة حرارة الغرفة وتحت الضغط الجوي.

الجدول (4-1): قيم معامل المرونة الحجمي  $B_0$  ومشتقته  $B'_0$  لنانو نتريد الالمنيوم AlN عند درجة حرارة الغرفة وتحت الضغط الجوي

$B_0$	321GPa	Reference
$B'_0$	4	Shen <i>et al.</i> , 2006

#### (4-4-1) حساب تغير الحجم النوعي $(\frac{V}{V_0})$ للنانو AlN باستخدام معادلات الحالة المختلفة تحت الضغط العالي

بتعويض قيم  $B_0$ ،  $B'_0$  لنانو AlN المدونة ، في الجدول (4-1)، في كل من معادلات الحالة (B-M، mL-J, S-K, Bardeen, Kumar) والموضحة فيما يأتي

(i) معادلة بيرخ - مرتكهان (Birch-Murnaghan EOS)( Birch, 1947)

$$P_{B-M} = \frac{3B_0}{2} \left[ \eta^{-7/3} - \eta^{-5/3} \right] \left[ 1 + \frac{3}{4} (B'_0 - 4)(\eta^{-2/3} - 1) \right] \quad (4.1)$$

(ii) معادلة الحالة لينارد جونز المحورة (m L-J EOS)(Jiuxun, 2005)

$$P_{mL-G} = \frac{B_0}{n} \eta^{-n} \left[ \eta^{-n} - 1 \right] \quad (4.2)$$

إذ أن

$$n = \frac{1}{3} B'_0 \quad (4.3)$$

**(Singh-Kao EOS)**(Singh & Kao, 2013)

**(iii) معادلة الحالة سينغ-كاو**

$$P_{S-K} = B_0 [1 - \eta] + \frac{B_0 (B'_0 + 1)}{2} [1 - \eta]^2 \quad (4.4)$$

**(Bardeen EOS)**(Bardeen, 1938)

**(iv) معادلة الحالة باردين**

$$P_{Bar} = 3B_0 [\eta^{-5/3} - \eta^{-4/3}] \left[ 1 + \frac{3}{2} (B'_0 - 3) (\eta^{-1/3} - 1) \right] \quad (4.5)$$

**(Kumar EOS)**(Kumar, 1995, 1996)

**(v) معادلة الحالة كومر**

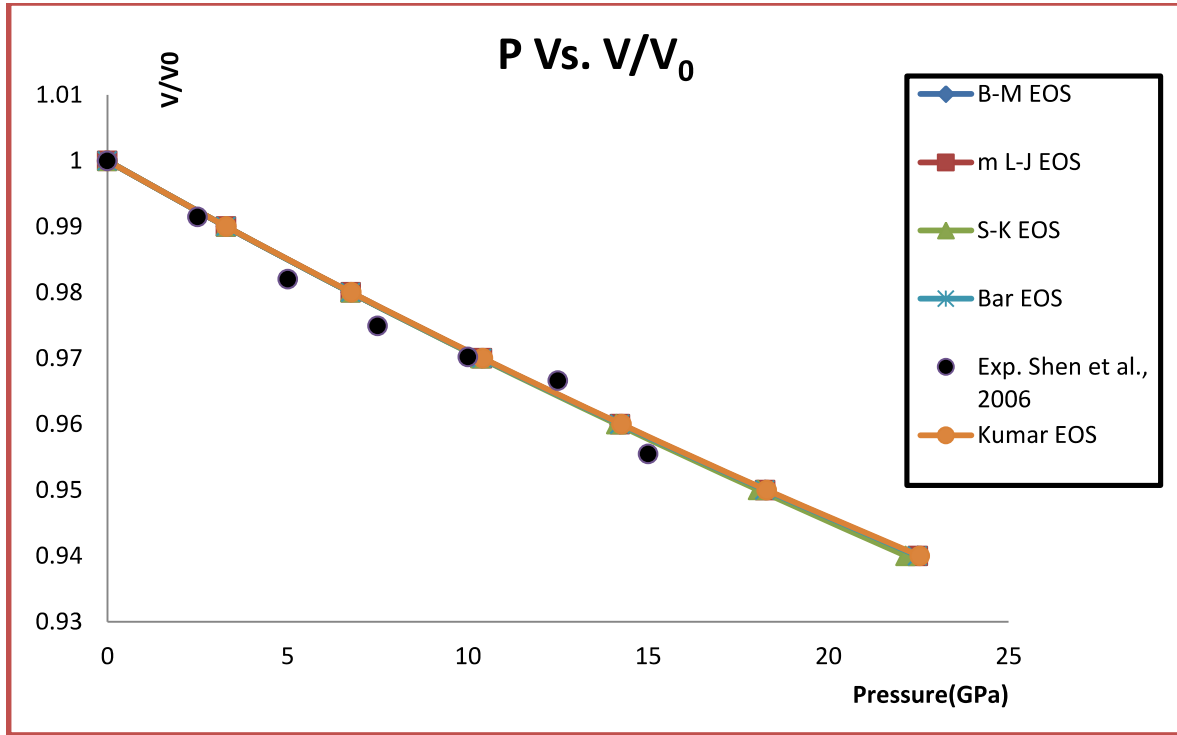
$$P_{Kum} = \frac{B_0}{A} [\exp\{A(1 - \eta)\} - 1] \quad (4.6)$$

تم حساب تغير  $\frac{V}{V_0}$  لنانو AIN باستخدام معادلات الحالة المختلفة والحصول على النتائج المدونة في

الجدول (4-2) والموضحة في الشكل (4-2)

الجدول (4-2): نتائج تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) للنانوAIN تحت الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة المختلفة، مقارنة مع البيانات التجريبية.

present work						Exp. Shen <i>et al.</i> , 2006	
$\frac{V}{V_0}$	$P_{B-M}$ GPa	$P_{mL-J}$ GPa	$P_{S-K}$ GPa	$P_{Bar}$ GPa	$P_{Kum}$ GPa	$P$ GPa	$\frac{V}{V_0}(Exp)$
1	0	0	0	0	0	0	1
0.99	3.2917	3.2915	3.2902	3.29068	3.3019	2.5	0.9915
0.98	6.7525	6.7519	6.7408	6.75095	6.773	5	0.982
0.97	10.3917	10.3901	10.3518	10.39045	10.4221	7.5	0.9749
0.96	14.219	14.218	14.1232	14.21704	14.2583	10	0.9702
0.95	18.2448	18.2463	18.055	18.24176	18.2912	12.5	0.9666
0.94	22.4801	22.4822	22.1472	22.4749	22.5309	15	0.9555



الشكل (4-2): تغير الحجم النوعي ( $\frac{V}{V_0}$ ) تحت الضغط العالي لجسيمات النانو AlN باستخدام معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.

#### (4-4-2) حساب تغير معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) للنانو AlN وفق معادلات الحالة المختلفة تحت الضغط العالي

بتعويض قيم  $B_0$ ،  $B'_0$  لنانو AlN المدونة، في الجدول (4-1)، في معادلات تغير ( $B_T$ ) تحت تأثير الضغط العالي والتي تم اشتقاقها مسبقاً والتي يمكن عرضها كما يلي:

(i) تغير معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) تحت الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ بيرخ-مرنكهان (B-M EOS)

$$B_{T(B-M)} = -V \left( \frac{dP_{B-M}}{dV} \right)_T = \frac{3}{2} B_0 \left[ \frac{7}{3} \eta^{-7/3} - \frac{5}{3} \eta^{-5/3} + \frac{9}{4} (B'_0 - 4) \eta^{-3} - \frac{7}{2} (B'_0 - 4) \eta^{-7/3} + \frac{5}{4} \right] \times (B'_0 - 4) \eta^{-5/3} \quad (4.7)$$

(ii) تغير معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) تحت الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ لينارد جونز المحورة (mL-J EOS)

$$B_{T(mL-J)} = B_0 \eta^{-n} [2\eta^{-n} - 1] \quad (4.8)$$

(iii) تغير معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) تحت الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ سينغ - كاو (Singh-Kao EOS)

$$B_{T(S-K)} = B_0 \eta [1 + (B'_0 + 1)(1 - \eta)] \quad (4.9)$$

(iv) تغير معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) تحت الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ باردين (Bardeen EOS)

$$B_{T(Bar)} = 3B_0 \left[ \frac{5}{3} \eta^{-5/3} - \frac{4}{3} \eta^{-4/3} + 3(B_0 - 3)\eta^{-2} - 5(B'_0 - 3)\eta^{-5/3} + 2(B'_0 - 3)\eta^{-4/3} \right] \quad (4.10)$$

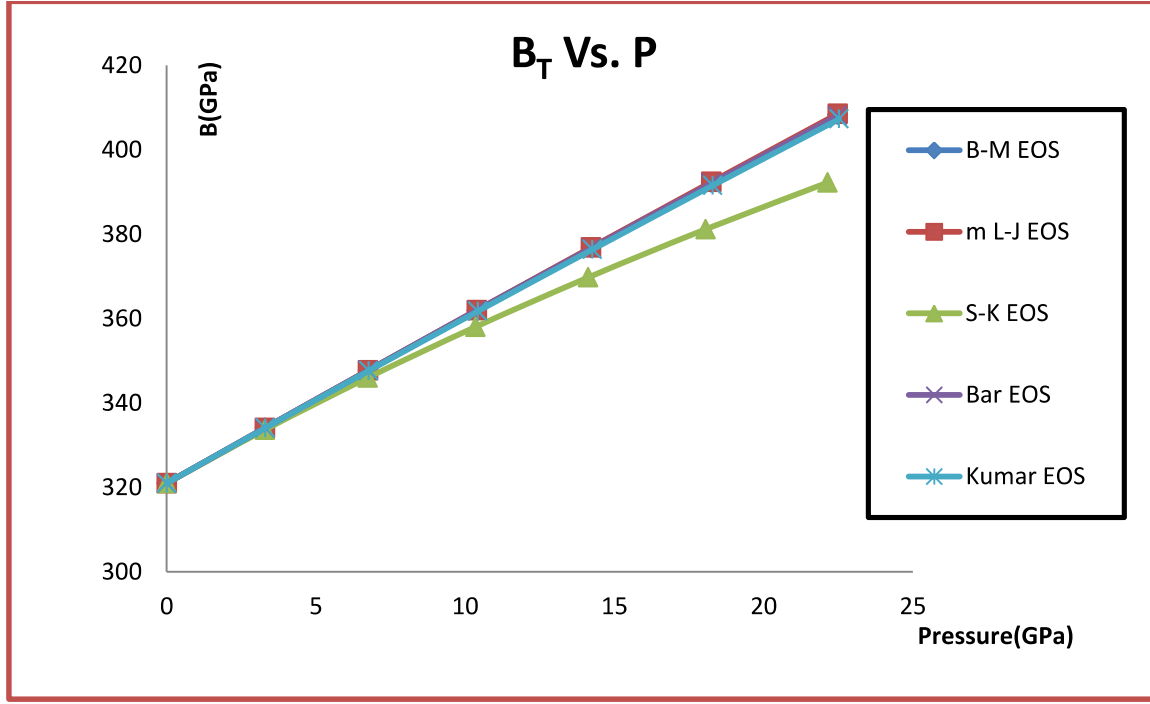
(v) تغير معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) تحت الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ كومر (Kumar EOS)

$$B_{T(Kum)} = B_0 \frac{V}{V_0} [\exp\{A(1 - \eta)\}] \quad (4.11)$$

تم حساب تغير  $B_T$  لنانو AIN وفق معادلات الحالة المختلفة والحصول على النتائج المدونة في الجدول (4-3) والموضحة في الشكل (4-3)

الجدول (4-3): نتائج تغير معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ ) للنانو AIN تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة

Present Work/GPa									
$P_{B-M}$	$B_{T(B-M)}$	$P_{mL-J}$	$B_{T(mL-J)}$	$P_{S-K}$	$B_{T(S-K)}$	$P_{Bar}$	$B_{T(Bar)}$	$P_{Kum}$	$B_{T(Kum)}$
0	321	0	321	0	321	0	321	0	321
3.2917	334.1028	3.2915	334.1077	3.2902	333.6795	3.29068	334.0936	3.3019	334.0834
6.7525	347.7483	6.7519	347.7683	6.7408	346.038	6.75095	347.72	6.773	347.6647
10.3917	361.9638	10.3901	362.0092	10.3518	358.0755	10.39045	361.9724	10.4221	361.7603
14.219	376.7776	14.218	376.8688	14.1232	369.792	14.21704	376.6678	14.2583	376.3875
18.2448	392.2203	18.2463	392.3774	18.055	381.1875	18.24176	392.0469	18.2912	391.5636
22.4801	408.324	22.4822	408.5554	22.1472	392.262	22.4749	408.0809	22.5309	407.3064



الشكل (4-3): تغير معامل المرونة الحجمي  $B_T$  تحت الضغط العالي لجسيمات النانو AlN وفق معادلات الحالة المختلفة

(4-4-3) حساب تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  للنانو AlN وفق معادلات

الحالة المختلفة تحت الضغط العالي

بتعويض قيم  $B_0$ ،  $B'_0$  لنانو AlN المدونة، في الجدول (4-1)، في معادلات تغير  $\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)$  تحت تأثير

الضغط العالي والتي يمكن عرضها كما يأتي:

(i) تغير معامل التمدد تحت الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ بيرخ-مرنكهان B- (M EOS)

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{B-M} = \frac{2}{3} \left[ \frac{7}{3} \eta^{-7/3} - \frac{5}{3} \eta^{-5/3} - \frac{9}{4} (B'_0 - 4) \eta^{-3} + \frac{7}{2} (B'_0 - 4) \eta^{-7/3} - \frac{5}{4} (B'_0 - 4) \eta^{-5/3} \right]^{-1} \quad (4.12)$$

(ii) تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  تحت الضغط العالي باستخدام معادلة

الحالة لـ لينارد جونز المحورة (m L-J EOS)

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{mL-J} = \eta^{4/3} \times [2\eta^{-4/3} - 1]^{-1} \quad (4.13)$$

(iii) تغير معامل التمدد النسبي  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  تحت الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة لـ

(Singh - Kao EOS)

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{S-K} = [\eta[1 + (1 + B'_0)(1 - \eta)]]^{-1} \quad (4.14)$$

(v) تغير معامل التمدد النسبي  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  تحت الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة

لـ (Bardeen EOS)

$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{Bar} = \frac{1}{3} \left[ \frac{5}{3} \eta^{-5/3} - \frac{4}{3} \eta^{-4/3} + (B'_0 - 3)(3\eta^{-2} - 5\eta^{-5/3} - 2\eta^{-4/3}) \right]^{-1} \quad (4.15)$$

(iv) تغير معامل التمدد النسبي  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  تحت الضغط العالي باستخدام معادلة الحالة

لـ (Kumar EOS)

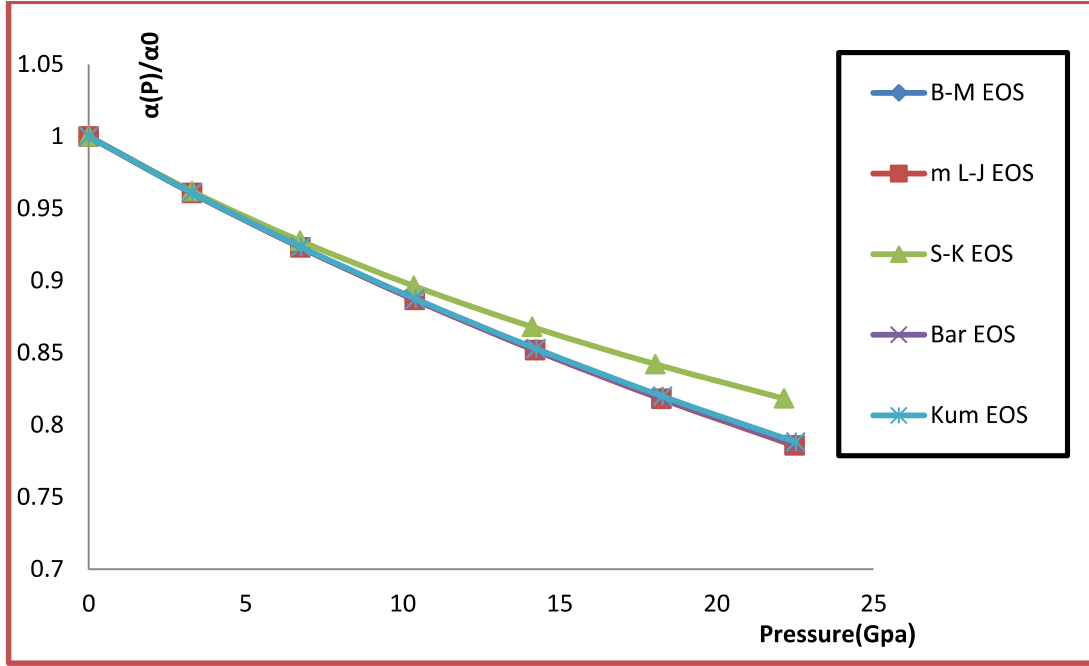
$$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)_{Kum} = \frac{V_0}{V} [\exp\{A(1 - \eta)\}]^{-1} \quad (4.16)$$

تم حساب تغير  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  لنانو AIN وفق معادلات الحالة المختلفة والحصول على النتائج المدونة في

الجدول (4-4) والموضحة في الشكل (4-4)

الجدول (4-4): نتائج تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  للنانون AIN تحت الضغط العالي وفق معادلات الحالة المختلفة.

Present Work									
$P_{B-M}$ GPa	$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)$ B-M	$P_{mL-J}$ GPa	$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)$ mL-J	$P_{S-K}$ GPa	$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)$ S-K	$P_{Bar}$ GPa	$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)$ Bar	$P_{Kum}$ GPa	$\left(\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}\right)$ Kum
0	1	0	1	0	1	0	1	0	1
3.2917	0.9608	3.2915	0.9607	3.2902	0.962	3.29068	0.9608	3.3019	0.96083
6.7525	0.9231	6.7519	0.923	6.7408	0.9276	6.75095	0.92315	6.773	0.9233
10.3917	0.8868	10.3901	0.8867	10.3518	0.8964	10.39045	0.88714	10.4221	0.88732
14.219	0.852	14.218	0.8517	14.1232	0.868	14.21704	0.8522	14.2583	0.85284
18.2448	0.8184	18.2463	0.818	18.055	0.8421	18.24176	0.818779	18.2912	0.81979
22.4801	0.7861	22.4822	0.7856	22.1472	0.8183	22.4749	0.7866	22.5309	0.7881



الشكل (4-4) تغير معامل التمدد النسبي الحراري  $\frac{\alpha(P)}{\alpha_0}$  تحت الضغط العالي للنانو AlN وفق معادلات الحالة المختلفة

من الشكل اعلاه يلاحظ توافق النتائج مع بعضها البعض وتفاوت طفيف في نتائج معادلة سينغ-كاو ربما لاعتبار قيمة  $B_0'$  ثابتة منذ بداية اشتقاق هذه المعادلة.

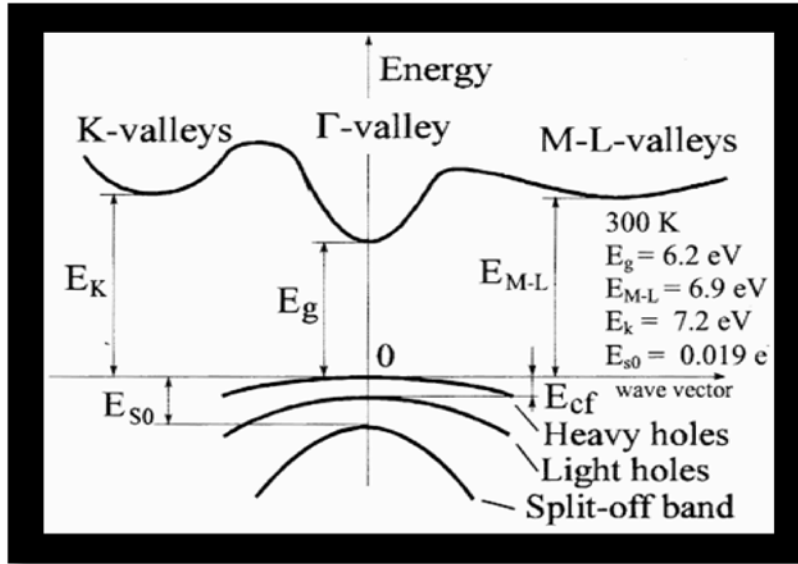
#### (4-5) حساب تغير فجوة الطاقة $E_g$ لـ AlN العياني تحت الضغط العالي

يمكن التعبير عن تغير فجوة الطاقة  $E_g$  تحت الضغط العالي بالمعادلة التالية (Levinshtein *et al.*, 2001)

$$E_g = E_g(0) + \frac{dE_g}{dP} P \quad (4.17)$$

إذ أن  $E_g$  فجوة الطاقة عند ضغط معين و  $E_g(0)$  فجوة الطاقة عند ضغط = صفر

الشكل (4-5) أدناه يوضح التركيب الحزمي لـ AlN



الشكل (4-5): التركيب الحزمي لنتريد الألمنيوم العياني AlN (Levinshtein *et al.*, 2001) من الشكل البياني، نلاحظ أن  $E_g(0) = 6.2 \text{ eV}$  لـ AlN بتعويض هذه القيمة في معادلة (4.17) ينتج

$$E_g = 6.2 + \frac{dE_g}{dP} P \quad (4.18)$$

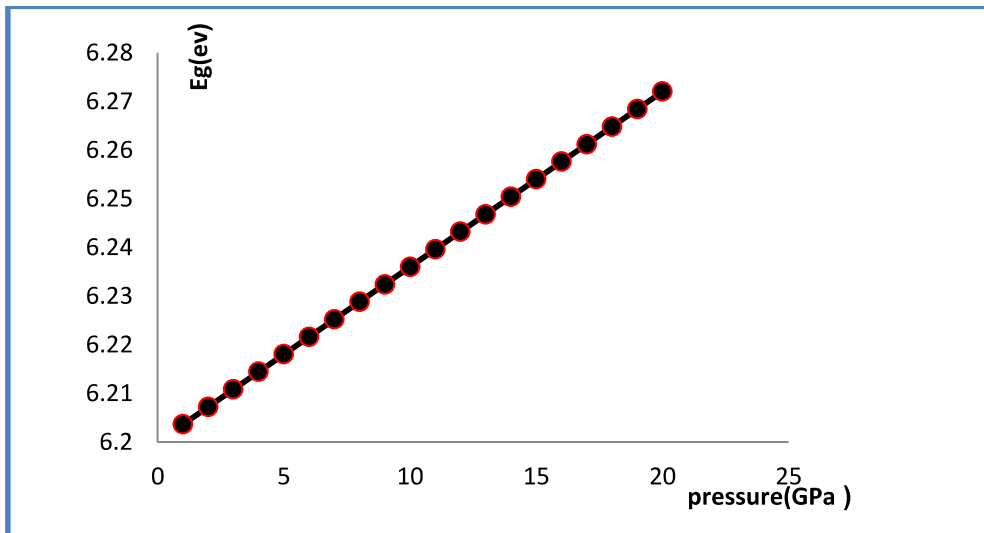
اذ ان

$$\frac{dE_g}{dP} = 3 \times 10^{-3} \text{ eV/kbar} \quad (\text{Gorczyca and Christensen, 1993}) \quad (4.19)$$

بتعويض المعادلة (4.19) في المعادلة (4.18) تم حساب تغير فجوة الطاقة لنتريد الألمنيوم AlN عند الضغوط المختلفة والحصول على النتائج المدونة في الجدول (4-5) والموضحة في الشكل (4-6).

جدول (4-5) نتائج تغير طاقة الفجوة لـ AIN العياني مع الضغط العالي

$E_g(\text{ev})$	P(Gpa)
6.2036	1
6.2072	2
6.2108	3
6.2144	4
6.218	5
6.2216	6
6.2252	7
6.2288	8
6.2324	9
6.236	10
6.2396	11
6.2432	12
6.2468	13
6.2504	14
6.254	15
6.2576	16
6.2612	17
6.2648	18
6.2684	19
6.272	20



شكل (4-6) تغير فجوة الطاقة لتنتريد الالمنيوم العياني AIN تحت الضغط العالي

إذ أن  $E_g$  لنتريد الألمنيوم العياني AIN تزداد تحت الضغط العالي وهذا يعني أن التوصيلية الكهربائية لنتريد الألمنيوم العياني تقل تحت الضغط العالي، ويبدو أن هذا مقبولاً لأن أشباه الموصلات تُعرّف على أنها تلك المواد التي تزيد موصليتها مع ازدياد درجة الحرارة أو بعبارة أخرى، تنخفض موصليتها الكهربائية مع ارتفاع الضغط.

## (4-6) المناقشة

1- يظهر الشكل (4-2) توافق النتائج الحالية التي تم الحصول عليها باستخدام معادلات الحالة لـ (B- (M, mL-J, Bardeen, Kumar)، والتي تستخدم عادة في دراسة المواد العيانية، وكذلك نتائج معادلة الحالة لـ S-K، والتي هي معادلة حالة لمواد النانو مع البيانات التجريبية، فضلاً عن توافق نتائج جميع هذه المعادلات مع بعضها البعض، من هذا يمكن أن نستنتج أن معادلات الحالة المستخدمة في المواد العيانية يمكن استخدامها أيضاً لدراسة مواد النانو.

2- في الشكل (4-3)، قد يُعزى انحراف النتائج التي تم الحصول عليها باستخدام معادلة الحالة S-K عن النتائج التي تم الحصول عليها باستخدام باقي معادلات الحالة إلى المبالغة في تقدير اعتبار  $B'_0$  مقداراً ثابتاً ( $B'_0=4$ ) منذ بداية اشتقاق معادلة الحالة S-K EOS.

3- يمكن تفسير انحراف نتائج معادلة الحالة S-K في الشكل (4-4) بنفس سبب النقطة في هذه المناقشة.

4- يوضح الشكل (4-6) زيادة فجوة طاقة AIN مع زيادة الضغط العالي. والضغط العالي يؤدي إلى انخفاض في ثابت الشبكة، وبالتالي يغير تركيب فجوة الطاقة ونتيجة لذلك تحدث زيادة في فجوة طاقة AIN العياني.

5- يمكن أن تُعزى شبه الموصلية في AIN، وفقاً لنموذج LCAO، إلى الترتيب الإلكتروني  $sp^3$  للغلاف الخارجي في AIN.

## الفصل الخامس

الاستنتاجات - الأعمال المستقبلية

*Conclusions and Future  
Works*

## الفصل الخامس

### الاستنتاجات والاعمال المستقبلية

## Conclusions and Future Works

### Conclusions

### (5-1) الاستنتاجات

- 1- البيانات التجريبية المدونة في الجدول (3-1). أظهرت اعتماد قيمة معامل المرونة الحجمي عند ثبوت درجة الحرارة، ( $B_0$ ) تحت الظروف الاعتيادية، على حجم جسيم النانو.
- 2- عند حساب تغير  $\frac{V}{V_0}$  تحت الضغط العالي فان الأشكال (3-1, 3-2, 3-3) والشكل (4-2) جميعها أظهرت إمكانية استخدام معادلات الحالة الشائعة الاستخدام في المواد العيانية (B-M, mL-J, Bardeen) لغرض اجراء حسابات تغير  $\frac{V}{V_0}$  تحت الضغط العالي لجسيمات نانو PbS جسيمات نانو AIN من خلال :

- أ- توافق نتائج معادلات الحالة (B-M, mL-J, Bardeen) مع البيانات التجريبية ومع بعضها البعض ومع معادلات الحالة الخاصة بمواد النانو (Kumar, S-K) EOSs .
- ب- الاختلاف الطفيف الذي أظهرته النتائج المتحصلة باستخدام معادلة S-K EOS (التي تعد معادلة حالة خاصة بمواد النانو)، في الشكلين (3-2, 3-3) يمكن أن يعزى لاعتبار قيمة  $B'_0$  مقدار ثابت (=4)  $B'_0$  لجميع المواد الصلبة منذ المراحل الاولى في اشتقاق معادلة الحالة (S-K EOS).
- ج- إذا كان الحصول على معادلة حالة للمواد الصلبة باقل عدد من المتغيرات هدفاً منشوداً للأبحاث العلمية ونجح عند تطبيق معادلات الحالة المختلفة في حسابات الضغط العالي. الا ان اعتبار  $B'_0$  مقدارا ثابتا (=4)  $B'_0$  لجميع المواد الصلبة عند اشتقاق اي معادلة حالة للمواد الصلبة لا يعد سبيلا واعدا في صياغة معادلات الحالة للمواد الصلبة.

### Future Works

### (5-2) الاعمال المستقبلية

- 1- تأثير حجم جسيمات النانو على الخصائص الترموديناميكية لمواد النانو تحت الضغط العالي.
- 2- دراسة تأثير الضغط العالي على خصائص أشكال مختلفة من مواد النانو مثل اسلاك النانو.
- 3- دراسة تأثير الضغط العالي على فجوة الطاقة في النانو AIN فضلا عن AIN العياني.

المصادر

References

## References

1. Ahmad S., Bhattacharya S., Singh A., Basu R., Bhatt R., Bohra A. K., Muthe K. P., and Gadkari S. C., (2017), Tailoring thermal conductivity in PbS by incorporation of copper for thermoelectric applications, AIP Conference Proceedings 1832, 110008, <https://doi.org/10.1063/1.4980632>.
2. Ahmeda M. H. S., Ahmida N. H. S., and Ahmeda A. A., (2017), Introduction to nanotechnology: definition, terms, occurrence and applications in environment, , Libyan International Medical University Journal (LIMU Journal), Volume 2, PP 12-26, <https://doi.org/10.21502/limuj.003.02.2017>.
3. Albrithen H., (2021), <https://nano.ksu.edu.sa/ar/nanotech-shapes>.
4. Alkammash I. Y., (2013), Evaluation of pressure and bulk modulus for alkali halides under high pressure and temperature using different EOS, Journal of the Association of Arab Universities for Basic and Applied Sciences, 14, p. 38-45, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jaubas.2013.01.001>.
5. Al-suwaifi M. M. T., and Al-sheikh A. M., (2021), Size dependent thermo elastic properties of nano lead sulfide (PbS) under high pressure, Journal of Rafidain science, Vol. 30, No. 3, pp. 12-20, ISSN: 1608-9391. e-ISSN: 2664-2786.
6. Anderson O. L., and Isaak D. G., (1993), The dependence of the Anderson Grüneisen parameter  $dT$  upon compression at extreme conditions. J. Phys. and Chem. Solids, 54, 221–227.
7. Anderson O. L., Oda H. and Isaak D.G., (1992), A model for the computation of thermal expansivity at high compression and high temperature: MgO as an example. Geophys. Res. Lett. 19, 1987– 1990.
8. Aritan S., (2006), Bulk Modulus, Wiley encyclopedia of biomedical engineering, doi:10.1002/9780471740360.ebs0206.
9. Balasubramanian C., Godbole V. P., , Rohatgi V. K., Das A. K., and Bhoraskar S. V., (2004), Synthesis of nanowires and nanoparticles of cubic aluminium nitride, Nanotechnology, Institute of physics publishing, 15, p370–373, [stacks.iop.org/Nano/15/370](https://stacks.iop.org/Nano/15/370) (DOI: 10.1088/0957-4484/15/3/024).
10. Bardeen J., (1938), Compressibilities of the alkali metals. J. Chem. Phys. 6, 372–377.
11. Bhatt J. C., Kholiya K., and Kumar R., (2013), High pressure equation of state for nanomaterials, Hindawi Publishing Corporation ISRN Nanotechnology, volume 2013, Article ID 404920, 5 pages.
12. Bian K., Bassett W., Wang Z., and Hanrath T., (2014), The Strongest Particle: Size-Dependent Elastic Strength and Debye Temperature of PbS Nanocrystals, The Journal of Physical Chemistry Letters, 5, 3688–3693.

13. Birch F., (1947), Finite elastic strain of cubic crystals, *Phys. Rev.* 71, 809-824.
14. Brown and Corrie C., (2007), *Equine Infectious Diseases*. Elsevier. 546-549. ISBN 9781416024064.
15. Brown, Karen A., Moss and Rav I., (2007). Opiate Usage in Children with Obstructive Sleep Apnea Syndrome, *Anesthesia & Analgesia*, 105 (2): 547–548, doi:10.1213/01.ane.0000268543.56134.c4. ISSN 0003-2999.
16. Butler R., and Anderson D. L., (1978), Equation of state fits to the lower mantle and outer core. *Phys. Earth Planet. Inter.* 17, 147–162.
17. Chandra J., Kandpal D., and B. R. K. Gupta, (2008), High temperature study of nanomaterials using integral form of equation of state (IFEOS), *High temperature-High pressure*, VOL. 37, P. 325-333.
18. Chandra J. and Kholiya K., (2013), Size dependent compressibility of nano crystalline materials, *Nano science and nano technology: An Indian Journal*, 7 (6), 212-216, ISSN:0974-7494.
19. Chandra J. and Kholiya K., (2016), Compression of nanomaterials under pressure, *Journal of Taibah University for Science*, 10, p.386-392 .
20. Elamin W. M., Endan J. B., Yosuf Y. A., Shamsudin R., and Ahmedov A., (2015), High pressure processing technology and equipment evolution, *Journal of Engineering Science and Technology*, Review 8(5),75- 83. <http://www.jestr.org/> .
21. Eremets M. I., (1996), "High pressure experimental methods", Oxford Science Publications.
22. Fraga M. A., Furlan H., Pessoa R.S. and Massi M., (2014), Wide band gap semiconductor thin films for piezoelectric and piezoresistive MEMS sensors applied at high temperatures: an overview, *Microsyst Technol* (2014) 20:9–21, DOI 10.1007/s00542-013-2029-z .
23. Fu X., (2016), Aluminum nitride wide band-gap semiconductor and Its basic characteristics, 6th International Conference on Electronic, Mechanical, Information and Management (EMIM2016), North China Electric Power University, Beijing, China xinruF@163.com.
24. Gamal M. A., (2016), Introduction to nano materials, Egyptian Researchers, Available at: <https://egyresmag.com>.
25. Gilvarry J. J., (1957), Temperature-dependent equations of state of solids, *Journal of applied physics*, Volume 28. Number 11, p1253-1261; doi: 10.1063/1.1722628.
26. Gorczyca I., Christensen N. E., (1993), *Physica B* vol. 185, pp. 410-414. Cited in Levinstein M. E., Rumyanstev S. L., Shur M. S., (2001), "Properties

- of Advanced Semi-Conductor Materials", (GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe) ", A Wiley-Interscience publication, 1993, John Wiley and sons, INC, 2001.
27. Guisbiers G., and Buchaillet L., (2008), Thermo-opto-mechanical properties of AlN nanostructures: a promising material for NEMS applications, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 41, 172001 (4pp) , <http://dx.doi.org/10.1088/0022-3727/41/17/172001>.
  28. Hameed K. S. and Al-sheikh A. M., (2011), Theoretical study of energy gap for silicon and germanium under high pressure, *Raf. J. Sci.* 22 (2): pp. 58-68.
  29. Indrawati O., Martina L., Ann Van L., Marc H., (2008). Effect of high-pressure processing on colour, texture and flavour of fruit- and vegetable-based food products: a review, *Trends in Food Science & Technology*, 19 (6): 320–328, doi:10.1016/j.tifs.2008.04.001. ISSN 0924-2244.
  30. Jahromi H. D. and Moaddel M., (2019), *Mater. Res. Express* , p. 1-10, <https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab513d>.
  31. Jamieson J.C., Lawson A. W., and Nachtrieb N. D., (1959), "New device for obtaining x-ray diffraction patterns from substances exposed to high pressure", *Rev. Sci. Instrum.* 30, 1016.
  32. Jay, James M., Loessner, Martin J., Golden and David A., (2009), "Microbiologia degli alimenti", *Food*. doi:10.1007/978-88-470-0786-4. ISSN 2035-4770.
  33. Juixun, S., (2005), A modified Lennard Jones-type EOS for solids strictly satisfying the spinodal condition, *Journal of Physics: Condens Matter*, 17, p. L103-L111.
  34. Katsura T., and Tange Y., (2019), A Simple derivation of the Birch–Murnaghan equations of state (EOSs) and comparison with EOSs derived from other definitions of finite strain, *minerals*, 9, 745; doi:10.3390/min9120745, <http://www.mdpi.com/journal/minerals>.
  35. Keiper A., (2003), The nanotechnology revolution, *The New Atlantis*, Number 2, Summer 2003, pp. 17-34.
  36. Keller K., Schlothauer T., Schwarz M., Heide G., & Kroke E., (2012), Shock wave synthesis of aluminium nitride with rocksalt structure, *High Pressure Research*, 32:1, 23-29, DOI: 10.1080/08957959.2011.642990.
  37. Knorr K., Ehm L., Hytha M., Winkler B., and Depmeier W., (2018), The high-pressure  $\alpha/\beta$  phase transition in lead sulfide (PbS), *EPJ*, 7 pages, DOI:10.1140/epjb/e2003-00034-6, Cite as: arXiv:cond-mat/0210013.
  38. Kondo K., Sawaoka A., Sato K., and Ando M., 1982, Shock compression and phase transformation of AlN and BP, *AIP Conf. Proc.* 78, pp. 325–329.

39. Kotadiya N. B., Kothari A. J., Tiwari D., Chaudhuri T. K., (2012), Photoconducting nanocrystalline lead sulphide thin films obtained by chemical bath deposition, *Appl. Phys. A*, 108:819–824, DOI 10.1007/s00339-012-6974-7.
40. Kranzmann, A., Brook R. J., (1991). Aluminum Nitride. *Concise Encyclopedia of Advanced Ceramic Materials, : An Overview*, p. 8–9, [Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart, Germany] <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-034720-2.50011-3>.
41. Kumar M., (1995), High pressure equation of state for solids. *Physica B* 212, 391–394.
42. Kumar M., (1996), Application of high pressure equation of state for different classes of solid. *Phys. B: Condens. Matter* 217, 143–148.
43. Levinshtein M. E., Rumyantsev S. L., Shur M. S., (2001), " Properties of Advanced Semi-Conductor Materials, (GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe) ", p. 33, A wiley-Interscience publication, John Willy and sons, INC.
44. Lignos I., Stavrakis S., Kilaj A., and deMello A. J., (2015), Millisecond-Timescale Monitoring of PbS Nanoparticle Nucleation and Growth Using Droplet-Based Microfluidics, *Small-MayJournal*.
45. Lu X., Zhao Y., and Wang C., (2005), Fabrication of PbS Nanoparticles in Polymer-Fiber Matrices by Electrospinning, *Adv. Mater.*, 17, 2485–2488, DOI: 10.1002/adma.200500196.
46. Mohamad A. H., Abdullah O. Gh., and Saeed S. R., (2020), Effect of very fine nanoparticle and temperature on the electric and dielectric properties of MC-PbS polymer nanocomposite films, *Results in Physics*, Volume 16, 102898, <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2019.102898>.
47. Moss and Ralph, (2007), Women in the front line, *New Scientist*, **194** (2605): 55, doi:10.1016/s0262-4079(07)61320-7. ISSN 0262-4079.
48. Mujica A., Ruio A., Munoz A., and Needs R.J., (2003), High - pressure phases of group-IV, III-V, and II-VI compounds, *Reviews of Modern Physics*, Vol.75, No. 3, DOI: 10.1103 / REVMODPHYS.75.863.
49. Patra T. K., Chan H., Podsiadlo P., Shevchenko E. V., Sankaranarayanan S. KRS, and Narayanan B., (2019), Ligand dynamics control structure, elasticity, and high-pressure behavior of nanoparticle superlattices, *Nanoscale*, Ligand dynamics control structure, elasticity, and high-pressure behavior of nanoparticle superlattices, vol. 11, Issue 22, 25 pages, DOI: 10.1039/C8NR09699F.

50. Paul A., Tipler, and Mosca, G. (2008), "Physics for scientists and engineers", 1, (6th Edition). New York, NY: Worth Publishers. p.666-670. ISBN 1-4292-0132-0.
51. Piermarini G. J., Blokh S., Barnett J. D., and Forman R. A., (1975), Calibration of the pressure dependence of the R1 ruby fluorescence line to 195 kbar, *J. Appl. Phys.*, 46, 2774.
52. Quadri, S. B., Yang, J., Ranta, R. B., Skelton, E. F. (1996). *Appl. Phys. Lett.* 69 (15), Cited in Chandra, J. and Kholiya, K., (2016).
53. Rubio and Teresa, (2016), Summaries of Safety Labeling Changes Approved by the FDA: Boxed Warnings Highlights July-September 2016, *Hospital Pharmacy*, 51 (11): 941–943. doi:10.1310/hpj5111-941. ISSN 0018-5787.
54. Schilling J. S., (1998), *J. Phys. Chem. Solids*, The use of high pressure in the basic and materials science, vol. 59, No. 4, 553-5613 .
55. Sharma U. D. and Kumar M., (2010), Effect of pressure on the nanomaterials, *Physica B* 405, 2820-2826.
56. Shen L. H., Li X. F., Ma Y. M., Yang K. F., Lei W. W., Cui Q. L., and Zou G. T., (2006), "Pressure-induced structural transition in AlN nanowires", *Applied Physics Letters*, vol. 89, 141903, doi: 10.1063/1.2358125, 2006
57. Singh B. P., (2004), Top-down and bottom-up approaches for synthesis of nanomaterials, *Nanoscience and nanotechnologies I*, drbeerpal@gmail.com.
58. Singh M., Kao M., (2013), Study of nanomaterials under high pressure, *Advances of Nanoparticles*, 2, p350-357.
59. Singh M., Tlali S. and Narayan H., (2012), Present dependent Volume Change in Some Nanomaterials Using an Equation of State, *Nanoscience and Nanotechnology*, 2(6), 201-207.
60. Singh P. P., Kumar M., (2004), Temperature dependence of bulk modulus and second-order elastic constants, *Physica B*, 344, 41–51.
61. Sonntag R. E., Borgnakke C., and Van Wylen G. J., (1998), "Fundamentals of Thermodynamics", John Wylen, & Sons, Inc., New York.
62. Srivastava A., and Tyagi N., (2012), Semiconductor Nanocrystals, Research Gate, <https://www.researchgate.net/publication/250308372>.
63. Teke A., & Morkoç H., (2006), Group III Nitrides, *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials*, 753–804. doi:10.1007/978-0-387-29185-7\_32.
64. Tripathi P., Misra G., and Goyal S. C., (2006), Equation of state for group IV–IV semiconductors, *Solid State Communications*, 139(3), 132–137. doi:10.1016/j.ssc.2006.03.038.

65. Ullmann W., Pan'kov V. L., (1976), Publ. No. 41, Potsdam: Central Institute of Physics of the Earth.
66. Weir C. E., Lippincott E. R., Van Valkenburg A. and Bunting E. N., (1959), "Infrared studies in the 1-15 micron region to 30,000 atmospheres", J. Res. Natl. Bur. Stand., Sect. A 63, 55.
67. Young, D., (2007), Equation of state, Cytoclonal Pharmaceuticals Inc, p1-10, file://J:\aaa.htm.
68. Zhang Y., Ke X., Chen C., Yang J., and Kent P. R. C., (2009), Thermodynamic properties of PbTe, PbSe, and PbS: First-principles study, Phys. Rev. B 80, 024304, DOI: 10.1103/PhysRevB.80.024304.

## Abstract

This thesis provides a theoretical high pressure study of thermo elastic characteristics of Nano lead sulfide particles PbS with three different sizes (2.6nm, 5.4nm and 8.8nm), and Nano aluminum nitride particles(Nano AlN) by calculating variation in  $(V/V_0)$ ,  $(B_T)$ ,  $(\alpha_r)$  under high pressure by using different equations of states which based on different principles in their derivation. Further to evaluating variation in energy gap of bulk AlN under high pressure.

The volume changes  $(V/V_0)$ , bulk modulus changes  $(B_T)$ , and relative expansion coefficient  $(\alpha(P)/\alpha_0)$  under high pressure were calculated using the Birch-Murnaghan equation of state (B-M EOS), the modified Lenard-Jones equation of state (mL-J EOS), and Bardeen EOS, and these equations are one of the equations of state Commonly used in the study of macroscopic materials, as well as using the Sing-Kao equation of state (S-K EOS) and Kumar equation of state, which are two equations of state for Nano materials.

The obtained results were compared with the available experimental data. This comparison showed the possibility of using well-known equations of state for macroscopic materials such as the Birch-Murnaghan equation of state (B-M EOS), the modified Lenard-Jones equation of state (mL-J EOS) and Bardeen equation of state (Bardeen EOS) in making the calculations for Nano materials through the agreement of the results that were Obtained using these equations with experimental data. Also, the results obtained using the Kumar EOS equation, which is one of the equations of state for Nano materials, are consistent with the experimental data and with the results of the used equations of state. Whereas, the results obtained using the Sing-Kao equation (S-K EOS), showed a discrepancy from the experimental data and the results of the rest of the used equations, especially when performing Nano PbS calculations, as this discrepancy increased as the size of the PbS nanoparticles decreased. The discrepancy shown by the results of the S-K EOS calculations can be attributed

to considering the derivative of the bulk modulus with respect to pressure ( $B'_0$ ) has a constant value ( $B'_0=4$ ) in deriving this equation since the beginning of the derivation. Note that this discrepancy did not appear when performing AlN calculations.

During calculating the energy gap change for aluminum nitride under high pressure, it appeared that the energy gap increases with the high pressure increasing. This result is synonymous with what is known about semiconductors whose conductivity increases (the energy gap narrows with temperature increasing).

الملحق

**SUPPLEMENT**

**University of Mosul**  
**Collage of Science**



**Theoretical High Pressure Study of Nano Materials**  
**Lead Sulfide and Aluminum Nitride**

**Madlool Mhammed T. Al-Suwaifi**

Master Thesis

**Physics**

**Supervised by**

**Assist. Prof. Dr. Adnan Mhammed Al-Sheikh**

---

**1443 A.H.**

**2021A.D.**

**University of Mosul**  
**Collage of Science**



**Theoretical High Pressure Study for Nano Materials**  
**Lead Sulfide and Aluminum Nitride**

M.Sc. Thesis Submitted By

**Madlool Mhammed Tbeen Al-Suwaifi**

*To*

The Council of the Collage of Science Department of Physics University of  
Mosul In Partial Fulfillment of the Requirements for the

Master's Degree

*In*

**Physics**

**Supervised by**

**Assist. Prof. Dr. Adnan Mhammed Al-Sheikh**

---

**1443 A.H.**

**2021 A.D.**