



جامعة الموصل
كلية العلوم

الخصائص الترموداينميكية وخصائص المرونة لبعض مواد النانو تحت
الضغط العالي

عبدالوهاب ابراهيم غزال عواد

رسالة ماجستير

علوم الفيزياء

بإشراف

الاستاذ مساعد الدكتور عدنان محمد الشيخ حسين

الخلاصة

في هذه الرسالة تم استخدام معادلات الحالة المختلفة (برخ- برنكهان، لينارد- جونس المحورة، ساي- كايو، تايت) لحساب تأثير الضغط العالي على النانو نيكل وعلى النيكل العياني ونانو ثنائي أوكسيد التيتانيوم باحتساب التغيرات في كل من (الحجم النوعي، معامل المرونة الحجمي عند ثبوت درجة الحرارة ومعامل التمدد الحراري النسبي). اظهرت مقارنة النتائج المتحصلة مع البيانات التجريبية امكانية استخدام معادلات الحالة الشائعة الاستخدام في دراسة المواد العيانية (برخ- برنكهان، لينارد- جونس المحورة ، تايت) لدراسة مواد النانو.

باعتماد تعريف معامل المرونة الحجمي وتوظيفه مع معادلات الحالة المختلفة امكّن وضع صياغات لتغير معامل مرونة الحجمي ومعامل التمدد الحراري تحت الضغط العالي وفقاً لكل معادلة حالة. إن مبالغة ساي- كايو، باعتبار B'_0 مشتقة معامل المرونة الحجمي بالنسبة للضغط مقدار ثابت ($B'_0 = 4$)، منذ بداية اشتقاق معادلة الحالة ((S-K EOS ربما يكون هو السبب في جعل نتائج هذه المعادلة غير منسجمة مع نتائج بقية معادلات الحالة المستخدمة عند حساب تغيرات $\alpha_r B_T$ ، رغم أن نتائجها عند حساب تغيرات V/V_0 تحت الضغط العالي كانت متوافقة مع البيانات التجريبية ومع نتائج بقية معادلات الحالة المستخدمة في هذه الرسالة.

إن توليف تقريب كرونشين مع معادلة الحالة يعد مدخلاً ناجحاً لحساب تغير طيف التردد الفونوني تحت الضغط العالي إذ جاءت النتائج المتحصلة في هذه الرسالة متوافقة مع الاستنتاجات النظرية لتغير طيف التردد الفونوني للمواد الصلبة تحت الضغط العالي.

Abstract

In this thesis different equations of state (Birch-Murnghan, modified Lenard-Jones, Sigh-Kao, and Tiat) EOSs have been used to evaluate the effect of high pressure on bulk and nano nickel further to Nano titanium dioxide by calculating variations in specific volume, isothermal bulk modulus and thermal expansion coefficient.

Comparing obtained results with experimental data show the possibility of using the well-known (B-M , mL-J, Tait) EOSs in studying nano materials under high pressure.

Based on the definition of bulk modulus and its use in different EOSs. Formalism for variations of isothermal bulk modulus and relative thermal expansion coefficient have been established in different formula according to each EOS.

Sigh-Kao's exaggeration in considering B_0' a constant ($B_0'=4$) from the beginning of (S-K) EOS derivation it might be reason for making the results of this EOS inconsistent with the results of the rest of EOSs used in calculating variation in B_T and α_r , although its results when calculating V/V_0 under high pressure were consistent with the experimental data and with the results of the rest of EOSs used in this thesis.

Combining Grüneisen approximation with EOS considered a successful approach for calculating the phonon frequency spectrum variation under high pressure, as the results obtained in this thesis are consistent with the theoretical conclusions of the change in the phonon frequency spectrum of solids under high pressure.

**University of Mosul
College of Sciences**



**Thermoelastic properties for some nanomaterial's
under high pressure**

Abdulwahab Ibrahim Ghazal Awwad

Master Thesis
Physics Science

Supervised by

Assist. Prof. Dr. Adnan Mohammed Al-Sheikh

1443 A.H

2021A.D