جامعة الموصل
كلية التربية للعلوم الصرفة

دراسة نظرية لِبعض مواد النـــــانو تحت الضغط العالي

أســماء فــريد عبداللطيف الطــائي

رسالة ماجستير

الفيزياء

بإشـــــــراف

أ. م. د .عدنــان محمد الشــيخ

١٤٤١هـ ٢٠٢٠ م

الخلاصة

تم في هذه الرسالة دراسة تغير الخصائص الثرموديناميكية ($\frac{V}{V_o}$ ومعامل المرونة الحجمي) للنانو جرمانيوم تحت الضغط العالي باستخدام عدداً من معادلات الحالة المعروفة والتي تستخدم لِدراسة المواد العيانية (معادلة الحالةِ ل برخ–مرنكهان، معادلة الحالة لِ ليناردـ جونس المحورة، معادلة الحالة لِ فينيت، ومعادلة الحالة لِ ثومسن)، فضلآ عن استخدام معادلة الحالة لِ (Singh and Kao;2013) وهي معادلة حالة تعني بمواد النانو، وكذلك تم مقارنة النتائج المستحصلة مع البيانات التجريبية، وأظهرت النتائج إمكانية استخدام معادلات الحالة المستخدمةِ لحسابات المواد العيانية لدراسة مواد النانو تحت الضغط العالي. كذلك أظهرت النتائج عند حساب تغير معامل المرونة الحجمي تحت الضغط العالي زيادة معامل المرونة الحجمي للنانو جرمانيوم تحت الضغط العالي مع تفاوت نسبي في الزيادة بين المعادلات المختلفة بما في ذلك معادلة (Singh and Kao;2013) الخاصة بمواد النانو. وتناولت الرسالة ايضآ دراسة تغير فجوة الطاقة للنانو جرمانيوم تحت تأثير الضغط العالي واظهرت النتائج المستحصلة زيادة فجوة الطاقة للنانو جرمانيوم مع زيادة الضغط العالي المسلط على العينة، كذلك تمت دراسة طيف التردد الفونوني لِحديد النانو تحت الضغط العالي بتوليف تقريب كرونشين مع معادلة الحالة المعروفة لِ برخ–مرنكهان، وكذلك مع معادلة الحالة الخاصة بمواد النانو (Singh and Kao;2013 ، وكذلك أظهرت مقارنة النتائج التي تم الحصول عليها مع البيانات التجريبية توافقآ جيدآ عند الضغط (27.8Gpa)، في حين أظهرت النتائج الحالية مايستوجب الملاحظة عن الضغط (9.4Gpa) اذ تظهر النتائج التجريبية زيادة في قيمة كثافة الأنماط تحت الضغط (9.4Gpa) عكس ماظهرت النتائج النظرية الحالية، وعكس ماظهرت النتائج التجريبية للأبحاث المنشورة وماكدته النتائج الحالية عند الضغط (27.8Gpa) .

Abstract

In this thesis the change of thermodynamic properties of $(\frac{V}{V_o})$ and the bulk modulus for nano germanium under high pressure were studied by using a number of equation of states , which are used to study macroscopic materials (B-M equation of state , Modified Linnard -Jones equation of state , Vinet equation of state and Thomsen equation of state). As well as using the equation of state (Singh and Kao;2013).Which is an equation of state that concerned with nano materials. The obtained results were compared with the experimental data, and the results have shown the possibility of using the state equation used to calculate the macroscopic material to quantity nanomaterial under high pressure. In addition, the results showed an increase in the bulk modulus (module) of nano-Germanium under high pressure. When calculating the change of the bulk modulus under high pressure, with a relative disparity in the increase between the equation of state including (Singh and Kao;2013) for nanomaterials.The thesis also dealt with the study of the change in the energy gap of high pressure for nano-germanium under the influence of high pressure nano germanium, and the results obtained showes an increase in the energy gap of nano-germanium with a high pressure increase applied to the sample. The phonon frequency spectrum of the nano iron under high pressure was studied by combining the Grüneisen approximation with the the equation of state well known the equation of state of (Birch-Murunghan), as well as with the EOS for the nanomaterials (Singh and Kao; 2013) The comparison of the results obtained with the experimental data shows that a good compatibility at pressure (27.8 Gpa).While the current results showed that it should be noted about the pressure of (9.4 Gpa). As the experimental results show an increase in the value of the density of state under pressure (9.4Gpa), contrary to what the current

theoretical results shows, and in contrast to what the experimental results of the published research and confirmed by the current results at pressure (27.8 Gpa).

University of Al Mosul

College of Education for Pure Sciences

Theoretical Study For Some Nanomaterials Under High Pressure

Asmaa Freed AL-tayee

M. Sc.

Physics

Supervised By

Asst. Prof. Dr. Adnan Muhammed AL-sheikh

2020 A.D **1441 A.H**