



ISSN: 1608-9391
e-ISSN: 2664-2786

Received 3 /2/2020
Accepted 17/5 /2020

استخدام معادلات حالة مختلفة لدراسة نسبة الحجم، معامل المرونة الحجمي وفجوة الطاقة في النانو جرمانيوم تحت الضغط العالي

اسماء فريد عبد اللطيف

قسم الفيزياء /كلية التربية للعلوم الصرفة/ جامعة الموصل

E-mail: violetrose2222@gmail.com

عدنان محمد الشيخ

قسم الفيزياء /كلية العلوم/ جامعة الموصل

E-mail: dr.adnan@uomosul.edu.iq

الملخص

تم في هذا البحث استخدام معادلات الحالة (معادلة برخ-مرنكهان، معادلة فينيت، معادلة لينارد جونس المحورة، معادلة ثومسن، معادلة Madan) لدراسة تأثير الضغط العالي على النانو جرمانيوم من خلال احتساب التغير بالحجم النوعي V/V_0 ، وتغير معامل المرونة الحجمي B_T ، وفجوة الطاقة E_g ، تحت تأثير الضغط العالي وقد اظهرت جميع المعادلات المستخدمة توافقاً مع النتائج التجريبية عند حساب V/V_0 للنانو-جرمانيوم تحت الضغط العالي وزيادة في معامل المرونة الحجمي B_T مع زيادة الضغط العالي، وزيادة فجوة الطاقة E_g للنانو جرمانيوم مع زيادة الضغط العالي.

الكلمات الدالة: النانو جرمانيوم، الضغط العالي، معادلات الحالة، فجوة الطاقة، معامل المرونة الحجمي.

المقدمة

العلاقة التي تربط الحجم (V) والضغط (P) ودرجة الحرارة (T) لمنظومة معينة، يطلق عليها معادلة الحالة (EOS). وتفيد معادلة الحالة في تحليل الخصائص الحرارية وخصائص المرونة للمنظومة المعنية. والمعروف ان هنالك معادلة حالة عامة للغازات، تعتمد على مفهوم الغاز المثالي.

الا ان الامر ليس كذلك في المواد الصلبة اذ ليس هنالك معادلة حالة عامة للمواد الصلبة حتى وقتنا الحاضر. في البحث الحالي تم استخدام عدة معادلات حالة وهي:

معادلة الحالة ل (برخ - مرنكهان) (B-M EOS) (Birch, 1947)

ومعادلة الحالة ل لينارد-جونس المحورة (mL-J EOS) (Jiuxun, 2005)

ومعادلة الحالة ل فينيت (Vinet EOS) (Vinet et al., 1986)

ومعادلة الحالة ل مرنكهان (Murnaghan EOS) (Murnaghan, 1937)

ومعادلة الحالة ل ثومسن (Thomsen EOS) (Thomsen, 1970)

ومعادلة الحالة ل (Madan EOS) (Singh and Kao, 2013)

اذ تقع هذه المعادلات المختلفة ضمن اصناف مختلفة لمعادلات الحالة. فمعادلات الحالة تصنف الى ثلاثة اصناف:

أ- معادلات حالة تعتمد على تعريف المطاوعة المحددة مثل معادلة الحالة ل (برخ - مرنكهان).

ب- معادلات حالة تعتمد على الجهد بين الذرات مثل معادلة الحالة ل (فينت و لينارد جونس المحورة).

ت- معادلات حالة تعتمد على العلاقة المفترضة بين المتغيرات مثل معادلة الحالة ل (مرنكهان).

فضلا عن معادلات الحالة التي تعالج المواد العيانية (Bulk materials)، فان عددا من معادلات الحالة التي تعالج مواد النانو قد تم صياغتها في وقتنا الحاضر مثل معادلة الحالة ل (Madan, 2013) (Singh and Kao, 2013)

ان الجرمانيوم هو أحد أشهر وابسط المواد شبه الموصلة ويقع ضمن الزمرة الرابعة (IV) من الجدول الدوري. يمتلك

الجرمانيوم التركيب البلوري للماس وله فجوة طاقة (0.66 eV) عند درجة حرارة الغرفة.

ان وضع تعريف شامل ودقيق للمواد شبه الموصلة ليس بالأمر اليسير خاصة وان التعريف قد يتناول خاصية معينة من خواص المواد شبه الموصلة التي تكون قيد البحث. الا ان الخاصية السائدة للمواد شبه الموصلة هي زيادة توصيليتها الكهربائية مع ارتفاع درجة حرارة العينة او بمعنى آخر انخفاض مقاومتها الكهربائية وهذا عكس سلوك المواد الموصلة، رغم ان هذه السمة ليست قائمة لكل مديات درجات الحرارة او لكل المواد شبه الموصلة.

تم في هذا البحث استخدام معادلات حالة مختلفة لحساب تغير الحجم النوعي للنانو جرمانيوم وحساب تغير معامل

المرونة الحجمي وحساب تغير فجوة الطاقة للجرمانيوم تحت الضغط العالي باستخدام معادلات حالة بمعطيات النانو - جرمانيوم.

التفاصيل النظرية

معادلات الحالة

استخدمت في هذا البحث عدة معادلات حالة وهي:

(i) معادلة الحالة ل (برخ - مرنكهان) (Birch, 1947)

ويعبر عنها بالصيغة:

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

اذ ان

B_0 : تمثل معامل المرونة الحجمي تحت الضغط الجوي الاعتيادي .

B_0' : تمثل مشتقة معامل المرونة الحجمي بالنسبة للضغط.

V : الحجم النوعي عند ضغط معين.

V_0 : الحجم النوعي عند الضغط الجوي الاعتيادي.

(ii) معادلة الحالة ل (لينارد -جونس) المحورة (Jiuxun, 2005)

ويعبر عنها بالصيغة:

$$P_{L-J} = \frac{B_0}{n} \left(\frac{V_0}{V} \right)^n \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^n - 1 \right] \quad (2)$$

$$n = \frac{1}{3} B_0'$$

اذ ان:

(iii) معادلة الحالة ل فينيت (Vinet EOS) (Vinet *et al.*, 1986)

ويعبر عنها بالصيغة التالية:

$$P_{vinet} = 3B_0 \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{2}{3}} \left(1 - \left(\frac{V}{V_0} \right)^{\frac{1}{3}} \right) \exp \left\{ \left[\frac{3}{2} (B_0' - 1) \right] \left\{ 1 - \left(\frac{V}{V_0} \right)^{\frac{1}{3}} \right\} \right\} \quad (3)$$

(iv) معادلة الحالة ل ثومسن (Thomsen EOS) (Thomsen, 1970)

ويعبر عنها بالصيغة التالية:

$$P_{Th} = \frac{3B_0}{2} \left(\left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{1}{3}} - \left(\frac{V}{V_0} \right)^{\frac{1}{3}} \right) \left[1 + \frac{3}{4} B_0' \left(1 - \left(\frac{V}{V_0} \right)^{\frac{2}{3}} \right) \right] \quad (4)$$

(v) معادلة الحالة ل (Madan) (Singh and Kao, 2013)

ويعبر عنها بالصيغة التالية:

$$P_M = B_0 \left(1 - \left(\frac{V}{V_0} \right) \right) + \frac{B_0(B_0'+1)}{2} \left(1 - \left(\frac{V}{V_0} \right) \right)^2 \quad (5)$$

معامل المرونة الحجمي B_T

يعرف معامل المرونة الحجمي بأنه مقياس لمقاومة المادة للانضغاط عند تسليط ضغط خارجي على تلك المادة. وهو

العلاقة العكسية للانضغاطية. ولأن معادلات الحالة المستخدمة في هذا البحث هي معادلات

حالة عند ثبوت درجة الحرارة (Isothermal EOSs) فإن معامل المرونة الحجمي سيعبر عنه بالرمز B_T

(Isothermal Bulk modulus)

ويكتب بالشكل التالي:

$$B_T = -V \frac{dp}{dv} \quad (6)$$

اذ ان B_T : تمثل معامل المرونة الحجمي عند ثبوت درجة الحرارة.

معامل المرونة الحجمي تحت الضغط العالي

ان تغير معامل المرونة الحجمي تحت الضغط العالي قد تمت دراسته من قبل العديد من الباحثين

(Boring, Lei, and Cui 1986; Chandra *et al.*, 2016; Pandey *et al.*, 2012; Sushil *et al.*, 2004)

نظرا لدوره الاساسي في معادلات الحالة وفي توصيف سلوك المواد الصلبة تحت الضغط العالي.

ان معظم معادلات الحالة تشتمل على معامل المرونة الحجمي عند درجة حرارة الغرفة B_0 ومشتقته بالنسبة للضغط B_0' كمعطيات اولية لأجراء الحسابات. ان هذه المعطيات عادة تستخدم في معادلات الحالة لحسابات تغير الحجم ومعامل المرونة الحجمي وفجوة الطاقة تحت تأثير الضغط العالي.

تم في هذا البحث صياغة تغير معامل المرونة الحجمي تحت تأثير الضغط العالي باستخدام معادلات الحالة المختلفة:

(i) تغير معامل المرونة الحجمي $B_{T(B-M)}$ مع الضغط باستخدام معادلة الحالة ل (برخ - مرنكهان) .

فمن معادلة (1) تم حساب

$$\left(\frac{dp}{dv}\right)_{B-M} = \frac{3B_0}{2} \left[-\frac{7}{3} \left(\frac{V^{\frac{7}{3}-1}}{V_0^{-\frac{7}{3}}} \right) + \frac{5}{3} \left(\frac{V^{\frac{5}{3}-1}}{V_0^{-\frac{5}{3}}} \right) + \frac{9}{4} (B_0' - 4) * \left(\frac{V^{-3-1}}{V_0^{-3}} \right) - \frac{7}{2} * \right. \\ \left. (B_0' - 4) \left(\frac{V^{\frac{7}{3}-1}}{V_0^{-\frac{7}{3}}} \right) + \frac{5}{4} (B_0' - 4) \left(\frac{V^{\frac{5}{3}-1}}{V_0^{-\frac{5}{3}}} \right) \right]$$

(7)

بتعويض معادلة (7) بالمعادلة (6) نحصل على:

$$B_{T(B-M)} = \frac{3B_0}{2} \left[\frac{7}{3} \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{7}{3}} - \frac{5}{3} \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{5}{3}} - \frac{9}{4} (B_0' - 4) \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-3} + \frac{7}{2} (B_0' - 4) \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{7}{3}} - \frac{5}{4} (B_0' - 4) \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{5}{3}} \right]$$

(8)

وبنفس الطريقة تم حساب dp/dv لمعادلات الحالة الاخرى و حصلنا على B_T كما يلي:

(ii) تغير معامل المرونة (معادلة لينارد جونز - المحورة)

$$B_{T(mL-J)} = B_0 \left(\frac{V_0}{V} \right)^n \left[2 \left(\frac{V_0}{V} \right)^n - 1 \right] \quad (9)$$

(iii) تغير معامل المرونة (معادلة فينيت)

$$B_{T(vinest)} = \left[2B_0 \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{2}{3}} - \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{1}{3}} + B_0 \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{1}{3}} + \frac{3}{2} B_0 (B_0' - 1) \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{1}{3}} - \right. \\ \left. 1 \right] \exp \left[\left\{ \frac{3}{2} (B_0' - 1) \right\} \left(1 - \frac{V}{V_0} \right)^{\frac{1}{3}} \right]$$

(10)

(iv) تغير معامل المرونة (معادلة ثومسن)

$$B_{T(TH)} = \left(\frac{B_0}{2} \right) \left[\left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{1}{3}} + \frac{3}{4} \left(B_0' \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{1}{3}} + \frac{3}{2} B_0' \left(\frac{V}{V_0} \right)^{\frac{1}{3}} + \left(\frac{V}{V_0} \right)^{\frac{1}{3}} - \frac{9}{4} B_0' \left(\frac{V}{V_0} \right) \right] \quad (11)$$

(v) تغير معامل المرونة (معادلة Madan)

$$B_{T(Madan)} = \left(\frac{V}{V_0} \right) B_0 + \left(\frac{V}{V_0} \right) \left(1 - \frac{V}{V_0} \right) \left(\frac{B_0(B_0'+1)}{2} \right) \quad (12)$$

ظاهرة شبه التوصيل في الجرمانيوم

ان منشأ ظاهرة شبه التوصيل في الجرمانيوم النقي يمكن توضيحها باستخدام نموذج الجمع الخطي للمدارات الذرية (Linear combination of atomic orbitals –(LCAO))

فكرة الجرمانيوم المعزولة تمتلك عدد ذري 32 (Hameed and AL-Sheikh, 2011) وترتيب الكتلوني يأخذ الصيغة:

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$$

ان الغلاف الخارجي $n=4$ يعبر عنه باصطلاحات الطيف بالصيغة الآتية $4s^2 4p^2$

عند تأصر ذرة الجرمانيوم المنفردة مع ذرات الجرمانيوم المجاورة لها فان احد الكتلونات المدار $4s$ ينتقل الى المدار $4p$ لينتج الترتيب الالكتروني، ان هذه المدارات المهجنة تولد مدارات متجهة نحو زوايا رباعي الاوجه المنتظم (regular tetrahedron)، لتكون كل ذرة في الجرمانيوم الصلب محاطة بأربع ذرات جرمانيوم ضمن رباعي الأوجه (Al-sheikh, Hussien, and Abdullah, 2019).

ان اشباه الموصلات في البعد الواحد او البعدين قد اظهرت خصائص الكتلونية وضوئية تختلف حسب حجم الجسيمات وهذا ما جعل هذا البحث يتناول دراسة النانو-جرمانيوم تحت الضغط العالي. اذ تناول البحث دراسة الخصائص الحرارية وخصائص المرونة وفجوة الطاقة تحت الضغط العالي مقارنة مع البيانات التجريبية المتاحة (Wang et al., 2005).

تغير فجوة الطاقة تحت الضغط العالي ودرجات الحرارة المختلفة

يعبر عن تغير فجوة الطاقة للجرمانيوم تحت الضغط العالي وعند درجات حرارة مختلفة بالعلاقة:

$$E_g(P, T) = E_g(0) + \alpha P - \frac{KT^2}{T+C} \quad (\text{Rodríguez et al., 2009}) \quad (13)$$

اذ ان $E_g(0)$ هي قيمة فجوة الطاقة عند $T=0$ و $P=0$.

K و C هما معاملات درجة الحرارة

α معامل الضغط (pressure coefficient dE_g/dp).

C تساوي تقريبا درجة حرارة ديباي θ_D .

فعندما يكون الضغط المسلط هو الضغط الجوي الاعتيادي $p=0$ تصبح المعادلة بالشكل التالي

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{KT^2}{T+C} \quad (14)$$

وعند تعويض $T=0$ في المعادلة (13) فان المعادلة تؤول للصيغة (15) كالآتي

$$E_g(p) = E_g(0) + \alpha P \quad (15)$$

الحسابات والنتائج

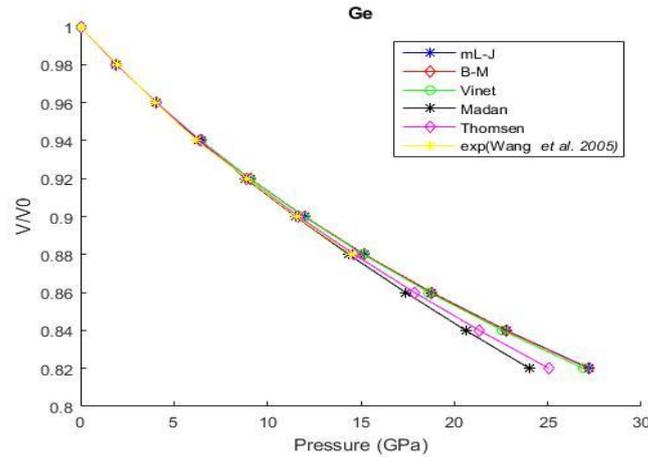
حساب تغير V/V_0 للنانو جرمانيوم باستخدام معادلات حالة مختلفة

تم حساب تغير V/V_0 للجرمانيوم باستخدام معادلات الحالة المبينة في المعادلات المرقمة (1-5) وبيانات النانو جرمانيوم

المدونة في (الجدول 1) وحصلنا على النتائج المبينة في الشكل (1) مقارنة مع النتائج التجريبية (Wang et al., 2005)

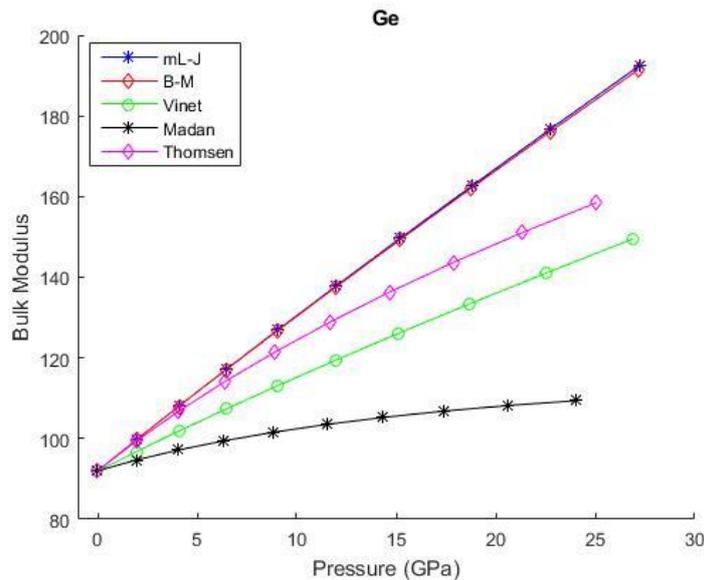
الجدول 1: قيم معامل المرونة الحجمي ومشتقة معامل المرونة الحجمي للنانو جرمانيوم وللجرمانيوم العياني

Material	B ₀	B ₀ '	Ref.
Bulk(Ge)	72	4.31	(Tripathi et al., 2006)
Nano (Ge)	92	4	(Wang et al., 2005)



الشكل 1: تغير V/V_0 للنانو جرمانيوم تحت تأثير قيم مختلفة للضغط العالي باستخدام معادلات حالة مختلفة حساب تغير معامل المرونة الحجمي للنانو جرمانيوم باستخدام معادلات الحالة

تم استخدام معادلات تغير معامل المرونة الحجمي مع الضغط المبينة بالمعادلات المرقمة (8-12) واشير لها مرة اخرى في الفقرة (3-2)، وحصلنا على النتائج المبينة في الشكل (2). اذ تظهر جميع النتائج المستندة لمعادلات الحالة المختلفة زيادة قيم معامل المرونة الحجمي تحت تأثير الضغط العالي، رغم تقارب نسبة الزيادة بين المعادلات المختلفة، اذ اظهرت معادلة تغير B_T مع الضغط العالي، المشتقة من معادلة الحالة ل Madan اقل نسبة تغيير ل B_T تحت تأثير الضغط العالي.



الشكل 2: تغير معامل الحجمي للنانو جرمانيوم تحت تأثير الضغط العالي باستخدام معادلات حالة مختلفة

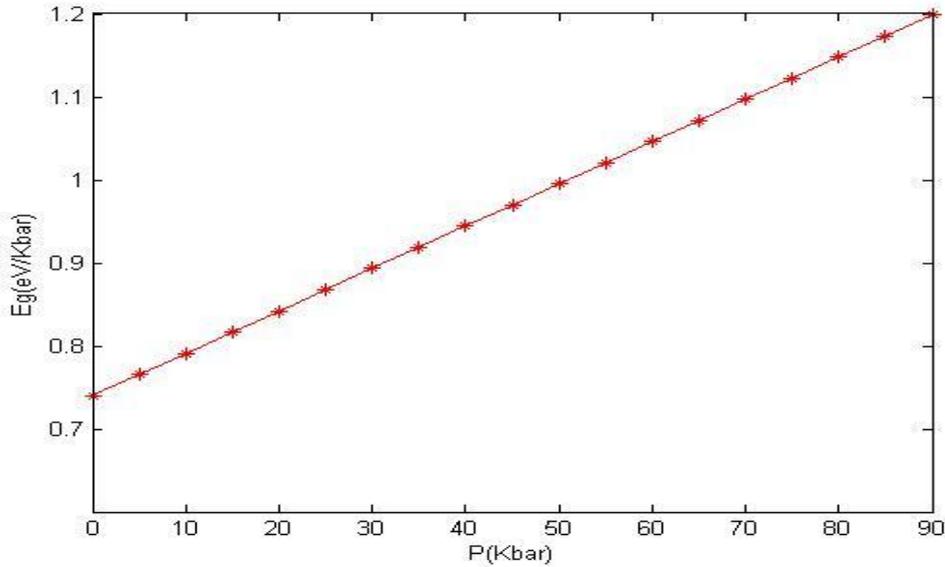
حساب تغير فجوة الطاقة

الجدول (2) يوضح قيم المعاملات الخاصة بالنانو - جرمانيوم

الجدول 2 : قيم فجوة الطاقة $E_g(0)$ عند $T=0$ ، $p=0$ ، معامل الضغط α ومعامل درجة الحرارة K و C للجرمانيوم (Levinshtein, Rumyantsev, and Shur, 2001)

$E_g(0)$ eV	$\alpha * 10^{-3}$ eV/kbar	$K*10^{-4}$ eV/K	C K
0.742	5.1	4.8	235

بتعويض قيم معاملات النانو-جرمانيوم من (الجدول 2) بالمعادلة (15) تم حساب تغير فجوة الطاقة تحت تأثير الضغط العالي اذ اظهرت النتائج زيادة فجوة الطاقة للجرمانيوم مع زيادة الضغط المسلط على العينة كما موضح في الشكل (3) (تمت الحسابات بمعادلات الحالة المبينة في المعادلات 1 الى 5 لتغير الحجم النوعي $\frac{V}{V_0}$ وحساب تغير معامل المرونة الحجمي في المعادلات 8 الى 12 وحساب تغير فجوة الطاقة باستخدام المعادلة 15 واستخدمت برامج حاسوبية مكتوبة من قبلنا لبرمجة معادلات الحالة مباشرة وهي الـ Excel and Matlab .



الشكل 3: تغير فجوة الطاقة E_g للنانو جرمانيوم تحت تأثير الضغط العالي باستخدام المعادلة (15)

المناقشة

- 1- ان قيمة معامل المرونة الحجمي للنانو جرمانيوم اكبر من معامل المرونة الحجمي للجرمانيوم العياني كما مبين في الفقرة (3-1) من البند 3.
- من الشكل (1) نلاحظ انه رغم توافق جميع معادلات الحالة المستخدمة مع النتائج التجريبية لتغير V/V_0 تحت الضغط العالي للنانو-جرمانيوم لغاية الضغط المسلط (10 Gpa). الا ان معادلة الحالة لـ Madan اظهرت توافقا تاما مع النتائج التجريبية اكثر من بقية المعادلات في الضغوط الاعلى من (10Gpa).
- 2- رغم ان جميع معادلات الحالة قد اظهرت زيادة معامل المرونة الحجمي للنانو-جرمانيوم تحت تأثير الضغط العالي، الا ان معادلة Madan والتي هي من المعادلات الخاصة بمواد النانو خلافا، لمعادلات (لينارد جونز المحورة، برخ مرزكهان، فينيت، ثومسن) اللواتي يعالجن المواد العيانية وتم استخدامها في حسابات النانو لغرض المقارنة، اظهرت معادلة Madan نسبة زيادة في معامل المرونة الحجمي تحت الضغط العالي اقل من بقية المعادلات كما مبين في الشكل (2).

3- الشكل (3) اظهر زيادة فجوة الطاقة للنانو جرمانيوم مع زيادة الضغط المسلط على العينة وهذا يتلاءم مع تقلص الحجم او بمعنى اخر ان زيادة الضغط تزداد انخفاض درجة الحرارة وبالتالي زيادة فجوة الطاقة مع زيادة الضغط المسلط.

الاستنتاجات

في الشكل (1)، ان توافق النتائج التي تم الحصول عليها باستخدام معادلة Madan مع النتائج التي تم الحصول عليها باستخدام معادلات الحالة المعروفة في استخداماتها في المواد العيانية، يظهر امكانية استخدام معادلات الحالة للمواد العيانية في حسابات مواد النانو.

رغم ان معامل المرونة الحجمي في الشكل (2) يظهر زيادة في قيمة B_T تحت تأثير الضغط العالي، الا ان اختلاف معدل تغير B_T تحت الضغط العالي باستخدام المعادلات المختلفة وخاصة معادلة Madan في الشكل (2) قد يعود لاعتماد معادلة Madan في اشتقاقها على معادلة الحالة لـ Mie-Grüneisen EOS.

المصادر

- Al-sheikh, A. M.; Mumtaz, M. H.; Siham, J. A. (2019). Pressure and temperature dependence of energy gap in sic and si1-xgex. Raf. J. Sci., 28(4),53–61.
- Birch, F. (1947). Finite elastic strain of cubic crystals. Physical Review. 71(11), 809–24.
- Boring, N.J.M.; Lei, X. L.; Cui, H. L. (1986). Dielectric interpretation of lei-ting nonlinear force-momentum —balance transport equation for isotheriial resistivity. Physical Review B 33(10), 6929–35.
- Chandra Usha, K. K.; Pandey, G. P.; Surinder, M. S. (2016). High-Pressure investigations on Piplia Kalan Euclite Meteorite using in-Situ X-Ray diffraction and ^{57}Fe Mössbauer Spectroscopic Technique up to 16 GPa. Geoscience Frontiers . 7(2), 265–71.
- Hameed, Kh.S. ; AL-Sheikh, A.M. (2011). Theoretical study of energy gap for silicon and germanium under high pressure. Raf. J. Sci., 22(2), 58-68.
- Jiuxun, S. (2005). A modified lennard-jones-type equation of state for solids strictly satisfying the spinodal condition. J. Physics Condensed Matter. 17(12).
- Levinshtein, M. E.; Sergey, L. R.; Michael, S. S. (2001). Properties of advanced semiconductor materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe .
- Murnaghan, FD. (1937). Finite deformations of an elastic solid. American J. Mathematics.
- Pandey, K. K.; Nandini Garg, A. K.; Mishra; Surinder, M. S. (2012). High pressure phase transition in Nd2O3. J. Physics: Conference Series. 377(1), 2–6.
- Rodríguez, A.H.; Trallero-Giner, C. C.; Duque, A.; Vázquez, G. J. (2009). Optical transition in self-assembled inas/gaas quantum lens under high hydrostatic pressure. J. Appl. Physics 105, 044308.
- Singh, M.; Moruti K. (2013). Study of nanomaterials under high pressure. Advances in Nanoparticles. 02(04), 350–57.
- Sushil, K.; Arunesh, K.; Singh, P. K.; Sharma, B. S. (2004). Analysis of finite-strain equations of state for solids under high pressures. Physica B: Condensed Matter 352(1–4), 134–46.
- Thomsen, L. (1970). On the fourth-order anharmonic equation of state of solids. J. Physics and Chemistry of Solids. 31(9), 2003–16.
- Tripathi, S. K.; Anup Thakur, J.; Sharma, G.; Singh, V.; Sharma, K. P.; Singh, G. S.; Saini, S.; Goyal, N. (2006). Proton-Induced changes on the optical parameters of a-(Ge₂₀Se₈₀)_{0.96}Ag_{0.04} Thin Film. J. Mater. Sci., 41, 1847–50.
- Vinet, P.; Ferrantef, J.; Smith, J. R.; Rose, J. H. (1986). A universal equation of state for solids. J. Physics C: Solid State Physics. 19(20), L467–73.

Wang, H., Wang, Y.; Chen, W.; Liu, J. F.; Jiang, J. Z.; Olsen, J. S.; Leif Gerward ; Gleiter, H. (2005). High-Pressure structural behaviour of nanocrystalline Ge. in Joint 20th AIRAPT - 43rd EHPRG International Conference of High Pressure Sci. and Technol., 19(15).

Using Different Equations of States to Study Volume Ratio, Bulk Modulus and Energy Gap in Nano Ge Under High Pressure

Asmaa F. Abdulateef

Department of Physics/ College of Education for Pure Science/ University of Mosul

Adnan M. Al-Shiekh

Department of Physics/ College of Science/ University of Mosul

ABSTRACT

This research has been used EOSs (Birch-Muraghan, Vinet, mL-J, Thomsen and Madan) to study the effect of high pressure on nano-Ge parameters by calculating compressed volume V/V_0 , Bulk modulus B_T , Energy gap E_g , under high pressure. All equations used showed compatibility with the experimental results for calculating V/V_0 of nano-Ge under high pressure, an increase in the Bulk modulus B_T with an increase in high pressure and an increase in the energy gap of nano Ge with high pressure.

Keywords: Nano-Ge, High pressure, Equations of state, Energy gap, Bulk modulus.