تتشرف كلية الدراسات العليا و كلية العلوم بدعوتكم لحضور

مناقشة أطروحة الدكتوراه

العنوان

دراسة نظرية لمواد ثنائية الأبعاد و تطبيقاتها في مجالات استشعار الغازات، و تخزين الطاقة، و تخزين المعلومات

للطالبة

سابا خان

المشرف

أ.د نصير تيت، قسم الفيزياء

كلية العلوم

المكان و الزمان

11 صباحا

الإثنين، 03 إبريل 2023

مبنى F3، قاعة 040

الملخص

منذ زمن اكتشاف الغرافين عام 2004 تركزت العديد من الأبحاث على دراسة المواد ثنائية الأبعاد. منذ ذلك العهد، تم تصنيع العديد من الأنواع من السبائك ثنائية الأبعاد و ظهرت العديد من التطبيقات في مجالات متنوعة مثل البيئة، توليد الطاقة، تخزين الطاقة، و تخزين المعلومات. في هذه الأطروحة ركزنا على شرائح الجرافين (GNR) و شرائح و سبائك C_2N، و أخيرا شرائح المكسين (MXenes). اعتمدنا في جميع بحوثنا النظرية على برامج محاكاة ذات سمعة عالمية أهمها مثل VASP و ATK في حساب الخصائص الكهربائية و المغناطيسية و الناقلية الكهربا ئية. في نطاق استشعار الغازات السامة، هناك بابين. في الباب 1، قمنا باستخدام شرائح الجرافين المنضبة بعنصرين النتروجين و البورون على حافتيهما (B/N-edge doped GNR). لقد تم الحصول على المقاومة التفاضلية السلبية (NDR) نتيجة لتراجع التيار الكهربائي جراء وجود الشوائب على الطريق. لقد تم استخدام الظاهرة "NDR" في تحسين استشعار الغازات السامة على سبيل المثال (NO_2, SO_3). في حين أن الباب 5 ركز على دراسة سبائك C_2N المنضبة بعناصر المعادن الممغنطة (Mn, Fe, Co, Ni). لقد أظهرت هذه المنضبات حساسية عالية لاستشعار الغازات المؤكسدة السامة نظرا لوجود سر و يكمن في التغير للعزم المغناطيسي الهائل بعد التصاق الغازات بالمعدن.في نطاق تخزين الطاقة، و خصوصا تخزين غاز الهيدروجين، قمنا باستخدام سبائك C_2N المنضبة بذرات معدن ممغنط مثل المغنيزيوم "Mn" و الغير ممغنط مثل الكالسيوم "Ca"، حيث تم رفق ذرة واحدة (SAC) أو ذرتين (DAC) داخل جوف الثغرة الكبرى لمادة C_2N. كانت النتائج مثيرة حيث تم ربط جزيئات الهيدروجين بذرات المعدن Mn أو Ca و سببت زيادات بنسب ملحوظة في سعة استقطاب غاز الهيدروجين. في نطاق تخزين المعلومات عن طريق الخصائص العزم المغزلي للالكترونات (Spintronics)، لقد قمنا بدراسة سبائك C_2N المنضبة بذرة واحدة أو ذرتين من معدن ممغنط "Mn". لقد أظهرت النتائج أن التأثيرات المغناطيسية بين كل من: SAC-SAC أوSAC-DAC أوDAC-DAC قد تؤدي ليس فحسب لتشكيل عزم مغناطيسي بل لتشكيل مواد ذات خاصية نصف ناقلة (Half metal). لقد كانت لهذه الدراسة فائدة كبيرة في فهم ميكانيكية تكوين الخصائص النصف ناقلة من أجل تحقيق تطبيقها في تصنيع أجهزة تخزين المعلومات المعاصرة. في نطاق البطاريات و تخزين الطاقة، خاصة تلك ذات الكفاءة العالية و التي تشتغل في درجات حرارة عادية مثل بطاريات كبريتات الصوديوم، لقد قمنا بدراسة بعض العوائق المعروفة في سبيل تذليلها و التقليل من اثارها السلبية مستقبلا و بالتالي تمديد عمر البطارية. من ضمن هذه المعوقات نذكر تاكل قطب البطارية المكونة من الكبريت نتيجة تفاعله الكيميائي مع أيونات الصوديوم. لقد قمنا خلال هذه الدراسة باقتراح شرائح المكسين (MXenes) لرفقها بالقطب السالب للبطارية حتى تقوم بحماية القطب من الاضمحلال والتلاشي السريع. هذا الحل يؤدي الى زيادة عمر البطارية و كفاءة عملها. في النهاية كملخص، لقد قمنا باستخدام برامج محاكاة عالية الجودة و الكفاءة في دراسة استشعار الغازات السامة، و تخزين الطاقة و تخزين المعلومات. كانت الدراسة مفيدة جدا في توضيح أهم العوامل التي تتحكم في تفادي العوائق لفائدة تحسين الأداء و الكفاءة في تشغيل الأجهزة الخاصة بكل تطبيق.

كلمات البحث الرئيسية: المواد ثنائية الأبعاد، استشعار الغازات، تخزين غاز الهيدروجين، معادن-البطاريات الكبريتية، Spintronics، ATK، VASP