



The effect of pressure on the electronic properties of diamond crystal

Sajjad Nadhim Naeem Khalil

University of Karbala - College of Science - Department of Physics/
sajadnadhim@outlook.com

Ahmed Shaker Mahmoud Hassoun

University of Basra/College of Science/Department of General
Physics/ ahmdshakr75@gmail.com

Murtdha Kareem Ghasim Habib

University of Baghdad, College of Science, Department of Physics/
bmw.marseds31@gmail.com

Sami Najah Abbas Kati Al-Bandar

University of Basra, College of Science, General Physics/
Saminajahabbas1996@gmail.com

Sarah Hamid Aifan Farhan

Anbar University College of Science Department of Physics
Sciences / hmydsart533@gmail.com

ABSTRACT

The study included the application of quantum mechanical calculations using the average neglect method of differential interference to the effect of pressure (pinch or pull stress) on the electronic properties and the extent of its effect on both the valence band width, the conduction band width, the lattice constant of the crystal, as well as the energy gap and the relationship of pressing and pulling stress with ductility, as follows .Increasing the width of both the valence and conduction bands and decreasing the energy gap in the pressing stress.

Decrease in the width of both the valence and conduction bands and the energy gap in the pulling stress. The crystal returns to its shape and size after the stress placed on it is removed as a result of elastic strain or relative strain with the inverse characteristic, meaning that the pulling or pressing stress is directly proportional to the ductility.

Keywords:

pressure , properties , diamond crystal

تأثير الضغط في الخواص الالكترونية لبلورة الماس

Introduction

المخلص

تضمنت الدراسة تطبيق حسابات ميكانيك الكم باستخدام طريقة الإهمال المتوسط للتداخل التفاضلي لتأثير الضغط (إجهاد كبس او سحب) على الخواص الالكترونية ومدى تأثيره على كل من عرض حزمة التكافؤ وعرض حزمة التوصيل وثابت الشبيكة للبلورة وايضا فجوة الطاقة وعلاقة اجهاد الكبس والسحب مع المطاوعة و كالتالي:

- زيادة عرض كل من حزمة التكافؤ والتوصيل ونقصان فجوة الطاقة في اجهاد الكبس
- نقصان عرض كل من حزمة التكافؤ والتوصيل وفجوة الطاقة في اجهاد السحب
- تعود البلورة الى شكلها وحجمها بعد زوال الاجهاد المسلط عليها نتيجة الانفعال المرن او الانفعال النسبي ذو الخاصية العكسية أي ان اجهاد السحب او الكبس يتناسب طرديا مع المطاوعة

1: المقدمة:

ميكانيكا الكم هي نظرية أساسية في الفيزياء تقدم وصفا للخواص الفيزيائية للطبيعة على مستوى الذرات والجسيمات دون الذرية. وهي أساس جميع فيزياء الكم ، بما في ذلك الكيمياء الكمية ، ونظرية المجال الكمي ، وتكنولوجيا الكم ، وعلم المعلومات الكمي.

إن الفيزياء الكلاسيكية هي وصف الفيزياء التي كانت موجودة قبل نظرية النسبية وميكانيكا الكم ، تصف العديد من جوانب الطبيعة على مقياس عادي. اما ميكانيكا الكم تفسر جوانب الطبيعة بمقاييس صغيرة (ذرية ودون ذرية) ، والتي لا تستطيع ان تفسرها الميكانيكا الكلاسيكية. إن أغلب نظريات الفيزياء الكلاسيكية يمكن استخلاصها من ميكانيكا الكم باعتبارها تقريباً صالحاً واسع النطاق.

تختلف ميكانيكا الكم عن الفيزياء الكلاسيكية في أن الطاقة والزخم والزخم الزاوي والكميات الأخرى من النظام المترابط تقتصر على قيم منفصلة (القياس الكمي) ، والأجسام لديها خصائص لكل من الجسيمات والموجات (ازدواجية الموجات والجسيمات) . والدقة التي يمكن بها التنبؤ بقيمة الكمية الفيزيائية قبل قياسها ، بالنظر إلى مجموعة كاملة من الشروط الأولية (مبدأ عدم اليقين).

1-1: الألماس: هو معدن نادر الوجود في الطبيعة يتكون من الكربون. ويحيط بكل ذرة كربون في الألماس أربع ذرات كربون أخرى مرتبطة بها عن طريق روابط تساهمية قوية (أقوى نوع من الروابط الكيميائية). وينتج عن هذا الترتيب البسيط والموحد المترابط بإحكام واحدة من أكثر المواد المعروفة صلابة. وبالإضافة إلى أنه أصلب مادة معروفة فهو مقاوم كيميائياً (لا يتآكل بفعل التفاعلات الكيميائية) ولديه أعلى نسبة توصيل حراري لأي مادة طبيعية. هذه الخصائص تجعله مناسباً لاستخدامه كأداة قطع وللاستخدامات الأخرى التي تتطلب المتانة.

ويتميز الألماس أيضاً بخصائص بصرية خاصة مثل ارتفاع مؤشر الانكسار والتشتت واللمعان العالي، وتساعد هذه الخصائص في جعل أكثر الأحجار الكريمة شهرة في العالم ما يحول استخدامه في العدسات الخاصة التي تتطلب المتانة والأداء.

2-1: نظرة تاريخية: كانت الهند أول دولة قامت بإنتاج الألماس في العالم، وبقيت المصدر الوحيد له حتى عام 1720، ثم اكتشف الألماس في البرازيل التي أضحت أكبر منتج له في العالم من عام 1740 حتى عام 1876، وفي أثناء هذه المدة اكتشف الألماس في جنوب إفريقيا في ركاميات نهر فال Vaal، وفي غضون ثلاث سنوات كان عشرة آلاف عامل منقب يقومون بنخل رسوبات النهر وتصويلها بهدف البحث عن الألماس، وامتد البحث والتنقيب فيما بعد إلى الأراضي العليا وذلك عام 1870 حيث بدأ العثور على أنابيب الألماس الانفجارية، وافتتح أول منجم في منطقة بولتفونتين Bultfontein من مقاطعة كمبرلي Kemberley، كما تم العثور عام 1871 على أنابيب حاملة للألماس من منطقة ياغرسفونتين Jagersfontein، ثم نتالت الاكتشافات وتأسست عدة شركات احتكارية. وبحلول عام 1889 قام الاحتكاري الإنكليزي سيسيل رودس Cecil Rhodes بضم شركات إنتاج الألماس كلها في شركة واحدة تحت اسم شركة دي بيرس للمناجم الموحدة De Beers Consolidated Mines Company، وبذلك قد يكون رودس قد قام بتأسيس الشركة الاحتكارية الوحيدة للألماس في جنوب إفريقيا، فأصبحت الشركة المسيطرة على معظم ألماس العالم حتى عام 1960. واكتشف الألماس أول مرة في روسيا عام 1928 في جبال الأورال ثم اكتشف في عام 1954-1955 مناجم جديدة للألماس في شرقي سيبيريا ثم في أوكرانيا وكازاخستان. وفي بداية الستينات من القرن العشرين وقع تغير عالمي فيما يتعلق باستخراج الألماس والمتاجرة فيه، بظهور اكتشافات مهمة من مكامن الألماس في الاتحاد السوفييتي من ناحية، وبداية نشوء حركات التحرر الوطنية في بلدان أفريقية المنتجة للألماس ومحاولاتها التحرر اقتصادياً من الشركات الاحتكارية وإدارة مواردها الطبيعية من ناحية ثانية. إزاء ما تقدم قامت شركة دي بيرس بإنشاء مؤسسة ضخمة للسيطرة على إنتاج الألماس الطبيعي في العالم والمجال بإنتاج الألماس بمقاييس كبيرة للزينة في جنوب أفريقية وكذلك تصنيع الألماس مخبرياً ومعملياً في إيرلندا. وتعد شركة دي بيرس منافساً قوياً للشركة الأمريكية جنرال إلكتريك General Electric التي بدأت بإنتاج الألماس الاصطناعي منذ عام 1957 وهي توفر نحو 25% من احتياجات أمريكا من الألماس الصناعي المستخدم في التكنولوجيا الحديثة. [1]

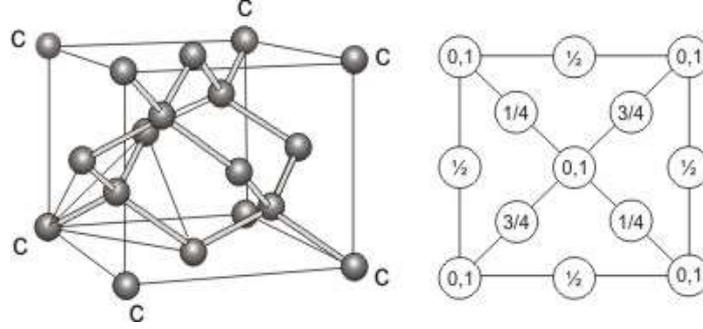
3-1: تشكل الألماس: الألماس مصدره ليس سطح الأرض. بل يتشكل عند ضغط وحرارة عالية على عمق 100 ميل تحت وشاح الأرض. ومعظم الألماس المكتشف خرج على السطح بسبب الانفجارات البركانية العميقة.

تبدأ هذه الانفجارات في الوشاح وفي طريقها تمزق قطعاً من الصخور الوشاحية وتوصلها إلى سطح الأرض بدون أن تذوب. وتُعرف هذه القطع من الوشاح باسم "Xenoliths" والتي تحتوي بدورها على الألماس.

يستخرج الناس الألماس من الصخور التي تحتوي على "Xenoliths" أو من التربة والرسوبيات الناتجة عن تفتت هذه الصخور الحاملة للألماس. ويُعتقد أن بعض الألماس يتشكل نتيجة الضغط المرتفع ودرجات الحرارة العالية في مناطق الصدوع القارية أو مواقع اصطدام الكويكبات.

4-1: أشكال الألماس البلورية: بعض الأشكال البلورية للألماس الطبيعي لا يأخذ الألماس الطبيعي أشكالاً بلورية نموذجية إلا نادراً، فهو قد يكون في العادة بأشكال بلورية محدبة أو متدرجة الوجوه، خشنة أو متعرجة السطح، مكورة أو مفلطحة تشبه

الحصى ، وذلك نتيجة نمو البلورات غير المتماثل في الاتجاهات المتنوعة لضيق حيز وسط النمو من ناحية أو نتيجة الانحلال أو الانصهار الجزئي بعد تشكل البلورات، من ناحية ثانية. غير حتى الحبيبات الألماسية الطبيعية تأخذ عند تقسيمها في المعامل أشكالاً بلورية هندسية مميزة ومحددة، تتحكم فيها طبيعة التوزع الفراغي لعناصر الكربون في البنية الداخلية المكعبة النظام. [2]



الشكل 1: الهيكل المكعب للماس (أ) خلية الوحدة التي تبين جميع الذرات و (ب) (001) - منظر الخطة للهيكل حيث تبين يتسمان بتفسير ذاتي. x و y فقط في حين أن الموضعين z المواضع الموضعية في الاتجاه

تأخذ بلورات الألماس في الحالات النموذجية الطبيعية أو بعد التقسيم المعملية أشكالاً هندسية منتظمة كثيرة، من أهمها الأشكال التالية:

- ثماني الوجوه المثلثية trigonal octahedron: وهو بمنزلة هرمين ملصقين بقاعدتيهما المربعيتين، ويكون محدداً بثمانية وجوه مثلثية.
 - المكعب cube أو سداسي الوجوه المربعة tetragonal hexahedron.
 - اثنا عشري الوجوه المعينية rhombic dolecahedron.
 - رباع سداسي الوجوه المثلثية trigonal-tetra hexahedron وهو محدد بأربعة وعشرين وجهاً مثلثاً منتظماً (نتيجة إبدال جميع وجه من المكعب بأربعة وجوه).
- بعض الأشكال الهندسية المنتظمة لبلورات الألماس
- سداس - ثماني الوجوه المثلثية trigonal-hex octahedron وهو محدد بثمانية وأربعين وجهاً مثلثياً (غير منتظم) نتيجة إبدال جميع وجه من ثماني الوجوه بستة وجوه.
 - توأمية بسيطة نجمية الشكل، شكل مركب مؤلف من مكعب + رباعي - سداسي الوجوه cube+tetra hexahedron وهو محدد في أن واحد بستة وجوه مربعة وأربعة وعشرين وجهاً على شكل شبه منحرف.

4-1-1 بنية الألماس الداخلية: تتألف بنية الألماس الداخلية من تكرار أعداد لا نهائية من وحدات مكعبة متماثلة تدعى الخلايا الأولية البنائية ذات الأبعاد المتساوية والمحددة بـ 0.356 نانومتر. تتراص تلك الوحدات بإحكام في الاتجاهات الثلاثة من دون فواصل بينها فتكوّن بلورة يختلف قدها وشكلها باختلاف أعداد وحداتها وفترة النمو التي توقفت عندها. تأخذ الخلية الأولية البنائية لبلورة الألماس شكل مكعب (الشكل أربعة - ب) تتوزع عناصر الكربون فيه فتتوضع في ذراه ومراكز وجوهه، إضافة إلى توضع أربعة عناصر في مراكز أربعة من مكعباته الثمانية على التناوب. وبذلك قد يكون جميع عنصر كربون في الخلية مرتبطاً بأقرب أربعة عناصر كربون مجاورة موزعة تناظرياً على رؤوس رباعي وجوه منتظم - أي ذو أربعة وجوه مثلثية متساوية وترتبط عناصر الكربون بعضها ببعض في جميع الاتجاهات المحددة بروابط تكافئية متينة (روابط

ذرية) تجعل المسافات فيما بينها مساوية 0.154 نانومتر. وبذلك يمكن النظر إلى بلورة الألماس النموذجية على أنها جزء واحد ضخم ذوروابط ذرية متينة جداً تكسبه القساوة، ويفترض في بلورات الألماس النموذجية حتى تكون خالية من الشوائب والعيوب في بنيتها الداخلية وهذا ما يكسبها شفافية عالية تجاه الأشعة الضوئية المرئية. ومع ذلك فقد ثبت حتى البلورات مهما كانت صافية، تشتمل على نسب زهيدة متباينة من الشوائب والعيوب تصل في بعض الأحيان إلى 1810 عنصر في جميع 1سم³. ومن أبرز العناصر التي تشوبها: السيليكون والألمنيوم والكالسيوم والمغنيسيوم. وهي تتوزع في أطراف بنية البلورات بكثافة أكبر مما هي عليه في أواسطها، ولا تزيد نسبتها في الألماس عموماً على 5%. وإضافة إلى ما تجاوز فإن الألماس، ولاسيما الأنواع غير الجيدة منه، يحتوي في ثنايا بنيته على محتضنات صلبة صغيرة جداً كالأوليفين والبيروكسين والكروم سبيل والغرافيت والكراتز وأكاسيد الحديد وغيرها؛ كما يحتوي على محتبسات سائلة (ماء وحمض الفحم) وغازية (أزوت وغيره). [3]

5-1: خصائص الألماس: أن الخصائص التي تتميز بها بنية الألماس الشبكية الداخلية تنعكس بشكل أواخر على خصائص الألماس الفيزيائية المتنوعة التي من أهمها الصفات الميكانيكية والضوئية والكهربائية والمغناطيسية والحرارية والمناعية تجاه العوامل المتنوعة.

1- الخصائص الميكانيكية: وتضم خصائص الكثافة والقساوة والمرونة وقابلية الانضغاط وغيرها.

2- الخصائص الضوئية: يتميز الألماس بأنه متمائل الخواص isotropic ضوئياً لكونه يتبلور في المنظومة المكعبية. وقرينة انكساره = 2.417 من أجل الأشعة بطول موجي $\lambda = 0.5893 \mu\text{m}$ ، وترداد قيمتها بازدياد درجة الحرارة. أما تبدد قرائن الانكسار فيصل إلى 0.063، وتبلغ زاوية الانعكاس الكلي الداخلي 24.24° . تتصف بعض نماذج الألماس بعدم تماثل الخواص anisotropic نتيجة توافر إجهادات مرنة مردها عدم التجانس في بنيتها الداخلية، لذا فإن الأشعة الواردة تنكسر فيها انكساراً مضاعفاً، وتبدي تحت المجهر الاستقطابي أشكالاً تداخلية interference figures ضوئية على هيئة صليب أسود مضاء فيما بين أفرعه. تتصف معظم أنواع الألماس بالامتصاص الانتقائي لأجزاء من طيف الأشعة تحت الحمراء (ذات أطوال الأمواج $\lambda = 8-10 \mu\text{m}$ ميكرومتر)، وكذلك للأشعة فوق البنفسجية (بأطوال أمواج أقل من 0.3 ميكرومتر)، ويدعى الألماس من هذا النوع ألماساً من النمط الأول (1). أما أنواع النمط الثاني (2) فهي نادرة واكتشفت عام 1933، وتتصف بأنها لا تملك خطوط امتصاص في نطاق الأمواج 8-10 ميكرومتر وتعد شفافة حتى نطاق الأمواج ~ 0.22 ميكرومتر، وتصادف أنواع أخرى من نمط ثالث (3) خليط تظهر في بعض أجزائه مؤشرات النمط الأول وفي الأجزاء الأخرى علائم النمط الثاني. وهنا تجدر الإشارة إلى حتى الخصائص الطيفية الأساسية لبلورات الألماس، ترتبط بالتغيرات الطفيفة الحادثة في بنيتها الشبكية وبكمية عناصر الأزوت المتوافرة فيها. ويبلغ عمق اختراق جسيمات ألفا لبلورات الألماس حتى عشرة ميكرومتر، وعمق اختراق الإلكترونات (بطاقة ~ 1 ميغا إلكترون فولط) حتى 1 مم. لذلك أمكن استخدام الألماس في الحاسبات والحواشيب، ومن محاسن الحواشيب الألماسية إمكانية تشغيلها في درجة حرارة الغرفة ولمدة طويلة في ظل نظام دائم ومستمر مع فصل لحزم الإشعاعات الضيقة. وهذا ما يحمل أهمية استخدامها خاصة في الأبحاث والدراسات البيولوجية ترتبط بالميزات

الضوئية للألماس كذلك، ظواهر مرئية بالعين المجردة أو تحت المكبرات والمجاهر (عندما تكون حبيبات الألماس دقيقة) كالشفافية والتلوث والتوهج والبريق (أو اللمعان) و التلألؤ.

3- الخصائص الكهربائية والمغناطيسية: تتصف بلورات الألماس من النمط الأول (1) بمقاومة كهربائية نوعية $r=$ عشرة 12- عشرة 14 أوم/م. أما بلورات النمط الثاني (2) فتصنف في نوعين: الأول بلورات من النمط (أ2) ذات مقاومة كهربائية نوعية $r \sim$ عشرة 12 أوم/م والثاني بلورات من النمط (ب2) ذات مقاومة نوعية $r \sim 0.5-10$ أوم/م، وتعد الأخيرة من أنصاف النواقل (من النموذج p) التي تظهر فيها عند التسخين إمكانية امتصاص خطوط الطيف ذات أطوال الأمواج 1 ~ ستة ميكرومتر) وقد اكتشفت عام 1952. وتصادف أحياناً بلورات ألماسية ذات مقاومة كهربائية نوعية ضعيفة جداً ($r=10-2$) تسمح بإمرار تيارات كهربائية. ولقد لوحظت ضمن بلورات النمط الثاني (2) ذات المقاومة الكهربائية العالية بعض البلورات التي ترتفع ناقليتها الكهربائية فجأة عند تعرضها لجسيمات ألفا أو بحزم إلكترونية أو بأشعة غاما. ينتمي الألماس مغناطيسياً إلى مجموعة المواد الضعيفة النفاذية المغناطيسية diamagnetic وتصل التأثيرية المغناطيسية magnetic susceptibility لوحدة الكتل إلى 16×10^{-6} سم.غ.ثا في درجة حرارة مقدارها 18 درجة مئوية. [7][8]

4- الخصائص الحرارية: يزداد معامل التمدد الحراري الخطي للألماس بتزايد درجات الحرارة، بدءاً من 10×0.6 (لمجال من درجات الحرارة يقع في حدود 53- 303 كلفن) حتى 10×5.7 (في حدود 1100- 1700 كلفن). أما معامل الناقلية الحرارية فيتناقص بتزايد درجة الحرارة (ضمن المجال ما بين 100 و 400 كلفن)، أما في حرارة الغرفة فإن الناقلية الحرارية للألماس تفوق ناقلية الفضة. [9][10]

5- خصائص المقاومة: يعد الألماس من أشد المواد مناعة تجاه العوامل الميكانيكية الطبيعية والصناعية لقساوته العالية وندرة سطوح الانفصام فيه. كما يتميز الألماس بمقاومة عالية لتأثيرات المياه والحموض والمحاليل القلوية (ولو أنها في درجة الغليان)، ولا ينحل إلا في مصهور السيلينتر (نترات الصوديوم أو البوتاسيوم) مع الصودا عند درجة حرارة $t \sim 500$ درجة مئوية. يحترق الألماس وهو في الهواء عند درجات من الحرارة مقدارها 720- 800 درجة مئوية، أما عند وضعه في الغازات الخاملة فيبدأ عند درجة الحرارة 1400 بتحول سطوحه الخارجية إلى غرافيت تحولاً ملحوظاً، وتزداد هذه العملية شدة مع ازدياد درجة الحرارة لتبلغ أشدها عند الدرجة 2000 ويتم التحول كلياً إلى غرافيت في غضون 10- 20 دقيقة. أما عند التسخين المفاجئ لدرجة 3400 في بضع ميكروثانية فتبقى بلوراته سليمة، إنما تتحول إلى غرافيت إذا زادت درجة الحرارة على 3600. [11][12]

1-6: أنواع الألماس

أمكن تمييز الأنواع التالية تبعاً لأشكال وجود الألماس في الطبيعة ضمن صخوره الأم:

- البريليان **brilliant**: وهو موجود على هيئة بلورات كبيرة صافية ذات أشكال نظامية.
- البورت **bort**: ويصادف على هيئة بلورات دقيقة مشوبة غير هندسية، أو على شكل تجمعات كروية.
- الكربونادو **carbonado**: ويلاحظ على هيئة حبيبات مجهرية التبلور سوداء اللون غير صافية تحتوي على شوائب صلبة وسائلة، وتكون بلورية في العادة على هيئة تجمعات غير منتظمة أو كروية هشّة أو متماسكة.

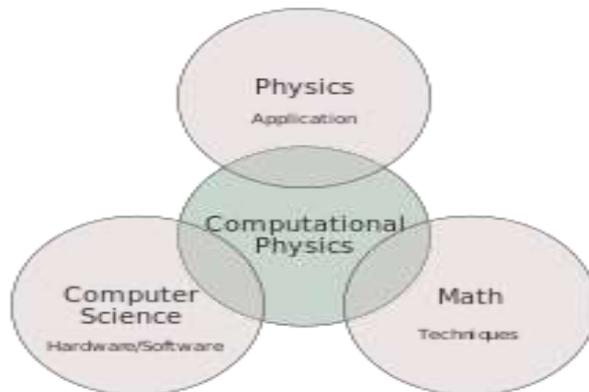
- البالاس **ballas**: ويتوافر على هيئة تجمعات كروية تتوزع فيها البلورات بحجوم مختلفة وفق نظام شعاعي. تختلف أوزان حبيبات الألماس بين بلورات مجهرية وبلورات كبيرة تصل إلى مئات أو آلاف القيراطات، وتكون أوزان حبيبات الألماس المستخرجة 0.1-1 قيراط وسطياً، أما البلورات الكبيرة التي تزن 100 قيراط فأكثر فهي نادرة. [13]

2-2: معادلة شرودنغر: معادلة شرودنغر هي معادلة تفاضلية جزئية خطية تحكم دالة الموجة لنظام ميكانيكي كمي. [1] وهو نتيجة رئيسية في ميكانيكا الكم ، وكان اكتشافه معلماً هاماً في تطور الموضوع. سميت المعادلة بعد إروين شرودنغر ، الذي افترض المعادلة في عام 1925 ونشرها في عام 1926 ، مما شكل أساس العمل الذي أسفر عن جائزة نوبل في الفيزياء في عام 1933. [29] [30].

من الناحية المفاهيمية ، معادلة شرودنغر هي النظرية الكمية لقانون نيوتن الثاني في الميكانيكا الكلاسيكية. بالنظر إلى مجموعة من الشروط الأولية المعروفة ، فإن قانون نيوتن الثاني يقوم بالتنبؤ الرياضي حول المسار الذي سيتخذه نظام فيزيائي معين عبر الزمن. تعطي معادلة شرودنغر التطور الزمني لدالة الموجة ، التوصيف الميكانيكي الكمي لنظام فيزيائي معزول.

معادلة شرودنغر ليست الطريقة الوحيدة لدراسة الأنظمة الميكانيكية الكمية وإجراء التنبؤات. التركيبات الأخرى لميكانيكا الكم تشمل ميكانيكا المصفوفة ، التي قدمها فيرنر هايزنبرغ ، وصياغة المسار المتكامل ، التي طورها في المقام الأول ريتشارد فاينمان. دمج بول ديراك ميكانيكا المصفوفة ومعادلة شرودنغر في صياغة واحدة. عند مقارنة هذه النهج ، استخدام معادلة شرودنغر يسمى أحياناً "ميكانيكا الموجة". [31]

3-2: الفيزياء الحاسوبية: هي دراسة وتنفيذ التحليل العددي لحل مشاكل الفيزياء التي توجد لها بالفعل نظرية كمية. [32] تاريخياً ، كانت الفيزياء الحاسوبية أول تطبيق للحواسيب الحديثة في العلوم ، وهي الآن مجموعة فرعية من العلوم الحاسوبية. وفي بعض الأحيان يعتبر فرعاً فرعياً (أو فرعاً) من فروع الفيزياء النظرية ، ولكن آخرين يعتبرونه فرعاً وسطياً بين الفيزياء النظرية والفيزياء التجريبية ، وهو مجال من مجالات الدراسة التي تكمل النظرية والتجريب على حد سواء. [33]



شكل (2.2)

تمثل الطبيعة المتعددة التخصصات للفيزياء الحاسوبية كموقع متداخل للفيزياء والرياضيات التطبيقية وعلوم الحاسوب وكجسر بينها. [33]

في الفيزياء ، النظريات المختلفة المبنية على النماذج الرياضية توفر تنبؤات دقيقة للغاية حول كيفية تصرف الأنظمة. ولسوء الحظ ، كثيرا ما يحدث أنه ليس من الممكن حل النموذج الرياضي لنظام معين من أجل إنتاج تنبؤات مفيدة. ويمكن أن يحدث ذلك ، على سبيل المثال ، عندما لا يكون للحل تعبير مغلق أو يكون معقدا للغاية. وفي هذه الحالات ، يلزم إجراء تقديرات تقريبية رقمية. إن الفيزياء الحاسوبية هي الموضوع الذي يتعامل مع هذه التقاربات العددية: حيث يكتب التقريب بين الحل باعتباره عدداً محدوداً (وخصماً عموماً) من العمليات الرياضية البسيطة (الخوارزمية) ، ويستخدم الكمبيوتر لأداء هذه العمليات وحساب الحل التقريبي والخطأ الخاص بكل منها.

4-2: التطبيقات: ونظراً للطبقة الواسعة من المشاكل التي تتعامل معها الفيزياء الحاسوبية ، فإنها تشكل عنصراً أساسياً في البحوث الحديثة في مجالات مختلفة من الفيزياء ، وعلى وجه التحديد: فيزياء المسرع والفيزياء الفلكية وميكانيكا السوائل (ديناميكا السوائل الحاسوبية) (لا سيما الشبكة الكروموديناميكية الكمية) ، محاكاة النظم الفيزيائية (على سبيل المثال ، باستخدام الديناميكا الجزيئية) ، والرموز الحاسوبية للهندسة النووية ، والتنبؤ ببنية البروتين ، والتنبؤ بالطقس ، وفيزياء الحالة الصلبة ، وفيزياء المادة المكثفة الناعمة ، والتأثير الفيزيائي الفائق السرعة ، وما إلى ذلك. [34]

الفيزياء الحاسوبية للحالة الصلبة ، على سبيل المثال ، تستخدم النظرية الوظيفية للكثافة لحساب خصائص المواد الصلبة ، وهي طريقة مماثلة لتلك المستخدمة من قبل الكيميائيين لدراسة الجزيئات. يمكن حساب كميات أخرى من الاهتمام في فيزياء الحالة الصلبة ، مثل بنية نطاق الإلكترون والخواص المغناطيسية وكثافات الحمل ، باستخدام هذه الطريقة والعديد من الطرق ، بما في ذلك طريقة لوتينجر-كون/كوب وطريقة ab-predo ،

5-2: AB initio: طرق كيمياء الكم هي طرق كيميائية حاسوبية تعتمد على الكيمياء الكمية. [35] تم استخدام مصطلح ab initio لأول مرة في كيمياء الكم من قبل روبرت بار ومعاونيه ، بما في ذلك ديفيد كريغ في دراسة نصف مثالية عن دول البنزين المثيرة. [36] [37] .

الأولى تعني "من المبادئ الأولى" أو "من البداية" ، مما يعني ضمناً أن المدخلات الوحيدة في البداية هي الثوابت الفيزيائية. [38] تحاول طرق كيمياء الكم حل معادلة شرودنغر الإلكترونية بالنظر إلى مواقف النواة وعدد الإلكترونات للحصول على معلومات مفيدة مثل كثافة الإلكترون والطاقات وغيرها من خصائص النظام. وقد سمحت القدرة على تنفيذ هذه الحسابات للكيميائيين النظريين لحل عدد من المشاكل وتبرز أهميتها مع منح جائزة نوبل لجون بوبل والتر كون. [39][40]

تهدف طرق البنية الإلكترونية Ab initio إلى حساب العديد من وظائف الإلكترون التي تمثل حل الحل غير النسبي لمعادلة شرودنغر الإلكترونية (في تقريب Born-Oppenheimer). تعد وظيفة الإلكترون العديدة عموماً مزيجاً خطياً من العديد من وظائف الإلكترون الأبسط مع الوظيفة المهيمنة هي وظيفة Hartree-Fock. ثم يتم تقريب كل من هذه الوظائف البسيطة باستخدام وظائف إلكترون واحد فقط. يتم بعد ذلك توسيع وظائف الإلكترون الواحد كمجموعة خطية من مجموعة محدودة من وظائف الأساس. يتمتع هذا النهج بميزة أنه يمكن جعله يتقارب مع الحل الدقيق ، عندما تميل مجموعة الأساس نحو حد

مجموعة كاملة وحيث يتم تضمين جميع التكوينات الممكنة (تسمى " Full CI "). ومع ذلك ، فإن هذا التقارب إلى الحد هو أمر صعب للغاية من الناحية الحسابية ومعظم العمليات الحسابية بعيدة عن الحد. ومع ذلك ، فقد تم التوصل إلى استنتاجات مهمة من هذه التصنيفات المحدودة.

الهدف من حسابات ab initio هو التنبؤ بالخصائص الفيزيائية لأنظمة المواد باستخدام أي مدخلات تجريبية عن طريق أرقامها الذرية فقط ، ويجب تحديد جميع الخصائص الفيزيائية ميكانيكياً كميًا دون تبسيط أو تقريب غير متحكم فيه . على وجه الخصوص ، يجب أولاً الحصول على التركيب الذري ، والذي يجب استخلاص جميع الخصائص الإلكترونية والاهتزازية والمغناطيسية والبصرية منها. الاتساق الذاتي. يمكن أيضًا دمج عمليات الاسترخاء وإعادة البناء الأيونية السطحية في هذا الإطار

النظرية المدارية الجزيئية Ab Initio:

يمكن حساب إجمالي الطاقة وخصائص المواد عن طريق حل معادلة شرودنجر:

$$H\Psi = E\Psi \quad 2.1$$

حيث E هي الطاقة الكلية، Ψ دالة الموجة، H هاميلتون هو عامل يشير إلى الطاقة الكلية للنظام الذي يتكون من الطاقة الحركية (E_k) بالإضافة إلى الطاقة الكامنة (V) كما هو موصوف على النحو التالي [41] [42]:

$$H = E_k + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r, t) \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad 2.2$$

\hat{H} = Hamiltonian operator

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{8\pi^2} \sum_A \frac{1}{M_A} \nabla_A^2}_{\text{kinetic energy (nuc.)}} + \underbrace{-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \sum_a \nabla_a^2}_{\text{kinetic energy (elect.)}} - e^2 \sum_A \sum_a \frac{Z_A}{r_{Aa}} + e^2 \sum_{A > B} \sum \frac{Z_A Z_B}{r_{AB}} + e^2 \sum_a \sum_b \frac{1}{r_{ab}} \quad 2.3$$

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{8\pi^2} \sum_A \frac{1}{M_A} \nabla_A^2}_{\text{kinetic energy (nuc.)}} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \sum_a \nabla_a^2}_{\text{kinetic energy (elect.)}} - e^2 \sum_A \sum_a \frac{Z_A}{r_{Aa}} + \underbrace{e^2 \sum_{A > B} \sum_{\substack{\text{nuclei} \\ A > B}} \frac{Z_A Z_B}{r_{AB}}}_{\text{constant}} + e^2 \sum_a \sum_{b > a} \frac{1}{r_{ab}}$$

1 kinetic energy term plus
2 Coulombic energy terms:
(one attractive, 1 repulsive)
plus a constant for nuclei

$$H_{total} = T_n + V_n + T_e + V_{en} + V_e = H_n + H_e \quad 2.4$$

2-6: تقريب بورن أوبنهايمر: في الكيمياء الكمية والفيزياء الجزيئية ، يُعد تقريب بورن-أوبنهايمر أفضل تقريب رياضي معروف في الديناميكا الجزيئية. على وجه التحديد ، من المفترض أن وظائف الموجة من النواة الذرية والإلكترونات من جزيء يمكن أن تعالج بشكل منفصل ، استناداً إلى حقيقة أن النواة هي أثقل بكثير من الإلكترونات. سمي النهج على اسم ماكس بورن و J. روبرت أوبنهايمر ، الذي اقترحه في عام 1927 ، [43] في الفترة المبكرة من ميكانيكا الكم.

ويستخدم التقريب على نطاق واسع في الكيمياء الكمية لتسريع حساب وظائف الموجات الجزيئية والخواص الأخرى للجزيئات الكبيرة. وهناك حالات حيث لم يعد من الممكن الوفاء بافتراض الحركة القابلة للفصل ، الأمر الذي يجعل التقريب يفقد صلاحيته (يقال إنه "مكسور") ، ولكنه كثيراً ما يستخدم كنقطة انطلاق لأساليب أكثر صقلًا.

في التحليل الطيفي الجزيئي ، يعني استخدام نهج BO النظر إلى الطاقة الجزيئية كمجموع من المصطلحات المستقلة ، على سبيل المثال:

$$E_{total} = E_{electronic} + E_{vibrational} + \quad 2.5 \quad \text{uclear spin}$$

هذه المصطلحات ذات أوامر مختلفة من حيث الحجم وطاقة الدوران النووية صغيرة جدًا لدرجة أنه غالبًا ما يتم حذفها. تتكون الطاقات الإلكترونية من الطاقات الحركية ، والتنافر الإلكتروني ، والتنافر النووي ، والجاذبية الإلكترونية والنووية ، وهي المصطلحات التي يتم تضمينها عادةً عند حساب التركيب الإلكتروني للجزيئات [44]

$$\begin{aligned} \text{Electronic SE: } H_e \Psi_e(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= E_e(\mathbf{R}) \Psi_e(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \\ \text{Nuclear SE: } (T_n + V_n + E_e(\mathbf{R})) \Omega_n(\mathbf{R}) &= E_n \Omega_n(\mathbf{R}) \\ V_n + E_e(\mathbf{R}) &= \text{potential energy surface (PES)} \\ \text{Total WF [16]: } \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= \Omega_n(\mathbf{R}) \Psi_e(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \end{aligned}$$

ويعترف نهج بورن أوبنهايمر بالفرق الكبير بين كتلة الإلكترونات وكتلة النواة الذرية ، وبالتالي ، الجداول الزمنية لحركتها. بالنظر إلى نفس كمية الطاقة الحركية ، تتحرك النواة أبطأ بكثير من الإلكترونات. من الناحية الرياضية ، يتكون نهج BO من التعبير عن دالة الموجة من جزيء كنتاج من دالة الموجة الإلكترونية ودالة الموجة النووية (اهتزاز ، دوران). وهذا يسمح بفصل مشغل هاميلتوني من الناحيتين الإلكترونية والنووية ، حيث يتم تجاهل الشروط المتبادلة بين الإلكترونات والنويات ، بحيث يمكن حل النظامين الأصغر حجما والمفصول بشكل أكثر كفاءة

2-7: تقريب هارترى فوك: في الفيزياء الحاسوبية ، طريقة (Hartree-Fock HF) هي طريقة تقريب لتحديد وظيفة الموجة وطاقة نظام كمي متعدد الأجسام في حالة ثابتة. تسعى طريقة Hartree-Fock إلى حل مشكلة إلكترونية تقريباً معادلة شرودنجر ، وتفترض أنه يمكن تقريب دالة الموجة بواسطة محدد سليتر واحد يتكون من مدار دوران واحد لكل إلكترون. نظرًا لأن تعبير الطاقة متماثل ، فإن النظريات المتغيرة تتمسك ، ولذا فنحن نعلم أن محدد سلاتر بأقل طاقة هو أقرب ما يمكننا الوصول إليه من دالة الموجة الحقيقية للشكل الوظيفي المفترض لمحدد سليتر واحد. تحدد طريقة Hartree-Fock مجموعة مدارات الدوران التي تقلل الطاقة وتعطينا أفضل محدد فردي .

إن الطاقة المحسوبة للدالة الموجية تكون دائما أكبر من الطاقة الحقيقية وعليه فإن الكثير من الحلول المقترحة لإيجاد الدالة الموجية ألا تكون بالضرورة صحيحة وإنما تحاول الحصول على أفضل دالة موجية والتي تمتلك أقل طاقة ، أي ان افضل دالة موجية يمكن الحصول عليها عندما تكون الطاقة أقل ما يمكن وعندها فان المشتقة الأولى للطاقة ∂E تساوي صفرا .

وتستند نظرية هارترى- فوك أساسا على طريقة التغيير في ميكانيك الكم بافتراض ان Ψ (دالة الحالة الارضية) هي دالة مقربة لعدد N من اوريبيتالات البرم المتعامدة- المتناسقة ψ فمحددة سليتر determinant Slater بإمكانها تمثيل دالة الحالة اللرضية

$$\Psi_0 \approx \Psi_{HF} = \frac{1}{\sqrt{N_i}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_2(x_1) & \cdots & \psi_N(x_1) \\ \psi_1(x_2) & \psi_2(x_2) & \cdots & \psi_N(x_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_1(x_N) & \psi_2(x_N) & \cdots & \psi_N(x_N) \end{vmatrix} \quad 2.6$$

تقريب Fock-Hartree هي الطريقة التي بموجبها توجد الالوربيتالات المتعامدة طاقة الدالة Ψ (الممثلة بصيغة المحددة) [45].

8-2: نظرية دالة الكثافة (DFT): هي طريقة للنمذجة الميكانيكية الكمية الحاسوبية المستخدمة في الفيزياء والكيمياء وعلم المواد للتحقيق في البنية الإلكترونية (أو البنية النووية) (بداية من الحالة الأرضية) لأنظمة الجسم العديدة ، وخاصة الذرات والجزيئات والمراحل المكثفة. وباستخدام هذه النظرية ، يمكن تحديد خواص نظام متعدد الإلكترونات باستخدام الدوال ، أي وظائف دالة أخرى.

يمكن ان يستعمل ميكانيك الكم لدراسة العديد من العمليات الكيميائية كالتالي تحصل عند المستويات الجزيئية . وتستخدم مختلف المعالجات لتقريب حل معادلة شرودنكر للنظام تحت الدراسة . من الطرائق عالية المستوى من الدقة و المعتمدة لحساب الكثير من الانظمة الالكترونية هي طريقتي DFT و ab initio . و تعتمد DFT في مجالات عديدة ، ففي الفيزياء تستعمل لدراسة أهم الظواهر الفيزيائية للمواد الصلبة الافلام الرقيقة وهي خاصية الشد الالكتروني الميكانيكي ، وتعد وسيلة ناجحة لفيزياء الحالة المكثفة ، وكذلك دراسة الصفات المجهرية properties Microscopic للأنظمة البايولوجية ، والأنظمة الالكترونية في الكيمياء ، وفي علم المواد science Material والتي يمكن وصفها بواسطة معادلة شرودنكر لمسألة تعدد الجسم . ان سبب الاعتماد الكبير على هذه النظرية يكمن في كونها رصينة و بسيطة في التطبيق ، وتعمل بواسطة دوال التصغير لتحديد الحالة الارضية حسب مبدأ نظرية التغير ، فعندما يوصف النظام بالدالة Ψ ، فالقيمة المتوقعة

للطاقة تعطى كالتالي

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi^* | \Psi \rangle} \quad 2.7$$

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \int \Psi^* \hat{H} \Psi dx \quad 2.8$$

إن مبدأ التغير ينص على ان الطاقة المحسوبة من الدالة المخمنة Ψ هي أكبر من طاقة الحالة الارضية الصحيحة $E[\Psi]$. تصغير الدالة $E[\Psi]$ لعدد N من الالكترونات سوف يعطي الحالة الارضية الصحيحة وطاقتها وهي :

$$E_o = \min_{\Psi \rightarrow N} E[\Psi] \\ = \min_{\Psi \rightarrow N} \langle \Psi | \hat{T} + \hat{V}_{Ne} + \hat{V}_{ee} | \Psi \rangle \quad 2.9$$

كانت نظرية دالة الكثافة ذات استخدام واسع جدا في حسابات فيزياء الحالة الصلبة منذ السبعينات. ومع ذلك ، لم تعتبر نظرية دالة الكثافة دقيقة بما فيه الكفاية لحسابات الكيمياء الكمية حتى التسعينات ، عندما تم تطوير التقريب المستخدمة في النظرية إلى حد كبير لتحسين تبادل النماذج وتفاعلات الترابط. التكاليف الحسابية منخفضة نسبياً مقارنة بالطرق التقليدية ، مثل تبادل نظرية هارترى-فوك (Hartree-Fock theory) التي تشمل الترابط بين الإلكترونات. ومنذ ذلك الحين ، أصبح نظرية دالة الكثافة أداة هامة لطرق التحليل الطيفي النووي مثل التحليل الطيفي أو الارتباط الزاوي المضطرب ، من أجل فهم أصل تدرجات المجال الكهربائي المحددة في البلورات.[46]

استعملت معالجات DFT بشكل كبير لتحديد مختلف خصائص الجزيئات بسبب المقدرة العالية التي تمتلكها ، وباستعمال B3LYP في الحساب فقد حققت DFT درجة ممتازة من الدقة وكفاءة الحساب لأطياف الاهتزاز لعدد كبير من الجزيئات ذات الحجم المتوسط . ولوصف السلوك الميكانيكي- الكمي behavior mechanical- quantum للنظام بالحالة المستقرة system stationary لعدد من الإلكترونات المتأثرة N ، فإن من الضروري حساب دالته الموجية متعددة الإلكترون . و من الممكن ان يحصل ذلك من خلال معادلة شرودنغر غير المعتمدة على الزمن ، ولأن حركة اي الكترون مقترنة مع تلك لبقية الإلكترونات في النظام ، ففي التطبيق لا يمكن حل المعادلة تحليليا بل بواسطة التقريبات . إن حل معادلة شرودنغر لمسألة تعدد الجسيم لذرة الهيدروجين ممكن ايجاده تحليليا لأنها تحتوي الكترون واحد ونواة واحدة ولكنه تبدأ الصعوبة لجزيئة الهيدروجين المتضمنة نواتين والكرونيين . اما للنظام المكون من اكثر من 20 جسيم فإن الحل يصبح معقدا . وتتفق طريقة DFT مع طريقة هارترى-

فوك بتمثيل الدالة الموجية function wave للإلكترونات المتعددة بمحددة سليتر والتي تتكون من عدد من الدوال الموجية للإلكترونات تساوي عدد الإلكترونات في الجزيئة ، وهي بذلك تأخذ الحركة المغزلية والتأثير بين الإلكترونات بنظر الاعتبار عند الحساب.[47]

9-2: الطرائق شبه التجريبية: Semi-Empirical Methods

تعتمد طريقة الحساب في الطرق الشبه عملية على معادلة شرودنغر، لذلك تعد من الطرق الشبيهة إلى حد كبير لطرق Initio Ab إال أن في هذا النوع من الحسابات يتم حل معادلة شرودنغر بمعاملات تجريبية، حيث يتم استبدال التكاملات المعقدة في طرق Initio Ab بمعاملات وتكاملت تجريبية تسحب

من قاعدة بيانات التكاملات ذات نتائج عالية الدقة كحسابات الطرق ذات المستوى العالي مثل "DFT". وتعد الطرق شبه العملية بطيئة مقارنة بطرق الميكانيكا الجزيئية، إلا أنها أسرع نوعا ما من طرق

Ab Initio [48,49]

9-2-1: الإهمال الكامل للتداخل التفاضلي (CNDO): هو أبسط إهمال لطرق التداخل (NDO) حيث

تميز مدارات التكافؤ باستخدام مجموعة بسيطة من مدارات نوع Slater, تستخدم طريقة (CNDO) للتوقع الأولي لحسابات طرق Ab initio للهيدروكربونات [50] كما تستخدم لدراسة [51] البنية الإلكترونية والفراغية للجزيء, ورغم بساطة طريقة الحساب في (CNDO) إلا أنه لم يتم

هذه الطريقة على نطاق واسع بسبب محدودية دقة نتائجها. لعدم قدرتها على تقدير التفاعلات ثنائية الإلكترون و التنبؤ بدقة الهياكل الجزيئية, وقد تبدو طريقة CNDO معقدة بعض الشيء إلا أنها تمثل تبسيطا شامال لنظرية HF, وقد أدخلت بعض التعديلات الطفيفة على هذه الطريقة فتقرعت الى مثل :

CNDO/S, CNDO/BW CNDO/2, CNDO/1 [52]

.CNDO: Complete Neglect of Differential Overlap

9-2-2: الإهمال الوسيط للتداخل المفرط (INDO) : هي طريقة كانت تستخدم للأنظمة العضوية ، أما الآن فتم استبداله بأساليب أكثر دقة [50] ، طريقة INDO لديها إمكانية كبيرة لنمذجة التحليل الطيفي للأشعة فوق البنفسجية والمرئية للمركب نتيجة لمعالجتها للتفاعلات الإلكترونية ذات المركز الواحد بطريقة أفضل ، كما تستخدم للتنبؤ بزوايا رابطة التكافؤ بدقة كبيرة و تكون ضعيفة نوعا ما في التنبؤ بالهندسة الجزيئية الكلية [53] .

INDO : Intermediate Neglect of Differential Overlap.

9-2-3: إهمال تعديل التداخل ثنائي الذرة (MNDO) : تم الإبلاغ عن الإهمال الموحد للتداخل التفاضلي بطريقة تستند إلى طريقة NDDO للعناصر C , O , N , H مع الاتفاقيات المحددة من قبل NDDO للتكامل . تعطي طريقة MNDO نتائج نوعية مقبولة لمختلف الأنظمة العضوية ، إلا أن دقة نتائج الطريقتين PM3 AM1 تغلبت على هذه الطريقة مما جعلتها تتراجع . كونها تعطي نتائج نوعية وكمية غير صحيحة ، فيتم التقليل من طاقات التحفيز الإلكتروني المحسوبة [50] .

. MNDO : Modified Neglect of Diatomic Overlap

9-2-4: AM1 : Austin Model 1 وهي طريق سريعة جدا شائعة لنمذجة المركبات العضوية حيث تعطي نتائج أكثر دقة على خلاف بقية الطرائق شبه التجريبية . تستخدم لتحسين طاقات التنشيط وتوقع الهندسة الجزيئية . وتكون أكثر دقة لطاقات رابطة الهيدروجين [50]

PM3 : Parametric Model number 3 :9-2-5 وهو نموذج قوي من نماذج NDDO يستمر استخدامه على نطاق واسع [54] ، تستخدم هذه الطريقة تقريبا نفس المعادلات المستعملة في AM1 ، وهي أكثر دقة منها وخاصة في حساب الزوايا رابطة الهيدروجين كما تستخدم لحساب الخصائص البنوية ، الطاقة الكلية ، حرارة التشكل [50] . كما بعض خصائص مجموعة PM3 إلى سلوكيات غير طبيعية لا تزال قيد المعالجة [55] .

المصادر:

- [1]: ^ a b "Diamond". Mindat. Retrieved July 7, 2009
- [2]:Ashcroft, Neil W.; Mermin, N. David. Solid state physics. Holt, Rinehart and Winston. (1976)
- [3]: Bandoz, Teresa J.; Biggs, Mark J.; Gubbins, Keith E.; Hattori, Y.; Iiyama, T.; Kaneko, Tatsumi; Pikunic, Jorge; Thomson, Kendall (2003). "Molecular models of porous carbons". In Radovic, Ljubisa R. (ed.). Chemistry and physics of carbon. 28. Marcel Dekker
- [4]: Diamonds from Outer Space: Geologists Discover Origin of Earth's Mysterious Black Diamonds". National Science Foundation. January 8, 2007. Retrieved October 28, 2007.
- [5]:Walker, J. (1979). "Optical absorption and luminescence in diamond"
- [6]: Zaitsev, A. M. (2000). "Vibronic spectra of impurity-related optical centers in diamond".
- [7]:Landstrass, M. I.; Ravi, K. V. (1989). "Resistivity of chemical vapor deposited diamond films". Applied Physics Letters.
- [8]: Zhang, W.; Ristein, J.; Ley, L. (2008). "Hydrogen-terminated diamond electrodes. II. Redox activity".
- [9]: Bundy, P.; Bassett, W. A.; Weathers, M. S.; Hemley, R. J.; Mao, H. K.; Goncharov, A. F. (1996). "The pressure-temperature phase and transformation diagram for carbon; updated through 1994".
- [10]: Wang, C. X.; Yang, G. W. (2012). "Thermodynamic and kinetic approaches of diamond and related nanomaterials formed by laser ablation in liquid". In Yang, Guowei (ed.). Laser ablation in liquids: principles and applications in the preparation of nanomaterials. Pan Stanford Pub.

- [11]: Diamond Care and Cleaning Guide". Gemological Institute of America. Retrieved 1 August 2019.
- [12]: Jones, Carl (27 August 2016). "Diamonds are Flammable! How to Safeguard Your Jewelry". DMIA. Retrieved 1 August 2019.
- [13]: Fukura, Satoshi; Nakagawa, Tatsuo; Kagi, Hiroyuki (November 2005). "High spatial resolution photoluminescence and Raman spectroscopic measurements of a natural polycrystalline diamond, carbonado". *Diamond and Related Materials*.
- [14]: Hitoshi SUMIYA, Novel Development of High-Pressure Synthetic Diamonds "Ultra-hard Nanopolycrystalline Diamonds", *SEI TECHNICAL REVIEW · NUMBER 74 · APRIL 2012 · 23*
- [15]: Liangchao Chen, Xinyuan Miao, Hongan Ma, Longsuo Guo, Zhanke Wang, Zhiqiang Yang, Chao Fang, Xiaopeng Jia, "Synthesis and characterization of diamonds with different nitrogen concentrations under high pressure and high temperature conditions, *Royal Society of Chemistry*, (2018)
- [16]: Andrey A Shiryaev, Denis A Zolotov, Olena M Suprun, Sergei A Ivakhnenko, Alexey A Averin, Alexey V Buzmakov, Valentin V Lysakovskiy, Irina G Dyachkova, Victor E Asadchikov "Unusual types of extended defects in synthetic high pressure–high temperature diamonds" *Royal Society of Chemistry*, (2018)
- [17]: Ning Chen, Guoqing Zhang, Rui Li, Gang Xu, Fangbiao Wang, Hongan Ma, Xiaopeng Jia "Defect and Stress Reduction in High-Pressure and High-Temperature Synthetic Diamonds Using Gradient Cooling Technology" *ACS Publications*, (2020)
- [18]: EA Ekimov, SG Lyapin, Yu V Grigoriev, IP Zibrov, KM Kondrina " Size-controllable synthesis of ultrasmall diamonds from halogenated adamantanes at high static pressure" *sciencedirect*, (2019)
- [19]: Evgeny A Ekimov, Oleg S Kudryavtsev, Andrey A Khomich, Oleg I Lebedev, Tatiana A Dolenko, Igor I Vlasov "High-Pressure Synthesis of Boron-Doped Ultrasmall Diamonds from an Organic Compound" *onlinelibrary.wiley.com*, (2015)
- [20]: Longsuo Guo, Hongan Ma, Liangchao Chen, Ning Chen, Xinyuan Miao, Yao Wang, Shuai Fang, Zhiqiang Yang, Chao Fang, Xiaopeng Jia "Synthesis and characterization of diamonds using C₃H₅N₃O as an organic additive under high pressure and high temperature" *Royal Society of Chemistry*, (2018)
- [21]: Yuri N Palyanov, Yuri M Borzdov, Igor N Kupriyanov, Alexander F Khokhryakov, Denis V Nechaev (Scientific reports) " Rare-earth metal catalysts for high-pressure synthesis of rare diamonds" *nature.com*, (2021)
- [22]: Y Nakamoto, M Sakata, H Sumiya, K Shimizu, T Irifune, T Matsuoka, Y Ohishi (Review of scientific instruments) "Note: High-pressure generation using nano-polycrystalline diamonds as anvil materials" *aip.scitation.org*, (2011)
- [23]: Stuart A Gilder, Ramon Egli, Rupert Hochleitner, Sophie C Roud, Michael WR Volk, Maxime Le Goff, Maarten De Wit (Journal of Geophysical Research: Solid Earth 116 (B10)) "Anatomy of a pressure-

induced, ferromagnetic-to-paramagnetic transition in pyrrhotite: Implications for the formation pressure of diamonds"onlinelibrary.wiley.com,(2011) Figure 1:introduction to solid state physics charles kittel·1953

[24]^ Born, M. (1926). "Zur Quantenmechanik der Stoßvorgänge" [Sobre a mecânica quântica dos processos de colisão]. *Zeitschrift für Physik* . 37 (12): 863–867. Bibcode : 1926ZPhy ... 37..863B . doi : 10.1007 / BF01397477 . S2CID 119896026 .

[25]^ a b c Feynman, Richard; Leighton, Robert; Sands, Matthew (1964). *The Feynman Lectures on Physics* . 3 . Instituto de Tecnologia da Califórnia. ISBN 978-0201500646. Página visitada em 19 de dezembro de 2020 .

[26]^ Jaeger, Gregg (setembro de 2014). "O que no mundo (quântico) é macroscópico?". *American Journal of Physics* . 82 (9): 896–905. Bibcode : 2014AmJPh..82..896J . doi : 10.1119 / 1.4878358 .

[27]^ a b c Lederman, Leon M .; Hill, Christopher T. (2011). *Física Quântica para Poetas* . EUA: Prometheus Books. ISBN 978-1616142810. ^ Müller-Kirsten, HJW (2006). *Introdução à Mecânica Quântica: Equação de Schrödinger e Integral de Caminho* . EUA: World Scientific. p. 14. ISBN 978-981-2566911.

[28]^ "The Google doodle by physicist Erwin Schrödinger marks the work of quantum mechanics" . *The Guardian* . August 13, 2013. Retrieved 25 August 2013.

[29]^ Schrödinger, E. (1926). "An undulating theory of the mechanics of atoms and molecules" (PDF) . *Physical review* . 28 (6): 1049-1070. Bibliographic Code : 1926PhRv ... 28.1049S . doi : 10.1103 / PhysRev.28.1049 . Archived from the original (PDF) on 17 December 2008.

[30] b Thijssen, Jos (2007). *Computational Physics*. Cambridge University Press. ISBN 978-0521833462.

[31]Landau, Rubin H. ; Páez, Manuel J.; Bordeianu, Cristian C. (2015). *Computer physics: problem solving with Python*. John Wiley & Fils .

[32]^ Landau, Rubin H. ; Paez, José; Bordeianu, Cristian C. (2011). *A Survey of Computer Physics: An Introduction to Computer Science* . Princeton University Press . ISBN 9780691131375. 12

[33]^ Smith, SJ; Sutcliffe, BT (1997). 'De ontwikkeling van computationele chemie in het Verenigd Koninkrijk'. *Recensies in Computational Chemistry* . 10 : 271-316.

[34]^ Schaefer, Henry F. III (1972). *De elektronische structuur van atomen en moleculen* . Reading, Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Co. p. 146 .

[35]^ Jongens, SF; Cook, GB; Reeves, CM; Shavitt, I. (1956). 'Automatische fundamentele berekeningen van moleculaire structuur'. *Natuur* . 178 (2): 1207. Bibcode : 1956Natur.178.1207B . doi : 10.1038 / 1781207a0 . S2CID 4218995 .