sjst.scst.edu.ly

Surman Journal for Science and Technology
ISSN: Online (2790-5721) - Print (2790-5713)

مجلة صرمان للعلوم والتقنية
Vol 8, No.1. Jan. – May. 2026
Pages: 199 ~ 205

دراسة تحليلية للسعة الحرارية المولية عند ثبوت الحجم لمادة كبريتيد القصدير (SnS) باستخدام نموذج ديباي

عفاف صالح علي الزوالي[1], سميراء صالح علي شاكونة[2], حنان الصادق الطاهر عبدالرحمن[3], انتصار الطاهر سالم الزوالي[4]

كلية التربية, جامعة الزاوية, ليبيا

a.zawaly@zu.edu.ly[1], s.shakonah@zu.edu.ly[2], h.abdulrahman@zu.edu.ly[3], i.zawaly@zu.edu.ly[4]

الملخص

تُعد مادة كبريتيد القصدير من أشباه الموصلات المهمة من نوع IV-VI ، ولها تطبيقات واعدة في مجالات المواد الكهرو حرارية والخلايا الشمسية . الهدف من هذه الدراسة هو تحديد السعة الحرارية المولية عند ثبوت الحجم C_v لمادة كبريتيد القصديرSnS حيث تمت دراسته نظريا باستخدام نموذج ديباي و اعتماد تقريب ديباي لوصف مساهمة اهتزازات الشبكة البلورية في السعة الحرارية عبر مدى واسع من درجات الحرارة، و تم اعتماد درجة حرارة ديباي لهذه المادة 218K. وباستخدام محاكاة الحسابات النظرية باستخدام برنامج MATLAB . أظهرت النتائج المحسوبة السلوك المتوقع للسعة الحرارية المولية C_v، حيث تتناسب مع مكعب درجة الحرارة المطلقة T^3 عند درجات الحرارة المنخفضة، وتقترب من حد دولونغ-بتي الكلاسيكي عند درجات الحرارة المرتفعة. تم مقارنة النتائج النظرية C_v مع النتائج التجريبية المتاحة للسعة الحرارية عند ثبوت الضغط C_p واظهرت النتائج المتحصل عليها توافقاً جيداً مع النتائج التجريبية المنشورة في الادبيات العلمية، حيث بلغ الانحراف النسبي حوالي% 0.34 عند 250 K ومع ذلك لوحظ انحراف متزايد عند درجات الحرارة المنخفضة 13.00% عند 100K والعالية % 6.50 عند 600K، مما يشير الى أن نموذج ديباي يمثل تقريباً ممتازاً في النطاق المتوسط، وأن الانحرافات تعود الى تأثيرات اللاحرارية وكذلك الفرق بين السعة الحرارية عند C_v و C_P. لقد قدمت هذه الدراسة اطاراً تحليلياً موثوقاً لتقدير الخصائص الحرارية لمادة SnS .

الكلمات المفتاحية: كبريتيد القصدير؛ السعة الحرارية المولية؛ نموذج ديباي؛ درجة حرارة ديباي؛ MATLAB

Abstract

Tin sulfide (SnS) is an important IV-VI semiconductor material with promising applications in thermoelectric materials and solar cells. The objective of this study is to determine the molar heat capacity at constant volume C_v for tin sulfide SnS. This was theoretically investigated using the Debye model, employing the Debye approximation to describe the contribution of lattice vibrations to the heat capacity across a wide range of temperatures. A Debye temperature of 218 K was adopted for this material. Theoretical calculations were performed using MATLAB simulation. The calculated results showed the expected behavior of the molar heat capacity C_v, which is proportional to the cube of the absolute temperature T^3 at low temperatures and approaches the classical Dulong-Petit limit at high temperatures. The theoretical C_v results were compared with available experimental results for heat capacity at constant pressure (C_p). The obtained results showed good agreement with published experimental data in the scientific literature, with a relative deviation of approximately 0.34% at 250 K. However, an increasing

sjst.scst.edu.ly
Surman Journal for Science and Technology
ISSN: Online (2790-5721) - Print (2790-5713)
مجلة صرمان للعلوم والتقنية
Vol 8, No.1. Jan. – May. 2026
Pages: 199 ~ 205

deviation was observed at low temperatures 13.00% at 100 K and high temperatures 6.50% at 600 K. This indicates that the Debye model provides an excellent approximation in the intermediate range, and the deviations are attributed to a harmonic effect as well as the difference between C_v and C_p. This study provides a reliable analytical framework for estimating the thermal properties of SnS.

Keywords: Tin sulfide; Molar heat capacity; Debye model; Debye temperature, MATLAB

Submitted: 16/04/2026 *Accepted: 26/05/2026*

المقدمة

يُعد كبريتيد القصدير (SnS) من أشباه الموصلات الطبقية التابعة لمركبات IV-VI ، وقد حظي باهتمام علمي متزايد نظراً لخواصه الكهربائية والبصرية والحرارية المميزة. في السنوات الأخيرة، استخدمت هذه المادة على نطاق واسع في تطبيقات تحويل الطاقة الكهرو حرارية وتقنيات الخلايا الشمسية. ويُعد فهم الخواص الحرارية لمادة SnS ، ولا سيما السعة الحرارية، امراً ضرورياً لتحسين أدائها في مثل هذه التطبيقات، نظراً لارتباط هذه الخاصية بسلوك الفونونات والاهتزازات الشبكية داخل البنية البلورية [1] . تعد السعة الحرارية النوعية المولية من أهم الخواص الحرارية التي تعكس طبيعة الاهتزازات الشبكية داخل المواد الصلبة، إذ ترتبط ارتباطاً مباشراً بسلوك الفونونات وتوزيع طاقاتها داخل الشبكة البلورية. وقد طُرحت عدة نماذج نظرية لوصف هذه الخاصية، من أبرزها نموذج ديبايDebye Model، الذي يُعد من أكثر النماذج نجاحاً في تفسير السلوك الحراري للمواد الصلبة، خاصة عند درجات الحرارة المنخفضة والمتوسطة [2,1].

يستند نموذج ديباي إلى تمثيل الاهتزازات الشبكية على أنها غاز من الفونونات ذات طيف طاقي مستمر وصولا إلي تردد يُعرف بتردد ديبايω_D، والذي تُشتق منه درجة حرارة ديباي. وقد أظهر هذا النموذج قدرة عالية على توصيف التغير في السعة الحرارية النوعية المولية مع درجة الحرارة، مقارنة بالنماذج الكلاسيكية التي تفشل في تفسير السلوك الحراري عند درجات الحرارة المنخفضة.

في هذا الاطار، قدمت دراسة نظرية لحساب السعة الحرارية النوعية المولية لمادة كلوريد الصوديوم (NaCl) باستخدام نموذج ديباي سنة 2024 ، حيث تم تحليل سلوك السعة الحرارية بدلالة درجة الحرارة المطلقة. واظهرت نتائجهم أن نموذج ديباي يوفر وصفاً دقيقاً للسلوك الحراري لـ NaCl، مع تحديد درجة حرارة ديباي للمادة بقيمة تقارب 277.5 K ،مما يعكس ملاءمة النموذج في توصيف المواد البلورية الايونية ذات البنية المكعبة [3,4] .

من ناحية أخرى، تمتد أهمية نموذج ديباي الى دراسة مواد أكثر تعقيداً من حيث البنية البلورية، بما في ذلك اشباه الموصلات الطبقية. اذ تعتمد الخواص الحرارية لهذه المواد، مثل كبريتيد القصدير (SnS)، على تأثيرات فونونية أكثر تعقيداً ناتجة عن عدم تماثل البنية البلورية وطبيعتها الطبقية. وعلى الرغم من هذا التعقيد، فإن نموذج ديباي يظل إطاراً نظرياً مهماً لتقدير السعة الحرارية النوعية المولية. لا سيما في المدى الحراري الذي تكون فيه التأثيرات الفونونية هي المسيطرة.

وبناءاً على ما سبق، فإن توظيف نموذج ديباي، الذي اثبت فعاليته في توصيف الخواص الحرارية لمواد بلورية بسيطة مثل NaCl، يمثل خطوة منطقية لدراسة السعة الحرارية النوعية المولية لمواد شبه موصلة من مركبات IV-VI مثل SnS، مما يسهم في فهم أعمق لسلوكها الحراري وتحسين أدائها في التطبيقات الكهرو حرارية والخلايا الشمسية.

sjst.scst.edu.ly
Surman Journal for Science and Technology
ISSN: Online (2790-5721) - Print (2790-5713)
مجلة صرمان للعلوم والتقنية
Vol 8, No.1. Jan. – May. 2026
Pages: 199 ~ 205

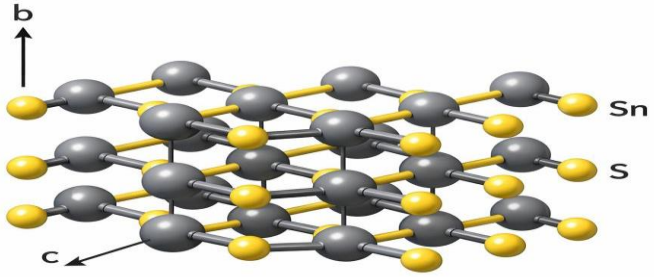
أهداف البحث

1- تطبيق نموذج ديباي لحساب السعة الحرارية المولية (C_v) لمادة (SnS).
2- محاكاة الحسابات النظرية باستخدام MATLAB.
3- مقارنة النتائج النظرية مع البيانات التجريبية المتاحة لتقييم مدى دقة النموذج في نطاقات حرارية مختلفة.

أولاً: الجانب النظري

1-1: التركيب البلوري والخصائص الفيزيائية لمادة كبريتيد القصدير(SnS)

يتكون كبريتيد القصدير الأحادي (SnS) من ذرات القصدير(Sn) والكبريت (S) بنسبة ستوكيومترية (1:1) حيث يوجد القصدير في حالة الاكسدة الثنائية (+2) والكبريت في حالة الاكسدة السالبة (-2) ويرتبطان بروابط ايونية – تساهمية مختلطة مكونين بنية بلورية طبقية، بشكل بلورات غامق الى اسود اللون. يتبلور كبريتيد القصدير الأحادي في النظام المعيني القائم(Orthorhombic) ببنية طبقية ناتجة عن التشوه في تناسق أيون Sn^{2+} ووجود الزوج الالكتروني الخامل. ويؤدي هذا التركيب البلوري غير المتجانس الى خواص فيزيائية اتجاهية، تتمثل في انخفاض الناقلية الحرارية. يتمتع (SnS) بالثوابت الشبيكية : a= 4.30 Å, b= 11.20Å , c= 3.99Å ، كما انها تمتلك توصيلية من النوع الموجب P- اي ان حاملات الشحنة الاغلبية هي الفجوات كما موضح بالشكل (1) [5,1].



الشكل (1) يمثل التركيب البلوري لمادة (SnS)

2-1: الأسس النظرية ونموذج ديباي

يفترض نموذج ديباي طيفاً مستمراً للفونونات حتى تردد أعظمي يُعرف بتردد ديباي ω_D، وترتبط به درجة حرارة مميزة تسمى درجة حرارة ديباي (θ_D) ، والتي تعكس الخواص الاهتزازية للمادة الصلبة. تعطى السعة الحرارية المولية عند الحجم الثابت وفق نموذج ديباي بالعلاقة (1).

$$C_v = 9NR\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2} dx \qquad (1)$$

- C_v: الحرارة النوعية المولية عند ثبوت الحجم) جول/مول. كلفن)
- N : عدد الذرات في الوحدة الجزيئية لكبريتيد القصدير الصوديوم (SnS).
- R : ثابت الغازات العام (8.314 J/mol. K).
- T : درجة الحرارة المطلقة (كلفن).

sjst.scst.edu.ly
Surman Journal for Science and Technology
ISSN: Online (2790-5721) - Print (2790-5713)
مجلة صرمان للعلوم والتقنية
Vol 8, No.1. Jan. – May. 2026
Pages: 199 ~ 205

- θ_D : درجة حرارة ديباي.
- x : متغير تكامل لا بعدي $x = \frac{\hbar\omega}{BKT}$

عند درجات الحرارة المنخفضة جداً ($T << \theta_D$) ، تتبع السعة الحرارية علاقة تناسبية مع T^3، في حين أنها تقترب عند درجات الحرارة المرتفعة ($T >> \theta_D$) من الحد الكلاسيكي لقانون دولونغ-بتي [5].

3-1: تطبيق النموذج على مادة كبريتيد القصدير (SnS)

يمتلك كبريتيد القصدير بنية بلورية معينية قائمة ((Orthorhombic) ويتكون من ذرتين في وحدة الصيغة الكيميائية. في هذه الدراسة النظرية، تم اعتماد قيمة تمثيلية لدرجة حرارة ديباي SnS استناداً الى القيم المنشورة في الادبيات العلمية.
وباستخدام نموذج ديباي، تم حساب السعة الحرارية المولية لمادة كبريتيد القصدير (SnS) كدالة لدرجة الحرارة. عند درجات الحرارة المنخفضة، تزداد السعة الحرارية بسرعة مع ارتفاع درجة الحرارة، وهو ما يعكس الطبيعة الكمومية لاهتزازات الشبكة البلورية. ومع زيادة درجة الحرارة، تتجه السعة الحرارية تدريجياً نحو قيمة ثابتة تقترب من الحد الكلاسيكي $3nR$ حيث n هو عدد الذرات في وحدة الصيغة.

ثانياً: منهجية الدراسة والمحاكاة

2-1: تحديد المعاملات

تم اعتماد المعاملات التالية لمركب (SnS) بناءاً على المراجع العلمية:

- عدد الذرات في وحدة الصيغة (SnS) :2
- درجة حرارة ديباي: 218 K تم اختيار هذه القيمة بناءاً على الحسابات النظرية الحديثة.
- البيانات التجريبية للمقارنة: تم استخدام بيانات السعة الحرارية عند ضغط ثابت C_p المتاحة في الادبيات العلمية في نطاق درجات الحرارة (600-100 K).

2-2: طريقة المحاكاة

تمت محاكاة معادلة (1) باستخدام برنامج (MATLAB)، حيث تم حساب قيمة C_v النظرية في نطاق واسع من درجات الحرارة (100K-650K). وتمت مقارنة قيم C_v النظرية مع قيم C_p التجريبية. يلاحظ ان الفرق بينهم يزداد مع ارتفاع درجة الحرارة، ولكن المقارنة المباشرة تظل ذات دلالة لتقييم مدى اقتراب النموذج النظري من السلوك الفعلي للمادة.

ثالثاً: النتائج والمناقشة

3-1: مقارنة النتائج

يوضح الجدول (1) مقارنة بين السعة الحرارية التجريبية (C_p) والسعة الحرارية النظرية (C_v) المحسوبة باستخدام نموذج ديباي عند درجة حرارة ديباي ($\theta_D = 218K$) .

sjst.scst.edu.ly
Surman Journal for Science and Technology
ISSN: Online (2790-5721) - Print (2790-5713)
مجلة صرمان للعلوم والتقنية
Vol 8, No.1. Jan. – May. 2026
Pages: 199 ~ 205

جدول (1) مقارنة السعة الحرارية التجريبية (C_p) مع السعة الحرارية النظرية (C_v) لمادة (SnS)

درجة الحرارة (T) (K)	C_pالتجريبية (J/mol·K)	C_v النظرية (J/mol·K)	الانحراف النسبي (%)
100.0	35.20	39.78	13.00
150.0	42.10	44.98	6.85
200.0	45.80	47.04	2.71
250.0	48.20	48.04	0.34
298.0	49.50	48.57	1.87
350.0	50.40	48.93	2.92
400.0	51.10	49.15	3.81
450.0	51.70	49.30	4.64
500.0	52.20	49.41	5.34
550.0	52.60	49.49	5.90
600.0	53.00	49.56	6.50

3-2: تحليل النتائج

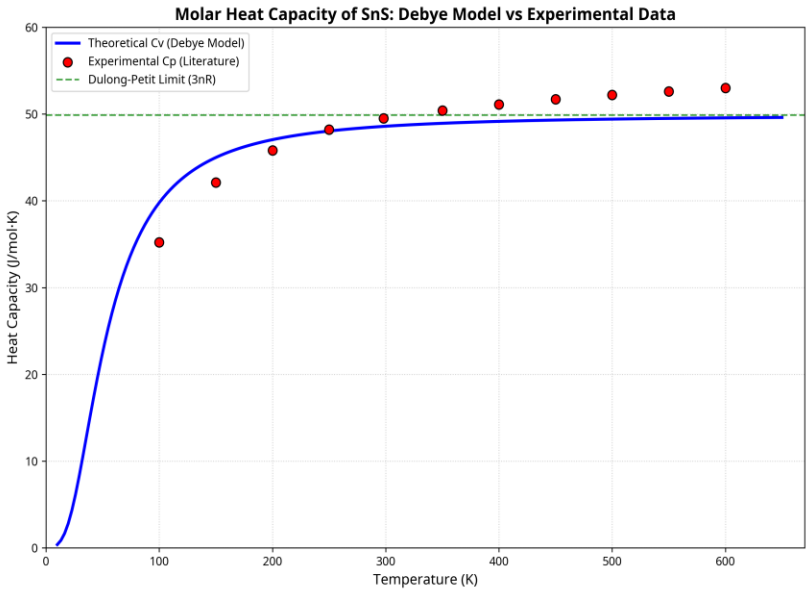
يُظهر الجدول (1) أن نموذج ديباي يقدم وصفاً دقيقاً للسلوك الحراري لمادة (SnS) في نطاق درجات الحرارة المتوسطة، خاصة حول درجة حرارة ديباي ($\theta_D = 218K$).

- عند T=250K،كان الانحراف النسبي ضئيلاً جداً (0.34%)،مما يؤكد أن $\theta_D = 218K$ هي قيمة مناسبة لنمذجة اهتزازات الشبكة في هذا النطاق.

- عند درجات الحرارة المنخفضة، يرتفع الانحراف النسبي بشكل ملحوظ (13.00%)عند 100K . يُعزى هذا الانحراف الى أن نموذج ديباي يصف السعة الحرارية عند درجات الحرارة المنخفضة بشكل افضل عندما تكون $T < \theta_D$ حيث C_v تتناسب مع T^3 و لكن في النطاق الانتقالي حول 100K

- عند درجات الحرارة العالية $T > \theta_D$ تتجاوز C_P التجريبية القيمة الحدية لنموذج ديباي من حد دولونغ-بيتي البالغ 49.88 J/mol.k K.

sjst.scst.edu.ly
Surman Journal for Science and Technology
ISSN: Online (2790-5721) - Print (2790-5713)
مجلة صرمان للعلوم والتقنية
Vol 8, No.1. Jan. – May. 2026
Pages: 199 ~ 205



الشكل (2) يوضح مقارنة بين السعة الحرارية المولية الحجمية المحسوبة باستخدام نموذج ديباي

الخلاصة

استعرضت هذه الورقة تطبيق نموذج ديباي لاستنباط السعة الحرارية المولية الحجمية لمركب كبريتيد القصدير (SnS) استناداً إلى درجة حرارة ديباي المميزة. وقد كشفت نتائج المحاكاة عن توافق وثيق مع البيانات التجريبية للسعة الحرارية عند ضغط ثابت ضمن النطاق الحراري المتوسط.
وتشير الانحرافات المرصودة في الأطراف الحرارية (الدنيا والعليا) إلى الحدود الفيزيائية لنموذج ديباي في توصيف السلوك الحراري المعقد للمواد ذات البنية الطبقية؛ حيث تبرز في هذه الأطوار أهمية التأثيرات اللاحرارية (Anharmonic effects) ويتعاظم التباين الفيزيائي بين C_P وC_V.

تلخص هذه الدراسة إلى أن نموذج ديباي يظل ركيزة نظرية صلبة ومنطلقاً فعالاً لتحديد الخصائص الحرارية لمركب SnS، مما يمهد الطريق لإجراء تحقيقات نظرية وتجريبية أكثر عمقاً تتناول الديناميكا الحرارية لهذا المركب بشكل تفصيلي.

المراجع

[1] He, X., Shen, H., Wang, W., Wang, Z., Zhang, B., & Li, X. (2013). The mechanical and thermo-physical properties and electronic structures of SnS and SnSe in orthorhombic structure. *Journal of Alloys and Compounds*, 556, 86-93

.

[2] Burton, L. A., & Walsh, A. (2012). Phase Stability of the Earth-Abundant Tin Sulfides SnS, SnS2, and Sn2S3.*The Journal of Physical Chemistry C*, 116(48), 26428-26432

.

[3] حنان الصادق الطاهر عبدالرحمن، حليمة المبروك شعبان، القمودي، وعفاف صلاح علي الزوالي .(2024) .مقارنة القيم المحسوبة نظرياً للحرارة النوعية المولية Cv لمادة كلوريد الصوديوم (NaCl) باستخدام نموذج ديباي مع القيم المعملية التجريبية .مجلة صرمان للعلوم والتقنية، المجلد 6، العدد 2، ص .51-57

Surman Journal for Science and Technology
ISSN: Online (2790-5721) - Print (2790-5713)
مجلة صرمان للعلوم والتقنية
Vol 8, No.1. Jan. – May. 2026
Pages: 199 ~ 205

.

[4] Calculate the molar specific heat of sodium chloride using the Debye model international j. ecomedical *Hanan A. Abdul Rahman, Sumaira S. Shakonah, Afaf S. Al-*Zawaly and public sciences, vol. 7, no. 1, march 2024
[5] Kittel, C. (2005).*Introduction to Solid State Physics*(8th ed.). John Wiley & Sons