

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

كلية الرياضيات و علوم المادة

قسم الفيزياء

رقم الترتيب:

الرقم التسلسلي:



مذكرة مقدمة لنيل شهادة ماستر

مجال: علوم المادة

فرع فيزياء

التخصص : فيزياء المواد

من إعداد الطالبة: بن يحكم أمال

الموضوع

دراسة الخصائص البنيوية و المرونية لأكسيد SiO_2 تحت الضغوط العالية
من 0 إلى 140 GPa بواسطة الحساب و تطبيقها في علم الزلازل

يوم المناقشة:

لجنة المناقشة:

بوكراع عمر	جامعة قاصدي مرباح- ورقلة	أستاذ تعليم عالي	رئيسا
بن بلقاسم خلف الله	جامعة قاصدي مرباح- ورقلة	أستاذ مساعد - أ.	مناقشا
محسن حسيـن	جامعة قاصدي مرباح- ورقلة	أستاذ محاضر - أ.	مساعد
تليلي صالح	جامعة قاصدي مرباح- ورقلة	أستاذ مساعد - أ.	مقررا

الموسم الجامعي: 2018/2017

تشكرات

لابد لنا ونحن نخطو خطواتنا الأخيرة في الحياة الجامعية من وقفة نعود الى أعوام قضيناها في رحاب الجامعة مع أساتذتنا الكرام الذين قدموا لنا الكثير.

وقبل أن أمضي أقدم أسمى آيات الشكر و الامتنان الى الذين حملوا أقدس رسالة أساتذتنا الأفاضل.

"كن عالماً.. فان لم تستطع فكن متعلماً, فان لم تستطع فأحب العلماء, فان لم تستطع فلا تبغضهم"

و أحص بالتقدير و الشكر:

الأستاذ: "ثليلي صالح"

الذي مد لي يد العون وذل لي الصعاب بملاحظاته و توجيهاته و كان لي مرشداً طوال مشوار هذا العمل.

كما أشكر الأستاذ " بوكراع عمر" على قبوله ترؤس لجنة المناقشة.

و الأستاذ " خلف الله بالقاسم " على قبوله مناقشة و تقييم عملي هذا.

كما لا يفوتنا أيضاً أن نتقدم بالشكر للأستاذ المساعد " محسن حسين " على مجهوداته معنا.

و كذلك أشكر كل من قدم لنا العون و مد لنا يد المساعدة لإتمام هذا العمل.



أمال

الاهداء

الى من جرع الكأس فارغا ليسقيني قطرة حب.. التي كلت أنامله ليقدم لي لحظة سعادة ..الى
من حصد الأشواك عن دربي ليمهد لي طريق العلم الى القلب الكبير (والدي العزيز)

الى حكمتي..وعلمي..الى أدبي و حلمي .. الى طريقي..المستقيم ..الى طريق الهداية..الى
ينبوع الصبر و التفاؤل و الأمل..الى كل من في الوجود بعد الله و رسوله (أمي الغالية)

الى سندي وقوتي وملاذي بعد الله..الى من آثروني على أنفسهم..الى من علموني علم الحياة..

الى من أزهروا لي ما هو أجمل من الحياة (إخوتي)

الى من تذوقت معهم أجمل اللحظات..الى من سأفتقدهم وأتمنى أن يفتقدوني..الى من

جعلهم الله إخوتي بالله (طلاب قسم المواد)

الآن تفتح الأشرعة وترفع المرساة لتنتقل السفينة في عرض البحر واسع مظلم..بحر الحياة وفي

هذه الظلمة لا يضيئ إلا قنديل الذكريات..ذكريات الأخوة البعيدة..الى الذين أحببتهم

وأحبوني (أصدقائي)

فهرس المحتويات

	التشكـرات
	الاهـداء
I	الفهرس
IV	فهرس الأشكال
VI	فهرس الجداول
1	مقدمة عامة

الفصل الأول: عموميات حول فيزياء

الضغوط العالية

3	1-I مقدمة
3	2-I فيزياء الضغوط العالية
3	1-2-I ماهية فيزياء الضغوط العالية
3	2-2-I أهمية فيزياء الضغوط العالية و أهم تطبيقاتها
4	3-I طرق الدراسة في فيزياء الضغوط العالية
4	1-3-I الطرق التجريبية
4	2-3-I الطرق الحسابية
4	1-2-3-I طريقة DFT
4	2-2-3-I تقريب الكثافة المحلية LDA
5	3-2-3-I تقريب التدرج المعمم GGA
5	4-I تطبيق فيزياء الضغوط العالية في علم الزلازل
5	1-4-I علم الزلازل
7	2-4-I نموذج PREM
10	5-I الجانب النظري
10	1-5-I تحديد السرعات الزلزالية
11	2-5-I تحديد الكثافة
11	3-5-I دراسة أنثالي
11	4-5-I تحديد ثوابت المرونة
13	5-5-I تحديد معامل الانضغاط الحجمي

13	6-5-I تحديد معامل القص
14	6-I دراسة الخصائص الزلزالية
14	1-6-I مقارنة السرعات الزلزالية
14	2-6-I عدم التجانس للوشاح السفلي
15	3-6-I عدم التماثل الزلزالي
15	1-2-6-I في حالة بلورة وحيدة
15	2-2-6-I في حالة موجات القص

الفصل الثاني: خصائص عامة ودراسات

مسبقة حول SiO_2

18	1-II مقدمة
18	2-II خصائص عامة حول SiO_2
20	3-II دراسات سابقة حول SiO_2
22	4-II خلاصة

الفصل الثالث: دراسة الخصائص البنيوية و

المرونية لـ SiO_2

23	1-III مقدمة
23	2-III طريقة الدراسة
24	3-III دراسة البنى المستقرة والتحول الطورية
24	1-3-III البنى المستقرة
26	2-3-III دراسة التحولات الطورية
27	4-III دراسة الخصائص البنيوية
27	1-4-III النسبة الحجمية V/V_0
28	2-4-III دراسة الكثافة
29	5-III دراسة الخصائص المرورية
29	1-5-III دراسة ثوابت المرورية C_{ij}
33	2-5-III دراسة معاملي المرورية
33	1-2-5-III دراسة معامل الانضغاط الحجمي K
34	2-2-5-III دراسة معامل القص G

36 الفصل الرابع: تطبيق دراسة الخصائص البنيوية و المرورية

لأكسيد في SiO_2 علم الزلازل

36	III-1 مقدمة
36	IV-2 دراسة سرعات الموجات الزلزالية
39	IV-3 دراسة عدم تجانس الوشاح السفلي
40	IV-4 دراسة عدم التماثل الزلزالي
45	خلاصة عامة
46	المراجع
49	الملحق

فهرس الأشكال

- 6 الشكل (1-I): يمثل أشكال الأمواج الزلزالية
- 9 الشكل (2-I): نموذج PREM وفقاً للعمق طبقاً للأرض المقابلة
- 9 الشكل (3-I): بنية وتكوين داخلي للأرض المقابلة مع نموذج PREM
الشكل (1-III): تفسير البنى البلورية لأكسيد SiO_2 ؛
- A-بنية Stishovite B-بنية CaCl_2 C-بنية Colombite
- 26 الشكل (2-III) تغير الفرق في أنتالبي التشكيل للبنى البلورية لـ SiO_2 بتغير الضغط
- 28 الشكل (3-III): تغير النسبة الحجمية لأكسيد SiO_2 بتغير الضغط، حيث؛
- A-الناتج من حساباتنا. B-الناتج من حساباتنا (a)، الناتج من عمل T.Yagi ورفاقه 2013
- 28 الشكل (4-III): تغير كثافة كل من SiO_2 و المادة الأرضية الممثلة في النموذج PREM بتغير الضغط
- 30 الشكل (5-III): تغير ثوابت المرونة لأكسيد SiO_2 بتغير الضغط، حيث؛
- A- خاص بالثوابت؛ c_{11} ، c_{22} و c_{33} -B، خاص بالثوابت؛ c_{12} ، c_{13} و c_{23} -C، خاص بالثوابت؛ c_{44} ، c_{55} و c_{66}
- 32 الشكل (6-III): تغير ثوابت المرونة لأكسيد SiO_2 بتغير الضغط، حيث؛
- A، C و E - تمثل مقارنة بين حساباتنا (a) و أعمال Tayeb Chihi ورفاقه 2013 (b)
- B، D و F - تمثل مقارنة بين حساباتنا (a) و أعمال Karki ورفاقه 1997 (b)
- 33 الشكل (7-III): تغير معامل الانضغاط الحجمي لأكسيد SiO_2 بتغير الضغط، حيث؛
- A-الناتج من حساباتنا. B-الناتج من حساباتنا (a)، الناتج من عمل Tayeb Chihi ورفاقه 2013
- 34 الشكل (8-III): تغير معامل القص لأكسيد SiO_2 بتغير الضغط، حيث؛
- A-الناتج من حساباتنا. B-الناتج من حساباتنا (a)، الناتج من عمل Tayeb Chihi ورفاقه 2013
- 38 الشكل (1-IV): يمثل تغير سرعات الموجات الزلزالية بدلالة الضغط لكل من قيم النموذج PREM (b) ونتائجنا (a)،
حيث: A- مقارنة السرعة V_p -B. مقارنة السرعة V_s -C. مقارنة السرعة V_f
- 39 الشكل (2-IV): يمثل تغير سرعتي الموجتين الطولية و العرضية بتغير الضغط حيث؛
- A - مقارنة سرعة الموجة V_p الناتجة عن عمل Tayeb Chihi (b) و الناتجة عن دراستنا (a).
- B - مقارنة سرعة الموجة V_s الناتجة عن عمل Tayeb Chihi (b) و الناتجة عن دراستنا (a).
- 40 الشكل (3-IV): يمثل تغير عدم تجانس الوشاح السفلي w و w' لأكسيد SiO_2 بتغير الضغط

41 الشكل(4-IV): يمثل تغير معاملات عدم التماثل الزلزالي Ap، As1 و As2 الخاصة بدراستناحول أكسيد SiO₂ بتغير الضغط

42 الشكل(5-IV): يمثل تغير السرعات الزلزالية في المستويات البلورية (100)، (110) و (001) بتغير الضغط، حيث:

A - خاص بالسرعة الطولية Vp . B - خاص بالسرعة العرضية Vs1 . C - خاص بالسرعة الطولية Vs2

43 الشكل(6-IV): يمثل تغير معاملات عدم التماثل الزلزالي بتغير الضغط:

Ap-A الخاصة بدراسة Karki و رفاقه (a) الخاصة بدراستنا(b).

B - As1 و As2 الخاصة بدراسة Karki و رفاقه (a) الخاصة بدراستنا(b).

فهرس الجداول

- 16 الجدول(1-I): يوضح سرعات الاتجاهات البلورية للتناظرية الرباعية (شبكة الرباعية)
- 17 الجدول(2-I): يوضح سرعات الاتجاهات البلورية للتناظرية المستطيلة (شبكة المستطيلة)
- 19 الجدول(1-II): يمثل بعض مختلف الأشكال البلورية من SiO_2
- 24 الجدول(1-III): خاص بأهم الخصائص البنيوية لثنائي أكسيد السليكون للبنى البلورية المستقرة في الشروط التيرموديناميكية للطبقات الأرضية
- 35 الجدول(2-III): قيم الميول الخاصة بالخصائص البنيوية و المرونية
- 44 الجدول(1-IV): قيم الميول الخاصة بالسرعات الموجية و معاملاتهما

مقدمة عامة:

تتأثر المادة بالشروط التيرموديناميكية المعرضة لها خاصة الضغط بشكل من الأشكال، فقد تغير بنيتها البلورية مثلاً. لهذا الأثر الفيزيائي تطبيقات متعددة من أهمها علم الزلازل، الذي يدرس انتشار الأمواج في الصخور بشكل عام. فالصخور تتعرض لضغوط عالية في الطبقات الداخلية للكواكب مما يغير انتشارية الأمواج فيها، و لهذا يهتم علم الزلازل بتكوين الطبقات الداخلية مستعملاً في إحدى طرقه ما يمكن القول عليه فيزياء الضغوط العالية.

من خلال نتائج علم الزلازل، الذي يعتمد على العديد من النماذج الزلزالية من أهمها النمـ _____ودج PREM (Preliminary Reference Earth Model)، حددت الكثير من خصائص الطبقات الداخلية الأرضية بالأخص مكوناتها المادية. من بينها نجد السليكون الذي يعتبر عنصر ثامن في الكون حسب الوفرة ولكن من النادر وجوده نقياً في الطبيعة، فكثيراً ما يكون مختلطاً بالغبار والرمال في الكويكبات والكواكب بعدة صور من ثاني أكسيد السيلكون و السيليكات أو منيرالات مشكلة من السيليكات، كما تبين أن حوالي 90% من القشرة الأرضية تتألف من معادن السيليكات، مما يجعل السليكون ثاني أكثر عنصر متوفر في القشرة الأرضية (حوالي 28% حسب الوفرة) بعد الأكسجين.

في هذه الدراسة سوف نهتم بثاني أكسيد السيلكون، الذي يعتبر من المكونات الأساسية للطبقات الأرضية. ذلك عن طريق الحساب من اجل تحديد تحولاته الطورية؛ الخصائص البنيوية و المرنة، التي تطبق نتائجها في دراسة السرعات الموجية و المقارنة بالملاحظات الزلزالية.

لذلك رأينا من المناسب تجزئة هذا العمل إلى أربعة فصول، يتناول كل منها موضوع محدد و هي:

الفصل الأول و الذي من خلاله يقدم عموميات حول فيزياء الضغوط العالية، ماهيتها، أهميتها و أهم تطبيقاتها و طرق دراستها، كما تم التطرق لعلم الزلازل الكويكبي كتطبيق مباشر لفيزياء الضغوط العالية، مع أهم العلاقات الخاصة بالحساب، بالأخص المكمل.

يتناول الفصل الثاني أهم الدراسات السابقة الخاصة بثنائي أكسيد السليكون SiO_2 ، حيث نتعرف على طرق الدراسة و

أهم الخصائص المدروسة.

في الفصل الثالث نقدم دراستنا للتحويل الطوري، الخصائص البنيوية و المرونية لهذا الأكسيد.

كما نعرض في الفصل الرابع تطبيق نتائج الفصل السابق في علم الزلازل، أين نجد دراسة تغيرات السرعات الموجات الزلزالية،

عدم تجانس الوشاح و أخير عدم التماثل الزلزالي.

في الأخير نحاول وضع خلاصة لنتائج دراستنا، نتطرق لنقاط القوة و الضعف فيها، نقدم في الأخير مجموعة من المقترحات و

أفاق البحث المستقبلية.

الفصل الأول:

عموميات حول فيزياء الضغوط العالية و تطبيقاتها في علم الزلازل

I-1 المقدمة:

في هذا الفصل، نبحث بمختلف النظريات الضرورية المرتبطة بفيزياء الضغوط العالية؛ انطلاقاً من ماهيتها، أهميتها و أهم تطبيقاتها، بالإضافة إلى مختلف الطرق المستخدمة في الدراسة فيها، كما نقدم أهم تطبيقات و هو علم الزلازل حيث؛ نعرض أهم الموجات الزلزالية و نماذج البنية المقترحة عن طريق تحليل هذه الموجات عموماً و نموذج PREM خصوصاً. تقدم هنا كذلك، مختلف تعريفات و العلاقات الضرورية لتحديد مختلف المعاملات المستعملة في هذه الدراسة.

I-2 فيزياء الضغوط العالية:

I-2-1 ماهية فيزياء الضغوط العالية:

عند تعرض المادة للتغير في الخصائص التيرموديناميكية للوسط المتواجدة به فان خصائصها غالباً ما تتأثر بهذا التغير، و الخصائص التيرموديناميكية المقصودة هنا تتمثل عموماً في درجة الحرارة و الضغط. فعند الزيادة في الضغط تتأثر بنية المادة، فان كانت صلبة و بلورية فقد تتغير بنيتها من طور إلى آخر و بالتالي تتغير كل الخصائص المتعلقة بالبنية كالخصائص المرورية و ما يترتب عنها كالسرعات الموجية مثلاً. هذا القسم من الفيزياء و الذي يمكن دعوته بـ " فيزياء الضغوط العالية "، لم نجد في أي مرجع انه جزء مستقل عن الفيزياء.

I-2-2 أهمية فيزياء الضغوط العالية وأهم تطبيقاتها:

تكمن أهمية فيزياء الضغوط العالية في القدرة على تطويع و التحكم في المادة، بالأخص التي لا تعود لبنيتها الأولى بعد رفع الحمل عنها. بهذا يمكن تطويع أي مادة تملك هذه الخاصية حتى يستفاد من الخصائص الجديدة لها. بسبب هذه الأهمية لا يمكن حصر تطبيقات فيزياء الضغوط العالية، فمجال هذا التطبيق يكون حسب الاستفادة من الخصائص المرجوة بعد تأثير الضغط. لذلك فتطبيقاتها كثيرة و متنوعة، نرى أن من أهمها الدراسات المتعلقة بتكوين الطبقات الأرضية أي تتعرض المادة إلى ضغوط عالية من وحدات GPa، هذه الدراسات تدخل في علم الزلازل.

I-3 طرق الدراسة في فيزياء الضغوط العالية:**I-3-1 الطرق التجريبية:**

نحن هنا لسنا في صدد التطرق لهذه الطرق، لذلك نختصر الحديث عنها. و هي غالبا تستعمل خلايا الألماس كأداة لإنتاج الضغط العالي [02,01]، و للتأثير على درجة الحرارة يستخدم الليزر كأداة للتسخين.

I-3-2 الطرق الحاسوبية:

طرق نظرية أو محاكاة حاسوبية؛ تستعمل جهاز الحاسوب، فهناك العديد من البرامج كمخابر افتراضية تقدم لها معلومات خاصة بالمواد كمدخلات من أجل القيام بعمليات حاسوبية مختلفة حسب الطرق المتوفرة عليها البرامج. و من أهم هذه الطرق نجد [04,03]؛

I-3-2-1 طريقة DFT

نظرية الدالة التابعية للكثافة (DFT) هي أحد أهم الطرق المستعملة في الفيزياء و الكيمياء النظرية و بواسطتهما نستطيع أن نحدد خصائص نظام متعدد الجسيمات، الطاقة الكلية للنظام، الكثافة الإلكترونية للمدارات، المعاملات الفيزيائية و الضوئية للمادة.....الخ، و هي واحدة من أكثر الطرق استخداما في العمليات الحاسوبية الكمومية لحل معادلة شرودنغر بسبب إمكانية

تطبيقها على أنظمة متنوعة (متعددة المتغيرات). البرنامج CASTEP يعتمد على هذه النظرية، تستعمل العديد من التقريبات من بينها [05]؛

I-3-2-2: تقريب الكثافة المحلية LDA (Local Density Approximation):

تقريب الكثافة المحلي هو تقريب موضعي لنظام الالكترونات اللامتجانس باعتباره موضعا متجانسا، [6] يعتمد على تقسيم الحجم الكلي على الحجم الأصغر المعطى في غاز متجانس الكترونيا، [7] المتشكل في حالة التفاعل، و يكون دقيقا في حالة خاصة عندما الالكترونات توجد في منطقة من الفضاء بكمون خارجي منتظم، ليحافظ على استقرار النظام يعني يكون مرتبط بغاز منتظم الكترونيا. في هذه الحالة دالة الكثافة متعلقة بطاقة التبادل و الارتباط لجسيمة غاز منتظم الكثافة الالكترونية، حيث تعطى طاقة تبادل الارتباط بالمعادلة التالية:

$$E_{XC}^{LDA}(\rho) = \int \rho(\mathbf{r}) \epsilon_{XC}(\rho(\mathbf{r})) d\mathbf{r}$$

E_{XC} : الطاقة الكلية وهي مقسمة الى جزئين حيث E_C طاقة الارتباط و E_X طاقة التبادل

$$E_{XC}(\rho) = E_X(\rho) + E_C(\rho)$$

I-3-2-3: تقريب التدرج المعمم GGA (L'approximation de Gradient Generalize):

أدخل لتحسين الدقة المتحصل عليها ب LDA، حيث يتم كتابة طاقة التبادل و الارتباط كدالة للكثافة الالكترونية $\rho(\mathbf{r})$ و التدرج $|\nabla\rho(\mathbf{r})|$ لا يؤخذ كخاصية منتظمة للغاز الالكتروني.

$$E_{XC}^{GGA}(\rho) = \int F[\rho(\mathbf{r}), \nabla\rho(\mathbf{r})] d^3\mathbf{r}$$

I-4: تطبيق فيزياء الضغوط العالية في علم الزلازل:

I-4-1: علم الزلازل:

علم الزلازل هو العلم المختص بدراسة انتشار الأمواج في الطبقات المكونة للكواكب سواء كانت سائلة أو صلبة و تسمى الأمواج هنا بالأمواج الزلزالية [08]، كما يدرس الصخور من ناحية القوى المؤثرة عليها والتي تعرضها إلى إجهادات قد تؤدي قوتها إلى

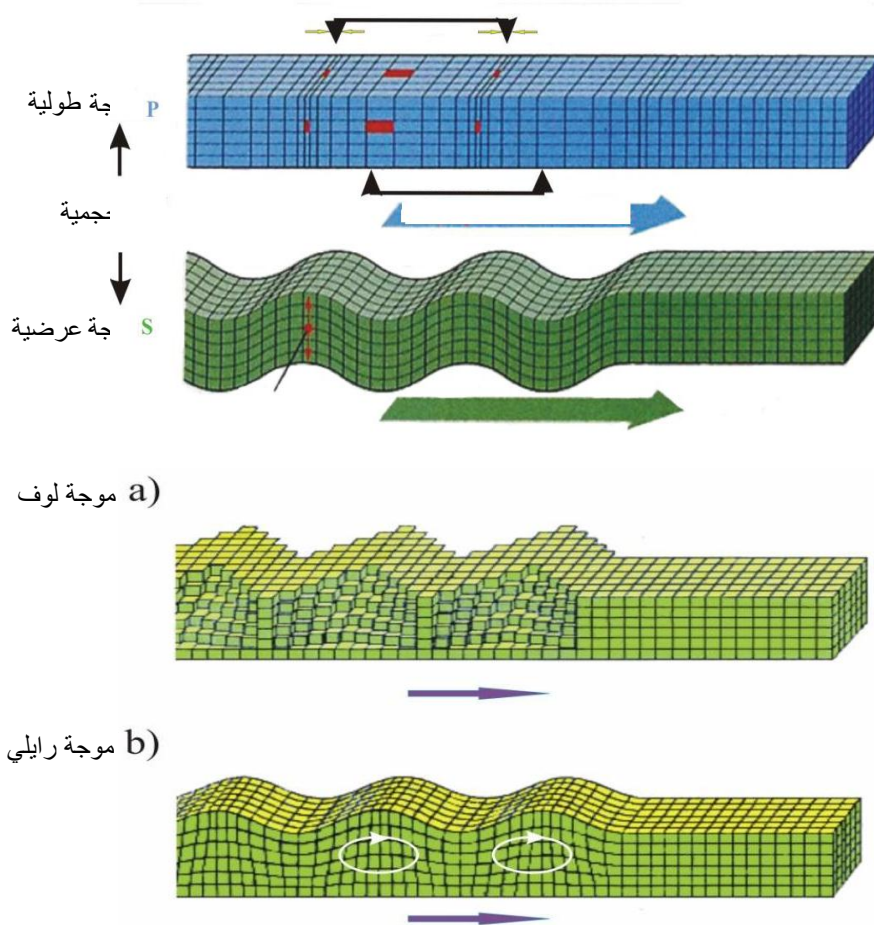
إحداث كسور في هذه الصخور مما ينتج طاقة تنتشر على شكل أمواج [09]. يعتمد علم الزلازل الكوني على دراسة نوعين من الأمواج [10]:

- أمواج حجمية؛ تنتشر عبر كامل الطبقات الأرضية، منها طولية (Longitudinal أو Premier)، و أخرى عرضية (Transversal أو Secondaire) التي لا تنتشر في الموائع [11].

- أمواج سطحية؛ تنتشر على السطح فقط تصنف إلى أمواج لوف (Love) و رايلي (Rayleigh) [12].

هذه الأمواج غالبا تأخذ هذا الترتيب من الأولى إلى الرابعة في تسجيل السيسموغرام أو الطيف الناتج عن كاشف الهزات

الزلزالية المسمى السيسموغراف [11].



الشكل (1-1): يمثل إشكال الأمواج الزلزالية [11].

هذا العلم يشمل عدة فروع من بينها: علم الزلازل الكوني (La sismologie globale)، الذي يدرس أعماق الكواكب من حيث تكوينها و تركيبها، من خلال معطيات ناتجة عن الزلازل. وقد اقترح علماءه لدراسة الطبقات الداخلية طريقتين [13]؛

- الطريقة عكسية -INVERSE-؛ تنطلق هذه الطريقة من تحليل الطيف الناتج عن السيسموغراف بطرق خاصة و متعددة، و نتائج هذا التحليل تقترح المكونات المادية لكل طبقة. هذه الأطياف تتكون من مجموعة من إشارات لأمواج مختلفة، و من بين نتائجها النموذج PREM [14].

- الطريقة المباشرة -DIRECTE-؛ تسمى أيضا علم الزلازل الحديث، و تنطلق من دراسة مباشرة للمواد تحت الشروط التيرموديناميكية (درجة الحرارة، الضغط) للطبقات الأرضية، بفرض أنها مجموعة من الصخور أو المينيرالات المكونة من متعددة البلورات، إذ يستعمل الضغط في مكان العمق كمتغير وغالبا ما يكون تأثير ارتفاع درجة الحرارة مهملا أمام التغير العالي للضغط [15].

I-4-2 نموذج PREM:

هناك عدد كبير من أجهزة قياس الزلازل موزعة على سطح الكرة الأرضية لتسجيل تحركات الأرض التي يسببها الزلزال. و يظهر تحليل الزلازل وجود العديد من الأمواج (P (Première) و S (Secondaire)؛ يتم شرحها من حيث الانكسار و الانعكاسات على السطح بين وسطين مختلفي الخصائص. لتحديد أكثر دقة للبنية الداخلية، تستخدم حواف الموجات: التي هي منحنيات مسؤولة عن التنبه لوصول كل موجة في وقتها (معرفة مركز الزلزال و لحظة وقوعه) و ذلك بدلالة بعد بؤرة الزلازل، المسافة الزاوية الفاصلة عن المحطة الزلزالية بواسطة الطريقة العكسية، يمكننا بعد ذلك العودة إلى سرعة الموجتين P و S و الكثافة بدلالة العمق. النموذج الأول الذي تم الحصول عليه هو نموذج PREM (Dziewonski & Anderson 1981) [16].

هذا النموذج يمثل تغير سرعة الموجات تبعا للعمق، و هو نموذجاً حادي البعد بتمثال كروي و الذي يعتبر الأكثر إستخداما. كما يعتبر النموذج الثاني بعد نموذج جيفريس - بولن (Jeffreys-bullen (1939) يستخدم أيضا لكن بصفة اقل [17]. اليوم هناك عدة نماذج أخرى مختلفة قليلا و التي تستخدم أيضا مثل (IASP91 (1991 و AK135(1995) [18].

من خلال PREM وجد أن الأرض تتكون من طبقات متعددة، متراكبة موحدة المركز، و هي [19]:

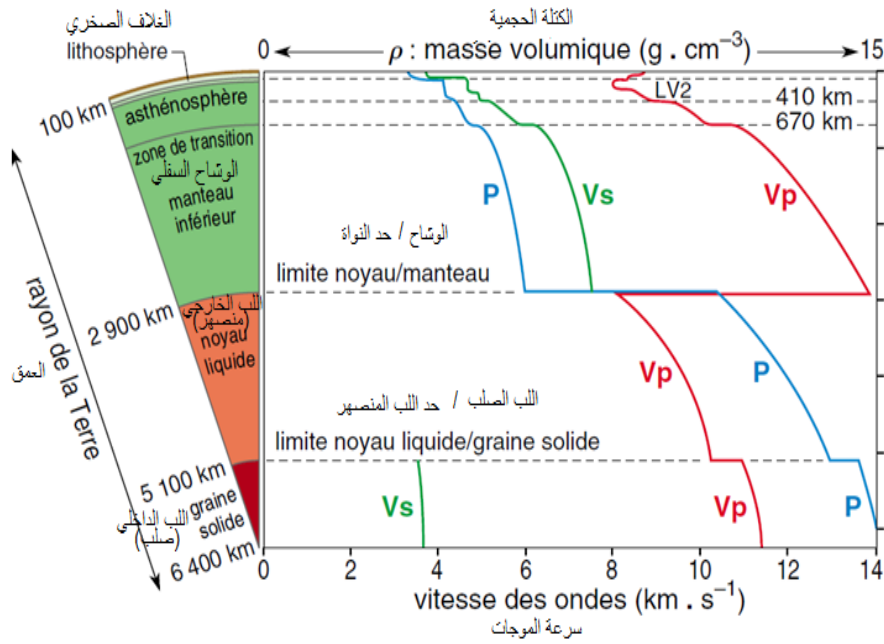
- القشرة: تنقسم إلى قسمين هما: محيطية؛ سميكة من 8 إلى 10 كم تحت المحيطات. قارية؛ بسماك يقدر بـ 30 كم داخل القارات و يصل إلى 70 كم تحت السلاسل الجبلية.

- الوشاح: و ينقسم كذلك إلى قسمين: الوشاح العلوي، يفصل عن القشرة بانقطاع موهوروفيتشيك (موهو)، يمتد إلى عمق 670 كم. الوشاح السفلي، يمتد إلى عمق 2900 كم و يقدر ضغطه من 23 إلى 135.8 GPa. و في داخل الوشاح، تترجم الانقطاعات التغيرات المادية:

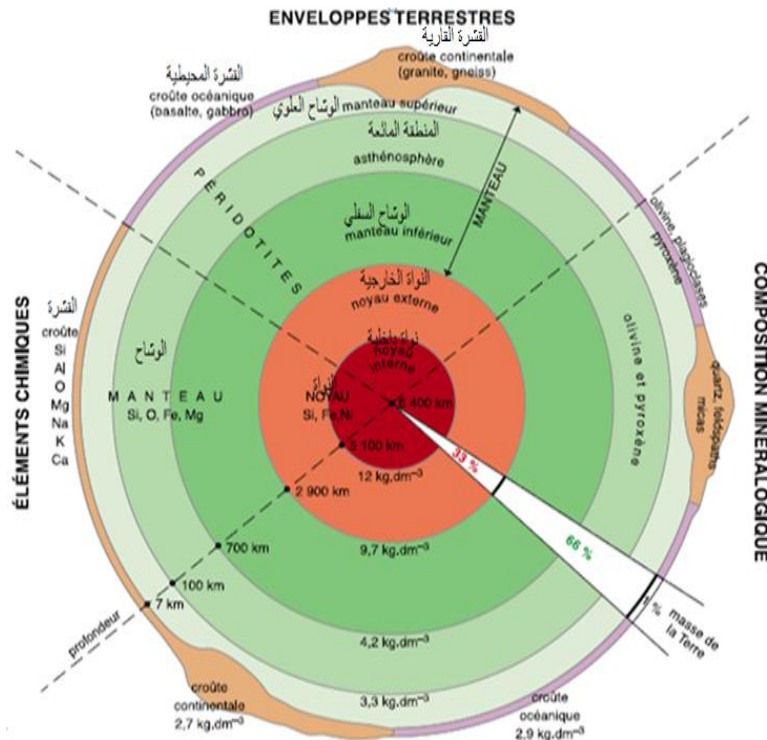
- بين 100 و 200 كم عمق، تنخفض سرعات P و S بسبب انخفاض الصلابة (مادة أقل لزوجة)؛ و يسمى هذا المجال LVZ. و يسمى الجزء المغطي من LVZ الغلاف الصخري.

- على عمق 400 و 670 كم، تؤدي الزيادة في السرعات الزلزالية إلى تحويل المراحل إلى مواد أكثر كثافة. و يتكون الوشاح ككل من صخور السيليكات؛ تصل إلى 400 كم عميق و تتكون أساسا من الحبيبات و الصخور التي تكون فيها المعادن الأساسية هي اوليفين Olivine و بيروكسينس Pyroxènes. و تمثل المنطقة الانتقالية التي يبلغ طولها 400 كم الانتقال من اوليفين إلى مرحلة الإسبنيل، في حين أنه في 670 كم، يتحول الأخير إلى تجميع بيروفسكيت Pérovskite و ماغنيسيوستيت Magnésioiwüstite. و هو يشير إلى الحد الفاصل بين الوشاح العلوي و السفلي.

- النواة: في مركز الأرض، مفصولة عن الوشاح السفلي بطبقة "D" (غوتنبرغ الانقطاع)، سمكها يقدر بـ 200 كم. تمتاز بعدم التجانس خاصة في جزئها السائل (النواة الخارجية) أما الداخلية فهي صلبة تتكون غالبا من الحديد (نوع E) و تفسر هذه الانقطاعات بتعديل التركيب الكيميائي و تعديل خصائص الوسيط (K أو B أو μ أو G، ρ). وتنقسم النواة أيضا إلى جزأين مفصولين عن انقطاع ليمان على عمق 5100 كم: جوهر الخارجي، يتكون السائل في الغالب من الحديد و نسبة أقل من النيكل و العناصر الخفيفة الأكسجين و الكبريت تتكون النواة الداخلية، أو اللب، أساسا من الحديد الصلب.



الشكل (2-I): نموذج PREM وفقا للعمق وطبقات الأرض المقابلة [20].



الشكل (3-I): بنية وتكوين داخلي للأرض المقابلة مع نموذج PREM [21].

I-5- الجانِب النظري:

I-5-1 تحديد السرعات الزلزالية:

كما ذكر سابقا يعتمد علم الزلازل الكوني على دراسة نوعين من الأمواج [22]:

الأمواج السطحية: و التي تعبر فقط السطح و هي أمواج لوف و سرعتها V_l و أمواج رايلي ذات السرعة V_r ، لكنها غير مهمة في هذا البحث.

الأمواج الحجمية: و هي الأمواج التي تعبر الطبقات الداخلية للأرض و هي:

- الأمواج الأولى (P): تسمى أيضا الأمواج الانضغاطية أو الطولية سرعتها V_p حيث تنتقل المادة في نفس اتجاه انتشار الموجة مما يؤدي إلى الانضغاط و التمدد بالموازات مع اتجاه انتشار الموجة، تعطى بدلالة كثافة المادة ρ ، معاملي الانضغاط الحتمي K و القص G للمادة بالعلاقة التالية:

$$V_p = \sqrt{\frac{K + \frac{4}{3}G}{\rho}} \quad (1)$$

- الأمواج الثانوية (S): تسمى أيضا أمواج القص أو الأمواج العرضية سرعتها V_s حيث تنتقل المادة عموديا على اتجاه انتشار الموجة و هي على هذا الأساس تنقسم إلى نوعين؛ عمودية و موازية لمستوى الانتشار وهذا النوع من الأمواج لا ينتشر في الموائع. و علاقتها الرياضية لا تستعمل معاملي الانضغاط للمادة و تعطى بـ:

$$V_s = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (2)$$

- السرعة الهيدروليكية سرعتها V_f تلعب دورا هام في توزيع الكثافة في الطبقات الداخلية، ترتبط بمعامل الإنضغاط الحتمي و الكثافة فقط حيث:

$$V_f^2 = V_p^2 - \frac{4}{3}V_s^2 = \frac{K}{\rho} \quad (3)$$

إذن من أجل تحديد السرعات أعلاه يجب معرفة الثوابت الثلاث و هي: ρ ، K و G .

I-5-2 تحديد الكثافة:

أو الكتلة الحجمية، هي عبارة عن حاصل قسمة كتلة المادة m على حجمها V ، في الأجسام الصلبة يأخذ حجم الخلية الاصطلاحية ومن أجل مول واحد من المادة فإن الكثافة بدلالة n . عدد الأنوية فيالخلية الاصطلاحية و N_a عدد أفوغادرو 6.023×10^{23} ، A مجموع الكتل المولية للذرات المكونة للنواة و V_c حجم الخلية الاصطلاحية المكونة للبنية هي [22]:

$$\rho = \frac{An}{N_a V_c} \quad (4)$$

من خلال هذا التعريف للكثافة تظهر إشكالية نوع بنية المادة الحاضرة عند تغيير الضغط، لذلك فمن بين المعاملات الضرورية التي يجب البحث عنها لحل المشكل أعلاه هو دراسة أنتالبي التشكيل للبنى البلورية H أو طاقة جيبس ΔG (عند $T=0$ فإن $\Delta G=H$).

I-5-3 دراسة أنتالبي:

من أجل مجموعة من البنى البلورية يحسب أنتالبي التشكيل لكل منها بتغيير الضغط حيث قيمته الأقل تعني استقرار البنية الموافقة، في غالب الأحيان قد يقع تغير في البنى البلورية المستقرة. حيث تتقاطع منحنيات تغير أنتالبي التشكيل بدلالة الضغط عند نقاط معينة تسمى نقاط التحول الطوري [23-25]. و من أجل تحديد معاملي المرونة يجب التعرف على ثوابتها c_{ij} نظرا لتأسس الأولى على الثانية.

I-5-4 تحديد ثوابت المرونة:

بعد معرفة مجموع البنى الحاضرة عند تغيير الضغط يمكننا معرفة ثوابت المرونة c_{ij} حيث لكل بنية بلورية ثوابت خاصة كما هو معروف في فيزياء الأجسام الصلبة. في الوسط المرن المتجانس و من أجل تشوهات لانهائية، الاجهادات و التشوهات تكون مرتبطة خطيا حسب قانون هوك. في الحالة العامة تعطى في شكل مؤثري: $\sigma_{ij} = c_{ijkl} \cdot \epsilon_{kl}$; يمكن تعريف علاقة عكسية: $\epsilon_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl}$ أين ϵ_{ij} هي مؤثرات الإجهاد و التشوه، و c_{ijkl} و s_{ijkl} هي التوالي ثوابت المرونة مؤثرات من الرتبة 4 لمعاملي المرونة و مؤثر التشوهات [26-27].

الجمع بين قانون هوك (5) مع العلاقة الأساسية للديناميكيات:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \quad (5)$$

حيث ρ هي كثافة و u_i هو الانسحاب، نحصل على معادلة الموجة:

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k} = p \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \quad (6)$$

الموجة المستقطبة u^0 تنتشر في اتجاه n مع سرعة الطور V تصبح المعادلة التي يتعين حلها:

$$c_{ijkl} n_j n_k u_l^0 = p V^2 u_i^0 \quad (7)$$

حيث نحصل على مؤثر كريستوفيل، نحصل على معادلة كريستوفيل:

$$\Gamma_{ii} u_i^0 = p V^2 u_i^0 \quad (8)$$

هذه المعادلة الأخيرة هي معادلة القيمة الذاتية التي تعطي اتجاهات الاستقطاب للموجات و سرعتها الموجية على التوالي. هذا

الحل ينتج الاتجاهات المستقطبة التي لا تكون في الحالة العامة، موازي أو عمودي. و يمكن القول أشباه الموجات طولية P و أشباه

قصية S [28].

لأسباب التناظر، يمكن تخفيض عدد المعاملات المستقلة للمؤثر c_{ijkl} من 81 إلى 21 و يضع في شكل مؤثر متمائل من

الرتبة 2 باستخدام مؤشرات جديدة (notation de Voigt) [29]:

ij(kl)	11	22	33	23,32	13,31	12,21
I(J)	1	2	3	4	5	6

مؤثر المرونة يعطى بـ [30]:

$$c_{ij} = \begin{pmatrix} c_{11} & \dots & c_{16} \\ c_{16} & \dots & c_{66} \end{pmatrix} \quad (9)$$

- الثوابت c_{ij} قطرية مع $i \leq 3$ يمكن تسميتها بثوابت المرونة الطولية.

- c_{ii} مع $i \geq 4$ تسمى ثوابت المرونة القصية.

- c_{ij} مع $i \neq j < 3$ تسمى الثوابت خارج قطرية.

- الثوابت c_{ij} مع $i \leq 3$ و $j > 3$ التي تقيس إجهاد القص الناتج عن إنضغاط طولي تسمى ثوابت المرونة مختلطة [31].

بالنسبة للتناظر المكعب، تحدد الثوابت الثلاثة c_{11} و c_{12} و c_{44} جميع الثوابت ذات الطبيعة نفسها حيث:

$$c_{44} = c_{55} = c_{66} \text{ و } c_{12} = c_{21} = c_{13} = c_{31}, \quad c_{11} = c_{22} = c_{33}$$

لكن بالنسبة للتناظر السداسي هناك غيرها من c_{33} ، c_{13} و c_{66} ، من اجل هذا فإن:

$$c_{44} = c_{55} \neq c_{66} \text{ و } c_{12} = c_{13} \neq c_{31}, \quad c_{11} = c_{22} \neq c_{33} \quad [31-29, 23].$$

I-5-5 تحديد معامل الانضغاط الحجمي:

يعرف هذا المعامل بمقاومة المادة للضغط، في الكثير من الطرق الحسابية تعطى قيمته مباشرة أو بحسب بالعلاقة الرياضية

التالية:

$$K = -V \left(\frac{\Delta P}{\Delta V} \right) \quad (10)$$

حيث V حجم المادة المضغوطة إلى الحجم $V - \Delta V$ تحت تأثير ضغط ΔP . الإشارة (-) هي اصطلاح تعبر على تعرض المادة إلى

انضغاط بزيادة الضغط أو تمدد عند تناقص الضغط. هذا المعامل وحدته ناتجة عن قوة مطبقة على سطح أي: $ML^{-1}T^{-2}$. في حال

الصخور الأرضية يكون مقدار هذا المعامل في درجات 100 GPa [32]. و هو بحسب من العلاقة التالية [23-25، 33-34]:

$$K = \frac{1}{2} (c_{11} + c_{12}) \quad (11)$$

I-5-6 تحديد معامل القص:

توجد طريقتين لحساب هذا المعامل انطلاقاً من ثوابت المرونة ومعامل الانضغاط الحجمي و هما طريقتي Voigt & Russ و

Hashin & Strekman [35]، حيث تقدم هذه الأخيرة نتائج أكثر دقة، إلا أننا سوف نعتمد الأولى في هذا البحث. أين بحسب

معامل القص G انطلاقاً من ثوابت المرونة كالتالي:

$$G = \left(\frac{G_V + G_R}{2} \right) \quad (12)$$

- بالنسبة للنظام الرباعي [23-25، 34]:

$$G_V = \frac{1}{5} \left(\frac{c_{11} + c_{12} - 4c_{13} + 2c_{33}}{6} + \frac{c_{11} - c_{12}}{2} + 2c_{44} + c_{66} \right) \quad (13)$$

و

$$G_R = \left[\frac{1}{5} \left(\frac{6[(c_{11} + c_{12}) + 4c_{13} + c_{33}]}{(c_{11} + c_{12})c_{33} - 2c_{13}^2} + \frac{1}{c_{11} - c_{12}} + \frac{2}{c_{44}} + \frac{1}{c_{66}} \right) \right]^{-1} \quad (14)$$

- بالنسبة للنظام المستطلي [24، 36]:

$$G_V = \frac{1}{15} (c_{11} + c_{22} + c_{33} - c_{12} - c_{13} - c_{23}) + \frac{1}{5} (c_{44} + c_{55} + c_{66}) \quad (15)$$

و

$$G_R = \frac{15}{4(s_{11} + s_{22} + s_{33}) - 4(s_{12} + s_{13} + s_{23}) + 3(s_{44} + s_{55} + s_{66})} \quad (16)$$

6-I دراسة الخصائص الزلزالية:

تمثل الخصائص الزلزالية أو ما يسمى بمقارنة مع الملاحظات الزلزالية كل من؛ مقارنة السرعات الزلزالية، عدم تجانس الوشاح

السفلي و أخيرا عدم التماثل الزلزالي [34].

6-I-1 مقارنة السرعات الزلزالية:

تقارن هنا قيم هذه السرعات بمثيلاتها في النماذج الزلزالية و التي يستخدم منها غالبا النموذج PREM، الذي تطرقنا إليه

سابقا. و تكون هذه المقارنة بدراسة تغير قيم هذه السرعات بحساب الميول و من ثم المقارنة [34].

6-I-2 عدم التجانس للوشاح السفلي (Hétérogénéité du manteau):

إن دراسة عدم تجانس الوشاح السفلي هو ثاني خطوة في المقارنة بالملاحظات الزلزالية، و هو الذي يمكن حسابه باستعمال

المعاملين المبينين بالعلاقة التالية [34]:

حيث:

$$w = \frac{\Delta \ln V_S}{\Delta \ln V_P} = \frac{\ln V_{SNt} - \ln V_{SPREM}}{\ln V_{PNt} - \ln V_{PPREM}} \quad (17)$$

و

$$w' = \frac{\Delta \ln V_\phi}{\Delta \ln V_S} = \frac{\ln V_{\phi Nt} - \ln V_{\phi PREM}}{\ln V_{SNt} - \ln V_{SPREM}} \quad (18)$$

حيث: V_{PPREM} ، V_{SPREM} و $V_{\phi PREM}$ هي سرعات الموجة الزلزالية لنموذج PREM. V_{PNt} ، V_{SNt} و $V_{\phi Nt}$ سرعات الموجة الزلزالية لحساباتنا.

I-6-3 عدم التماثل الزلزالي (Anisotropies sismique):

هو مقياس لتغير سرعات الموجات الزلزالية مع اتجاه انتشارها كما انه وسيلة لرصد الزلازل للعمليات الجيوديناميكية و التكتونية، و من بين العديد من العوامل التي جعلت تفسير التماثل الملحوظ صعب كاعدم وجود معلومات حول الثوابت المرنة و تماثل المعادن المكونة في الظروف ذات الصلة جيوفيزيائية. يتم تحديد مجموع التماثل من قبل التوجه المفضل للبنية (LPO) من مكوناته أو التوجه المفضل للصيغة (SPO) من إدراج مشابه مع معامل المرنة.

عدم تماثل الخواص هو الخطوة الثالثة في المقارنة مع المراقبة الزلزالية [34].

I-6-3-1 في حالة بلورة وحيدة: يمكن تعيين عدم تماثل الخواص للموجتين P و S باستخدام العلاقات التالية:

$$A_S = \frac{V_{s \max} - V_{s \min}}{V_s} \quad (20) \quad A_P = \frac{V_{p \max} - V_{p \min}}{V_p} \quad (19)$$

حيث: A_P هو عدم تماثل الخواص للموجة P. A_S هو عدم تماثل الخواص للموجة S. $V_{p \max}$ ، $V_{p \min}$ هما الحد الأدنى و الحد الأقصى لسرعات الموجة الزلزالية الطولية في اتجاه واحد و $V_{s \max}$ ، $V_{s \min}$ هما الحد الأدنى و الحد الأقصى لسرعات الموجات الزلزالية المعطاة في اتجاه واحد.

2-3-6-I في حالة موجات القص: يمكننا أيضا أن ننظر إلى استقطاب تماثل الخواص A_s^{Po} بين الموجتين S_H (الأفقي) و S_V

(العمودية) في نفس اتجاه الانتشار بواسطة العلاقة:

$$A_s^{po} = \left| \frac{V_{SH} - V_{SV}}{V_S} \right| \quad (21)$$

الجدول (1-I): يوضح سرعات الاتجاهات البلورية للتناظرية الرباعية (شبكة الرباعية) [30].

اتجاه الانتشار	الاستقطاب	سرعة الموجة
[100]	[100]L	$\sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}}$
	[010](T)	$\sqrt{\frac{c_{66}}{\rho}}$
	[001](T)	$\sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}$
[110]	[110](L)	$\sqrt{\frac{c_{11} + c_{12} + 2c_{66}}{2\rho}}$
	[1-11](T)	$\sqrt{\frac{c_{11} - c_{12}}{2\rho}}$
	[001](T)	$\sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}$
[001]	[001](L)	$\sqrt{\frac{c_{33}}{\rho}}$
	plan (001)(T)	$\sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}$

الجدول (2-I): يوضح سرعات الاتجاهات البلورية للتناظرية المستطيلة (شبكة المستطيلة) [30].

اتجاه الانتشار	الاستقطاب	سرعة الموجة
[100]	[100]L	$\sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}}$
	[010](T)	$\sqrt{\frac{c_{66}}{\rho}}$
	[001](T)	$\sqrt{\frac{c_{55}}{\rho}}$
[110]	[110](L)	$\sqrt{\frac{c_{11} + c_{12} + 2c_{66}}{2\rho}}$
	[1-11](T)	$\sqrt{\frac{c_{11} - c_{12}}{2\rho}}$
	[001](T)	$\sqrt{\frac{c_{44} + c_{55}}{2\rho}}$
[001]	[001](L)	$\sqrt{\frac{c_{33}}{\rho}}$
	plan (001)(T)	$\sqrt{\frac{c_{55}}{\rho}}$

الفصل الثاني:

خصائص عامة و دراسات سابقة حول SiO_2

1-II مقدمة:

حسب ما جاء في الفصل السابق يعتبر أكسيد SiO_2 من المكونات الهامة (أو يدخل في تكوين مكونات) الطبقات الأرضية، لذلك نحث في عملنا بدراسته. و قبل التطرق لهذه الدراسة وفي هذا الفصل نعرض على خصائص عامة حول هذا الأكسيد، والأعمال السابقة التي تناولت دراسته.

2-II خصائص عامة حول SiO_2 :

ثنائي أكسيد السليكون المعروف أيضا باسم السليكا هو مركب كيميائي ذي الصيغة الكيميائية SiO_2 ، كتلته المولية 60.08 g/mole ، و هو عبارة عن مسحوق (رمل - غير متبلور) لونه شفاف صلب أبيض (أبيض مصفر)، كثافته 2.196 g/cm^3 ، أما الكوارتز ($\alpha\text{-quartz}$) 2.648 g/cm^3 . فالسليكا هي الأكثر شيوعا في الطبيعة مثلا لكوارتز، إذ أنها المكون الرئيسي للرمال فهي الأكثر تعقيدا والأكثر وفرة من المواد الموجودة على حد سواء كما العديد من المعادن ويكون إنتاجها صناعيا، وتشمل الأمثلة المنصهرة البارزة الكوارتز المنصهر، السليكا المدخنة (الحمضية)، هلام السليكا. تتراوح التطبيقات لديها من المواد الهيكلية إلى الالكترونيات الدقيقة إلى المكونات المستخدمة في صناعة الأغذية. يتم الحصول على ثنائي أكسيد السليكون في الغالب عن طريق تعدين و تنقية الكوارتز، يضم أكثر من 10% من كتلة القشرة الأرضية. تم إنتاج ما يقرب من مليار كيلو غرام سنة (1999) من السليكا. يستهلك ما يقدر نحو 95% من ثنائي أكسيد السليكون في صناعة البناء على سبيل المثال لإنتاج الإسمنت، فالسليكا يستخدم أساسا في إنتاج الزجاج للنوافذ، زجاجات المشروبات و العديد من الإستخدامات الأخرى، فمعظم الألياف البصرية السليكية و اللاسلكية مصنوعة من السليكا.

جدول (1-II) يمثل بعض مختلف الأشكال البلورية من SiO_2 :

ملاحظات	ρ g/cm ³	تناظر بلوري	شكل
سلاسل حلزونية، α -quartz يحول إلى β -quartz في 846 K	2.648	منشور سداسي منتظم	α -quartz
ترتبط ارتباطا وثيقا مع α -quartz, β -Quartz يحول إلى β -tridymite في 1140 K	2.533	سداسي الشكل	β -quartz
شكل متبدل الاستقرار تحت الضغط العادي	2.265	معيني متعامد المحاور	α -tridymite
ترتبط ارتباطا وثيقا مع α -tridymite، β -tridymite يحول إلى β -tridymite في 2010K		سداسي الشكل	β -tridymite
شكل متبدل الاستقرار تحت الضغط العادي	2.334	رباعي الزوايا	α -cristobalite
ترتبط ارتباطا وثيقا مع α -cristobalite يذوب في 1978 K		مكعب	β -cristobalite
حلقات Si_8O_{16} , Si_4O_{14} , Si_5O_{10} ؛ مؤلفة من السليكا الزجاجية والقلويات في (600-900K) و (40-400MPa)	3.011	رباعي الزوايا	Keatite
حلقات Si_6O_{12} و Si_4O_8		أحادي الميلان	Moganite
حلقات Si_8O_{16} و Si_4O_8 و 900K و 3-3.5GPa	2.911	أحادي الميلان	Coesite
واحدة من الأكثر كثافة (جنباً إلى جنب مع seifertite)	4.287	رباعي الزوايا	Stishovite
واحدة من الأكثر كثافة (جنباً إلى جنب مع stishovite) يتم إنتاج أشكال متعددة من السليكا فيالضغوط فوق 40 GPa	4.294	معيني متعامد المحاور	Seifertite
حلقات Si_6O_{12} , Si_5O_{10} ، وجدت أنها معدنية دائمة مع الهيدروكربونات في المساحات الخالية	2.04	مكعب	Melanophlogite
مثل SiS_2 تتكون من سلاسل مشتركة الحواف، يذوب في ~ 1700 K	1.97	معيني متعامد المحاور	Fibrous
ورقة تشبه بنية ثنائية الطبقات		سداسي الشكل	2D silica

II-3 دراسات مسابقة حول SiO_2 :**➤ عمل Louise Levien (1980) [36]:**

درس Louise Levien في 1980 و رفاقه الخصائص البنيوية والميكانيكية بواسطة الأشعة السينية (RX) فتطرق إلى كل من معامل القص و الثابت الحجمي، أجريت التجارب عند 150 Kbar إذ لم يظهر أي دليل لإنتقال المرحلة على الرغم من أن العينة قد تعرضت لضغوط أعلى لتحويل Quartz إلى Coesite و Stishovite، تم جمع البيانات الانضغاطية في معدن منخفض القص كوسيلة لنقل الضغط فوجدنا البيانات عند الضغط المنخفض ليست دقيقة مثل البيانات ذات الضغط العالي، أما بالنسبة للثابت الحجمي V/V_0 لا يعطي صورة دقيقة للبيانات.

➤ عمل B B.Karki et al (1997) [38]:

لدراسة الخصائص البنيوية و الميكانيكية تعرض كل من B B.Karki و رفاقه في 1 أوت 1997 بواسطة المحاكاة الديناميكية لتحول الطور و معامل القص. يظهر تحول SiO_2 من مرحلة Stishovite إلى CaCl_2 في حوالي 47 GPa و هذا التحول مثال جيد على عدم استقرار القص تحت الضغط الهيدروستاتيكي.

و في 15 ديسمبر 1997 تعرض كذلك إلى نفس الخصائص السابقة بالإضافة إلى الخصائص الزلزالية حيث تطرق إلى تحول الطور و السرعات الموجية الطولية و العرضية بواسطة طريقة الموجة الكاذبة (تقريب الكثافة المحلية) بتغير الضغط، فتنخفض السرعة العرضية بسرعة (بنسبة % 60) و يزداد التباين بسرعة بين 40 GPa إلى 47 GPa قبل الانتقال من Stishovite إلى CaCl_2 في 47 GPa و يرافق التحول من CaCl_2 إلى Colombite في 98 GPa، يتم تحديد معامل الصلابة المرنة (C_{ij}) ستة ل Stishovite و تسعة ل (CaCl_2 و Colombite) من السليكا كدالة للضغط تصل إلى 140 GPa.

و تختلف سرعة الموجات الطولية بنسبة % 23 عند الضغط 0 GPa و % 32 بالقرب من نقطة الانتقال من Stishovite إلى CaCl_2 عند 46 GPa، كما يزداد تباين الاستقطاب في نفس مدى الضغط بالقرب من هذا التحول أما CaCl_2 يظهر اختلافات كبيرة في السرعات عند 50 GPa و لكن بالنسبة ل Colombite هو أضعف بكثير من الاثنين.

➤ عمل T.Yagi et al (1990) [37]:

في 1 ديسمبر 1990 قام T.Yagi و رفاقه بدراسة الخصائص البنيوية حيث تعرض لتحول الطور بتغير الضغط بواسطة الأشعة السينية، حيث أوضح إرتفاع الضغط أن Stishovite يتحول إلى بنية CaCl_2 تحت الضغط 80 GPa و كذلك تحوله إلى CaSiO_3 تحت الضغط 120 GPa، و على الرغم من أن MgSiO_3 كثيفة جدا تستقر فوق 25 GPa، فنجد CaSiO_3 استقر في 14 GPa و من أجل دراسة كل هذه الإحتمالات رصدت الملاحظات المباشرة لاستقرار SiO_2 و CaSiO_3 تصل إلى 120 GPa.

➤ عمل Hajime Kimizika et al (2007) [40]:

وجد Hajime Kimizika ورفاقه بعد دراسته للخصائص البنيوية، الزلزالية و الميكانيكية بواسطة الأشعة السينية والمحاكاة في 20 فيفري 2007 بتغير الضغط، حيث تعرض لكل من الموجات فوق الصوتية ومعامل الانضغاط الحجمي، فوصل إلى أن الموجات فوق الصوتية تقتصر على عدد قليل من جيغا باسكال و بريليون تم تطبيق ما يصل إلى 25 GPa.

➤ عمل WieHua Wang (2012) [41]:

درس Wie Hua Wang في 21 جويلية 2012 تغير الخصائص الميكانيكية و الزلزالية بدلالة الضغط حيث تعرض لكل من ثابت الأنضغاط الحجمي، معامل القص و السرعات الموجية (الطولية و العرضية).

➤ عمل TayebChihi et al (2013) [42]:

في ديسمبر 2013 تعرض كل من Tayeb Chihi ورفاقه بواسطة المحاكاة إلى الخصائص المرنة و الزلزالية بدلالة الضغط، حيث تعرض لتغير كل من معامل القصو السرعات الموجية فوجد أن لـ Stishovite سرعة الموجة الطولية تزيد بسرعة في المقابل تزيد السعة الموجية لمعامل القص ببطء شديد حتى الضغط 30 GPa.

➤ عمل Carole Nisr et al (2014) [43]:

تعرض Carole Nisr ورفاقه بواسطة حيود الأشعة السينية (RX) في 14 جانفي 2014 لتغير كل من تحول الطور وبدلالة الضغط، Stishovite هو مرحلة مستقرة من SiO_2 عند الضغط أعلى من 10 GPa، فيتم تنفيذ (RX) على عينتين من Stishovite في 15 GPa و 26 GPa.

➤ عمل Katharina Philipps et al (2017) [44]:

في 21 فيفري 2017 درس كل من Katharina Philipps ورفاقها الخصائص البنيوية، الزلزالية و المرونية بتغير الضغط بواسطة نظرية الكثافة الوظيفية DFT و المحاكاة فتطرق إلى معامل الانضغاط الحجمي.

II-4 خلاصة:

بعد الاطلاع على الدراسات السابقة، لاحظنا أن جميعها تعرض لبعض الخصائص التي تعرضنا لها في الفصل السابق كأهم خصائص بعلم الزلازل الكوني. كما لاحظنا أن الدراسات التي اعتمدت الحساب كطريقة عمل منها فقط اثنان التي استخدمت طريقة DFT و هي B.Karki [38] و Katharina Philipps [46] أحر دراسة منها لم تعتمد تقريب LDA.

الفصل الثالث:

دراسة الخصائص البنيوية و المرونية لـ SiO_2

III-1 مقدمة:

دراستنا تهتم بأكسيد SiO_2 ، إذ نحاول في هذا الفصل التطرق لمناقشة تغير خصائصه البنيوية و المرونية بتغير الضغط من 0 إلى 140 GPa حتى نهاية الوشاح السفلي الأرضي. أين يمكن مقارنة نتائج حساباتنا بتلك الناتجة إما عن دراسات سابقة إن وجدت، أو تلك المتوفرة في النموذج الزلزالي PREM. حيث نستعمل طريقة حسابية تعتمد طريقة DFT بتقريب GGA، هذه الطريقة و كما جاء في الفصل السابق تستعمل من قبل من أجل دراسة هذا الأكسيد، لذلك سوف نقدم هذه الطريقة أولاً و بالتفصيل قبل عرض النتائج و مناقشتها.

III-2 طريقة الدراسة:

في هذا العمل استخدمنا برنامج CASTEP (Cambridge Total Energy Package) و بال ضبط و باستعمال نظرية كثافة الدوال DFT (Density Functional Theory) [16,17] و التي تتضمن نظرية Kohn-Sham المستخدمة لحل معادلة شرودينجر [18,19] و تم نجد الطاقة متساوية السطوح للنظام. في رتبة اختزال عدد المتغيرات، التقريب شبه الكموني و تواع الموجات المستوية المعطاة [20]. تمثيل Monkhorst-Pack يستعمل لتبسيط اختزال منطقة بريليون [21]. التبادل المترابط للطاقة يعتمد بتقريب GGA-PW91. من أجل عملنا هذا استخدمنا طاقة cut-off تساوي 450 إلكترون فولط، و منطقة بريليون البسيطة هي $8 \times 8 \times 8$ هذه القيم تحدد حساب كبير الدقة و تقترب من القيم الحقيقية.

الحساب بواسطة هذا البرنامج لا يعطي قيم كل المعاملات، لكن يمكن من القيم الأساسية التي تحدد بدورها بقية المعاملات. للحساب المتمم يمكن استعمال العلاقات المقدمة في الفصل الأول، و ذلك عن طريق الحاسوب أيضا و باستعمال العديد من البرامج

المختلفة مثل ميكروسوفت اكسل، أو لغة برمجة مثل فورترون أو أي بيئة تطوير مثل السيلاب أو ماتلاب رغم كون هذا الأخير استعماله يتطلب ترخيص خاص من منتجه.

III-3 دراسة البنى المستقرة و التحولات الطورية:

III-3-1 البنى المستقرة:

هناك ثلاث بنى بلورية مستقرة في الشروط التيرموديناميكية للطبقات الأرضية لأكسيد السيليكون [39] و هي:

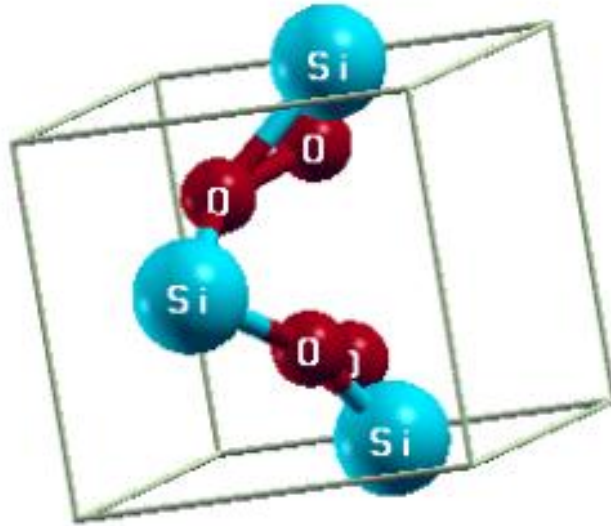
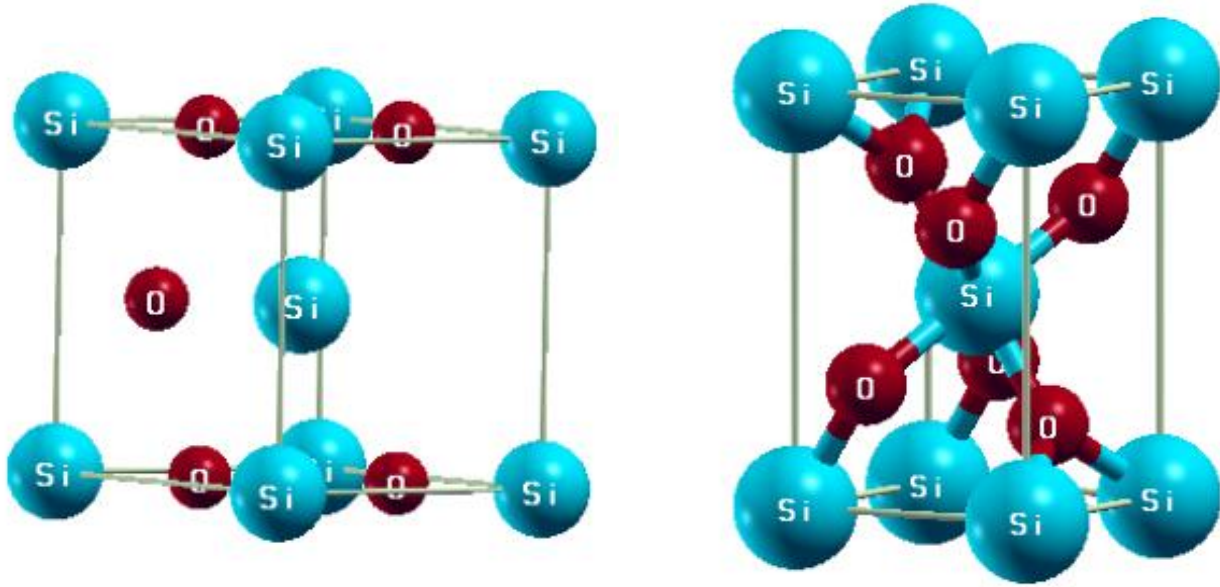
Stishovite، CaCl_2 و Colombite (النوع $\alpha\text{-PbO}_2$) المفصلة خصائصها في الجدول (III-1).

الجدول (III-1) خاص بأهم الخصائص البنيوية لأكسيد السيليكون للبنى البلورية المستقرة في الشروط التيرموديناميكية للطبقات الأرضية.

	Stishovite	CaCl_2	Colombite
	Tétragonal	Orthorhombique	Orthorhombique
S-C	Retile	CaCl_2	Colombite
G-S	P42/mmm	Pnnm	Pbcn
N-G-S	136	60	58
Z	2	2	4
a(A)	4.179	3.997	4.097
b(A)	2.6649	3.862	5.0462
c(A)	2.6649	2.554	4.4946
$\alpha(^{\circ})$	90	90	90
$\beta(^{\circ})$	90	90	90
$\gamma(^{\circ})$	90	90	90
coor	Si(0,0,0), Si(0.5,0.5,0.5) O(0.3053,0.3053,0) O(-0.3053,-0.3053,0) O(0.8053,0.1947,0.5) O(0.1947,0.8053,0.5)	Si(0,0,0), Si(0.5,0.5,0.5) O(0.275,0.325,0) O(-0.275,-0.325,0) O(0.775,0.175,0.5) O(-0.775,0.175,0.5)	Si± (0,0.171, 0.5) Si± (0.5, 0.671,0.25) O±(0.286,0.376,0.412) O±(0.214,0.124,0.912) O±(0.7860.124, 0.412) O±(-0.286,0.376,0.25)
Ref	[12]	[14]	[13]

حيث: S-C: التركيب البلوري G-S: مجموعة الفضاء للبنية البلورية N-G-S: رقم تصنيف المجموعة الفضائية للتركيب البلوري a, b, c:

تمثل ثوابت الشبكة البلورية. α ، β ، γ : تمثل زوايا الشبكة البلورية. Coor: إحداثيات ذرات العقدة في شبكة البلورية. Ref: المرجع.



المصدر: (1-111). ميلين ابني البتولا و سيد زكريا.

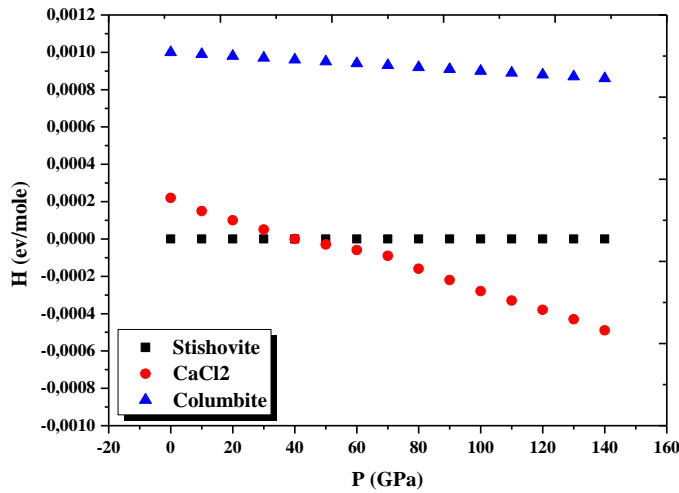
-C- بنية Colombite

-B- بنية CaCl_2

-A- بنية Stishovite

III-3-2 دراسة التحولات الطورية:

البرنامج CASTEP المستخدم في عملنا يحسب قيم أنتالبي التشكيل لكل البنى البلورية الممكنة، هذا المعامل و كما رأينا في الفصل الأول يكون مساوي لطاقة جيبس عندما تنعدم درجة الحرارة. في دراستنا لم نتعامل مع هذا المعامل مباشرة بل فضلنا استخدام الفارق بين قيمه لكل بنيتين، بأخذ قيمه للبنية البلورية لـ Stishovite كمرجع أين يكون الفارق معدوم و في حال كون الفارق كبير جدا يمكن سحب القيم بإضافة مقدار معين حتى يكون التمثيل أكثر وضوحا. و حتى يتضح الأمر أكثر يمكن استعمال العلاقات التالية؛ $\text{DH}_1=\text{H}_1-\text{H}_1=0$, $\text{DH}_2=\text{H}_2-\text{H}_1$, $\text{DH}_3=\text{H}_3-\text{H}_1-1000$ ، حيث مثلنا تغير هذا الفارق بتغير الضغط في الشكل (2-III).



الشكل (2-III): تغير الفرق في أنتالبي التشكيل للبنى البلورية لـ SiO_2 بتغير الضغط.

من خلال هذا الشكل يمكن ملاحظة أن أنتالبي التشكيل لبنية Stishovite ذو البنية الرباعية يكون أقل (الفارقين DH_2 و DH_3 موجبين) و هذا في مجال الضغط من 0 إلى 40 GPa، و عليه فان هذه البنية هي الأكثر استقرارا في هذا المجال. انطلاقا من هذا الضغط (40 GPa) حتى 140 GPa نجد أن أنتالبي التشكيل لبنية البلورية CaCl_2 هو الأقل (الفارق DH_2 سالب)، لهذا فان هذه

البنية هي المستقرة في هذا المجال من الضغط. من الواضح إذن أن التحول الطوري من الطور Stishovite إلى الطور من النوع CaCl_2 يحدث عند الضغط 40 GPa. أما الطور الثالث Colombite فإن انتالي التشكيل له يبقى أعلى عند جميع نقاط مجال دراستنا (الفارق DH_3 دوما موجب) لذلك فانه لا يستقر، و لهذا سوف ندرس بقية الخصائص باعتبار البنيتين السابقين فقط.

من الواضح أن ضغط التحول الناتج من حساباتنا أقل من غيره من الدراسات السابقة حيث تكون قيمته 50 GPa عند درجة حرارة تقدر بـ 298 K من أجل دراسة كل من؛ (Cohen, 1991) [05] النظرية، (Kinyna et al 1995) [05] و (Dubrovisky et al 1997) [05] التجريبتين، كما تكون قيمته 54 GPa في الدراسة التجريبية كذلك (Andraut et al 1998) [05].

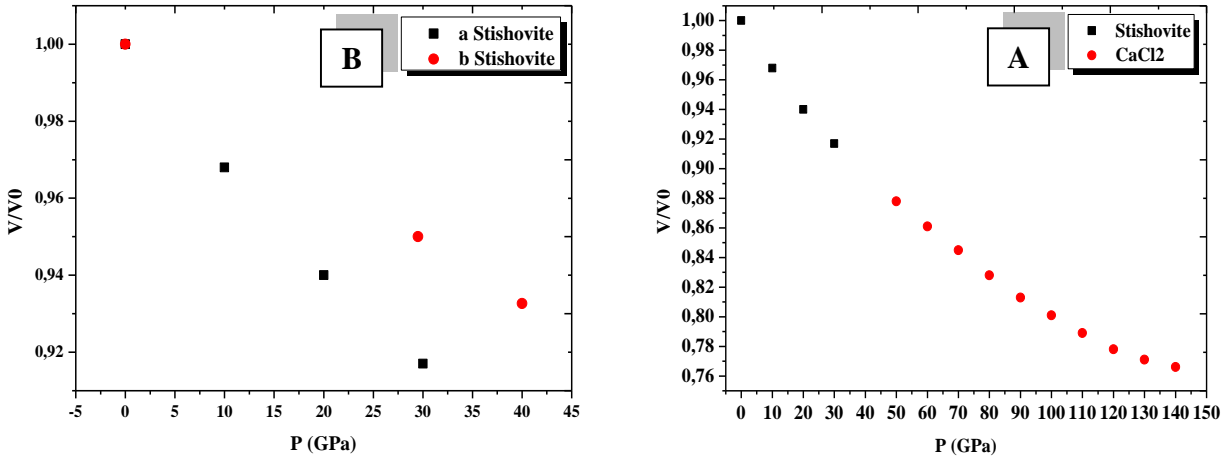
III-4 دراسة الخصائص البنيوية:

تتمثل الخصائص البنيوية المدروسة هنا في النسبة الحجمية و الكثافة، غالبا ما تدخل هذه الأخيرة ضمن الخصائص الزلزالية.

III-4-1 النسبة الحجمية V/V_0 :

حجم الخلية الاصطلاحية يحسب مباشرة من البرنامج، كما يمكن حسابه من خلال ثوابت الشبكة و زواياها. أما النسبة الحجمية فتحسب بقسمة حجم الخلية الاصطلاحية عند كل ضغط على قيمته عند 0 GPa، لذلك تكون قيمتها دوما عند هذا الضغط مساوية للواحد كما هو واضح في الشكل (III-3-A).

فمن خلال هذا الشكل نلاحظ أن النسبة V/V_0 تنخفض ببطء مع زيادة الضغط بشكل غير خطي، لكن هذا التباطؤ يقل بشكل واضح في نهاية الطور الثاني لهذا الأكسيد و بالتحديد ابتداء من الضغط 120 GPa. من الشكل (III-3-B) يمكن مقارنة النسبة الحجمية V/V_0 الناتجة من حساباتنا و تلك الناتجة من عمل T.Yagi و رفاقه 1990 [37]، حيث نلاحظ أن قيم حساباتنا أقل من تلك الناتجة عن عملهم رغم وجود تقارب جيد، مع تناقص أسرع لقيم نتائج عملهم بتزايد الضغط.



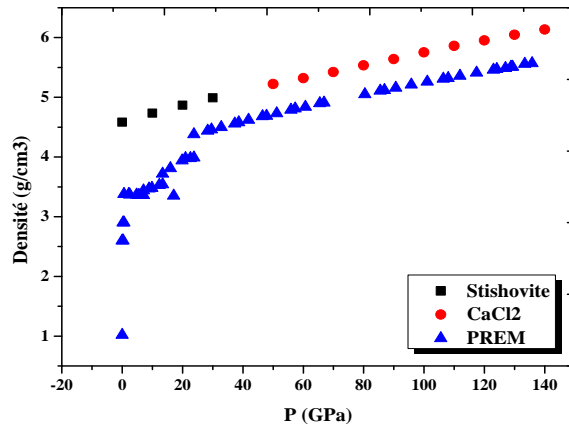
الشكل (3-III): تغير النسبة الحجمية لأكسيد SiO_2 بتغير الضغط، حيث؛

A- الناتج من حساباتنا. B- الناتج من حساباتنا (a)، الناتج من عمل T.Yagi ورفاقه 1990 [37].

III-4-2 دراسة الكثافة:

الكثافة أو الكتلة الحجمية تحسب مباشرة من العلاقة (4) المذكورة في الفصل الأول، و ناتج حساباتنا موضح في الشكل

(4-III).



الشكل (4-III): تغير كثافة كل من SiO_2 و المادة الأرضية الممثلة في النموذج PREM بتغير الضغط.

من خلال هذا الشكل يمكن ملاحظة أن كثافة كل من الطورين تزداد خطياً مع زيادة الضغط، إلا أن الزيادة في الطور Stishovite أسرع و هو المبين بدقة في النتائج المدونة في الجدول (III-2).

يوضح نفس الشكل مقارنة نتائج حساباتنا الخاصة بالكثافة مع قيمها في النموذج PREM. حيث؛ نلاحظ أن قيم حساباتنا أعلى مهما كان الضغط، كما نلاحظ ابتداء من الضغط 23.8 GPa الممثل لبداية الوشاح السفلي الأرضي أن نتائج حسابنا أكثر خطية و أسرع تزايد من قيم هذا النموذج (انظر الجدول (III-2)).

III-5 دراسة الخصائص المرورية:

تتمثل هذه الخصائص في كل من ثوابت المرورية c_{ij} ، معامل الانضغاط الحجمي K و معامل القص G و التي سوف نتطرق لدراستها كما يلي:

III-5-1 دراسة ثوابت المرورية:

تعتبر ثوابت المرورية من بين المعاملات المحسوبة مباشرة بواسطة البرنامج المستخدم، و نتائج حساباتنا بتغير الضغط ممثلة في الشكل (III-5).

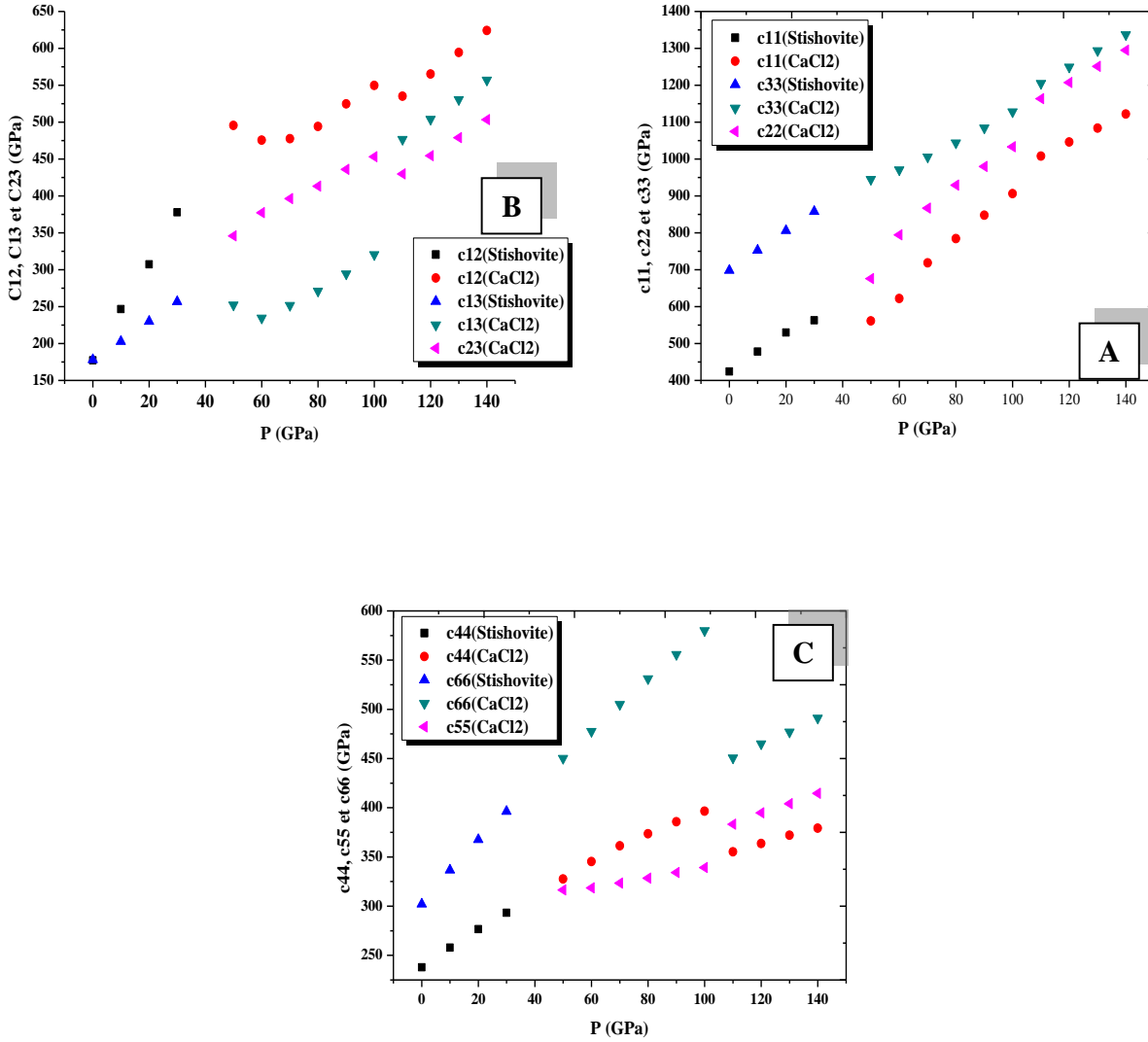
من خلال هذا الشكل المكون من منحنيات متعددة نلاحظ أن؛

- أغلب الثوابت لا تتأثر بالتحول الطوري الحاصل في بنية الأكسيد، حيث تستمر قيمها على نفس وتيرة التغير. من بين الثوابت التي تتأثر بالتحول الطوري C_{12} و C_{13} .

- أغلب الثوابت متزايدة بشكل خطي، حيث يظهر التناقص فقط في تغير كل من C_{12} و C_{13} في بداية الطور الثاني حتى الضغط 60 GPa.

- في كلا الطورين يظهر أن C_{33} هو الأعلى قيمة من بين جميع الثوابت، بينما الأقل قيمة فيكون C_{13} .

- بالنسبة للطور الأول يظهر أن C_{33} هو الأسرع تغيراً، أما الأبطىء فهو الثابت C_{11} (انظر الجدول (III-2)).



الشكل (5-III): تغير ثوابت المرونة لأكسيد SiO_2 بتغير الضغط، حيث؛

A- خاص بالثوابت؛ c_{11} ، c_{22} و c_{33} .

B- خاص بالثوابت؛ c_{12} ، c_{13} و c_{23} .

C- خاص بالثوابت؛ c_{44} ، c_{55} و c_{66} .

- أما بالنسبة للطور الثاني فيكون c_{11} (c_{22} لأنهما متوافقين في التغيير) هو الأسرع تغيراً، بينما الأبطىء فيكون c_{55} (انظر الجدول (2-III)).

يعتبر عملي TayebChihi و رفاقه 2013 [42] و Karki و رفاقه 1997 [38] من بين الأعمال التي اهتمت بثوابت المرورية، المقارنة مع حساباتنا ممثلة في الشكل (6-III).

من خلال هذه الأشكال المكونة نلاحظ أن؛

- أغلب الثوابت في الدراسات أعلى قيمة من ناتج حساباتنا، باستثناء الثابت c_{44} الذي تكون قيمه من أجل حساباتنا من تلك الناتجة من دراسة TayebChihi و رفاقه 2013 [42] و Karki و رفاقه 1997 [38] في الطور الثاني للأكسيد.

- أغلب الثوابت الناتجة عن حساباتنا أسرع تغيراً بزيادة الضغط، ما عدا c_{44} الناتجة عن دراسة TayebChihi و رفاقه 2013 [42] و c_{12} ، c_{44} و c_{66} في الطور الأول للأكسيد و c_{55} التي تظهر في الطور الثاني للأكسيد الناتجة عن دراسة Karki و رفاقه [38] 1997 (أنظر الجدول (2-III)).

- هناك شبه تطابق بين قيم الثابت c_{44} من ناتج حسابنا و أعمال TayebChihi و رفاقه 2013 [42]، و بين قيم الثوابت c_{11} و c_{33} في الطورين أما c_{13} و c_{66} في الطور الأول للأكسيد و c_{12} في الطور الثاني للأكسيد الناتجة عن دراسة Karki و رفاقه 1997 [38].

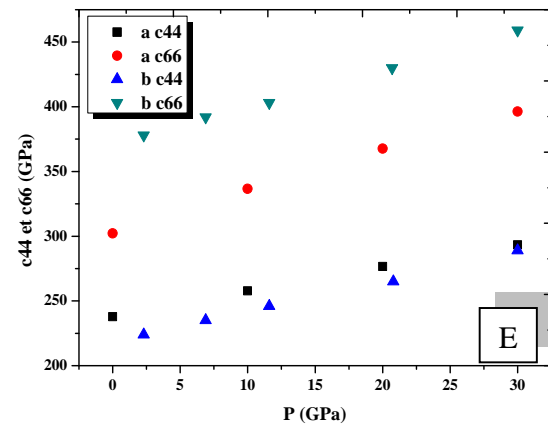
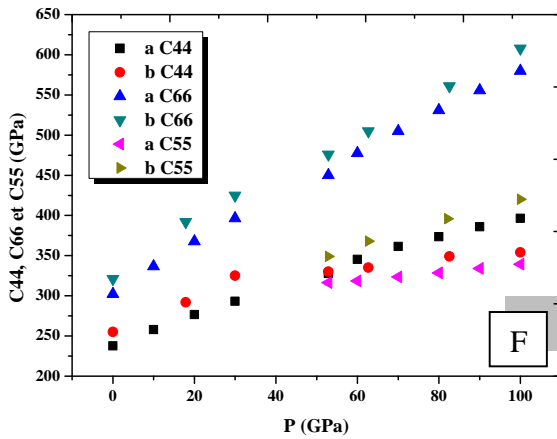
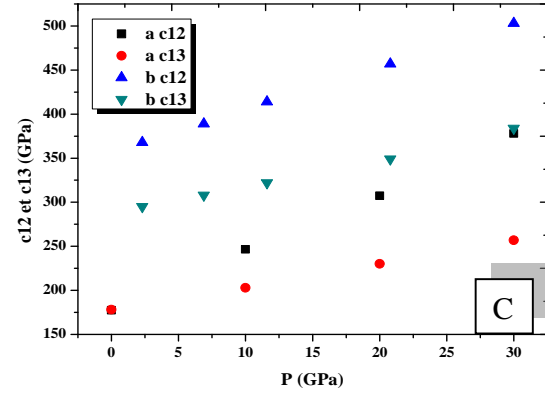
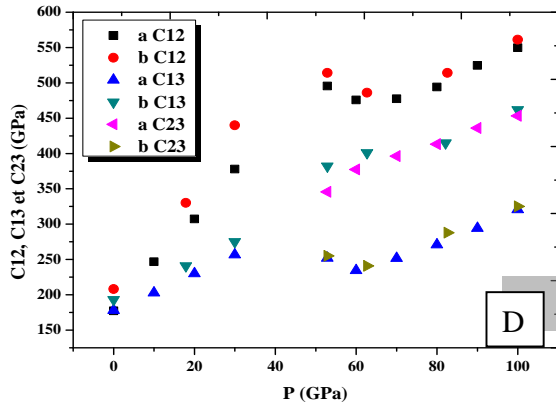
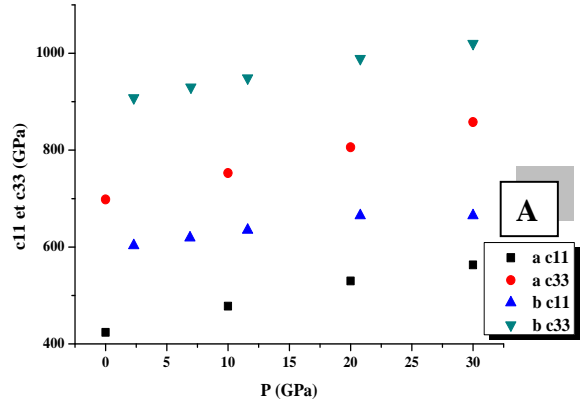
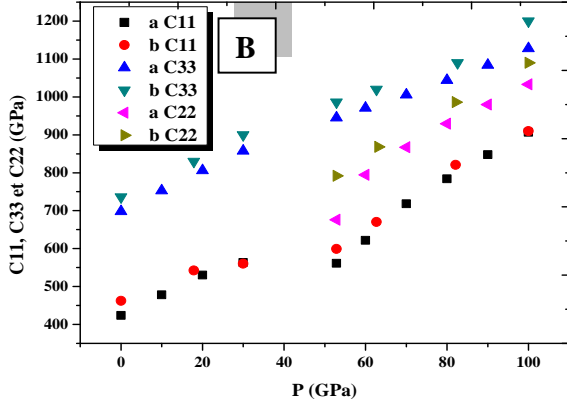
- تتطابق قيم الثوابت بين ناتج حسابنا و ناتج العملين فقط من أجل؛

- c_{11} و ذلك عند الضغوط 30 و 100 GPa (Karki و رفاقه 1997 [38]).

- c_{12} و ذلك عند الضغط 0 GPa (TayebChihi و رفاقه 2013 [42]).

- c_{44} و ذلك عند الضغوط 30 GPa (TayebChihi و رفاقه 2013 [42])، 50 GPa (Karki و رفاقه

1997 [38]).



الشكل(III-6):تغير ثوابت المرورية لأوكسيد SiO₂ بتغير الضغط، حيث؛

A، C و E - تمثل مقارنة بين حسابتنا (a) و أعمال Tayeb Chihi و رفاقه [42]2013 (b).

B، D و F - تمثل مقارنة بين حسابتنا (a) و أعمال Karki و رفاقه [38]1997 (b).

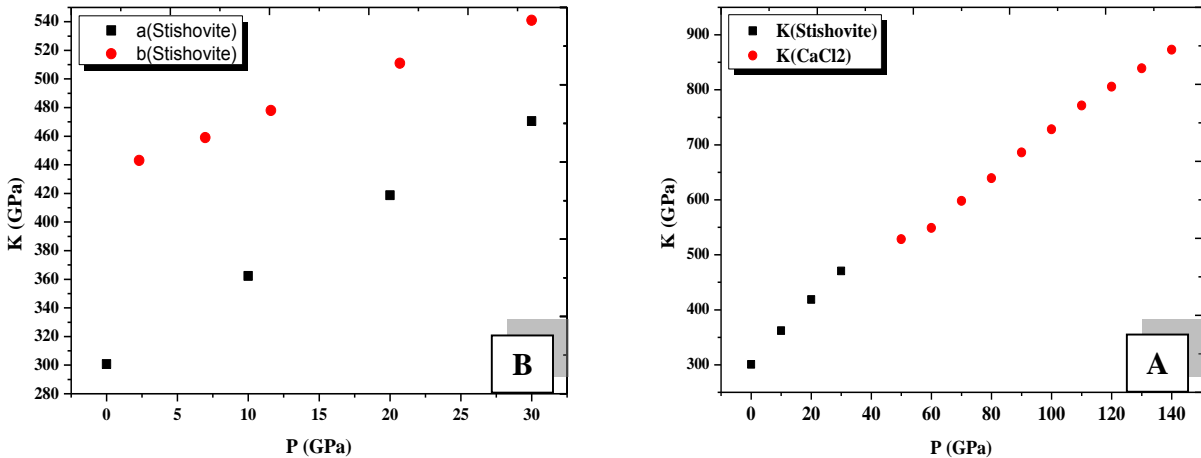
III-5-2 دراسة معاملي المرنة:

III-5-2-1 دراسة معامل الانضغاط الحجمي:

معامل الانضغاط الحجمي يحسب كذلك مباشرة من البرنامج، كما يمكن حسابه من خلال ثوابت المرنة كما جاء في العلاقة (11) من الفصل الأول.

واضح في الشكل (A-7-III) أن عمل التزايد في هذا المعامل بزيادة الضغط يكون خطي في كلا طوري الأكسيد باستثناء قيمته عند الضغط 60 GPa، وذلك بخطية متوافقة الميل بشكل تقريبي وذلك حسب القيم المدونة في الجدول (2-III). كما أن التحول الطوري غير مؤثر بشكل كبير.

يعتبر عمل TayebChihi و رفاقه 2013 [42] الوحيد الذي يمكن مقارنة نتائجه الخاصة بمعاملي المرنة بتلك الناتجة عن دراستنا، و تخص فقط الطور الأول لهذا الأكسيد. يمثل الشكل (B-7-III) نتائج العملين و الخاصين بهذا المعامل و الذي يمكننا من خلاله ملاحظة أن هناك تزايد بخطية واضحة في كلا العملين، إلا أن عملنا ذو قيم أقل و أسرع تغير مع تغير الضغط (لاحظ قيم الجدول (2-III)).



الشكل (7-III): تغير معامل الانضغاط الحجمي لأكسيد SiO_2 بتغير الضغط، حيث؛

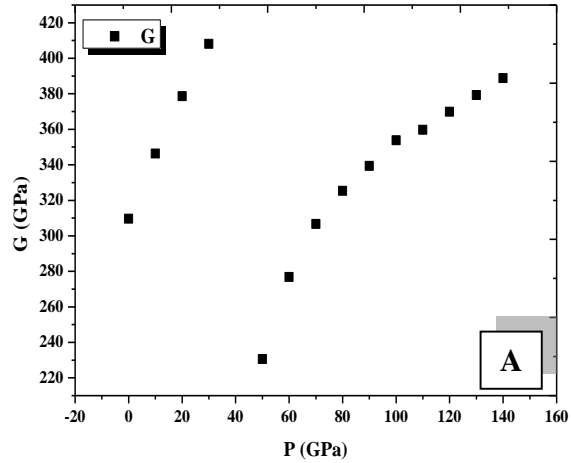
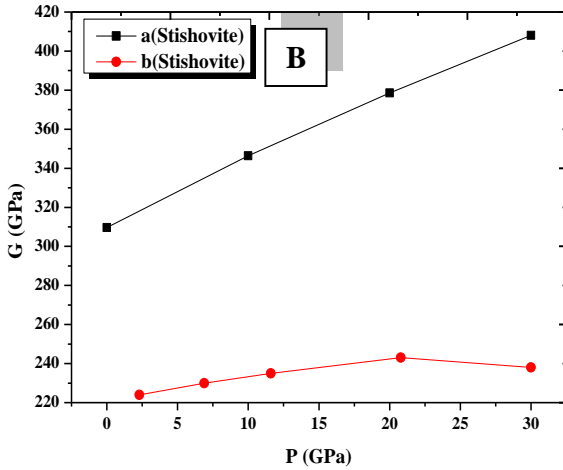
A- الناتج من حساباتنا. B- الناتج من حساباتنا (a)، الناتج من عمل Tayeb Chihi و رفاقه 2013 (b) [42].

III-2-5-2 دراسة معامل القص:

يحسب معامل القص G من خلال ثوابت المرونة و معامل الانضغاط الحجمي كما جاء في العلاقات من (12) إلى (27) من الفصل الأول، الذي يمثل الشكل (A-8-III) تغيراته بتغير الضغط.

من خلال هذا الشكل نلاحظ أن قيم هذا المعامل تكون متزايدة دوماً مع تزايد الضغط في كلا الطورين، هذا التزايد الغير المستمر بين الطورين نظراً لتأثير التحول الطوري الواضح، كما يتبين أن التغير خطي فقط في الطور الأول لهذا الأكسيد.

كما جاء أعلاه يعتبر عمل Tayeb Chihi و رفاقه 2013 [42] الوحيد الذي يمكن مقارنة نتائجه الخاصة بهذا المعامل بتلك الناتجة عن دراستنا، و من خلال الشكل (B-8-III) الممثل لنتائج العملين يمكننا ملاحظة أن عملنا ذو قيم أعلى و أسرع تزايد عند الزيادة في الضغط لكن حتى 20 GPa أي يظهر تناقص في قيم العمل الأخر. يمكن اعتبار قبل هذا الضغط أن التغير يكون خطي في كلا العملين. هناك تزايد بخطية واضحة في كلا العملين، إلا أن عملنا ذو قيم أعلى و أسرع تغير مع تغير الضغط.



الشكل (8-III): تغير معامل القص لأكسيد SiO_2 بتغير الضغط، حيث:

A- الناتج من حساباتنا. B- الناتج من حساباتنا (a)، الناتج من عمل Tayeb Chihi و رفاقه 2013 [42] (b).

جدول(III-2): قيم الميول الخاصة بالخصائص البنيوية و المرورية.

B,Karki	Teyeb	Chihi	PREM	SiO ₂	الطور	
/	/	/	1.229	1.363	B1	الكثافة
/	/	/	0.938	1.014	B2	
211	224	/	/	464.064	B1	C11
672	/	/	/	623.308/	B2	
585	410	/	/	531.956	B1	C33
432	/	/	/	435.465	B2	
882	488	/	/	668.4	B1	C12
96	/	/	/	142.913/	B2	
269	322	/	/	262.755	B1	C13
163	/	/	/	338.771/	B2	
184	234	/	/	185.215	B1	C44
48	/	/	/	57.278/	B2	
307	293	/	/	313.86	B1	C66
269	/	/	/	45.407	B2	
632.696	/	/	/	688.023	B2	C22
148.619	/	/	/	175.215	B2	C23
144	/	/	/	108.964	B2	C55
/	353.79	/	/	566.232	B1	المعامل K
/	/	/	/	383.111	B2	
/	75.675	/	/	328.268	B1	معامل القص G
/	/	/	/	383.111	B2	

الفصل الرابع:

تطبيق دراسة الخصائص البنيوية و المرونية لأكسيد SiO_2 في علم الزلازل

IV-1 مقدمة:

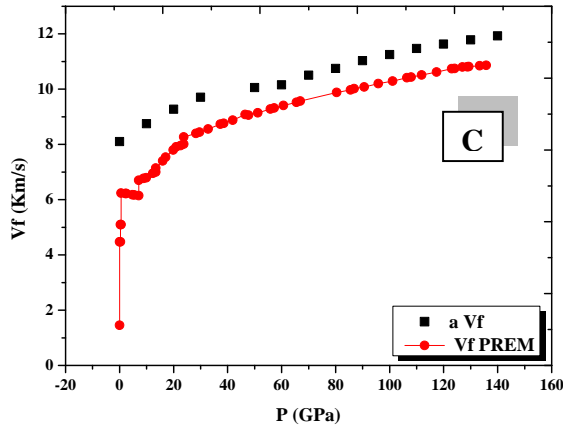
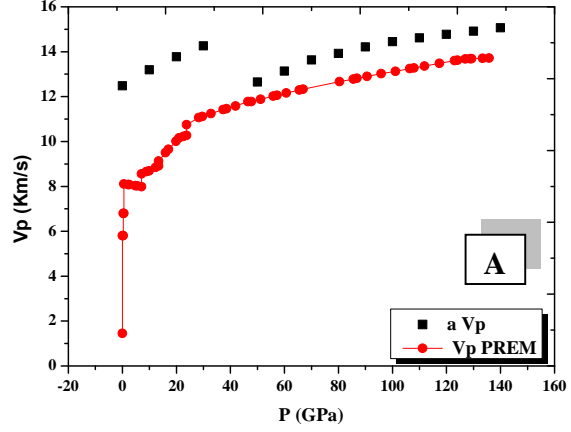
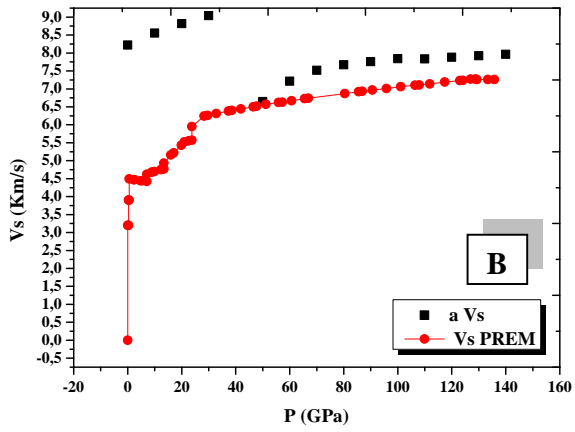
كما تبين في الفصل الأول من هذه الدراسة، يمكن حساب الكثير من المعاملات الأخرى بالأخص تلك المحددة للخصائص الزلزالية انطلاقاً من معاملات الخصائص المدروسة في الفصل السابق. الخصائص الزلزالية تقسم إلى ثلاث عناصر تدعى غالباً الملاحظات الزلزالية، و هي: مقارنة سرعات الموجات الزلزالية بمثلتها في نموذج PREM، دراسة عدم التماثل الزلزالي و عدم تجانس الوشاح السفلي. لذلك خصص هذا الفصل للتطرق لكل هذه الملاحظات، بالإضافة إلى مقارنة نتائج دراستنا بدراسات أخرى سابقة و جاء ذكرها في الفصل الثاني.

IV-2 دراسة سرعات الموجات الزلزالية:

تحتسب سرعات الموجات الزلزالية V_p ، V_s و V_f من خلال معامل الانضغاط الحجمي، معامل القص و الكثافة الحجمية كما جاء في العلاقات (1، 2، و 3) من الفصل الأول، تمثل الأشكال (IV-1- A، B و C) تغيراتها بتغير الضغط و التي من خلالها يمكن ملاحظة؛

- أن جميع السرعات متزايدة دوماً مع تزايد الضغط في كلا الطورين، كما يتبين أن التغير يكون خطي فقط في الطور الأول لهذا الأكسيد.

- قيم السرعات الثلاث الناتجة من حساباتنا تكون أعلى من قيمها في نموذج PREM، كما تكون فقط أبطئ تغيراً في سرعة الموجة العرضية في الطور الثاني للأكسيد.



الشكل (1- IV): يمثل تغير سرعات الموجات الزلزالية بدلالة الضغط لكل من قيم النموذج PREM (b) و نتائجنا (a)،

حيث: A - مقارنة السرعة V_p . B - مقارنة السرعة V_s . C - مقارنة السرعة V_f .

يعتبر عمل TayebChihi و رفاقه 2013 [42] الوحيد الذي يمكن مقارنة نتائجه الخاصة بسرعتي الموجتين الطولية و

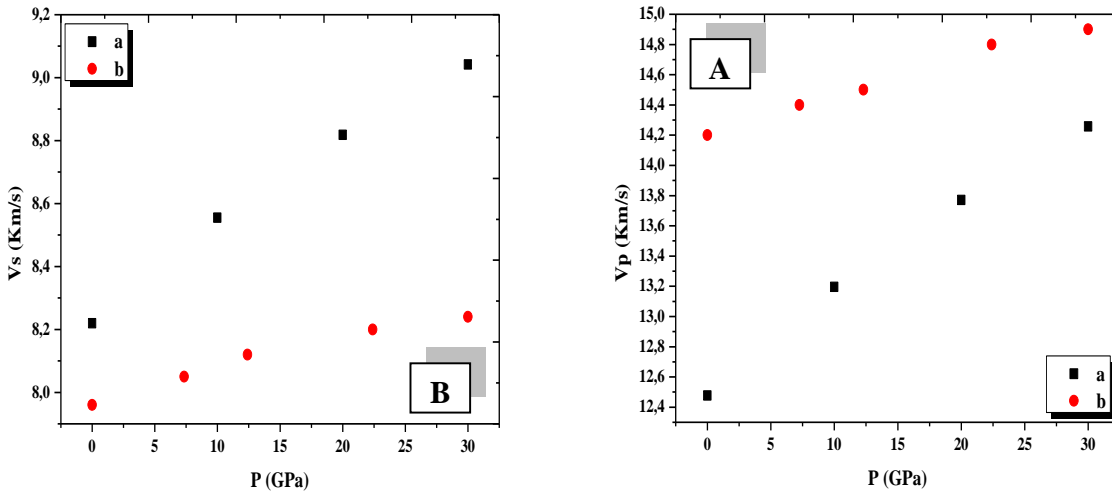
العرضية بتلك الناتجة عن دراستنا، و هي التي تمثل نتائجها الممثلة في الشكلين (IV-2- A و B) و التي من خلالها يمكن ملاحظة؛

- التغير في كلا الدراستين يكون متزايد و خطي.

- قيم سرعة الموجة الطولية الناتجة عن حسابنا أقل و أسرع تغيرا مع الزيادة في الضغط.

- قيم سرعة الموجة العرضية الناتجة عن حسابنا توافق سرعة الموجة الطولية في تسارع التغير و تحالفها في موضع القيم بالنسبة

لقيم العمل الأخر، أي هي أسرع تغيرا و أقل قيما من تلك الناتجة عن عمل TayebChihi و رفاقه 2013 [42].



الشكل (IV-2): يمثل تغير سرعتي الموجتين الطولية و العرضية بتغير الضغط حيث:

A - مقارنة سرعة الموجة V_p الناتجة عن عمل TayebChihi (b) و الناتجة عن دراستنا (a) [42].

B - مقارنة سرعة الموجة V_s الناتجة عن عمل TayebChihi (b) و الناتجة عن دراستنا (a) [42].

IV-3- دراسة عدم تجانس الوشاح السفلي:

يحسب معاملي هذه الخاصية حسب العلاقتين (30) و (31) من الفصل الأول.

يوضح الشكل (3-IV) إختلاف عدم تجانس الوشاح السفلي بالنسبة لهذا الأوكسيد بتغير الضغط، حيث نلاحظ أن

نتائجنا تبين:

- من أجل الطور الأول هناك عدم تجانس في الوشاح السفلي من أجل هذا الأوكسيد، لأن قيمة النسبتين w و w' يساوي

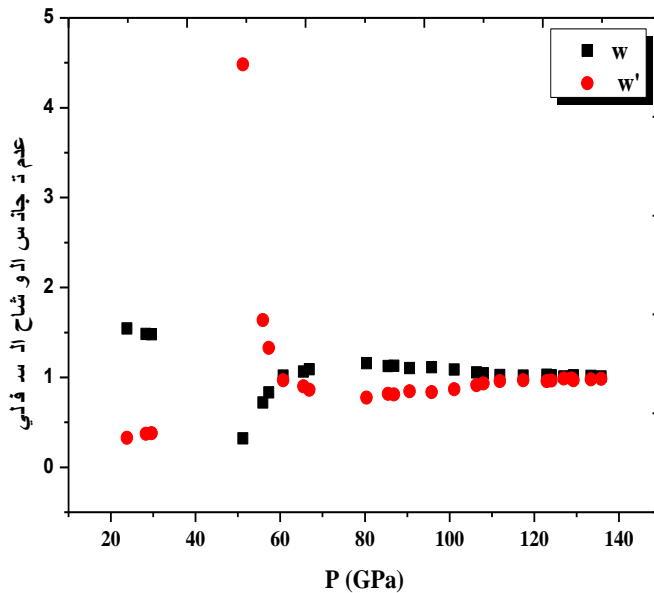
كل منها 1.5 و 0.35 على التوالي مع تناقص طفيف نحو التجانس.

- أما الطور الثاني هناك عدم تجانس كبير جدا عند بداية الطور، بزيادة الضغط يكون هناك زيادة نحو التجانس حتى الضغط

60.7 GPa، أين يكون التجانس واضح حيث تتساوى النسبتين تقريبا عند 1.

- كما يظهر التجانس واضح بين الضغطين 106.4 GPa حتى 135.8 GPa، أما بين الضغطين 60.7GPa و

106.4 GPa فيكون التجانس غائبا نسبيا.



الشكل (3-IV): يمثل تغير عدم تجانس الوشاح السفلي w و w' لأوكسيد SiO_2 بتغير الضغط.

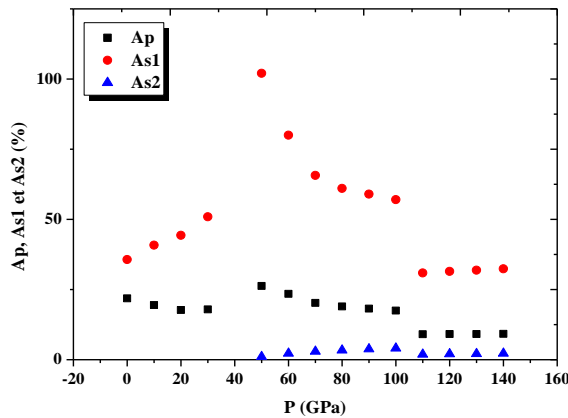
4-IV دراسة عدم التماثل الزلزالي:

يحسب معاملا عدم التماثل حسب العلاقتين (32) و (33) من الفصل الأول، أما السرعات فتحسب حسب الجدولين (1-I و 2) من نفس الفصل.

كما يظهر في الشكل (4-IV)؛

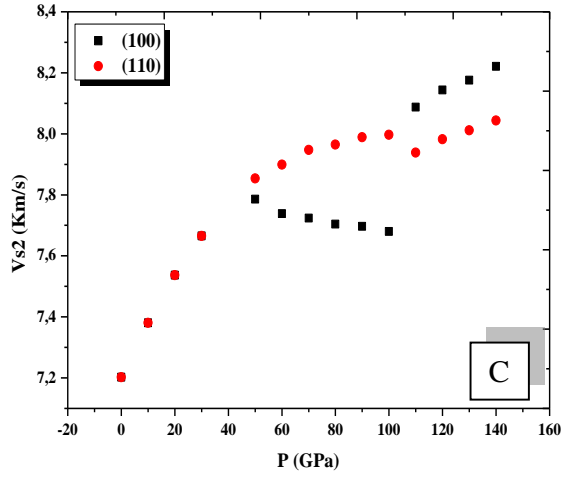
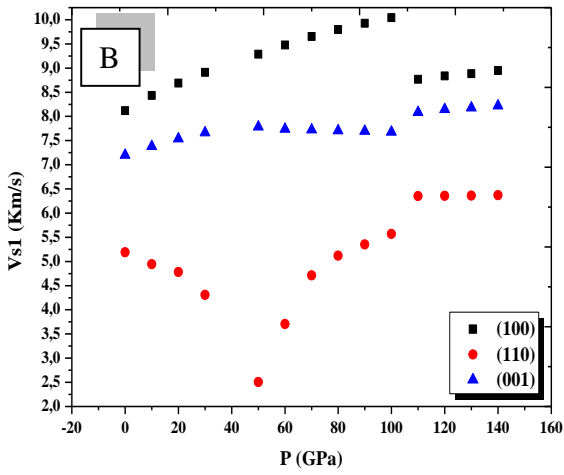
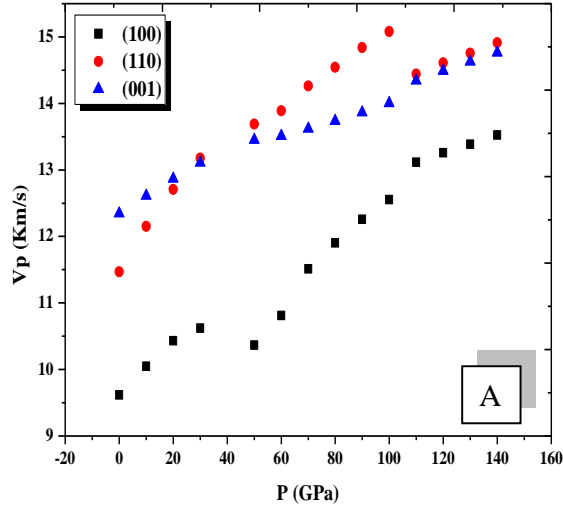
- واضح بالنسبة لعدم التماثل A_p أن هناك تناقص غير خطي في كلا الطورين مع زيادة الضغط، لكن في الطور الثاني يكون تناقص حتى الضغط 100 GPa ثم يتزايد بشكل بطيء جدا ابتداء من الضغط 110 GPa إلى غاية نهاية حدود مجال دراستنا. يعود هذا إلى أن السرعة الطولية للأكسيد في الطور الأول و حتى الضغط 100 GPa من الطور الثاني أكثر سرعة في التغير في الاتجاه البلوري [100] من غيرها، أما بعد هذا الضغط تكون أسرع تغيرا في الاتجاه البلوري [110] (أنظر الشكل (A-5-IV) أدناه).

- كما يمكننا ملاحظة التزايد الخطي الواضح في معامل عدم التماثل As_1 للطور الأول و ابتداء من الضغط ط 110 GPa للطور الثاني، بينما يتناقص مع غياب للتغير الخطي من بداية الطور الثاني حتى الضغط 100 GPa. يرجع هذا إلى التزايد الدائم في السرعة العرضية V_{s1} في كلا الاتجاهين البلوريين [100] و [001]، بينما تكون متناقصة في الاتجاه البلوري [110] في الطور الأول (أنظر الشكل (B-5-IV) أدناه).



الشكل (4-IV): يمثل تغير معاملات عدم التماثل الزلزالي A_p ، As_1 و As_2 الخاصة بدراستنا حول أكسيد SiO_2 بتغير

الضغط.



الشكل (5-IV): يمثل تغير السرعات الزلزالية في الاتجاهات البلورية [100]، [110] و [001] بتغير الضغط، حيث:

A- خاص بالسرعة الطولية V_p . B- خاص بالسرعة العرضية V_{s1} . C- خاص بالسرعة الطولية V_{s2} .

- هناك تزايد طفيف غير خطي في بداية الطور الثاني أين يظهر المعامل As_2 ، مع شبه ثبوت لقيمته ابتداءً من الضغط 110 GPa . هذا ما يرجع إلى سرعة الزيادة في السرعة العرضية Vs_2 في الاتجاه البلوري [100]، بينما تتقارب سرعة الزيادة فيها بعد الضغط المذكور سابقاً (أنظر الشكل (C-5-IV) أعلاه).

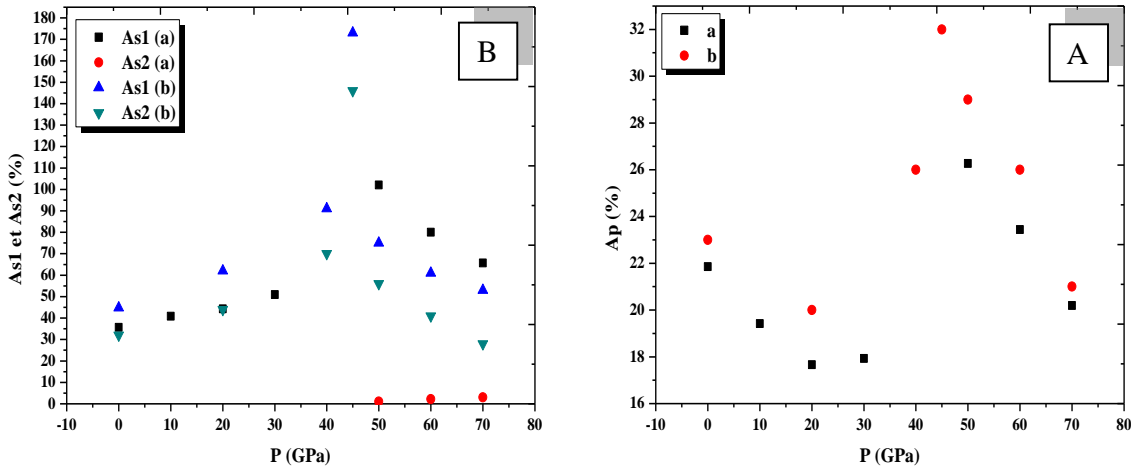
الشكل (6-IV) الذي يقدم مقارنة بين نتائج حساباتنا و نتائج عمل Karki و رفاقه [39] الخاصة بمعاملات عدم التماثل

الزلزالي، يبين أن؛

- جميع معاملات عدم التماثل الزلزالي الناتج عن دراستنا للأكسيد تكون ذات قيم أقل، ما عدا المعامل As_1 في الطور

الثاني.

- تغير المعاملات يبدو متوافق بين العملين، مع سرعة واضحة في هذا التغير تظهر في نتائج Karki و رفاقه [39].



الشكل (6-IV): يمثل تغير معاملات عدم التماثل الزلزالي بتغير الضغط:

Ap - A الخاصة بدراسة Karki و رفاقه (a) [39] الخاصة بدراستنا (b).

As1 - B و As2 الخاصة بدراسة Karki و رفاقه (a) [39] الخاصة بدراستنا (b).

جدول (1-IV): قيم الميول الخاصة بالسرعات الموجية و معاملاتهما.

B.Karki	Teyeb Chihi	PREM	SiO ₂	الطور	السرعات و معاملاتهما
/	2.333	3.66	5.932	B1	Vp
/	/	1,895	2.677/	B2	
/	0.933	2.71	2.74	B1	Vs
/	/	0,703	1.462/	B2	
/	/	3.019	5.363	B1	Vf
/	/	1.66	2.079/	B2	
15	/	/	30.385	B1	Ap
-44	/	/	-20.93	B2	
60	/	/	50.716	B1	As1
-140	/	/	-181.92	B2	
51.9	/	/	/	B1	As2
-151.6	/	/	19.7	B2	

خلاصة عامة:

- تناولت دراستنا أكسيد SiO_2 الذي يدخل في تركيب الطبقات الداخلية للأرض، و التي قمنا بها بواسطة الحساب و ذلك من أجل:
- معرفة التحول الطوري لهذا الأكسيد، خصائصه البنيوية و المرنة في مجال الضغط من 0 إلى غاية 140 GPa.
 - في علم الزلازل و من خلال تلك النتائج يمكن الاطلاع على تغير سرعات الموجات الزلزالية، عدم تجانس الوشاح السفلي و عدم التماثل الزلزالي كدالة للضغط و ذلك دوما في المجال المذكور أعلاه.
- من خلال نتائج دراستنا المتحصل وجدنا أن:
- التحول الطوري لهذا الأكسيد يحدث من Stishovite إلى CaCl_2 عند الضغط 40 GPa.
 - معظم المعاملات تتأثر بالتغير الطوري.
 - بتغير الضغط معظم المعاملات تتزايد ماعدا C_{12} ، C_{13} للطور الثاني و معامل عدم التماثل Ap، As1 و As2 للطور الثاني كذلك، كما أن النسبة الحجمية تتناقص ببطء.
 - هناك عدم تجانس واضح في الوشاح السفلي يقترب من التجانس في قيم محددة من الضغط مثل 60.7 GPa، كما يظهر التجانس واضح بين الضغطين 106.4 GPa حتى 135.8 GPa، أما بين الضغطين 60.7 GPa و 106.4 GPa فيكون التجانس غائبا نسبيا.
 - السرعة الطولية Vp تكون أسرع في الاتجاه البلوري [100].
 - السرعة العرضية Vs1 تكون أسرع في الاتجاهين البلوريين [100] و [001].
 - السرعة العرضية Vs2 تكون أسرع في الاتجاه [100].
- حتى تندعم هذه الدراسة يمكن تقديم العديد من المقترحات المستقبلية من بينها:
- بالإضافة إلى تغير الضغط، تغير في درجة الحرارة لتحسين الدقة في الدراسة.
 - يمكن تناول الأكسيد بالدراسة في القشرة أو الوشاح العلوي نظرا لأنه متوفر أكثر في هاتين الطبقتين، أما في الوشاح السفلي فيمكن اعتباره غير نفي أي محتوى في منيرالات أخرى.

المراجع:

- [01] Wang S-F, Hsu Y-F, Pu J-C, Sung JC, Hwa L. Determination of acoustic wave velocities and elastic properties for diamond and other hard materials. *Materials Chemistry and Physics*. 2004;85:432-7.
- [02] Ulrich TJ, McCall K, Guyer R. Determination of elastic moduli of rock samples using resonant ultrasound spectroscopy. *The Journal of the Acoustical Society of America*. 2002;111:1667-74.
- [03] Marx D, Hutter J. Ab initio molecular dynamics: Theory and implementation. *Modern methods and algorithms of quantum chemistry*. 2000;1:141.
- [04] Kumar M. Application of high pressure–high temperature equation of state for elastic properties of solids. *Physica B: Condensed Matter*. 2002;311:340-7.
- [05] N. V. « Investigation théorique du mécanisme de physisorption:
- [06] C. Kittel, *Physique de l'état solide*, 8^{ème} édition, Dunod Paris,(2007).
- [07] N. V. « Investigat in théorique du mécanisme de physisorption :application d'une méthode de partition fondée sur la fonctinnelle de la densité » 'Université de Genève ;(2000).
- [08] Bolt B and B K. *An introduction to the theory of seismology*. CambridgeUniversity Press, CambridgeU.K., 499 pp. 1985.
- [09] Poirier J-P. *Introduction to the Physics of the Earth's Interior*: Cambridge University Press; 2000.
- [10] Pujol J. *Elastic wave propagation and generation in seismology*: Cambridge University Press; 2003.
- [11] Shearer PM. *Introduction to seismology*: Cambridge University Press; 2009.
- [12] Radi Z, *Étude de l'anisotropie sismique du Nord-Est de l'Algérie*, thèse Doctorat, Université Ferhat Abbas Sétif 1, 2016.
- [13] Baddari K. *Eléments de sismologie*: OPU Alger 1994, 466 P; 1994.
- [14] Stein CA. *The solid earth: an introduction to global geophysics*. Eos, Transactions American Geophysical Union. 1991;72:427-8.
- [15] Jackson I. *The Earth's mantle: composition, structure, and evolution*: Cambridge University Press; 2000.

-
- [16] Dziewonski AM, Anderson DL. Preliminary reference Earth model. *Physics of the earth and planetary interiors*. 1981;25:297-356.
- [17] Bolt, B. A.. *Nuclear Explosions and Earthquakes*. The parted. Vei. W .H. Fercman San Francisco. 1976.
- [18] Kennett B. On seismological reference models and the perceived nature of heterogeneity. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 2006;159:129-39.
- [19] Anderson DL. *Theory of the Earth*: Blackwell scientific publications; 1989.
- [20] Mattern E. *Composition et température dans le manteau profond: interprétations minéralogiques des observations sismologiques*: École normale supérieure (Lyon); 2005.
- [21] Merkel S. *Elasticité et orientations préférentielles dans la terre profonde: approche expérimentale*. Doctorat de Ecole normale supérieure de lyon. umr 5570 laboratoires des sciences de la terre. Thèse. 2002.
- [22] Kittel C, McEuen P. *Introduction to solid state physics*: Wiley New York; 1996.
- [23] Karki B, Stixrude L, Clark S, Warren M, Ackland G, Crain J. Structure and elasticity of MgO at high pressure. *American Mineralogist*. 1997;82:51-60.
- [24] Tlili S, Louail L, Bouguera A, Haddadi K, Medkour Y. Contribution to the study of structural and elastic properties of wüstite under pressure up to 140 GPa by pseudopotential calculations. *Phase Transitions*. 2017;90:1229-40.
- [25] Louail L, Krachni O, Bouguerra A, Sahraoui FA. Effect of pressure on structural and elastic properties of alkaline-earth oxide CaO. *Materials Letters*. 2006;60:3153-5.
- [26] Ezziani A. Ondes dans les milieux poroélastiques-Analyse du modele de Biot. *Revue Africaine de la Recherche en Informatique et Mathématiques Appliquées*. 2006;5:95-109.
- [27] Screiber E, Anderson O, Soga N. *Elastic constants and their measurements*. McGrawHill, New York. 1973.
- [28] Ravindran P, Fast L, Korzhavyi PA, Johansson B, Wills J, Eriksson O. Density functional theory for calculation of elastic properties of orthorhombic crystals: application to TiSi 2. *Journal of Applied Physics*. 1998;84:4891-904.
- [29] Seitz F, Turnbull D, Christy R. *Solid State Physics, Vol. 12: Advances in Research and Applications*. American Journal of Physics. 1962;30:936-7.

-
- [30] Kittel C, Holcomb DF. Introduction to solid state physics. American Journal of Physics. 1967;35:547-8.
- [31] Galperin YM. Introduction to modern solid state physics. доступна pdf формат на адрес: <http://edu.ioffe.ru/lib/galperin>. 2001.
- [32] Jeanloz, R, and E. Knittle, Density and composition of the lower mantle. Philosophical Transactions of the Royal society of London Series A, 328,377-389, 1989.
- [33] Sobolev SV, Babeyko AY. Modeling of mineralogical composition, density and elastic wave velocities in anhydrous magmatic rocks. Surveys in geophysics. 1994;15:515-44.
- [34] Karki BB, Stixrude L, Wentzcovitch RM. High-pressure elastic properties of major materials of Earth's mantle from first principles. Reviews of Geophysics. 2001;39:507-34.
- [35] Jeanloz R, Knittle E. Density and composition of the lower mantle. Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 1989;328:377-89.
- [36] Levien L, Prewitt CT, Weidner DJ. Structure and elastic properties of quartz at pressure. American Mineralogist. 1980;65:920-30.
- [37] Yagi T, Tsuchida Y, Kusanagi S, Fukai Y. Stabilities of SiO₂ stishovite and CaSiO₃ perovskite under lower mantle condition. High Pressure Science and Technology. 1990;5:699-701.
- [38] Karki BB, Stixrude L, Crain J. Ab initio elasticity of three high- pressure polymorphs of silica. Geophysical research letters. 1997;24:3269-72.
- [39] Karki B, Ackland G, Crain J. Elastic instabilities in crystals from ab initio stress-strain relations. Journal of Physics: Condensed Matter. 1997;9:8579.
- [40] Kimizuka H, Ogata S, Li J, Shibutani Y. Complete set of elastic constants of α -quartz at high pressure: a first-principles study. Physical Review B. 2007;75:054109.
- [41] Wang WH. The elastic properties, elastic models and elastic perspectives of metallic glasses. Progress in Materials Science. 2012;57:487-656.
- [42] Chihi T, Fatmi M, Boucetta S. Theoretical Study of the α -Quartz and Stishovite Phases of SiO₂. Chinese Journal of Physics. 2013;51:1270-9.
- [43] Nisr C, Ribárik G, Ungár T, Vaughan GB, Merkel S. Three-dimensional X-ray diffraction in the diamond anvil cell: application to stishovite. High Pressure Research. 2014;34:158-66.

- [44] Philipps K, Stoffel RP, Dronskowski R, Conradt R. Experimental and theoretical investigation of the elastic moduli of silicate glasses and crystals. *Frontiers in Materials*. 2017;4:2.

الملحق

معطيات نموذج PREM المستخدم في المقارنات

في الجدول أدناه يتم عرض أهم القيم المستخدمة في هذه المذكرة لنموذج PREM كدالة للعمق، و هي كثافة المادة، و ثوابت المرونة وسرعات الموجات الزلزالية، مع العلم أن السرعة الهيدروديناميكية يتم حسابها وفقاً للعلاقة (3) من الفصل الأول، و لكن على حدود النواة الداخلية.

Profondeur (Km)	P(GPa)	K(GPa)	den(g/cm ³)	G(GPa)	V _p (Km/s)	V _s (Km/s)	V _φ (Km/s)
0	0	2.15	1.02	0	1.45	0	1.45
0.3	0	2.15	1.02	0	1.45	0	1.45
0.3	0	51.97	2.6	26.62	5.8	3.2	4.47
15	0.3	51.97	2.6	26.62	5.8	3.2	4.47
15	0.3	75.28	2.9	44.11	6.8	3.9	5.10
24.4	0.6	75.28	2.9	44.11	6.8	3.9	5.10
24.4	0.6	131.45	3.38	68.14	8.11	4.49	6.24
71.0	2.2	130.62	3.38	67.54	8.08	4.47	6.22
80.0	2.5	130.23	3.37	67.34	8.08	4.47	6.22
80.0	2.5	130.23	3.37	67.34	8.08	4.47	6.22
150	4.8	128.72	3.37	66.44	8.03	4.44	6.18
171.0	5.5	127.80	3.36	66.24	8.02	4.44	6.17
220	7.1	126.98	3.36	65.64	7.99	4.42	6.15
220	7.1	154.16	3.44	73.43	8.56	4.62	6.70
271.0	8.9	158.90	3.47	76.00	8.66	4.68	6.77
300	9.9	160.30	3.48	76.90	8.69	4.7	6.79
371.0	12.3	170.28	3.53	79.65	8.85	4.75	6.95
400	13.4	173.64	3.54	80.55	8.91	4.77	7.00
400	13.4	189.54	3.72	90.42	9.13	4.93	7.14
471.0	16	208.60	3.81	101.44	9.5	5.16	7.40
500	17.1	190.25	3.35	91.30	9.65	5.22	7.54
571.0	19.9	239.90	3.94	116.17	10.01	5.43	7.80
600	21	249.14	3.98	121.27	10.16	5.52	7.91
600	21	249.14	3.98	121.27	10.16	5.52	7.91

Profondeur (Km)	P(GPa)	K(GPa)	den(g/cm ³)	G(GPa)	V _p (Km/s)	V _s (Km/s)	V _φ (Km/s)
640	22.6	252.25	3.98	122.60	10.22	5.55	7.96
640	22.6	252.25	3.98	122.60	10.22	5.55	7.96
670	23.8	255.78	3.99	123.79	10.27	5.57	8.01
670	23.8	299.41	4.38	155.07	10.75	5.95	8.27
771.0	28.3	313.59	4.44	172.88	11.07	6.24	8.40
800	29.6	317.47	4.46	174.78	11.11	6.26	8.44
871.0	32.8	329.62	4.5	179.17	11.24	6.31	8.56
971.0	37.3	347.22	4.56	185.61	11.42	6.38	8.73
1000	38.6	351.37	4.58	187.60	11.46	6.4	8.76
1071.0	41.9	364.05	4.62	191.61	11.58	6.44	8.88
1171.0	46.5	385.80	4.68	197.73	11.78	6.5	9.08
1200	47.8	384.99	4.69	199.37	11.78	6.52	9.06
1271.0	51.2	395.34	4.73	204.17	11.88	6.57	9.14
1371.0	55.9	412.17	4.79	209.92	12.02	6.62	9.28
1400	57.3	417.67	4.81	211.43	12.06	6.63	9.32
1471.0	60.7	428.57	4.84	215.33	12.16	6.67	9.41
1571.0	65.5	444.20	4.9	221.94	12.29	6.73	9.52
1600	66.9	449.07	4.91	223.05	12.33	6.74	9.57
1871.0	80.4	492.88	5.05	238.34	12.67	6.87	9.88
1971.0	85.5	508.34	5.11	244.70	12.78	6.92	9.97
2000	86.9	513.63	5.12	245.89	12.82	6.93	10.02
2071.0	90.6	524.44	5.16	250.68	12.9	6.97	10.08
2171.0	95.8	541.84	5.21	256.02	13.02	7.01	10.20
2271.0	101.1	557.24	5.26	262.18	13.13	7.06	10.29
2371.0	106.4	575.33	5.31	267.68	13.25	7.1	10.41
2400	108	579.64	5.32	268.94	13.28	7.11	10.44
2471.0	111.9	592.37	5.36	273.25	13.36	7.14	10.51
2571.0	117.4	610.15	5.41	279.68	13.48	7.19	10.62
2671.0	123	629.33	5.46	285.41	13.6	7.23	10.74
2700	124.1	632.41	5.47	286.72	13.62	7.24	10.75
2741.0	127	640.53	5.49	290.16	13.68	7.27	10.80
2771.0	128.8	644.37	5.51	291.22	13.69	7.27	10.81
2780	129.3	645.44	5.51	290.42	13.69	7.26	10.82
2850	133.4	654.34	5.56	293.05	13.71	7.26	10.85
2885	135.8	657.05	5.57	293.58	13.72	7.26	10.86

الملخص:

باستعمال الحساب بواسطة طريقة DFT و بتقريب GGA قمنا بدراسة التحول الطوري، الخصائص البنيوية و المرنة لأوكسيد SiO_2 التي من خلالها يمكن دراسة تغيرات الخصائص الزلزالية المتمثلة في سرعات الموجات الزلزالية، عدم تجانس الوشاح السفلي و عدم التماثل الزلزالي. هذه التغيرات تكون بتغير الضغط من 0 حتى 140 GPa. وجدنا أن التحول الطوري يكون عند الضغط 40 GPa، حيث معظم المعاملات لا تتأثر بهذا التحول الطوري و تتزايد بزيادة الضغط ما عدا c_{12} ، c_{13} و G بالإضافة إلى أن التجانس يكون عند الضغوط 60.7 GPa، 106.4 GPa و 135.8 GPa، كما أن السرعات V_p ، V_{s2} تكون أسرع في الاتجاه [100] و V_{s1} في الاتجاهين [001]، [100]. بمقارنة نتائجنا بدراسات أخرى وجدنا أنها متوافقة في أغلب المعاملات ما عدا معامل القص G مقارنة بدراسة TeyebChihi.

الكلمات المفتاحية: SiO_2 ، خصائص زلزالية، DFT، عدم تجانس الوشاح، عدم التماثل.

Abstract :

By using the calculation by DFT method, by GGA approximation we studied the phase transition, structural and elastic properties of SiO_2 . Through which the changes in seismic properties; they are seismic waves velocities, heterogeneity of the lower mantle and seismic anisotropies. These changes are caused by pressure changes from 0 to 140 GPa. We found that the phase shift is at 40 GPa, where most of the coefficients are not affected by this phase transition and are increased by increasing pressure except c_{12} , c_{13} and G. In addition, the homogeneity is at 60.7 GPa, 106.4 GPa and 135.8 GPa, and V_p , V_{s2} velocities are faster in directions [100] and V_{s1} in both directions [001], [100]. By comparing our results with other studies, we found that they were consistent in most treatments except G compared to the study of TeyebChihi.

keywords: SiO_2 , Seismic properties, Hétérogénéité of the lower mantle I, anisotropies sismiques.

Résumé:

Par l'utilisation du calcul par la méthode DFT, par approximation GGA, nous avons étudié la transition de phase, les propriétés structurales et élastiques de SiO_2 . Grâce à laquelle changements dans les propriétés sismiques; ce sont les vitesses des ondes sismiques, l'hétérogénéité du manteau inférieur et les anisotropies sismiques. Ces changements sont causés par des changements de pression de 0 à 140 GPa. Nous avons trouvé que la transition de phase est à 40 GPa, où la plupart des paramètres ne sont pas affectés par cette transition de phase et augmentent par l'augmentation de la pression sauf c_{12} , c_{13} et G. De plus, l'homogénéité est de 60.7 GPa, 106.4 GPa et 135.8 Les vitesses GPa et V_p , V_{s2} sont plus rapides dans les directions [100] et V_{s1} dans les deux directions [001], [100]. En comparant nos résultats avec d'autres études, nous avons trouvé qu'ils étaient cohérents dans la plupart des traitements sauf G par rapport à l'étude de TeyebChihi.

Mots-clés: SiO_2 , propriétés sismiques, DFT, GGA, hétérogénéité du manteau inférieur, anisotropies sismiques.