

## دراسة المقارنات الزلزالية الخاصة بالأكاسيد FeO, MgO, CaO في نطاق الوشاح الأرضي بواسطة الحساب

من إعداد الطالبتين: إسماعيلية رجاء -ملوح هاجر / تحت إشراف الأستاذ: تيلي صالح tlilisalah2007@gmail.com

### ملخص:

عملنا هذا يهتم بجمع أهم الدراسات المتناولة للأكاسيد الثلاث FeO, MgO, CaO وذلك بتغيير الضغط من 0 حتى 140 GPa حيث استعمل معظمها الطرق الحسابية مثل DFT التي تتضمن طرق تقريبية كثيرة أهمها GGA و LDA، وأهم الخصائص المدروسة هنا هي الخصائص البنيوية و المرئية (معامل الإنضغاط الحجمي)، وهي المعاملات التي تفيد في التطرق مستقبلا إلى الخصائص الزلزالية .  
**الكلمات المفتاحية:** CaO, MgO, FeO، علم الزلازل، الحساب العددي

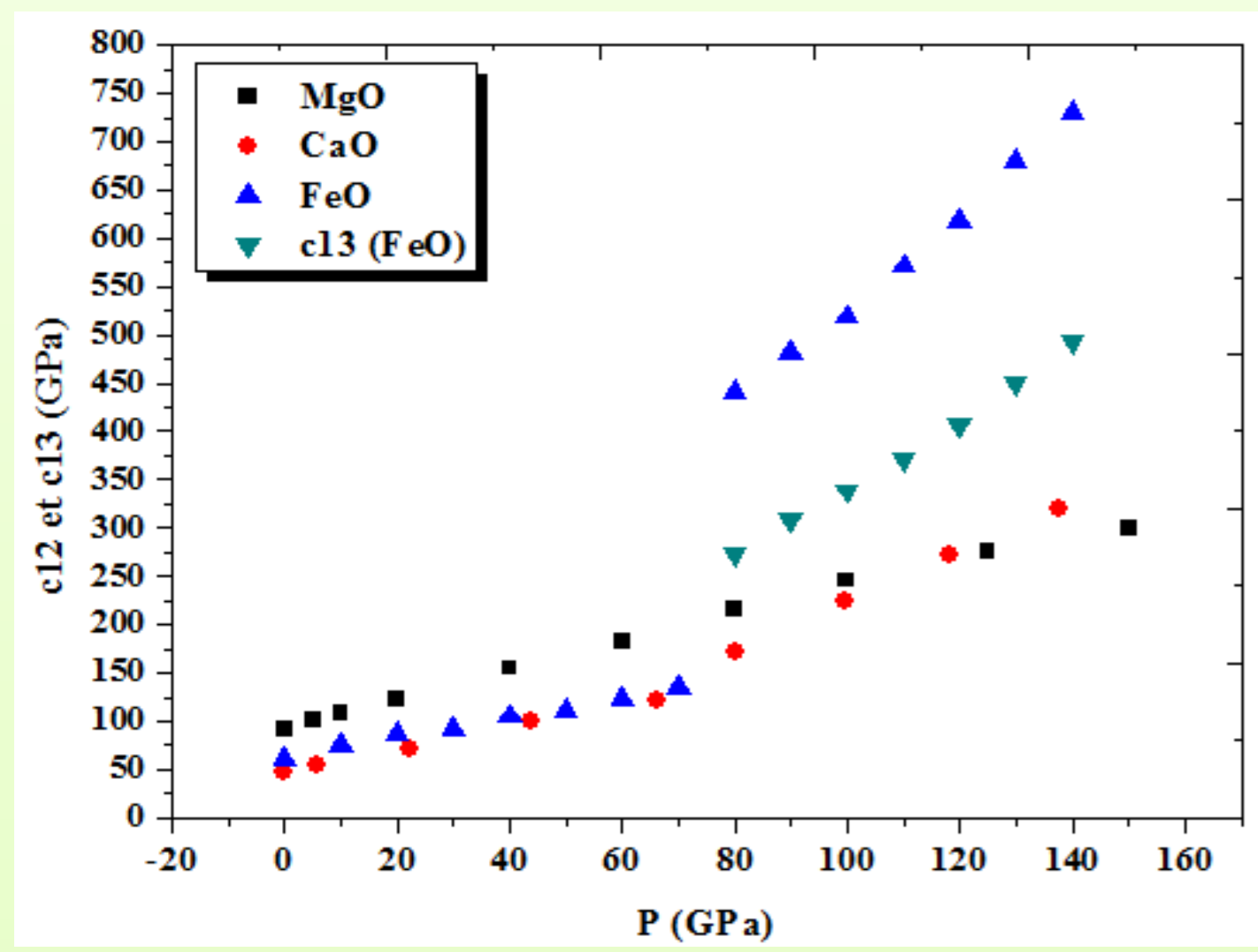
### مقدمة:

من خلال العلاقة بين فيزياء الأجسام الصلب و علم الزلازل، ابن نجد الطريقة المباشرة للبحث في هذا العلم تعتمد على دراسة التحولات الطورية و البنى البلورية المستقرة في الشروط الترموديناميكية للأرض، لذلك نقوم بدراسة 3 أكاسيد مهمة في تركيب الطبقات الداخلية للأرض و هي CaO, MgO, FeO و غالبا ما تكون مركب مانيزوفيستيت و المتواجد في الوشاح السفلي من هذه الطبقات، إهتمامنا في عملنا بدراسة خصائص يعتمد عليها لتحديد الخصائص الزلزالية و ذلك انطلاقا من التحولات الطورية و حساب تغير كل من  $\rho$ ,  $V/V_0$ ,  $c_{ij}$  و K دلالة الضغط معتمدين على طريقة حسابية و ذلك عند الصفر المطلق.

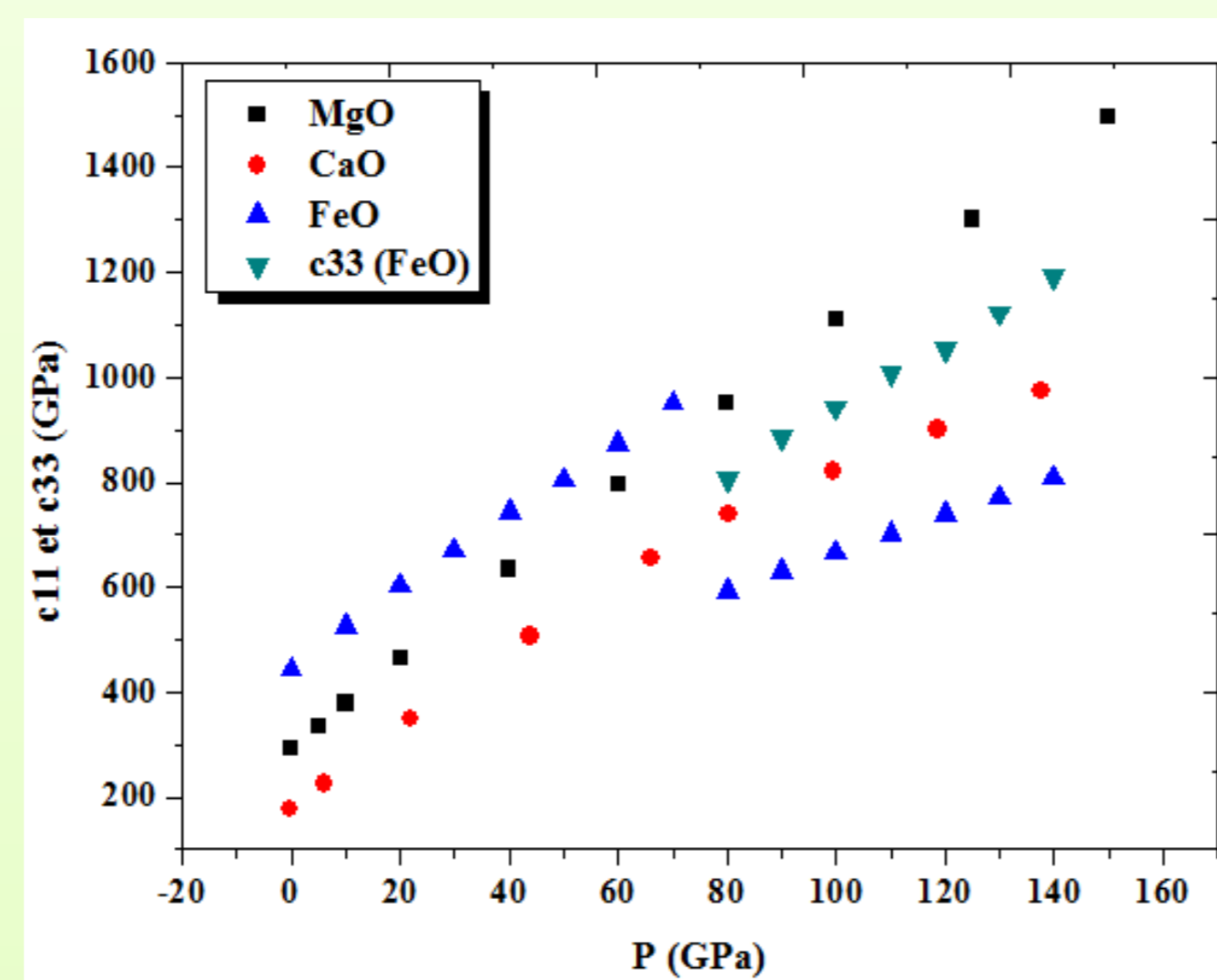
### طريقة الدراسة:

إن أهم الأعمال المعتمدة عليها دراستنا كانت حسابية استعملت طريقة DFT التي تحتوي على التقريبات GGA و LDA و هذه الطريقة موجودة في برنامج يدعى CASTEP و ذلك بالإعتماد على خطوات ممنهجة حسب ما يأتي عند عرض النتائج و تفسيرها.

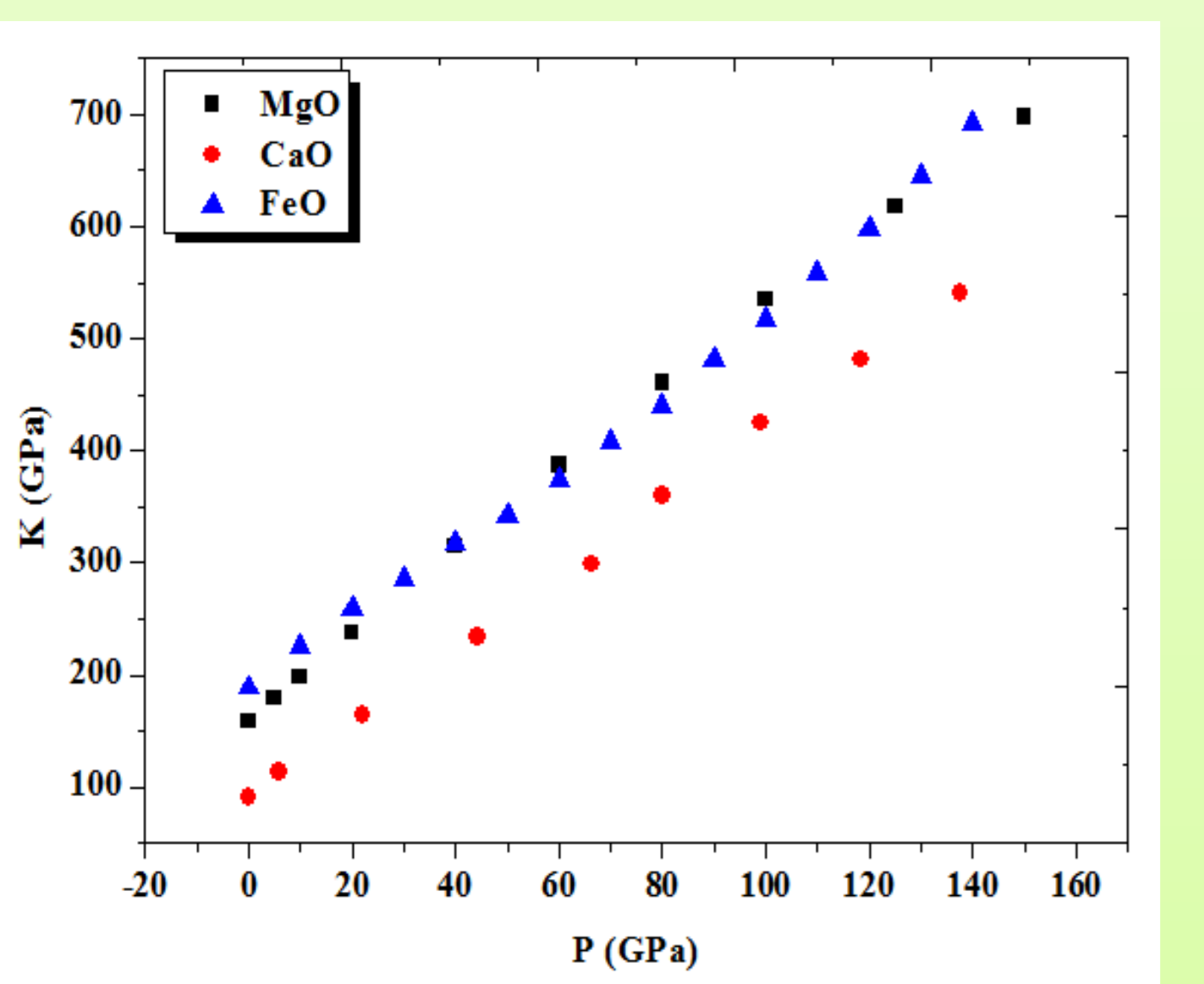
### الخصائص المرئية 5- نتائج خاصة بالثوابت المرئية و معامل الإنضغاط الحجمي:



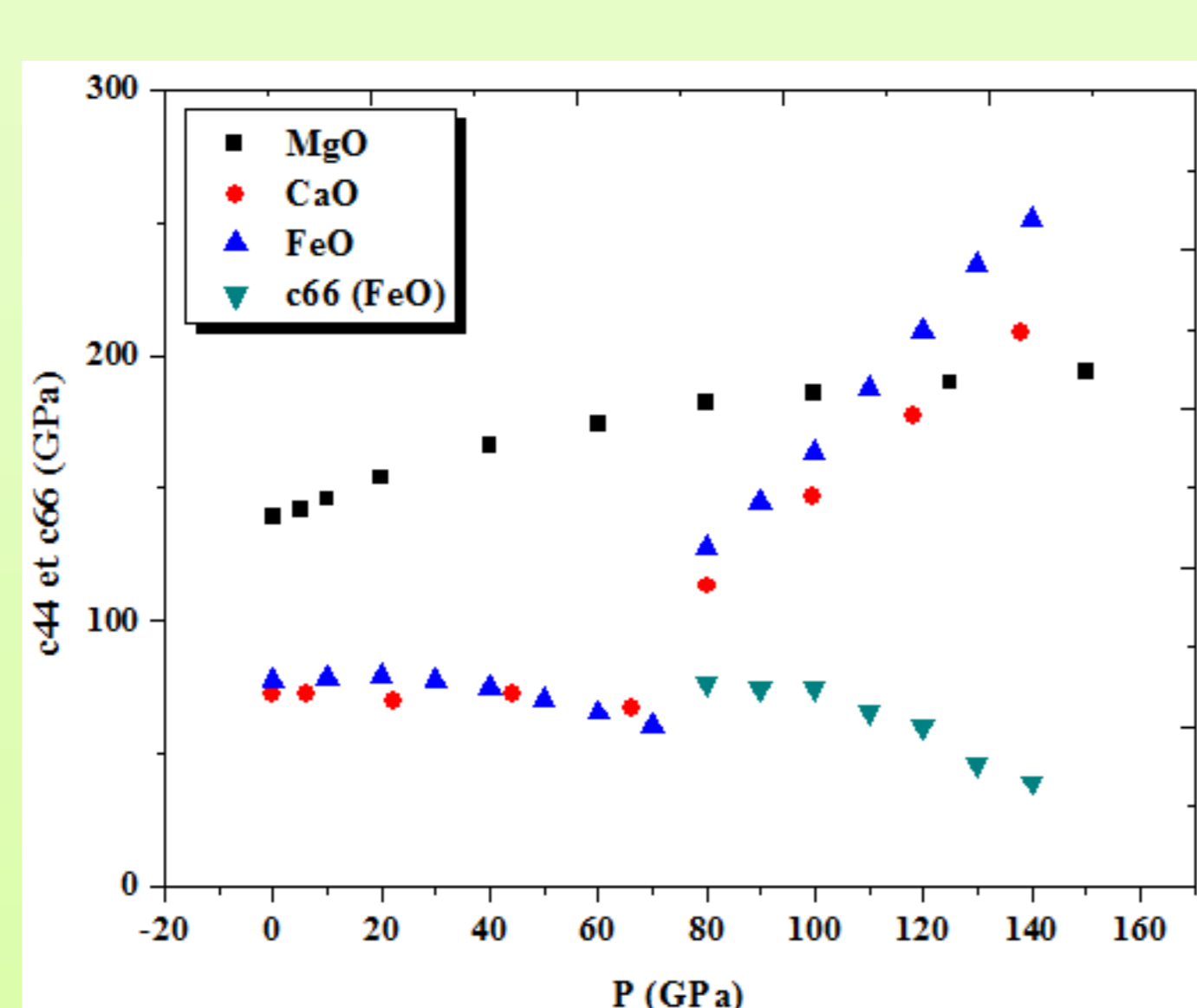
الشكل 7



الشكل 6



الشكل 9



الشكل 8

### 3- التحول الطوري:

إنطلاقا من التحول الطوري أي دراسة تغير أنتالي بدلالة الضغط بحثا على البنى المستقرة، باعتبار البنى المستقرة بحسب الباقي من المعاملات باستعمال البرنامج المذكور اعلاه (حجم الخلية، ثوابت المرئية، بالإضافة الى معامل الانضغاط الحجمي الذي يمكن ان يحسب مباشرة. أما المعاملات المكملة للحساب تربط بين معاملات السابقة التي تحسب بالعلاقات الرياضية التالية:

**تحديد معامل الانضغاط الحجمي (K أو B):**

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

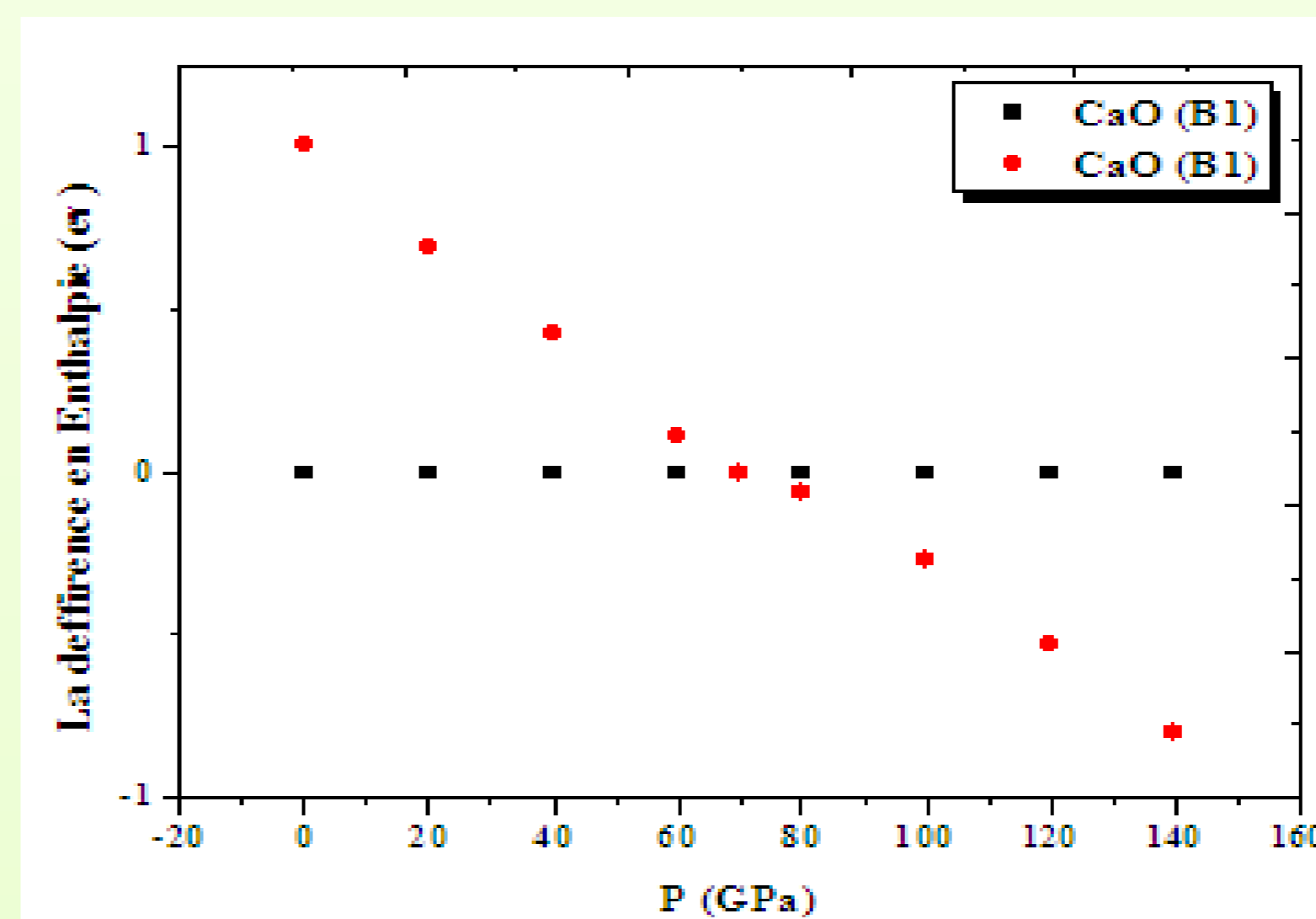
**تحديد الكثافة ( $\rho$ ):**

$$\rho = \frac{An}{N_a V_c}$$

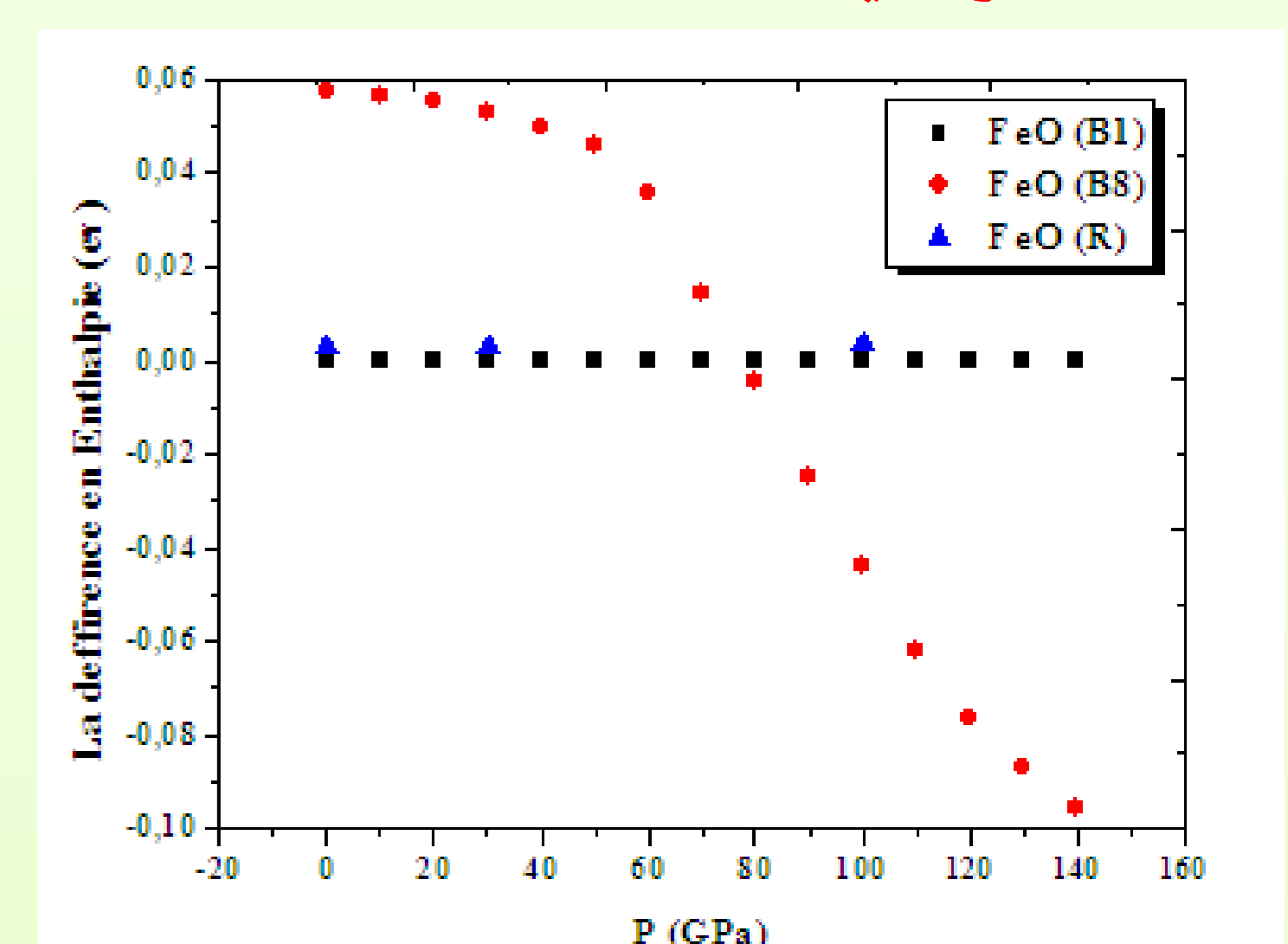
An مجموع الكتل المولية للذرات المكونة للنواة  
N<sub>a</sub> عدد أفوغادرو 6.023 x 10<sup>23</sup>  
V<sub>c</sub> حجم الخلية الاصطناعية المكونة للبنية

### الخصائص البنيوية

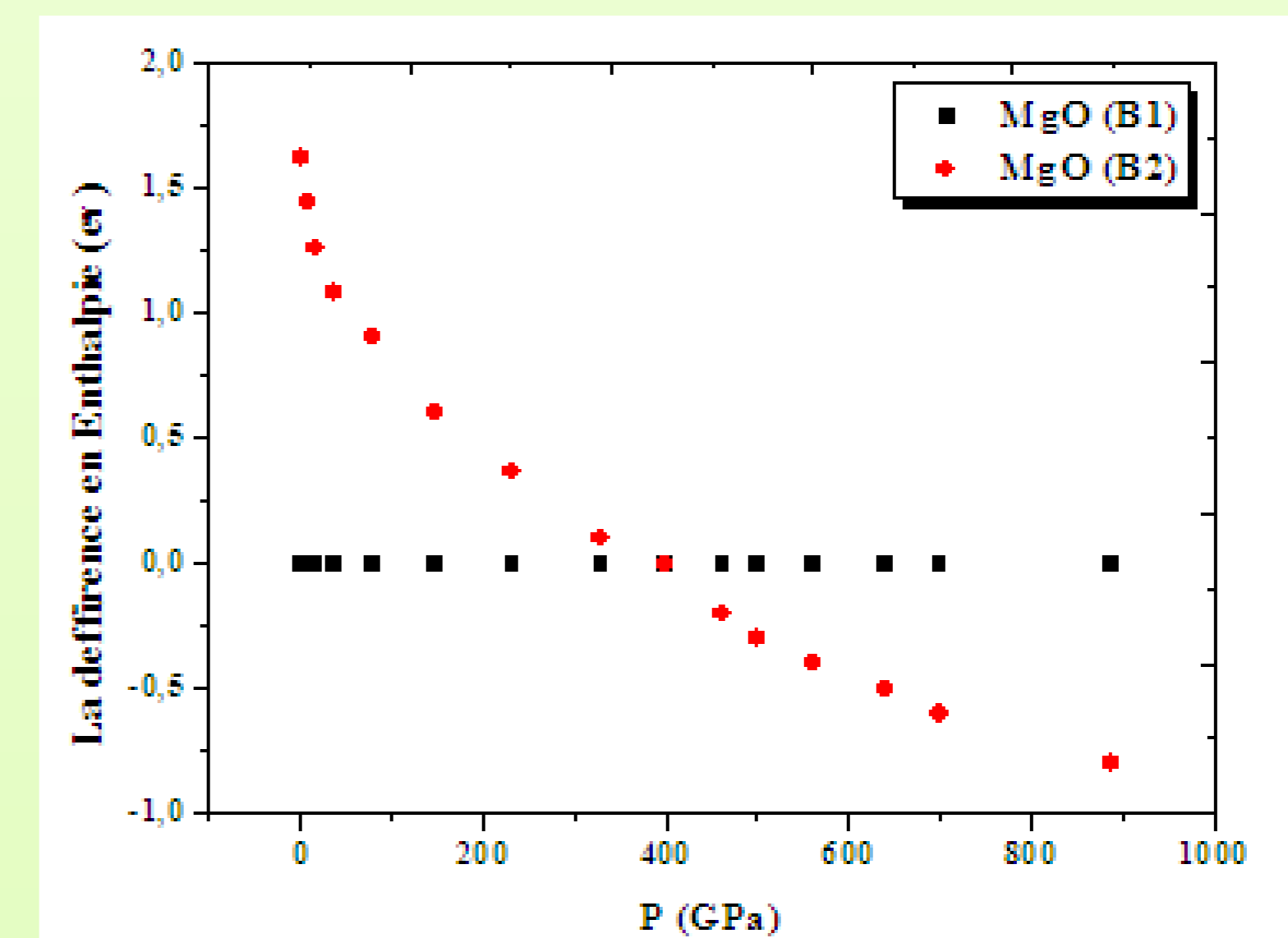
### 4- النتائج في المخططات التالية:



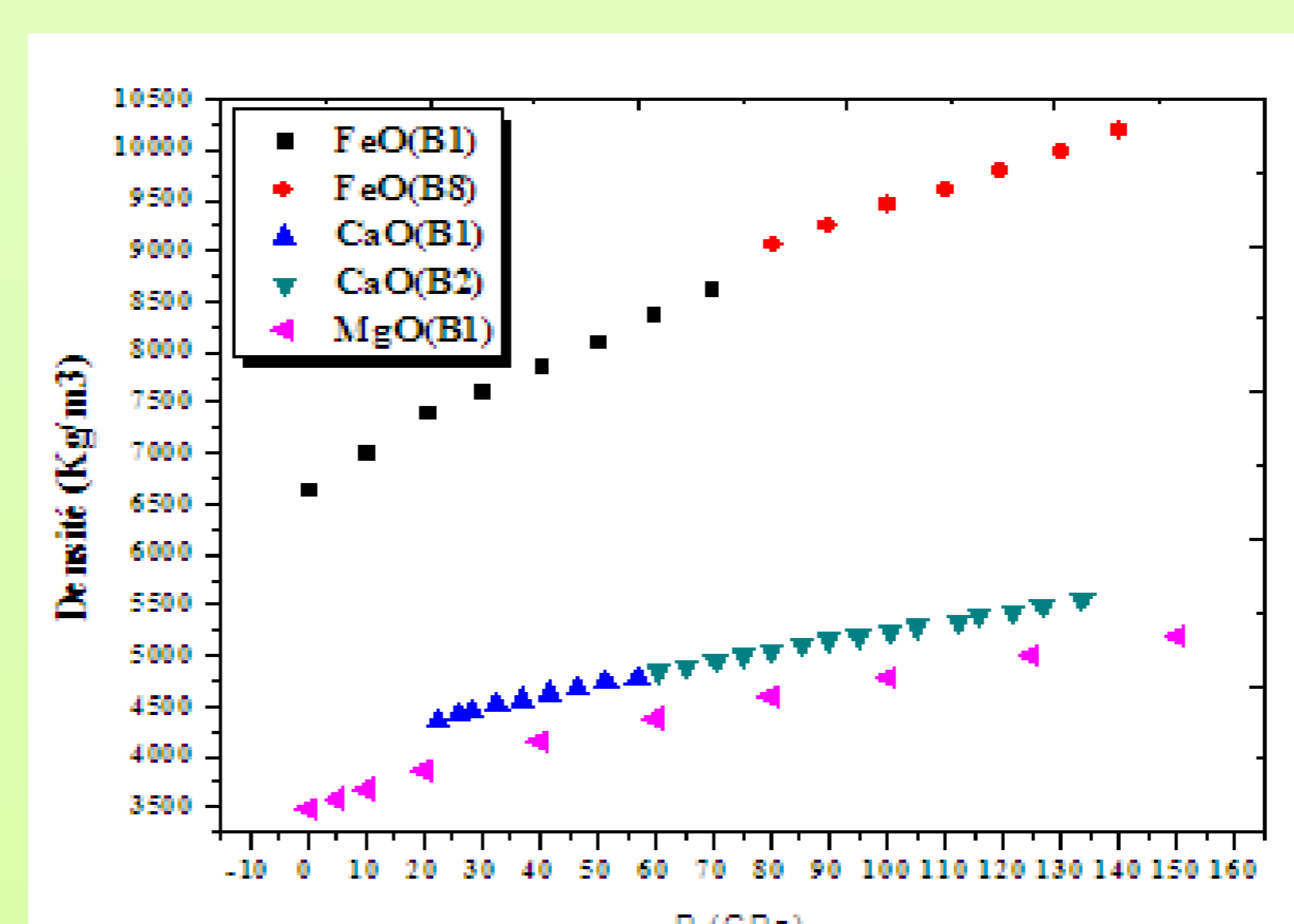
الشكل 2



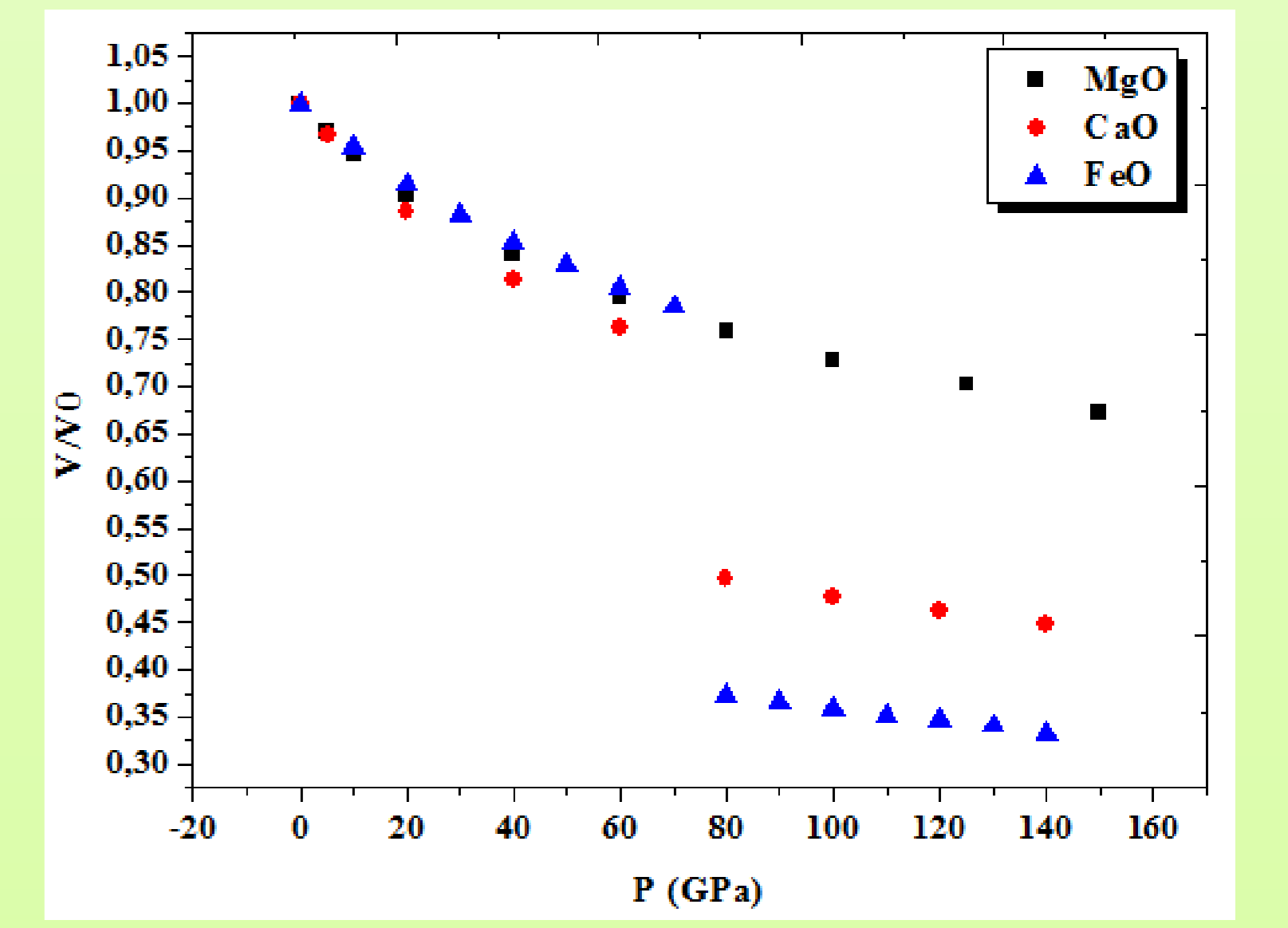
الشكل 1



الشكل 3



الشكل 5



الشكل 4

### مناقشة عامة:

- بالنسبة للانتالي نرى كلا الأكاسيد من 0 حتى 70 GPa يأخذان نفس البنية و هي البنية المكعب من نوع NaCl الطور B1، أما فوق الضغط 80 GPa حتى الضغط 150 GPa يأخذ أكسيد الحديد البنية السداسية NiAs الطور B8 بينما يستمر أكسيد المنغنيز في نفس البنية السابقة و يأخذ أكسيد الكالسيوم البنية المكعبة من النوع CsCl الطور B2.  
- النسبة الحجمية نرى ان المنحنيات تأخذ نفس المنحى في الطور الأول تبعا للضغط هناك تداخل بين FeO و CaO في النقطة 0 GPa و بين MgO و CaO في النقطة 8 GPa و في الطور الثاني نرى تماثل بين CaO و FeO و FeO و FeO و يكون بشكل خطي تقريبا.  
- نلاحظ أن ثابت المرئية C<sub>11</sub> و C<sub>33</sub> تتغير خطيا تبعا للضغط ماعدا من أجل CaO الذي يظهر خطية أقل. كما نلاحظ أن الأسرع تغيرا هو الثابت الخاص لـ MgO.  
- الملاحظة الممكن تسجيلها من منحني ثابت المرئية لـ C<sub>12</sub> هي نفسها الملاحظة المسجلة لثابت المرئية C<sub>11</sub> هو الأسرع تغيرا مقارنة بـ CaO و MgO.  
- نلاحظ بالنسبة للطور الأول أن ثابت المرئية C<sub>44</sub> للثوابت الخاصة بالأكاسيد الثلاثة تظهر خطية أقل بدلالة الضغط التغير الأسرع هو الثابت الخاص بـ MgO.  
- من خلال منحني معامل الانضغاط K نلاحظ أن MgO و CaO يتغيران خطيا بدلالة الضغط و FeO يتغير بخطية أقل، MgO هو الأسرع تغيرا من وهناك تقارب وتداخل في قيم FeO و MgO و يتمثل التداخل في النقطة 40 GPa.

### خلاصة:

من خلال حساباتنا وجدنا أن هناك تحول للبنية لكل من FeO, CaO في طبقات الداخلية للأرض من حدود القشرة إلى بداية النواة الخارجية، أما MgO يبقى ببنية مستقرة خلال مجال الداسة و يظهر هذا التحول في النسبة الحجمية، و كذلك في ثوابت المرئية لكليهما ما عدا C<sub>11</sub> من أجل CaO لا يتأثر بالتحول الطوري.

### References:

- [1] 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.
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] Ringwood, A. E., Phase transformations and the constitution of the mantle, Phys. Earth Planet, Inter. 197,03, 109-155.
- [5] Karki B, Ackland G, Crain J. Elastic instabilities in crystals from ab initio stress-strain relations. Journal of Physics: Condensed Matter. 1997;9:8579.