



جامعة قاصدي مرباح ورقلة
كلية الرياضيات و علوم المادة
2 ماستر فيزياء المواد
قسم الفيزياء



دراسة الخصائص البنيوية و المرئية لـ SiO_2 تحت الضغوط العالية
من 0 – 140 GPa بواسطة الحساب و تطبيقها في علم الزلازل

تحت إشراف الأستاذ : تليلي صالح
tlilialah2007@gmail.com

من إعداد : بن يحكم أمال
ikbalfifo@gmail.com

الملخص :

تهدف دراستنا الى تحديد الخصائص الزلزالية المتمثلة في سرعات الموجات الطولية، العرضية والهيدروليكية و معاملات عدم التماثل المناحي وعدم تجانس الوشاح السفلي وذلك بعد تحديد كل من الخصائص البنيوية والتي تتمثل في التحول الطوري، النسبة الحجمية والخصائص الميكانيكية والتي منها ثوابت المرنة ومعاملاتها، التي اكتفينا بها هنا كل هذا في مجال الضغط من 0 حتى 140 GPa بالطريقة الحسابية DFT وتقريب GGA فقد وجدنا ان طورين فقط هما المستقرين من بين الثلاث المستقرة وهذا مماثل لدراسات و يتنافى مع اخرى، بالإضافة الى ان تغير معظم المعاملات بالأخص الزلزالية مماثل لأغلب الدراسات حول SiO_2

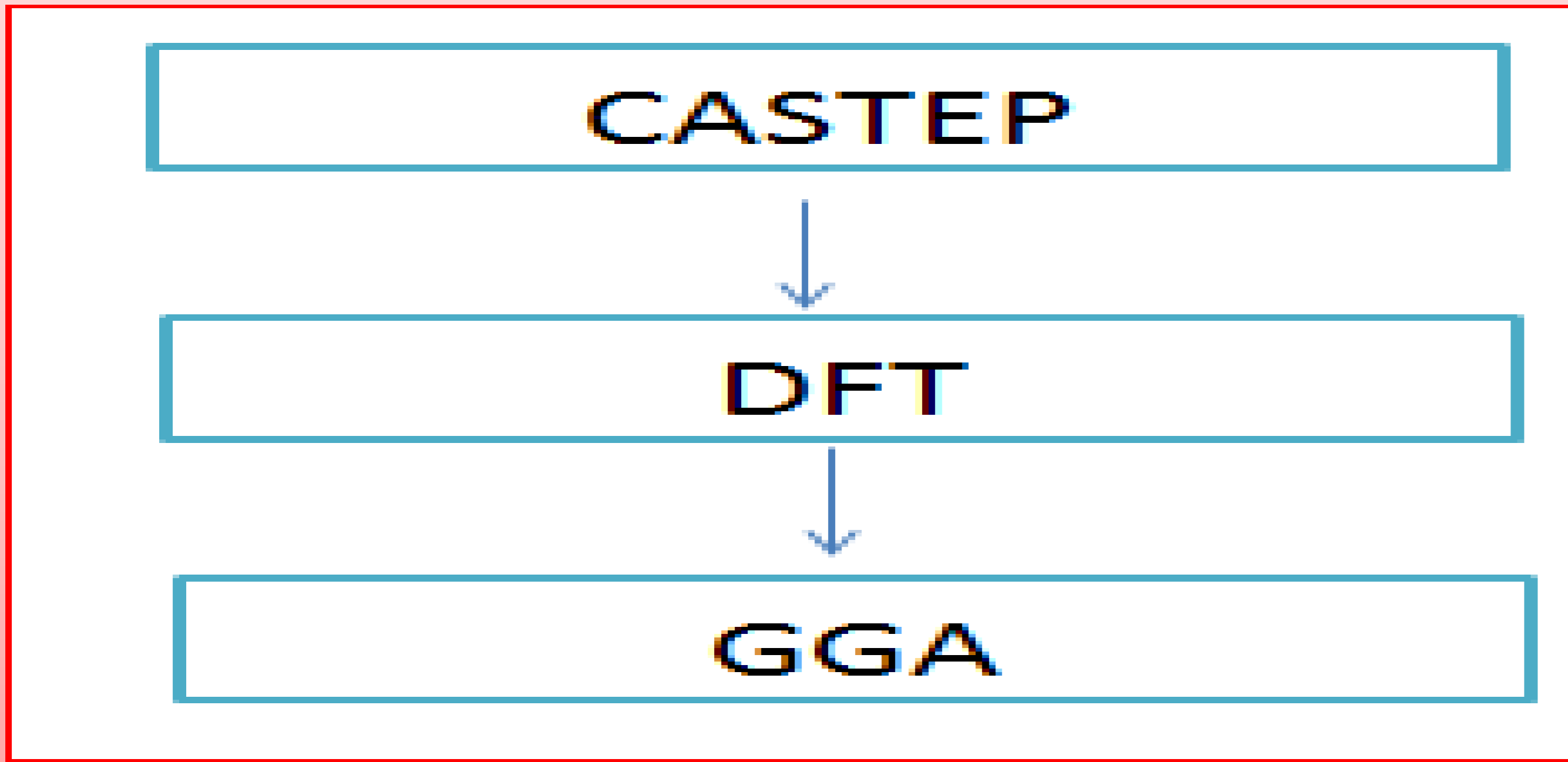
الكلمات المفتاحية: SiO_2 ، خصائص بنيوية، خصائص مرئية، خصائص زلزالية

1- مقدمة :

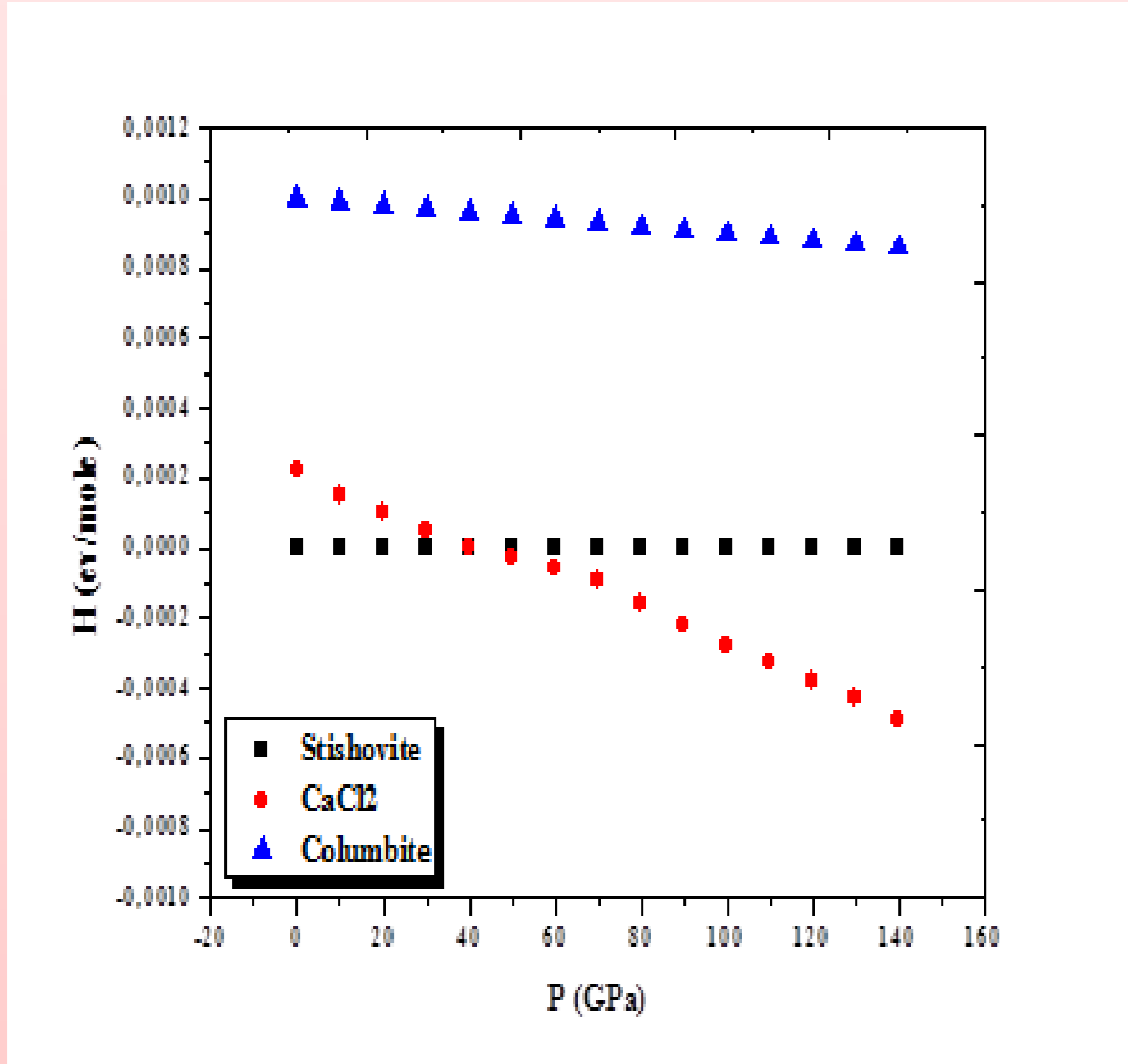
عند تعرض المادة بصفة عامة لتغير الشروط الترموديناميكية فان حالتها يمكن ان تتغير او يتغير الطور في نفس الحالة، فالمواد الصلبة البلورية خاصة قد تتغير بناها البلورية مما يؤدي تغير خصائصها المتعلقة بهذه البنى عند الضغوط العالية خاصة وهذا الجزء من الفيزياء يطلق عليه فيزياء الضغوط العالية.

تطبق فيزياء الضغوط العالية في العديد من الميادين من بينها علم الزلازل الكوني الذي يدرس انتشار الامواج الزلزالية في المواد الصلبة خاصة، حيث تعرضها للضغط في الطبقات الداخلية للكواكب لتتغير سرعاتها، اذن نقوم هنا بدراسة اكسيد من بين الاكاسيد الهامة المكونة للطبقات الارضية وهو SiO_2 وهذا في مجال الضغط من 0 الى 140 GPa اي الى غاية حدود النواة الخارجية للأرض. تعددت الدراسات حول موضوع هذا الاكسيد وفي نفس الاطار سواء تعرضت الى التحول الطوري، الخصائص البنيوية، المرئية و الزلزالية حسب ما جاء اعلاه فان التطرق الى الخاصيتين الاخيرتين يعتمد في الاساس على الخصائص الاولى، كما ان الخصائص الاخيرة تستوجب دراستها المرور ولو بالحساب الى الخصائص الثانية. وعليه فضلنا هنا التطرق للخصائص الاولى كاملة اما الثانية فقد استثنينا منها معامل القص الذي يلزمه الحساب بطرق خاصة، سوف تتضمن دراستنا نفس الترتيب اعلاه وذلك بطريقة حسابية تعتمد على الحاسوب ولنذكر فقط في الاخير ان درجة الحرارة المعتبرة هنا مساوية الى 0 K.

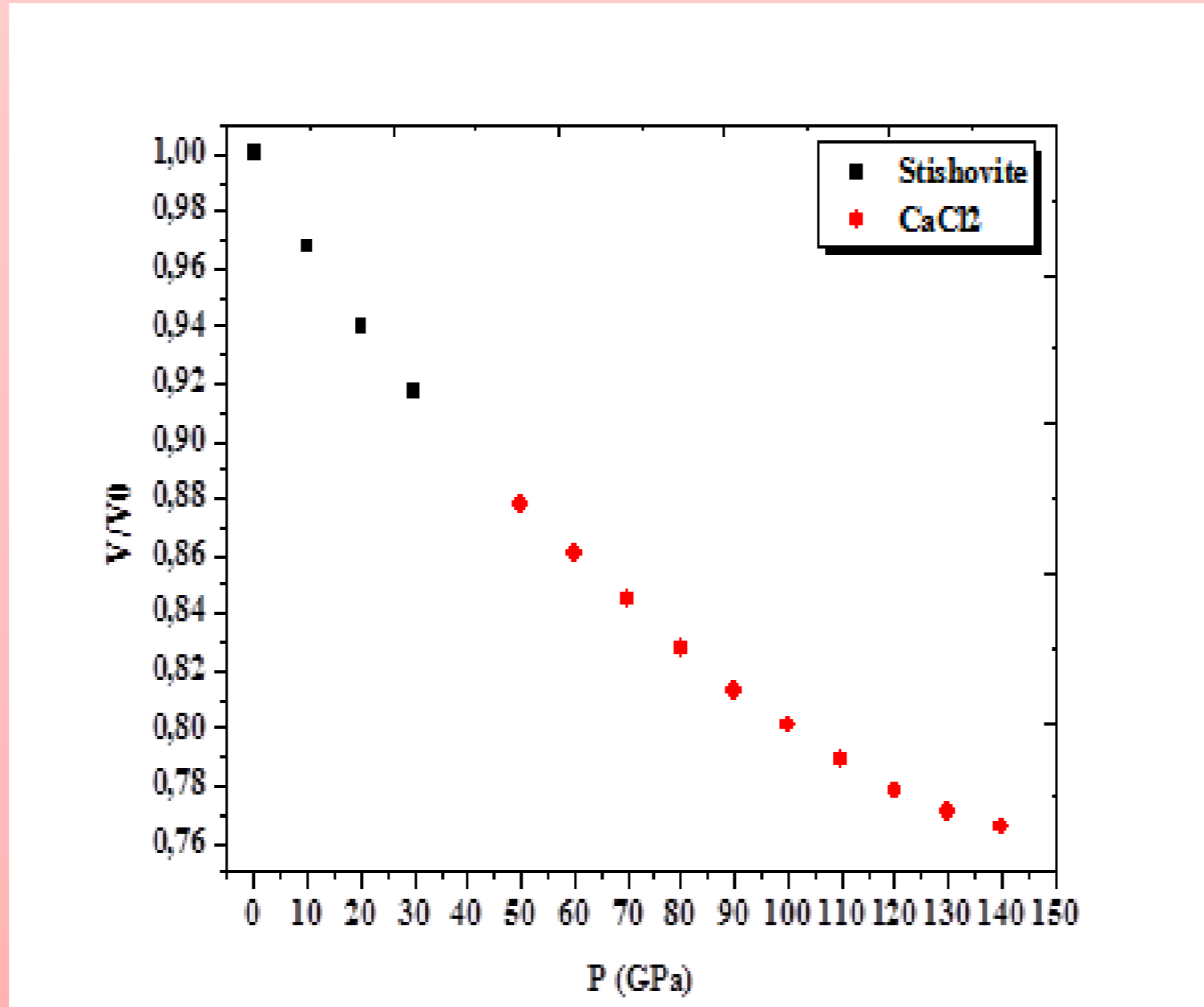
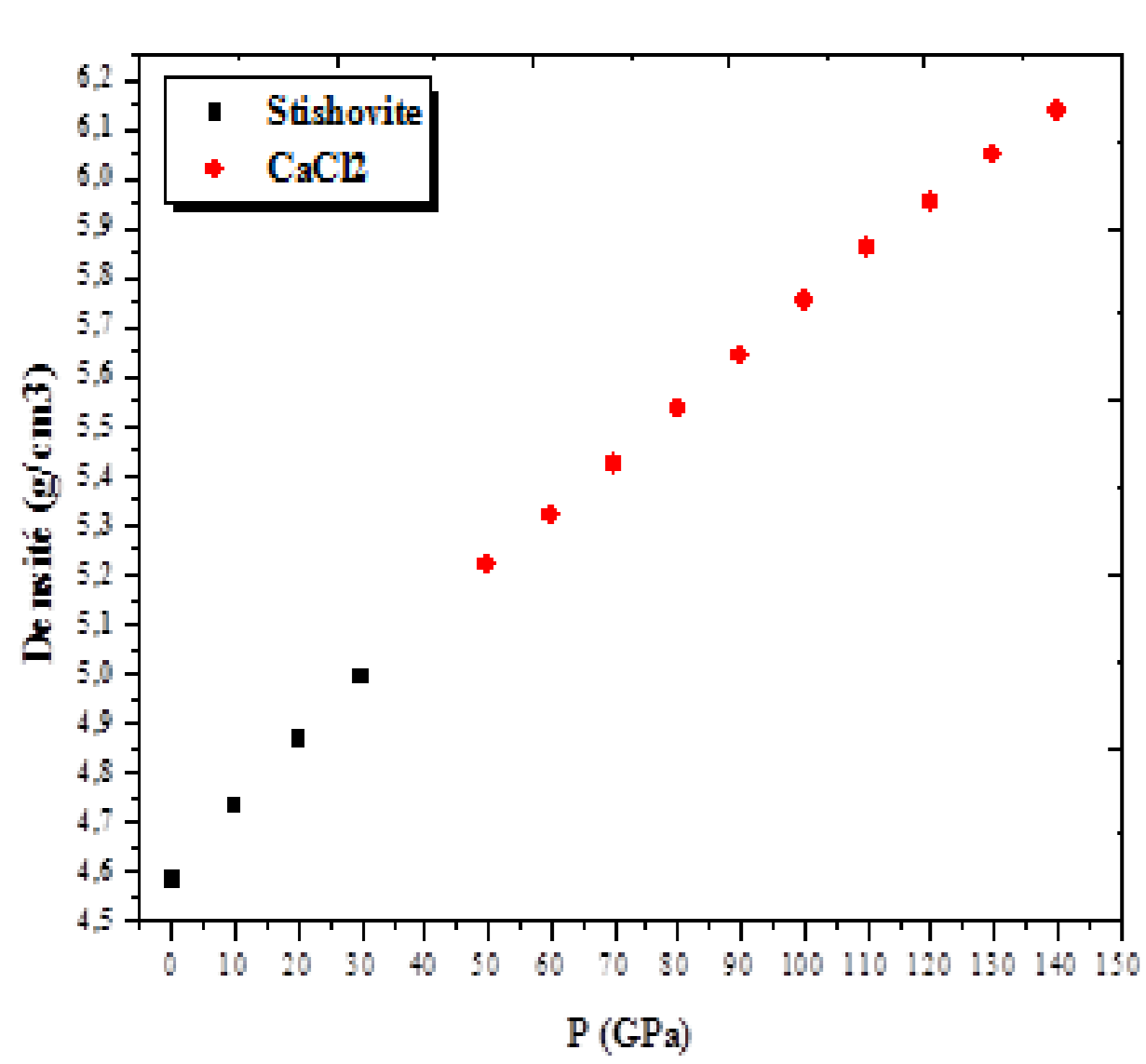
2- طريقة الدراسة: نستعمل من اجل الحساب برنامج CASTEP الذي يحتوي العديد من الطرق الحسابية من اهمها طريقة DFT التي بدورها ايضا تتضمن العديد من التقريبات نستخدم هنا طريقة GGA.



3- نتائج



التحول الطوري: هو دراسة تغير انتالي التشكيل بتغير الضغط بحثا عن البنى المستقرة. عند $T=0$ K يتسازم $\Delta G = H$



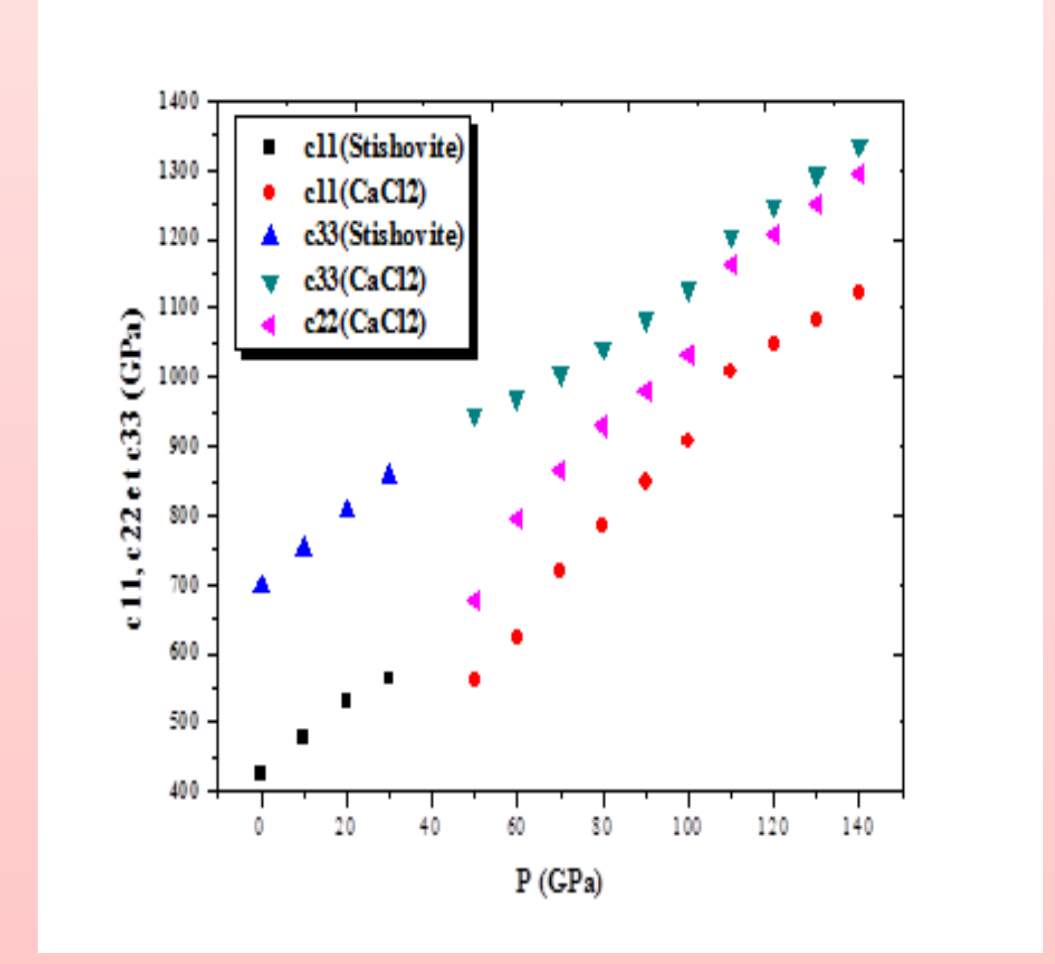
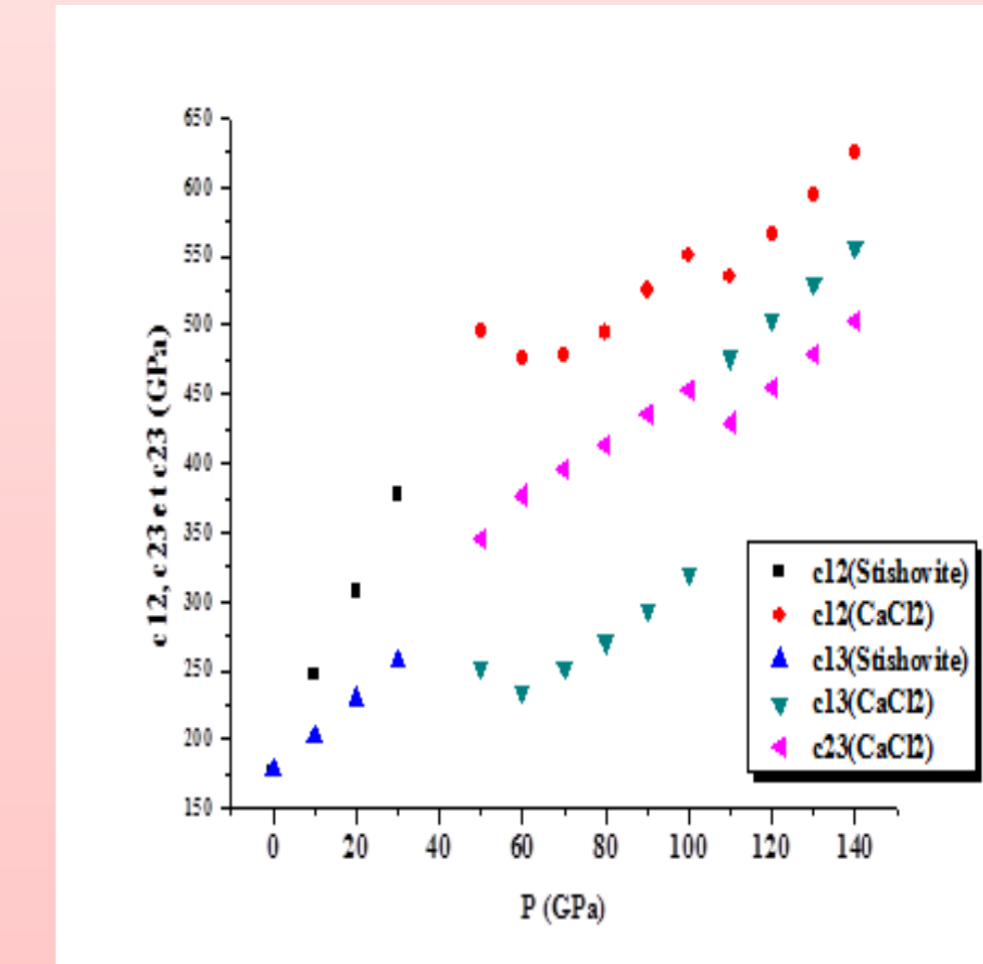
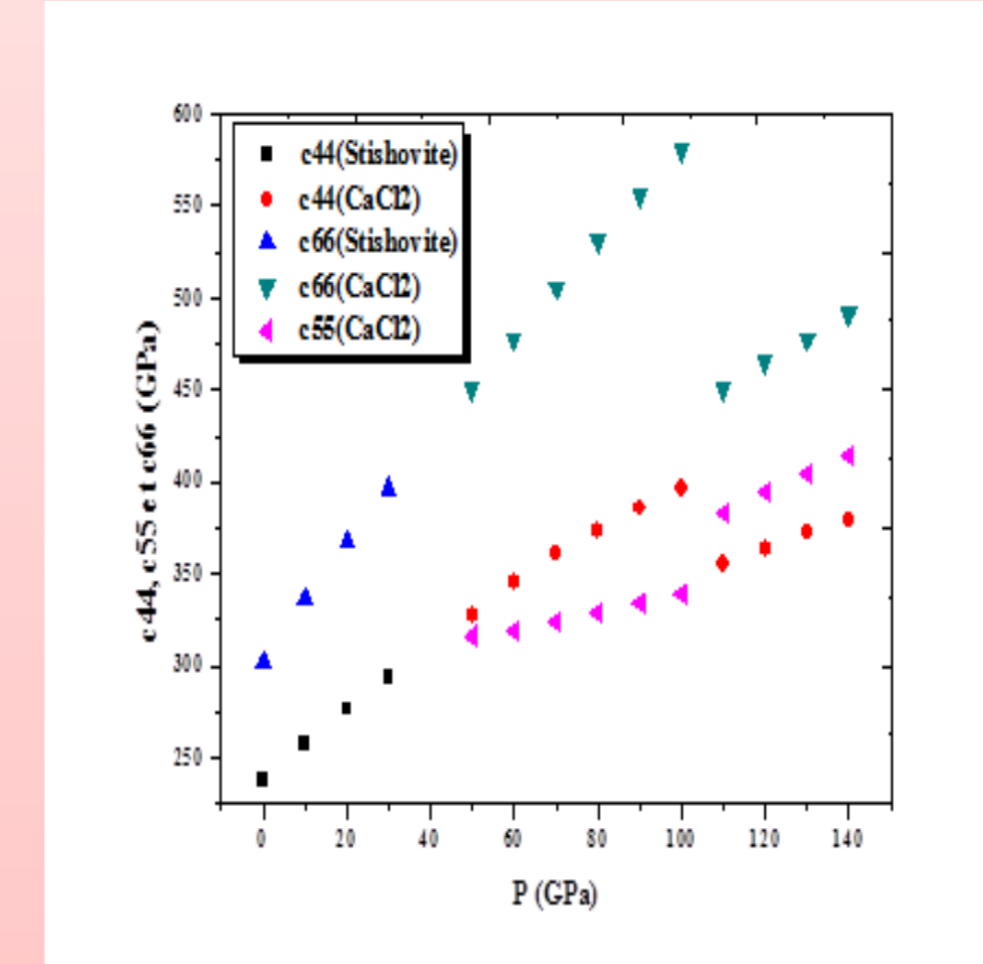
$$\rho = \frac{An}{NaVc}$$

الخصائص البنيوية: نلاحظ ان التحول لا يؤثر على كلا من النسبة الحجمية والكثافة.

4- الخلاصة:

من خلال حساباتنا وجدنا ان طورين فقط يستقران ابتداء من القشرة حتى نهاية الوشاح السفلي وهما Stishovite و Colombite. التحول الطوري لا يؤثر على كل من الخصائص البنيوية و معامل الانضغاط K ولكن يؤثر بشكل واضح على ثوابت المرنة. بتغير الضغط يتغير كل من الكثافة والثابت الحجمي و معامل K، بينما يبقى خطي والباقي من المعاملات يكون غالبا غير خطي.

الخصائص المرئية
a- ثوابت المرنة:



عند الضغط المنخفض يأخذ Stishovite البنية الرباعية، لدينا ستة ثوابت مرنة غير صفيرية اما في المرحلة Orthorhombic من نوع (CaCl2) نجد 18 ثوابت غير صفيرية.

b- معامل الانضغاط الحجمي:

عند Stishovite يزداد معامل الانضغاط يصل الى 35 GPa، ان عدم ثبات قيم K يعود الى التحول الى Stishovite CaCl2.

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

4- مناقشة:

حسب الدراسات السابقة في حساباتنا افترضنا استقرار البنى الثلاث Stishovite، $CaCl_2$ ، Colombite باستعمال انتالي التشكيل حيث $T=0$ K فهو مساوي لطاقة Gips من خلال الشكل نلاحظ ان انتالي التشكيل لبني Stishovite يكون اقل بين 0 و 40 GPa (باعتقاد طريقة نيوتن رافسون لتحديد انعدام الدوال) اذن فان هذه البنية تكون مستقرة في هذا المجال ومن 40 حتى 140 GPa نلاحظ ان انتالي التشكيل لـ $CaCl_2$ هو الاقل اذن فان بنيته مستقرة في هذا المجال اما الطور الثالث Colombite فان انتالي التشكيل له يبقى اعلى عند جميع نقاط مجال دراستنا لذلك فانه لا يستقر، لهذا سوف ندرس بقية الخصائص على حسب ناتج هذا التحول الطوري.

-تنخفض النسبة V/V_0 ببطيء مع زيادة الضغط وتقل من 1 الى 0,89 في المرحلة الاولى ومن 0,89 الى 0,77 في المرحلة الثانية.

-توضح حساباتنا ان كثافة Stishovite و $CaCl_2$ تزدادان خطيا.

-يزيد C_{11} ببطيء مع الضغط حتى 35 GPa ومن ثم ينخفض، عند 40 GPa يظهر انتقال طور Stishovite الى $CaCl_2$.

-عند Stishovite يزداد معامل الانضغاط يصل الى 35 GPa، ان عدم ثبات قيم K يعود الى تحول Stishovite الى $CaCl_2$.

5- المراجع :

- [1] Karki B, L. Stixrude, M.C. Warren, G.J; Ackland, and J. Crain, Ab ignition elasticity of three high-pressure polymorphs of silica. Geophysical Research Letters, 24, 3269–3272, 1997.
- [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] Stixrude L. Elastic constants and anisotropy of $MgSiO_3$ perovskite, periclase, and SiO_2 at high pressure. The core-mantle boundary region. 1998:83–96.
- [4] 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.
- [5] Kumar M. Application of high pressure-high temperature equation of state for elastic properties of solids. Physica B: Condensed Matter. 2002;311:340–7.