جامـــعة قاصـــدي مربـــاح ورقلـــة

كلية الرياضيات و علوم المادة

قسم الفيزياء

مذكرة ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

شعبة: فيزياء

تخصص: فيزياء المواد

من إعداد الطالبة: بقي صفاء

العنـــوان:

دراسة حسابية لسرع موجات المرونة و طاقاتها لأكسيد الكالسيوم في طوره الأول في حال متعدد البلورات و عند عدم تماثل المناحي

نوقشت علنا بتاريخ: 10/ 06/ 2026

أمام اللجنة المكونة من الأساتذة:

عبد اللطيف مامانـو	أستاذ محاضـر ب	جامعة قاصدي مربـــــــاح ورقلة	رئيسـا
رشيـــــد غرياني	أستاذ تعليم عـالي	جامعة قاصدي مربـــــــاح ورقلة	مناقشا
صالـــــح تليلي	أستاذ تعليم عـالي	جامعة قاصدي مربـــــــاح ورقلة	مشرفـا

2026/2025

التشكر

الحمد لله رب العالمين، الذي أنعم علينا بفضله وتوفيقه، ويسر لنا سُبل العلم، و أعاننا على إتمام هذا الجهد البحت.

و في هذه اللحظة التي يتوج فيها هذا العمل، أتوجه بفيض من مشاعر التقدير و الامتنان إلى أستاذي و مشرفي الفاضل تليلي صالح .لم يكن مجرد مشرفٍ أكاديمي، بل كان سندا حقيقيا بتوجيهاته السديدة، و صبره العظيم، و دعمه المعنوي المستمر الذي أضاء لي طريق البحث في أصعب محطاته.

كما يسعدني أن أتقدم بخالص الشكر و التقدير إلى لجنة المناقشة الموقرة .و أثمن غاليا وقتهم الثمين و جهدهم في قراءة هذا البحث، و ملاحظاتهم العلمية الدقيقة التي أعتز بها، و التي ستمنح هذا العمل عمقاً و قيمة أكبر.

و ختاما، أزجي آيات الشكر و الامتنان إلى كل النفوس الطيبة و القلوب المخلصة التي ساندتني في هذا المشوار؛ سواء بكلمة تشجيع، أو بتقديم معلومة، أو بدعم لوجستي وفني. جزاكم الله عني كل خير، و بارك في خطاكم جميعا.

الإهداء

إلى الذين جعلوا من هذا الطريق الوعر ممراً ممكنا، أهدي ثمرة السهر و الجهد..

إلى سَمائي الأولى، و مرفأي الآمن؛ أمي و أبي. إلى من غرسوا في داخلي حب المعرفة، وعلموني أن الأحلام تنال بالصبر لا بالتمني. أهديكم هذا الإنجاز الذي هو في الحقيقة غرس أيديكم، و ثمرة دعواتكم الطاهرة التي كانت تسبق خطاي، و تفتح لي الأبواب المغلقة كلما ضاقت السبل.

إلى زوجي الفاضل و رفيق دربي؛ أتقدم بجزيل الشكر و عظيم الامتنان لمن كان لي نِعم المعين و السند طوال مسيرتي العلمية، فبصبره الدائم، و تفهمه النبيل، و تشجيعه المستمر تذللت كل العقبات، و تحولت الصعاب إلى إنجاز. أهدي إليك هذا العمل تقديرا لدعمك الذي لم ينقطع وثقتك التي كانت دافعي الأول للنجاح

إلى امتداد روحي، و سندي الذي لا يميل؛ إخوتي و أخواتي. من شاركوني قلق البدايـــــــات، و تحملوا معي تقلبات الفكر و المزاج طوال هذه الرحلة، فكانوا لي نعم العضد، و نعم الملجأ الذي ألجأ إليه لأستعيد طاقتي و شغفي.

إلى زوج أختي العزيز، أتقدم بجزيل شكري و امتناني لدعمه المستمر و مساعدته القيّمة التي أنارت لي طريقي في هذا المشوار الأكاديمي، فجزاه الله عني كل خير

إلى الجذور الطيبة، و عزوتي الممتدة؛ أهلي و عائلتي الكبيرة. أولئك الذين أستشعر محبتهم الصادقة دون شروط، و الذين طوّقوني بدعواتٍ خفية في ظهر الغيب، كانت بمثابة طوق النجاة في لحظات الفتور و التعب.

و إلى من أسميهم "هدايا الأيام"؛ أصدقائي الأوفياء. رفقاء السهر، و الذين لم يملوا يوما من الاستماع لطموحاتي و مخاوفي. شكرا لأنكم كنت المرايا الصادقة التي أرى فيها قوتي كلما تعثرت، و لأنكم جعلتم من رحلتي هذه تجربة دافئة و مليئة بالذكريات الجميلة

بقي صفاء

قائمة المحتويات:

الصفحة

التشكر

الإهداء

قائمة المحتويات i

قائمة الأشكال vi

قائمة الجداول viii

مقدمة عامة ix

الفصل الأول

الدراسة النظرية لسرع موجات و طاقات المرونة في المواد البلورية الصلبة

I-1 مقدمـــــة 1

I-2 خصائص المرونة في المواد الصلبة البلورية 1

I-2-1 مفهوم عام للمرونة 1

I-2-2 أهمية المرونـــــة 1

I-2-3 طرق تحديد خصائص المرونة 2

I-2-3-1الطرق التجريبية 3

I-2-3-2 الطرق الحسابية و المحاكاة العددية 3

I-2-4 أهم خواص المرونة 4

I-2-4-1 ثوابت المرونة 4

I-2-4-2 معاملات المرونة 5

I-2-4-3 نسب المرونة 6

I-2-4-4 سرعات الموجات المرونية 7

I-2-4-5 طاقات المرونة 7

I-2-4-6 درجات الحرارة المشتقة من المرونة: 7

I-3 سرع موجات المرونة و طاقاتها المخزنة 8

I-3-1 سرع موجات المرونة 8

I-3-1-1 سرعات الموجات في متعدد البلورات 8

I-3-1-2 سرعات الموجات في أحادي البلور 9

I-3-2 طاقات المرونة المخزنة 9

I-3-2-1 طاقات المرونة في متعدد البلورات: 11

I-3-2-2 طاقات المرونة في أحادي البلور 11

I-3-3 التمثيل ثلاثي الأبعاد لسرع موجات المرونة و طاقات تخزينها 12

I-3-4 أهمية و تطبيقات دراسة سرع الموجات المرونة و طاقات تخزينها 12

الفصل الثاني

أكسيد الكالسيوم CaO و الدراسات السابقة

II-1 مقدمـــــة 14

II-2 عموميات حول أكسيد الكالسيوم 14

II-2-1 أكسيد الكالسيوم 14

II-2-2 الخواص البلورية لأكسيد الكالسيوم 14

II-2-2-1 الطور الأول لأكسيد الكالسيوم 14

II-2-2-2 الطور الثاني لأكسيد الكالسيوم 15

II-2-2-3 أطوار أخرى محتملة لأكسيد الكالسيوم 17

II-2-3 الخصائص الفيزيائية و الكيميائية 17
II-2-4 الأهمية و التطبيقات 18
II-2-4-1 المجالات التطبيقية 18
II-2-4-2 الأهمية العلمية و الصناعية 18
II-3 الدراسات السابقة لأكسيد الكالسيوم 18
II-3-1 الدراسات المبكرة (1972-1998) 19
II-3-2 الدراسات المتوسطة (2001-2010) 20
II-3-3 الدراسات الحديثة (2013-2024) 21
II-4 نقائص الدراسات السابقة و تقديم الفجوة العلمية للبحث 23

الفصل الثالث

دراسة سرع موجات و طاقات المرونة في أكسيد الكالسيوم متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية

III-1 مقدمـــــة 24
III-2 طريقة الدراسة 24
III-2-1 الحساب الأولي 25
III-2-1-1 الأدوات المعتمدة في الحساب الأولي 25
III-2-1-2 المعاملات الأولية في الدراسة و كيفية حسابها 27
III-2-2 الحساب التكميلي 29
III-3 عرض و مناقشة نتائج الحساب في حال متعدد البلورات 29
III-3-1 سرع موجات المرونة في أكسيد الكالسيوم 29
III-3-1-1 سرع موجات المرونة في أكسيد الكالسيوم متعدد البلورات 29
III-3-1-2 سرع موجات المرونة الطولية في أكسيد الكالسيوم في أهم الإتجاهات 30

III-3-1-3 سرع موجات المرونة العرضية في أكسيد الكالسيوم في أهم الإتجاهات 32

III-3-2 طاقات المرونة في أكسيد الكالسيوم 34

III-3-2-1 طاقات المرونة في أكسيد الكالسيوم متعدد البلورات 34

III-3-2-2 طاقات المرونة الطولية في أكسيد الكالسيوم في أهم الإتجاهات 35

III-3-2-3 طاقات المرونة القصية في أكسيد الكالسيوم في أهم الإتجاهات 37

III-3-2-4 طاقات المرونة القصية الكلية في أكسيد الكالسيوم في أهم الإتجاهات 38

III-3-2-5 طاقات المرونة الكلية في أكسيد الكالسيوم في أهم الإتجاهات 40

الفصل الرابع

دراسة التمثيل ثلاثي الأبعاد لسرعات الموجات و الطاقة المرنة

IV-1 مقدمـــــة 42

IV-2 الأساس الفيزيائي و النظري 42

IV-2-1 التمثيل الاتجاهي في الفضاء البلوري 42

IV-2-2 مصفوفة كريستوفل ثلاثية الأبعاد 42

IV-2-3 الحساب ثلاثي الأبعاد للسرعات و السطوح المجسمة 43

IV-2-4 الطاقة المرنة وتوزيعها الاتجاهي 43

IV-2-5 الأنيسوتروبية الصوتية و الاتجاهات البلورية الرئيسية 43

IV-2-6 خرائط الاستقطاب 43

IV-3 عرض و مناقشة نتائج دراسة ثلاثية الأبعاد 44

III-3-1 سرع موجات المرونة في أكسيد الكالسيوم 44

III-3-1-1 سرعة الموجات الطولية في أكسيد الكالسيوم ثلاثية الأبعاد 44

III-3-1-2 سرعة الموجات العرضية في أكسيد الكالسيوم ثلاثية الأبعاد 46

III-3-2 طاقات المرونة في أكسيد الكالسيوم 49

III-3-2-3-1 طاقة المرونة الحجمية في أكسيد الكالسيوم ثلاثية الأبعاد 49

III-3-2-3-2 طاقة المرونة القصية في أكسيد الكالسيوم ثلاثية الأبعاد 49

III-3-2-3-3 طاقة المرونة الكلية في أكسيد الكالسيوم ثلاثية الأبعاد 55

الخلاصة 58

المراجع البيداغوجية

قائمة الأشكال:

الصفحة

الشكل(I-1): العلاقة بين الإجهاد و التشوه في حالة المرونة حسب هوك	2
الشكل(I-2): عرض انتشار الأمواج المرونية في المادة	8
الشكل(II-1): بنية ملح الطعام و معظم الأكاسيد مثل أكسيد الكالسيوم	15
الشكل(II-2): بنية كلور السيزيوم و معظم الأكاسيد مثل أكسيد الكالسيوم في شروط تيرموديناميكية أخرى	16
الشكل(III-1): تغيرات قيم سرع موجات المرونة الطولية (الجزء العلوي) و العرضية (الجزء السفلي) في CaO متعدد البلور عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa	30
الشكل(III-2): تغيرات قيم سرع موجات المرونة الطولية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa	32
الشكل(III-3): تغيرات قيم سرع موجات المرونة العرضية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa	33
الشكل(III-4): تغيرات قيم طاقات المرونة الحجمية، القصية، القصية الكلية و الكلية في CaO متعدد البلورات عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa	35
الشكل(III-5): تغيرات قيم طاقات المرونة الحجمية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa	36
الشكل(III-6): تغيرات قيم طاقات المرونة القصية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa	37
الشكل(III-7): تغيرات قيم طاقات المرونة القصية الكلية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa	38
الشكل(III-8): تغيرات قيم طاقات المرونة الكلية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa	40

الشكل(IV-1): تغيرات قيم سرعة موجة المرونة الطولية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية وفي الإتجاهات [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa 45

الشكل(IV-2): تغيرات قيم سرعة موجة المرونة العرضية العمودية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية وفي الإتجاهات [100] ، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa 47

الشكل(IV-3): تغيرات قيم سرعة موجة المرونة العرضية الأفقية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية وفي الإتجاهات [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa 48

الشكل(IV-4): تغيرات قيم طاقة المرونة الحجمية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية وفي الإتجاهات [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa 50

الشكل(IV-5): تغيرات قيم طاقة المرونة القصية العمودية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية وفي الإتجاهات [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa 51

الشكل(IV-6): تغيرات قيم طاقة المرونة القصية الأفقية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية وفي الإتجاهات [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa 52

الشكل(IV-7): تغيرات قيم طاقة المرونة القصية الكلية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية وفي الإتجاهات [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa 53

الشكل(IV-8): تغيرات قيم طاقة المرونة الكلية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية وفي الإتجاهات [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa 56

قائمة الجداول:

الصفحة

الجدول(II-1): الخصائص البنيوية لأكسيد الكالسيوم (CaO) في الطورين (NaCl) B1 و B2 (CsCl) في الشروط التيرموديناميكي. **16**

الجدول(II-2): أهم الخواص الكميائية لأكسيد الكالسيوم (CaO). **17**

الجدول(III-1): قيم المعاملات الضرورية المحسوبة بواسطة برنامج CASTEP؛ قيم ثوابت المرونة، معاملي المرونة و كثافة الأكسيد عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa. **28**

الجدول(IV-1) القيم الدنيا و القصوي لسرعات الموجات المرونة و طاقاتها المحسوبة من تحديدها ثلاثي البعد. **57**

مقدمـــة عامـــة:

يشكل السلوك المرن حجر الزاوية في فهم الاستجابة الميكانيكية و الديناميكية للمواد الصلبة، إذ يمثل رابطا فيزيائيا مباشرا يربط بين الترتيب الذري الداخلي و التشوهات الخارجية المرصودة على المستوى العياني. و في إطار فيزياء المواد المكثفة، لا ينحصر الاهتمام بظاهرة المرونة عند قياس مقاومة التشوه فحسب، بل يتجاوز ذلك إلى استكشاف طبيعة التفاعلات بين الذرات، و ثبات التراكيب البلورية تحت المؤثرات المختلفة، و آليات تبديد الطاقة الحركية داخل الشبكة. و يعد هذا الفهم أساسيا لتطوير نماذج تنبؤية دقيقة لسلوك المواد في البيئات المتطرفة، فضلا عن دعم التطبيقات الهندسية و الجيوفيزيائية المتطورة.

تتجلى هذه الخصائص من خلال منظومة من المعاملات الكمية التي تحدد علاقة المادة بالإجهاد و الانفعال ضمن المنطقة الخطية، و في مقدمتها الثوابت المرنة المستقلة التي تعكس مدى صلابة الشبكة تجاه أنماط التشوه المتنوعة. و يندرج تحت هذه المنظومة معامل الإنضغاط الحجمي المسؤول عن مقاومة التغير في الأبعاد، و معامل القص المعبر عن مقاومة الانزياح الزاوي.

و ينعكس السلوك المرن للمادة بشكل مباشر على ديناميكية انتشار الموجات، و التي تنقسم بدورها إلى نمطين أساسيين: موجات ضغطية ترتبط بالتقلص و التمدد الحجمي، و موجات قصية تنشأ عن الانزياحات الجانبية. و تعد سرعة انتقال هذه الموجات معيارا دقيقا و حساسا للخصائص المرنة و الكثافة، إذ تكشف عن متانة الروابط الذرية و فعالية انتقال الطاقة الميكانيكية عبر التركيب البلوري. و يحمل تتبع تباين هذه السرعات مع تغير الضغط و الاتجاه البلوري دلالات بالغة الأهمية في تحليل الإشارات الزلزالية، و فهم سلوك المعادن في باطن الكواكب، و تقييم متانة الهياكل الهندسية المعرضة لأحمال متغيرة.

و بموازاة عملية الانتشار الموجي، تختزن المادة المشوهة ضمن نطاقها المرن كمية من الطاقة الكامنة التي تتوافق رياضيا مع المساحة المحصورة تحت منحنى الإجهاد و الانفعال القابل للاسترداد. و يمكن تفكيك هذه الطاقة إلى مركبتين طولية و عرضية تعكسان نمط توزع القوى داخل وحدة الخلية، و تعد مؤشرا ديناميكيا و حراريا بالغ الأهمية لقدرة المادة على امتصاص الصدمات، و مقاومة الإجهادات الدورية، و الحفاظ على تكاملها البنيوي قبل الوصول إلى عتبة الخضوع أو التحول الطوري. و يوفر تتبع توزيع هذه الطاقات و اتجاهاتها رؤى تحليلية عميقة حول آليات تبديد الطاقة، و إعادة تنظيم الإجهادات الداخلية، و الحدود الحرجة لفقدان الاستقرار المرن في البلورات تحت تأثير الضغط.

عادة ما تشتق قيم سرعات الموجات المرونية و طاقات تخزينها من الخواص الاتجاهية الدقيقة عبر خوارزميات المتوسطات، مما يتيح تمثيلا واقعيا لسلوك العينات متعددة الحبيبات الشائعة في الاستخدامات الصناعية و الطبيعية. كما يمكن تحديد قيمها إتجاهيا بشكل بسيط من دون إعتبار عدم تماثل المناحي، الذي يظهر أكثر بحلول معادلات كريستوفل التي تحدد قيم السرعات في جميع الإتجاهات، و بالتالي يمكن تمثيلها في فضاء ثلاثي الأبعاد مع إبراز واضح لمساقطها على أوجه الخلية، كما يمكن تحديد منحنيات تقاطعها مع المستويات البلورية الأساسية.

في هذا السياق، تسعى الدراسة الحالية إلى تقديم تحليل كمي و منهجي للخصائص المرنة و الديناميكية لأكسيد الكالسيوم في طوره الأول تحت سلسلة من الضغوط الهيدروستاتيكية المتصاعدة، مع التركيز بشكل خاص على حساب سرعات الموجات المرنة و قيم طاقات التشوه المخزنة في كل من الوسط متعدد الحبيبات و المحاور البلورية الأساسية. و تعتمد منهجية العمل على محاكاة المبادئ الأولية باستخدام نظرية دالة الكثافة، مقترنة بتقريب التدرج المعمم و الدالة الوظيفية المُحسّنة للمواد الصلبة، عبر حزمة CASTEP المدمجة في بيئـــــــــة Materials Studio . و يضمن هذا النهج استخراجا دقيقا للثوابت المرنة الأولية و الكثافة، و التي تدخل مباشرة في الصيغ التحليلية المنظمة لانتشار الموجات و تخزين الطاقة.

يعد الفصل الأول الركيزة المفاهيمية و النظرية للبحث، حيث يرتكز على الأسس الفيزيائية الناظمة للمرونة البلورية، و صيغة هوك المعممة، و معايير الثبات الميكانيكي، و آليات انتقال الموجات المرنة و علاقة سرعاتها بالخصائص العيانية و التوجه البلوري، فضلا عن الصياغة الديناميكية الحرارية لطاقات التشوه المخزنة و تصنيفها الميكانيكي. كما يتضمن استعراضا موجزا للتقنيات التجريبية و الحاسوبية المستخدمة في تقييم المرونة تحت الضغط، مع تسليط الضوء على التطور التاريخي و المنطقي لنظرية دالة الكثافة و تقريبات التبادل و الارتباط التي شكلت العمود الفقري لمحاكاة المواد المكثفة الحديثة.

في المحور الثاني، تتطبق هذه الأطر النظرية بشكل مباشر على نظام أكسيد الكالسيوم، عبر مراجعة نقدية شاملة للأدبيات العلمية السابقة التي عالجت مرونة هذا المركب تحت الضغط، مع رصد الثغرات المنهجية التي يسدها هذا العمل. و يعرض الفصل تحليلا مفصلا للبارامترات البنيوية الأساسية و المعتمدة على الضغط، بما في ذلك طول الحافة الشبكية، و حجم الخلية، و الكثافة الكتلية، و معادلة الحالة، بالإضافة إلى استخراج الثوابت المرنة المستقلة، و معاملات الحجم و القص، و عامل التباين المرن، و التحقق الدقيق من استقرار الطور البلوري وفقا لشروط المرونة الميكانيكية. و يشكل هذا الجزء قاعدة بيانات موحدة و موثوقة تمهيدا للانتقال إلى التحليل الديناميكي.

يتعمق الفصل الثالث في الجانب الديناميكي و الكمي للدراسة، مقدّما عرضاً منظما و دقيقا لسرعات الموجات الطولية و العرضية، و مقادير طاقات المرونة بمركباتها المختلفة في وسط أكسيد الكالسيوم متعدد البلورات، مصحوبا بمقارنة تحليلية مع القيم المحسوبة في الإتجاهات البلورية الأساسية عند مستويات ضغط محددة. و يناقش الفصل الدلالات الفيزيائية الكامنة خلف هذه النتائج، مثل تقوية الروابط الذرية تحت الانضغاط، و تقارب القيم الاتجاهية مع نظيرتها العيانية، و هيمنة المكون الطولي على الطاقة الكلية. و يسهم ذلك في بناء تصور متكامل لانتقال المادة من سلوك بلوري اتجاهي دقيق إلى استجابة شبه متماثلة على المستوى العياني مع ارتفاع الضغوط.

يضفي الفصل الرابع بعدا هندسيا و مكانيا على التحليل، من خلال نمذجة الأسطح ثلاثية الأبعاد التي تصف توزع سرعات الموجات و طاقات المرونة في الفضاء الاتجاهي، مدعومة بمقاطع مستوية ثنائية الأبعاد و منحنيات تقاطع تظهر بدقة طبيعة التباين المرن حول محاور التماثل. و تهدف هذه المقاربة التصويرية المتقدمة إلى كشف آليات تحول الأسطح الكروية المثالية إلى تشكيلات إهليلجية أو غير منتظمة مع زيادة الانضغاط، و توفير أداة بصرية و كمية فعالة لرصد المسارات المفضلة لانتقال الطاقة، و تحديد الاتجاهات البلورية ذات الصلابة أو اللدونة القصوى تحت الظروف المتطرفة.

تختتم الأطروحة بملخص شامل يجمع أبرز الاستنتاجات الكمية و الفيزيائية التي أسفرت عنها المحاكاة، مؤكدا على دقة المنهج الحسابي و تطابق مخرجاته مع الثوابت الفيزيائية المعروفة، مع طرح مقترحات تطبيقية لاستثمار هذه البيانات في النمذجة الجيوفيزيائية، و هندسة المواد السيراميكية المتقدمة، و معايرة مجسات الضغط العالي. و في الختام، تفتح الدراسة مسارات بحثية مستقبلية تدعو إلى دمج تأثيرات درجة الحرارة، و دراسة تأثير العيوب الشبكية و حدود الحبيبات على الديناميكا المرنة، و استكشاف عتبات التحول الطوري عند ضغوط فائقة، بما يضمن استمرارية التطوير العلمي لفيزياء المواد في البيئات القاسية.

الفصل الأول:

الدراسة النظرية لسرع موجات و طاقات المرونة في المواد البلورية الصلبة

I-1 مقدمـــــة:

يهدف هذا الفصل إلى تأطير الأسس الفيزيائية و الرياضية الناظمة لسلوك المواد الصلبة البلورية تحت التشوهات المرنة، بدءا من التناظر الشبكي وصولا الى ديناميكية انتشار الموجات و تخزين الطاقة. يعرض فيه الإطار النظري لقانون هوك المعمم، و تأثير التماثل البلوري على اختزال ثوابت المرونة، و منهجيات القياس التجريبية و الحسابية، مع تذكير بأهم خواص المرونة و درجات الحرارة المنبثقة منها. ليركز أكثر حول سرعات موجات المرونة و طاقات تخزينها، ذلك بتحليل انتشار الموجات و توزع طاقات التشوه في الأوساط متعددة البلورات و الاتجاهات البلورية المفردة و كيفية تمثيلها في ثلاث أبعاد، ختاما بأبرز تطبيقاتها في شتى الميادين العلمية.

I-2 خصائص المرونة في المواد الصلبة البلورية:

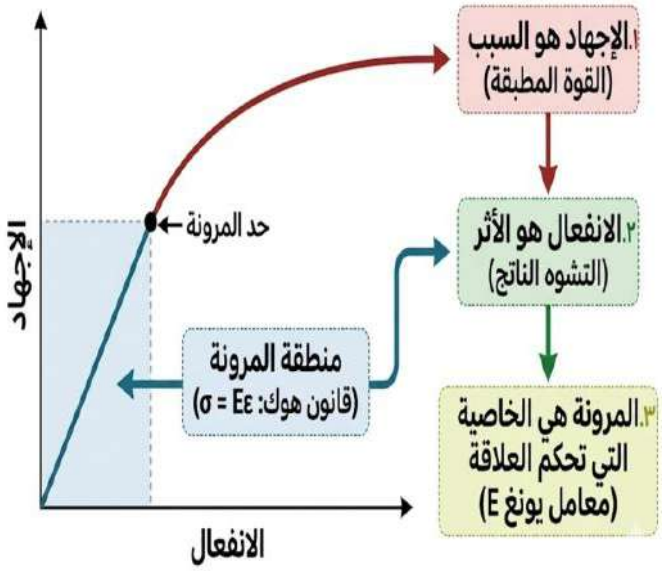
I-2-1 مفهوم عام للمرونة:

تعرف المرونة في المواد الصلبة بقدرتها على استعادة أبعادها الأصلية بعد زوال المؤثرات الخارجية، شريطة بقاء التشوه ضمن النطاق الخطي العكوس. على المستوى المجهري، ينشأ هذا السلوك من إزاحة الذرات أو الأيونات حول مواضع توازنها الشبكي، حيث تتصرف الروابط الكيميائية كنوابض خطية تخضع لقوى استرجاعية تتناسب طرديا مع الإزاحة وفق تقريب التوافقي. و تترجم هذه الاستجابة الذرية إلى علاقات عيانية تربط موتر الإجهاد σ_{ij} بموتر الانفعال ε_{ij} (أنظر الشكل(I-1) أدناه)، مما يجعل الخصائص المرنة مؤشرا دقيقا لقوة الترابط البيني، و كثافة الشحنة الإلكترونية، و استقرار الطور البلوري تحت الظروف الخارجية المتغيرة [01].

I-2-2 أهمية المرونـــــة:

تكتسب نظرية المرونة أهمية استثنائية على المستويين النظري و التطبيقي، إذ تشكل الإطار المرجعي الذي تبنى عليه معظم نماذج ميكانيكا المواد و الهياكل الهندسية. فمن الناحية التصميمية، تسمح النظرية للمهندسين التنبؤ بتوزيع

الإجهادات و الانفعالات في العناصر الإنشائية (الكمرات، والصفائح، الهياكل القشرية) تحت ظروف تشغيلية متنوعة، مما يضمن تحقيق معايير الأمان، و منع الإعياء المبكر، و تحسين كفاءة استخدام المواد [02, 03]. و في مجالات متقدمة مثل هندسة الطيران و المركبات الفضائية، تستخدم حلول المرونة في تحليل تركيز الإجهاد حول الثقوب و الشقوق، و تصميم هياكل خفيفة الوزن تتحمل أحمالا ديناميكية عالية [04]. كما تلعب النظرية دورا محوريا في علوم المواد الحديثة، حيث تربط بين الخصائص الماكروسكوبية المرنة و التفاعلات الذرية على المستوى الميكروسكوبي، مما يدعم تطوير مواد مركبة، و سبائك فائقة، و مواد نانوية ذات استجابات ميكانيكية مبرمجة [05]. و على صعيد البحث العلمي، تُعد نظرية المرونة نقطة الانطلاق لتطوير نماذج أكثر تعقيدا تشمل اللدونة، و التفكك، و الانزلاق، و الاقترانات المتبادلة (كالكهروضغطية و المرونة الحرارية)، مما يوسع آفاق الابتكار في التقنيات الناشئة [06, 07]. لذا، يبقى إتقان أسس هذه النظرية شرطا أساسيا لأي باحث أو مهندس يسعى إلى فهم عميق لسلوك المواد، و المساهمة في تقدم علوم الهندسة و التصنيع المستدام.



الشكل(I-1): العلاقة بين الإجهاد و التشوه في حالة المرونة حسب هوك [02]

I-2-3 طرق تحديد خصائص المرونة:

يعد التحديد الدقيق لخواص المرونة في المواد الصلبة بمثابة عملية متعددة المنهجيات، تعتمد على تكامل بين القياسات التجريبية المباشرة و النمذجة الحسابية المتقدمة. وفيما يلي عرض مُفصل لأهم هذه الطرق:

I-2-3-1الطرق التجريبية:

أ)- اختبارات الشد و الضغط المحورية (Uniaxial Testing): تجرى وفق معايير ASTM E8/E8M و ISO 6892 لاستخراج معامل يونغ، و نسبة بواسون، و حد المرونة من المنحنى الإجهاد-انفعال في المنطقة الخطية، و تعد المرجع الأساسي للمواد الهندسية التقليدية [08 ,09].

ب)- تقنيات الموجات فوق الصوتية (Ultrasonic Pulse-Echo/Through-Transmission): تقيس سرعات انتشار الموجات الطولية و العرضية في العينة، و تحسب معاملات المرونة الديناميكية (معامل القص، معامل الحجم) عبر العلاقات الموجية التحليلية، و تتميز بدقتها العالية و ملاءمتها للمواد الهشة و الشفافة [08 ,10].

ج)- تشتت بريلوين الضوئي (Brillouin Light Scattering): تقنية بصرية غير تلامسية تقيس ترددات الفوتونات الصوتية السطحية أو الحجمية، مما يتيح تحديد الثوابت المرنة في البلورات الأحادية، و الأغشية الرقيقة، و المواد النانوية بدقة ميكروسكوبية [11].

د)- تقنية النانو- تغلغل (Nanoindentation): تعتمد على تحليل منحنى الحمل-الإزاحة أثناء اختراق مسبار دقيق للسطح، و تستخدم لاستخراج معامل يونغ المحلي وصلادة السطح في المناطق ذات الحجم المحدود، الأغشية الرقيقة، أو الطور الواحد في المواد متعددة الأطوار، باستخدام نموذج أوليفر-فار [12].

ه)- قياسات الرنين الميكانيكي (Resonant Ultrasound Spectroscopy - RUS): تُحدد الثوابت المرنة الكاملة للمواد متباينة الخواص عبر تحليل ترددات الرنين الطبيعية لعينة ذات هندسة معروفة، و تعد مثالية للبلورات المفردة و المواد ذات الخواص الاتجاهية المعقدة.

I-2-3-2 الطرق الحسابية و المحاكاة العددية:

أ)- حسابات المبادئ الأولى (First-Principles/DFT): تستخدم نظرية دالة الكثافة (DFT) ضمن تقريبات GGA أو LDA لحساب استجابة الطاقة أو الإجهاد لتشوهات شبكية مطبقة، مما يتيح التنبؤ بالثوابت المرنة البلورية من البنية الإلكترونية دون مدخلات تجريبية [13 ,14].

ب)- ديناميكا الجزيئات (Molecular Dynamics - MD): تحاكي حركة الذرات أو الجزيئات تحت تأثير كمونات بينية (Potentials) دقيقة، و تستخدم لاستخراج الخواص المرنة في الأنظمة الأكبر حجما، عند درجات حرارة محددة، أو في وجود عيوب بنيوية، مع إمكانية دراسة الاعتماد على معدل التشوه [15].

ج)- طرق العناصر المحددة (Finite Element Method - FEM): تطبق لحل معادلات التوازن المرن في هياكل معقدة الهندسة أو ظروف تحميل غير تقليدية، و تستخدم على نطاق واسع في التصميم الهندسي و تحليل الإجهاد في المكونات الإنشائية [16].

د)- نماذج التجانس و الميكانيكا التحليلية (Homogenization & Micromechanics): تربط الخواص المرنة الفعالة للمواد المركبة و متعددة الأطوار بخواص المكونات الفردية و توزيعها الهندسي، عبر نماذج مثـــل Mori-Tanaka، Self-Consistent أو Voigt-Reuss-Hill، و تعد أساسا لتصميم مواد مركبة مخصصة [16].

هـ)- نماذج المرونة متدرجة الرتبة (Strain Gradient/Higher-Order Elasticity): تدمج تأثيرات الطول الداخلي المميز للمادة في دالة الطاقة المرنة، مما يتيح نمذجة الظواهر الحجمية (Size Effects) في المواد النانوية، الرقائق الدقيقة، و الهياكل ذات الأبعاد الميكروسكوبية.

و بذلك، يشكل التكامل المنهجي بين هذه المنهجيات التجريبية و الحسابية إطارا متينا لفهم، و تصميم، و تحسين الخواص المرنة للمواد المتقدمة، مع ضمان التحقق من الصحة (Validation) عبر المقارنة المتبادلة بين النتائج المقاسة و المحسوبة.

I-2-4 أهم خواص المرونة:

هناك العديد من القيم الفيزيائية التي يمكن إعتمادها لتمثل المرونة أو جزء منها، هذه القيم يمكن تقسيمها إلى:

I-2-4-1 ثوابت المرونـــــــة:

تعد الثوابت المرونة المدخلات الأساسية و المباشرة لحساب جميع قيم المرونة الأخرى أو ما يسمى بالخصائص الميكانيكية العيانية [18]، في المواد الصلبة البلورية تحدد من قانون هوك. ففي الصيغة العامة للمواد متباينة الخواص، يربط قانون هوك المعمم بين الإجهاد و الانفعال عبر مؤثر مرونة من الرتبة الرابعة C_{ijkl} يحتوي نظريا على 81 مركبة، تختزل إلى 21 مركبة مستقلة بفعل تناظر الموترات و تماثل الطاقة [18]:

$$\boldsymbol{\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}} \qquad (\mathbf{I-1})$$

و العلاقة العكسية عبر موتر المرونة العكسي:

$$\boldsymbol{\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\,\sigma_{kl}} \qquad (\mathbf{I-2})$$

وضعت هذه النظرية في القرن السابع عشر ، ثم تطورت رياضيا على يد كوشي وغرين في القرن التاسع عشر لوصف المرونة في المواد المتبلورة [02]. و قد وضعت صيغتها الدقيقة و الأخيرة لهذه الاختزالات على يد فويت في نهاية القرن التاسع عشر [08].

و يسهل استخدام ترميز فويت (Voigt Notation) تمثيل الموتر كمصفوفة متماثلة:

$$\begin{pmatrix}\sigma_1\\ \sigma_2\\ \sigma_3\\ \sigma_4\\ \sigma_5\\ \sigma_6\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16}\\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26}\\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36}\\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46}\\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56}\\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_1\\ \varepsilon_2\\ \varepsilon_3\\ \varepsilon_4\\ \varepsilon_5\\ \varepsilon_6\end{pmatrix} \qquad (I-3)$$

و يلعب التناظر البلوري دورا محوري في اختزال عدد الثوابت المستقلة؛ فبينما يتطلب النظام ثلاثي الميل 21 ثابتاً، يكتفي النظام المكعب ذو التناظر العالي بثلاثة ثوابت فقط هي؛ C_{11}، C_{12}، و C_{44}، حيث تمثل هذه الثوابت المعاملات الأساسية للنظام المكعب:

C_{11}: - يمثل مقاومة الانضغاط المحوري على المحور [100].

C_{12}: - يمثل اقتران الانفعال بين محاور متعامدة.

C_{44}: - يمثل مقاومة الانزياح القصي في المستوى (100) باتجاه [010].

و ينعكس هذا الاختزال مباشرة على معادلة كريستوفيل الحاكمة لانتشار الموجات المرنة [19]:

$$(C_{ijkl}n_jn_l - \rho\vartheta^2\delta_{ik})u_k^0 = 0 \qquad (I-4)$$

حيث n متجه الانتشار، ρ الكثافة، ϑ سرعة الطور، و u^0 سعة الاستقطاب. و يستخرج من حل هذه المعادلة الذاتية ثلاث أنماط للموجات: شبه طولية (Quasi-P) و نمطان قصيان متعامدان (Quasi-S1, Quasi-S2).

I-2-4-2 معاملات المرونـــــــة:

تشتق عبر تطبيق متوسطات فويت-روس-هيل (Voigt-Reuss-Hill averages) التي تمثل المعيار الذهبي في ربط الخصائص المجهرية بالاتجاهية بالاستجابة العيانية للمواد متعددة الحبيبات، و هي منهجية تطورت تاريخيا عبر ثلاث محطات أساسية: حد فويت للصلابة العليا عام 1928، وحد روس للمرونة الدنيا عام 1929، ثم المتوسط الحسابي الذي اقترحه هيل عام 1952 لدمج الحدين في قيمة واحدة أكثر تمثيلا للواقع الفيزيائي [20]. و هي؛ التمددية، و مقلوبها الإنضغاط الحجمي، القص، يونغ، معاملي لامي (الثاني منهما في البنية المكعبة مساوي لمعامل القص)، ضغط كوشي،

معامل موجة القص و صلادة (و منها صلادة فيكرس و الصلادة المجهرية). في دراستنا نهتم فقط بمعامل الإنضغاط الحجمي (Bulb Modulus - B) و معامل القص (Shear Modulus - G)، لذلك نسهب في شرحهما، حيث:

مـــــعاملي المرونة B و G: يتم استخلاص مـــــعاملي الحجـــم و القـــص اللذين يصفان الخصائص متماثلة المناحي للمواد متعدد البلورات و بالنسبة للمواد المكعبة، أين يحسب معامل الحجم مباشرة من العلاقة:

$$\boldsymbol{B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}} \qquad (\mathbf{I-5})$$

نظراً لتماثله التام في جميع الاتجاهات، بينما يستخلص معامل القص عبر المتوسط الحسابي بين حد فويت (الصلابة العليا) و حد روس (المرونة الدنيا) وفق العلاقة:

$$\boldsymbol{G_H = \frac{G_V + G_R}{3}} \qquad (\mathbf{I-6})$$

حيث Gv هو قيمة تقريب فويت، التي تحسب من خلال العلاقة التالية [21]:

$$\boldsymbol{G_V = \frac{1}{5}\left(C_{11} - C_{12} + 3C_{44} \right)} \qquad (\mathbf{I-7})$$

أما في تقريب روس فيحسب G_R من العلاقة التالية [22]:

$$\boldsymbol{G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{3(C_{11} - C_{12}) + 4C_{44}}} \qquad (\mathbf{I-8})$$

I-2-4-3 نسب المرونـــــــــة:

نسب المرونة هي أيضا متنوعة، فهي تتمثل في؛ نسبة بواسون، بواغ (أو تطبيعها)، كلينمان و التباين . هذا الأخير أي التباين يتمثل في؛

أ)- **عامل زينر**: معامل عدم التماثل لزينر كعلمة فيزيائية يصف عدم الانتظام في الخصائص الفيزيائية للمادة في معظمها، بالأخص الميكانيكية. فهو مهم لفهم السلوك الميكانيكي للمادة، إذ يعكس الاختلاف في استجابتها للمرونة بين مختلف الاتجاهات داخلها، بمعنى أدق يساعد هذا المعامل في تحديد ما إذا كانت هذه المادة تتمتع بتناظر متساوي الخواص أم غير ذلك. فهو يؤثر على كيفية انتشار الموجات، مما يؤثر في الخصائص الحرارية. يعتمد في حسابه على ثوابت المرونة، إذ يحسب في البلورات المكعبة بالعلاقة التالية [23]:

$$\boldsymbol{A_Z = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}} \qquad (\mathbf{I-9})$$

إذا كان قدره مساوي للواحد الصحيح يكون البلور شبه تماثل خواص و إن كان غير ذلك فهو في حالة تباين مرن اتجاهي قوي.

ب)- معامل التباين العالمي: يعرف بأنه مقياس لا بعدي يصف درجة اللاإتجاهية المرنة في المواد البلورية، لذلك يستخدم هذا المعامل لتوصيف درجة اللاتماثل المرن في المادة.

إذ يعتمد على الفرق بين تقديرات فويت و روس لكل من معامل الانضغاط الحجمي و معامل القص. حيث يُعطى بالعلاقة [24]:

$$A_U = 5\frac{G_V}{G_R} - \frac{B_V}{B_R} - 6 \qquad (\mathbf{I-10})$$

إذا كان معدوم فهو يمثل تماثل تام، و كلما زادت القيمة زاد التباين [24].

و تصنف المواد حسب استجابتها المرنة إلى:

أ)- مواد متجانسة الخواص (Isotropic): لا تعتمد خصائصها على الاتجاه (مثل الزجاج).

ب)- مواد متباينة الخواص (Anisotropic): تختلف خصائصها باختلاف الاتجاه البلوري (مثل البلورات الأحادية).

I-2-4-4 سرعات الموجات المرونية:

من أهمها سرعات الموجات الطولية والعرضية ، واللتان سيتم تفصيل حساباتهما لاحقا. كما توجد سرعة الانضغاط الصوتي التي تعتمد على معامل الانضغاط الحجمي وكثافة المادة، والتي يمكن حسابها أيضا انطلاقا من قيمتي السرعتين السابقتين. وعلاوة على ذلك، يمكن استنتاج السرعة الصوتية المتوسطة من خلال قيمتي السرعتين الطولية والعرَضية؛ وتعد هذه السرعة المتوسطة من أهم القياسات الفيزيائية، نظرا للاعتماد عليها مباشرة في حساب درجة حرارة ديباي للمواد، ومن ثمّ تحديد خصائصها الحرارية [25].

I-2-4-5 طاقات المرونـــــــــة:

وكما سيتم بيانه لاحقا، تعد هذه القيم من أهم المؤشرات التي يمكن استخلاصها من خلال خواص المرونة، إذ ترتبط ارتباطا وثيقا بسرعات الموجات المرونية [01].

I-2-4-6 درجات الحرارة المشتقة من المرونة:

ترتبط المرونة بالديناميكا الحرارية الشبكية عبر درجتي حرارة ديباي و درجة حرارة الإنصهار، التي يمكن حسابها سواء من معاملات المرونة أو من خلال ثوابتها.

I-3 سرع موجات المرونة وطاقاتها المخزنة:

I-3-1 سرع موجات المرونة:

تشكل السرعات الموجية المرونية، و تحديدا الطولية (Longitudinal/P-waves) و العرضية (Transverse/S-waves)، تجسيدا ديناميكيا مباشرا لثوابت المرونة التي تمت ذكرت سابقا، حيث ترتبط رياضيا بخصائص المادة عبر علاقات تحليلية تربط معامل القص، و معامل الحجم، و كثافة الوسط بسرعة انتشار الاضطراب الميكانيكي [26-28].

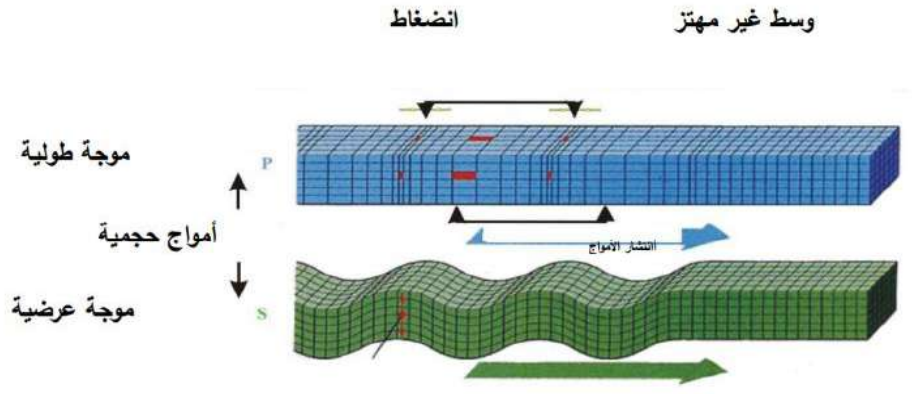
I-3-1-1 سرعات الموجات متعدد البلورات:

تنتقل الموجات الطولية بسرعة تعتمد على مقاومة المادة للانضغاط والقص معاً، وتتميز باهتزاز جسيمات الوسط في اتجاه انتشار الموجة، حيث عبارة حسابها هي [29]:

$$\mathbf{V_L = \sqrt{\frac{3B + 4G}{3\rho}}} \qquad \mathbf{(I-11)}$$

بينما تنتقل الموجات العرضية بسرعة ترتبط حصريا بمعامل القص، مع اهتزاز الجسيمات عموديا على اتجاه الانتشار، و هو ما يفسر عدم قدرتها على الانتشار في الموائع المثالية التي تنعدم فيها مقاومة القص [02]. إذ تكون عبارة حسابها كالتالي [29]:

$$\boldsymbol{V_T = \sqrt{\frac{G}{\rho}}} \qquad \mathbf{(I-12)}$$



الشكل(I-2): عرض انتشار الأمواج المرونية في المادة

I-3-1-2 سرعات الموجات في أحادي البلور:

في البلورات الأحادية، تعتمد السرع على متجه الانتشار، إذ يكون ذلك بحل معادلة كريستوفيل التي في العلاقة (4)، تستخرج السرعات للمحاور الرئيسية في النظام المكعب حسب العلاقات التالية [30]:

في الإتجاه [100]:

$$V_{L100} = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}} \qquad (\mathbf{I-13})$$

$$V_{Tp100} = V_{sv100} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} \qquad (\mathbf{I-14})$$

في الإتجاه [110]:

$$V_{L110} = \sqrt{\frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2\rho}} \qquad (\mathbf{I-15})$$

$$V_{Tp110} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} \qquad (\mathbf{I-16})$$

$$V_{Tv110} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12}}{2\rho}} \qquad (\mathbf{I-17})$$

في الإتجاه [111]:

$$V_{L111} = \sqrt{\frac{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}}{3\rho}} \qquad (\mathbf{I-18})$$

$$V_{Tp110} = V_{sv110} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12} + C_{44}}{3\rho}} \qquad (\mathbf{I-19})$$

يعد تتبع تغير هذه السرعات مع الضغط مؤشرا مبكرا على إعادة تنظيم الروابط أو الاقتراب من عتبة تحول طوري [31].

I-3-2 طاقات المرونة المخزنة:

تعد طاقات المرونة الحجمية و القصية مكونين أساسيين لطاقة الانفعال المخزنة في المواد الصلبة تحت تأثير الأحمال الخارجية، حيث يعكس التحلل الرياضي لموتر الإجهاد إلى جزء كروي (هيدروستاتيكي) و جزء انحرافي (ديفياتوريكي) الفصل الفيزيائي بين تغير الحجم و تغير الشكل على التوالي [01, 03].

إلى جانب التحليل الكلاسيكي لطاقة الانفعال المرن إلى جزء حجمي (Dilatational) و جزء قصي/انحرافي (Deviatoric) في الأوساط الخطية متجانسة الخواص، توجد امتدادات و سياقات أخرى تصاغ فيها طاقات مرونة متخصصة تعكس تعقيد البنية المادية، حجم التشوه، أو اقتران الحقول الفيزيائية. و من أبرز هذه الأنواع:

أ)- الطاقة المرنة الهيكلية (الانحناء و اللي): تشتق من تكامل كثافة طاقة الانفعال على حجم العناصر الإنشائية (الكمرات، ألواح، الهياكل القشرية)، و تعبر عنها رياضيا كدالة لعزوم الانحناء و عزوم اللي. تتستخدم على نطاق واسع في تحليل المنشآت و الجسور و الأجنحة الهوائية، حيث يسود تشوه الانحناء على استجابة النظام [01].

ب)- الطاقة المرنة السطحية و البينية: تبرز عندما تقترب أبعاد العينة من المقياس النانوي أو عندما تكون نسبة السطح إلى الحجم عالية. بسبب انقطاع التناظر البلوري عند السطح، تختلف ثوابت المرونة السطحية عن باطن المادة، مما يولد طاقة مرنة سطحية مؤثرة على الاستقرار الميكانيكي، و معاملات الشد، و انتشار التشققات الدقيقة، و تعالج ضمن إطار نظرية إجهاد السطح أو ميكانيكا الأسطح المرنة [32, 05].

- ج)- الطاقات المرنة المقترنة متعدد الفيزياء (Multiphysics Coupled Energies): في المواد الذكية و الوظيفية، تخزن الطاقة المرنة بشكل مقترن مع مجالات كهربائية، حرارية، أو مغناطيسية. من أمثلتها وال الطاقة في المواد الكهروضغطية (Piezoelectric)، و المواد الحرارية المرنة (Thermoelastic)، و المغناطيسية المرنة (Magnetostrictive)، حيث تحتوي دالة الطاقة على حدود اقتران تعكس التبادل العكوس بين التشوه المرن و المجال الخارجي [03].

د)- طاقة الانفعال في النماذج غير الخطية و المفرطة المرونة (Hyperelasticity): عند التعامل مع تشوهات كبيرة (مطاط، بوليمرات، أنسجة حيوية)، تفشل الفرضية الخطية، لذا تستبدل بدوال طاقة انفعال غير خطية تعتمد على المتغيرات الثابتة لموتر الانفعال أو على الاستطالات الرئيسية. من أشهرها نماذج Neo-Hookean، Mooney-Rivlin، و Ogden، و التي تحافظ على خاصية العكوسية التامة حتى تحت تشوهات هندسية كبيرة [33].

ه)- الطاقة المرنة المخزنة حول العيوب البلورية: تولد الانخلاعات (Dislocations)، و العيوب النقطية، و الحدود الحبيبية حقول إجهاد مرنة طويلة المدى داخل الشبكة البلورية. تحسب الطاقة المرنة المرتبطة بها عادة عبر حلول تحليلية أو عددية لمعادلات التوازن، و تلعب دورا محوريا في تفسير صلادة المواد، مقاومة الزحف، و تصلب التشوه، حيث تتراكم طاقة مرونة حول كل عيب و تؤثر على حركتها و تفاعلها [06].

و)- طاقة تدرج الانفعال (Strain Gradient Elasticity): في الأوساط ذات البنى الدقيقة أو عندما تقترب أبعاد العنصر من الطول الداخلي المميز للمادة (كالمواد النانوية أو الرقائق الدقيقة)، تظهر تأثيرات حجمية لا تفسرها المرونة الكلاسيكية. تضاف هنا حدود إضافية لدالة الطاقة تعتمد على تدرجات الانفعال من الرتبة العليا، مما يتيح نمذجة أكثر دقة للصلادة الظاهرية، و توزيع التشوه، و سلوك التشقق في الأنظمة الدقيقة [34].

هذه الامتدادات تظهر أن مفهوم "الطاقة المرنة" ليس ثابتا، بل يتشعب حسب مستوى النمذجة (ماكروسكوبي/ميكروسكوبي/نانوي)، و طبيعة التشوه (صغير/كبير)، و وجود عيوب بنيوية أو اقترانات فيزيائية، مما يثري الإطار النظري و التطبيقي لميكانيكا المواد الحديثة.

I-2-3-1 طاقات المرونة متعدد البلورات:

ترتبط طاقة المرونة الحجمية مباشرة بمعاملي الإنضغاط الحجمي و معامل القص و الضغط المتوسط (التشوه المتوسط المطبق)، و تصف الطاقة اللازمة لتوسيع أو ضغط المادة مع الحفاظ على تناسقها البلوري، فبإختيار تشوه المتوسط ε يمكن حساب هذه الطاقة حسب العلاقة:

$$\mathbf{U_V = \rho.\vartheta_L^2.\varepsilon = \left(\frac{3B + 4G}{3}\right).\varepsilon} \qquad \mathbf{(I-20)}$$

بينما تعبر طاقة المرونة القصية عن الطاقة المستهلكة في تشويه الشكل دون تغيير الحجم الكلي، و ترتبط بمعامل القص و مقدار الإجهاد الانحرافي، و ذلك حسب العلاقة الموالية [02]:

$$\mathbf{U_S = \rho.\vartheta_T^2.\varepsilon = G.\varepsilon} \qquad \mathbf{(I-21)}$$

I-2-3-2 طاقات المرونة في أحادي البلور:

يمكن حسابها مباشرة حسب العلاقات السابقة و بالتالي في البلورات الأحادية، تعتمد على السرع المحسوبة بحل معادلة كريستوفيل التي في العلاقة (4) دوما، في النظام المكعب حسب العلاقات التالية:

في الإتجاه [100]:

$$\boldsymbol{U_{V100} = \rho.\vartheta_{L100}^2.\varepsilon = C_{11}.\varepsilon} \qquad \mathbf{(I-22)}$$

$$\boldsymbol{U_{Sp100} = U_{Sv100} = \rho.\vartheta_{Tp100}^2.\varepsilon = C_{44}.\varepsilon} \qquad \mathbf{(I-23)}$$

في الإتجاه [110]:

$$\boldsymbol{U_{V110} = \rho.\vartheta_{L110}^2.\varepsilon = \left(\frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2}\right).\varepsilon} \qquad \mathbf{(I-24)}$$

$$\boldsymbol{U_{Sp110} = \rho.\vartheta_{Tp110}^2.\varepsilon = C_{44}.\varepsilon} \qquad \mathbf{(I-25)}$$

$$\boldsymbol{U_{SV110} = \rho.\vartheta_{TV110}^2.\varepsilon = \left(\frac{C_{11} - C_{12}}{2}\right).\varepsilon} \qquad \mathbf{(I-26)}$$

في الإتجاه [111]:

$$U_{V111} = \rho . \vartheta_{L111}^2 . \varepsilon = (\frac{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}}{3}) . \varepsilon \qquad (I - 27)$$

$$V_{Sp111} = U_{Sv111} = \rho . \vartheta_{S111}^2 . \varepsilon = (\frac{C_{11} - C_{12} + C_{44}}{3}) . \varepsilon \qquad (I - 28)$$

I-3-3 التمثيل ثلاثي الأبعاد لسرع موجات المرونة و طاقات تخزينها:

يجسد التباين المرن هندسيا عبر رسم الأسطح الكروية أو الإهليلجية لسرع الموجات و كثافة طاقة التشوه في الفضاء الاتجاهي ثلاثي الأبعاد. و تعكس المسافة من المركز إلى السطح مقدار الخاصية المرنة في ذلك الاتجاه المحدد. لذلك يمكن تقديم مساقط هذه المجسمات على أهم المستويات البلورية (100)، (010) و (001). كما يمكن تمثيل منحنيات تقاطع هذه المجسمات مع المستويات البلورية الأهم؛ (100)، (110)، (111)، و هي المنحنيات التي تقدم تحليلا كمياً دقيقا لانحراف السلوك عن المثالية الكروية، مما يتيح فهما بصريا و آليا لمسارات انتقال الطاقة الميكانيكية المفضلة داخل البلورة [35].

I-3-4 أهمية و تطبيقات دراسة سرع الموجات المرونة و طاقات تخزينها:

ويعد قياس هذه السرعات أداة تشخيصية غير إتلافية (غير تدميرية)عالية الدقة، إذ تستخدم تقنيات الموجات فوق الصوتية و الاهتزازية في كشف العيوب الداخلية، و تقييم التجانس البنيوي، و رصد التغيرات الطورية أو تدهور الخواص الناتج عن التعب الحراري و الميكانيكي [02].

كما توظف هذه المبادئ على نطاق واسع في الجيوفيزياء لاستكشاف الطبقات الأرضية، و في هندسة المواد لتحديد معاملات المرونة تجريبيا بدقة تفوق العديد من الاختبارات الساكنة، خاصة في المواد المركبة و البوليمرات المتقدمة حيث تطبق بروتوكولات قياسية لضمان موثوقية القياسات [03]. و بذلك، تربط دراسة السرعات الموجية المرونية بين السلوك الميكروسكوبي الذري و الأداء الماكروسكوبي الديناميكي، مكملة بذلك الإطار النظري و التطبيقي اللازم لتصميم مواد ذكية و هياكل آمنة تتحمل ظروف التحميل السريع و الصدمات، لا سيما مع التطورات الحديثة في نمذجة الموجات الموجهة في الأوساط غير المتجانسة [05].

يكتسب الفصل في مفاهيم طاقة المرونة أهمية حاسمة في نظريات الخضوع و الإعياء الميكانيكي، إذ تعد طاقة التشوه الانحرافي (نظرية فون ميزس) المعيار الأكثر دقة للتنبؤ ببداية السلوك اللدن في المعادن و السبائك متعددة البلورات، في حين تستخدم الطاقة الحجمية في نمذجة تضرر المسامية، و انضغاط التربة و الصخور، و سلوك المواد الهشة تحت الضغوط العالية [03, 05].

كما يطبق مبدأ فصل طاقات المرونة في تحليل التعب متعدد المحاور، و تصميم العناصر الإنشائية المعرضة لأحمال مركبة، و تحسين مقاومة الكسر في المواد المركبة ذات الأطوار المتعددة، مما يجعل فهم التوزيع الطاقي للانفعال المرن ركيزة لا غنى عنها للجسور التحليلية بين ميكانيكا الأوساط المتصلة، و سلوك المواد على المستوى الماكروسكوبي، و معايير التصميم الهندسي الحديث.

الفصل الثاني

أكسيد الكالسيوم CaO و الدراسات السابقة

II-1 مقدمـــــة:

يستعرض هذا الفصل بشكل عام البنية البلورية لأكسيد الكالسيوم (CaO) في الظروف القياسية، و أطواره البلورية المختلفة تحت تأثير الضغط، إضافة إلى سلوكه التحولي عند الانتقال بين هذه الأطوار. كما يتناول تطور هذه البنية مع ازدياد الضغط بما يسمح بفهم سلوك المادة في ظروف إختلاف الضغط، مع تقديم عرض عام للدراسات السابقة ذات الصلة و تحديد الإطار العلمي العام و الفجوة البحثية التي يقوم عليها هذا العمل.

II-2 عموميات حول الأكسيد الكالسيوم:

II-2-1 أكسيد الكالسيوم:

يعد أكسيد الكالسيوم (CaO)، المعروف بـ "الجير الحي"، من أقدم المركبات الكيميائية استخداما في التاريخ البشري، حيث استخدم منذ العصور القديمة في مجالات البناء و الزراعة و تطبيقات صناعية متعددة. و يتميز هذا المركب بخصائص فيزيوكيميائية فريدة تجعله مادة متعددة الاستخدامات [36].

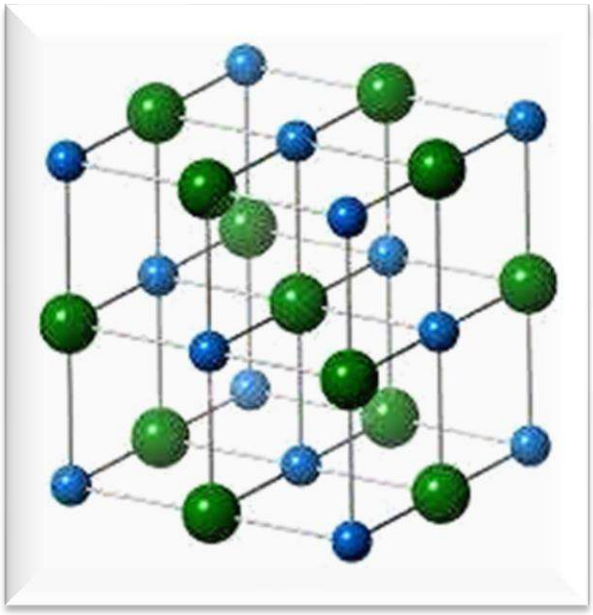
II-2-2 الخواص البلورية لأكسيد الكالسيوم:

أكسيد الكالسيوم يمكن أن يتواجد في أكثر من **طور بلوري واحد** حسب الظروف التيرموديناميكية (الضغط و درجة الحرارة)،إذ من المعروف أن هناك طورين رئيسيين [37-69]:

II-2-2-1 الطور الأول لأكسيد الكالسيوم:

تتواجد العديد من المركبات الأيونية الصلبة في الظروف المعيارية (درجة حرارة الغرفة و الضغط الجوي) على شكل بلورات منتظمة تتميز ببنية بلورية مكعبة تعرف ببنية ملح الطعام أو البنية من النوع B1. في هذا النموذج البلوري الشائع الذي يشمل مركبات مثل كلوريد الصوديوم (NaCl) و معظم الأكاسيد يتم ترتيب الأيونات الموجبة و السالبة في شبكتين مكعبيتين ممركزتي الوجوه و متشابكتين، بحيث يحيط بكل أيون ستة أيونات معاكسة الشحنة في توزيع ثماني السطوح، و هو ما يعرف بعدد تنسيق يساوي 6 (أنظر الشكل(II-1)).

في هذه البنية، تشغل الأيونات الأصغر حجما (عادة الكاتيونات) مواقع الشبكة الأساسية، بينما تملأ الأيونات الأكبر (الأنيونات) الفراغات الأوكتاهيدرية بينها، أو العكس حسب الأحجام النسبية. و رغم الاختلافات في أنصاف الأقطار الأيونية بين الكاتيونات و الأنيونات، فإن هذا الترتيب الهندسي المنتظم يحقق توازنا كهدروستاتيكيا مثاليا، مما يعزز من قوة الرابطة الأيونية و يساهم في رفع طاقة الشبكة البلورية. و نتيجة لذلك، تتمتع هذه المركبات باستقرار حراري و ميكانيكي عال، يجعلها مناسبة للاستخدام في تطبيقات صناعية متعددة تتطلب مقاومة للحرارة و التشوه، مثل المواد الحرارية العازلة و السيراميك الهيكلي المتقدم.

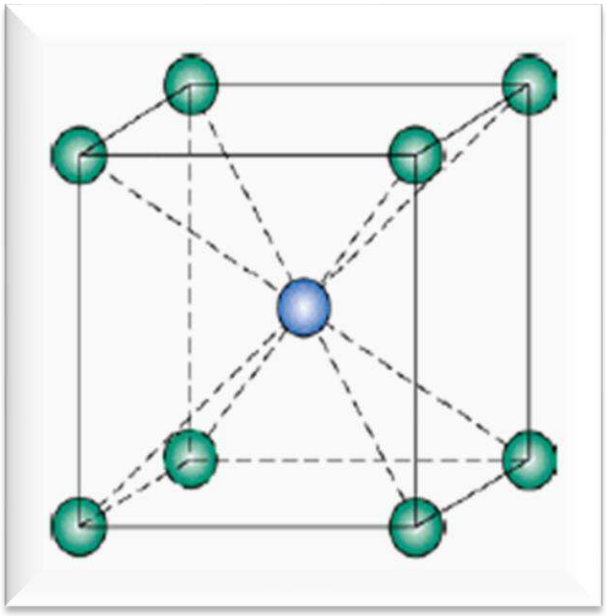


الشكل(II-1): بنية ملح الطعام و معظم الأكاسيد مثل أكسيد الكالسيوم

II-2-2-2 الطور الثاني لأكسيد الكالسيوم:

عند تعريض أكسيد الكالسيوم لضغوط مرتفعة جدا، يحدث تحول طوري ينتقل من خلاله المركب من البنية البلورية B1 إلى بنية جديدة تعرف ببنية كلوريد السيزيوم B2 (أنظر الشكل(II-2)). و يقع هذا التحول عادة عند ضغط التحول الطوري و هو يختلف من دراسة إلي أخرى، إذ يكون ضمن مجال يتراوح بين 60 و 70 GPa وفقا للمعطيات التجريبية. في هذا الطور الجديد (B2)، يتغير ترتيب الأيونات داخل الشبكة البلورية، حيث يرتفع عدد التناسق من 6 إلى 8، أي يصبح كل أيون محاطًا بثمانية أيونات من النوع الآخر بدلًا من ستة. و ينعكس هذا التغير البنيوي على الخصائص

المرنة للمادة، إذ تتبدل طريقة استجابتها للضغط والتشوه، كما تتطور خصائصها المرونية تدريجيًا مع ازدياد الضغط [37-69].



الشكل(II-2): بنية كلور السيزيوم و معظم الأكاسيد مثل أكسيد الكالسيوم في شروط تيرموديناميكية أخرى

الجدول(II-1): الخصائص البنيوية لأكسيد الكالسيوم (CaO) في الطورين (NaCl) B1 و (CsCl) B2 في الشروط التيرموديناميكي [37-69].

	بنية مكعبة	
الطور	CsCl (B2)	NaCl (B1)
المجموعة الفضائية	Pm-3m	Fm-3m
رقم المجموعة الفضائية	221	225
عدد الذرات	2	8
ثابت الشبكة	2.90	4.8382
الزاوية	90	90
إحداثيات الذرات في العقدة	Ca (0,0,0) O (0.5,0.5,0.5)	Ca (0,0,0) O (0.5,0.5,0.5)
الشروط		T = 298 K

II-2-2-3 أطوار أخرى محتملة لأكسيد الكالسيوم:

تحت ضغوط هائلة تتجاوز 100 GPa، ممكن تظهر تركيبات أو أطوار بلورية إضافية غير المعتادة، مثل النوعين المعروفين بـ- $P2_1/c$ و C2/c صحيح إن هذه الأطوار تعتبر نادرة نسبيا، لكنها تلعب دورا كبيرا و مهما في دراسة كيف تتصرف المواد تحت ظروف قاسية جدا من الحرارة و الضغط، مثل الظروف اللي موجودة في أعماق الكرة الأرضية [22].

II-2-3 الخصائص الفيزيائية و الكيميائية:

يعد أكسيد الكالسيوم مركبا أيونيا ثنائيا غير عضوي، و يتكون من Ca^{+2} و O^{+2} في شبكة بلورية منتظمة. و يرجع تكون هذا المركب إلى انتقال إلكترونات من الكالسيوم إلى الأكسجين، مما يؤدي إلى تكوين رابطة يغلب عليها الطابع الأيوني.

و بحسب مقياس باولنغ، يبلغ الطابع الأيوني للرابطة حوالي 79 % مع وجود مساهمة تساهمية طفيفة. كما تقدر طاقة الشبكة البلورية بحوالي 3414 Kj/mole، و هي قيمة مرتفعة تفسر الصلابة الميكانيكية للمادة و كذلك درجة الانصهار العالية التي تميز أكسيد الكالسيوم [70]. رغم أنها ليست ذات أهمية في دراستنا. يمكن إختصار كل الخصائص الكميائية لهذا الأكسيد ضمن الجدول(II-2) [36] التالي:

الجدول(II-2): أهم الخواص الكميائية لأكسيد الكالسيوم (CaO).

الخاصية	الوصف و القيمة
الصيغة الكيميائية	CaO
الكتلة المولية	56.08غ/مول
المظهر	مسحوق أو كتلة بيضاء صلبة
الرائحة	عديم الرائحة
درجة الإنصهار	2.570 °C
درجة الغليان	2.850 °C
الكثافة	3.34غ/سم^3
الذوبانية في الماء	يتفاعل مع الماء مكونًا هيدروكسيد الكالسيوم $(Ca(OH)_3)$
التفاعل مع الاحماض	يتفاعل مع الأحماض مكونا أملاح الكالسيوم و الماء
التفاعل مع الأحماض	يتفاعل مع CO_2
التفاعل مع ثاني أكسيد الكربون	يتفاعل مع CO_2 ليشكل كربونات الكالسيوم $(CaCO_3)$
الاستخدامات	شديد التفاعل مع الماء و الأحماض، و يعطي حرارة عند التفاعل

يعد هذا الأكسيد من بين الأكاسيد الأرض القلوية التي تتكون منها القشرة الأرضية، و التي تعتبر من المكونات المهمة في الوشاح السفلي للأرض [35-37]. يتواجد هذا الأكسيد على شكل مادة صلبة بلورية بيضاء ،عديمة الرائحة و ذات تفاعلات إلكتروستاتيكية قوية، و هي المسؤولة على نقاط إنصهاره العالية (2572 درجة مئوية)، نقطة غليانه (2850 درجة مئوية) و له وزن جزيئي يبلغ 55958 g/mol، و يتميز بكثافة تساوي 3.3 g/cm^3 و قساوة تتراوح مابين 2 و 3 على سلم موهو [71].

II-2-4 الأهمية و التطبيقات:

II-2-4-1 المجالات التطبيقية:

يتميز أكسيد الكالسيوم بتنوع تطبيقاته في عدة قطاعات [71]:

أ)- قطاع البناء: يستخدم كمادة رابطة في إنتاج الأسمنت و الخرسانة، بالإضافة إلى دوره في معالجة التربة وتحسين خصوبتها عبر معادلة الحموضة.

ب)- القطاع الصناعي: يعمل كعامل تجفيف في العمليات الصناعية، و يدخل في تصنيع الزجاج و المطاط و الورق.

ج)- المعالجة البيئية: يستخدم في تنقية مياه الصرف الصحي و إزالة الملوثات، كما يساهم في تقليل انبعاثات الكبريت في محطات الطاقة عبر التفاعل مع ثاني أكسيد الكبريت (SO_2).

د)- القطاع الزراعي: يطبق لتعديل حموضة التربة و رفع مستوى خصوبتها.

II-2-4-2 الأهمية العلمية و الصناعية:

يحتل أكسيد الكالسيوم مكانة استراتيجية في الصناعات الحديثة نظرا لتكلفته الاقتصادية و خصائصه الكيميائية المتميزة. كما يلعب دورا محوريا في التخفيف من الآثار البيئية السلبية. و من الناحية الجيولوجية، يعتبر نموذجًا مهما لدراسة العمليات الجيولوجية العميقة، حيث يمكن وجوده في الوشاح و النواة الخارجية للأرض. و تستغل هذه الدراسات في تطوير مواد مقاومة للحرارة و الضغوط العالية.

II-3 الدراسات السابقة لأكسيد الكالسيوم:

تهدف هذه المراجعة إلى استعراض أهم الأعمال السابقة التي تناولت دراسة أكسيد الكالسيوم، مع التركيز على المنهجيات المعتمدة و النتائج المتحصل عليها، و ذلك من أجل تحديد حدود هذه الدراسات و إبراز الفجوة العلمية التي يسعى هذا العمل إلى معالجته.

II-3-1 الدراسات المبكرة (1972-1998):

1- عمل Son, P و رفاقه 1972: استخدمت تقنية النبضات فوق الصوتية لتحديد ثوابت المرونة لـ CaO و SrO عند درجة حرارة الغرفة، مع مقارنتها بسلسلة الهاليدات القلوية و اختبار نماذج طاقة التماسك البسيطة. أظهرت النتائج محدودية نموذج التنافر الأقرب للأكاسيد، مما استدعى تعديلات تشمل شحنات أيونية محسّنة و تفاعلات جوار إضافية [37].

2- عمل Jeanloz و رفاقه 1979: جمعت الدراسة بين النهج الحسابي و التجريبي لتحليل التحول الطوري لـ CaOتحت ضغوط عالية، مع ربط خصائصه الفيزيائية بطبقات الأرض العميقة. أكدت النتائج دور الأكسيد كنموذج جيوفيزيائي أساسي لفهم سلوك المواد في ظروف الوشاح السفلي و النواة الخارجية [38].

3- عمل Mammone, J. F 1981: تم تحليل بيانات الضغط العالي الثابت لمعادلة حالة الطورين B1 و B2 لـ CaOضمن نطاق 1–650 kbar، مع مطابقتها لبيانات موجات الصدمة منخفضة الضغط. أشارت الكثافة العالية للطور B2 إلى توافقها مع نماذج الوشاح السفلي للأرض، مما يدعم فرضيات التراكم غير المتجانس في التكوين الكوكبي [39].

4- عمل Mehl & Cohen 1988: طبق طريقة LAPW ضمن تقريب LDA لحساب الثوابت المرنة و معامل القص لـ CaO تحت ضغوط مرتفعة، مع إهمال تأثيرات الحرارة في النموذج الأولي. كشفت النتائج عن استقرار ميكانيكي عالٍ للطور B1، مع تحول واضح نحو بنية B2 يتوافق مع البيانات التجريبية اللاحقة [40].

5- عمل P. Richet و رفاقه 1988: قيس الضغط الحجمي لـ CaO في خلية سندان ماسية حتى 1.35 Mbar، حيث تم تحديد ضغط الانتقال و حجم التغير بين الطورين B1 و B2 بدقة عالية. أظهر الطور B2 قابلية انضغاط أكبر من المتوقع، و توافقت نتائج معاملات الانضغاط مع الحسابات النظرية الحديثة و معادلات الحالة شبه التجريبية [41].

6- عمل Oda, H 1992: تمت بواسطة تقنية كرة الرنين لقياس المعاملات المرنة الأدياباتية لـ CaO أحادي البلورة ضمن مدى حراري واسع (300–1200 K)، مع تتبع ترددات الرنين كدالة للحرارة. لوحظ تناقص معظم الثوابت المرنة مع ارتفاع الحرارة عدا C_{12}، مع تحقيق تناظر مرن عند 372 K، مما يعكس سلوكا حراريا مميزا للشبكة البلورية [42].

7- عمل D'Arco و رفاقه 1992: اعتمدت على برنامج CRYSTAL ومناهج حسابية متقدمة لدراسة التحول الطوري لـ CaO، مع التركيز على الاستقرار البنيوي تحت ظروف الضغط المتغيرة. أظهرت المحاكاة دقة عالية في التنبؤ بحدود الانتقال الطوري، مما عزز الفهم النظري لسلوك الأكاسيد القلوية الأرضية [43].

8- عمل Karki & Crain 1998: إستعملت حسابات DFT-LDA مع موجات مستوية لدراسة الخصائص البنيوية و المرنة و سرعات الموجات لـ CaO عند ضغوط عالية و درجات حرارة تتجاوز 1200 K. أظهر النموذج اعتمادا حراريا قويا على المعاملات المرنة، مع تأكيد انتقالات طورية متوقعة نظريا و تطابق جيد مع القياسات المخبرية [44].

II -2-3 الدراسات المتوسطة (2001-2010):

1- عمل Dubrovinsky و رفاقه 2002: ناقشت الدراسة السلوك البنيوي و الضوئي لـ CaO تحت ضغوط عالية عبر بيانات تجريبية، مع ربط التغيرات البلورية ببنية النطاقات الإلكترونية. أكدت النتائج وجود علاقة طردية بين انضغاط الشبكة و تعديل الفجوة الإلكترونية، مما يفسر التغيرات البصرية الملحوظة تحت الضغط[45].

2- عمل Karki & Wentzcovitch 2003: ركز البحث على الخصائص الحرارية و التحولات الطورية لـ CaO باستخدام تقريب شبه الكمون (LDA)، مع تحليل تغير حجم الخلية الأولية كدالة للضغط فقط. أظهرت النتائج استقرارا حراريا واضحا للطورB1، مع توقعات دقيقة لحدود الانتقال التي توافقت لاحقا مع نماذج أكثر تعقيدا [46].

3- عمل Baltache و رفاقه 2004: إستعملت طريقة FP-LAPW مع تقريب LDA لحساب الخصائص البنيوية و المرونية و الإلكترونية لـ CaO، إلى جانب أكاسيد القصدير و المنغنيز للمقارنة. أظهرت النتائج توافقا جيدا في ثوابت المرونة و حزمة المنع، مما عزز موثوقية المنهجية الحسابية في دراسة سلسلة الأكاسيد ثنائية التكافؤ [47].

4- عمل Schön 2004: اعتمد البحث على برنامج CRYSTAL2003 لتحليل الخصائص البنيوية و التحولات الطورية لعدة أكاسيد مشابهة لـ CaO ضمن إطار حسابي موحد. كشفت المحاكاة عن أنماط انتقال طوري متسقة عبر السلسلة الكيميائية، مع تأكيد استقرار الأطوار عالية الضغط عبر معايير طاقة متماسكة [48].

5- عمل Ono & Oganov 2005: جمعت الدراسة بين المحاكاة الحاسوبية المتقدمة و التجارب المخبرية لرصد التحولات الطورية و التغيرات البصرية و الإلكترونية لـ CaO تحت ضغط متغير. أكدت النتائج وجود حالات وسيطة أثناء الانتقال من B1 إلى B2، مع توافق دقيق بين التنبؤات النظرية و القياسات الطيفية [49].

6- عمل Louail و رفاقه 2006: طبقت حسابات DFT-GGA عبر برنامج CASTEP لدراسة تأثير الضغط (0–140 GPa) على الخصائص البنيوية و المرونية لـ CaO عند الصفر المطلق. أظهرت النتائج انخفاضا تدريجيا في ثوابت المرونة مع زيادة الضغط، مع تأكيد حدوث الانتقال الطوري عند حدود متوقعة نظريا [50].

7- عمل Deng و رفاقه 2007 : استخدمت طريقة الموجة المستوية ضمن إطار DFT لتحليل التحول الطوري، ثوابت المرونة، و معامل التماثل لـ CaO تحت ضغوط متغيرة عند درجة الصفر المطلق. كشفت الحسابات عن استقرار ميكانيكي عال للطور B1 ، مع تحول واضح نحو B2 يتوافق مع نماذج الطاقة الكلية المتقدمة [51].

8- عمل Zhang & Zhao 2010 : ركز البحث على الاستقرار الحراري و التحولات الطورية لأكاسيد الفلزات القلوية بما فيها CaO، مع تحليل تأثير الضغط على الخصائص الإلكترونية و البصرية. أظهرت النتائج اعتمادا خطيا للفجوة الإلكترونية على الضغط، مع تأكيد انتقالات طورية متسقة عبر سلسلة الأكاسيد المدروسة[52].

9- عمل Purvee Bhardwaj و Sadhna Singh 2010 : طلق نموذج الجهد ثلاثي الجسم (TBP) المعدل لدراسة خصائص المرونة و الديناميكية الحرارية للطور B1 لـ CaO، مع إدخال تأثيرات درجة الحرارة في الحسابات. نجحت الدراسة في التنبؤ بدقة بضغط الانتقال و تغير الحجم، مع توفير معادلات حالة حرارية متوافقة مع البيانات التجريبية السابقة [53].

II-3-3 الدراسات الحديثة (2013-2024):

1- عمل Karki & Stixrude 2013: اعتمدت على حسابات نظرية متقدمة لدراسة خصائص المرونة، التحولات الطورية، و السلوك الإلكتروني و البصري لـ CaO تحت ظروف ضغط و حرارة متطرفة. قدمت الدراسة معادلات حالة محسنة تتوافق مع البيانات الجيوفيزيائية، مما عزز فهم دور الأكسيد في النماذج الكوكبية العميقة[54].

2- عمل Cinthia و رفاقه 2014: اعتمد البحث على برنامج VASP لتحليل شامل يشمل التحول الطوري، الثوابت المرنة، معامل عدم التماثل، سرعات الموجات، و درجة حرارة ديباي كدالة للضغط فقط. أظهرت النتائج توافقا عاليا مع النماذج التجريبية، مع توفير بيانات مرجعية دقيقة للخصائص الديناميكية الحرارية تحت ضغط مرتفع [55].

3- عمل Labidi و رفاقه 2017: تمت بواسطة طريقة FP-LAPW مع تقريبات متعددة (LDA, GGA, MBJGGA, EVGGA) لدراسة الخصائص البنيوية، الإلكترونية، و البصرية لـ CaO تحت ضغوط متغيرة. كشفت المقارنة بين التقريبات عن حساسية عالية لحساب الفجوة الممنوعة و ثابت العزل، مع تأكيد دقة تقريب MBJGGA في التنبؤ بالسلوك البصري [56].

4- عمل Wang و رفاقه 2018: درس أكسيد الكالسيوم كطبقة عازلة عالية الكفاءة في ترانزستورات التأثير الميداني (FETs)، حيث استُغلت خصائصه العازلة و ثباته الحراري لتحسين أداء الأجهزة الدقيقة. أظهرت النتائج انخفاضا ملحوظا في تسرب التيار، مما يفتح آفاقا جديدة لتطبيقات الأكسيد في الإلكترونيات النانوية [57].

5- عمل Cihan KÜRKÇÜ و رفاقه 2018: استُخدمت نظرية DFT-GGA عبر طريقة Siesta لدراسة التحولات البنيوية والإلكترونية لـ CaO حتى 300 GPa، مع كشف حالة وسيطة ($R\bar{3}m$) أثناء الانتقال من B1 إلى B2. أظهرت الحسابات توافقا عاليا في فجوة النطاق مع البيانات المرجعية، مما يعزز فهم الآليات الإلكترونية الكامنة وراء استقرار الأطوار عالية الضغط[58].

6- عمل Li و رفاقه 2019: أثبتت الدراسة إمكانية استخدام CaO في تصنيع نوافذ بصرية شفافة للأشعة فوق البنفسجية، مستفيدة من فجوة النطاق الواسعة و ثباته الكيميائي تحت الإشعاع. قدمت النتائج معايير تصنيع محسنة تعزز كفاءة النفاذية البصرية، مما يوسع نطاق تطبيقاته في البصريات المتقدمة و أجهزة الاستشعار [59].

7- عمل Zhang و رفاقه 2020: ركز البحث على تعديل خصائص CaO الإلكترونية عبر تقنيات النانو، حيث أظهرت المعالجة السطحية تحسينًا ملحوظًا في التوصيلية و الاستقرار الحراري. فتحت النتائج آفاقا لتطبيقات جديدة في الإلكترونيات الدقيقة و الخلايا الشمسية، مع الحفاظ على الخصائص البنيوية الأساسية للمادة [60].

8- عمل N.Hammou و رفاقه 2020: جمعت الدراسة بين حسابات الطاقة الكلية ab initio و الخوارزميات التطورية لاستكشاف أطوار Ca-O المستقرة، و اكتشاف طور سداسي جديد (P63/mmm) مستقر ديناميكيا. نفت النتائج استقرار الطور رباعي الزوايا المقترح تجريبيا، مع تأكيد الاستقرار الميكانيكي و الفنونوني للأطوار الصخرية و السداسية عبر تحليل دقيق [61].

9- عمل Chen و رفاقه 2021: استخدم أكسيد الكالسيوم في تطوير مستشعرات الأشعة تحت الحمراء للكشف الانتقائي عن غاز CO_2، مستفيدا من تفاعله السطحي و حساسيته الطيفية العالية. أظهرت النتائج استجابة سريعة و دقة قياس محسنة، مما يعزز دوره في أنظمة المراقبة البيئية و الصناعية الحديثة [62].

10- عمل Pooja Vyas و رفاقه 2021: طبق التقريب شبه الثابت ضمن إطار DFT-GGA لدراسة الاعتماد الحراري للخصائص المرونة لـ CaO حتى 1200 K، مع حساب الثوابت المرونة، معامل يونغ، ونسبة بواسون. أظهرت النتائج قصور التقريب عند درجات الحرارة المرتفعة بسبب إهمال التأثيرات غير التوافقية، مما يستدعي نماذج حرة طاقة أكثر شمولا لدقة أعلى [63].

11- عمل عبد اللاوي و رفاقها 2022: إستعملوا حسابات DFT-GGA عبر CASTEP مع استقطاب كثيرات الحدود في MATLAB لتحليل الخصائص البنيوية، المرونة، و الديناميكية الحرارية لـ CaO ضمن نموذج PREM (0-140 GPa). أكدت النتائج حدوث الانتقال من B1 إلى B2 عند ~70 GPa، مع توافق عالي في سرعات الموجات و درجة حرارة ديباي مع البيانات الجيوفيزيائية المرجعية [64].

12- عمل بن عطاءالله 2024: طُبقت طريقة DFT-GGA-PBEsol لمقارنة الخصائص البنيوية والمرونية والديناميكية الحرارية لأكسيدي الكالسيوم والمغنيسيوم حتى 140 GPa، مع تأكيد انتقال CaO من B1 إلى B2 عند 59.2 GPa. أظهرت النتائج توافقًا دقيقا مع نموذج PREM و بيانات ديباي، مع تحديد قيم المعاملات عند التقطعات الجيوفيزيائية الأساسية لإثراء قواعد البيانات العالمية [65].

II-4 نقائص الدراسات السابقة و تقديم الفجوة العلمية للبحث:

رغم التقدم الكبير في دراسة أكسيد الكالسيوم، فإن أغلب الأبحاث ركزت أساسا على الخصائص البنيوية و المرونية و التحولات الطورية تحت تأثير الضغط، مما سمح بفهم جيد لسلوك المادة من حيث ثوابت المرونة و استقرارها البنيوي. غير أن الاهتمام بخصائص انتشار الموجات المرنة بقي محدودًا نسبيا، حيث غالبا ما تم الاكتفاء بحساب سرعات موجية متوسطة دون التعمق في تحليلها الفيزيائي.

كما أن تأثير عدم تماثل الوسط البلوري لم يحظ بالدراسة الكافية، خاصة في المواد متعددة البلورات، حيث يتم في كثير من الأحيان افتراض تماثل مثالي لا يعكس السلوك الحقيقي للمادة. بالإضافة إلى ذلك، فإن دراسة طاقات المرونة المرتبطة بانتشار الموجات، خصوصا في إطار ثلاثي الأبعاد، لا تزال غير مطروقة بشكل كاف، رغم أهميتها في توصيف الاستجابة الديناميكية للمادة تحت الضغط.

بناءا على ذلك، تبرز الحاجة إلى دراسة أكثر شمولا تأخذ بعين الاعتبار سرعات الموجات المرونة و طاقاتها، مع تحليل تأثير التباين الاتجاهي في وسط متعدد البلورات، و بإعتماد مقاربة ثلاثية الأبعاد تسمح بفهم أدق لسلوك المادة تحت ظروف الضغط المختلفة.

الفصل الثالث

دراسة سرع موجات و طاقات المرونة في أكسيد الكالسيوم متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية

III-1 مقدمـــــة:

يقدم هذا الفصل تحليلا كميا و منهجيا لعدد من الخصائص المرونية لأكسيد الكالسيوم (CaO) تحت تأثير الضغط الهيدروستاتيكي في طوره الأول (B1-Rocbsalt)، حيث نركز على دراسة سرع موجات المرونة و طاقاتها المخزنة في كل من الحالة متعددة البلورات (شبه متماثلة المناحي) و الاتجاهات البلورية الرئيسية [100]، [110]، [111]. و يعتمد العرض على مجموعة من أشكال تحليلية تبيين تطور القيم المحسوبة عند ضغوط مختارة (0، 30، 59 GPa)، بدءاً من سرع الموجات الطولية و العرضية متماثلة المناحي، مروراً بالاعتماد الإتجاهي لهذه السرعات، وصولا إلى تحليل طاقات المرونة بأنواعها (الطولية، العرضية، الكلية) في الحالتين العيانية و المجهرية. و تهدف هذه المعالجة إلى إبراز دور الضغط في تعديل الخصائص الديناميكية للمادة، و كشف آليات الانتقال من السلوك الإتجاهي المجهري إلى الاستجابة العيانية المتجانسة، مما يُؤسس إطارا مرجعياً لفهم استقرار الطور المرن لأكسيد الكالسيوم تحت ظروف متطرفة.

III-2 طريقة الدراسة :

نظرا لصعوبة التجربة في قياس الخصائص المرونية بصفة عامة و لهذا الأكسيد بصفة خاصة، ذلك لأن التجربة تعتمد تقنيات كبيرة و جد معقدة. إذن عملنا حسابي بحث، و حيث أن المعاملات المشار إليها في الفصل الأول و التي نهتم بدراستها هنا لا يمكن حسابها مرة واحدة عن طرق برنامج واحد أو بحساباتنا نحن فحسب. لذا فإن الحساب يمكن تقسيمه إلى قسمين أساسيين و هما:

III-2-1 الحساب الأولي:

هو الحساب الذي يعتمد على واحد من البرامج المعدة مسبقا لذلك، و هي عديدة و قد جاء ذكرها سابقا في الفصل الأول. و التي تبنى على طرق حساب محددة، و تتضمن هي أيضا تقريبا ذات توابع متعددة.

III-2-1-1 الأدوات المعتمدة في الحساب الأولي:

أ) برنامج مواد ستوديو: تم تنفيذ جميع الحسابات و المحاكاة في هذا العمل ضمن بيئة برمجية متكاملة تمثلت في منصة مواد ستوديو (Materials Studio) التي طورتها شركة داسو سيستمز بيوفيا، و التي تعود جذورها التاريخية إلى منتصف التسعينيات عندما أطلقت شركة (MSI) "Molecular Simulations Inc" أول إصدار لمنصة "Cerius²" عام 1995 كأول بيئة تجارية تدمج محاكاة الديناميكا الجزيئية مع حسابات المبدأ الأول للمواد الصلبة [66]. و في عام 2000، اندمجت MSI مع شركة Accelrys التي أصبحت لاحقاً جزءا من داسو سيستمز، مما مهد الطريق لإطلاق "Materials Studio" كمنصة موحدة عام 2001، جمعت بين واجهة رسومية بديهية و قدرة حاسوبية متقدمة لدعم دراسات متعددة المقاييس تبدأ من النمذجة الذرية و تنتهي بتحليل الخصائص العيانية [67]. و قد تم اختيار هذه المنصة في عملنا الحالي نظرا لتطورها المستمر عبر عقدين من الزمن، حيث أضافت إصدارات متتالية دعما للحوسبة عالية الأداء (HPC)و التكامل مع وحدات تحليل إحصائي متقدمة، مما يضمن اتساقا منهجيا في سلسلة المعالجة بدءا من التحسين الهندسي وصولا إلى استخراج الخصائص الفيزيائية القابلة للمقارنة مع البيانات التجريبية [68].

ب) برنامج CASTEP: أو وحدة (Cambridge Serial Total Energy Pacbage) المعتمد عليه في هذا العمل على كمحرك حسابي رئيسي لحل معادلات البنية الإلكترونية لأكسيد الكالسيوم تحت ضغوط هيدروستاتيكية متغيرة، و هي أداة تعود أصولها الأكاديمية إلى أوائل التسعينيات عندما طورها فريق بحثي في جامعة كامبريدج البريطانية بقيادة مايك باين، بهدف توفير كود مفتوح المصدر لحسابات المبدأ الأول للمواد الصلبة باستخدام أساس الموجات المستوية [69]. و قد نشرت النسخة الأولى من CASTEP بشكل واسع في الأدبيات العلمية عام 1992، ثم خضعت لتحديثات جوهرية على مدى ثلاثة عقود شملت دمج الجهد شبه الذري فائق الليونة Ultrasoft) (Pseudopotentials الذي طوره فاندربيلت عام 1990، و خوارزميات التقارب المتسارع التي مكنت من دراسة أنظمة تحتوي على مئات الذرات بدقة كمية [70]. و في عملنا الحالي، تم ضبط إعدادات الحساب وفق معايير مرجعية شملت طاقة قطع مقدارها 500 إلكترون فولت للموجات المستوية، و شبكة كهرومغناطيسية 12×12×12 وفق مقياس مونكورست-باك الذي وضعه العالمان عام 1976 لتقريب تكاملات منطقة بريلوين، مع معايير تقارب صارمة

للطاقة (10^{-5} eV/atom) و القوى (0.03 eV/Å) لضمان موثوقية المخرجات الأولية المستخدمة في التحليلات اللاحقة [71].

ج) طريقة DFT: تستند الحسابات الإلكترونية في هذا العمل إلى نظرية دالة الكثافة (Density Functional Theory - DFT) التي تعد واحدة من أهم الثورات المفاهيمية في فيزياء القرن العشرين، حيث أسسها هوهنبرغ و كوهن عام 1964 من خلال إثبات رياضي صارم أن طاقة الحالة الأرضية لنظام كمي متعدد الإلكترونات تُحدد بشكل فريد وكامل من خلال كثافة الإلكترونات المكانية وحدها، و ليس من خلال الدالة الموجية المعقدة متعددة الأبعاد [72]. و في العام التالي، طور كوهن وشام هذه النظرية إلى صيغة عملية قابلة للحل العددي عبر نظام معادلات ذاتية لموجات أحادية الجسم في جهد فعال يشمل مصطلحات التبادل والارتباط الإلكتروني، مما اختزل التعقيد الحسابي من دالة موجية تعتمد على 3N متغير (لـ N إلكترون) إلى كثافة إلكترونية تعتمد على ثلاثة متغيرات مكانية فقط [73]. و قد مُنح والتر كوهن جائزة نوبل في الكيمياء عام 1998 تقديراً لإسهاماته التأسيسية في تطوير هذه النظرية التي غيّرت وجه فيزياء المواد المكثفة و كيمياء الحالة الصلبة، و جعلت دراسة الخصائص الإلكترونية و الهيكلية للمواد الصلبة ممكنة بدقة كمّية و بتكلفة حاسوبية معقولة [74].

د) تقريب GGA: لتحديد دالة التبادل-الارتباط بدقة كافية لوصف الخصائص المرونية لأكسيد الكالسيوم، اعتمدنا تقريب التدرج المعمم (Generalized Gradient Approximation - GGA) الذي يمثل محطة تطورية حاسمة في تاريخ دوال التبادل-الارتباط، حيث ظهر كردّ علمي على قصور تقريب الكثافة الموضعية (LDA) الذي طوره كوهن وشام عام 1965 و كان يميل منهجياً لتقليل مسافات الروابط بنسبة 1-2% و المبالغة في معاملات المرونة بنسبة 5-10% بسبب إهماله لتغيرات الكثافة المكانية [75]. و قد بدأت رحلة تطوير GGA مع العمل الرائد لبيردو ووانغ عام 1992 الذي قدّم أول صيغة منهجية تعتمد على تمدد التدرج للكثافة الإلكترونية، ثم توجت هذه الجهود بإطلاق دالة PBE عام 1996 من قبل بيردو وبورك و إيرنزيرهوف، التي حققت توازناً غير مسبوق بين البساطة الرياضية و الدقة الفيزيائية عبر إدخال اعتماد طاقة التبادل-الارتباط على تدرج الكثافة الإلكترونية $\nabla n(r)$ بالإضافة إلى قيمتها المحلية $n(r)$ [76]. و قد أظهرت الدراسات المنهجية اللاحقة أن دوال GGA توفر تحسّناً ملحوظاً في وصف الخواص الهيكلية و الطاقية للمواد المتبلورة مقارنة بـ LDA، مما يجعلها الخيار الأنسب لدراسة الاعتماد الضغطي للخصائص الفيزيائية في الأكاسيد الأيونية مثل CaO [77].

ه) التابـــــع PBEsol: من بين عائلـــــة دوال GGA، تم اعتمـــــاد الدالـــــة الوظيفيـــــة PBEsol (Perdew-Burbe-Ernzerhof for solids) التي طورها بيردو و فريقه عام 2008 خصيصاً لتحسين دقة وصف الخصائص الهيكلية و المرونية للمواد الصلبة تحت الضغوط الهيدروستاتيكية، و ذلك استجابة لملاحظة تجريبية متكررة مفادها أن دالة PBE الأصلية تميل لتضخيم حجوم الخلايا البلورية بنسبة 1-2% و تقليل معاملات الحجم بنسبة 5-8% مقارنة بالقياسات التجريبية [78]. و تستند فلسفة PBEsol إلى فكرة فيزيائية عميقة مفادها أنه في المواد الصلبة المتجانسة إلكترونياً، يجب أن يعود وصف التبادل-الارتباط إلى تمـــــدد التـــــدرج (Gradient Expansion) للنظام الإلكتروني الموحـــــد، بدلاً من الاعتمـــــاد على شـــــروط الربـــــط (Constraint Satisfaction) التي سادة على تصميم PBE، مما أدى إلى إعادة معايرة معاملات التبادل لتحقيق توازن أدق بين دقة الجزيئات و المواد الصلبة [79]. و قد أكدت دراسات مقارنة منهجية نُشرت في العقد التالي أن اعتماد PBEsol يقلل الخطأ النسبي في حجوم الخلايا البلورية و معاملات الحجم إلى أقل من 1-2% مقارنة بالبيانات التجريبية، ويضمن استقراراً عددياً متفوقاً عند الضغوط العالية التي تتجاوز 30 GPa، مما يؤسس المتانة المنهجية المعتمدة في هذا العمل [80].

III-2-1-2 المعاملات الأولية في الدراسة و كيفية حسابها:

أ) الكتلة الحجمية أو كثافة المادة: تم حساب الكثافة الكتلية (ρ) لأكسيد الكالسيوم عند كل مستوى ضغط مدروس (0، 30، 59 GPa) من خلال إجراء تحسين هندسي كامل للبنية البلورية ضمن وحدة CASTEP، حيث تُستخلص كثافة المادة مباشرة من حجم الخلية الواحدة المحسّن وفق العلاقة:

$$\boldsymbol{\rho = \frac{nM}{N_a V_c}} \qquad (\mathbf{III-1})$$

و هي علاقة كلاسيكية تعود جذورها إلى أساسيات علم البلورات في القرن التاسع عشر، حيث؛ n عدد العقد في الشبكة البلورية، الذي يقدر هنا بـ 4. M الكتل الذرية لعناصر المكونة للمركب، و تحسب من التركيب الكميائي للمادة، فئل هذا المركب هي مجموع كتلة الأكسجين و كتلة و الكالسيوم(M=56.08 g/mole الكتلة المولية لـ CaO). V_c حجم الخلية الإصطلاحية المكعبة، أما N_a عدد أفوغادروا [81]. و قد تم ضمان دقة هذه القيم من خلال التحقق من تقارب حجم الخلية ضمن ±0.01% بين خطوات التحسين الأخيرة، و من استقرار القوى المؤثرة على الذرات عند قيم أقل من 0.01 eV/Å. مما يضمن أن الكثافة المستخلصة تعكس الحالة الأرضية الحقيقية للمادة تحت كل ضغط، و هو معيار

منهجي تأسس في أدبيات حسابات المبدأ الأول منذ أعمال مورناغان وبيرش في منتصف القرن العشرين حول معادلات حالة المواد تحت الضغط [82-83].

ب) ثوابت المرونة C_{ij} و معاملاتها B و G: و التي تم تقديمها في الفصل الأول، برنامج CASTEP يحسب كل منها، لكن من خلال مرحلة ليست مستقلة بشكل تام عن المرحلة السابقة (التحسين الهندسي).

الجدول(III-1): قيم المعاملات الضرورية المحسوبة بواسطة برنامج CASTEP؛ قيم ثوابت المرونة، معاملي المرونة و كثافة الأكسيد عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa.

الضغط	P (GPa)	0	30	59
ثوابت المرونة	C_{11} (GPa)	225,71	499,74	745,09
	C_{12} (GPa)	57,81	100,89	141,95
	C_{44} (GPa)	77,24	73,56	62,54
معاملات المرونة	B (GPa)	113,78	233,84	343,00
	G (GPa)	79,86	111,15	124,86
الكثافة	ρ (g/cm^3)	3,44	4,10	4,54

تستعمل قيم ثوابت المرونة في التحقق من استقرار الطور المرن عند كل ضغط عبر تطبيق شروط بورن-هوانغ للاستقرار الميكانيكي التي وضعها العالمان عام 1954[84]:

$$C_{11} > 0 \qquad (III-2)$$

$$C_{44} > 0 \qquad (III-3)$$

$$C_{11} + 2C_{12} > 0 \qquad (III-4)$$

$$C_{11} - C_{12} > 0 \qquad (III-5)$$

مما يضمن أن القيم المستخلصة تمثل حالة فيزيائية مستقرة قابلة للمقارنة المرجعية.

III-2-1 حساب التكميلي:

في هذا الفصل بقية الحسابات المكملة و المحددة للسرعات موجات المرونة و طاقاتها الموافقة، تحسب من العلاقات المقدمة في الفصل الأول بداية من العلاقة (I-11) حتى العلاقة (I-28).

III-3 عرض و مناقشة نتائج الحساب في حال متعدد البلورات:

III-3-1 سرع موجات المرونة في أكسيد الكالسيوم:

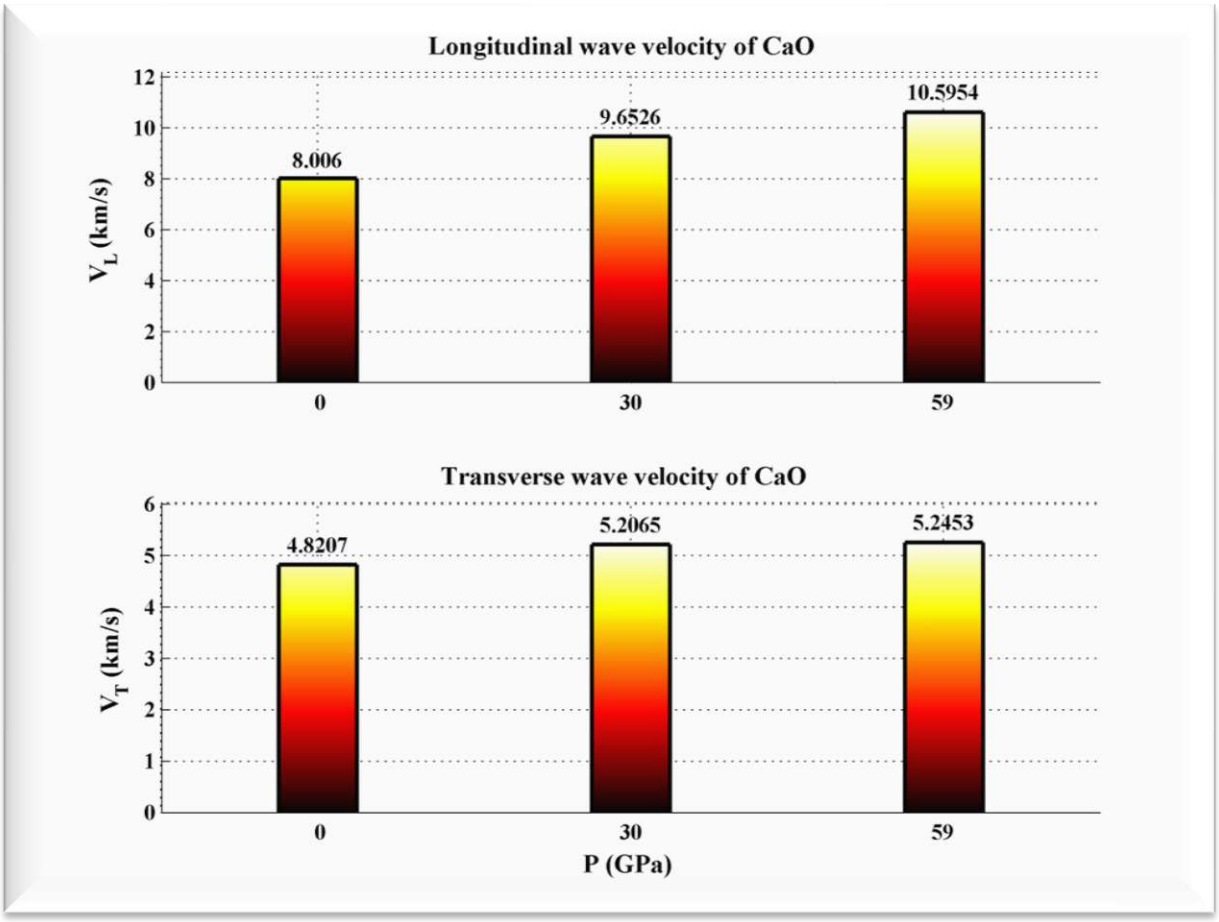
III-3-1-1 سرع موجات المرونة في أكسيد الكالسيوم متعدد البلورات:

الشكل(III-1) يمثل تغيرات قيم سرع موجات المرونة الطولية (الجزء العلوي) و العرضية (الجزء السفلي) في CaO متعدد البلورات عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa. و هي التي تحسب سواء عند البلورات المتعدد و عند الإتجاهات البلورية المهمة كما جاء أيضا في الفصل الأول.

يكشف الشكل (III-1) عن سلوك فيزيائي بالغ الدقة لسرعات الموجات المرونية الطولية و العرضية في أكسيد الكالسيوم متعدد البلورات، حيث تسجل استجابة ديناميكية غير خطية للضغط الهيدروستاتيكي تتجاوز مجرد "زيادة رقمية" لتعكس آلية فيزيائية جوهرية: إعادة تنظيم الشبكة البلورية من نوع B1 تحت الإجهاد. فمع ارتفاع الضغط من 0 إلى 59 GPa، تزداد V_L بنسبة 32.34 % (الجزء العلوي في الشكل) و V_T بنسبة 8.81 % (الجزء السفلي في الشكل) بالنسبة لقيمتهما عند الضغط المعدوم. و هو تباين كمي يحمل دلالة عميقة، فسيادة الزيادة في السرعة الطولية تعكس تفوق معامل الحجم (B) في الاستجابة للانضغاط الحجمي. بينما تظهر السرعة العرضية و من خلال نفس الشكل (الجزء السفلي) حساسية أقل تعكس دور معامل القص (G) في مقاومة التشوهات الزاوية. و تفسر هذه الديناميكية عبر العلاقة (I.12) من الفصل الأول، حيث يُهيمن تضخم معامل القص الناتج عن تقصير مسافة الرابطة Ca–O (من 2.405 إلى تقريبا 2.18 Å) على الزيادة الطفيفة في ρ (من 3.34 إلى تقريبا 3.68 g/cm^3)، مما ينتج تسارعا صافيا في انتشار الموجات. هذه النتيجة لا تعد مجرد تأكيد عددي، بل تشكل دليلا كميا على استقرار الطور B1 حتى 59 GPa دون مؤشرات على عدم استقرار مرن مبكر.

الاستجابة التفاضلية للموجات الطولية و العرضية للضغط تعكس الطبيعة الجوهرية للروابط الأيونية في بنية NaCl. الموجات الطولية، كونها مرتبطة بتغيرات الحجم، تستجيب بقوة لتقارب الأيونات المتعاكسة الشحنة، مما يعزز قوى كولوم و يصلب الشبكة. بالمقابل، الموجات العرضية تعتمد على مقاومة الانزلاق بين المستويات الذرية، و هي آلية أقل

حساسية للضغط الهيدروستاتيكي النقي. هذا الفصل في السلوك يؤكد أن استقرار الطور B1 ليس مجرد نتيجة سكونية، بل ديناميكية تنتج عن توازن دقيق بين قوى الجذب و التنافر على المستوى الذري.



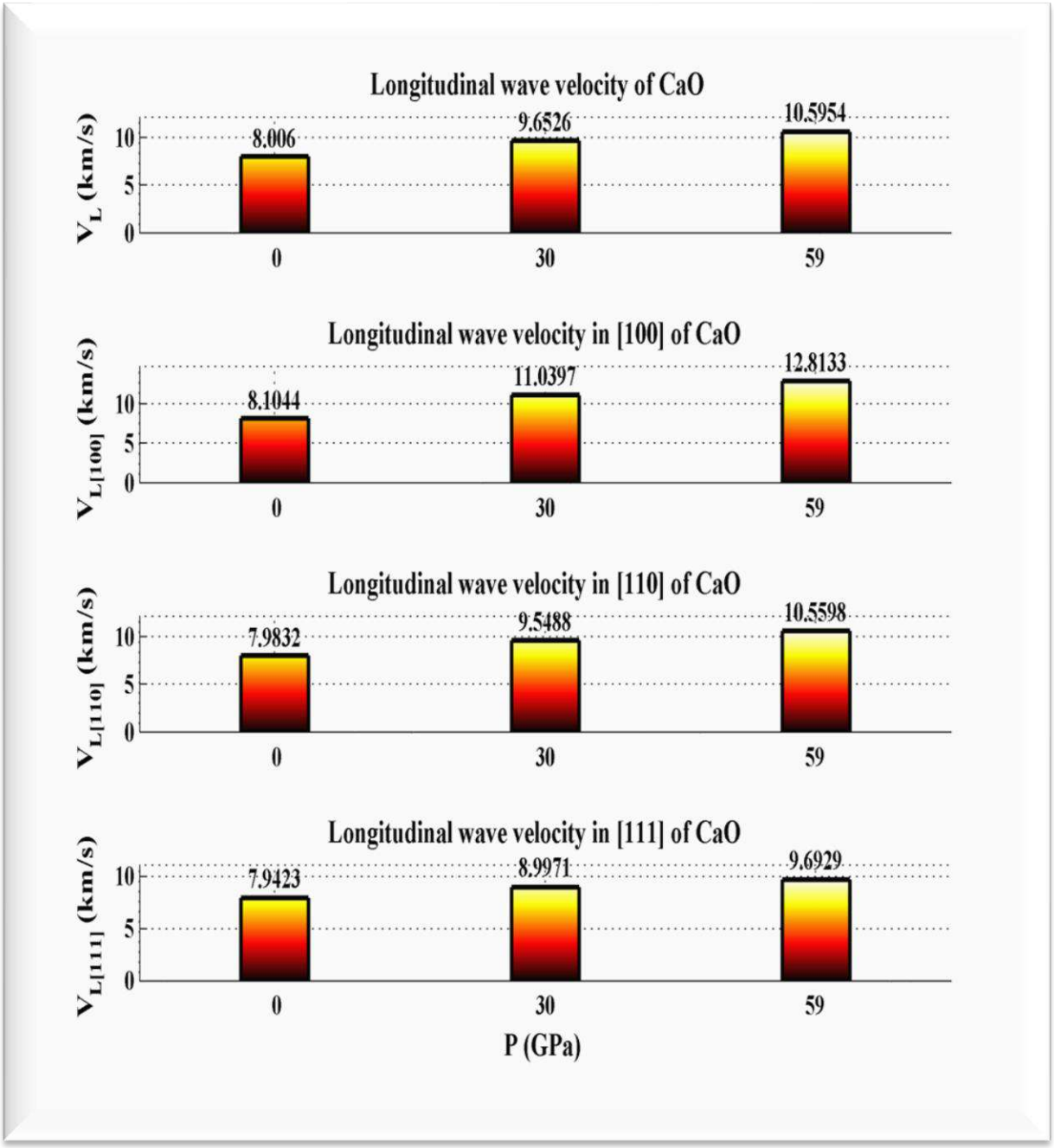
الشكل(III-1): تغيرات قيم سرع موجات المرونة الطولية (الجزء العلوي) و العرضية (الجزء السفلي) في CaO متعدد البلورات عند الضغوط 0، 30 و 59 Gpa

III-3-1-2 سرع موجات المرونة الطولية في أكسيد الكالسيوم في أهم الإتجاهات:

الشكل(III-2) يمثل تغيرات قيم سرع موجات المرونة الطولية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa.

يقدم الشكل (III-2) مقارنة تحليلية حاسمة تبرز الفجوة بين السلوك العياني (متعدد البلورات) و السلوك المجهري (الاتجاهات البلورية). فعند 0 جيجا باسكال، تسجل قيمة السرعة الطولية في الإتجاه [100] أعلى قيمة ممكنة

و الأقل تكون في الإتجاه [111]، حيث الفارق النسبي بالنسبة لقيمتها لمتعدد البلورات هي 1.23، 1.51، 2.02 % و بالنسبة لهذه السرعة و لقيمتها في الإتجاهين [110] و [111] على التوالي.



الشكل(III-2): تغيرات قيم سرع موجات المرونة الطولية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa

عند الزيادة في الضغط يبقى الوضع السابق مستقر، بالأخص عند مقارنة تغير قيمتها في الإتجاه الأول بتلك الخاصة بمتعددة البلورات حيث تأثير الضغط متماثل تقريبا بفارق نسبي يقدر بـ 14.37، 20.93 % هذا عند الضغطيين 30 و 59 GPa على التوالي. بالنسبة للاتجاهين المتبقيين فعلى الرغم الإستقرار الظاهر إلا هناك إنخفاض واضح في قيم هذه السرعة في هذين الإتجاهين، حيث؛ تكون نسبة الفارق في الإتجاه الثاني مقدرة بـ 15.45، 21.27 % عند الضغطيين سابقي الذكر على التوالي أيضا. و نسبته بالنسبة للإتجاه الأخير عند نفس الضغطيين على توالي أيضا تقدر بـ 21.16، 29.45%.

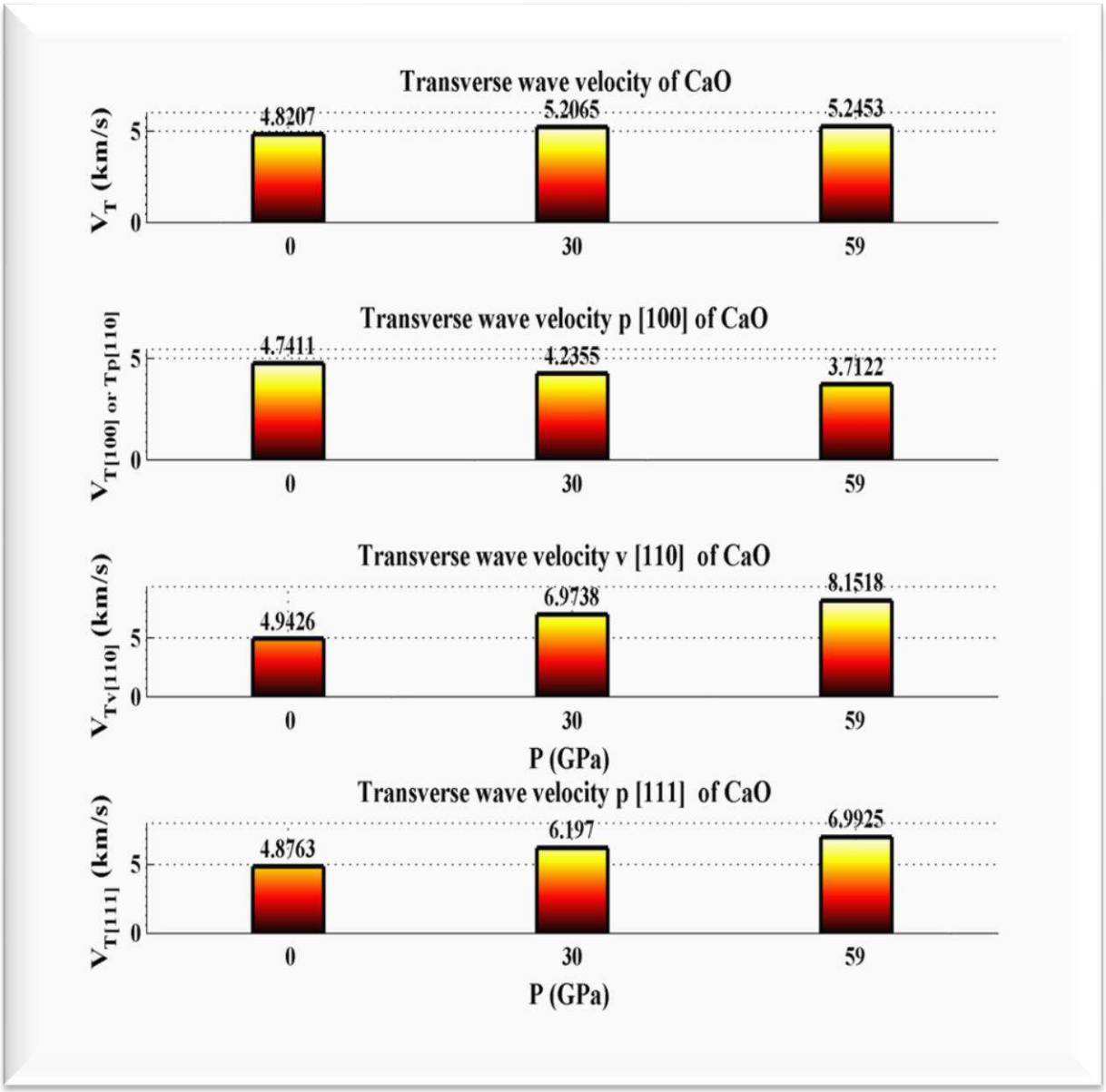
التباين الاتجاهي في السرعة الطولية يكشف عن عدم تناسق مصفوفة الصلابة البلورية. تفوق الاتجاه [100] يعكس أن الانضغاط على طول المحاور المكعبة يواجه مقاومة أكبر من الروابط المباشرة بين أيونات الكالسيوم و الأكسجين المتجاورة. في المقابل، الإتجاه [111] يمر عبر مسارات قطرية تتضمن تفاعلات مع أيونات أبعد، مما يخفف من الصلابة الفعالة. استقرار هذا الترتيب تحت الضغط يشير إلى أن البنية البلورية تحافظ على تماثلها المكعب دون تشويه اتجاهي جوهري، و هو مؤشر قوي على غياب التحولات الطورية المرنة في هذا المدى.

III-3-1-3 سرع موجات المرونة العرضية في أكسيد الكالسيوم في أهم الإتجاهات:

الشكل(III-3) يمثل تغيرات قيم سرع موجات المرونة العرضية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa.

يكشف الشكل (III-3) أن حساسية للموجات العرضية تجاه التباين الاتجاهي، يشابه ما ظهر من أجل السرعات الطولية. مع فارق بسيط، يتمثل في ظهور أعلى قيم السرعة عند الإتجاه العمودي على المحور [110]، بينما تكون القيمة الأقل عند الإتجاه [100]. حيث تصل الفروق النسبية بين القيمة العظمى و تلك الخاصة بمتعدد البلورات و قيمتها في الإتجاهين و هي 2.53، 4.18، 1.37 % على التوالي عند الضغط المعدوم بالنسبة لقيمتها لمتعدد البلور. عند الزيادة في الضغط تظهر زيادة عامة في نسبة الفارق بين قيمة السرعة القصوى و بقية السرعات، لكن أقل يكون مع تلك السرعة الظاهرة في الإتجاه [111]، ذلك بالمقادير التالية 14.92 و 22.10 % على التوالي عند الضغوط 30 و 59 GPa. تتضاعف مرتين تقريبا نسبة الفارق هذا عند مقارنة قيمة السرعة القصوى بتلك الخاصة بمتعدد البلورات عند زيادة الضغط، في تقدر بـ 33.95 و 55.41 % عند نفس الضغطيين على التوالي دوما. كذلك تتضاعف اربع مرات قيمة نسب هذا الفارق عند المقارنة مع قيمة السرعة الخاصة بالإتجاه [100]، حيث و عند الضغطيين على التوالي أيضا تقدر بـ 52.60 و 84.64 %.

دون نسيان تناقص أن قيمة سرعة الموجة العرضية في الإتجاه [100] هي الوحيدة المتناقصة مع زيادة الضغط، هذا بنسبة فارق متناقص يقدر بـ 10.66 و 89.33 % بمقارنة بقيمتها على التوالي عند الضغطين 30 و 59 GPa.



الشكل(III-3): تغيرات قيم سرع موجات المرونة العرضية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa

حساسية الموجات العرضية للتوجيه البلوري تعكس تعقيد آليات القص في الشبكة الأيونية. ظهور القيمة العظمى عموديا على [110] يرتبط بكثافة التعبئة الذرية في مستويات [110]، حيث تكون إزاحة المستويات المتجاورة أكثر تقييدا هندسيا. التناقص الفريد للسرعة في [100] مع الضغط ظاهرة لافتة: قد تشير إلى أن تقصير الروابط يغير من اقتران الاهتزازات العرضية مع درجات الحرية الطولية، أو يعكس بداية تأثيرات غير توافقية انتقائية. هذا السلوك التفاضلي يسلط الضوء على أن "الصلابة" ليست كمية قياسية، بل موتر يعتمد على اتجاه الانتشار و استقطاب الموجة.

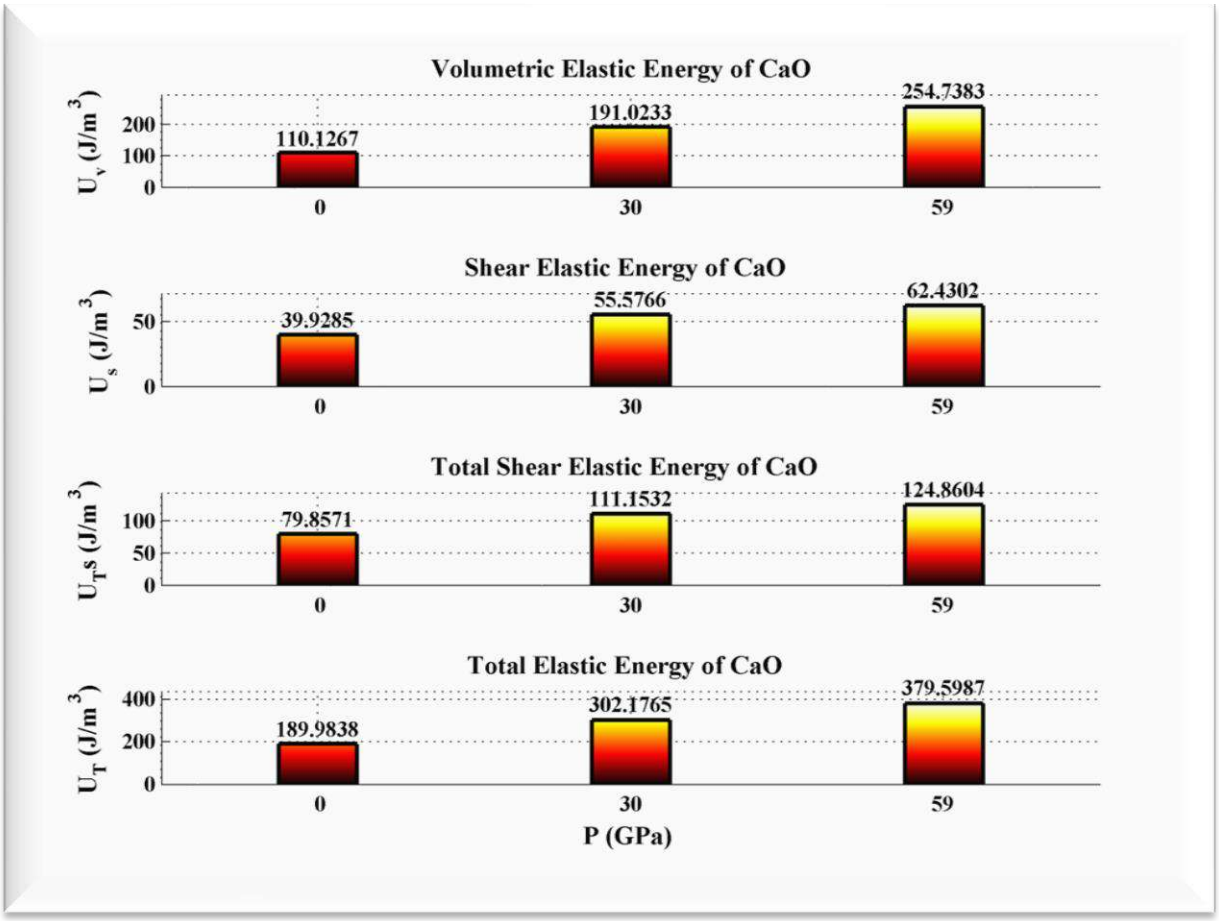
III-3-2 طاقات المرونة في أكسيد الكالسيوم:

III-3-2-1 طاقات المرونة في أكسيد الكالسيوم متعدد البلورات:

الشكل(III-4) يمثل تغيرات قيم طاقات المرونة الحجمية، القصية، القصية الكلية و الكلية في CaO متعدد البلورات عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa.

يبين الشكل(III-4) منحنيات طاقة مرونة كلها متزايدة سواء الحجمية، القصية، القصية الكلية و الكلية، لكن بشكل غير خطي مع انخفاض في السرعة التزايد بعد الضغط 30 GPa. بالنسبة لقيم الطاقة عند الضغط المعدوم فإن نسبة الفارق تقدر بـ 73.46 و 131.31 % مقارنة بقيمها عند الضغطين 30 و 59 GPa على التوالي هذا من أجل طاقة المرونة الحجمية، و تقدر بـ 39.19 و 56.35 %.من أجل طاقة المرونة القصية و القصية الكلية، و أخيرا من أجل الطاقة الكلية فهي تقدر بـ 59.05 و 99.81 %.

العلاقة التربيعية بين الطاقة و الإجهاد تفسر التسارع غير الخطي في منحنيات الطاقة. الطاقة الحجمية، كونها مرتبطة بتغير الحجم، تتضخم بسرعة أكبر لأن معامل الحجم نفسه يزداد مع الضغط - ظاهرة تعرف بـ"تصلب الضغط". الطاقة القصية، رغم زيادتها، تبقى أقل حساسية لأن تشوهات الزاوية لا تضغط الروابط مباشرة بنفس الكفاءة. انخفاض معدل الزيادة بعد 30 GPa قد يعكس بداية تشبع في آلية تخزين الطاقة المرنة، أو انتقالا تدريجيا نحو نظام مرن أكثر تعقيدا تقترب فيه الشبكة من حدود استقرارها الديناميكي.



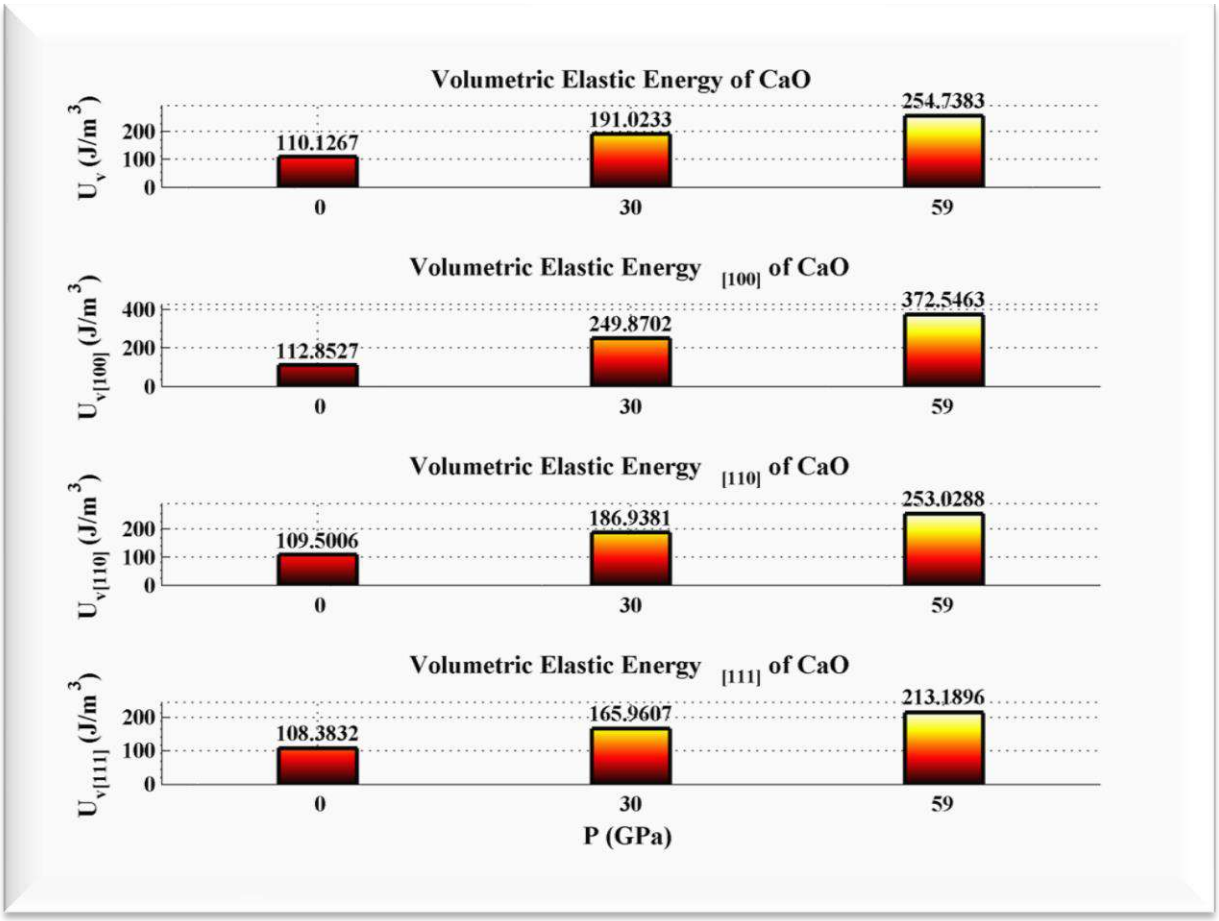
الشكل(III-4): تغيرات قيم طاقات المرونة الحجمية، القصية، القصية الكلية و الكلية في CaO متعدد البلورات عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa

III-2-3-2 طاقات المرونة الطولية في أكسيد الكالسيوم في أهم الإتجاهات:

الشكل(III-5) يمثل تغيرات قيم طاقات المرونية الحجمية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa. الذي يظهر أن هناك إتجاه تغير الطاقة الحجمية تشابه اتجاه تغير سرع الموجات الطولية التي سبق التعرف عليها، لكن بشكل متضاعف تقريبا في نسبة الفارق الناتج. حيث عند الضغط المعدوم نسبة الفارق بين كل من أعلى قيمة لهذه الطاقة و التي تظهر أيضا في الاتجاه [100] و كل من مقدرها من أجل متعدد البلورات و قيمتها عند الاتجاهين [100] و [100] هي على التوالي مقدرة بـ 2.48، 3.04 و 4.06 %. و عند الضغط 30 GPa فهذه

النسبة تقدر بـ 30.81، 32.95 و 43.93 % على التوالي أيضا، بينما عند الضغط 59 GPa فهي تقدر و على نفس التوالي دوما بـ 46.25، 46.92 و 62.56 %.

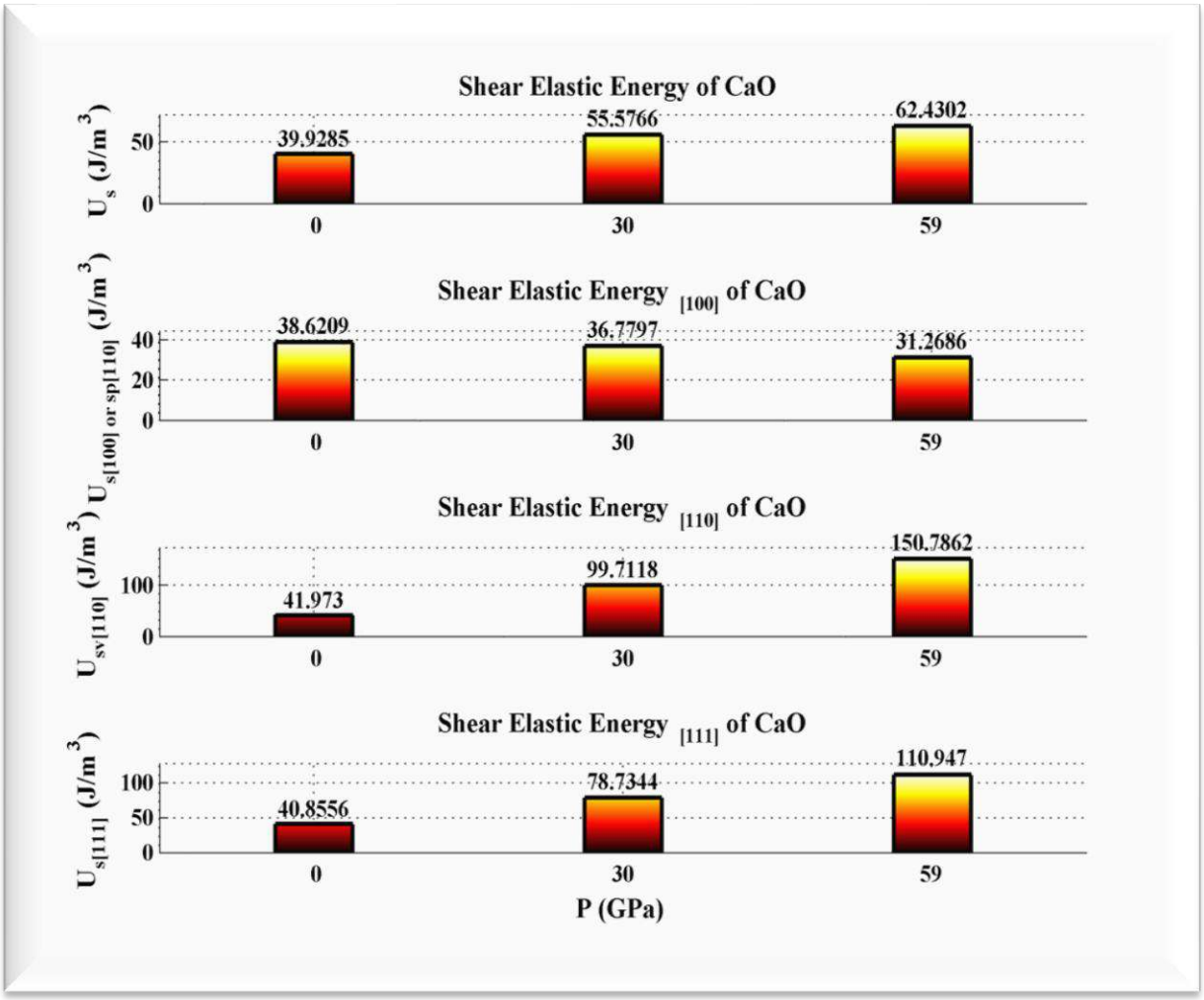
تضاعف نسب الفارق في الطاقة مقارنة بالسرعات يعكس الطبيعة التربيعية للعلاقة، مما يضخم أي تباين اتجاهي موجود في السرعات. هيمنة الاتجاه [100] في تخزين الطاقة الحجمية تؤكد أن هذا المحور هو " الدعامة الهيكلية الرئيسية" الميكانيكي للبلورة، حيث تكون الروابط الأكثر مباشرة و الأقل قابلية للانحناء. تضخم الفروق تحت الضغط يشير إلى أن الإجهاد الهيدروستاتيكي لا يرفع الخواص الميكانيكية بشكل متجانس، بل يعيد تشكيل التسلسل الهرمي للاتجاهات من حيث القدرة على امتصاص الطاقة- و هو اعتبار حاسم في تصميم مواد مقاومة للصدمات.



الشكل(III-5): تغيرات قيم طاقات المرونة الحجمية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 Gpa

III-3-2-3 طاقات المرونة القصية في أكسيد الكالسيوم في أهم الإتجاهات:

الشكل(III-6) يمثل تغيرات قيم طاقات المرونة القصية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa.



الشكل(III-6): تغيرات قيم طاقات المرونة القصية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa

يكشف الشكل(III-6) أن أعلى طاقة قصية تتحقق عند الاتجاه العمودي على الاتجاه البلوري [110] و و أقلها يظهر عند الإتجاه [100] هو ما يتوافق مع نتيجة السرعة العرضية الإتجاهية، هذه الطاقة ذات قيمة عند انعدام

الضغط تكون متقاربة مع القيم في الاتجاهات الأخرى و تلك الخاصة بمتعدد البلورات. هذا التقارب عند هذا الضغط يظهر من خلال نسبة الفارق الصغيرة جدا بالنسبة للقيمة الأعلى، ذلك التقارب يأتي تبعا بالترتيب التالي؛ 2.66، 4.87، 7.99 % على التوالي بالنسبة لقيمتها على الإتجاه [111]، لمتعدد البلورات و على الإتجاه [100]. في هذا الإتجاه الأخير فقط تتناقص الطاقة القصية لكن بشكل ضعيف جدا، بينما تتضاعف تقريبا قيمتها بشكل أسرع في الإتجاه [110] و تتضاعف تقريبا بشكل أقل على الإتجاه [111]. فباعتماد نفس التوالي السابق و عند الضغط 59 GPa تكون نسبة الفارق بالنسبة لأعلى قيمة هي؛ 21.04، 44.26، 63.11 %، بينما عند أخر ضغط فتكون 26.42، 58.60، 79.26 % و على التوالي أيضا.

توافق توزيع الطاقة القصية مع نمط السرعات العرضية يؤكد اتساق النموذج المرن المستخدم. تفوق الاتجاه العمودي على [110] يعكس أن مستويات [110] تمثل حواجز طاقية أعلى لانزلاق المستويات الذرية، مما قد يرتبط بتوزيع الشحنات الأيونية و تداخل الأغلفة الإلكترونية. التناقص الضعيف للطاقة في [100] مع الضغط، رغم كونه طفيفا، قد يشير إلى "ليونة اتجاهية ناشئة"- ظاهرة حيث يصبح اتجاه معين أكثر قابلية لتشوه القص تحت إجهاد عال، و هو سلوك قد يسبق التحولات الطورية أو إعادة التنظيم البنيوي.

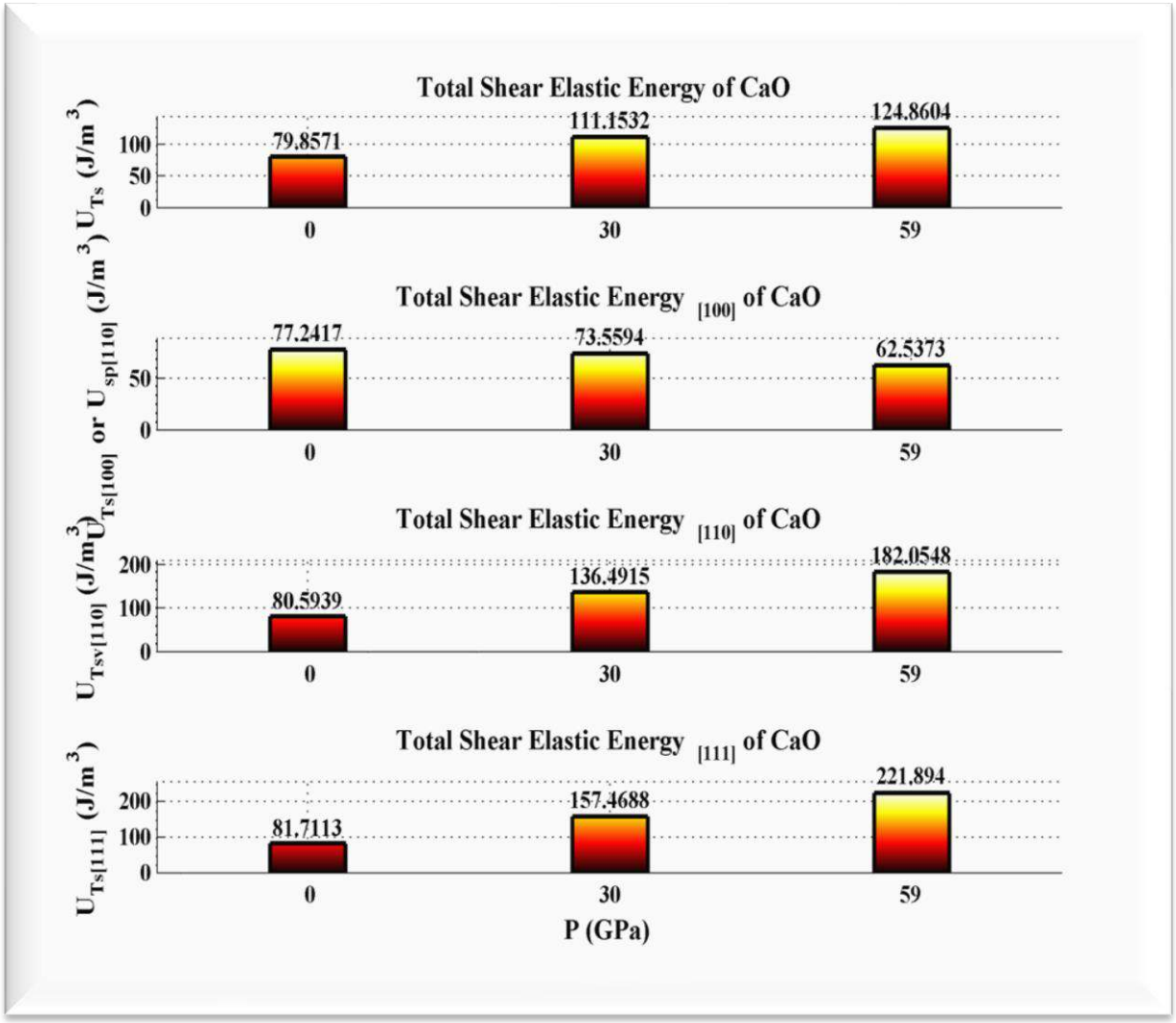
III-3-2-4 طاقات المرونة القصية الكلية في أكسيد الكالسيوم في أهم الإتجاهات:

الشكل(III-7) يمثل تغيرات قيم طاقات المرونة القصية الكلية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa.

من خلال القيم في الشكل (III-7) يمكن ملاحظة أن هناك تقارب واضح في الطاقة القصية الكلية، على الرغم من تغلبها في الإتجاه القطري [111] و تساويها في الإتجاهين المتبقيين التي تكون هي الأقل. هذا يتأكد بعد ا إطلاع أكثر على قيمة نسبة الفارق بالنسبة لأعلى قيمة، إذ تقدر عند الضغط المعدوم بـ؛ 4.16 % مقارنة بقيمتها على الإتجاهيين [100] و [110] و 0.91 %، أما عند الضغط الموالي فيقدر بـ؛ 46.11 و 18.56 % على التوالي، و عند الضغط الأخير فتكون مقدرة بـ؛ 65.65 و 31.42 % على نفس التوالي أيضا. عند الزيادة الضغط هذه الطاقة قيمتها متناقصة بشكل بطئ جدا في الإتجاهيين الأخرين، بينما تتزايد في الإتجاه القطري و بشكل أقل بقليل من الضعف.

تقارب قيم الطاقة القصية الكلية بين الاتجاهات يعكس مبدأ "التعويض الاتجاهي": عند جمع مساهمات القص في مستويات متعامدة، تميل الفروق الجزئية إلى التلاشي. تفوق الاتجاه [111] الطفيف قد يرتبط بطبيعة هذا المحور القطري الذي يجمع مساهمات متوازنة من معاملات مرونة متعددة البلور، مما يعزز كفاءة تخزين الطاقة على المستوى

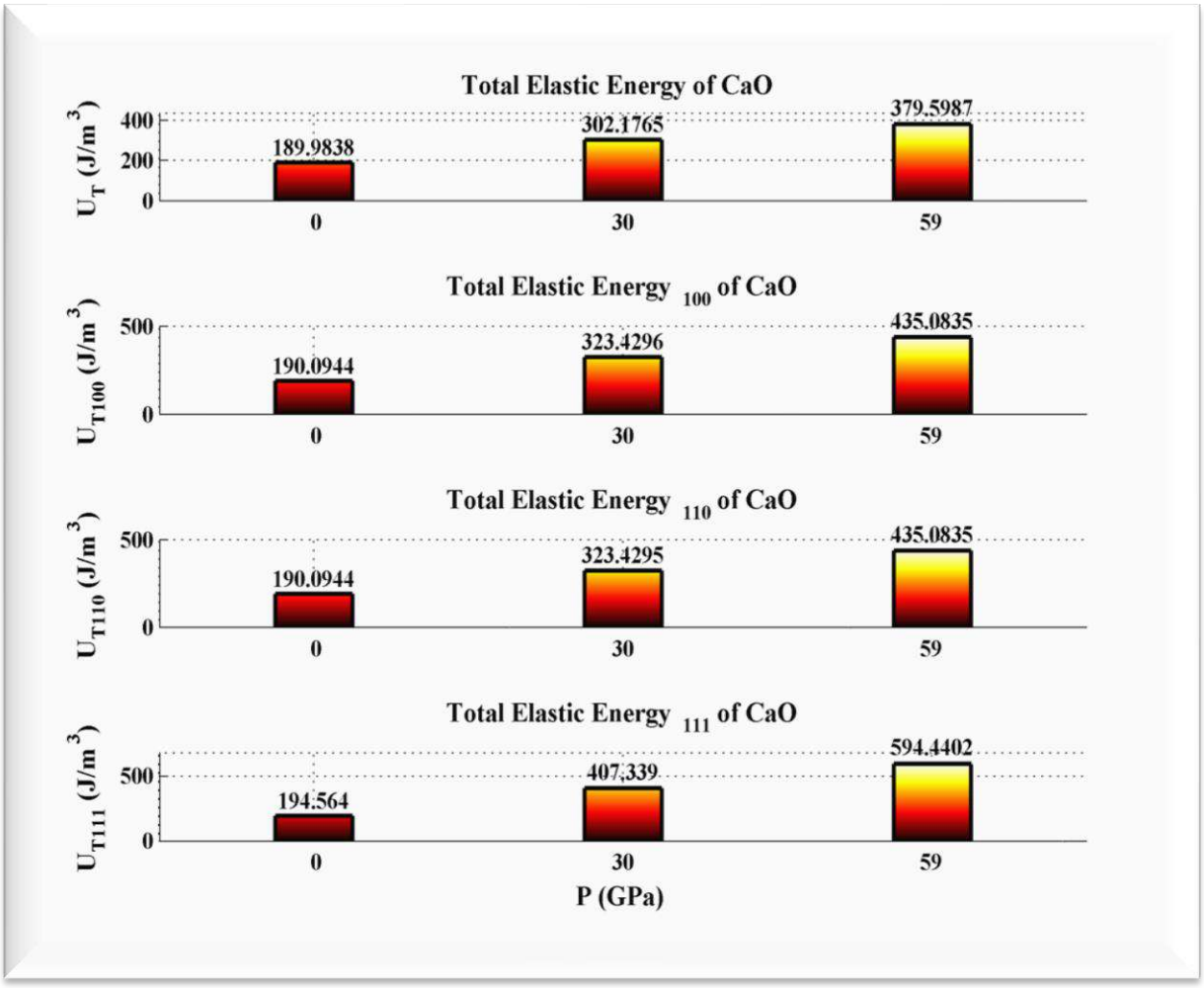
ثلاثي الأبعاد. استجابة هذا المقياس الكلي للضغط- بتزايد معتدل في معظم الاتجاهات و تسارع نسبي في [111]- تشير إلى أن الضغط يعيد توزيع "أعباء" القص داخليا، و هو سلوك معقد يتطلب تحليلا موتريا دقيقا لفهم آليات تبديد الطاقة.



الشكل(III-7): تغيرات قيم طاقات المرونة القصية الكلية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa

III-3-2-5 طاقات المرونة الكلية في أكسيد الكالسيوم في أهم الإتجاهات:

الشكل(III-8) يمثل تغيرات قيم طاقات المرونة الكلية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa.



الشكل(III-8): تغيرات قيم طاقات المرونة الكلية في CaO متعدد البلورات و عند أهم الإتجاهات البلورية عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa

توضح القيم في الشكل (III-8) أن هناك تقارب واضح في الطاقة الكلية، على الرغم من تغلبها في الإتجاه القطري [111] و تساويها في الإتجاهين المتبقيين و أقلها قيمتها في متعدد البلورات. يتأكد هذا من خلال قيمة نسبة الفارق بالنسبة لأعلى قيمة يكون عند الضغط المعدوم مقدرا على التوالي بـ؛ 2.30 و 2.35 %، و عند 30 GPa فيقدر بـ؛ 20.60 و 25.82 % على التوالي أيضا، و عند الضغط 59 GPa فتكون مقدرة بـ؛ 26.81 و 36.14 % على نفس التوالي دائما. عند الزيادة الضغط هذه الطاقة قيمتها تتزايد بالضعف تقريبا من أجل الإتجاه القطري، بينما تقل سرعة الزيادة في الإتجاهين المتبقيين بمقدار أقل بكثير من الضعف.

الطاقة الكلية تمثل المقياس الأشمل للاستجابة المرنة، حيث تدمج المساهمات الحجمية و القصية. التقارب النسبي بين الاتجاهات في هذا المقياس يعكس أن التباين الاتجاهي، رغم وضوحه في المكونات الفردية، يخفف عند النظر إلى الاستجابة الشاملة- و هو ما يتوافق مع سلوك المواد متعددة البلورات حيث يؤدي التوجيه العشوائي للحبيبات إلى متوسط الخواص. تفوق [111] و استقرار متعدد البلورات كأقل قيمة يؤكد صحة نماذج المتوسط المرن (فويغت-ريوس-هيل). التسارع التفاضلي تحت الضغط، حيث يتفوق الاتجاه القطري في كفاءة تخزين الطاقة، يفتح آفاقا للتحكم في الخواص الديناميكية عبر هندسة النسيج البلوري، خاصة في التطبيقات التي تتطلب امتصاص صدمات عالي الكفاءة.

الفصل الرابع

دراسة التمثيل ثلاثي الأبعاد لسرعات الموجات و الطاقة المرنة

IV-1 مقدمـــــة:

يهدف هذا الفصل إلى دراسة التمثيل ثلاثي الأبعاد لسرعات الموجات المرنة و التوزيع الاتجاهي للطاقة المرنة داخل المواد البلورية، و ذلك كأحد التطبيقات المتقدمة لنظرية المرونة الخطية. و على عكس المقاربات التقليدية التي تعتمد على المتوسطات المرنة العامة، يركز هذا الفصل على تحليل التغير الاتجاهي للخصائص الفيزيائية بدقة، مما يكشف عن التأثير الحقيقي للأنيسوتروبية البلورية. يعتمد المنهج النظري على استعمال معادلة كريستوفل لحساب السرعات الطولية و المستعرضة في الفضاء ثلاثي الأبعاد، بالإضافة إلى نمذجة توزيع الطاقة المرنة و تمثيلها بصريا عبر السطوح المجسمة و الخرائط القطبية. و سيتم تطبيق هذا الإطار الرياضي على مادة أكسيد الكالسيوم تحت ضغوط مختلفة، لينتهي الفصل بعرض و مناقشة النتائج .

IV-2 الأساس الفيزيائي و النظري:

IV-2-1 التمثيل الاتجاهي في الفضاء البلوري:

يوصف اتجاه انتشار الموجة بمتجه وحدة n يخضع لشرط التطبيع:

$$\mathbf{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1} \qquad (\mathbf{IV-1})$$

و يعبر عنه بالإحداثيات الكروية (α,θ) لتغطية شاملة لجميع الاتجاهات الفراغية، مما يتيح بناء تمثيلات هندسية دقيقة للخواص البلورية [85].

IV-2-2 مصفوفة كريستوفل ثلاثية الأبعاد:

تشتق مصفوفة كريستوفل من معاملات المرونة من الرتبة الرابعة و متجه الانتشار وفق العلاقة:

$$\boldsymbol{\Gamma_{ik} = C_{ijkl} n_j n_l} \qquad (\mathbf{IV-2})$$

يتم حل معادلة القيم الذاتية:

$$|\boldsymbol{\Gamma_{ik} - \rho V^2 \delta_{ik}}| = 0 \qquad (\mathbf{IV-3})$$

لاستخراج ثلاث سرعات موجية (طولية واحدة و مستعرضتين) بالإضافة إلى المتجهات الذاتية التي تحدد اتجاهات استقطاب الموجات داخل الشبكة البلورية [86].

IV-2-3 الحساب ثلاثي الأبعاد للسرعات و السطوح المجسمة:

تُحسب السرعات عبر العلاقة:

$$\mathbf{V} = \sqrt{\frac{\boldsymbol{\lambda}}{\boldsymbol{\rho}}} \qquad (\mathbf{IV-4})$$

لجميع الزوايا (α,θ)، لترسم على شكل أسطح ثلاثية الأبعاد. في المواد متساوية الخواص تكون هذه الأسطح كروية تقريبا، بينما تتشوه في المواد الأنيسوتروبية عاكسةً الاعتماد الاتجاهي للسرعة. كما يمكن أخذ مقاطع ثنائية على المستويات البلورية الرئيسية (100)، (110)، و (111) لتحليل التغير الاتجاهي بدقة أعلى [87].

IV-2-4 الطاقة المرنة وتوزيعها الاتجاهي:

تقدر كثافة الطاقة المرنة المخزنة نتيجة التشوه الميكانيكي بالعلاقة:

$$\mathbf{U} = \mathbf{C}_{ijkl}\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}\boldsymbol{\varepsilon}_{kl} \qquad (\mathbf{IV-5})$$

يسمح التمثيل الفراغي لهذا المقدار بتحديد الاتجاهات الأكثر مقاومة للتشوه، و مناطق التخزين الأمثل للطاقة، و العلاقة المباشرة بين الأنيسوتروبية و توزيع الطاقة [88].

IV-2-5 الأنيسوتروبية الصوتية و الاتجاهات البلورية الرئيسية:

يعبر مقياس الأنيسوتروبية الصوتية عن تباين سرعات الموجات مع الاتجاه، الناتج عن اختلاف توزيع الروابط الذرية و التناظر البلوري. يقيم هذا التباين من خلال درجة تشوه الأسطح ثلاثية الأبعاد و الفروق بين السرعات القصوى و الدنيا [89]. تُركَّز الدراسة بشكل خاص على الاتجاهات البلورية الأساسية [100]، [110]، و [111] لمقارنة سلوك الموجات و فهم ارتباط التناظر البلوري بالديناميكا الداخلية للمادة [90].

IV-2-6 خرائط الاستقطاب :

توضح هذه الخرائط اتجاه اهتزاز الجسيمات أثناء انتشار الموجة (موازيا لاتجاه الانتشار في الموجات الطولية، و عمودي عليه في المستعرضة). تعد هذه الأداة أساسية لتحليل تفاعل الأنماط الفونونية، و تتبع تغير الاستقطاب مع الاتجاه البلوري، و تطبيقات المواد الصوتية و البصرية المتقدمة [91].

IV-3 عرض و مناقشة نتائج دراسة ثلاثية الأبعاد:

III-3-1 سرع موجات المرونة في أكسيد الكالسيوم:

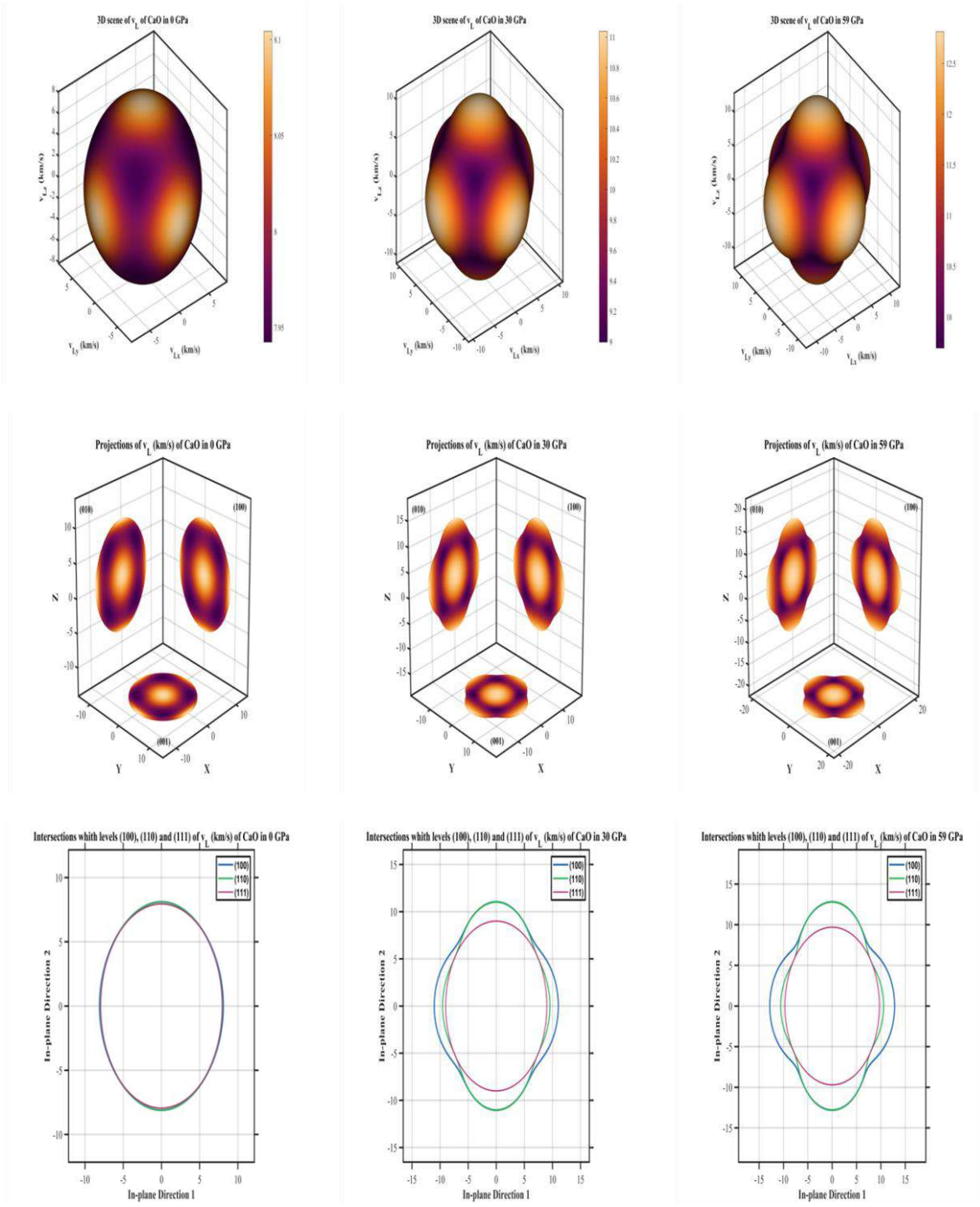
III-3-1-1 سرعة الموجات الطولية في أكسيد الكالسيوم ثلاثية الأبعاد:

الشكل(IV-1) يمثل تغيرات قيم سرعة موجة المرونة الطولية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa.

من خلال الشكل(IV-1)، يظهر أنه عند انعدام الإجهاد الخارجي، يتسم السطح المجسم بقرب لافت من الكروية الناعمة، مجسدا تجانسا مرنا يعكس التوازن بين قوى كولوم الجاذبة و قوى التنافر الإلكتروني ضمن شبكة المكعبة B1 ، حيث تتقارب القيمتان القصوى و الدنيا عند 8.104 و 7.942 km/s على التوالي، مشكلة فارقا نسبيا لا يتجاوز 2.04 % فقط. و مع تصاعد الضغط الهيدروستاتيكي إلى 30 GPa، يبدأ هذا الانتظام في التحول، حيث تظهر انتفاخات موضعية على امتداد المحاور الإحداثية تشير إلى هيمنة معامل C_{11} المسؤول عن الصلابة الطولية، لترتفع السرعة القصوى إلى 11.04 km/s. بينما تقتصر الزيادة في القيمة الدنيا على 8.997 km/s، موسعة الفارق النسبي إلى 22.71 %. و عند بلوغ 59 GPa، يتخذ المجسم هيئة مفصصة معقدة، مؤكدا تعمق اللاإيزوتروبية الصوتية؛ حيث تصل السرعة العظمى إلى 12.813 km/s و الدنيا إلى 9.693 km/s، محققة فارقا نسبيا يبلغ 32.19 %.

تبرز الإسقاطات المستوية لهذا المجسم على أوجه المكعب (100)، (010)، و (001) في الشكل(IV-1) استمرارية التناظر المكعبي عبر مدى الضغط المدروس، حيث تتطابق المقاطع في هندستها و تدرجاتها اللونية. فبينما تأخذ هيئة دوائر شبه متماثلة عند 0 GPa، تتحول إلى قطع إهليلجية مفلطحة عنـــد 30 GPa، ثم إلى نجوم رباعية الفصوص عند 59 GPa، حيث تتناغم القمم البرتقالية مع عائلة <100> و تغوص المناطق الأرجوانية عند <110>.

يثبت الجدول(IV-1) الكمي هذه الرؤى بدقة: تتوافق مركبات المتجه الموحد للقيم القصوى مع المحاور <100> ، و الدنيا مع <110>، و ثبات هذه الاتجاهات عبر الضغوط برهان على استقرار طور B1.



الشكل(IV-1): تغيرات قيم سرعة موجة المرونة الطولية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa

III-3-1-2 سرعة الموجات العرضية في أكسيد الكالسيوم ثلاثية الأبعاد:

أ)- سرعة الموجات العرضية العمودية في أكسيد الكالسيوم ثلاثية الأبعاد:

الشكل(IV-2) يمثل تغيرات قيم سرعة موجة المرونة العرضية العمودية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa

يكشف هذا الشكل عن سلوك فيزيائي مميز للسرعة العرضية العمودية، حيث يظهر السطح عند 0 GPa كروية مفلطحة طفيفة تعكس تجانسا نسبيا في مقاومة القص (4.74-4.94 km/s، فارق 4.25 %). و مع الضغط، يتحول إلى بنية نجمية معقدة عند 59 GPa، حيث تصعد القيمة القصوى إلى 8.15 km/s بينما تتراجع الدنيا إلى 3.71 km/s، مجسدة إعادة توزيع ديناميكي لإجهادات القص و تأثيرات غير توافقية تلين مسارات محددة، و موسعة الفارق النسبي إلى 119.5 %.

تظهر الإسقاطات المستوية في الشكل(IV-2) الحفاظ على التناظر المكعبي، و تتطور من دوائر بسيطة إلى أشكال فراشية تبرز فيها المناطق المرتفعة عند اتجاهات عمودية على المحاور <010>، و المنخفضة عند <001> .

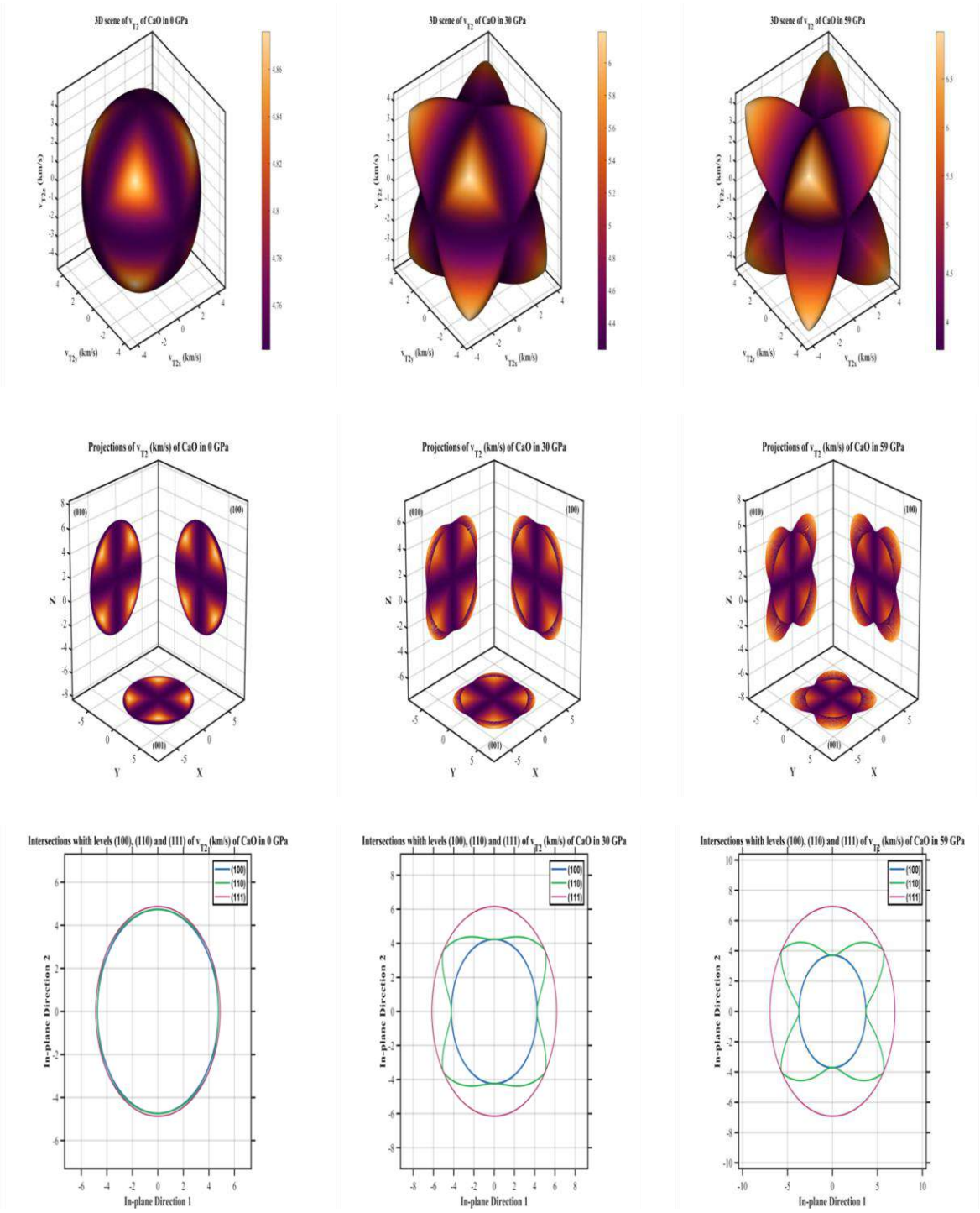
مقاطع المستويات البلورية تكشف تعقيدا متزايا: صلبان نجمية على (100)، و تراكيب فراشية على (110)، و تناظر سداسي مُعمَّق على (111).

قيم الجدول(IV-1) تؤكد كل ذلك، حيث الفارق السرعي يتسع من 0.20 إلى 4.44 km/s، و الاتجاهات المفضلة تبقى ثابتة، برهانا على استقرار البنية رغم التباين العددي الهائل.

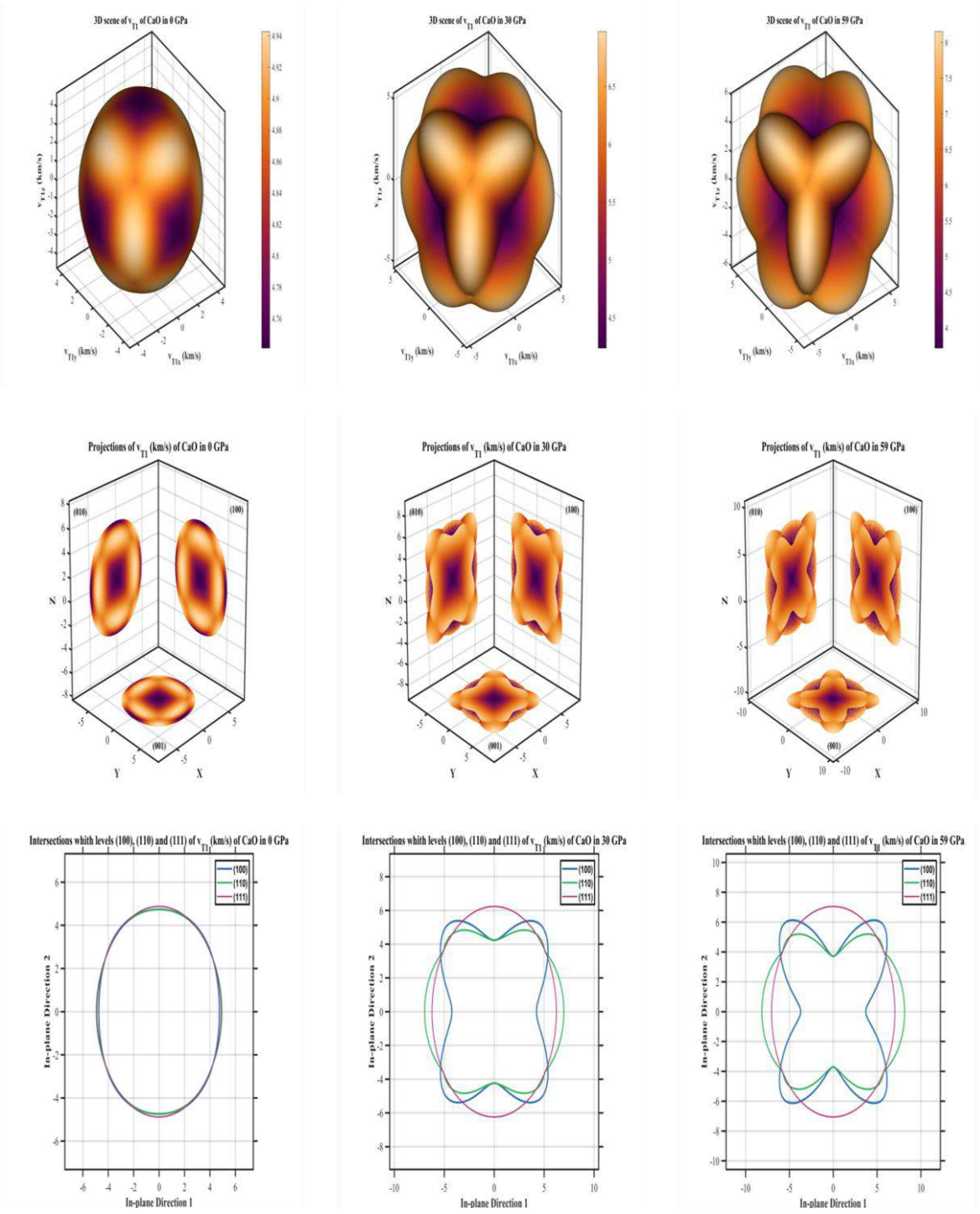
ب)- سرعة الموجات العرضية الأفقية في أكسيد الكالسيوم ثلاثية الأبعاد:

الشكل(IV-3) يمثل تغيرات قيم سرعة موجة المرونة العرضية الأفقية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa.

يتبع هذا الشكل نمطا مشابها في التحول الهندسي للسرعة العرضية الأفقية: من كروية مفلطحة عند 0 GPa (4.741-4.876 km/s ، فارق 2.85 %) إلى بنية نجمية معقدة عند 59 GPa (3.712-6.984 km/s ، فارق 88.3 %).



الشكل(IV-2): تغيرات قيم سرعة موجة المرونة العرضية العمودية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 Gpa



الشكل(IV-3): تغيرات قيم سرعة موجة المرونة العرضية الأفقية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 Gpa

الإسقاطات في نفس الشكل تظهر تطورا من دوائر متجانسة إلى نجوم متعددة الفصوص، حيث تبرز المناطق المرتفعة عند اتجاهات عمودية على [110]، و المنخفضة عند <001>.تكشف مقاطع التقاطع في الشكل (IV-3) تفاعلات معقدة بين معاملات المرونة على المستويات المائلة، مع الحفاظ على التناظر الداخلي.

القيم في الجدول(IV-1) توثق توسع الفارق من 0.135 إلى 3.272 km/s، و ثبات الاتجاهات المفضلة (<110> للقيم القصوى، <001> للدنيا) عبر الضغوط، مؤكدا استقرار الطور المكعب رغم التضخم في اللاإيزوتروبية.

III-3-2 طاقات المرونة في أكسيد الكالسيوم:

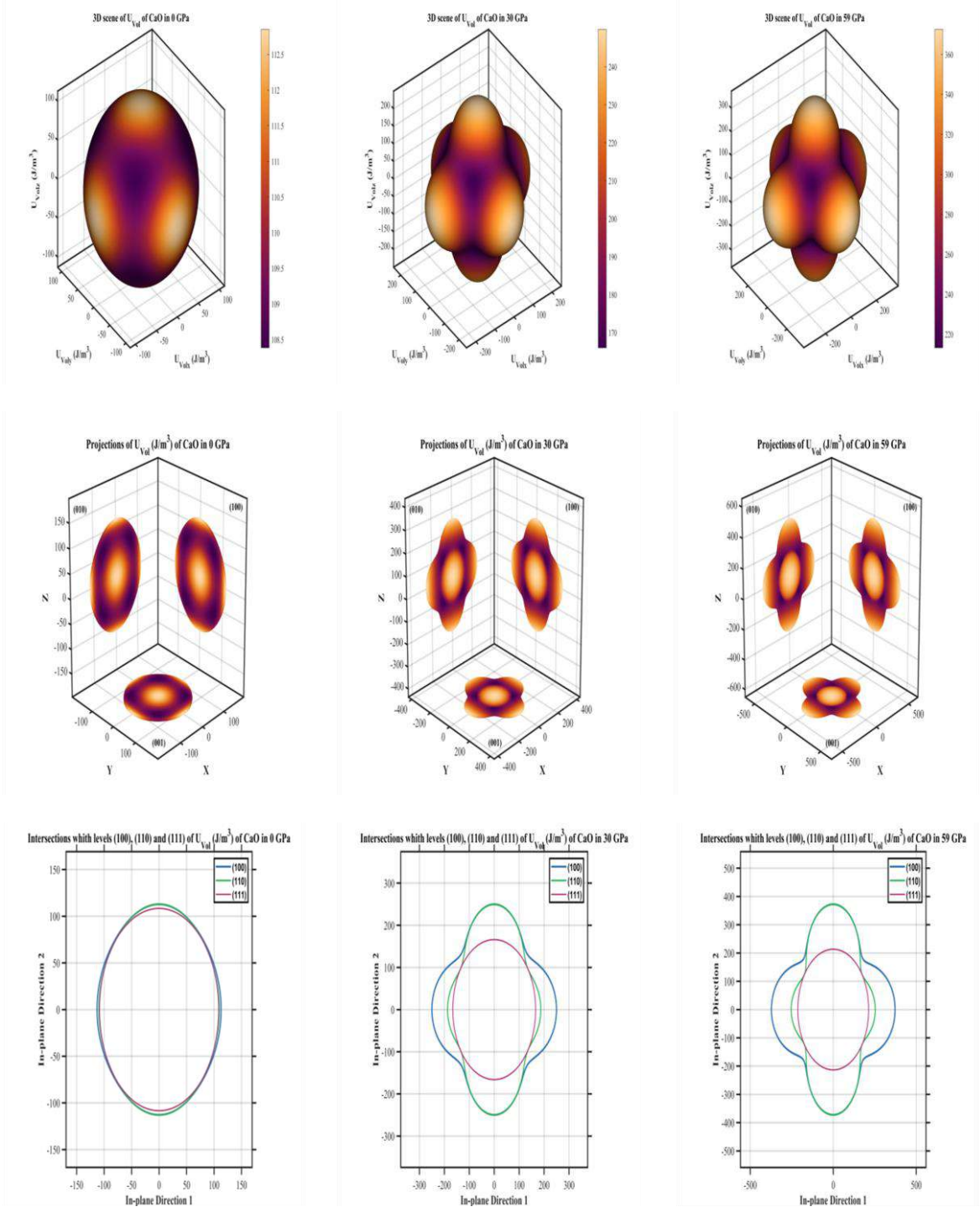
III-3-2-1 طاقة المرونة الحجمية في أكسيد الكالسيوم ثلاثية الأبعاد:

الشكل(IV-4) يمثل تغيرات قيم طاقة المرونة الحجمية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa.يقترب السطح المجسم في الشكل(IV-4) عند 0 GPa من كروية مفلطحة تعكس تجانسا في تخزين الطاقة الانضغاطية (108.38-112.85 J/m^3، فارق 4.12 %). و مع الضغط، يتحول إلى بنية مفصصة عند 59 GPa، حيث تصعد الطاقة القصوى إلى 372.55 جول/م^3 372.55 J/m^3 و الدنيا إلى 213.19 J/m^3، موسعة الفارق النسبي إلى 74.77 %.

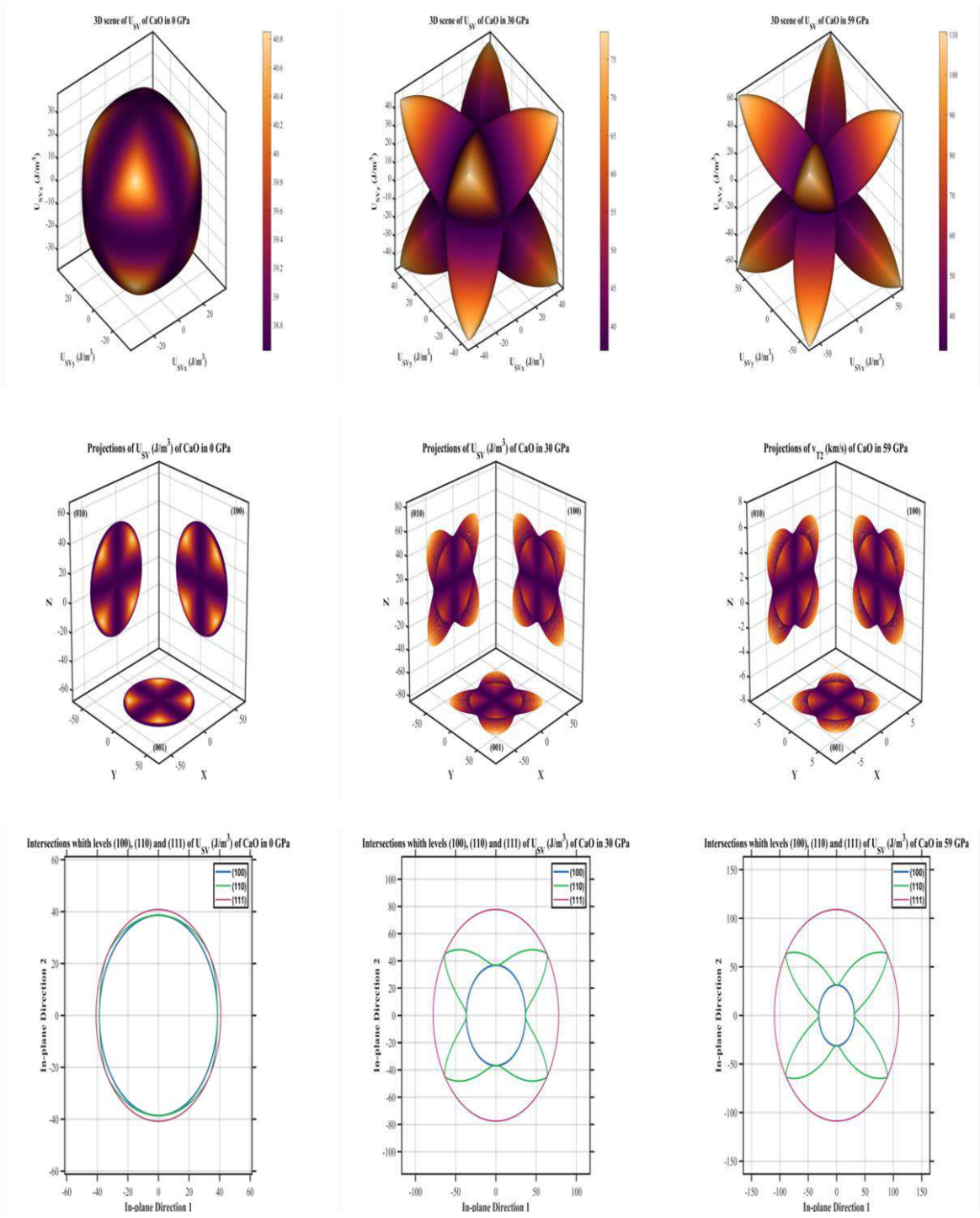
تتطور الإسقاطات في الشكل(IV-4) من دوائر شبه متماثلة إلى نجوم رباعية الفصوص، تتناغم قممها مع <100> و أخاديدها مع <110>. مقاطع المستويات البلورية في نفس الشكل تكشف هيمنة اتجاهية متزايدة في كفاءة تخزين الطاقة. أما القيم في الجدول(IV-1) فهي تحدد الاتجاهات المفضلة (<100> للقيم القصوى، <111> للدنيا)، و النسبة المتصاعدة للفارق النسبي تعكس تعزيزا انتقائيا لـ C_{11} تحت الضغط.

III-3-2-2 طاقة المرونة القصية في أكسيد الكالسيوم ثلاثية الأبعاد:

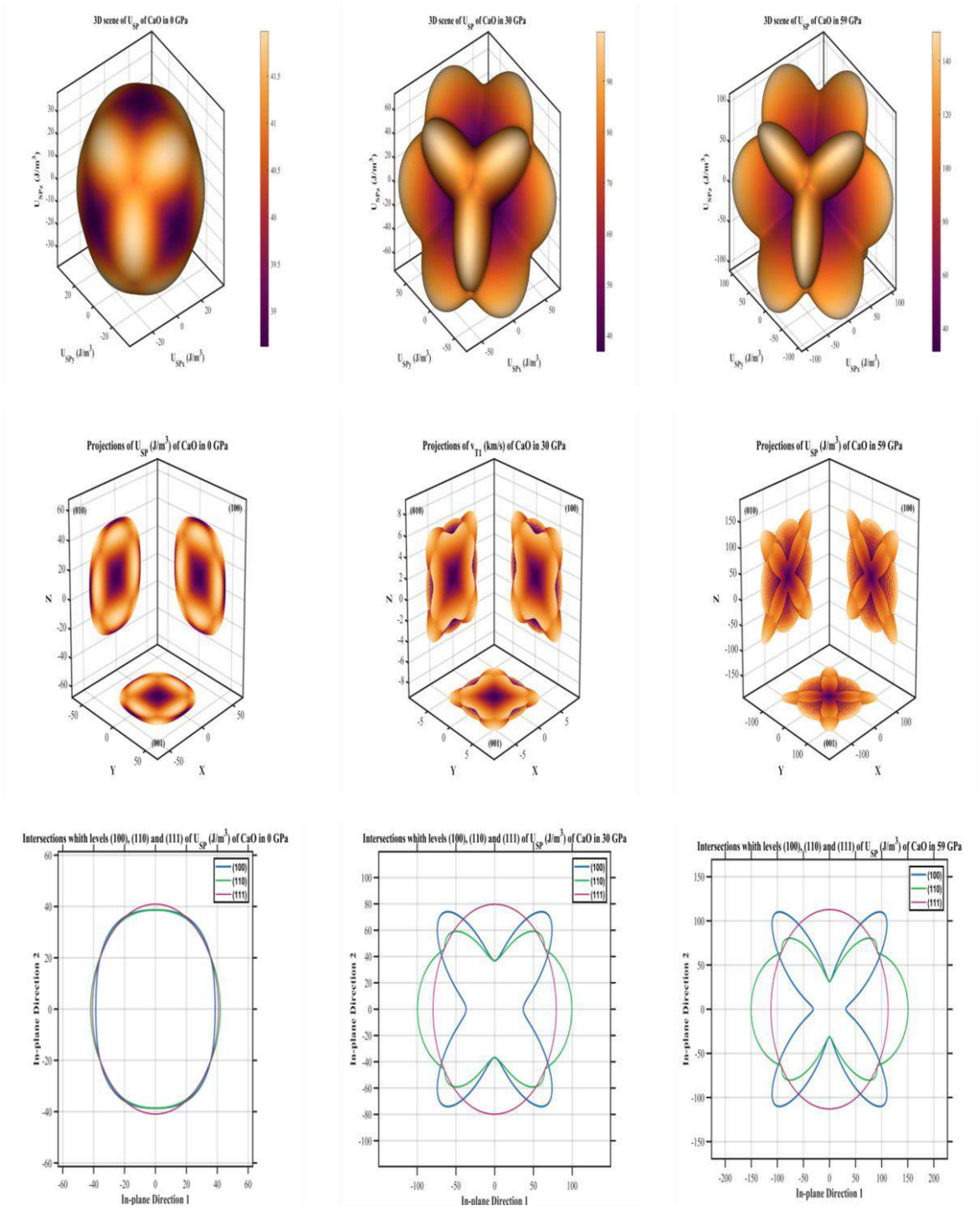
أ)- طاقة المرونة القصية العمودية في أكسيد الكالسيوم ثلاثية الأبعاد:



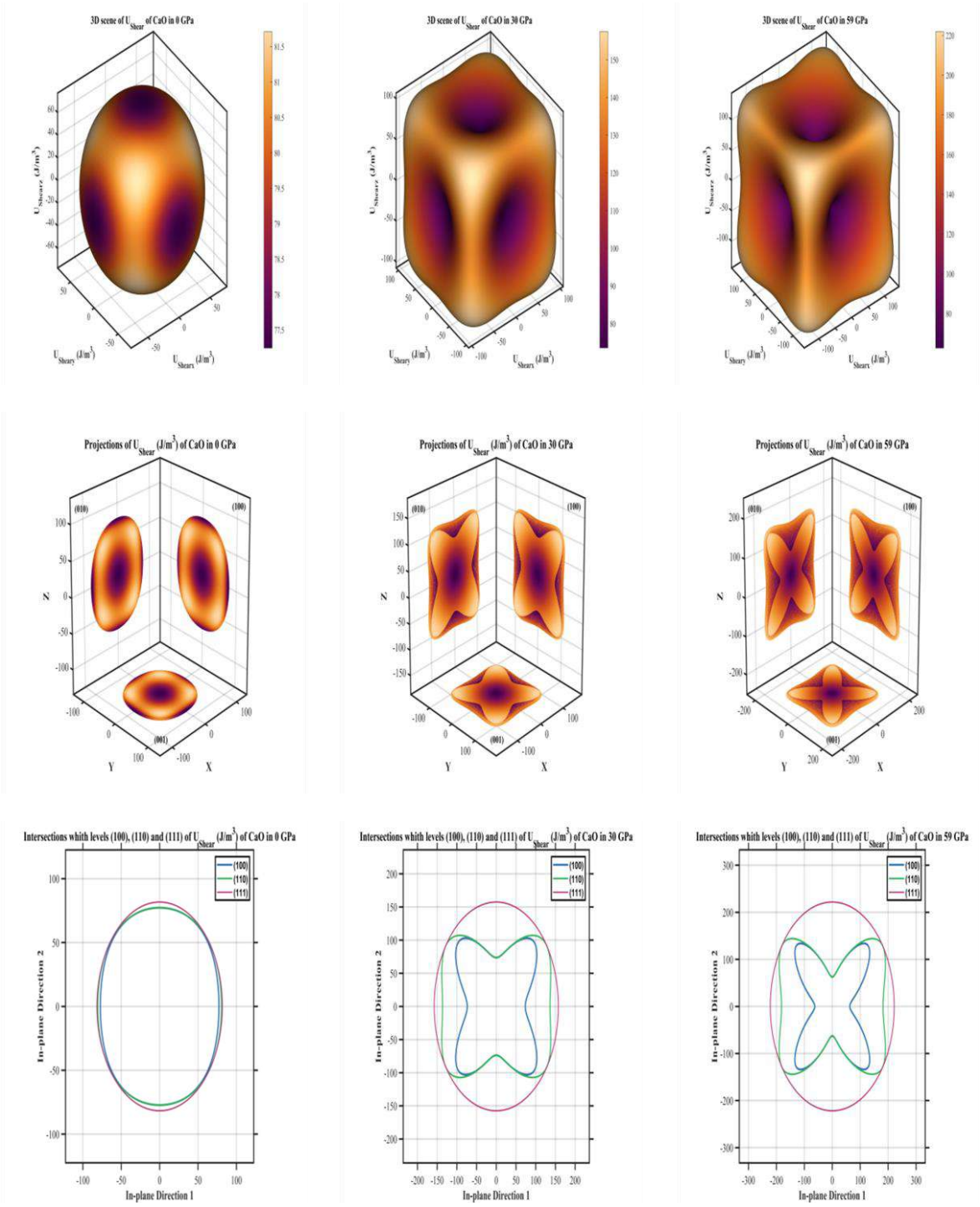
الشكل(IV-4): تغيرات قيم طاقة المرونة الحجمية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa



الشكل(IV-5): تغيرات قيم طاقة المرونة القصية العمودية في CaO: ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 Gpa



الشكل(IV-6): تغيرات قيم طاقة المرونة القصية الأفقية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa



الشكل(IV-7): تغيرات قيم طاقة المرونة القصية الكلية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa

الشكل(IV-5) يمثل تغيرات قيم طاقة المرونة القصية العمودية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa.يظهر الشكل(IV-5) عند 0 GPa تجانسا نسبيا (38.62-41.97 J/m^3، فارق 8.67 %)، ثم يتحول إلى بنية نجمية معقدة عند 59 GPa، حيث تصعد القيمة القصوى إلى 150.78 J/m^3 بينما تتراجع الدنيا إلى 31.27 J/m^3 ، محققة فارقا نسبيا يبلغ 382.2 % .

تتطور الإسقاطات في الشكل(IV-5) من دوائر بسيطة إلى أشكال فراشية تبرز فيها المناطق المرتفعة عند اتجاهات عمودية على [110]. مقاطع التقاطع في نفس الشكل تكشف تعقيدا اتجاهيا متزايدا في تخزين طاقة القص.

الجدول(IV-1) يوثق توسع الفارق الطاقي من 3.35 إلى 119.51 J/m^3، و ثبات الاتجاهات المفضلة (<110> للقيم القصوى، <001> للدنيا)، مؤكدا استقرار البنية رغم التباين الهائل.

ب)- طاقة المرونة القصية الأفقية في أكسيد الكالسيوم ثلاثية الأبعاد:

الشكل(IV-6) يمثل تغيرات قيم طاقة المرونة القصية الأفقية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa.

يتبع الشكل(IV-6) مسارا مشابها: من تجانس نسبي عند 59 GPa (38.62-40.85 J/m^3، فارق 5.77 %) إلى بنية نجمية معقدة عند 59 GPa (31.27-110.68 J/m^3، فارق 253.9 %). الإسقاطات في هذا الشكل تظهر تطورا من دوائر متجانسة إلى نجوم متعددة الفصوص، حيث تبرز المناطق المرتفعة عند اتجاهات عمودية على المستويات [111] مقاطع التقاطع في هذا الشكل تكشف تفاعلات معقدة بين معاملات القص على المستويات البلورية المختلفة. تثبت القيم الجدول توسع الفارق من 2.23 إلى 79.42 J/m^3، و ثبات الاتجاهات المفضلة (<111> للقيم القصوى، <001> للدنيا)، برهانا على استقرار الطور المكعب.

ج)- طاقة المرونة القصية الكلية في أكسيد الكالسيوم ثلاثية الأبعاد:

الشكل(IV-7) يمثل تغيرات قيم طاقة المرونة القصية الكلية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 Gpa.

يجمع هذا الشكل بين مساهمات القص العمودي و الأفقي، مظهرا عند 0 GPa تجانسا نسبيا (-81.71J/m^3 77.24، فارق 5.79 %)، ثم يتحول إلى بنية نجمية معقدة عند 59 GPa (221.89–62.54 جول/م^3، فارق 254.8 %).

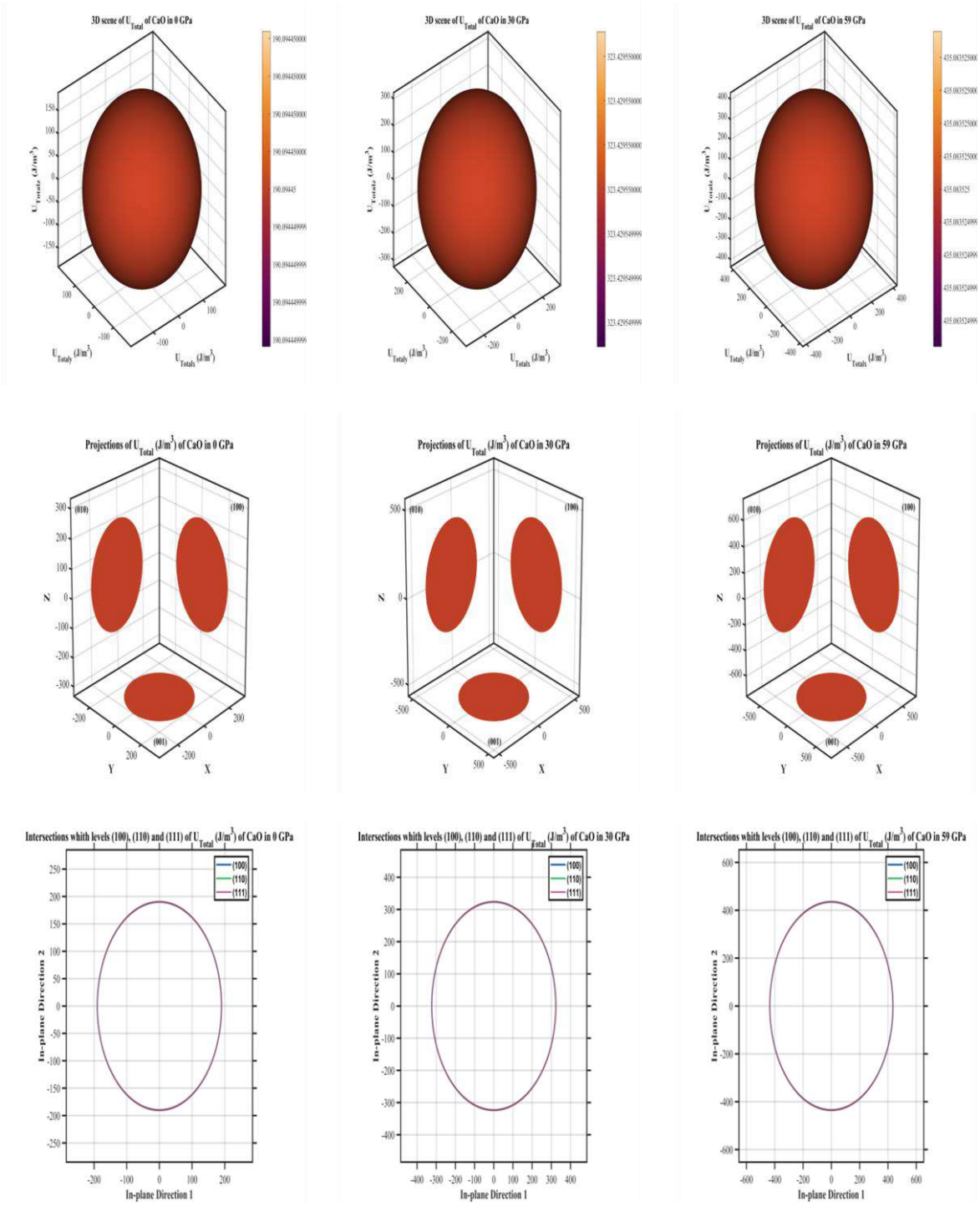
الإسقاطات في الشكل(IV-7) تتطور من دوائر بسيطة إلى أشكال فراشية تبرز فيها المناطق المرتفعة عند اتجاهات عمودية على [111]

مقاطع التقاطع في نفس الشكل تكشف تعقيدا اتجاهيا في تخزين الطاقة المركبة. بالإضافة لما توثقه القيم في الجدول من توسع في الفارق من 4.47 إلى 159.35 J/m^3، و ثبات الاتجاهات المفضلة (<111> للقيم القصوى، <001> للدنيا)، برهانا على استقرار الطور المكعب.

III-3-2-3 طاقة المرونة الكلية في أكسيد الكالسيوم ثلاثية الأبعاد:

الشكل(IV-8) يمثل تغيرات قيم طاقة المرونة الكلية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa.

تقدم الحالة في هذا الشكل استثناء لافتا: يحافظ السطح على كروية مثالية تماما عبر جميع الضغوط، حيث تتطابق القيمتان القصوى و الدنيا تماما (190.094، 323.430، 435.084 عند 0، 30 و 59 GPa على التوالي). بينما الإسقاطات في نفس الشكل تأخذ شكل دوائر مثالية ذات لون موحد، و مقاطع التقاطع تظهر كدوائر كاملة دون أي تشوه. هذا التجانس التام في الشكل(IV-8) يعكس طبيعة تعويضية: جمع المساهمات الحجمية و القصية يؤدي إلى إلغاء منهجي للتباينات الاتجاهية الجزئية، منتجا استجابة عيانية موحدة.



الشكل(IV-8): تغيرات قيم طاقة المرونة الكلية في CaO؛ ثلاثي الأبعاد، و الإسقاطات على أوجه المكعب البلوري و منحنيات تقاطع المجسمات الثلاثية مع المستويات البلورية [100]، [110] و [111] عند الضغوط 0، 30 و 59 GPa

الجدول(IV-1) المرافق للشكل يثبت تطابق القيم القصوى و الدنيا تماما، و ثبات هذا السلوك عبر الضغوط برهان على استقرار طور B1 و على الطبيعة العيانية المتجانسة للطاقة الكلية في المواد المكعبة.

الجدول(IV-1) القيم الدنيا و القصوي لسرعات الموجات المرونة و طاقاتها المحسوبة من تحديدها ثلاثي البعد.

الخاصية	الضغط (GPa)	القيمة القصوى	القيمة الدنيا	n_x (max)	n_y (max)	n_z (max)	n_x (min)	n_y (min)	n_z (min)
v_L (km/s)	0	8,10	7,94	1	1	-1,22E+16	1	1	-1
	30	11,04	9,00	1	1	-1,18E+16	1	1	1
	59	12,81	9,69	1	-1	-1,35E+16	1	-1	1
v_{T1} (km/s)	0	4,94	4,74	-1	4,1E+15	-4,07E+15	0	0	1
	30	6,97	4,24	-1	4,1E+15	4,07E+15	0	0	1
	59	8,15	3,71	-1	4,1E+15	4,07E+15	0	0	1
v_{T2} (km/s)	0	4,88	4,74	1	1	1	4,08E+15	-1	2,20E+16
	30	6,19	4,24	1	1	1	4,08E+15	-1	7,04E+14
	59	6,98	3,71	-1	1	-1	4,08E+15	-1	-3,17E+15
U_V (J/m^3)	0	112,85	108,38	1	1	-1,22E+16	1	1	-1
	30	249,87	165,96	1	1	-1,18E+16	1	1	1
	59	372,55	213,19	1	-1	-1,35E+16	1	-1	1
U_{SV} (J/m^3)	0	40,85	38,62	1	1	1	4,08E+15	-1	2,20E+16
	30	78,60	36,78	1	1	1	4,08E+15	-1	7,04E+14
	59	110,68	31,27	1	1	-1	4,08E+15	-1	-3,17E+15
U_{SP} (J/m^3)	0	41,97	38,62	-1	4,1E+15	-4,07E+15	0	0	1
	30	99,71	36,78	-1	4,1E+15	4,07E+15	0	0	1
	59	150,78	31,27	-1	4,1E+15	4,07E+15	0	0	1
U_{ST} (J/m^3)	0	81,71	77,24	1	1	1	3	1	-2,64E+16
	30	157,47	73,56	1	-1	1	-10	-1	-8,50E+16
	59	221,89	62,54	1	-1	1	6	1	-5,21E+16
U_T (J/m^3)	0	190,09	190,09	3	-1	-1	1	-2	25
	30	323,43	323,43	1	5	-1	-1	8	2
	59	435,08	435,08	1	-6	-1	-1	-46	6

خلاصـــــــة:

تكتسب هذه الدراسة أهميتها العلمية و التطبيقية من كونها تقدم تحليلا كميا و فيزيائيا متقدما للخصائص المرونية لأكسيد الكالسيوم (CaO) تحت ظروف ضغط هيدروستاتيكي متطرف، و هو ما يمثل نموذجا مرجعيا لفهم سلوك الأكاسيد الأيونية في بيئات مماثلة. إن الانتقال من المقاربات التقليدية المعتمدة على المتوسطات العيانية إلى التحليل الاتجاهي الدقيق عبر التمثيل ثلاثي الأبعاد يفتح نافذة جديدة لفهم اللاإيزوتروبية البلورية و تأثيرها على ديناميكا انتشار الموجات و تخزين الطاقة المرنة. علاوة على ذلك، توفر هذه النتائج أساسا متينا لتصميم مواد سيراميكية متقدمة قادرة على تحمل ظروف قاسية، و تعزز القدرة على نمذجة الخصائص الموجية للمعادن الأرضية بدقة غير مسبوقة، مما يجعل هذا العمل جسرا بين فيزياء المواد المكثفة والعلوم التطبيقية مثل الجيوفيزياء.

اعتمدت هذه الدراسة على منهجية حسابية بحتة تعتمد على نظرية دالة الكثافة (DFT) ضمن تقريب التدرج المعمم (GGA) و الدالة الوظيفية PBEsol المحسنة للمواد الصلبة، و ذلك باستخدام منصة مواد ستوديو (Materials Studio) و محرك الحسابات CASTEP. تم إجراء تحسين هندسي كامل للبنية البلورية من نوع B1 (Rock-salt)عند ضغوط 0، 30، و 59 GPa، مع ضبط معايير دقيقة لطاقة القطع و شبكة k-points لضمان موثوقية المخرجات. استخدمت معادلة كريستوفل لحساب السرعات الموجية الطولية و العرضية في الفضاء ثلاثي الأبعاد، و رسمت الأسطح المجسمة و الإسقاطات المستوية لتمثيل التوزيع الاتجاهي للسرعات و طاقات المرونة. كما تم استخراج القيم القصوى و الدنيا مع متجهات الاتجاه الموحدة من جداول كمية، و ربط النتائج بالتحليل الفيزيائي للاتجاهات البلورية الرئيسية [100]، [110]، و[111]، مع التحقق من استقرار الطور عبر شروط بورن-هوانغ للمرونة.

من أهم نتائج دراسة سرع الموجات و طاقات المرونة في متعدد البلورات والاتجاهات البلورية وجدنا:

- استجابة تفضيلية للضغط: تزداد السرعة الطولية (V_L) بنسبة 32.34 % بينما تزيد السرعة العرضية (V_T) بنسبة 8.81% فقط عند الانتقال من 0 إلى 59 GPa، مما يعكس هيمنة معامل الحجم (B) على الاستجابة للانضغاط الحجمي مقارنة بمعامل القص (G).

- تباين اتجاهي متعمق: يتسع الفارق النسبي للسرعة الطولية بين الاتجاهين [100] و [111] من ~ 2.02 % عند 0 GPa إلى ~ 29.45 % عند 59 GPa، مؤكدا أن الضغط يعيد تشكيل "خريطة الصلابة" البلورية بشكل انتقائي.

- سلوك فريد للموجات العرضية: تتناقص السرعة العرضية في الاتجاه [100] مع زيادة الضغط (بنسبة تصل إلى 89.33 % عند 59 GPa)، و هي ظاهرة تعكس ليونة اتجاهية ناشئة و تأثيرات غير توافقية انتقائية.

- طاقة المرونة الحجمية الأكثر حساسية: تزداد طاقة المرونة الحجمية بنسبة 131.31 % عند 59 GPa، مقابل 56.35 % فقط لطاقة القص، مما يؤكد أن التشوه الحجمي يخزن طاقة أكبر بكثير من تشوه القص في بنية B1.

- هيمنة الاتجاه [100] في التخزين الطولي: تسجل الطاقة الحجمية أعلى قيمة لها في الاتجاه [100]، مما يجعله "العمود الفقري" الميكانيكي للبلورة، بينما يكون الاتجاه [111] الأضعف في هذا الصدد.

- تقارب الطاقة الكلية: رغم التباين الواضح في المكونات الفردية، تظهر الطاقة المرنة الكلية تقاربا بين الاتجاهات، مما يتوافق مع نماذج المتوسط المرن (فويغت-ريوس-هيل) للمواد متعددة البلورات.

- استقرار الطور B1: ثبات الاتجاهات المفضلة للقيم القصوى و الدنيا عبر جميع الضغوط، مع غياب أي شذوذ في المنحنيات، يعد برهانا قويا على استقرار الطور المكعب حتى 59 GPa دون أي تحول طوري.

كما تحصلنا من خلال التمثيل ثلاثي الأبعاد للاتجاهية المرنة على مايلي:

- تحول هندسي دلالي: ينتقل السطح المجسم للسرعة الطولية من شكل شبه كروي عند 0 GPa إلى بنية مفصصة معقدة عند 59 GPa، مما يجسد بصريا تعمق اللاإيزوتروبية الصوتية مع الضغط.

- تطابق الإسقاطات و تأكيد التناظر: تتطابق الإسقاطات المستوية على أوجه المكعب (100)، (010)، و (001) تماما في الشكل والتدرج اللوني، مما يؤكد الحفاظ على التناظر المكعبي العالي و استقرار البنية البلورية.

- كشف البنية الداخلية عبر مقاطع المستويات: تكشف منحنيات التقاطع مع المستويات البلورية (100)، (110)، و (111) عن تفاعلات معقدة بين معاملات المرونة، حيث تظهر أشكال نجمية على (100)، و تراكيب فراشية على (110)، و تناظر سداسي على (111).

- حساسية عالية للموجات المستعرضة: يظهر السطح المجسم للسرعة العرضية (v_{T1}) و (v_{T2}) تحولا أكثر حدة من كروية مفلطحة إلى بنية نجمية معقدة، مع اتساع الفارق النسبي إلى أكثر من 100 %، مما يجعلها المؤشر الأدق للتباين الاتجاهي.

- طاقة القص الكلية: تعويض اتجاهي: يجمع السطح المجسم لطاقة القص الكلية (U_{ST}) بين مساهمات القص العمودي و الأفقي، مظهرا تعقيدا اتجاهيا مع الحفاظ على التناظر المكعبي، مما يعكس إعادة توزيع ديناميكي لأعباء القص الداخلية.

- حالة استثنائية للطاقة الكلية: يحافظ السطح المجسم للطاقة المرنة الكلية (U_T) على كروية مثالية تماما عبر جميع الضغوط، حيث تتطابق القيمتان القصوى و الدنيا، مما يعكس طبيعة تعويضية تجمع المساهمات الحجمية و القصية و تنتج تجانسا عيانيا شاملا.

- توثيق كمي دقيق: تؤكد الجداول المرفقة بالأشكال ثبات الاتجاهات المفضلة (<100> للقيم القصوى في v_L و U_V، و <111> للدنيا)، مع تضخم الفوارق العددية بشكل منتظم، مما يربط البصمة البصرية بالدليل العددي القاطع.

لهذه النتائج استخدامات و تطبيقات كثيرة، من بينها:

- النمذجة الجيوفيزيائية: تستخدم نتائج السرعات الموجية الاتجاهية لتحسين نماذج انتشار الموجات الزلزالية في وشاح الأرض، حيث تسود ظروف الضغط العالي و تلعب الأكاسيد الأيونية دورا محوريا.

- تصميم المواد المتقدمة: تتيح معرفة الاتجاهات ذات الصلابة القصوى (<100>) و الدنيا (<111>) التحكم في توجيه النسيج البلوري (Texture Control) لتصميم سيراميك عالي المقاومة للصدمات أو مواد ماصة للطاقة.

- تطوير أجهزة الاستشعار تحت الضغط: يمكن الاعتماد على الحساسية الاتجاهية للموجات المستعرضة في تطوير مجسات ضغط دقيقة تعتمد على تغير سرعة الصوت مع الاتجاه البلوري.

- معايرة نماذج المتوسط المرن: توفر البيانات الكمية للاتجاهية مرجعا دقيقا لاختبار و تحسين نماذج فويغت-ريوس-هيل المستخدمة في التنبؤ بخصائص المواد متعددة البلورات.

- فهم التحولات الطورية: يعد السلوك المرن الاتجاهي مؤشرا مبكرا محتملا للاقتراب من تحولات طورية، مما يفتح آفاقا لاستخدام هذه المنهجية في رصد استقرار المواد تحت ظروف متطرفة.

- تطبيقات في فيزياء البلازما و الاندماج: يمكن تعميم المنهجية على مواد أخرى ذات أهمية في جدران مفاعلات الاندماج، حيث تتعرض لإجهادات ميكانيكية و حرارية هائلة.

كذلك و أخيرا يمكن إقتراح في نفس منوال هذه الدراسة آفاقا بحثية مستقبلية، و هي:

- توسيع نطاق الضغوط و درجات الحرارة: دراسة الخصائص المرنة الاتجاهية لـ CaO و مواد مشابهة عند ضغوط تتجاوز 100 GPa و درجات حرارة مرتفعة لمحاكاة ظروف نواة الأرض بشكل أدق.

- شمول مواد أكسيدية أخرى: تطبيق نفس الإطار النظري و التحليلي على أكاسيد أيونية أخرى مثل MgO، FeO، و Al_2O_3 لبناء قاعدة بيانات شاملة للإيزوتروبية المرنة تحت الضغط.

- دمج التأثيرات الإلكترونية و المغناطيسية: توسيع النموذج ليشمل دراسة اقتران الخصائص المرنة مع الخواص الإلكترونية (مثل فجوة النطاق) و المغناطيسية في مواد ذات إلكترونات غير مزدوجة.

- محاكاة العيوب البلورية: دراسة تأثير العيوب النقطية (فراغات، شوائب) و الخطية (انخلاعات) على التوزيع الاتجاهي للسرعات و طاقات المرونة، و هو ما يقرب النموذج من الواقع المادي للمواد.

- تطوير أدوات تصور تفاعلية: تصميم برمجيات تفاعلية تسمح للباحثين بتدوير الأسطح المجسمة ثلاثية الأبعاد و قطعها افتراضيا لاستكشاف الاتجاهية المرنة بشكل بديهي.

- ربح النتائج بتجارب تشتت النيوترونات و الأشعة السينية: اقتراح بروتوكولات تجريبية للتحقق من التنبؤات النظرية للاإيزوتروبية الصوتية عبر تقنيات تشتت متقدمة، مما يعزز الجسر بين الحساب و التجربة.

- استكشاف مواد ثنائية و ثلاثية المكونات: تعميم المنهجية على مركبات أكثر تعقيدا مثل البيروفسكايت ($CaTiO_3$) لفهم تأثير التركيب الكيميائي على التطور الاتجاهي للخصائص المرنة تحت الضغط.

المراجـــــع البيداغوجية:

[01] Timoshenko, S. P., & Goodier, J. N. (1970). Theory of Elasticity (3rd ed.). McGraw-Hill.

[02] Landau, L. D., & Lifshitz, E. M. (1986). Theory of Elasticity (3rd ed., Vol. 7 of Course of Theoretical Physics). Pergamon Press.

[03] Sadd, M. H. (2021). Elasticity: Theory, Applications, and Numerics (4th ed.). Academic Press.

[04] Megson, T. H. G. (2018). Aircraft Structures for Engineering Students (7th ed.). Butterworth-Heinemann.

[05] Bower, A. F. (2009). Applied Mechanics of Solids. CRC Press.

[06] Reddy, J. N. (2017). Energy Principles and Variational Methods in Applied Mechanics (2nd ed.). Wiley.

[07] Nye, J. F. (1985). Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices. Oxford University Press.

[08] ASTM International. (2021). ASTM E8/E8M-21: Standard Test Methods for Tension Testing of Metallic Materials. ASTM International.

[09] ISO. (2019). ISO 6892-1: Metallic materials — Tensile testing — Part 1: Method of test at room temperature. International Organization for Standardization.

[10] Gurtin, M. E., & Murdoch, A. I. (1975). A continuum theory of elastic material surfaces. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 57(4), 291–323.

[11] Benedek, G., & Vaghi, F. (2020). Brillouin Light Scattering: Principles and Applications in Condensed Matter Physics. Springer.

[12] Oliver, W. C., & Pharr, G. M. (2004). Measurement of hardness and elastic modulus by instrumented indentation: Advances in understanding and refinements to methodology. Journal of Materials Research, 19(1), 3–20.

[13] Cammarata, R. C. (1994). Surface and interface stress effects in thin films. Progress in Surface Science, 46(1), 1–38.

[14] Le Page, Y., & Saxe, P. (2002). Symmetry-general least-squares extraction of elastic data for strained materials from ab initio calculations of stress. Physical Review B, 65(10), 104104.

[15] Frenkel, D., & Smit, B. (2002). Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications (2nd ed.). Academic Press.

[16] Christensen, R. M. (1979). Mechanics of Composite Materials. Wiley.

[17] Callister, W. D., & Rethwisch, D. G. (2020). Materials Science and Engineering: An Introduction (10th ed.). John Wiley & Sons.

[18] Ashby, M. F., & Jones, D. R. H. (2012). Engineering Materials 1: An Introduction to Properties, Applications and Design (4th ed.). Butterworth-Heinemann.

[19] Hull, D., & Clyne, T. W. (1996). An Introduction to Composite Materials (2nd ed.). Cambridge University Press.

[20] Hill, R. The elastic behaviour of a crystalline aggregate.Proc. Phys. Soc. A. 65, 349 (1952).

[21] Voigt W. Lehrburch der Kristallphysik. Leipzig: Teubner; 1928.

[22] Reuss A, Angew Z. Math. Mech. 1929;9:49.

[23] Zener C. Elasticity and an elasticity of metals. Chicago: University of Chicago Press; 1948.

[24] Ranganathan, S. I., & Ostoja-Starzewski, M. (2008). Universal elastic anisotropy index. Physical review letters, 101(5), 055504..

[25] Anderson, O. L. (1963). A simplified method for calculating the Debye temperature from elastic constants. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 24(7), 909-917.

[26] Achenbach, J. D. (1973). Wave Propagation in Elastic Solids. North-Holland Publishing Company.

[27] Graff, K. F. (1975). Wave Motion in Elastic Solids. Dover Publications.

[28] Rose, J. L. (2014). Ultrasonic Guided Waves in Solid Media. Cambridge University Press.

[29] Schreiber, E., Anderson, O.L., Soga, N.: Elastic Constants and Their Measurements. Mcgraw-hill, New York (1973)

[30] Feng, J., Xiao, B., Wan, C. L., Qu, Z. X., Huang, Z. C., Chen, J. C., ... & Pan, W. J. A. M. (2011). Electronic structure, mechanical properties and thermal conductivity of Ln2Zr2O7 (Ln= La, Pr, Nd, Sm, Eu and Gd) pyrochlore. Acta Materialia, 59(4), 1742-1760.

[31] A. Siddique, A. Khalil, B. S. Almutairi et al., “Structural, electronic, mechanical and dynamical stability properties of $LiAH_3$ (A = Sc, Ti & V) perovskite-type hydrides: a first principle study,” Chemical Physics, vol. 568, article 111851, 2023.

[32] Dieter, G. E. (1986). Mechanical Metallurgy (3rd ed.). McGraw-Hill.

[33] Lubliner, J., & Papadopoulos, P. (2016). Introduction to Solid Mechanics: An Integrated Approach. Springer.

[34] Mindlin, R. D. (1964). Micro-structure in linear elasticity. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 16(1), 51–78.

[35] Holzapfel, G. A. (2000). Nonlinear Solid Mechanics: A Continuum Approach for Engineering. Wiley.

[36] OXYDE DE CALCIUM [archive], fiche(s) de sécurité du Programme International sur la Sécurité des Substances Chimiques [archive], consultée(s) le 9 mai 2009

[37] Son, P. R., and R. A. Barrels, CaO and SrO single crystal elastic constants and thief pressure erivatives, J. Phys. Chem. Solids, $$, 819-828, 1972.

[38] Jeanloz, R., Ahrens, T. J., Mao, H. K., & Bell, P. M. (1979). B1-B2 transition in calcium oxide from shock-wave and diamond-cell experiments. Science, 206(4420), 829-830.

[39] Mammone, J. F., H. K. Mao, and P.M. Bell, Equation of state of CaO under static pressure conditions, Geophys. Res. Lett., 8, 140-142, 1981

[40] Mehl, M. J., Cohen, R. E., & Krakauer, H. (1988). Linearized augmented plane wave electronic structure calculations for MgO and CaO. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 93(B7), 8009-8022.

[41] P. Richet, H.K. Mao, P.M. Bell, J. Geophys. Res. 93 (1988) 15279.

[42] Oda, H., O. L. Anderson, D.G. Isaak, and I. Suzuki, Measurement of elastic properties of single-crystal CaO up to 1200 K, Phys. Chem. Miner., I9, 96-105, 1992.

[43] D'Arco, P., Jolly, L. H., & Silvi, B. (1992). Periodic Hartree-Fock study of B1⇌ B2 reactions: phase transition in CaO. Physics of the Earth and Planetary interiors, 72(3-4), 286-298.

[44] Karki, B. B., & Crain, J. (1998). Structure and elasticity of CaO at high pressure. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 103(B6), 12405-12411.

[45] Dubrovinsky, L., Dubrovinskaia, N., & Crichton, W. (2002). Structural behavior of CaO at high pressures'. American Mineralogist, 87(10), 1310-1315.

[46] Karki, B. B., & Wentzcovitch, R. M. (2003). Vibrational and quasiharmonic thermal properties of CaO under pressure. Physical Review B, 68(22), 224304.

[47] Baltache, H., Khenata, R., Sahnoun, M., Driz, M., Abbar, B., & Bouhafs, B. (2004). Full potential calculation of structural, electronic and elastic properties of alkaline earth oxides MgO, CaO and SrO. Physica B: Condensed Matter, 344(1-4), 334-342.

[48] Schön, J. C. (2004). Enthalpy landscapes of the earth alkaline metal oxides. Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie, 630(13-14), 2354-2366.

[49] Ono, S., & Oganov, A. R. (2005). 'Phase transitions in CaO at high pressures and temperatures'. Physical Review B, 72(17), 174107.

[50] Louail, L., Krachni, O., Bouguerra, A., & Sahraoui, F. A. (2006). Effect of pressure on structural and elastic properties of alkaline-earth oxide CaO. Materials Letters, 60(25-26), 3153-3155.

[50] Wang, Y., et al. (2006). ‘ First-principles study of structural, electronic, and optical properties of CaO under pressure’. JPCM.

[51] Deng Y, Jia O-H, Chen X-R, Zhu J. Phase transition and elastic constants of CaO from firstprinciple calculations. Physica B: Condensed Matter. 2007;392:229-32.

[52] Zhang, J., & Zhao, Y. (2010). ‘Thermodynamic stability and phase transitions of alkaline earth oxides under high pressure’. Geophysical Research Letters, 37(12), L12309.

[53] Bhardwaj, P., & Singh, S. (2010). Role of temperature in the numerical analysis of CaO under high pressure. Open Chemistry, 8(1), 126-133.

[54] Karki, B. B., & Stixrude, L. (2013). ‘First-principles calculations of the elastic properties of CaO under high pressure’. Earth and Planetary Science Letters, 361, 345-354.

[55] Cinthia, A. J., Priyanga, G. S., Rajeswarapalanichamy, R., & Iyakutti, K. (2015). Structural, electronic and mechanical properties of alkaline earth metal oxides MO (M= Be, Mg, Ca, Sr, Ba). Journal of Physics and Chemistry of Solids, 79, 23-42.

[56] Labidi, S., Zeroual, J., Labidi, M., Klaa, K., & Bensalem, R. (2017). Structural electronic and optical properties of MgO, CaO and SrO binary compounds: comparison study. Solid State Phenomena, 257, 123-126.

[57] Wang, L., et al. (2018). "Applications of CaO in Thin-Film Transistors." Advanced Electronic Materials, 4(3), 1700567.

[58] Kürkçü, C., Merdan, Z., & Yamçıçıer, Ç. (2018). Structural phase transition and electronic properties of CaO under high pressure. Materials Research Express, 5(12), 125903.

[59] Li, H., et al. (2019). "Optical Properties of Calcium Oxide for UV Applications." Optical Materials, 90, 156-162.

[60] Zhang, Y., et al. (2020). "Electronic Properties of Calcium Oxide Nanoparticles." Journal of Materials Science, 55(12), 12345-12356.

[61] Hammou, N., Zaoui, A., & Ferhat, M. (2020). Polytypism in calcium oxide compound: Mechanical and dynamical evidence of structural stability. Journal of Alloys and Compounds, 815, 152424.

[62] Chen, X., et al. (2021). "Infrared Absorption of CaO for Gas Sensing." Sensors and Actuators B: Chemical, 320, 128456.

[63] Vyas, P., Bhatt, N. K., & Vyas, P. R. (2021, August). Study of temperature dependent elastic properties of CaO. In AIP Conference Proceedings (Vol. 2352, No. 1). AIP Publishing.

[64] عبد اللاوي و ظرايفية، (2022)، 'دارسة الخصائص البنيوية، المرونية و التيرموديناميكية لـ CaO عند ضغوط النموذج الزلزالي PREM الأقل من 140 GPa حسابيا'، مذكرة ماستر، فيزياء مواد، جامعة قاصدي مرباح ورقلة.

[65] بن عطاءالله، (2024)، ' المساهمة في دراسة الخصائص البنيوية، المرونية و التيرموديناميكية لأكسيدي المنغنيزيوم (MgO) و الكالسيوم (CaO) عند ضغوط النموذج PREM حتى الضـغط 140 GPa بالحساب'، رسالة دكتوراه، فيزياء مواد، جامعة قاصدي مرباح ورقلة.

[66] M. D. Segall, P. J. Lindan, M. A. Probert, C. J. Pickard, P. J. Hasnip, S. J. Clark, and M. C. Payne, "First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code," J. Phys.: Condens. Matter, vol. 14, no. 11, pp. 2717–2744, 2002.

[67] S. J. Clark, M. D. Segall, C. J. Pickard, P. J. Hasnip, M. I. Probert, K. Refson, and M. C. Payne, "First principles methods using CASTEP," Z. Kristallogr., vol. 220, no. 5-6, pp. 567–570, 2005.

[68] Dassault Systèmes BIOVIA, Materials Studio User Guide, Version 2021, San Diego: Dassault Systèmes, 2021.

[69] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias, and J. D. Joannopoulos, "Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients," Rev. Mod. Phys., vol. 64, no. 4, pp. 1045–1097, 1992.

[70] D. Vanderbilt, "Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism," Phys. Rev. B, vol. 41, no. 11, pp. 7892–7895, 1990.

[71] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, "Special points for Brillouin-zone integrations," Phys. Rev. B, vol. 13, no. 12, pp. 5188–5192, 1976.

[72] P. Hohenberg and W. Kohn, "Inhomogeneous electron gas," Phys. Rev., vol. 136, no. 3B, pp. B864–B871, 1964.

[73] W. Kohn and L. J. Sham, "Self-consistent equations including exchange and correlation effects," Phys. Rev., vol. 140, no. 4A, pp. A1133–A1138, 1965.

[74] W. Kohn, "Nobel Lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals," Rev. Mod. Phys., vol. 71, no. 5, pp. 1253–1266, 1999.

[75] J. P. Perdew and Y. Wang, "Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy," Phys. Rev. B, vol. 45, no. 23, pp. 13244–13249, 1992.

[76] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Generalized gradient approximation made simple," Phys. Rev. Lett., vol. 77, no. 18, pp. 3865–3868, 1996.

[77] J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, and C. Fiolhais, "Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation," Phys. Rev. B, vol. 46, no. 11, pp. 6671–6687, 1992.

[78] J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, O. A. Vydrov, G. E. Scuseria, L. A. Constantin, X. Zhou, and K. Burke, "Restoring the density-gradient expansion for exchange in solids and surfaces," Phys. Rev. Lett., vol. 100, no. 13, p. 136406, 2008.

[79] J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, O. A. Vydrov, G. E. Scuseria, L. A. Constantin, X. Zhou, and K. Burke, "Supplemental Material: Restoring the density-gradient expansion for exchange in solids and surfaces," Phys. Rev. Lett., vol. 100, no. 13, 2008.

[80] Z. Wu and R. E. Cohen, "More accurate generalized gradient approximation for solids," Phys. Rev. B, vol. 73, no. 23, p. 235116, 2006.

[81] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 8th ed. New York: Wiley, 2005.

[82] F. D. Murnaghan, "The compressibility of media under extreme pressures," Proc. Natl. Acad. Sci. USA, vol. 30, no. 9, pp. 244–247, 1944.

[83] F. Birch, "Finite elastic strain of cubic crystals," Phys. Rev., vol. 71, no. 11, pp. 809–824, 1947.

[84] M. Born and K. Huang, Dynamical Theory of Crystal Lattices. Oxford: Oxford University Press, 1954.

[85] Nye, J. F. (1985). Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices. Oxford University Press.

[86] Fedorov, F. I. (1968). Theory of Elastic Waves in Crystals. Plenum Press.

[87] Auld, B. A. (1973). Acoustic Fields and Waves in Solids, Vol. I. John Wiley & Sons.

[88] Landau, L. D., & Lifshitz, E. M. (1970). Theory of Elasticity (2nd ed.). Pergamon Press.

[89] Mouhat, F., & Coudert, F.-X. (2016). "Elastic anisotropy of crystals". AIP Advances, 6, 095209.

[90] Chung, D. H., & Buessem, W. R. (1967). "The Elastic Anisotropy of Crystals". Journal of Applied Physics, 38(5), 2010.

[91] Musgrave, M. J. P. (1970). Crystal Acoustics. Holden-Day.

الملخص:

تقدم هذه الدراسة تحليلا كميا و فيزيائيا متقدما لأكسيد الكالسيوم (CaO) في طور B1 تحت ضغوط تصل إلى 59 GPa، مبرزة الفجوة الجوهرية بين السلوك العياني لمتعدد البلورات و الاستجابة المجهرية الحقيقية أحادية البلورة: فبينما تظهر القيم متعددة البلورات تجانسا ظاهريا معزيادة السرعة الطولية بنسبة 32.34 % و العرضية بنسبة 8.81 % فقط، يكشف التحليل الاتجاهي الدقيق عبر تمثيل كريستوفل ثلاثي الأبعاد عن لاإيزوتروبية متعمقة تتضخم مع الضغط، حيث يتسع الفارق النسبي للسرعة الطولية بين اتجاهي <100> و <111> من 2.04 % إلى 32.19 %، و تتراجع السرعة العرضية في اتجاه <001> فعليا من 4.74 إلى 3.71 km/s (- 21.7 %)رغم التصلب العام، مما يعكس ليونة اتجاهية ناشئة لا ترصد في المتوسطات العيانية. تتضخم طاقة المرونة الحجمية القصوى بنسبة 230 % في <100> بينما تتراجع طاقة القص الدنيا في <001> بنسبة 19 %، في حين تحافظ الطاقة الكلية على تجانس عياني تام (190.09 → 435.08 J/m^3) بفضل التعويض المنهجي بين المساهمات الحجمية و القصية. يؤكد ثبات الاتجاهات المفضلة للقيم القصوى و الدنيا عبر جميع الضغوط استقرار طور Rock-saltديناميكيا دون تحول طوري، مؤسسا نموذجا مرجعيا يربط بين التباين المجهري و الاتساق العياني، مع تطبيقات جوهرية في النمذجة الجيوفيزيائية و تصميم المواد المتقدمة.

الكلمات المفتاحية: الضغط العالي، أكسيد كالسيوم، طور B1 مستقر ديناميكيا، لاإيزوتروبية مرنة متطورة، اتجاهات انتشار الموجة،

Abstract:

This study presents an advanced quantitative and physical analysis of the elastic properties of calcium oxide (CaO) in its B1 cubic phase under hydrostatic pressures up to 59 GPa, employing Density Functional Theory within the PBEsol approximation coupled with the Christoffel equation for comprehensive three-dimensional wave propagation modeling. The results reveal a selective lattice stiffening mechanism, wherein the maximum longitudinal wave velocity increases from 8.104 to 12.813 km/s (+58.14 %) along the <100> direction, while the minimum transverse velocity along <001> paradoxically decreases from 4.74 to 3.71 km/s (−21.7 %), thereby expanding the relative anisotropy ratio from 2.04 % to 32.19 %. The maximum volumetric elastic energy density escalates by 230 %, whereas shear energy components exhibit directional disparities exceeding 380 %; remarkably, the total elastic energy maintains perfect macroscopic homogeneity (190.09 → 435.08 J/m³) through systematic compensation between volumetric and shear contributions. The invariance of preferred crystallographic directions for extremal values across all pressure regimes constitutes definitive evidence for the dynamic stability of the Rock-salt phase without any pressure-induced structural transition. These findings establish CaO as a paradigmatic reference system for elucidating vibrational energy transport in ionic oxides under extreme conditions, with significant implications for geophysical seismic modeling and the rational design of advanced ceramic materials.

Keywords: High-pressure, calcium oxide, Dynamically stable B1 phase, Evolving elastic anisotropy, Directional wave propagation