



## **Study the Effect of High Pressure and High Temperature on the Properties of NaCl-B<sub>1</sub>**

**Janan F. Ahmad<sup>1\*</sup>; Zeena R. Mhmood<sup>2</sup>**

Department of Physics, College of Education for Pure Science, University of Mosul, Mosul, Iraq

Email: <sup>1\*</sup> [dr.janan\\_2019@uomosul.edu.iq](mailto:dr.janan_2019@uomosul.edu.iq), <sup>2</sup> [zeena.r.m@gmail.com](mailto:zeena.r.m@gmail.com)

(Received October 01, 2019; Accepted October 30, 2019; Available online June 01, 2020)

DOI: [10.33899/edusj.2020.165304](https://doi.org/10.33899/edusj.2020.165304), © 2020, College of Education for Pure Science, University of Mosul.

This is an open access article under the CC BY 4.0 license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

### **Abstract**

Equations of state are used for the evaluation of pressure effects on solid (Alkali halides) at room temperature and high temperature up to melting point,

Thermodynamic properties such as  $\frac{V_P}{V_0}$ ,  $B_T$  of alkali halide (NaCl-B<sub>1</sub>) at high pressure and room temperature have been evaluated and the results are compared with experimental data and gave good results up to 5 GPa but beyond it the results of these equations of state diverge from experimental data while Bardeen equation of state gave good agreement with experimental data, the effect of high pressure and high temperature on vibration energy of atoms ( $E_D$ ) and on heat capacity at constant volume ( $C_V$ ) of (NaCl-B<sub>1</sub>) are calculated by using Debye Model and gave good agreement with the theory, also thermal volume and pressure ( $V_{th}$ ), ( $P_{th}$ ) and thermal expansion coefficient ( $\alpha_V$ ) are calculated by using thermal equation of state by Kumar.

Finally, melting curve of (NaCl-B<sub>1</sub>) was calculated by using Kumar thermal equation of state with Lindeman equation the results were compared with experimental data. Also inter ionic distance at melting ( $r_m$ ) for (NaCl-B<sub>1</sub>) was calculated by two ways, first by using lattice potential energy and second by using Anderson equation, and compared with data of other researcher and a good fitting was observed.

Key words: (NaCl-B<sub>1</sub>), Equation of state, melting curve

**دراسة تأثير الضغط العالي ودرجات الحرارة المرتفعة على خصائص كلوريد الصوديوم (NaCl-B<sub>1</sub>)**

أ.م.د. جنان فخر الدين احمد<sup>1\*</sup> و زينة رعد محمود<sup>2</sup>

<sup>2,1</sup> قسم الفيزياء / كلية التربية / جامعة الموصل

## الخلاصة

استخدمت معادلات الحالة في دراسة خواص كلوريد الصوديوم NaCl-B1 في مدى واسع من درجات الحرارة ابتداءً من درجة حرارة الغرفة إلى درجة حرارة الانصهار تحت تأثير الضغط العالي ومن هذه الخواص التغيير النسبي في الحجم  $\frac{V_P}{V_0}$ ، ومعامل المرونة الحجمي  $B_T$  ومن ثم مقارنة النتائج مع البيانات التجريبية وكانت في حالة توافق جيد وخصوصاً عند الضغوط القليلة إلى حد الضغط (5Gpa). أما بعد هذا الضغط فإنها انحرفت عن البيانات التجريبية قليلاً وقد اعطت معادلة باردين تطابق جيد مع البيانات التجريبية كما تم دراسة تأثير الضغط على الطاقة التذبذبية  $E_D$  وعلى السعة الحرارية  $C_V$  عند حجم ثابت وذلك باستخدام نموذج ديبي على كلوريد الصوديوم (NaCl-B1) حيث تعطي توافق جيد مع النظرية. وأخيراً جرت دراسة منحني الانصهار للهاليد القلوي كلوريد الصوديوم NaCl-B1 بالاعتماد على معادلة الحالة الحرارية لكومر مع نموذج لنديمان في الانصهار وكانت النتائج متوافقة مع البيانات التجريبية. وكذلك تم إيجاد المسافة البينية بين الأيونات عند الانصهار ( $r_m$ ) للهاليد القلوي كلوريد الصوديوم NaCl-B1 باستخدام صيغتين أولاً باستخدام طاقة جهد الشبكة وثانياً باستخدام طريقة اندرسن في التمدد الحراري وقورنت النتائج مع نتائج باحثين آخرين وتم الحصول على توافق جيد.

**الكلمات الدالة:** كلوريد الصوديوم (NaCl-B1)، معادلات الحالة، منحني الانصهار

## المقدمة

معادلة الحالة هي صياغة نظرية لوصف المادة عند مجموعة ظروف فيزيائية معينة وهي علاقة رياضية بين دالتني حالة أو أكثر متعلقة بالمادة مثل درجة الحرارة والضغط والحجم النوعي والطاقة الداخلية. في هذه الدراسة استخدمت معادلات حالة مبنية على أسس مختلفة مثل معادلة الحالة (لينارد-جونس، باردين، كومر) لحساب تأثير الضغط على الخصائص الفيزيائية وبالتالي تساعدنا هذه المعادلات على فهم سلوك المواد تحت تأثير الضغط العالي وتطبيقها على نحو واسع في الهندسة الكهربائية والبحوث العلمية الأخرى. وقد طبقت معادلة الحالة على الهاليد القلوي NaCl-B1 وان التركيب البلوري لكلوريد الصوديوم من نوع مكعب ممرکز الأوجه F.C.C حيث تعد وحدة خلية كلوريد الصوديوم من الخلايا غير البدائية وذلك لتداخل شبكتين أحدهما مكونه من أيونات Na والآخرى من أيونات Cl والشبكتين أحدهما مزاحة عن الأخرى باتجاه الخط الذي يربط ركنين متقابلين في المكعب بمقدار  $\frac{1}{2}$  وقيمة ثابت الشبكة اي (البعد بين أيونين متشابهين) لبلورة كلوريد الصوديوم [1] ( $5.6\text{\AA}$ ) يهدف البحث إلى دراسة تأثير الضغط العالي على بعض الخصائص المهمة لكلوريد الصوديوم (NaCl-B1) باستخدام معادلات الحالة الاتية (لينارد-جونس، باردين، كومر) تحت ضغوط عالية وعند درجة حرارة الغرفة ومن هذه الخصائص هي التغيير الحجمي النسبي  $\left(\frac{V_P}{V_0}\right)$ ، معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ )، لتحديد أفضل صيغة لمعادلة الحالة للهاليدات القلوية تتوافق نتائجها مع البيانات التجريبية ومن ثم دراسة الخواص الترموديناميكية لكلوريد الصوديوم تحت الضغط العالي وعند درجات حرارة أعلى من درجة حرارة الغرفة وهذه

الخواص هي: (الطاقة التذبذبية للذرات ( $E_D$ ), السعة الحرارية عند ثبوت الحجم ( $C_V$ ) باستخدام نظرية ديبياي ودراسة تأثير الضغط العالي على درجة حرارة الانصهار لكلوريد الصوديوم (NaCl-B1) باستخدام معادلة كומר الحرارية ومعادلة لنديمان للانصهار وكذلك تم حساب المسافة بين الايونات عند الانصهار ( $r_m$ ) باستخدام طاقة جهد الشبكة و باستخدام معادلة أندرسن في التمدد الحراري.

### التفاصيل النظرية

#### (i) معادلة لينارد\_ جونس المطورة

إن معادلة لينارد\_ جونس المطورة:- يمكنها أن تصف المادة في الحالة الصلبة والحالة المائعة وهي وسيلة مهمة لحساب العلاقات بين الضغط والحجم ودرجة الحرارة وتوازن ضغط بخار السائل [2] وتمتلك جميع مميزات معادلة الحالة المثلى إذ انها يمكن أن تصاغ بدلالة الطاقة والضغط والحجم. فضلاً عن أنها تحقق شرط السبينودال:

$$B \propto (P - P_{SP}) \quad \dots \dots (1)$$

$$B(P = P_{SP}) = 0 \quad \dots \dots (2)$$

فيعبر عن الضغط في معادلة لينارد-جونس المطورة بالصيغة[3]:

$$P_{mL-J} = \frac{B_0}{n} \left( \frac{V_0}{V_P} \right)^{n'} \left[ \left( \frac{V_0}{V_P} \right)^{n'} - 1 \right] \quad \dots \dots (3)$$

$$n' = \frac{1}{3} B'_0$$

$B_0$  معامل المرونة الحجمي تحت الضغط الجوي الاعتيادي,  $B'_0$  مشتقة معامل المرونة الحجمي بالنسبة للضغط,  $V_P$

الحجم النوعي عند ضغط معين  $V_0$ , الحجم النوعي عند الضغط الجوي الاعتيادي.

#### (ii) معادله باردين

أحتسب باردين تغير انضغاطية العناصر القلوية وقارنها مع البيانات التجريبية[4] واستطاع الحصول على نتائج نظرية متوافقة مع البيانات التجريبية لعنصر الصوديوم (Na) ولكن نتائجه لم تكن متوافقة تماما لعنصر الليثيوم (Li) إذ كانت نتائج الليثيوم

(Li) اعلى بنسبة 50% من النتائج التجريبية. ويعبر عن الصيغة التي استخدمها باردين بالعلاقة[5]

$$P_B = 3B_o(x^{-5/3} - x^{-4/3}) \left[ 1 + \frac{3}{2}(B'_o - 3)(x^{-1/3} - 1) \right] \quad \dots \dots (4)$$

$$x = \frac{V_P}{V_o}$$

(iii) معادلة كומר

تعد معادلة كומר [6,7] معادلة حالة عند درجات حرارة مختلفة تتضمن حد يحتوي على درجة الحرارة والتي تتراوح من  $(300 - T_m)$  حيث  $T_m$  هي درجة حرارة الانصهار وقيمة الضغط تتراوح بين الضغط الجوي الاعتيادي والضغط العالي (structural transition pressure) الضغط الانتقالي التركيبي

معادلة كומר تعطى بالصيغتين:-

$$\frac{V_P}{V_o} = 1 - \frac{1}{A} \ln \left[ 1 + \frac{A}{B_o} \{P - \alpha_o B_o (T - T_o)\} \right] \quad \dots \dots (5a)$$

$$P = \frac{B_o}{A} \left[ \exp \left( A \left( 1 - \frac{V_P}{V_o} \right) \right) - 1 \right] + \alpha_o B_o (T - T_o) \quad \dots \dots (6a)$$

إذ أن :

$$A = (\delta_{T_o} + 1)$$

$\delta_{T_o}$  معامل أندرسن -كرونيشن عند درجة حرارة الغرفة,  $\alpha_o$  معامل التمدد الحراري الحجمي عند درجة حرارة الغرفة

$(T_o)$  ويمكن كتابة معادلة كומר لحالة خاصة وذلك بفرض ان درجة الحرارة المستخدمة هي درجة حرارة الغرفة وكما يلي

$$\frac{V_P}{V_o} = 1 - \frac{1}{A} \ln \left[ 1 + \frac{A}{B_o} P \right] \quad \dots \dots (5b)$$

$$P = \frac{B_o}{A} \left[ \exp A \left( 1 - \frac{V_P}{V_o} \right) - 1 \right] \quad \dots \dots (6b)$$

وإن المعادلات أعلاه هي معادلات أيزوثرمية عند درجة حرارة الغرفة وقد وضحت في الشكل(1)

**معامل المرونة الحجمي ( $B_T$ )**

يعرف معامل المرونة الحجمي بأنه النسبة بين تغير الضغط إلى التغير النسبي للحجم عند ثبوت درجة الحرارة [8]

$$B_T = -V \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \quad \dots \dots (7)$$

وهو يحدد مقدار أنضغاطية المادة عند تسليط ضغط خارجي عليها وكذلك يعرف بأنه العلاقة العكسية للأنضغاطية وبذلك يعتبر مقياس لمقاومة المادة للأنضغاط المنتظم ويمكن التوصل إلى صياغة معامل المرونة الحجمي  $B_T$  من خلال معادلات الحالة إذ يمكن اشتقاق معادلات الحالة بالنسبة للحجم ومن ثم تعويض بالمعادلة (7)

(I) معامل المرونة الحجمي بالنسبة لمعادلة لينارد\_ جونز المحورة هو بالصيغة [3]:

$$B_T = B_0 \left(\frac{V_0}{V}\right)^{n'} \left[ 2 \left(\frac{V_0}{V}\right)^{n'} - 1 \right] \dots \dots (8)$$

(II) معامل المرونة الحجمي بالنسبة لمعادلة باردين هو بالصيغة [5]

$$B_T = -15B_0(B'_0 - 3)x^{-\frac{5}{3}} + 5B_0x^{-\frac{5}{3}} + 9B_0(B'_0 - 3)x^{-2} - 4B_0x^{-\frac{4}{3}} \dots \dots \dots (9)$$

(III) معامل المرونة الحجمي بالنسبة لمعادلة كומר هو بالصيغة [6,7]

$$B_T = B_0 \left[ \frac{V_P}{V_0} \exp \left\{ A \left( 1 - \frac{V_P}{V_0} \right) \right\} \right] \dots \dots (10)$$

وان معاملات المرونة الحجمي رسمت في الشكل (2)

#### الطاقة التذبذبية للذرات :

طاقة اهتزاز الذرات ( $E_D$ ) هي شكل من أشكال الطاقة الداخلية وهي مهمة جداً في احتساب الحرارة النوعية للمواد الصلبة، إذ تعد الجزء الأساسي في الطاقات التي يمتلكها النظام [9]. ولقد افترض ديبي في نظريته للحرارة النوعية للمواد الصلبة أن ذرات المادة الصلبة تتذبذب تذبذباً جماعياً، أي اعتبر حركة الشبكة ككل، بدلاً من اعتبار كل ذرة تذبذب بصورة مستقلة عن بعضها البعض كما افترضها أينشتاين في نظريته.

$$E_D = 9Nk_B T \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{X_D} \frac{X^3}{e^X - 1} dX \dots \dots \dots (11)$$

اذ ان:

$$X_D \equiv \hbar\omega_D/k_B T \equiv \theta_D/T$$

$K_B =$  ثابت بولتزمان  $R$ , الثابت العام للغازات [10]

هناك علاقة تبين تأثير الضغط مع درجة حرارة ديبياي وكما يلي [11]

$$\theta_P = \theta_D \left( \frac{V_P}{V_0} \right)^{-\gamma} \quad \dots \dots (12)$$

اذ ان:  $\theta_P =$  درجة حرارة ديبياي تحت اي ضغط  $P$  (Gpa),  $\theta_D =$  درجة حرارة ديبياي تحت الضغط الجوي

الاعتيادي وهي تساوي 320K وان الطاقة الاهتزازية للذرات رسمت في الشكل (3)

### السعة الحرارية

أستُخدمت نظرية ديبياي في إيجاد طاقة الاهتزاز الكلية الداخلية والسعة الحرارية النوعية ( $C_V$ ) لجميع المهتزات التوافقية

كما يأتي:

$$C_V = 9R \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{X^4 e^X}{(e^X - 1)^2} dX \quad \dots \dots (13)$$

وحسبت السعة الحرارية تحت ضغط محدد بالاستناد الى معادلة (12) ورسمت في الشكل (4)

### طاقة جهد الشبيكة

عند درجات الحرارة الواطئة الذرات سوف تكون شبه مستقرة وفي نقطة الاتزان ( $r_0$ ) سوف تمتلك الذرات اوطى قيمة من

طاقة الجهد  $\varphi_{min}$  التي عندها طاقة التجاذب تعادل طاقة التنافر ويكون منحنى الجهد متناظر وياخذ شكل قطع مكافئ وان سعة

اهتزاز الذرات تكون متناظرة حول نقطة الاستقرار (harmonic oscillation). وكلما ارتفعت درجات الحرارة فإن سعة إهتزاز

الذرات تزداد ويصبح منحنى الجهد غير متناظر لان الذرات المهتزة تتحرك في مسافات اكبر من المسافة بينها وبين جيرانها و

يكون معدل إزاحة الذرات المتحركة اكبر من  $r_0$  اي ( $r > r_0$ ) وان معادلة طاقة الجهد للشبيكة هي:

$$\varphi = \frac{\alpha_m e^2}{r} + \varphi_R \quad \dots \dots (14)$$

الجزء الاول من المعادلة يمثل طاقة التجاذب

الجزء الثاني من المعادلة يمثل طاقة التنافر وقد أعطي بصيغتين كما يلي:

صيغة Born-mie Potential form

$$\varphi_R = B \left( \frac{r}{r_0} \right)^{-n} \quad \dots \dots (15a)$$

Born-mayer Potential form صيغة

$$\varphi_R = D \exp \left[ -\frac{r_0}{\rho} \left( \frac{r}{r_0} - 1 \right) \right] \quad \dots \dots (15b)$$

حيث ان  $B, n, D, \rho$  معاملات جهد

$r_0$ : المسافة بين الذرات عند درجة حرارة الغرفة والضغط الجوي والجدول (1) يوضح معاملات الجهد لكلوريد الصوديوم

**الجدول (1) قيم معاملات الجهد لكلوريد الصوديوم [12]**

المادة	$B/(10^{12} \text{erg mol}^{-1})$	$n$	$D/(10^{-12} \text{erg mol}^{-1})$	$\rho/A^\circ$
NaCl-B1	1.509	8.73	1.354	0.290

المسافة بين الايونات عند الانصهار  $r_m$

حسبت :-

اولا: من منحنى طاقة الجهد

كلما زادت درجة الحرارة فإن سعة إهتزاز الذرات حول مواقع اتزانها سوف تزداد والتقريب التوافقي يصبح غير توافقي (harmonic oscillation) ويأخذ المنحني شكل قطع ناقص وعند بداية انحناء هذا المنحني او عند بداية مغادرة المنحني للعلاقة الخطية سوف يحدث الانصهار للمادة قيد البحث أي عند النقطة  $(r_m)$  من المنحني وتدعى نقطة الانقلاب ومن الشكل (5) سوف نعتبر بأن انصهار المواد الصلبة يحدث عند نقطة الانقلاب في منحنى طاقة الجهد والمسافة الفاصلة بين الايونات عند نقطة الانصهار تدعى  $(r_m)$  وتحسب من العلاقة الآتية:

$$r_m = \frac{r_i + r'}{2} \quad \dots \dots (16)$$

وعند نقطة الانقلاب المشتقة الثانية لطاقة الجهد  $\varphi(r)$  كدالة ل  $(r)$  تكون مساوية للصفر

$$\left( \frac{d^2 \varphi}{dr^2} \right)_{r=r_i} = 0 \quad \dots \dots (17)$$

من تعويض الصيغة الأولى ل  $\varphi_R$  في المعادلة (14) وأخذ المشتقة الثانية لها ومساواتها بالصفر نحصل على

$$r_i = \left[ \frac{n(n+1)B r_o^n}{2\alpha_m e^2} \right]^{n-1} \dots \dots (18)$$

$r_i$  تمثل نقطة الانقلاب

سوف نحتاج إلى قيمة  $r'$  إذ يتم حسابها من حل معادلة طاقة الجهد والتي يكون لها نفس قيمة طاقة الجهد عند نقطة الانقلاب

$$r = r'$$

أي ان  $(\text{Joul}\varphi'_r = \varphi_i\varphi = -11.47 \times 10^{-19})$ . ومن تعويض قيم  $i$  و  $'$  في المعادلة (16) نحصل على قيمة  $r_m$

ثانياً: حساب  $r_m$  بطريقة اندرسن للتمدد الحراري

هذه طريقة أخرى لحساب المسافة الفاصلة بين الايونات عند الانصهار  $r_m$  سوف نأخذ صيغة اندرسن للتمدد الحراري [12]

$$\alpha = \alpha_o [1 - \alpha_o \delta_T (T - T_o)]^{-1} \dots \dots (19)$$

$$\left( \frac{\alpha}{\alpha_o} \right) = \left( \frac{V}{V_o} \right)^{\delta_T} \dots \dots (20)$$

$$r(T) = r_o [1 - \alpha_o \delta_T (T - T_o)]^{-1/(3\delta_T)} \dots \dots (21)$$

وجد العالم باندي [12] أن هذه المعادلة تعطي نتائجاً جيدة جداً لمركبات الهاليدات القلوية وبأماكننا استعمالها لايجاد

المسافة الفاصلة بين الذرات عند درجات حرارية عالية وصولاً إلى درجة حرارة الانصهار للهاليدات القلوية

حساب قيمة  $\alpha B_T$  عند الانصهار من معادلة طاقة جهد الشبيكة

تمكن العالم هلبيرند [12] من صياغة معادلة للضغط الحراري الكلي وكالتالي

$$P = - \frac{d\varphi}{dV} + T\alpha B_T \dots \dots (22)$$

$$V = 2r^3$$

$$\frac{d\varphi}{dV} = \frac{1}{6r^2} \frac{d\varphi}{dr} \dots \dots (23)$$

عندما  $P=0$  فإن المعادلة أعلاه تصبح



$$\left(\frac{d\varphi}{dr}\right)_{r=r_m} = 6r_m^2 T_m \alpha B_T \dots \dots (24)$$

بعد التعويض عن قيمة  $r_m$  و  $T_m$  في المعادلة (24) نجد قيمة  $\alpha B_T$  عند الانصهار هي مقارنة لقيمة  $\alpha_0 B_0$  عند درجة

$$\theta_D \leq T_0$$

حرارة الغرفة للمركبات التي تكون فيها

**إيجاد منحنى الانصهار لكلوريد الصوديوم NaCl-B1 تحت تأثير الضغط العالي ودرجات الانصهار العالية**

تحت تأثير الضغط العالي ودرجة الحرارة العالية سجل كومر [13,14]

نظرية لإيجاد  $\frac{V_{Th}}{V_0}$  تحت تأثير الضغط العالي ودرجة الحرارة العالية وقد استخدم هذه النظرية عدد من الباحثين وقد وضحت

النظرية خصائص الصلب من الضغط الجوي إلى ضغط الانتقال التركيبي (Structural transition Pressure) الذي يحدث

عنده الانصهار وذلك بتغيير درجات الحرارة من درجة حرارة الغرفة إلى درجة الانصهار وقد قمنا بتطبيق معادلة الحالة الحرارية

Kumar(5a) وكالتالي.

$$\frac{V_{th}}{V_0} = 1 - \frac{1}{A} \ln \left[ 1 + \frac{A}{B_0} (P_{(V)} - P_{Th}) \right] \dots \dots (5a)$$

$$P_{Th} = \alpha_0 B_0 (T - T_0) \dots \dots (25)$$

حسبت  $V_{th}$  ورسمت في الشكل (6)

لايجاد درجات الانصهار نستخدم معادلة لندمان في الانصهار [16]

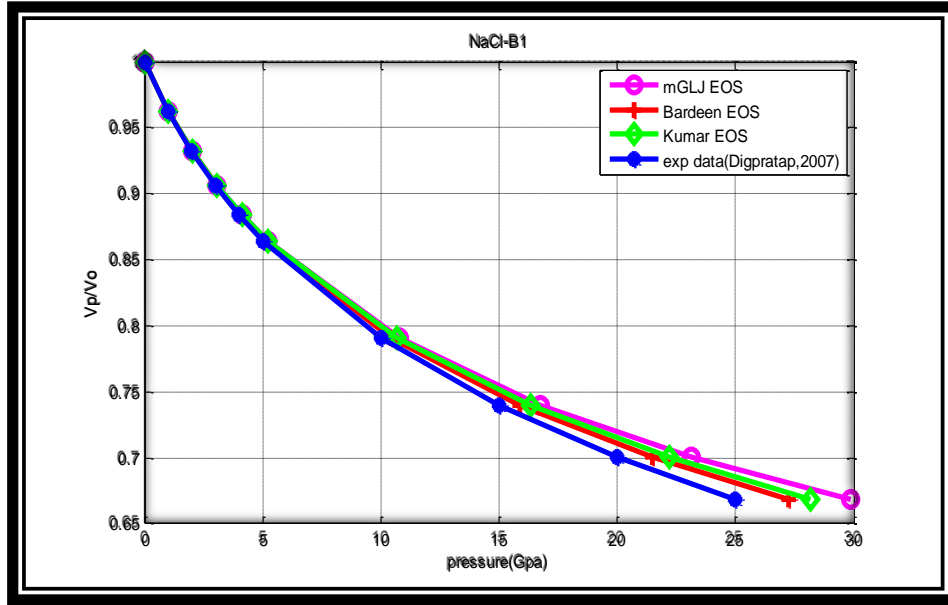
$$T_m = T_{m0} \left(\frac{V_m}{V_{m0}}\right)^{2/3} \exp \left[ \frac{2\gamma_0}{q} \left\{ 1 - \left(\frac{V_m}{V_{m0}}\right)^q \right\} \right] \dots \dots (26)$$

**النتائج والمناقشة**

حسب منحنى الانضغاطية الايزوثيرمي لكلوريد الصوديوم NaCl-B1 باستخدام معادلات الحالة (لينارد-جونس, باردن, كومر)

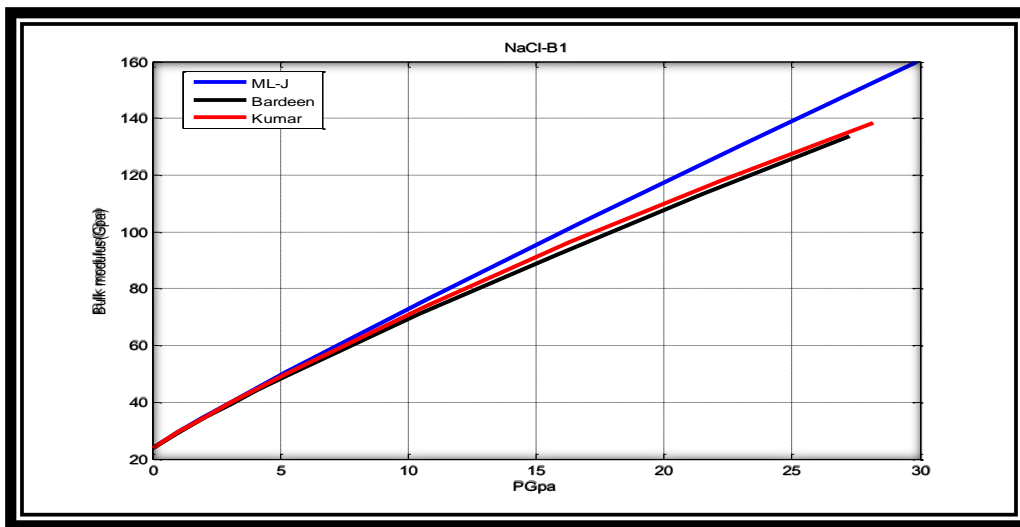
$$, B_0 = 24(Gpa), V_0 = 27(cm^3.mol^{-1}), [17]$$

$$[18] , B'_0 = 5.5[15]$$



الشكل (1) منحنى الانضغاطية الايزوثرمي NaCl-B1 باستخدام معادلات حالة مبنية على اسس مختلفة ومقارنة مع منحنيات الانضغاطية الايزوثرمية التجريبية.

يوضح الشكل (1) مقارنة بين منحنى الانضغاطية لكلوريد الصوديوم المحسوبة من معادلات الحالة الثلاثة وبين البيانات التجريبية التي اخذت من المصدر [15] يتبين ان معادلات الحالة الثلاثة كانت متفقة تماماً مع البيانات التجريبية الى حد الضغط (5GPa) أما عند الضغوط العالية فيظهر تباين قليل بين معادلات الحالة الثلاثة المستخدمة وبين البيانات التجريبية وهذا يعود إلى تباين الأسس النظرية لهذه المعادلات ويتضح من الشكل بأن معادلة باردين هي افضل معادلة توصف الانضغاطية النسبية في الهاليدات القلوية ؛ ذلك انها الاكثر انسجاماً عند جميع الضغوط مع البيانات التجريبية.

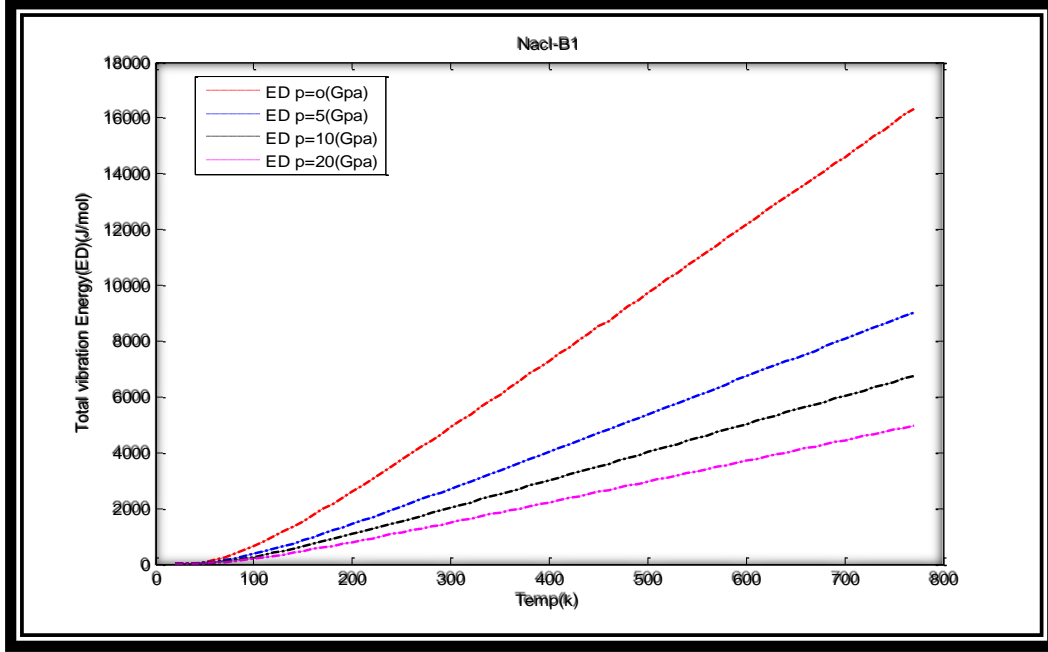


الشكل (2) تغير معامل المرونة الحجمي الايزوثرمي NaCl-B1 مع الضغط العالي

يبين الشكل (2) ان معامل المرونة الحجمي الايزوثرمي ( $B_T$ ) عند درجة حرارة الغرفة قد حسب بالنسبة للحجوم المضغوطة المختلفة التي تتراوح قيمها من (1-0.65) ويبين الشكل ان ( $B_T$ ) تزداد مع زيادة الضغط طبقاً للمعادلة

$$B_T = -V \frac{dp}{dV}$$

اذ ان زيادة الضغط عند درجة حرارة ثابتة يؤدي الى تقلص الحجم وبدوره يؤدي الى زيادة معامل المرونة الحجمي.



الشكل (3) تغير الطاقة التذبذبية NaCl-B1 مع درجات الحرارة عند ضغوط محددة

من الشكل (3) يبين تغير الطاقة التذبذبية مع درجات حرارة التي تتراوح من (0-800K) وعند ضغوط محددة ونلاحظ من الشكل عند الضغط الجوي ودرجات الحرارة الواطئة انحناء منحي الطاقة التذبذبية الى حد درجة حرارة الغرفة وبعد هذه الدرجة فان المنحني يزداد تدريجياً بعدها يكون التغير خطي عند درجات الحرارة العالية ولحساب السعة الحرارية تحت الضغط العالي استخدمت معادله تبين علاقة درجة حرارة ديبياي مع الضغط ومع الطاقة التذبذبية.

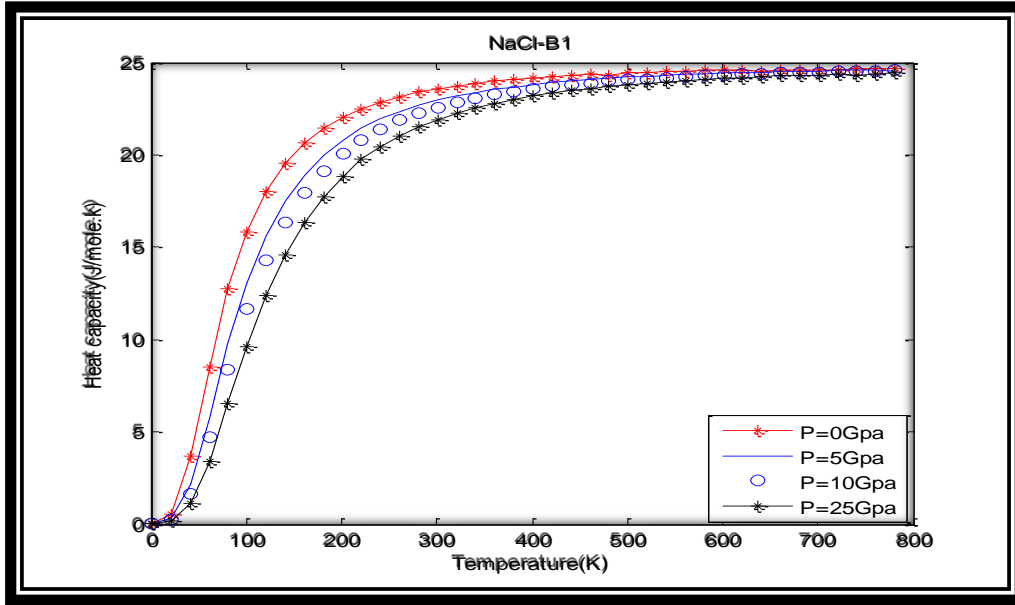
[11] وكالتالي :

$$\theta_P = \theta_D \left( \frac{V_P}{V_0} \right)^{-\gamma} \quad \dots \dots (12)$$

$$E_D = 9RT \left( \frac{T}{\theta_P} \right)^3 \int_0^{X_m} \frac{X^3}{e^X - 1} dX$$

$$X \equiv \hbar\omega / K_B T, X_m = \omega_D = \frac{\theta_P}{T}$$

نلاحظ ان الطاقة التذبذبية تقل مع زيادة الضغط



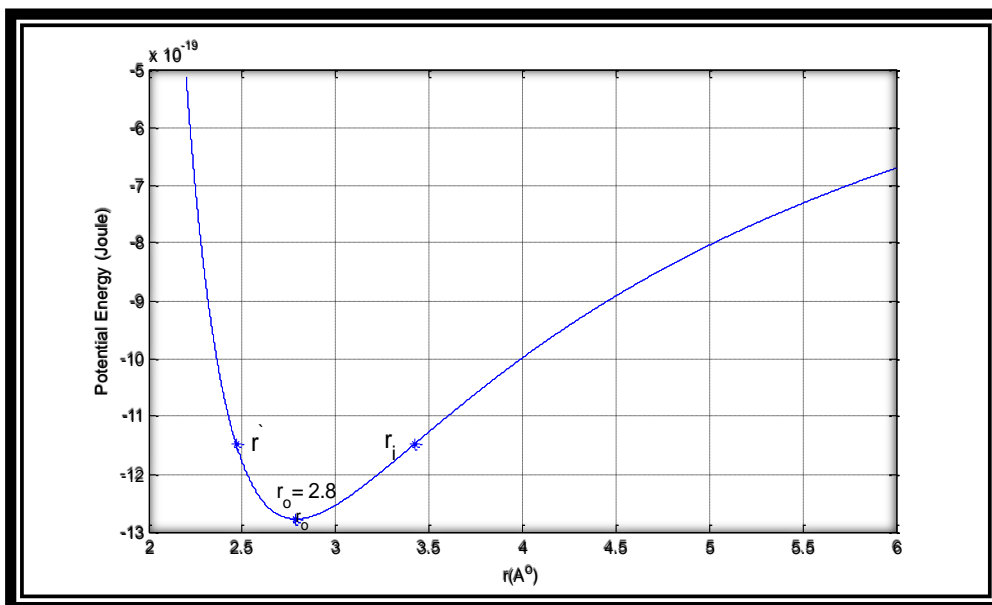
الشكل (4) تغير السعة الحرارية NaCl-B1 مع درجات الحرارة عند ضغوط محددة

حسبت السعة الحرارية عند ضغوط محددة و رسمت في الشكل (4) وكما هو واضح فإن السعة الحرارية تزداد بشكل حاد مع زيادة درجة الحرارة إلى حد درجة حرارة ديباي وأن السعة الحرارية تعتمد على (P,T) حيث تزداد بزيادة (T) إلى حد درجة حرارة ديباي أما بعد هذه الدرجة فإن تأثير زيادة درجة الحرارة ليس له تأثير ملحوظ على السعة الحرارية. وقد استخدمت معادلة السعة الحرارية المحورة كالتالي:

$$C_V = 9R \left( \frac{T}{\theta_P} \right)^3 \int_0^{\theta_P/T} \frac{X^4 e^X}{(e^X - 1)^2} dx$$

أما تأثير الضغط على السعة الحرارية فإن الضغط يقلل من السعة الحرارية إلى حد درجة حرارة ديباي، أما تأثير الضغط على السعة الحرارية عند درجات الحرارة أكبر من ديباي فيكون قليل جداً. (إن مقدار خزن السعة الحرارية للطاقة الحرارية يقل مع زيادة الضغط وذلك لقصر المسافة البينية بين الذرات)

حسبت طاقة جهد الشبكة ورسمت في الشكل (5) وكانت قيمه طاقة جهد الشبكة عند  $r^* = 2.8A$  هي  $\phi_{min} = 12.78 \times 10^{-19} \text{ Joule}$ . بزيادة الضغط على منحنى الجهد يؤثر على المسافة البينية بين الذرات فعندما تصبح المسافة أقل من نصف قطر الذرة عندها قوة التنافر سوف تتعزز وأن منحنى طاقة الجهد يرتفع تدريجياً مع تناقص المسافة بين الذرات ( $r$ ) وكذلك بزيادة الضغط فإن معامل المرونة الحجمي يزداد والقوة المرجعة إلى نقطة الاتزان تكون عالية. فعند زيادة درجة الحرارة فإن المسافة البينية سوف تزداد ومعامل المرونة الحجمي سوف يقل و إن القوة المرجعة إلى نقطة الاتزان تكون واطنة وكذلك تظهر قوى التجاذب بين الذرات ونرى أن قيمة طاقة الجهد تزداد وإن شكل المنحنى يكون مفلطح وفي هذا البحث، تم استخدام مبدأ نقطة الانقلاب لحساب المسافة الفاصلة بين الأيونات عند نقطة الانصهار ( $r_m$ ) للهاليدات القلوية من نوع F.C.C وقد قمنا بحساب المسافة الفاصلة بين الذرات  $r_m$  عند الانصهار باستخدام المعادلة (16) وعينت على الشكل (5) حيث يوضح الشكل مواقع النقاط ( $r_i, r'$ ) عند الجهود والناتج مبينة بالجدول (2)



الشكل (5) منحنى طاقة جهد الشبكة لكلوريد الصوديوم

الجدول (2) قيم  $(r_i, r', r_m)$  باستخدام الصيغ (a) باستخدام صيغة بورن-ماي, b - صيغة بورن-ماير, c - باستخدام صيغة أندرسن للتمدد الحراري (

المادة	$r_i(\text{Å})$		$r'(\text{Å})$		$r_m(\text{Å})$			المصدر
	a	b	a	b	a	B	C	
NaCl-B1	3.427	3.424	2.465	2.451	2.946	2.938	2.948	[12]
NaCl-B1	3.430	-	2.467	-	2.947	-	2.942	Present work

والجدول (2) يتبين ان قيم  $(r_m)$  من طاقة جهد الشبكة ومن معادلة أندرسن الحرارية كانت متطابقة مع نتائج الباحث [12]

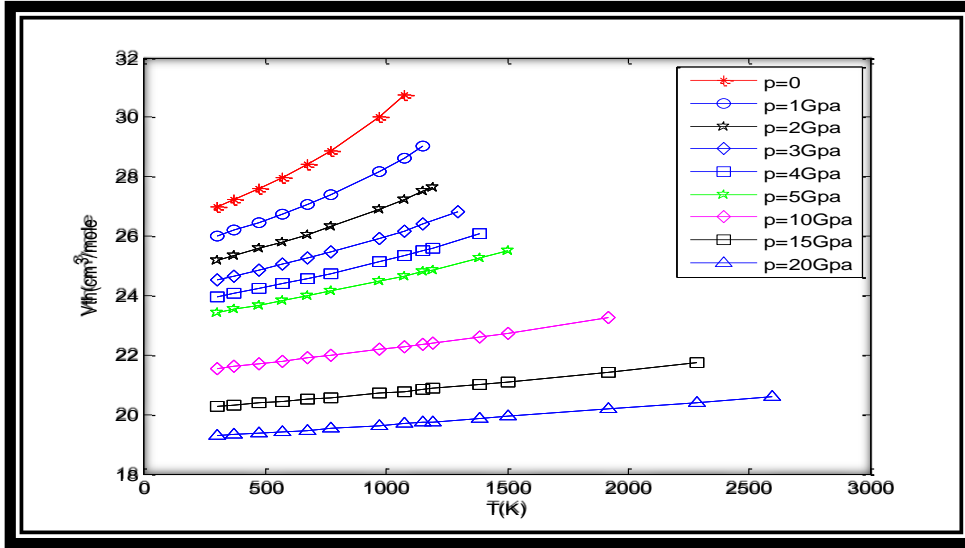
تم حساب قيمة  $\alpha B_T$  عند الانصهار من المعادلة (24) وهي مقاربة لقيمة  $\alpha_0 B_0$  عند درجة حرارة الغرفة للمركبات

التي تكون فيها  $\theta_D \leq T_0$  ودونت بالجدول (3)

الجدول (3) يبين قيم الثوابت الترموديناميكية لكلوريد الصوديوم

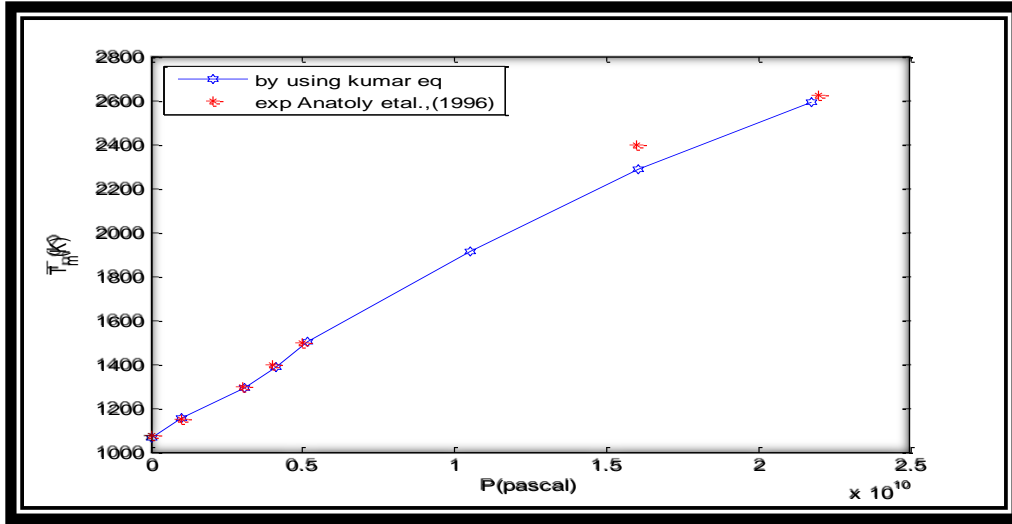
	$(d\varphi/dr)_{r=r_0}$ ( $10^{-4}$ dyn)		$T_m(K)$	$\delta_T$	$\theta_D$ (K)	$\alpha B_T$ ( $10^{-4}$ GPa/K)	
	a	b				at $T=T_m$	at $T=room$ temperature
NaCl- B1	1.586	1.555	1074	5.95	320	28.4	28.0

في الشكل (6) تم حساب الحجم الحراري  $V_{th}$  مع درجات الحرارة عند ضغوط محددة باستخدام معادلة الحالة الحرارية لكومر معادلة (5a) و(25).



الشكل (6) تغير  $V_{th}$  مع درجة الحرارة لكلوريد الصوديوم NaCl-B1 عند ضغوط محددة

يتبين من الشكل (6) عند  $P=0$  فإن  $V_{th}$  تزداد مع زيادة  $T$  وعند زيادة الضغط فإن  $V_{th}$  تقل كلما زاد الضغط وتحسب  $V_{th}$  لضغوط تتراوح من (0-20GPa) وعند درجات حرارة تصل إلى درجات الانصهار فنحصل على  $(V_m, T_m)$  تم حساب منحنى الانصهار لكلوريد الصوديوم NaCl-B1 كما في الشكل (7) وذلك باستخدام معادلة الحالة الحرارية لكومر مع معادلة لندمان للانصهار معادلة (26).



شكل (7) منحنى الانصهار لكلوريد الصوديوم NaCl-B1 باستخدام نظرية Kumar

ومن الشكل (7) ان درجات الانصهار تزداد مع زيادة الضغط المسلط وكانت متفقة مع البيانات التجريبية [19] حيث

$$\text{ان } \gamma_0 = 1.59, q = 1V_{m0} = 30.7 \text{ cm}^3 \cdot \text{mole}^{-1}$$

#### الاستنتاجات

1- إن معادلات الحالة المستخدمة (لينارد-جونس وباردين وكومر) على الرغم من أنها مبنية على أسس نظرية مختلفة إلا أنها أعطت نتائجاً جيدة ومقاربة مع النتائج التجريبية وخاصة عند الضغوط القليلة واكثر المعادلات أعطت نتائج جيدة هي معادلة باردين.

2- يمكن استخدام معادلة الحالة الحرارية لكومر لايجاد الحجوم الحرارية

3- أما تأثير الضغط على السعة الحرارية فإن الضغط يقلل من السعة الحرارية (Cv) عند درجات حرارة أقل من درجة حرارة ديباي  $T \leq \theta_D$  أما عند درجات حرارة أعلى من درجة حرارة ديباي  $T \geq \theta_D$  فان تأثير الضغط يكون قليلاً جداً.

$$\text{ان حاصل ضرب } \alpha_0 B_0 = \alpha_T B_T$$

5- نستطيع إيجاد المسافة الفاصلة بين الايونات عند الانصهار ( $r_m$ ) من خلال منحنى طاقة الجهد وذلك بالاعتماد اولاً على مبدأ نقطة الانقلاب في منحنى طاقة جهد البلورة وثانياً بالاعتماد على معادلة اندرسن للتمدد الحراري واعطت نتائج متوافقة مع نتائج باحثين اخرين.

- [1] Al Jamal Yahah, "Solid State Physics Book" (dar, Al-hakima for Publication and Distribution Mosul) (Arabic reference).
- [2] Tada, Y., Tamakoshi, A., Kato Y.; J. Flud phase equliria Issue , 2 , 236-243 (2007).
- [3] Jiuxun, S., Qiang, W., Lingcang, C., and Fugian, J. ; J. Phys .chem.of solid Rev.; 66, 773-782 (2005).
- [4] Bridgman, P.W., " The Physics of high pressure", Bell, C. and Sons Ltd., Londdon, C h. 6 , pp .88-149 (1958).
- [5] Butler , R. and Anderson ; J. Science ,17,147-162 (1978).
- [6] Kumar , M. ; J. physica B 212, 391- 394 (1995).
- [7] Kumar , M. ; J. phys.B,condenc Matter 212, 391-394 (1996).
- [8] Gaudioiu, R. and Foulke, W.M.C.; J. phy.R,B.vol.66, No.5, p.p.052104 (2002).
- [9] Shahada-Amjad, "Thermodynamic Book" (Dar, AlFajar for Publication and Distribution Cario.) (Arabic reference)
- [10] Kittel, Charles; "introduction to the solid state physics Book"; sixth edition, John Wiley and Sons, Inc. (1986).
- [11] Ahmad, J.F.; Ph.D. Thesis in Solid state Physics, College of Education, University of Mosul. (2007) (Arabic reference)
- [12] Chauhan, R.S., Singh, C. ; J. Physica B 324, 151-156 (2002).
- [13] Kumar, M. ; J. Physica B 292.173 (2000).
- [14] Kumar, M. ; J. Physica B 311.340 (2002).
- [15] Dighpratap, S., Sushil, K. and Singh, B.P.; J. Indian of pure and Applied physics, Vol.45, 721-725 (2007).
- [16] Dubrovinsky, L.S., Saxena, S.K., Dubrovinskaia, N. A., Rekh, S., Lebihan T. ; J. American mineralogist , 85, 386-389 (2000)..



- [17] Taravillo, M., Baonza, V.G., Rubio, J.E.F., Nunez, J., and Caceres, M. ; J. Phy., 63, 1705-1715 (2002).
- [18] Liu, Q. ; Acta Physica Polonica, Vol.119 (6), 829- 834 (2011).
- [19] Anatoly, B., Belonoshko, and Leonds,; J.Amercan Mineralogist, Vol.1,303-316 (1996).