

معادلة الحالة للنحاس - دراسة نظرية باستخدام الضغط العالي

د. عدنان محمد الشيخ زينة وليد حازم العبادي

قسم الفيزياء / كلية العلوم

جامعة الموصل

القبول

الاستلام

2010 / 02 / 16

2009 / 01 / 16

Abstract

The present work, six different equations of state (EOS), have been used for studying Copper under high pressure at room temperature, by studying variation of different thermodynamical parameters in particular, variations in bulk modulus and Grüneisen parameter, which are represent a promising approach for modeling universal EOS for solids.

On comparing our predicted results, obtained by using the different EOS, with experimental data, one notice that all the six EOS gives agreement with experimental data for relatively low pressure. The best agreement with experimental data, with increasing pressure, have been shown by the results calculated by Bardeen, Brennan – Stacey and Vinet EOS. While results predicted by using Birch – Murnaghan EOS shows slightly less agreement with experimental data.

The results calculated by using both Murnaghan EOS and Thomsen EOS at higher pressure shows disagreement with experimental data and with our theoretical results.

الخلاصة

تم في هذه الرسالة استخدام ست معادلات حالة لدراسة تأثير الضغط العالي على النحاس ، في درجة حرارة الغرفة ، من خلال دراسة تغيرات المعاملات الترموديناميكية المختلفة وبخاصة تغيرات معامل المرونة الحجمي ومعامل كرونيشين التي تمثل دراستها مدخلاً واعداً لصياغة معادلة حالة عامة للمواد الصلبة . تمت مقارنة النتائج النظرية التي تم الحصول عليها مع البيانات التجريبية المتاحة وحصلنا على توافق تام مع النتائج التجريبية لجميع المعادلات المستخدمة في الضغوط القليلة نسبياً، ومع ارتفاع الضغط بقيت معادلات باردين ، برينان -

سلسلي و فينت تعطي توافقاً تاماً مع البيانات التجريبية لجميع الضغوط في الوقت الذي أعطت معادلة برخ - مرنكهان توافقاً أقل نوعاً ما من هذه المعادلات ، وتفاوتت نتائج كل من معادلة مرنكهان وثومسن عن البيانات التجريبية وعن نتائج المعادلات الأخرى مع زيادة الضغط المسلط على المادة.

1. المقدمة

يعد الضغط عاملاً رئيساً في معادلات الحالة للمادة ، التي تعطينا معلومات مفيدة حول العلاقة ما بين الضغط (P) والحجم (V) ودرجة الحرارة (T)، وهذا يساعدنا على فهم سلوك المواد تحت تأثير الضغط العالي ودرجة الحرارة (Dorogokupets and Ogano, 2005;) (Chijioke et al.,2005).

لا يزال الباحثون يواصلون البحث حتى يومنا هذا (Wang et al., 2009; Rai et al.,2008 ;) عن صيغة بسيطة لمعادلة الحالة التي تمتلك أعداداً قليلة من المعاملات ، هذه المعاملات تحدد باستخدام المعطيات المتاحة عند الضغط الواطئ وتكون متوفرة مثل الحجم النوعي عند الضغط الجوي الاعتيادي (V_o) ومعامل المرونة الحجمي عند ثبوت درجة الحرارة (B_{oT}) ومشتقاته بالنسبة للضغط (B'_{oT}) و (B''_{oT}) تحت الضغط الجوي الاعتيادي.

يعبر عن معادلة الحالة من المرتبة الثانية ، عند ثبوت درجة الحرارة ، بدلالة معاملين يمكن قياسهما عند الضغط الجوي الاعتيادي:

$$P = f (\eta, B_{oT})$$

إذ إن

$$\eta = \frac{V_p}{V_o}$$

V_p: الحجم النوعي عند الضغط P(kbar).

V_o: الحجم النوعي عند الضغط الجوي الاعتيادي.

B_{oT}: معامل المرونة الحجمي عند ثبوت درجة حرارة تحت الضغط الجوي الاعتيادي.

وبالطريقة نفسها فإن معادلة الحالة من المرتبة الثالثة والرابعة هي:

$$P = f (\eta, B_{oT}, B'_{oT})$$

$$P = f (\eta, B_{oT}, B'_{oT}, B''_{oT})$$

على التوالي.

2. التفاصيل النظرية

فيما يأتي عرضٌ لصيغ معادلات الحالة المختلفة التي تم استخدامها في هذا البحث
لاحتساب تأثير الضغط على الخصائص الترموديناميكية للنحاس:

2.1: معادلة مرنكهان (Murnaghan EOS (Murnaghan, 1937)

يعبر عن معادلة مرنكهان بالصيغة

$$P_M = \frac{B_{os}}{B'_{os}} \left[(\eta)^{-B'_{os}} - 1 \right] \dots\dots\dots (1)$$

B_{os} : معامل المرونة الحجمي الكاظم عند الضغط الابتدائي أو الضغط الجوي.
 B'_{os} : مشتقة معامل المرونة الحجمي الكاظم بالنسبة للضغط، وافترضت من مرنكهان بعدم
تغيرها مع الضغط.

2.2: معادلة باردين (Bardeen EOS (Bardeen, 1938)

ويعبر عن الصياغة التي استخدمها باردين بالمعادلة

$$P_B = 3B_{oT} (\eta^{-5/3} - \eta^{-4/3}) \left[1 + \frac{3}{2} (B'_{oT} - 3) (\eta^{-1/3} - 1) \right] \dots\dots\dots (2)$$

2.3: معادلة برخ-مرنكهان (Birch – Murnaghan EOS (Birrch)

ويعبر عن الصيغة التي استخدمها برخ-مرنكهان بالعلاقة (Tripathi et al., 2006):

$$P_{BM} = \frac{3}{2} B_{oT} \left[\eta^{-7/3} - \eta^{-5/3} \right] \left\{ 1 - \left(\frac{3}{4} \right) (4 - B'_{oT}) [\eta^{-2/3} - 1] \right\} \dots\dots\dots (3)$$

2.4: معادلة ثومسن (Thomsen EOS (Thomsen, 1970)

يعبر عن معادلة ثومسن بالصيغة

$$P_T = \frac{3B_{oT}}{2} (\eta^{-1/3} - \eta^{1/3}) \left[1 + \frac{3}{4} B'_{oT} (1 - \eta^{2/3}) \right] \dots\dots\dots (4)$$

2.5: معادلة برينان-ستاسي (Brennan-Stacey EOS (Brennan and Stacey, 1979)

يعبر عنها بالصيغة

$$P_{BS} = \frac{3B_{oT}}{(3B'_{oT} - 5)} \eta^{-4/3} \left[\exp \left\{ \left(\frac{3B'_{oT} - 5}{3} \right) (1 - \eta) \right\} - 1 \right] \dots\dots\dots (5)$$

Vinet EOS (Vinet et al, 1986 & 1987)

2.6: معادلة فينت

يعبر عن معادلة فينت بالصيغة:

$$P_V = 3 B_{oT} \eta^{-2/3} (1 - \eta^{1/3}) \exp \left[\left\{ \frac{3}{2} (B'_{oT} - 1) \right\} (1 - \eta^{1/3}) \right] \quad \dots\dots\dots (6)$$

3. تأثير الضغط على معامل كرونشين (γ)

يعبر عن معامل كرونشين بالصيغة (Boehler and Ramakrishan, 1980):

$$\gamma = \frac{\alpha_p V}{K_T C_V} \quad \dots\dots\dots (7)$$

إذ إن:

α_p : معامل التمدد الحجمي Coefficient of volume expansion

K_T : هي الانضغاطية Compressibility عند ثبوت درجة الحرارة

C_V : السعة الحرارية للمادة عند ثبوت الحجم.

وان

$$\alpha_p = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p, \quad K_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T \quad \dots\dots\dots (8)$$

وبتعويض المعادلتين (8) في المعادلة (7) نحصل على:

$$\gamma = -\frac{V}{C_V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \quad \dots\dots\dots (9)$$

من تطبيقات جبر المعادلات التفاضلية في الترموديناميك، فان:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T &= -1 \\ \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T &= -\frac{1}{\left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_V} \\ &= -\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \quad \dots\dots\dots (10) \end{aligned}$$

بتعويض المعادلة (10) في المعادلة (9) نحصل على:

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{-V}{C_V} \left(-\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \\ \gamma &= \frac{V}{C_V} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \quad \dots\dots\dots (11) \end{aligned}$$

من القانون الأول للترموديناميك

$$dQ = dU + PdV \quad \dots\dots\dots (12)$$

إذ إن

U: الطاقة الداخلية الكلية للمنظومة هي:

$$U = U(V, T)$$

Q: الطاقة الحرارية للمنظومة.

d_oQ: تشير إلى تفاضل غير تام (يعتمد على المسار).

إذ إن

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V dT + \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T dV \quad \dots\dots\dots(13)$$

بتعويض المعادلة (13) في (12):

$$d_{o} Q = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V dT + \left[\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + P \right] dV \quad \dots\dots\dots(14)$$

عند ثبوت الحجم

$$\left(\frac{d_{o} Q}{dT} \right)_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$$

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$$

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial P} \right)_V \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \quad \dots\dots\dots(15)$$

بتعويض المعادلة (15) في (11):

$$\gamma = \frac{V}{\left(\frac{\partial U}{\partial P} \right)_V \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V} \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V$$

$$\gamma = \frac{V}{\left(\frac{\partial U}{\partial P} \right)_V} \quad \dots\dots\dots(16)$$

بإجراء التكامل على المعادلة (16) نحصل على معادلة حالة:

$$U = PV + f(V) \quad \dots\dots\dots(17)$$

إذ إن

f(V): هو ثابت تكامل

من جانب آخر فإن نظريات إشعاع الجسم الأسود والإلكترونات في المعادن تقود لمعادلة حالة من الصيغة (Landsberg, 1990).

$$PV = g U \quad \dots\dots\dots(18)$$

إذ إن

g: ثابت قيمته وحدة واحدة.

من المعادلة (17) يمكننا أن نستنتج أن:

$$\gamma = g$$

للمنظومات التي تخضع لمعادلة الحالة (18) والتي يطلق عليها منظومات الغازات الكمية المثالية. إن مثل هذا الاستنتاج والعلاقة بين المعادلتين (17 و 18) لا تزال مسألة خاضعة للبحث التي منها انطلق بحثنا لتقصي تغير معامل γ مع الضغط.

4. الحسابات والنتائج

4.1: حساب تغير الحجم النوعي ($\frac{V_p}{V_o}$) للنحاس تحت تأثير الضغط العالي في درجة حرارة

الغرفة

البيانات التجريبية لتغير الحجم النوعي للنحاس مع الضغط العالي تم الحصول عليها من دراسة (Liu et al, 2007) وهي موضحة في الجدول (1) والمبينة في الشكل (1). في حين أن معادلة مرنكهان التي يعبر عنها على وفق الصيغة.

$$P_M = \frac{B_{os}}{B'_{os}} \left[(\eta)^{-B'_{os}} - 1 \right] \dots\dots\dots (19)$$

قد حصلنا منها على النتائج الموضحة في الجدول (1) والمبينة في الشكل (1). بعد أن استخدمنا قيمة معامل المرونة الحجمي الكاظم للنحاس وقيمة مشتقته بالنسبة للضغط وهي:

$$\left. \begin{aligned} B_{os} &= 1331.5 \text{ (kbar)} \\ B'_{os} &= 5.68 \end{aligned} \right\} \text{ (Moyzis, 1968)}$$

الجدول (1): البيانات التجريبية والنتائج النظرية باستخدام معادلات حالة مختلفة لتغير $\frac{V_p}{V_o}$ للنحاس

مع الضغط في درجة حرارة الغرفة.

Exp. Data (Liu et al., 2007)		Theoretical results						
P (kbar)	$\frac{V_p}{V_o}$	$\frac{V_p}{V_o}$	P (kbar)					
			Murnagh Eos	Bardeen Eos	Birch- Murnaghan Eos	Thomsen. Eos	Brennan & Stacey Eos	Vient Eos
0	1	1	0	0	0	0	0	0
250	0.875	0.95	79.3	78.1	78.2	77.3	78.1	78.1
500	0.805	0.90	192.1	184.4	185.3	177.9	184.6	184.5
750	0.76	0.85	355.6	328.8	332.7	304.5	329.4	329.5
1000	0.72	0.80	598.2	525.4	536.7	460.3	526.5	527.0
1250	0.69	0.75	966.9	793.9	821.7	649.0	795.1	797.2
1500	0.67	0.70	1543.2	1163.5	1224.4	875.5	1162.8	1169.1
1750	0.65	0.65	2473.6	1677.2	1802.1	1145.4	1666.7	1685.5

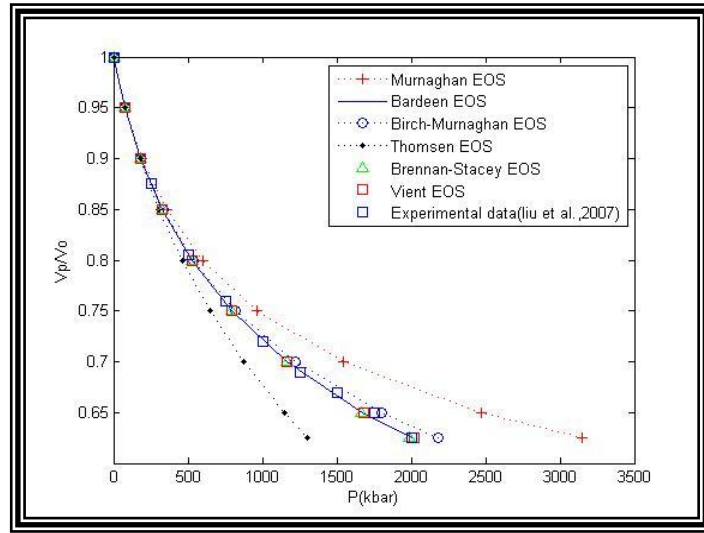
2000	0.625	0.625	3149.3	2007.5	2183.3	1298.8	1990.6	2016.8
------	-------	-------	--------	--------	--------	--------	--------	--------

أما عند تعويض قيم معامل المرونة الحجمي عند ثبوت درجة الحرارة (Isothermal bulk modulus- B_{oT}) وقيمة مشتقته بالنسبة للضغط للنحاس اللتان هما:

$$\left. \begin{array}{l} B_{oT} = 1330 \text{ kbar} \\ B'_{oT} = 5.3 \end{array} \right\} \text{ (Liu et al., 2007)}$$

في المعادلات (2 - 6)

حصلنا على النتائج المبينة في الشكل (1) مقارنة مع البيانات التجريبية ، والنتائج المستحصلة من تطبيق المعادلات الحالة المختلفة.



الشكل (1): احتساب تغير الحجم النوعي ($\frac{V_p}{V_o}$) للنحاس بتأثير الضغط العالي

باستخدام معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية.

التي يتضح منها أن المعادلات Bardeen و Brennan-Stacey و Vinet كانت منسجمة تماماً مع البيانات التجريبية تحت الضغوط جميعها في حين أن معادلة Birch-Murnaghan كانت أقل انسجاماً بخاصة عند الضغوط المرتفعة . في الوقت الذي أظهرت معادلة Murnaghan ومعادلة Thomsen تفاوتاً واضحاً عن البيانات التجريبية وعن نتائج بقية معادلات الحالة ، مع ملاحظة أن نتائج المعادلات جميعها كانت منسجمة تماماً مع البيانات التجريبية ومع بعضها بعضاً للضغوط القليلة نسبياً.

4.2: حساب تغير معامل كرونيشين (γ) للنحاس تحت الضغط العالي في درجة حرارة الغرفة

يعبر عن معامل كرونيشين بأنه:

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v}$$

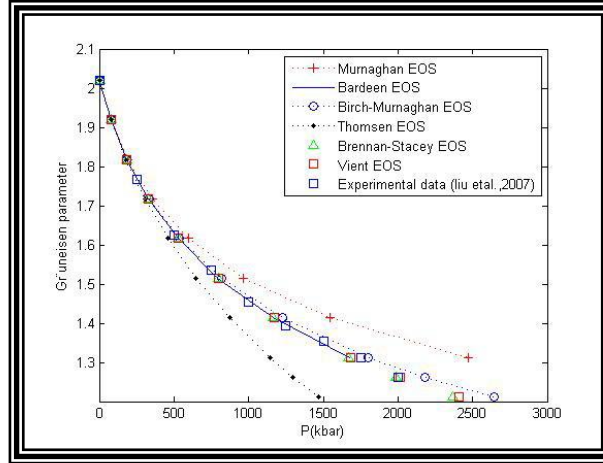
إذ إن C_p : السعة الحرارية للمادة عند ثبوت الضغط.

وعلى الرغم من أن معامل كرونيشين كمية فيزيائية مهمة في أبحاث المواد الصلبة إلا أنه لا توجد صيغة نظرية دقيقة لاحتساب هذا المعامل ، فضلاً عن تضارب البيانات التجريبية الخاصة به ولهذا السبب فإن دراسته تحت تأثير الضغط العالي تعد محاولة للوصول إلى صيغة دقيقة للتعبير عن هذا المعامل.

يعبر عن تغير معامل كرونيشين مع الضغط على وفق الصيغة (Boehler,1983):

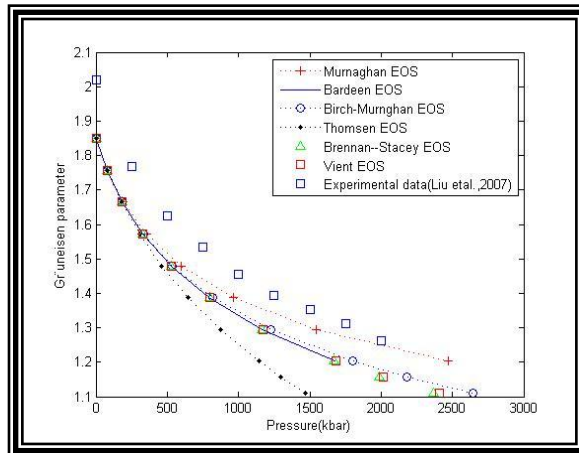
$$\gamma = \gamma_o \left(\frac{V_p}{V_o} \right) \dots\dots\dots(20)$$

ولما كانت القيم التجريبية لمعامل كرونيشين عند الضغط الجوي الاعتيادي ($\gamma_{exp} = 2.02$) تختلف عن القيمة النظرية ($\gamma_{oth} = 1.85$) (Graf et al., 2003). فقد أجرينا حساباتنا لتغير معامل كرونيشين مع الضغط باستخدام القيمة التجريبية ، في المرة الأولى ، كما مبين بالشكل (2a). وفي المرة الثانية استخدمنا القيمة النظرية ($\gamma_{oth} = 1.85$) وحصلنا على النتائج المبينة في الشكل (2b) مقارنة مع البيانات المحسوبة باستخدام القيمة التجريبية



الشكل (2a): تغير معامل كرونيشين للنحاس مع الضغط عند درجة حرارة

الغرفة باستخدام القيمة التجريبية γ_{exp}



الشكل (2b): تغير معامل كرونيشين للنحاس مع الضغط عند درجة حرارة

الغرفة باستخدام القيمة النظرية γ_{oth} .

4.3: حساب تغير معامل المرونة الحجمي B_T مع الضغط في درجة حرارة الغرفة

يعبر عن معامل المرونة الحجمي B_T على وفق العلاقة

$$B_T = -V_o \frac{\partial P}{\partial V} \dots\dots\dots(21)$$

إذ إن B_T معامل المرونة الحجمي الحراري

V_o الحجم النوعي للنحاس تحت الضغط الجوي الاعتيادي في درجة حرارة الغرفة ، وقد

وجد انه يساوي $11.18 \text{ \AA}^3 / \text{atom}$ (Liu et al., 2007).

باشتقاق المعادلات 3, 5, 6 تم احتساب $\frac{\partial P}{\partial V}$ لهذه المعادلات وحصلنا على:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{BM} = \frac{3}{2} B_{oT} [(\eta)^{-7/3} - (\eta)^{-5/3}] \left[-\frac{3}{4} (4 - B'_{oT}) \left[\left(\frac{-2}{3} \right) \frac{V_p^{-5/3}}{V_o^{-2/3}} \right] \right] + \dots\dots\dots(22)$$

$$\frac{3}{2} B_{oT} \left[\frac{-7 V_p^{-10/3}}{3 V_o^{-7/3}} + \frac{5 V_p^{-8/3}}{3 V_o^{-5/3}} \right] \left[1 - \left(\frac{3}{4} \right) (4 - B'_{oT}) [(\eta)^{-2/3} - 1] \right]$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T = \frac{3B_{oT}}{2} [(\eta)^{-1/3} - (\eta)^{1/3}] \left[\frac{3}{4} B'_{oT} \left(-\frac{2}{3} \left(\frac{V_p^{-1/3}}{V_o^{2/3}} \right) \right) \right] + \dots\dots\dots(23)$$

$$\frac{3B_{oT}}{2} \left[\left(-\frac{1}{3} \left(\frac{V_p^{-4/3}}{V_o^{-1/3}} \right) - \frac{1}{3} \left(\frac{V_p^{-2/3}}{V_o^{1/3}} \right) \right) \right] \left[1 + \frac{3}{4} B'_{oT} (1 - (\eta)^{2/3}) \right]$$

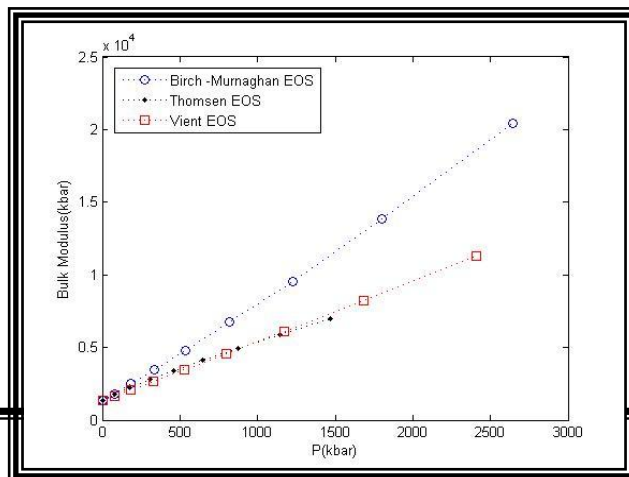
$$\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_V = -2B_{oT} \frac{V^{-5/3}}{V_o^{-2/3}} \{1 - (\eta)^{1/3}\} \exp \left[\frac{3}{2} (B'_{oT} - 1) (1 - (\eta)^{1/3}) \right] + \dots\dots\dots(24)$$

$$3B_{oT} (\eta)^{-2/3} \left\{ \left(-\frac{1}{3} \frac{V_p^{-2/3}}{V_o^{1/3}} \right) \exp \left[\frac{3}{2} (B'_{oT} - 1) (1 - (\eta)^{1/3}) \right] + \right.$$

$$\left. (1 - (\eta)^{1/3}) \exp \left[\frac{3}{2} (B'_{oT} - 1) (1 - (\eta)^{1/3}) \right] \left(-\frac{3}{2} (B'_{oT} - 1) \right) \frac{1}{3} \frac{V_p^{-2/3}}{V_o^{1/3}} \right\}$$

بتعويض المعادلات (22, 23, 24) على التوالي في المعادلة 21 حصلنا على النتائج المبينة في

الشكل (3) التي تظهر تغير معامل المرونة الحجمي مع الضغط.



الشكل (3): تغير معامل المرونة الحجمي B_T للنحاس مع الضغط العالي.

ولما كانت القيم النظرية لـ B_{oT} عند الضغط الجوي الاعتيادي متفاوتة في مقاديرها ، كما موضح في الجدول (2)، فقد استخدمنا في حساباتنا لتغير B_T مع الضغط القيمة التجريبية والموضحة في الجدول (2) أيضاً، ومع ذلك فإن النتائج التي حصلنا عليها هي الأخرى متفاوتة بالنسبة لمعادلات الحالة المختلفة، شكل (3).

الجدول (2): قيم معامل المرونة الحجمي B_{oT} عند الضغط الجوي الاعتيادي.

B_{oT} Mbar	B_{oT} Mbar	Ref.
1.79	4.95	Jona F. <i>et al.</i> ,2003
1.34	4.94	(theoretical)
1.416	5.312	Liu Y.B. <i>et al.</i> ,2007
1.434	5.168	(Theoretical results)
1.33	5.3	Dewaele A. <i>et al.</i> ,2004 (experimental data)

4.4: حساب تغير ثابت الشبكة للنحاس مع الضغط عند درجة حرارة الغرفة

يعبر عن تغير ثابت الشبكة مع الضغط على وفق العلاقة الآتية (Radi *et al.*,2007)

$$a = a_o \left(\frac{V_p}{V_o} \right)^{1/3} \dots\dots\dots(25)$$

إذ إن

a : ثابت الشبكة عند الضغط P kbar.

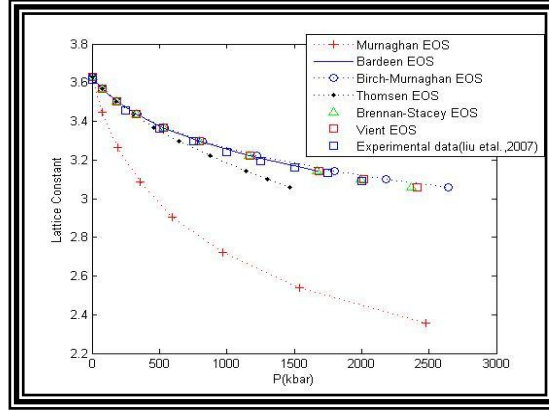
a_o : ثابت الشبكة عند الضغط الجوي الاعتيادي.

إن القيم التجريبية والنظرية لثابت الشبكة للنحاس متفاوتة في مقاديرها بعضها مع بعض كما موضح في الجدول (3).

الجدول (3): قيم ثابت الشبكة للنحاس تحت الضغط الجوي الاعتيادي.

a_o	Ref.
3.629	Liu <i>et al.</i> ,2007
3.631	
3.54	Jona F. <i>et al.</i> ,2003
3.64	
3.52	Mehl M.J. & Papaconstantopoulos,1996
3.615 _(exp)	Dewaele <i>et al.</i> ,2004

عند إجراء حساباتنا النظرية، على وفق معادلات الحالة المختلفة، استعملنا $a_0 = 3.629$ ، في حين أننا استخدمنا القيمة التجريبية عند احتساب تغير a_0 مع الضغط على وفق قيم $\frac{V_p}{V_0}$ التجريبية المستحصلة من الشكل (1) و حصلنا على النتائج المبينة في الشكل (4)، إذ تظهر نتائج معظم معادلات الحالة توافقاً جيداً مع القيم التجريبية باستثناء معادلة Murnaghan التي أظهرت تفاوتاً واضحاً تحت الضغوط جميعها، في حين أظهرت معادلة Thomsen بعض التفاوت عن النتائج التجريبية للضغوط التي تجاوزت 500 kbar



الشكل (4): تغير ثابت الشبكة للنحاس (a) مع الضغط عند درجة حرارة الغرفة.

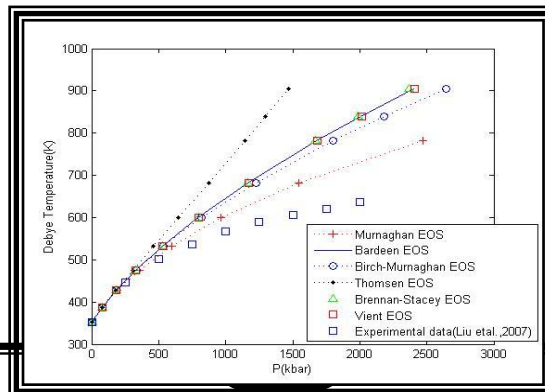
4.5: حساب تغير درجة حرارة ديباي للنحاس مع الضغط العالي عند درجة حرارة الغرفة.
يعبر عن تغير درجة حرارة ديباي مع الضغط على وفق العلاقة

$$\theta_p = \theta_D \left(\frac{V_p}{V_0} \right)^{-\gamma} \quad \dots\dots\dots(26)$$

إذ إن: θ_p هي درجة حرارة ديباي تحت ضغط P (kbar).

θ_D هي درجة حرارة ديباي تحت الضغط الجوي الاعتيادي، وهي للنحاس تساوي 352K (Shepard et al, 2000).

تم احتساب تغير درجة حرارة ديباي على وفق المعادلة (26) باعتبار ان $\gamma_0 = 1.85$ (Graf, 2003) واستخدام قيم $\frac{V_p}{V_0}$ التي تم الحصول عليها باستخدام المعادلات (2-6) والمبينة في الشكل (1) وحصلنا على النتائج المبينة في الشكل (5 a) مقارنة مع البيانات التي حصلنا عليها باستخدام القيم التجريبية $\frac{V_p}{V_0}$ المبينة أيضاً في الشكل (1)



الشكل (5a): تغير درجة حرارة ديبياي للنحاس مع الضغط باستخدام معادلات الحالة المختلفة مقارنة مع البيانات التجريبية*.

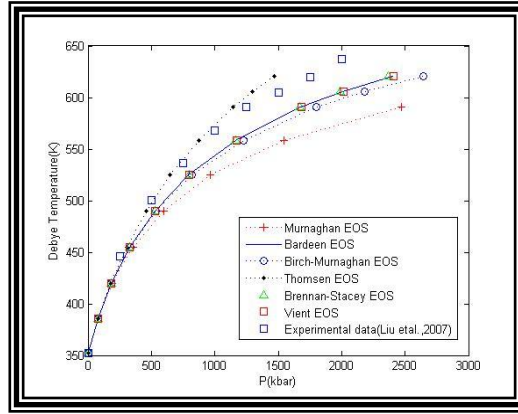
ويلاحظ مدى التفاوت في النتائج المستحصلة من المعادلات المختلفة بعضها مع بعض ومع البيانات التجريبية . باستثناء التوافق بين النتائج المستحصلة من معادلت ي الحالة ل Vient ، Brennan-Stacey. ولما كنا قد اشرنا في الفقرة (4.2) لتغير معامل كرونيشن مع الضغط فلا بد لنا من الانتباه الى احتساب تغير معامل كرونيشن مع الضغط عند احتساب تغير درجة حرارة ديبياي مع الضغط.

بتوليف المعادلة (20)

$$\gamma = \gamma_o \left(\frac{V_p}{V_o} \right)$$

مع المعادلة (26) استطعنا احتساب تغير معامل كرونيشن عند احتساب تغير درجة حرارة ديبياي مع الضغط وحصلنا على النتائج المبينة في الشكل (5b)، مقارنة مع البيانات التجريبية.

ويلاحظ من الشكل (5b) أن نتائج معادلة Thomsen كانت هي الأكثر توافقاً مع البيانات التجريبية ومعادلة Murnaghan هي اقل توافقاً مع البيانات التجريبية ، وتظهر النتائج أن الصياغة الدقيقة لاحتساب تغير معامل كرونيشن مع الضغط تعد أملاً واعداً لصياغة معادلة حالة عامة للمادة الصلبة.



الشكل (5b): تغير درجة حرارة ديبياي للنحاس مع الضغط باستخدام معادلات الحالة المختلفة واحتساب تغير معامل γ مع الضغط مقارنة مع البيانات التجريبية.

5. المناقشة والاستنتاجات

* البيانات التجريبية (exp data) هي نتائج محسوبة لقيم درجة حرارة ديبياي عند الضغوط المختلفة باستخدام بيانات تجريبية لكل من $\left(\frac{V_p}{V_o}\right)$ ومعامل كرونيشن الأول وليست بيانات مأخوذة من نتائج قياسات تجريبية لتغير درجة حرارة ديبياي مع الضغط

إذا تجاوزنا كل الملاحظات التي يمكن الوقوف عليها للخصائص المختلفة التي تناولها هذا الفصل، فإنه لا يمكننا تجاوز التفاوت في نتائج تغير معامل γ مع الضغط، وتغير نتائج B_T مع الضغط. فضلاً عن التضارب في قيم المعاملين عند الضغط الجوي الاعتيادي والتفاوت بين أقياما التجريبية والنظرية.

ويؤشر هذا إلى أن محاولات صياغة معادلة حالة عامة (Universal EOS) للمواد الصلبة لا بد لها أن تمر من خلال الأخذ بالحسبان تغيرات كل من γ و B_T .

6. المصادر

- 1) Baghmar D., Gaur N. K., Singh S., and Gupta D. C.; (2008); "High Pressure Phase Transition of Copper Halides"; Turk. J. Phys.; 32; 167 -174.
- 2) Bardeen J.; (1938); "Compressibilities of the alkali metals"; Journal of Chemical Physics.; 6; 372.
- 3) Birch F.; (1947); "Finite elastic strain of cubic crystals" ; Phys. Rev.; 71; 809-824.
- 4) Boehler R. and Ramakrishnan J.; (1980); "Experimental results on the pressure dependence of the Grüneisen paramete: A review"; Journal of Geophysical research; Vol. 85; No. 1312; 6996-7002.
- 5) Boehler R.; (1983); "Melting temperature, a diabats and Grüneisen parameter of Lithium, Sodium an Potassium versus pressure"; Phys. Rev. B.; Vol. 127; No. 11; 6754 – 6762.
- 6) Brennan B. J., and Stacey F. D.; (1979); "A thermodynamically based equation of state for the lower mantle"; J. Geophys. Res.; 84(B10); 5535-5539.
- 7) Chijioke A. D., Nellis W. J., and Saliva I. F.; (2005); "High – pressure equations of state of Al, Cu, Ta and W"; Journal of Applied Physics.; 98; 073526.
- 8) Dewaele A., Loubeyre P., and Mezouar M.; (2004); "Equations of state of six metals above 94 GPa"; Phys. Rev. B.; 70; 094112.
- 9) Dorogokupets P. I., and Oganov A. R.; (2005); "Equation of state of Al, Au, Cu, Pt, Ta, and revised ruby pressure scale"; Doklady Earth Sciences.; Vol. 410; No. 7; 1091- 1095.

- 10) Graf M. J., Greeff C. W., and Boettger J. C.; (2003); "High pressure Debye – Waller and Grüneisen parameters of Au and Cu"; *Cond-Mat. Mtrl. Sci.*; 50; 0307750.
- 11) Greeff C. W., Boettger J. C., Graf M. J., and Johnson J. D.; (2006); "Theoretical investigation of the Cu EOS standard"; *Journal of Physics and Chemistry of Solids*; 67; 2033-2040.
- 12) Jona F., Ji X. Z., and Marcus P. M.; (2003); "Theory and experiments hexagonal close – packed copper" *Phys. Rev. B.*; 68; 172101.
- 13) Landsberg P. T.; (1990); "Thermodynamics and statistical mechanics"; Dover Publication; INC; New York.
- 14) Liu Y. B., Sheng Li X., Feng Y. L., Cui Y. L., and Han X.; (2007); "Thermodynamic properties of Cu under high pressure"; *Physica B.*; 394 ; 14-17.
- 15) Mehl M. J., and Papaconstantopoulos D. A.; (1996); "Applications of a tight-binding total-energy method for transition and noble metals: Elastic constants, vacancies, and surfaces of monatomic metals" *Phys. Rev. B.*; 54(7); 4519 - 4530 .
- 16) Moyzis J. A.; (1968); "High pressure Mössbauer studies on Iron and its dilute alloys" ; Ph D. Thesis; University of Illinois; USA.
- 17) Murnaghan F. D.; (1937); "Finite deformations of an elastic solid" ; *Am. J. Math.*; 49; 235- 260.
- 18) Radi I. O., Abdulsatter M A. and Abdul-letif M.; (2007); "Semiempirical LUC-INDO calculation on the effect of pressure on the electronic structure of diamond" *Phy. Stat. Sol.*; (b) 244; No 4; 1304 -1317.
- 19) Rai H. K., Misra A. K., Shukla S. P., and Pandey A. K.; (2008); "Analysis of pressure–volume relationship for bulk metallic glasses"; *E-Journal of Chemistry.*; Vol. 5; No. 2; 385-394.
- 20) Shepard C. K., Mullen J. G., and Schupp G.; (2000); "Debye – Waller factors of Copper, Silver and Lead"; *Phys. Rev. B.*; 61(3); 8622-8624.
- 21) Thomsen L.; (1970); "On the fourth – order anharmonic equation of state of solid"; *Journal of Physics and Chemistry of Solids. Phys*; Volume 31(9); 2003-2016.

- 22) Tripathi P., Misra G., and Goyal S. C.; (2006); "Equation of state for group IV-IV semiconductors"; Solid state communication; 139; 132-137.
- 23) Vient P., Ferraute J., Smith J. R., and Rose J.; (1986); A universal equation of state for solids"; J. Phys. Chem. solid; 19; L 467-L 473.
- 24) Vinet P., Ferrante J., Rose J. H., and Smith J. R.; (1987); "Compressibility of solids" ; J. Geophys. Res.; 92; 9319 – 9325.
- 25) Wang Y., Zhang J., Xu H., Lin Z., Daemen L. L., Zhao Y., and Wang L.; (2009); "Thermal equation of state of Copper studied by high P-T synchrotron x-ray diffraction"; Appl. Phys. Lett.; 94(7); 071904.