SJST
sjst.scst.edu.ly
Surman Journal for Science and Technology
ISSN: Online (2790-5721) - Print (2790-5713)
مجلة صرمان للعلوم والتقنية
Vol6, No.2, Jun. – Dec. 2024
Pages: 051 ~ 057

مقارنة القيم المحسوبة نظريا للحرارة النوعية المولية c_V لمادة كلوريد الصوديوم (NaCl) باستخدام نموذج ديباي مع القيم المعملية التجريبية

حنان الصادق الطاهر عبدالرحمن، حليمة المبروك شعبان القمودي، عفاف صالح علي الزوالي
قسم الفيزياء / كلية التربية أبي عيسي/جامعة الزاوية
a.zawaly@zu.edu.ly_, h.elgamoudi@zu.edu.ly_, h.abdulrahman@zu.edu.ly

الملخص:

تمَّ إعداد هذا البحث للمقارنة بين النتائج والقيم المحسوبة نظريا للحرارة النوعية المولية بثبوت الحجم (c_V) لمادة كلوريد الصوديوم (NaCl)،مع النتائج المعملية التجريبية .

يعتبر الهدف الرئيسي من هذا البحث هو إيجاد مدى التطابق بين القيمتين النظرية والتجريبية ويتم ذلك باستخدام نموذج ديباي للحرارة النوعية المولية بثبوت الحجم وتطبيقه على مادة كلوريد الصوديوم وبرنامج (ماثلاب) يقوم بحساب هذه القيم النظرية مستخدمين في ذلك درجة حرارة ديباي للمادة المدروسة θ_D 277.5 =K وعدد درات الوحدة الخلية البدائية الواحدة Z=2 ومن ثم مقارنتها بالنتائج المعملية .

الكلمات المفتاحية :الحرارة النوعية، درجة حرارة ديباي، نموذج ديباي، نقطة الانصهار، عدد درات الخلية البدائية الواحدة

المقدمـــــة:

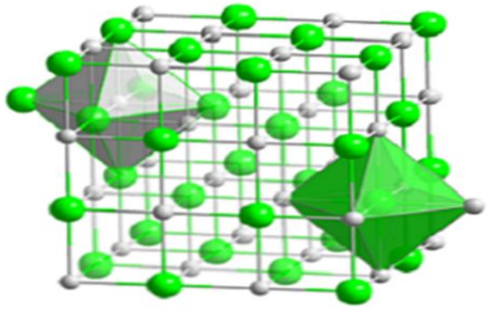
تمَّ اختيار هذا البحث ليُسهم ولو بقدر بسيط في تقييم مدى التطابق بين النتائج النظرية والمعملية للحرارة النوعية المولية بثبوت الحجم (c_V) لمادة كلوريد الصوديوم وذلك بالاعتماد على نموذج ديباي للوصول إلى هذا الهدف، إذ أنه يُعتبر نموذجاً يعطي قيماً للحرارة النوعية المولية بدقة مقبولة إذا كان المطلوب فقط إيجادها دون استخدامها لإيجاد كميات فيزيائية أخرى عن طريق التكامل أو المجموع الإحصائي الرياضي.

حدَّدت القياسات التجريبية المعملية سلوك الحرارة النوعية المولية بثبوت الحجم بدلالة درجة الحرارة المطلقة وحاولت العديد من النظريات تفسير ذلك السلوك وإعطائه المفهوم الفيزيائي المناسب، ومن أهم تلك النظريات والتي تم استخدامها في هذا البحث نموذج ديباي الذي أعطى دقة عالية مقبولة جداً في وصف الحرارة النوعية المولية بثبوت الحجم كدالة في درجة الحرارة المطلقة نظريا ومن ثم مقارنتها بالنتائج المعملية.

التركيب البلوري والخصائص الفيزيائية لمادة كلوريد الصوديوم:

يعتبر كلوريد الصوديوم ملح نقي على شكل بلورات عديمة اللون في حالتها الصلبة ، ويتكون من عنصرين الكلور -Cl والصوديوم +Na ، حيث تفقد ذرة الصوديوم إلكترونها الخارجي فيصغر حجمها وتتحول الى ايون سالب (الكلوريد)، فتتجمع الأيونات السالبة للكلور -Cl في مشبك بلوري منتظم بسبب قوة الجذب الكهربي بين الشحنات مكونة كلوريد الصوديوم بأواصره (روابطه) الأيونية .

بلورة كلوريد الصوديوم تنتمي إلى النظام المكعب متمركز الوجوه ، ويمكن اعتبار التركيب البلوري لكلوريد الصوديوم مكونا من شبيكتين فرعيتين متداخلتين من نوع المكعب متمركز الوجوه إحداهما لأيونات الصوديوم والأخرى لأيونات الكلور ،ثم أزيحت هاتان الشبيكتان الفرعيتان بالنسبة لبعضيهما البعض بمقدار نصف طول ضلعا المكعب .[1]



بلورة كلوريد الصوديوم[2]

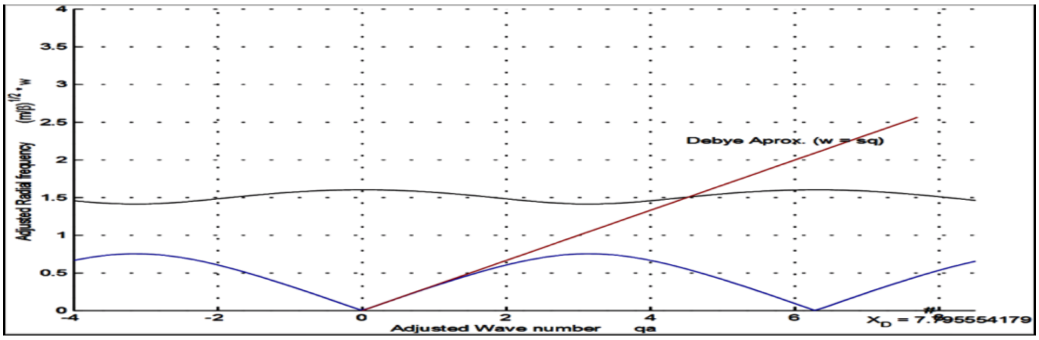
الخاصيـــــــة	الرمـــــز	القيمــــــــــة
درجـــــــة الانصهـــــــــار[3]	T_m	108 K
درجـــة حرارة ديبـــــاي (المعملية)[3]	θ_D	277.5K
الوزن الجزئي	W	58.44 g /mol
عـــــدد الـــــذرات في الخليـة البدائيـــة	Z	2
الكتلـــــــــــــــــــة الجزيئيـــــة الجرامية	M	155.96 * 10^{-3} K
سرعـــــــــــــــة الصـــــــــوت[3]	S	2636 m/s
الكثافـــــة [3]	ρ	$1.940\, g/mol$

نموذج ديباي للحرارة النوعية: c_V

اقترح ديباي في نموذجه أن الفونونات لها خيارات عدة من الترددات وبالتالي الطاقات، وقد يكون لأي عدد من الفونونات أي قيمة من الترددات المسموحة لأن الفونونات هي بوزونات في الأصل، ومن ناحية أخرى قرَّب ديباي علاقة التشتت (Dispersion relation) بخط مستقيم يمر بنقطة المرجع للتردد الزاوي بدلالة العدد الموجي[5]، وميل هذا الخط هو سرعة الموجة الميكانيكية في البلورة، أي أن:

$$\omega = s\,q, \qquad (1)$$

وقد جعل هذه العلاقة تمثل كل الفونونات التي عددها (ZN) (في بعد واحد) تمثل المنحنى بالكامل بجزأيه الصوتي والضوئي (a هي المسافة البينية بين كل ذرتين متشابهتين متتاليتين) كما هو موضح بالشكل (1)



الشكل (1): تقريب ديباي (الخط المستقيم) لعلاقة التشتت (المنحنيين) $x_D = a\, q_D$.[6]

أما في حالة الفراغ الثلاثي الأبعاد ، فإن عدد أنماط الاهتزاز الممكنة (الفونونات) هو $(3ZN)$، وذلك ليشمل تقريب ديباي المنحنيين المستعرضين والمنحنى الطولي حسب ما يحقق الشروط الفيزيائية المتعلقة بالموضوع، كما يوضحه الشكل (2).

الشكل

ومن الشكل (2)، نلاحظ أن تقريب ديباي $(\omega = sq)$ فعَّال جداً بالقرب من الصفر للأفرع الثلاثة ولكن مع الابتعاد شيئاً فشيئاً عن $(q = 0)$ يبتعد الخط المستقيم لديباي عن كل الأفرع خصوصاً المستعرضين.[4]

ذلك يعني أن ديباي قرَّب منطقة بريليون الأولى إلى كرة بدل متعدد الأوجه لمنطقة بريليون وذلك لمادة متبلورة خليتها البدائية تحتوي على ذرة واحدة، أما للمواد التي خليتها البدائية تحتوي على أكثر من ذرة، فإن كل الحلول تكون متضمنة في عدد من مناطق بريليون يساوي عدد الذرات في الخلية البدائية .

كرة ديباي سوف تعبر عن كل مناطق بريليون التي تحتوي الحل، أي

$$\frac{4}{3}\pi q_D^3 = Z\, \mathrm{v}_r ,$$

$$\frac{4}{3}\pi q_D^3 = Z\, \frac{8\pi^3}{\mathrm{v}_c} , \qquad (2)$$

حيث q_D هو نصف قطر كرة ديباي، والذي هو العدد الموجي الذي يقابل أعلى الفونونات تردداً، v_r هو حجم الخلية المعكوسة للخلية البدائية و v_c حجم الخلية البدائية، ومن ذلك نجد أن

$$q_D = \left(\frac{6\pi^2 Z}{\mathrm{v}_c} \right)^{\frac{1}{3}}, \qquad (3)$$

أي

$$\omega_D = s q_D = s \left(\frac{6Z\pi^2}{\mathrm{v}_c} \right)^{\frac{1}{3}}, \qquad (4)$$

وبالتالي تكون درجة حرارة ديباي (التقريبية) كما يلي

$$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = \frac{\hbar s}{k_B} \left(\frac{6Z\pi^2}{\mathrm{v}_c} \right)^{\frac{1}{3}}, \qquad (5)$$

حيث k_B ثابت بولتزمان و $\hbar$ ثابت بلانك مقسوماً على 2π.

ودرجة حرارة ديباي (θ_D) هي درجة الحرارة التي تظهر فيها الفونونات الأعلى طاقة (أي التي ترددها ω_D)، ونقصد هنا درجة حرارة ديباي الحقيقية التجريبية التي تعطينا أفضل تطابق بين نتائج نموذج ديباي والقياسات التجريبية.

عدد أنماط الاهتزاز التي لها عدد موجي بين q و$(q + dq)$ هو.

$$N(q)dq = \frac{3V}{2\pi^2} q^2 dq \qquad (6)$$

وحيث أن $\omega = sq$ ، أي $\omega_D = s q_D$ ، نستنتج أن

$$s = \omega_D \left(\frac{\mathrm{v}_c}{6\pi^2 Z} \right)^{\frac{1}{3}},$$

$$g(\omega)d\omega = \frac{3V}{2\pi^2 s^3} \omega^2 d\omega,$$

$$g(\omega)d\omega = \frac{9ZN_A}{\omega_D^3} \omega^2 d\omega, \qquad (7)$$

حيث أن $V = N\mathrm{v}_c = nN_A\mathrm{v}_c = N_A\mathrm{v}_c$ ، إذ أن المطلوب إيجاد الحرارة النوعية المولية، أي لمول واحد $(n = 1)$ [2].

النتائج:

تم تطبيق نموذج ديباي على مادة كلوريد الصوديوم **(NaCl)** لحساب القيم النظرية للحرارة النوعية المولية c_V باستخدام برنامج MatLab ، ومقارنة هذه القيم مع القيم المعملية التجريبية ، كما تم حساب مجموع مربعات انحرافات القيم النظرية عن التجريبية وطباعة النتائج، ويعطي الجدول (1) القياسات التجريبية للحرارة النوعية المولية c_V كدالة في درجة الحرارة لمدى يمتد من $10\,K$ إلى $250\,K$ والذي تم استخدامه في البرنامج للمقارنة.

جدول **(1):** القياسات التجريبية للحرارة النوعية المولية c_V بدلالة درجة الحرارة لمادة كلوريد الصوديوم **(NaCl)**.[5]

T (K)	c_v (J/(mol.K))	T (K)	c_v (J/(mol.K))
10	0.151	80	29.100
20	1.300	90	32.000
30	4.760	100	34.700
40	9.970	125	39.500
50	15.700	150	42.400
60	20.900	175	44.200
70	25.300	250	46.600

ويعطي الجدول (2) القيم المحسوبة نظريا لمادة كلوريد الصوديوم.

الجدول (2):القيم النظرية للحرارة النوعية المولية c_V كدالة في درجة الحرارة المطلقة الناتجة من نموذج ديباي لمادة **NaCl**).)

T (K)	c_v (J/(mol.K)) القيم النظرية
10	0.182
20	1.453
30	4.698
40	9.719
50	15.373
60	20.724
70	25.363
80	29.220
90	32.372
100	34.934
125	39.469
150	42.293
175	44.137
250	46.944

وعند تطبيق البرنامج المدعوم بكل القيم اللازمة كانت النتائج كما يوضحها الجدول (3)

جدول **(3):** مقارنة بين القيم الناتجة من نظرية ديباي لمادة **(NaCl)** والقياسات التجريبية لها الخاصة بالحرارة النوعية المولية c_V بتطبيق برنامج **MatLab**.

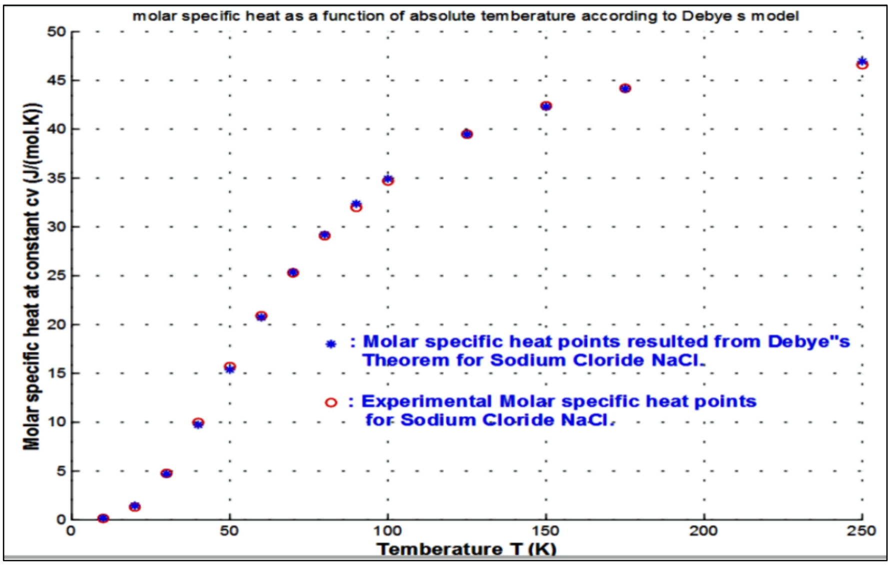
T (K)	c_v (*J/(mol.K)*) القيم النظريــة	c_v (J/(mol.K)) القيم التجريبية
10	0.182	0.151
20	1.453	1.300
30	4.698	4.760
40	9.719	9.970
50	15.373	15.700
60	20.724	20.900
70	25.363	25.300
80	29.220	29.100
90	32.372	32.000
100	34.934	34.700
125	39.469	39.500
150	42.293	42.400
175	44.137	44.200
250	46.944	46.600

Variations summation = 0.575490012508 = مجموع مربعات الانحرافات

يوضح الجدول (3) مدى التقارب الكبير بين النتائج النظرية للحرارة النوعية لمادة كلوريد الصوديوم مع القياسات التجريبية خصوصاً في درجات الحرارة المتوسطة والكبيرة، إلا أنه توجد انحرافات نسبية معتبرة عند درجات الحرارة المنخفضة جداً ، ولكن يمكن الاعتماد على نموذج ديباي إلى حد كبير إذا كان المطلوب فقط قيم الحرارة النوعية المولية c_V، وذلك يوضحه أيضاً مجموع مربعات انحرافات القيم النظرية عن القيم التجريبية الذي يساوي حوالي

$$\sum_i \left(c_{theo_i} - c_{\exp_i}\right)^2 = 0.575490012508,$$

ويعتبر صغيراً بمقارنته بقيم الحرارة النوعية المولية c_V، والشكل (3) يؤكد ذلك بشكل أوضح.



الشكل(3)

مقارنة بين النتائج النظرية لنموذج ديباي والقياسات التجريبية للحرارة النوعية المولية c_V لمادة **NaCl** باستخدام برنامج **MatLab** خاص.

إن هذا البحث هو مساهمة بسيطة لمحاولة إظهار السلوك الحراري لمادة كلوريد الصوديوم نظريا وتجريبيا ، ودرجة الحرارة التي تصبح فيها حرارته النوعية شبه ثابتة والتي يمكن أن تعطينا انطباعاً عاماً على مدى صحة افتراضاتنا التي تم استخدامها

في نموذج ديباي .حيث يمكن الاعتماد على نموذج ديباي لحساب الحرارة النوعية للمواد في حالتها المكثفة لأن نسبة الأخطاء مقبولة، هذا إذا كان المطلوب فقط إيجاد قيم الحرارة النوعية، ولكن إذا كان المطلوب إيجاد كمية فيزيائية تنتج من تكامل منحنى الحرارة النوعية على درجة الحرارة المطلقة فإن الأخطاء تجمع بعضها البعض ويكون الخطأ الإجمالي مؤثر بدرجة كبيرة.

و لإثبات صحة النتائج النظرية للحرارة النوعية، فيمكن استخدامها لإيجاد الطاقة اللازمة لرفع درجة حرارة المادة من الصفر المطلق إلى عتبة درجة حرارة الانصهار كما يلي

$$u = \int_0^{T_m} c_v \, dT = 3ZR\theta_D \int_0^{x_m} y \, dx \quad \Rightarrow \quad x_m = \frac{T_m}{\theta_D}$$

من خلال مقارنة نقاط الحرارة النوعية المولية النظرية باستخدام نموذج ديباي مع القياسات المعملية لمادة كلوريد الصوديوم NaCl، نجد أن معظم الانحرافات تكون في درجات الحرارة القريبة من الصفر المطلق وتقل هذه الانحرافات كلما زادت درجة الحرارة، و بالرغم من ذلك فإن نموذج ديباي يُعتبر جيدا ويمكن الاعتماد عليه لمعظم المواد مثل كلوريد الصوديوم NaCl والماس C والنحاس Cu وكبريتيد الخارصين ZnS في الحالة المكثفة.

المراجع العربية:

[1] م .أ إسماعيل ، فيزياء الحالة الصلبة الصلبة 2007

[2]محمد حسن جغلاف، "طاقات الانصهار وعلاقتها بطاقات الارتباط في المواد الصلبة"، رسالة ماجستير في الفيزياء الصلبة، قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة طرابلس، ليبيا، 2014م.

[3]محمد علي معتوق، "دراسة بعض البلورات الجزيئية والأيونية باستخدام أطياف رامان وتقنية الأمواج فوق السمعية"، رسالة الدكتوراة في الفيزياء الصلبة، قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة "ويلز" بكاردف، المملكة المتحدة "بريطانيا"، 1987م.

المراجع الأجنبية:

[4] **M. Razeghi**, "*Fundamentals of solid state engineering*", 2nd Edition, ISBN 10: 0-387-28152-5,ISBN 13: 978-0-387-28152-0, Inc., Evanston, USA, Library of Congress Control Number: 2005937004, Springer Science + Business Media, 2006.

[5] **M. W. Zemansky** and **R. H. Dittman**, "*Heat and thermodynamics*", 5th Edition, McGRAW-HILL Book Company, New York, 1981.

[6] **I. Nasser**, "*Specific heat of solids*", Chapter 15, 2012.