دراسة نظرية للحرارة النوعية المولية (C_V) للنيون في حالته الصلبة باستخدام نموذج ديباي ومقارنتها بالنتائج التجريبية المعملية

حنان الصادق الطاهر عبدالرحمن
h.abdulrahman@zu.edu.ly

عفاف صالح علي الزوالي
a.zawaly@zu.edu.ly

سميراء صالح علي شاكونة
s.shakonah@zu.edu.ly

زهور عبدالمجيد محمد زكري
z.zikri@zu.edu.ly

حليمة المبروك شعبان القمودي
h.elgamoudi@zu.edu.ly

الملخص

يهدف هذا البحث الى دراسة الحرارة النوعية لعنصر النيون في حالته الصلبة باستخدام نموذج ديباي ، حيث يعد نموذج ديباي من أكثر النماذج نجاحاً في تفسير السلوك الحراري للمواد الصلبة عند درجات الحرارة المنخفضة . ثم حساب الحرارة النوعية نظرياً عند درجات حرارة مختلفة باستخدام درجة حرارة ديباي الخاصة بالنيون الصلب (63K) ، ثم مقارنة النتائج النظرية المدروسة في هذا البحث مع النتائج التجريبية المعملية للحرارة النوعية للنيون الصلب . حيث أظهرت النتائج اتفاقاً جيداً بين نموذج ديباي ونموذج T3 عند درجات الحرارة المنخفضة ، بينما لوحظ انحراف واضح عند الاقتراب من درجة حرارة ديباي ، وقد تمت مناقشة الفروق الفيزيائية وتفسيرها ، مع تقديم رسم بياني توضيحي للنتائج .

استلام الورقة: 2026-02-16 - قبول الورقة: 2026-02-24 - نشر الورقة: 2026-03-02

الكلمات المفتاحية : درجة حرارة ديباي ، السعة الحرارية ، نقطة الانصهار ، التركيب البلوري

المقدمة Introduction

تعد دراسة الخواص الحرارية للغازات النبيلة الصلبة مجالاً بحثياً مهماً في فيزياء الحالة الصلبة ، ودلك بسبب بساطة تركيبها البلوري (مكعب متمركز الأوجه)،يتميز النيون الصلب بكونه نظاماً نموذجياً لاختيار النماذج النظرية في الديناميكا الحرارية ، نظراً لعدم وجود إلكترونات تكافؤ حرة وعدم وجود عزم ثنائي قطب دائم ، كما يتميز نموذج ديباي بقدرته على وصف هذا السلوك بدقة عند درجات الحرارة المنخفضة ، حيث تعتمد الحرارة النوعية على علاقة تكعيبية مع درجة الحرارة $C_V \alpha T^3$[1]

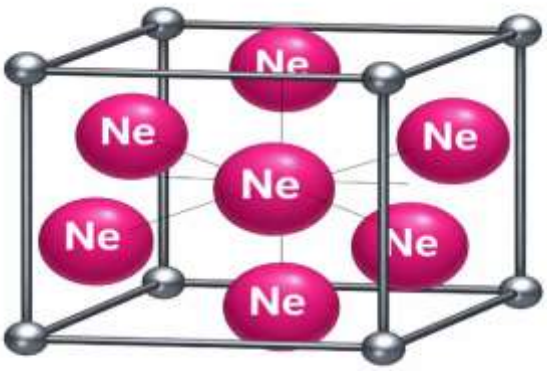
يعتبر النيون Ne احد الغازات النبيلة الخاملة، ويتواجد في الظروف القياسية من الضغط ودرجة الحرارة على شكل غاز، بينما تحت ظروف شديدة مثل الضغط العالي جداً ودرجات الحرارة المنخفضة جداً ، يمكن لغاز النيون أن يتصلب ويكون تركيباً بلورياً عند درجة انصهار 24. 6K [2].

تهدف هذه الدراسة إلى إجراء مقارنة كمية بين التوقعات النظرية لنموذج ديباي بمعلومية $\theta_D = 63K$ والقياسات التجريبية للحرارة النوعية للنيون الصلب في نطاق (5-70k) . تم اختيار هذا النطاق ليشمل كلاً من المنطقة المنخفضة الحرارة (حيث يسود قانون T^3) والمنطقة القريبة من درجة ديباي [2,1].

التركيب البلوري والخصائص الفيزيائية للنيون في حالته الصلبة

أ - التركيب البلوري(Crystal Structure)

يتجمد النيون على شكل بلورة مكعبة متمركزة الأوجه (FCC) ، تترتب فيها ذرات النيون في عقد شبكة مكعبة ، مع وجود ذرة في مركز كل وجه إضافةً إلى ذرات الزوايا [1]. كما هو موضح في الشكل (1) .



FCC Structure of Solid Neon (Ne)

ب. الخصائص الفيزيائية (Physics Properties)

في هذه الورقة تم اعتماد قيمة درجة حرارة ديباي $\theta_D = 63K$ لكونها القيمة الأكثر دقة في تمثيل سلوك السعة الحرارية للنيون الصلب عند درجات الحرارة المنخفضة ولتحقيقها افضل مطابقة تجريبية مع قانون ديباي للتكعيب مقارنةً بالقيم المستخلصة من القياسات المرنة [3].

بما أن النيون غاز خامل فإن الروابط بين ذراته وهي روابط (فان در فال) ضعيفة مما يجعل درجة حرارة ديباي له منخفضة جداً، كذلك سرعة الصوت في النيون منخفضة، مما يجعل (الفونونات) هي المسيطر الأساسي على السعة الحرارية كما موضح في الجدول 1.

الجدول (1) يوضح الخصائص الفيزيائية للنيون الصلب [4,3].

الخاصية	الرمز	القيمة
درجــة الانصهــار	T_m	*24.6K*
درجة حرارة ديبــاي	θ_D	63 K
الوزن الجزئي	W	20.18 g /mol
عــدد الــذرات في الخلية البدائية	Z	1
الكتلـــــة الجزيئيــة الجرامية	M	$3.35x10^{-26}$ Kg
الكثافــة	ρ	1.44 g/cm^3
سرعة الصوت	S	435 m/s

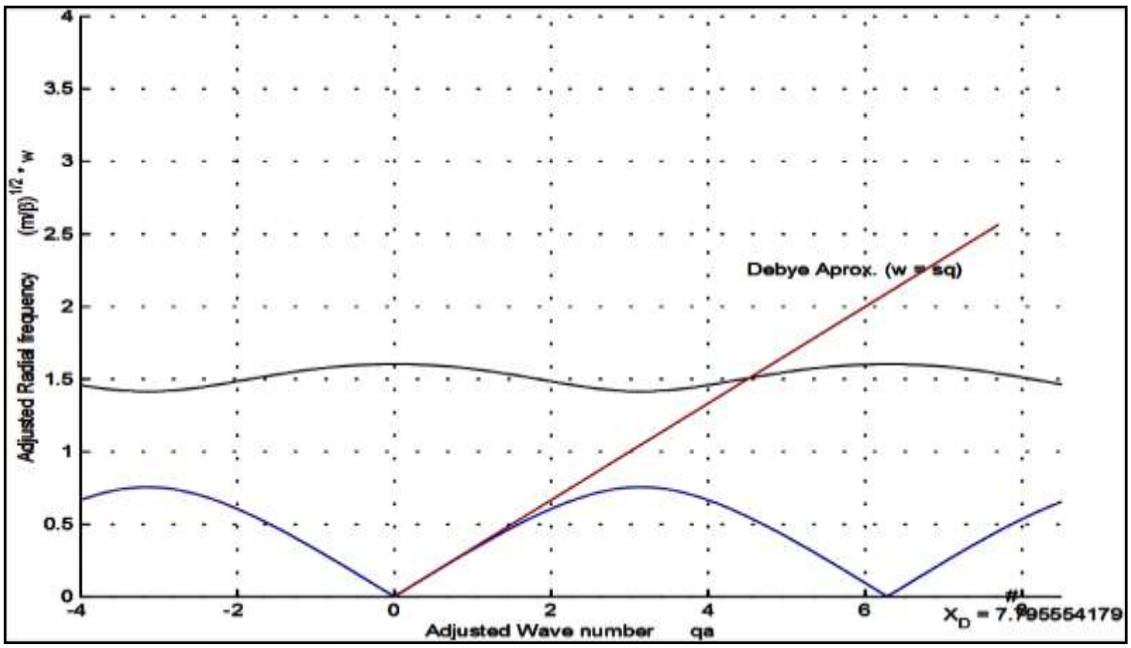
الجانب النظري

1- نموذج ديباي للحرارة النوعية c_v

للحصول على نتائج أكثر دقة وأقرب للقياسات التجريبية من تلك التي توصل لها إينشتين، 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:

$$\omega = s\, q, \tag{1}$$

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 (2)



الشكل (2)

تقريب ديباي (الخط المستقيم) لعلاقة التشتت (المنحنيين) $x_D = a\, q_D$ **.[7]**

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.

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

حيث k_B ثابت بولتزمان ، $\hbar$ ثابت بلانك مقسوماً على 2π ، Z عدد درات وحدة الخلية البدائية الواحدة.

2- قانون الاس الثالث لدرجة الحرارة المطلقة (T^3)

في نموذج ديباي تعطي الطاقة الداخلية الكلية U لجسم صلب بالعلاقة

$$U = \int_0^{\omega_D} g(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} - 1} d\omega \qquad (3)$$

حيث أن $g(\omega)$ هي كثافة الحالات الاهتزازية .

عند درجات الحرارة المنخفضة جداً($T<<\theta_D$) ،يمكن اعتبار الحد الأعلى للتكامل مالانهاية لان الترددات العالية لا تتأثر حرارياً ،

تتحول المعادلة بعد التعويض وتغيير المتغيرات الى :

$$U = \frac{3V\hbar}{2\pi^2 V^3} \int_0^{\infty} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} - 1} \, d\omega \qquad (4)$$

يعبر عن الحرارة النوعية عند حجم ثابت في نموذج ديباي بالعلاقة :

$$C_v = 9NR\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \, dx \qquad (5)$$

حيث :

$$x = \frac{\hbar\omega}{K_B T}$$

R : الثابت العام للغازات R=8.314 J/mol.K

θ_D : هي درجة حرارة ديباي

T : درجة الحرارة المطلقة

عند درجات الحرارة المنخفضة جداً $T<<\theta_D$ يؤول التكامل إلى قيمة ثابتة وبتبسيط المعادلة (5) نحصل على :

$$C_v = \frac{12\pi^4}{5} R\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \qquad (6)$$

من هذه المعادلة نجد أن السعة الحرارية تتناسب مع الأس الثالث لدرجة الحرارة المطلقة

$$C_V \alpha T^3$$

2-الجانب العملي (الحسابات)

تم جمع البيانات التجريبية من دراسات سابقة أجريت على عينات عالية النقاوة من نيون صلب تحت ظروف ضغط عالي (للحفاظ على الحالة الصلبة فوق 24.6K).[6] كما هو موضح في الجدول (2)

جدول 2 يوضح القيم التجريبية للحرارة النوعية للنيون الصلب

T(K)	C_v التجريبية(جول/مول.كلفن)
5	0.808
10	6.42
20	16.85
30	21.18
40	23.05
50	23.98
60	24.48
70	24.68

ولحساب C_V نظريا عند درجات الحرارة 5-10-20-30-40-50-60-70K

تم اعتماد قيمة درجة حرارة ديباي للنيون الصلب المستخلصة من القياسات التجريبية في درجات الحرارة المنخفضة وهي 63K. تم تطبيق معادلة ديباي التكاملية باستخدام برنامج حاسوبي بلغة بايثون(Python)، كما هو موضح في الجدول (3)

الجدول(3): مقارنة بين القيم النظرية والتجريبية للحرارة النوعية(C_V) للنيون الصلب [3]

T(K)	C_V التجريبية(جول/مول.كلفن)	C_v النظرية(ديباي) (جول/مول.كلفن)
5	0.808	0.97
10	6.42	6.96
20	16.85	17.26

T(K)	C_V التجريبية(جول/مول.كلفن)	C_v النظرية(ديباي) (جول/مول.كلفن)
30	21.18	22.01
40	23.05	23.69
50	23.98	24.37
60	24.48	24.67
70	24.68	24.78

مناقشة النتائج

تمت مقارنة القيم النظرية للحرارة النوعية عند ثبوت الحجم C_v المحسوبة باستخدام نموذج ديباي $\theta_D = 63K$ مع القيم التجريبية للنيون في حالته الصلبة عند درجات حرارة مختلفة تتراوح بين 5-70K .وقد أظهرت النتائج توافقا جيداً بشكل عام بين القيم النظرية والتجريبية ،مع وجود فروق طفيفة يمكن تفسيرها فيزيائياً

1-عند درجات الحرارة المنخفضة جداً ($T<<\theta_D$)

عند درجات الحرارة المنخفضة مثل 5K و 10K، نلاحظ أن القيم النظرية أكبر قليلاً من القيم التجريبية، فمثلاً القيمة النظرية (0.97): تتفق نظرية ديباي مع القانون الثالث للديناميكا الحرارية حيث تظهر أن C_v تتناسب مع T^3 وتقترب من الصفر عند الاقتراب من الصفر المطلق.

- القيمة التجريبية (0.8): القيمة التجريبية أقل قليلاً من القيمة النظرية، ويعزى هذا الفرق إلى أن نموذج ديباي يفترض شبكة بلورية مثالية واهتزازات توافقية تماماً، في حين أن العينات الحقيقية تحتوي على عيوب بلورية وشوائب تؤثر على طيف الفونونات، مما يؤدي إلى انخفاض القيم المقاسة عملياً.

كما أن القيم التجريبية عند هذه الدرجات المنخفضة تتبع تقريباً علاقة $C_V \propto T^3$ ، وهو ما يتفق مع تنبؤات نموذج ديباي في مجال درجات الحرارة المنخفضة، مما يؤكد صحة النموذج في وصف السلوك الحراري للنيون الصلب في هذا المجال.

2-عند درجات الحرارة المتوسطة ($20 \leq T \leq 40K$)

في هذا المجال، يزاد التقارب بشكل ملحوظ بين القيم النظرية والتجريبية. فعلى سبيل المثال ،عند 20K بلغت القيمة النظرية 17.26 والقيمة التجريبية 16.85 ، بينما عند 40K بلغ الفرق أقل من 0.7 . ويشير هذا التوافق الجيد إلى أن نموذج ديباي يعطي وصفاً دقيقاً للاهتزازات الشبكية في هذا النطاق الحراري، حيث تبدأ معظم أنماط الفونونات بالمساهمة في السعة الحرارية.

3-**عند درجات الحرارة العالية نسبياً($T \approx \theta_D$)**

عند درجات حرارة تقترب من درجة حرارة ديباي للنيون الصلب مثل 50,60 و 70K ، نلاحظ أن القيم النظرية والتجريبية تقترب من حد دولونغ بيتي($3R \approx \frac{24.9J}{mol.K}$) .

الخلاصة

تظهر النتائج أن نموذج ديباي عند درجة حرارة ديباي بمعلومية $\theta_D = 63K$ يقدم وصفاً كمياً موفقاً للسلوك الحراري للنيون الصلب في النطاق (5-70K) . ويؤكد التوافق الجيد مع القيم التجريبية صحة الفرضيات الأساسية للنموذج، خاصةً في تفسير السلوك عند درجات الحرارة المنخفضة والمتوسطة . توفر الدراسة اساساً لمقارنات مستقبلية مع غازات نبيلة صلبة أخرى وتطوير نماذج أكثر دقة .

المراجع

[1] Kittel,C.(2005),Introduction to Solid State Physics (8th ed.) wiley.

[2]Ashcroft,N.W.,&Mermin, N.D.(1976). Solid State Physics. Holt, Rinehart and Winston.

[3]Haynes M.William , CRC Handbook of Chemistry and Physics , Francis&Taylor /CRC press , 2016

[4] IUPAC.(2023).Standard Atomic Weights. International Union of Puer and Applied Chemistry.

[5] **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.

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