دراسة تأثير الضغط والحرارة وحساب القيم المثلى لكرونشن لبعض المواد الصلبة

أطروحة تقدمت بها

جنان فخر الدين احمد علي

إلى

مجلس كلية التربية–جامعة الموصل
وهي جزء من متطلبات نيل شهادة دكتوراه فلسفة
فيزياء الحالة الصلبة

باشراف

الاستاذ المساعد الدكتور عدنان محمد الشيخ حسين

الاستاذ المساعد الدكتور ممتاز محمد صالح حسين

1428 هـ **2007 م**

الخلاصة

معادلة الحالة هي صياغة نظرية لوصف المادة عند مجموعة ظروف فيزياوية معينة وهي علاقة رياضية بين دالتي حالة او اكثر متعلقة بالمادة مثل درجة الحرارة والضغط والحجم والطاقة الداخلية. في هذه الدراسة استخدمت معادلة الحالة لاحتساب تاثير الضغط على الخواص الفيزيائية للمواد الصلبة في مدى واسع من درجات الحرارة ابتداءا من درجة حرارة الغرفة وصولا لدرجة حرارة الانصهار، ثم صياغة معادلة حالة عامة للمواد الصلبة من خلال اجراء بعض التحويرات على المعمول بها وفق تسلسلها الزمني بدءا من معادلة برجمان وصولا الى معادلات حالة المواد الصلبة الحديثة.

تم تطبيق معادلات الحالة المختلفة على مجموعة من المواد الصلبة واحتساب تاثير الضغط على الخواص الفيزيائية بالاضافة الى استخدام معادلة مرنكهان وتحويراتها للتعرف على التاثير الاعلى من المديات المألوفة وعلى تغير معامل المرونة الحجمي مع الضغط واجتياز حاجز تغير طور الحديد α(b.c.c.)-Fe الى طور $\in$(hcp)-Fe.

للمزيد من استقصاء تاثير الضغط على المواد الصلبة تم دراسة تاثير الضغط على معامل كرونشن الاول γ وعمل برنامج حاسوبي لاحتساب القيم المثلى للمعامل الثاني لكرونشن q باعتماد تاثير الضغط على الجزء الخالي من الارتداد ثم مقارنة البيانات التجريبية والبيانات النظرية التي تم الحصول عليها من النموذج النظري في هذه الدراسة وكانتا في حالة تطابق جيد.

لقد تم تطبيق معادلة الحالة لفنت للفضة عند درجة حرارة الغرفة وعند درجات الحرارة العالية باستخدام معادلة ماي–كرونشن–ديباي (المتكونة من معادلة فينت مضافا اليها الضغط الحراري) لحساب تاثير الضغط على انماط الاهتزاز وترددات الفونون وكذلك احتساب المعاملات الثرموداينميكية للفضة عند ضغوط ودرجات حرارة مختلفة. اشارت نتائج الدراسة الى ان الضغط يرفع اهتزاز الشبيكة نحو الترددات العالية في الوقت الذي تقل فيه شدة كثافة الانماط وحدتها.

تم دراسة دراسة تاثير الضغط على درجات حرارة الانصهار لاطوار الحديد الاكثر استقرارا مثل طور $\in$(hcp)-Fe وطور γ_i(f.c.c.)-Fe وذلك بربط معادلة لندمان في الانصهار مع معادلة ماي–كرونشن–ديباي (MGDE) ومقارنة النتائج النظرية مع منحنيات الانصهار التجريبية والنظرية التي تم الحصول عليها من المصادر العلمية وكذلك دراسة الخواص الثرموداينامیكية للحديد طور $\in$-Fe ومقارنتها مع البيانات التجريبية والنظرية، ولقد لوحظ ان نتائج الدراسة كانت مرضية وتحقق معادلات الحالة المعتمدة ولاسيما معادلة فينت التي يظهر انها لاتزال المعادلة الاكثر استخداما لكونها معادلة حالة عامة، رغم تواصل الابحاث حتى الوقت الحاضر لصياغة معادلة حالة عامة للمواد الصلبة.

Abstract

An equation of state is a constitutive equation describing the state of matter under a given set of physical conditions. It provides a mathematical relationship between two or more state functions associated with the matter, such as its temperature, pressure, volume or internal energy. Equations of state are useful in describing the properties of fluids, mixtures of fluids, solids and even the interior of stars. In this thesis equations of state are used for the evaluation of pressure effects on solids at room temperature and high temperature up to melting points.

A review for equations of state evaluation have been given with applications of the different EOS on solid state starting from Bridgeman EOS till up to date EOS such applications enable this work to improve the applying of Murnghun EOS to higher range of pressure passing the point of phase transition as aresult of considering the variation in bulk modulus value for α-Fe and $\in$-Fe.

The optimum value of second Gruneisen parameter has a subject of study and a theoretical model of study and a theoretical computational model has been constructed using the evaluation of recoilless-fraction (f-fraction) of γ-ray for Fe^{57} in V, Ti and α-Fe.

Static and thermodynamic properties of silver at high pressure and high temperature have evaluated. The effect of high pressure and high temperature of lattice vibrations and mode density have been studied in details in this thesis.

Iron phases, melting curve, thermodynamics properties of iron have been studied and theoretical evaluation and physical interpretation for the variation of these subjects have been given.

A Study for Effect of Pressure and Temperature and Evaluation of Optimum Value of Gruneisen Parameter for Some Solids

A Thesis Submitted

By

Janan Fakhar Al-Deen Ahmad Ali

To
The Council of the College of Education
University of Mosul
In a Partial Fulfillment of the Requirements
of the Ph.D. Degree

In
Solid-State Physics

Supervised by

Assist. Prof. Dr.
Adnan M. Al-Sheikh Hussien

Assist. Prof. Dr.
Momtaz M.S. Hussien

2007 A.D. **1428 A.H.**