جامعة الموصل

كلية التربية للعلوم الصرفة

تحليل الانصهار للهاليدات القلوية والمبني على جهد طاقة الشبيكة ومعادلة الحالة

نور مزاحم حازم

رسالة ماجستير

في

الفيزياء

باشراف

الأستاذ المساعد

الدكتورة جنان فخر الدين احمد

1438 هـ   2017 م

الخلاصة

تم العمل في هذه الرسالة على ثلاثة محاور نظرية كالآتي:

المحور الأول: دراسة الخواص المرنة الايزوثرمية للهاليدات القلوية (الطور الأول (B1) والطور الثاني (B2) لـ B1 liF, B1 KBr, KCl) تحت تأثير الضغط وعند درجة حرارة الغرفة وهذه الخواص هي التغير النسبي بحجم وحدة الخلية $\left(\frac{V}{V_o}\right)$، معاملات المرونة وهي (معامل المرونة الحجمي (K_T)، معامل القص(G)، معامل يونك (Y))، المسافة بين الأيونات (r) التي لها علاقة بحجم وحدة الخلية. وقد استخدمت في هذه الدراسة معادلات حالة مبنية على طاقة الجهد وهي (فنت، بورن– ماي، بورن– مايير). وبعد اشتقاق معادلة الحالة لبورن– ماي والتي رأيناها انها تنسجم مع متطلبات الرسالة تم التوصل الى صيغة جديده لمعامل المرونة الحجمي (K_T) واعتمدت في الرسالة.

المحور الثاني: دراسة الخواص الثرموديناميكية للهاليدات القلوية (B1 B2 KCl, B1 KBr, B1 LiF) تحت تأثير الضغط ولمدى من درجات الحرارة، وهذه الخواص هي معامل التمدد الحراري الحجمي (α)، المسافة بين الايونات (r_T) طبقا لمعادلة باندي، معامل المرونة الحجمي(K)، الضغط الحراري(P_{Th})، الحجم الحراري (V_{Th})، وقد تم دراسة هذه الخواص بالاعتماد على معادلة اندرسن للتمدد الحراري ومعادلة باندي ومعادلة كومر. كما تم ايجاد منحني طاقة جهد الشبيكة للهاليدات القلوية المشار لها بالمحور ومن ثم حساب طاقة جهد الشبيكة عند الاتزان اي عند $r = r_o$ بالاعتماد على صيغة القوة المعكوسة لبورن – ماي تم التوصل الى الصيغة النهائية لمعادلة الطاقة حيث تم تطبيقها على الهاليدات القلوية المذكورة وتعينها على منحني طاقة جهد الشبيكة.

المحور الثالث: دراسة الانصهار للهاليدات القلوية (B1 B2 KCl, B1 KBr, B1 LiF) بالاعتماد على:

1– طاقة جهد الشبيكة حيث تم ايجاد المسافة البدائية بين الايونات (r_{mo}) عند نقطة الانصهار بعد استخدام معادلة طاقة الجهد عند نقطة الانقلاب اي عند $r = r_i$ والتي عندها يحدث الانصهار بالاعتماد على صيغة القوة المعكوسة لبورن – ماي تم التوصل لمعادلة الطاقة حيث تم حسابها وتطبيقها على الهاليدات القلوية المشارة بالمحور وتعينها على منحني طاقة جهد الشبيكة تم ايجاد النقطة المقابلة لنقطة الانقلاب (r_j) التي لها علاقة بـ (r_{mo}) ومقارنة النتائج مع نتائج باحثين آخرين وتم الحصول على توافق جيد.

2– باستخدام معادلة الحالة الحرارية لكومر مع المعادلة (25 – 2، 28 – 2) حسبت (r_{mo})

3– لإيجاد منحني الانصهار: تم استخدام معادلة الحالة لفنت ومعادلة الحالة الحرارية لكومر مع انموذج لندمان تم ايجاد منحني الانصهار للهاليدات القلوية قيد الدراسة ومقارنة النتائج مع البيانات التجريبية لمنحني الانصهار لباحثين آخرين وتم الحصول على توافق جيد.

Abstract

This thesis was Prepared in three theoretical parts as follows:

1 − First Part: Studying the Alkali Halides Isothermal features (friest phase (B1) and second phase (B2) for KCl, B1 KBr, B1 liF) under pressure effect at room temperature. These features are, relative change in the volume of the cell unit $\left(\frac{V}{V_o}\right)$, Bulk modules like Bulk modules(K_T), Sheer module(G), young module(Y), inter ionic separation (r) associated with the volume of the cell unit. This study, has tackled equations of state based on potential energy which are(Vinet, Born− Mie, Born− Mayer) . After having derivation for Born−Mie equation of state I found matching in harmony with my current message, A new form was reached for the bulk module (K_T).

2 − Second Part: Studying the Alkali Halides thermodynamic features (B1 B2 KCl, B1KBr, B1liF) under pressure effect and a range of temperature. These features are, interionic separation (r_T) in accordance with Bandy equation, volume thermal expansion coefficient (α), Bulk module(K), thermal pressure$(P_{Th})$and thermal volume(V_{Th}). The above features were studied depending on Anderson thermal expansion equation, Bandy equation and Kumar equation. Also energy curve for Alkali Halides lattice potential which found referred to within part 2 has been introduced as well as calculating it upon equilibrium when $r = r_o$ relying on Born−Mie Inverse power form has been reached the new final form of energy equation Which was calculated and applied on Alkali Halides described within this part and inserted on the lattice potential energy curve .

3 − Third Part: Studying Melting of Alkali Halides (B1 B2 KCl, B1 KBr, B1 liF) depending on the following :

Lattice potential energy where the primary inter ionic separation 1 − (r_{mo}) at the melting point was found after using the potential energy equation at the point of inflection when $r = r_i$ and where the melting occurs relying on Born−Mie Inverse power form has been reached the new final form of the energy equation Which was calculated and applied on Alkali Halides described within this part and inserted on the lattice potential energy curve. We found the point opposite the point of inflection (r_j) related to (r_{mo}) and after comparing the results with the results of other researchers, a good agreement was observed.

2− by using Kumar thermal equation of state with equations (2−25, 2−28) has been calculated (r_{mo})

3 −To find melting curve: Vient equation of state and Kumar thermal equation of state with Lindeman model to find melting curve for Alkali Halides that was used and compared the result with experimental data for melting curve of other researchers, a good agreement was observed.

Mosul University

College of Education for Pure Sciences

Melting Analysis for Alkali Halides And The Based on Lattice Potential Energy And Equation of State

Noor Muzahim Hazim

M. Sc. Thesis

In

Physics

Supervised By

Asst. Prof.

Dr. Janan Fakhar Al-Deen Ahmad

2017 A.D. 1438 A.H