جامعة الموصل
كلية التربية للعلوم الصرفة

الخصائص الديناميكية الحرارية للهاليدات القلوية تحت ضغوط عالية

زينة رعد محمود

رسالة ماجستير

الفيزياء

بإشراف

الأستاذ المساعد

الدكتورة جنان فخر الدين احمد

1435 هـ 2014 م

الخلاصة

معادلة الحالة هي صياغة نظرية لوصف المادة عند مجموعة ظروف فيزيائية معينة وهي علاقة رياضية بين دالتي حالة أو أكثر متعلقة بالمادة مثل درجة الحرارة والضغط والحجم النوعي والطاقة الداخلية. في هذه الرسالة استخدمت معادلات حالة مبنية على أسس مختلفة مثل (لينارد–جونس, باردين, كومر) لحساب تأثير الضغط على الخواص الفيزيائية لكلوريد الصوديوم (NaCl-B1, CsCl, LiF) حيث نقصد ب NaCl-B1 الطور الأول لبلورة كلوريد الصوديوم وهو مكعب ممركز الأوجه (face center cubic) ويرمز لها (F.C.C) في مدى واسع من درجات الحرارة من درجة حرارة الغرفة وصولاً لدرجة حرارة الانصهار. وللمزيد من استقصاء تأثير الضغط على كلوريد الصوديوم تم دراسة تأثير الضغط على التغير النسبي للحجم $\frac{V_P}{V_o}$ ومعامل المرونة الحجمي B_T ومعامل كرونيشن الأول γ ودرجة حرارة ديباي θ_D, وكذلك تأثير الضغط على ثابت الشبيكة عند درجة حرارة الغرفة وثم مقارنة النتائج مع البيانات التجريبية وكانت في حالة توافق جيد وخصوصاً عند الضغوط القليلة إلى حد الضغط (5 Gpa), أما بعد هذا الضغط فإن النتائج المستحصلة تباينت عن البيانات التجريبية, بقدر او بأخر, وكان افضل توافق بين النتائج المستحصلة باستخدام معادلة باردين مقارنة مع النتائج التجريبية.

فضلاً عن ذلك تم دراسة تأثير الضغط على الطاقة التذبذبية E_D وعلى السعة الحرارية C_V عند حجم ثابت, لكل من (NaCl-B1, CsCl, LiF) وذلك باستخدام نموذج ديباي. إذ تم الحصول على نتائج متوافقة مع نتائج الأبحاث العلمية المنشورة.

كما تم استخدام معادلة الحالة الحرارية لكومر في حساب معامل التمدد الحراري الحجمي α_V وحساب معامل المرونة الحجمي B كما تم حساب الضغط الحراري P_{th} بالاعتماد على معامل التمدد الحراري α_o ومعامل المرونة الحجمي B_o عند درجة حرارة الغرفة حيث لوحظ ان الضغط الحراري يعتمد على درجات الحرارة فقط .

واخيراً جرت دراسة منحني الانصهار للهاليد كلوريد الصوديوم (NaCl-B1) بالاعتماد على معادلة الحالة الحرارية لكومر مع نموذج لندمان في الانصهار وكانت النتائج متوافقة مع

البيانات التجريبية وكذلك تم إيجاد المسافة البينية بين الايونات عند الانصهار (r_m) للهاليد كلوريد الصوديوم (NaCl-B1) مرتاً باستخدام طاقة جهد الشبيكة ومرتاً ثانية باستخدام طريقة اندرسن في التمدد الحراري واعطت النتائج المستحصلة توافقاً جيداً مع نتائج الأبحاث العلمية المنشورة.

Abstract

Equatin 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 temperature, pressure, spesicat volume and internal energy . equation of state are useful in describing the properties of fluids and solid . In this study equation of state are used for the evaluation of pressure effects on solid (Alkali haliedes) at room temperature and high temperature up to melting point.

Thermodynamic properties ($\frac{V_P}{V_o}, B_T, \theta_D, \gamma, a$) of alkali halieds (NaCl-B1,CsCl,LiF) at high pressure and room temperature have been evaluated and the results are compared with experimental data and gave good results under to 5 Gpa but after, the results of these equations of state diverge from experimental data while Bardeen equation of state gave good agreement with experimental data , the effect of high pressure and high temperature on vibration energy of atoms (E_D) and on heat capacity at constant volume (C_V) of (NaCl-B1,CsCl,LiF) are calculatied by using Debye Model and gave good agreement with the theory, also thermal volume and pressure (V_{th}), (P_{th}) and thermal expansion coefficient (α_V) are calculated dy using thermal equation of state by Kumar .

Finally, melting curve of (NaCl-B1) was calculated by using Kumar thermal equation of state with Lindeman equation the results were compared with experimental data. Also inter ionic distance at melting (r_m) for (NaCl-B1) was calculated by two ways, first by using lattice potential energy and second by using Anderson equation, and compared with data of other recearchers and a good maching was observed.

University of Mosul
College of Education
For Pure Science

Thermodynamical properties of Alkali Halieds under High Pressure

Zeena Raad Mhmood

M. Sc. Thesis
Physics

Supervised By

Assistant Prof.
Dr. Janan Fakhar AL-Deen Ahmad

2014 A. D 1435 A.H.