٤١١٩٥

۱۳۸۱ /۴/ ۳۰

دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکدهٔ شیمی

بررسی تحرک یونی هالیدها در آرگون و هلیم

پایان نامهٔ کارشناسی ارشد شیمی فیزیک

ایرج عبادی

اساتید راهنما

دکتر محمود تبریزچی
دکتر یوسف غایب

۱۳۸۰

۴۱۱۹۵

دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکدهٔ شیمی

پایان نامهٔ کارشناسی ارشد رشتهٔ شیمی فیزیک آقای ایرج عبادی

تحت عنوان

بررسی تحرک یونی هالیدها در آرگون و هلیم

در تاریخ ۸۰/۱۱/۲۹ توسط کمیتهٔ تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهائی قرار گرفت.

۱- استاد راهنمای پایان نامه	دکتر محمود تبریزچی
۲-استاد راهنمای پایان نامه	دکتر یوسف غایب
۳-استاد مشاور	دکتر بیژن نجفی
٤- استاد داور	دکتر حسن سبزیان
٥- استاد داور	دکتر تقی خیامیان

سرپرست تحصیلات تکمیلی دانشکده — دکتر تقی خیامیان

با حمد و سپاس پروردگار بی همتا

اکنون که به یاری خدا دورهٔ کارشناسی ارشد را به پایان می برم بر خود لازم می دانم از همهٔ افرادی که مرا در این راه یاری کردند تشکر و قدردانی کنم.

از اساتید راهنما

تمام معلمانم

اساتیدم در دانشگاه تربیت معلم

اساتیدم در دانشگاه صنعتی اصفهان

کادر دانشکدهٔ شیمی

و از همهٔ آنان که مجال ذکر نامشان نیست کمال تشکر و قدردانی را دارم.

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات،
ابتکارات و نوآوریهای ناشی از تحقیق موضوع
این پایان نامه متعلق به دانشگاه صنعتی
اصفهان است.

تقدیم به

روان پاک پدرم

همهٔ اعضای خانواده‌ام

همسرم

مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فهرست مطالب	هشت
فهرست شکلها	دوازده
فهرست جداول	چهارده
چکیده	۱
فصل اول: تاریخچه و نظریهٔ تحرک یونی	
۱-۱- تحرک یونی	۲
۱-۲- وابستگی تحرک به میدان	۳
۱-۳- رابطه نرنست-انیشتین	۳
۱-٤- روشهای اندازه گیری تحرک یونی	۵
۱-٤-۱- روش تک اسکن	۵
۱-٤-۲- روش اسکن با استفاده از دریچه دوم	٦
۱-٤-۳- روش متوسط گیری سیگنال	٦
۱-٤-٤- روش تبدیل فوریه	۷
۱-٤-۵- روشهای دیگر	۷
۱-۵- نظریه تحرک یونی	۷
۱-۵-۱- نظریه انتقال اندازه حرکت برای تحرک یونی	۱۲
۱-٦- یونهای بزرگ	۱۹
۱-۷- تحرک کاهش یافته	۲۰
۱-۸- هدف از انجام تحقیق	۲۰
فصل دوم: نیروهای بین مولکولی و تحرک یونی	
مقدمه	۲۱
۲-۱- نظریه جنبشی گازها	۲۲
۲-۱-۱- مدل ارائه شده در نظریه جنبشی گازها	۲۳

۲-۱-۲- تابع توزیع ماکسول-بولتزمن ۲٤
۲-۱-۳- تابع توزیع ماکسول-بولتزمن در سه بعد ۲٤
۲-۱-۳- فرکانس برخورد ۲٥
۲-۱-٤- پویش آزاد متوسط ۲٦
۲-۲- نیروهای بین مولکولی ۲٦
۲-۲-۱- منشاء نیروهای بین مولکولی ۲۹
۲-۲-۲- نیروهای الکترواستاتیک ۳۰
۲-۲-۳- نیروهای القایی ۳۰
۲-۲-٤- نیروهای تفرق ۳۱
۲-۳- پتانسیل بین مولکولی تجربی ۳۱
۲-۳-۱- پتانسیل کره سخت ۳۳
۲-۳-۲- پتانسیل کره نرم ۳۳
۲-۳-۳- پتانسیل چاه مربعی ۳٤
۲-۳-٤- پتانسیل دافعه با توان معکوس ۳٤
۲-۳-٥- پتانسیل چاه مثلثی ۳٤
۲-۳-٦- پتانسیل ساترلند ۳٥
۲-۳-۷- پتانسیل چاه ذوزنقه ای ۳٥
۲-۳-۸- پتانسیل چاه مربعی همراه با پتانسیل ساترلند ۳٥
۲-۳-۹- پتانسیل (n-m) لنارد جونز ۳٦
۲-۳-۱۰- پتانسیل کیهارا ۳٦
۲-۳-۱۱- پتانسیل (exp-٦) ۳٦
۲-۳-۱۲- پتانسیل بوکینگهام-کورنر ۳۷
۲-۳-۱۳- پتانسیل مورس ۳۷
۲-۳-۱٤- پتانسیل گوگنهایم ۳۷
۲-۳-۱٥- پتانسیل بویز و شاویت ۳۸
۲-۳-۱٦- پتانسیل دایموند-رایگبی-اسمیت ۳۸
۲-٤- تحرک یونی و برهمکنش یون-مولکول ۳۸
۲-٤-۱- مدل کره سخت ۳۸
۲-٤-۲- مدل حد-قطبش ٤۰

۲-٤-۳- مدل پتانسیل ۱۲-٤ هسته سخت ٤١
۲-٥- پتانسیلهای واقع بینانه ٤٣
۲-٥-۱- پتانسیل عزیز ٤٣
۲-٥-۲- پتانسیل عمومی گازهای بی اثر(پتانسیل میسون) ٤٥
۲-٦- نظریه چاپمن-انسکو'گ ٤٨
۲-۷- انتگرالهای برخورد ٥١
۲-۸- دمای کاهش یافته ٥٣
۲-۹- محاسبه تحرک یونی ٥٣

فصل سوم: دستگاهوری

مقدمه ٦٠
۳-۱- منبع یونیزاسون ٦٣
۳-۲- ناحیه واکنش ٦٤
۳-۲-۱- ربایش الکترون ٦٤
۳-۲-۲- تفکیک همراه با ربایش الکترون ٦٥
۳-۲-۳- از دست دادن پروتون ٦٥
۳-۲-٤- تبادل بار با اکسیژن ٦٥
۳-۳- شبکه الکتریکی ٦٦
۳-٤- ناحیه شناوری ٦٦
۳-٥- شبکه محافظ ٦٦
۳-٦- جمع کننده ٦٧
۳-۷- منابع تغذیه با ولتاژ بالا ٦٧
۳-۸- تقویت کننده ٦٨
۳-۹- دستگاه جمع آوری داده ها ٦٨
۳-۱۰- گازهای حامل، شناوری و کرونا ٦٨
۳-۱۰-۱- گاز حامل ٦٨
۳-۱۰-۲- گاز شناوری ٦٩
۳-۱۰-۳- گاز کرونا ۷۰
۳-۱۱- شرایط اندازه گیری ۷۰
۳-۱۱-۱- فشار هوا ۷۰

۳-۱۱-۲- دما ۷۰
۳-۱۱-۳- شدت میدان ۷۱
۳-۱۱-٤- سرعت جریان گازها ۷۱

فصل چهارم:نتایج

مقدمه ۷۲
٤-۱- اندازه گیری تحرک یونی ۷۲
٤-۱-۱- تزریق نمونه ۷۳
٤-۱-۲- ثبت کردن طیفها ۷۳
٤-۲- به دست آوردن تحرک یونها از روی زمان خوانده شده از روی طیف ۸۱
٤-۳- کالیبراسیون دستگاه ۸۲
٤-۵- مقایسه نتایج نظری و تجربی ۸٦
٤-۵-۱- آبپوشی یونها ۸۹
٤-۵-۲- خوشه ای شدن با گاز رانش ۱۰٦
پیوست ۱۰۷
مراجع ۱۱۵

فهرست شکلها

عنوان **صفحه**

شکل(۱-۱): حرکت یونها در یک میدان الکتریکی یکنواخت ۳

شکل(۱-۲):حرکت یونها در سل دستگاه اسپکترومتر یونی ۵

شکل(۱-۳):تحرک بعضی یونها در گاز هیدروژن بر حسب جرم یونی ۱۰

شکل(۲-۱): نحوه توزیع سرعتهای مولکولی نیتروژن در K ۲۹۸و K ۱۵۰۰ ..... ۲۵

شکل(۲-۲): تابع انرژی پتانسیل بین مولکولی و اجزای جاذبه و دافعه آن ۲۹

شکل(۲-۱۲): فرایند القا ۳۱

شکل(۲-٤): نمودار انرژی پتانسیل برای برخی گازها ۳۲

شکل(۲-۵): پتانسیل بر همکنش بین دو مولکول بر اساس مدلهای مختلف ۳۹

شکل(۲-٦): معکوس تحرک های تجربی(نقاط) و محاسبه شده از طریق مدلها ٤۲

شکل(۲-۷): نمودار پتانسیل کاهش‌یافته میسون برای بر هم کنش یونهای هالید با هلیم برحسب فاصله کاهش‌یافته... ٤۹

شکل(۲-۸): نمودار مشتق اول پتانسیل میسون برای بر هم کنش یونهای هالید با آرگون ٤۹

شکل(۲-۹): نمودار پتانسیل کاهش‌یافته میسون برای بر هم کنش یونهای هالید با هلیم برحسب فاصله کاهش‌یافته... ۵۰

شکل(۲-۱۰): نمودار مشتق اول پتانسیل میسون برای بر هم کنش یونهای هالید با هلیم ۵۰

شکل(۲-۱۱): زاویه انحراف ایجاد شده در اثر برخورد دو مولکول ۵۲

شکل(۲-۱۲): نمودار تحرک یونی محاسبه شده با استفاده از پتانسیل میسون برای یونهای هالید در گاز آرگون ۵۸

شکل(۲-۱۳): نمودار تحرک یونی محاسبه شده با استفاده از پتانسیل میسون برای یونهای هالید در گاز هلیم ۵۹

شکل(۳-۱): نمای دستگاه طیف سنج تحرک یونی آزمایشگاه تحقیقاتی شیمی فیزیک ٦۲

شکل(۳-۲): نمای کاربرد منابع تغذیه با ولتاژ با بالا ٦۷

شکل(۳-۳): نمای سل دستگاه و محل های ورود و خروج گازها ٦۹

شکل(٤-۱): طیف تحرک یونی برای یونهای کلرید، برمید و یدید در گاز شناوری آرگون در دمای ۷٤

شکل(٤-۲): طیف تحرک یونی برای یون کلرید در گاز شناوری آرگون در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸ ..... ۷۵

شکل(٤-۳): طیف تحرک یونی برای یون برمید در گاز شناوری آرگون در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸ ..... ۷٦

شکل(٤-٤): طیف تحرک یونی برای یون یدید در گاز شناوری آرگون در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸ ..... ۷۷

شکل(٤-۵): طیف تحرک یونی برای یون کلرید در گاز شناوری هلیم در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸ ..... ۷۸

شکل(٤-٦): طیف تحرک یونی برای یون برمید در گاز شناوری هلیم در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸ ..... ۷۹

شکل(٤-٧): طیف تحرک یونی برای یون یدید در گاز شناوری هلیم در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸..... ۸۰
شکل(٤-٨): نمودار تحرک یونی تجربی هالیدها برحسب جذر دما در گاز شناوری آرگون..... ۸٤
شکل(٤-٩): نمودار تحرک یونی تجربی هالیدها برحسب جذر دما در گاز شناوری هلیم..... ۸۵
شکل(٤-١٠): تحرک یونی نظری و تجربی برای یونهای هالید در گاز شناوری آرگون..... ۸۷
شکل(٤-١١): تحرک یونی نظری و تجربی برای یونهای هالید در گاز شناوری هلیم..... ۸۸
شکل(٤-١٢): نمودار کسرهای مولی برای واکنش آبپوشی یون کلرید در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸..... ۱۰۰
شکل(٤-١٣): نمودار کسرهای مولی برای واکنش آبپوشی یون برمید در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸..... ۱۰۱
شکل(٤-١٤): نمودار کسرهای مولی برای واکنش آبپوشی یون یدید در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸..... ۱۰۲
شکل(٤-١٥): نمودار تعداد مولکولهای آب متصل شده به یون های هالیددر گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸..... ۱۰۵

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

جدول(۲-۱): پارامترهای پتانسیل عزیز برای آرگون و هلیم ٤٥

جدول(۲-۲): پارامترهای پتانسیل میسون برای بر همکنش یونهای هالید با آرگون و هلیم ٤٧

جدول(۲-۳): پارامترهای بدون دیمانسیون انرژی تبادلی برای پتانسیل میسون ٤٨

جدول(۲-٤): انتگرال برخورد مرتبه اول کاهش یافته برای یون Cl^- در گاز آرگون ٥٥

جدول(۲-٥): انتگرال برخورد مرتبه اول کاهش یافته برای یون Br^- در گاز آرگون ٥٥

جدول(۲-٦): انتگرال برخورد مرتبه اول کاهش یافته برای یون I^- در گاز آرگون ٥٦

جدول(۲-۷): انتگرال برخورد مرتبه اول کاهش یافته برای یون Cl^- در گاز هلیم ٥٦

جدول(۲-۸): انتگرال برخورد مرتبه اول کاهش یافته برای یون Br^- در گاز هلیم ٥٧

جدول(۲-۹): انتگرال برخورد مرتبه اول کاهش یافته برای یون I^- در گاز هلیم ٥٧

جدول(٤-۱): زمان های آشکار سازی و تحرک های متناظر هالید ها در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸در گاز شناوری هلیم ٨١

جدول(٤-۲):) زمان های آشکار سازی و تحرک های متناظر هالید ها در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸در گاز شناوری آرگون ٨٢

جدول(٤-۳):مقایسه شرایط اندازه گیری با مرجع استاندارد ٨٣

جدول(٤-٤): تغییرات آنتالپی(Kcal/mol) و آنتروپی(cal/mol.K) برای واکنش هالیدها با آب ٨٩

جدول(٤-٥): مقادیر کسرهای مولی برای واکنش آبپوشی یون کلرید در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸ ..... ٩٤

جدول(٤-٦): مقادیر کسرهای مولی برای واکنش آبپوشی یون برمید در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸ ..... ٩٥

جدول(٤-۷): مقادیر کسرهای مولی برای واکنش آبپوشی یون یدید در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸ ..... ٩٦

جدول(٤-۸): مقادیر ثابت های تعادل برای واکنش آبپوشی یون کلرید در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸ ..... ٩٧

جدول(٤-۹): مقادیر ثابت های تعادل برای واکنش آبپوشی یون برمید در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸ ..... ٩٨

جدول(٤-۱۰): مقادیر ثابت های تعادل برای واکنش آبپوشی یون یدید در گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸ ..... ٩٩

جدول(٤-۱۱): محاسبه تعداد مولکولهای آب متصل شده به یون های هالیددر گستره دمایی K ۵۰۸-۲۹۸ ..... ١٠٤

جدول(پ-۱):داده های نمودار شکل(۲-۱۲) ١٠٧

جدول(پ-۲): داده های نمودار شکل(۲-۱۳) ١٠٨

جدول(پ-۳): داده های نمودار شکل(٤-۸) ١٠٩

جدول(پ-٤): داده های نمودار شکل(٤-٩) ١١٠
جدول(پ-٥): داده های نمودار شکل(٤-١٠) ١١١
جدول(پ-٦): داده های نمودار شکل(٤-١١) ١١٢
جدول(پ-٧): داده های نمودار شکل(٤-١١) ١١٣
جدول(پ-٨): داده های نمودار شکل(٤-١١) ١١٤

چکیده

در این پایان نامه تحرک یونی I^-, Br^-, Cl^- در گازهای آرگون و هلیم از نظر تجربی و نظری مورد مطالعه قرار گرفتند. برای محاسبهٔ نظری تحرک یونی از معادلهٔ میسون-شمپ استفاده شده است.در این معادله تحرک یونی با بار یونها نسبت مستقیم و با دانسیتهٔ مولکولهای خنثی، انتگرال برخورد مرتبه اول و همچنین با جذر جرم کاهش یافته و دما رابطهٔ معکوس دارد. انتگرال برخورد مرتبه اول با استفاده از پتانسیل میسون که برای اتمها و یونهای با قشر الکترونی کامل پیشنهاد شده است، بدست آمد. تحرک یونی یونهای کلرید، برمید و یدید در گازهای آرگون و هلیم محاسبه شدند و نتایج مورد مقایسه قرار گرفتند.در قسمت دوم تحقیق تحرک یونهای مزبور در گازهای آرگون و هلیم در گسترهٔ دمایی ۵۰۸ K-۲۹۸ اندازه گیری شدند. برای این کار از دستگاه اسپکترومتر تحرک یونی استفاده شد. تحرکهای تجربی به دست آمده با مقادیر تحرکهای یونی محاسبه شده مورد مقایسه قرار گرفتند و مشاهده گردید که در دماهای بالا اختلاف بین آنها ناچیز است ولی در دماهای پایین عواملی همچون آبپوشی یونها و خوشه ای شدن با گاز شناوری باعث کم شدن تحرک یونی تجربی از تحرک یونی نظری می شود.