

دانشگاه ارومیه

دانشکده علوم

پایان نامه جهت اخذ دانشنامه

کارشناسی ارشد شیمی، (گرایش شیمی فیزیک)

موضوع:

استخراج یک معادله حالت جدید تعمیم یافته نوع

واندرولسی از طریق مکانیک

آمار سیالات

۱۳۸۰ / ۱۶ / ۲۵

کتابخانه اطلاعات آرک علم ایران  
تیم مدیریت آرک

استاد راهنما:

جناب آقای دکتر علی مقاری

نگارش:

فرشاد شیدائی

013125

اردیبهشت ۱۳۸۰

## به نام خدا

خداوند علیم را شکر می‌کنم که توانستم مدت زیادی را در محضر استاد بزرگوار جناب آقای دکتر علی مقاری باشم تا از علم و اخلاق ایشان بهره کافی را ببرم. بر خود لازم می‌دانم که از زحمات بی‌شائبه استاد، که با وجود مشغله کاری فراوان هدایت و راهنمایی این پایان‌نامه را با گشاده‌رویی تمام تقبل فرمودند، تشکر قلبی خود را ابراز کنم.

همچنین از زحمات آقای دکتر هدایت راحمی که به عنوان استاد مشاور پایان‌نامه کمک زیادی را به من کردند نیز تشکر می‌کنم.

فرشاد شیدایی

تقدیم به :

پدر و مادر عزیزم که همیشه مشوق من در

تحصیل بوده‌اند

و تمامی موفقیت‌های خود را مدیون ایشان

هستم

عنوان	فهرست مطالب	صفحه
چکیده		۴
فصل اول اصول اساسی مکانیک آماری سیالات		۵
۱-۱- مقدمه		۶
۲-۱- روش استخراج توابع توزیع		۱۰
۳-۱- ارتباط توابع ترمودینامیکی با $g(r)$		۱۶
۴-۱- معادله تراکم پذیری		۲۰
۵-۱- روش های تعیین تابع توزیع شعاعی		۲۱
الف) معادله انتگرالی Kirkwood		۲۱
ب) معادله (Born- Green- Yon) BGY		۲۴
ج) معادله (Ornstein of Zernike) OZ		۲۴
د) معادلات PY و HNC		۲۵
۶-۱- عبارات های تحلیلی برای توابع توزیع شعاعی سیالات		۲۶
فصل دوم معادلات حالت و مکانیک آماری سیالات		۲۸
۱-۲- مقدمه		۲۹
۲-۲- مدل کره سخت و معادلات حالت		۳۰
۲-۳- معادله حالت Percus- Yevick- Thiele		۳۳
۴-۲- معادله حالت Percus- Yevick		۳۳
۵-۲- تقریب Pade		۳۴
۶-۲- معادله اصلاح شده Carnahan- Starling		۳۴
۷-۲- مدل چاه مربعی (SW)		۳۵
۸-۲- اشاره ای به روش به کار رفته در پایان نامه		۳۷
فصل سوم محاسبه معادله اصلاح شده Deiter's برای سیالات		۳۹
فصل چهارم نتایج		۵۲
منابع		۶۰

## چکیده

در این پژوهش با استفاده از مکانیک آماری یک معادله حالت جدید تعمیم یافته واندرولسی برای مایعات به دست آمده است.

ویژگی های این معادله عبارتند از:

شکل اصلاح شده ای از مدل چاه مربعی را که شامل تفکیک پتانسیل به دو سهم یکی سهم دافعه مربوط به کره های سخت و دیگری سهم جاذبه که به شکل پتانسیل حقیقی و از نوع پتانسیل لاندن است یعنی  $u_{\text{eff}} = C_6/r^6$  مورد استفاده قرار گرفته است.

برای ناحیه دافعه توزیع شعاعی پیشنهاد شده توسط Valderrama & Faundez به کار رفته است.

تابع توزیع شعاعی برای قسمت جاذبه تابعی است که توسط Enrico Matteoli & G. Ali. Monsoori پیشنهاد شده است.

به علت اینکه هنگام نزدیک شدن یک مولکول به مولکول دیگر حداقل فاصله متوسط به اندازه قطر مولکولی نیست بلکه این حداقل بر حسب نوع فاز به چگالی و دما بستگی دارد. بنابراین برای حد پایان انتگرال در معادله به دست آمده در نواحی مختلف فازی عبارت هایی را برای  $r_{\text{eff}}^*$  به دست آورده ایم. در نهایت با رسم نمودارهای گوناگون در نواحی مختلف فازی و مقایسه مقادیر محاسبه شده با مقادیر تجربی مشاهده می شود که بیشترین مقدار خطا فشار برای کاهش یافته تجربی به ندرت ۷/۵ درصد می رسد.

**فصل اول**  
**اصول اساسی مکانیک**  
**آماري سيالات**

## ۱-۱- مقدمه

یک معادله حالت<sup>۱</sup> که در فاصله زیادی از دما و چگالی معتبر باشد، ابزار مستحکمی برای پیش بینی خواص ترمودینامیکی سیستم مورد نظر می باشد. به طور کلی، بر اساس نوع نگرش و تکنیک به کار رفته می توان سه روش کلی را برای به دست آوردن معادله حالت ذکر نمود: روش های تجربی<sup>۲</sup>، روش های نظری<sup>۳</sup> و روش های نیمه تجربی<sup>۴</sup>. معادلات حالت تجربی معمولاً نیازمند تعداد زیادی داده تجربی هستند و یا ضرورتاً باید تعداد زیادی پارامترهای تنظیم پذیر را به کار گرفت تا بر اساس داده های تجربی برای مواد مختلف آن پارامترها را تنظیم نمود. معادلات حالت نظری نیز نیازمند تعدادی پارامترهای مولکولی، به ویژه پارامترهای پتانسیل بین جفت مولکول هستند. معادلات حالت نیمه تجربی که غالباً در سطح وسیعی برای پیش بینی خواص ترمودینامیکی سیستم های چگال

---

۱- Equation of state

۲- empirical

۳- theoretical

۴- Semi-empirical

به کار می‌روند از طریق روش‌های نظری استخراج شده و سپس پارامترهای آن با بهره‌گیری از داده‌های تجربی تنظیم می‌شوند.

هر دو روش نظری و نیمه تجربی باید از طریق به کارگیری روش‌های حساس نسبت به خواص ماکروسکپی و میکروسکپی آزمایش شوند. از جمله این روش‌ها می‌توان منحنی وارونگی ژول-تامسون که نسبت به معادله حالت حساس است را نام برد [۱].

استخراج معادله حالت برای گازهای رقیق ساده‌تر است، چرا که در این نوع سیستم‌ها به دلیل سادگی در نوع بر کنش‌ها می‌توان از طریق بسط خوشه‌ای،<sup>۱</sup> بر هم کنش‌های بین مولکولی را به مجموعه‌ای از بر هم کنش‌های دوتایی، بر هم کنش‌های سه تایی و ... تجزیه نمود. تحت این شرایط معادله حالت به صورت بسط ویریال به دست خواهد آمد. به گونه‌ای که ضریب دوم ویریال با خوشه‌های دوتایی، ضریب سوم ویریال با خوشه‌های سه‌تایی و ... مرتبط می‌شوند. این روش موجب می‌شود که دانش ما از پتانسیل‌های بین مولکولی بتواند منجر به محاسبه ضرایب ویریال شود. از این طریق راهکار مناسبی برای استخراج معادله حالت سیستم‌های گاز رقیق به دست آید.

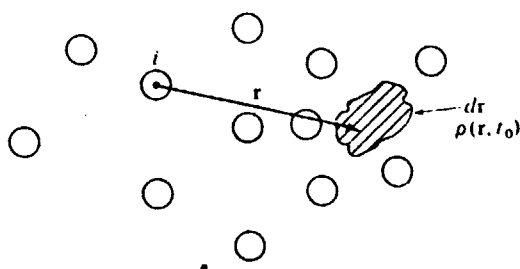
در مورد گازهای چگال، به ویژه در ناحیه فوق بحرانی، و مایعات موضوع پیچیده‌تر خواهد بود، چرا که این نوع سیستم‌ها را نمی‌توان از طریق بسط‌های خوشه‌ای پتانسیل‌های بین مولکولی مطالعه نمود. در این نوع سیستم‌ها هر مولکول با تعداد زیادی مولکول‌های اطراف خود درگیر است به طوری که همبستگی میان یک مولکول با مولکول‌های اطراف آن باید محور مطالعه و بررسی قرار گیرد. به همین جهت در مطالعه نظری سیالات چگال محاسبه توابع همبستگی و ارتباط آنها با پتانسیل‌های بین مولکولی اساس کار قرار می‌گیرد.

خوشبختانه، فرض جفت گونه جمع‌پذیری برای پتانسیل بین مولکولی موجب می‌شود که تنها توابع همبستگی شعاعی که میزان همبستگی میان دو ذره را توصیف می‌کند نیاز به محاسبه داشته و پل ارتباطی خواص مولکولی با خواص ماکروسکپی باشد.



بدین ترتیب دانش ما از خواص ماکروسکوپی نیازمند اطلاع از خواص مولکولی به ویژه انرژی پتانسیل بین یک جفت مولکولی خواهد بود. لذا داشتن اطلاعات دقیق از پتانسیل های بین مولکولی اهمیت ویژه ای دارد. چندین روش برای تعیین پتانسیل های بین مولکولی وجود دارد که شامل روش های تجربی پراش مولکولی [۲]، روش های ab initio [۳] و روش های وارونگی داده های تجربی [۴] می باشند. ساده ترین مدلی که در سیستم های چگال، به ویژه مایعات، استفاده زیادی شده و تعداد مقالات زیادی برای آن منتشر گردیده است [۵]، مدل کره سخت (HS) است. اشکال اصلاح شده ای نظیر چاه مربعی (SW)، ساترلند و لنارد-جونز (۶، ۱۲) نیز در محاسبه خواص ترمودینامیکی سیالات به کار رفته اند [۷].

در تحقیق حاضر شکل اصلاح شده ای از مدل چاه مربعی را برای استخراج معادله حالت سیالات چگال (در ناحیه فوق بحرانی و نیز مایعات) به کار برده ایم. همانطور که اشاره شد هنگامی که فرض جفت گونه جمع پذیر مجاز باشد توصیف نظری حالت سیال از روش معمول تابع توزیع شعاعی صورت می گیرد که اکنون آن را تعریف می کنیم. اجازه دهید فرض کنیم که دستگاه مختصاتی را بر روی یکی از مولکول های سیال، مثلاً مولکول  $i$  به عنوان مولکول مرکزی همچنان که در میان مولکول های همسایه اش در حال حرکت است قرار داد. اگر مجهز به وسیله اندازه گیری باشیم می توانیم تعداد مولکول هایی که به فاصله  $r$  از مولکول  $i$  در لحظه  $t$  قرار گرفته اند را اندازه گیری کنیم.



شکل (۱-۱): در لحظه  $t$  تعداد مولکول هایی که در عنصر حجمی  $dr$  به فاصله  $r$  از

مولکول مرکزی  $i$  قرار دارند  $\rho(r, t_0)dr$  است.

این اندازه گیری را می توان در فواصل متوالی و در یک دوره زمانی تکرار کرد و برای تعیین چگالی متوسط زمانی به فاصله  $r$  از مولکول  $i$  مورد استفاده قرار داد.

کمیت به دست آمده مقدار متوسط زمانی تعداد مولکول‌هایی است که در فاصله  $r$  از مولکول مرکزی  $i$  قرار دارند و به آن چگالی تعداد یا تابع توزیع  $\rho(r)$  گفته می‌شود. می‌توان اندازه‌گیری‌های مشابهی برای مقادیر متفاوتی از  $r$  انجام داد و بدین طریق شکل تحلیلی  $\rho(r)$  را به دست آورد. به علت اینکه سیال در حال تعادل است  $\rho(r)$  از زمان و مخصوصاً مولکول انتخاب شده مستقل است اما به چگالی و دما وابسته است.

تابع توزیع شعاعی  $g(r, \rho, t)$  و یا به اختصار  $g(r)$  که یک کمیت بدون بعد است به صورت نسبت چگالی موضعی در فاصله  $r$  از مولکول مرکزی به چگالی توده‌ای مایع تعریف می‌شود.

$$g(r) = \frac{\rho(r)}{\rho} \quad (1-1)$$

در اصل تابع توزیع شعاعی  $g(r)$  توسط همبستگی‌های بین مولکول مرکزی با سایر مولکول‌ها معین می‌شود و بنابراین واقعاً یک تابع مستقل نیست، و به علت وجود همین همبستگی‌های مولکولی  $g(r)$  از مقدار واحد تفاوت دارد. توجه شود که وقتی هیچ همبستگی میان مولکول مرکزی با سایر مولکول‌ها وجود نداشته باشد نظیر وقتی که چگالی سیال به سمت صفر میل می‌کند آنگاه تابع توزیع

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} g(r, \rho, t) = 1$$

شعاعی به سمت یک میل خواهد کرد، یعنی

به دلیل بزرگی نیروهای دافعه احتمال اینکه دو مولکول در فاصله کمی از یکدیگر باشند ناچیز است، بنابراین برای مقادیر  $r$  خیلی کم،  $g(r)$  و  $\rho(r)$  تقریباً صفر هستند. در حداقل انرژی پتانسیل بین مولکولی احتمال اینکه بتوان دو مولکول مجزا را از هم تشخیص داد بالا است و  $g(r)$  یک قله را نشان می‌دهد. در مایعات قله‌های اضافی کوچک‌تری بران مقادیر بزرگ‌تر  $r$  ممکن است مشاهده شوند.

کمیت به دست آمده مقدار متوسط زمانی تعداد مولکول‌هایی است که در فاصله  $r$  از مولکول مرکزی  $i$  قرار دارند و به آن چگالی تعداد یا تابع توزیع  $\rho(r)$  گفته می‌شود. می‌توان اندازه‌گیری‌های مشابهی برای مقادیر متفاوتی از  $r$  انجام داد و بدین طریق شکل تحلیلی  $\rho(r)$  را به دست آورد. به علت اینکه سیال در حال تعادل است  $\rho(r)$  از زمان و مخصوصاً مولکول انتخاب شده مستقل است اما به چگالی و دما وابسته است.

تابع توزیع شعاعی  $g(r, \rho, T)$  و یا به اختصار  $g(r)$  که یک کمیت بدون بعد است به صورت نسبت چگالی موضعی در فاصله  $r$  از مولکول مرکزی به چگالی توده‌ای مایع تعریف می‌شود.

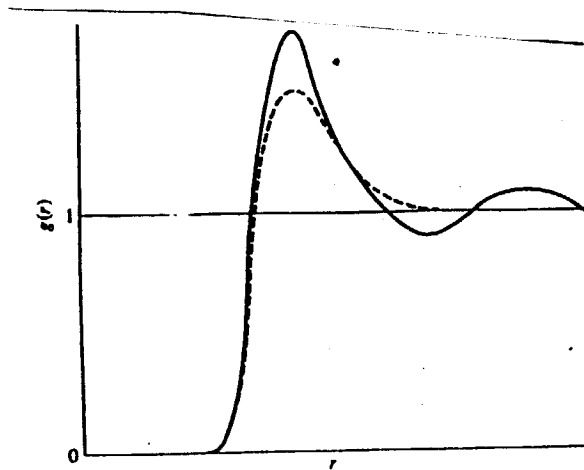
$$g(r) = \frac{\rho(r)}{\rho} \quad (1-1)$$

در اصل تابع توزیع شعاعی  $g(r)$  توسط همبستگی‌های بین مولکول مرکزی با سایر مولکول‌ها معین می‌شود و بنابراین واقعاً یک تابع مستقل نیست، و به علت وجود همین همبستگی‌های مولکولی  $g(r)$  از مقدار واحد تفاوت دارد. توجه شود که وقتی هیچ همبستگی میان مولکول مرکزی با سایر مولکول‌ها وجود نداشته باشد نظیر وقتی که چگالی سیال به سمت صفر میل می‌کند آنگاه تابع توزیع

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} g(r, \rho, T) = 1$$

یعنی به سمت یک میل خواهد کرد، یعنی

به دلیل بزرگی نیروهای دافعه احتمال اینکه دو مولکول در فاصله کمی از یکدیگر باشند ناچیز است، بنابراین برای مقادیر  $r$  خیلی کم،  $g(r)$  و  $\rho(r)$  تقریباً صفر هستند. در حداقل انرژی پتانسیل بین مولکولی احتمال اینکه بتوان دو مولکول مجزا را از هم تشخیص داد بالا است و  $g(r)$  یک قله را نشان می‌دهد. در مایعات قله‌های اضافی کوچک‌تری برای مقادیر بزرگ‌تر  $r$  ممکن است مشاهده شوند.



شکل: (۲-۱): تابع توزیع شعاعی در مقابل  $r$  برای سیالات — و گازها ...

برای مایعاتی با مولکول‌های کره سخت، این قله‌ها توصیف کننده احتمال حضور مولکولی مورد نظر در لایه‌ای با فواصل  $2\sigma$ ،  $3\sigma$ ، و... نسبت به مولکول مرکزی است که با افزایش فاصله این احتمال‌های کوچک‌تر می‌شوند [۷].

### ۱-۲- روش استخراج توابع توزیع

سیستمی شامل  $N$  ذره که دارای حجم  $V$  و دمای  $T$  است را در نظر بگیرید، احتمال اینکه ذره ۱ در فاصله  $r_1$  تا  $r_1+dr_1$  ذره ۲ در فاصله  $r_2$  تا  $r_2+dr_2$  و... باشند توسط معادله زیر داده می‌شود.

$$P^{(N)}(r_1, \dots, r_N) dr_N = \frac{e^{-\beta U_N} dr_1 \dots dr_N}{Z_N} \quad (1-2)$$

در معادله فوق  $Z_N$  انتگرال پیکربندی و  $U_N$  انرژی پتانسیل مربوط به سیستم  $N$  ذره‌ای است که در صورت فرض جفت گونه جمع‌پذیر به صورت زیر می‌شود:

$$U_N(r_1, \dots, r_N) = \sum_{i(j)} u(r_{ij}) \quad (3-1)$$

$$Z_N = \int \dots \int e^{-U_N/kT} dr_1 \dots dr_N \quad (4-1)$$

احتمال اینکه ذره ۱ در فاصله  $r_1$  تا  $r_1+dr_1$  و... و ذره  $n$  در فاصله  $r_n$  تا  $r_n+dr_n$  یافت شود و بقیه ذرات ( $N-n$  ذره باقی مانده) در بقیه فضای مایع باشد عبارت است از:

$$P^{(n)}(r_1, \dots, r_n) = \frac{\int \dots \int e^{-\beta U_N} dr_{n+1} \dots dr_N}{Z_N} \quad (5-1)$$

در واقع  $P^{(n)}$  چگالی احتمال  $n$  - ذره‌ای است و با انتگرال‌گیری از طرفین معادله (۲-۱) به دست می‌آید.

اکنون می‌توان گفت احتمال اینکه یکی از  $N$  ذره در فاصله  $r_1$  تا  $r_1+dr_1$  ذره دیگری در فاصله  $r_2$  تا  $r_2+dr_2$  و ذره  $n$  ام در فاصله  $r_n$  تا  $r_n+dr_n$  و پیکربندی  $N-n$  ذره باقیمانده به هر صورت که باشد عبارت است از:

$$\rho^{(n)}(r_1, \dots, r_n) = \frac{N!}{(N-n)!} P^{(n)}(r_1, \dots, r_n) \quad (6-1)$$

این امر از آنجا ناشی می شود که  $N$  انتخاب برای اولین ذره،  $N-1$  انتخاب برای دومین ذره و ... وجود دارد. بنابراین ضریب  $N!/(N-n)!$  تعداد راه های انتخاب  $n$  ذره از بین  $N$  ذره و توزیع آنها بر اساس فوق می باشد. ساده ترین تابع توزیع  $\rho^{(1)}(r_1)$  است.

کمیت  $\rho^{(1)}(r_1) dr_1$  احتمال اینکه یکی از ذرات در فاصله  $r_1$  تا  $r_1 + dr_1$  یافت شود را بیان می کند. برای یک جامد این کمیت یک تابع متناوب از  $r_1$  با یک ماکزیمم تیز در نقاط شبکه می باشد، اما در یک سیال همه نقاط در داخل حجم  $V$  یکسان هستند و بنابراین  $\rho^{(1)}(r_1)$  مستقل از  $r_1$  است، به طوری که برای یک سیال می توان نوشت:

$$\int \rho^{(1)}(r_1) dr_1 = \rho^{(1)} \int dr_1 = \rho^{(1)} V \quad (7-1)$$

با توجه به معادله (6-1)

$$\rho^{(1)} = N \rho^{(1)}(r_1) \quad (8-1)$$

و بر اساس معادله (5-1)

$$\rho^{(1)} = \frac{\int \dots \int e^{-\beta U_N} dr_2 \dots dr_N}{Z_N} \quad (9-1)$$

چون  $\rho^{(1)}(r_1)$  مستقل از  $r_1$  است می توان معادله (9-1) را به صورت زیر نوشت:

$$\rho^{(1)}(r_1) = \frac{1}{V} \frac{\int \dots \int e^{-\beta U_N} dr_1 \dots dr_N}{Z_N} = \frac{1}{V} \quad (10-1)$$

و با قرار دادن  $\rho^{(1)}(r_1)$  در معادله (9-1) نتیجه زیر به دست می آید:

$$\rho^{(1)} = \frac{N}{V} = \rho \quad (11-1)$$

به عبارت دیگر احتمال یافتن یک ذره در واحد حجم سیال با چگالی سیال برابر است.

اکنون تابع همبستگی  $g^{(n)}(r_1, \dots, r_n)$  را که یک کمیت بدون بعد است برای  $n$  ذره به صورت زیر تعریف می کنیم:

$$\rho^{(n)}(r_1, \dots, r_n) = \rho^{(n)} g^{(n)}(r_1, \dots, r_n) \quad (12-1)$$

که  $g^{(n)}$  تابع همبستگی  $n$ -ذره ای نامیده می شود، به طوری که اگر ذرات مستقل

از یکدیگر باشند  $\rho^{(n)}$  برابر  $\rho^n$  می شود.

بنابراین ضریب  $g^{(n)}(r_1, \dots, r_n)$  برای تصحیح توزیع تصادفی و به عبارت دیگر برای بیان میزان وابستگی یا همبستگی بین ذرات به کار می رود و به همین دلیل به تابع همبستگی معروف است.

با توجه به معادلات (۱-۵)، (۱-۶) و (۱-۱۲) تابع همبستگی چنین معین می شود:

$$g^{(n)}(r_1, \dots, r_n) = \frac{V^n N!}{N^n (N-n)!} \cdot \frac{\int \dots \int e^{-\beta U_N} dr_{n+1} \dots dr_N}{Z_N} \quad (13-1)$$

تابع همبستگی جفتی  $g^{(2)}(r_1, r_2)$  که ارتباط میان دو ذره را بیان می کند بسیار مهم است، زیرا فرض جفت گونه جمع پذیر موجب می شود که برای به دست آوردن کلیه خواص ترمودینامیکی سیالات داشتن اطلاع از این تابع کافی باشد. از آنجا که بیشتر با  $g^{(2)}(r_{12})$  سر و کار داریم، بنابراین بالاوند را حذف می کنیم و می نویسیم  $g^{(2)}(r_{12}) = g(r)$  ویژگی های  $g(r)$  عبارتند از:

الف) اگر مولکولی را در مبدأ تصور کنیم  $\rho g(r) dr$  تعداد مولکول هایی را نشان می دهد که در فاصله  $r$  تا  $r+dr$  از مولکول مبدأ وجود دارند. باید توجه داشت این احتمال به واحد نرمال نشده است اما در عوض رابطه زیر وجود دارد:

$$\int_0^\infty \rho g(r) 4\pi r^2 dr = N - 1 \approx N \quad (14-1)$$

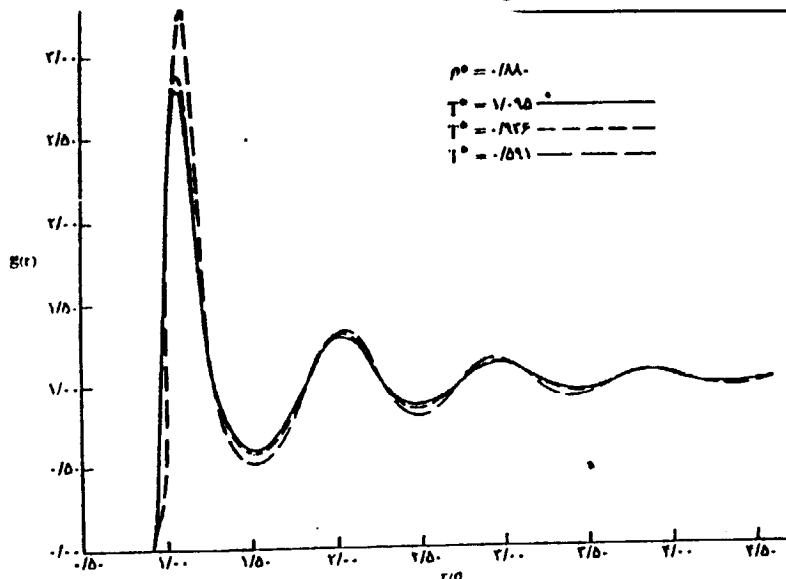
در حقیقت معادله فوق نشان می دهد که عبارت  $\rho g(r) 4\pi r^2 dr$  برابر تعداد مولکول هایی هستند که بین  $r$  و  $r+dr$  در اطراف مولکول مرکزی وجود دارند.

ب) می توان تصور نمود که تابع  $g(r)$  به عنوان فاکتوری است که اگر در چگالی توده ای  $\rho$  حول مولکول ثابت مرکزی ضرب شود رابطه زیر را به دست می دهد:

$$\rho(r) = \rho g(r) \quad (15-1)$$

ج) هنگامی که  $r \rightarrow 0$  به علت اینکه پتانسیل برهمکنش در حد فواصل خیلی کم به سمت بی نهایت میل می کند، بنابراین انتظار داریم که:

$$\lim_{r \rightarrow 0} g(r) = 0 \quad (16-1)$$



شکل (۳-۱): تابع توزیع شعاعی برای سیالی که مولکول‌های آن بر اساس پتانسیل (۶، ۱۲)  $\lambda$  برهمکنش دارند. این منحنی از نتایج محاسبات دینامیک مولکولی ترسیم شده است.  
 $T^* = kT/\epsilon$  و  $\rho^* = \sigma^3 \rho$  می‌باشد.

در شکل (۳-۱) تابع توزیع شعاعی برای سیال لنارد-جونز در چند دما بر حسب فاصله از مولکول مرجع رسم شده است. این منحنی‌ها از محاسبات دینامیک مولکولی به دست آمده‌اند. مشاهده می‌شود که شکل (۳-۱) با رفتار معادله (۶-۱) مطابقت دارد. قله اول مربوط به نزدیک‌ترین همسایه و قله‌های بعدی همسایه‌های بعدی را نشان می‌دهند. ملاحظه می‌شود که مولکول مرجع (واقع در مبدأ مختصات  $r=0$ ) در توزیع چند لایه مجاور نقش دارد و به عبارت دیگر یک نظم منطقه‌ای ایجاد می‌کند. بعد از چند قطر مولکولی این نظم ملاحظه نمی‌شود و هنگامی که  $r \rightarrow \infty$  تابع توزیع شعاعی  $g(r)$  به سمت واحد میل می‌کند.

در شکل (۴-۱) رفتار تابع توزیع شعاعی برای سیال لنارد-جونز نشان داده شده است. این شکل نشان می‌دهد که با افزایش دما نظم منطقه‌ای کاهش می‌یابد و تعداد مولکول‌ها در لایه اول کاهش پیدا می‌کند. بر اساس شکل (۵-۱) با افزایش چگالی سیال سطح زیر اولین پیک افزایش می‌یابد. این مشاهده بدین مفهوم است که با افزایش چگالی سیال عدد کتوردیناسیون افزایش می‌یابد. به طور تجربی مشخص شده است که سطح زیر پیک اول که به عدد کتوردیناسیون اول مربوط است با چگالی به طور خطی تغییر می‌کند.