

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده شیمی

گروه شیمی فیزیک

پایان نامه:

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته شیمی (گرایش شیمی فیزیک)

عنوان:

مطالعه توابع فزونی و خواص انتقالی سیستم‌های سه جزئی شامل

ایزوپروپیل استات ، ۲- بوتانول و دی اتیل آمین در دماهای مختلف

استاد راهنما:

دکتر حسین ایلوخانی

استاد مشاور:

دکتر فخری کرمانپور

پژوهشگر:

علی رضا شیری

مهر ماه ۱۳۹۱



دانشکده شیمی
گروه شیمی فیزیک

پایان نامه:

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته شیمی (گرایش شیمی فیزیک)

عنوان:

مطالعه توابع فزونی و خواص انتقالی سیستم‌های سه جزئی شامل

ایزوپروپیل استات ، ۲- بوتانول و دی اتیل آمین در دماهای مختلف

پژوهشگر:

علی رضا شیری

کمیته ارزیابی پایان نامه

- | | | | |
|----------------------|-------|--------------------|-----------------|
| استاد شیمی فیزیک | | دکتر حسین ایلوخانی | ۱- استاد راهنما |
| استاد یار شیمی فیزیک | | دکتر فخری کرمانپور | ۲- استاد مشاور |
| استاد شیمی فیزیک | | دکتر حسینعلی زارعی | ۳- استاد مدعو |
| استاد شیمی فیزیک | | دکتر سعید عزیزیان | ۴- استاد مدعو |



دانشکده شیمی

گروه شیمی فیزیک

صورت جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

پایان نامه کارشناسی ارشد در رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک

عنوان:

مطالعه توابع فزونی و خواص انتقالی سیستم‌های سه جزئی شامل

ایزوپروپیل استات ، ۲- بوتانول و دی اتیل آمین در دماهای مختلف

جلسه دفاع از پایان نامه آقای علی رضا شیری به ارزش ۶ واحد در روز یکشنبه ۱۳۹۱/۷/۹ ساعت ۱۰ صبح در سالن آمفی تئاتر ۲ دانشکده شیمی و با حضور اعضای هیأت داوران زیر برگزار گردید که پس از بررسی‌های لازم پایان نامه نامبرده با نمره به عدد به حروف و درجه مورد ارزیابی قرار گرفت.

هیأت داوران:

ردیف	نام و نام خانوادگی	سمت	مرتبه علمی	امضاء
۱	دکتر حسین ایلوخانی	استاد راهنما	استاد	
۲	دکتر فخری کرمانپور	استاد مشاور	استادیار	
۳	دکتر حسینعلی زارعی	داور داخلی	استاد	
۴	دکتر سعید عزیزیان	داور داخلی	استاد	
۵	دکتر طیبه مدرکیان	مسئول تحصیلات تکمیلی	استاد	

کلیه امتیازهای این پایان‌نامه به دانشگاه بوعلی سینا تعلق دارد. در صورت استفاده از تمام یا بخشی از مطالب این پایان‌نامه در مجلات، کنفرانس‌ها و یا سخنرانی‌ها، باید نام دانشگاه بوعلی سینا یا استاد راهنمای پایان‌نامه و نام دانشجو با ذکر مأخذ و ضمن کسب مجوز کتبی از دفتر تحصیلات تکمیلی دانشگاه ثبت شود. در غیر این صورت مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت. درج آدرس‌های ذیل در کلیه مقالات خارجی و داخلی مستخرج از تمام یا بخشی از مطالب این پایان‌نامه در مجلات، کنفرانس‌ها و یا سخنرانی‌ها الزامی می‌باشد.

....., Bu-Ali Sina University, Hamedan, Iran.

مقالات خارجی

.....، گروه، دانشکده، دانشگاه بوعلی سینا، همدان.

مقالات داخلی

هر چند بسیار ناچیز است اما به رسم ادب و احترام

تقدیم به استاد راهنمای عزیز و بزرگوارم

جناب آقای پرفسور ایلوخوانی

تقدیر و تشکر:

از خداوند باریتعالی که ما را توانمند و یاری نمود.

از استاد راهنمای فاضل و بزرگووارم، دکتر ایلوخوانی که راهنمای من در مراحل مختلف تحقیق بوده‌اند و در کمال اخلاص یاریم نموده، و در برابر کاستی‌هایم شکیبا بوده و تجربیات ارزشمند خود را در اختیار من قرار دادند بسیار سپاسگزارم.

از استاد مشاور گرانقدر، سرکار خانم دکتر کرمانپور که یاور من در مراحل مختلف تحقیق بوده‌اند سپاسگزارم.

از اساتید گرانقدر و عزیزم دکتر عزیزیان و دکتر زارعی که زحمت مطالعه و داوری این پایان‌نامه را پذیرفتند، سپاسگزارم.

بر خود وظیفه می‌دانم از اساتید معزز و معظم، دکتر ایلوخوانی، دکتر کرمانپور، دکتر زارعی، دکتر عزیزیان، دکتر رفعتی، دکتر مدرکیان، دکتر صالح زاده و دکتر ارجمندی کمال تقدیر و سپاسگزاری را داشته باشم

از دانشجویان محترم دوره دکتری و دوستان ورودی ۸۸ و ۸۹ در آزمایشگاه‌های تحقیقاتی شیمی فیزیک، شیمی آلی، شیمی معدنی، شیمی تجزیه و شیمی کاربردی سپاسگزارم.



دانشگاه بوعلی سینا

مشخصات رساله/پایان نامه تحصیلی

عنوان:		
مطالعه توابع فزونی و خواص انتقالی سیستم‌های سه جزئی شامل ایزوپروپیل استات ، ۲- بوتانول و دی اتیل آمین در دماهای مختلف		
نام نویسنده: علی رضا شیری		
نام استاد راهنما: دکتر حسین ایلوخوانی		
نام استاد مشاور: دکتر فخری کرمانپور		
دانشکده: شیمی		گروه آموزشی: شیمی فیزیک
رشته تحصیلی: شیمی	گرایش تحصیلی: شیمی فیزیک	مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد
تاریخ تصویب: ۸۹/۸/۱۷	تاریخ دفاع: ۹۱/۰۷/۰۹	تعداد صفحات: ۹۵
چکیده:		
<p>بررسی خواص مایعات آلی گوناگون نشان می‌دهد که رفتار این محلول‌ها ایده‌آل نیست. برای بیان انحراف از حالت ایده‌آل بسیاری از خواص، بویژه خواص فزونی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. خواص ترمودینامیکی در درک برهم‌کنش‌های مولکولی مفید هستند و برهم‌کنش‌های حلال-حلال، حلال-حل‌شونده و حل‌شونده-حل‌شونده را نشان می‌دهند.</p> <p>در این مطالعه، چگالی ρ، ویسکوزیته η، مواد خالص و مخلوط‌های دو و سه جزئی آن‌ها در محدوده کاملی از ترکیب درصد و در دماهای ۲۸۸/۱۵ K، ۲۹۸/۱۵ K و ۳۰۸/۱۵ K اندازه‌گیری گردید. چگالی، با استفاده از چگالی سنج Anton Paar مدل (DMA ۴۵۰۰) و ویسکوزیته، با استفاده از ویسکومتر Ubbelohde اندازه‌گیری شد، درصد خلوص مواد با اندازه‌گیری چگالی و ویسکوزیته و مقایسه آن‌ها با مقادیر موجود در منابع تایید شدند.</p> <p>با استفاده از داده‌های بدست آمده، حجم مولی فزونی V_m^E، حجم مولی جزئی فزونی \bar{V}_i^E، ویسکوزیته η، انحراف ویسکوزیته $\Delta\eta$ و انحراف انرژی آزادگیس فزونی ΔG^{*E}، ضریب انبساط گرمایی فزونی α^E و تغییرات انتالپی مولی فزونی نسبت به فشار در دما و کسر مولی ثابت $(\partial H_m^E / \partial P)_{T,x}$، برای مخلوط‌های دوجزئی ایزو پروپیل استات + ۲-بوتانول (سیستم ۱۲)، ایزو پروپیل استات + دی اتیل آمین (سیستم ۱۳) و ۲-بوتانول + دی اتیل آمین (سیستم ۲۳) محاسبه شد. همچنین برای سیستم سه جزئی، V_m^E، η، $\Delta\eta$ و ΔG^{*E} محاسبه گردید. توابع فزونی سیستم‌های دوجزئی، توسط معادله ردلیچ-کیستر و سه جزئی توسط معادله سیبولکا همبسته گردیدند.</p> <p>مقادیر V_m^E، $\Delta\eta$، $(\partial H_m^E / \partial P)_{T,x}$، ΔG^{*E} و α^E برای اکثر سیستم‌ها منفی هستند. البته $(\partial H_m^E / \partial P)_{T,x}$ برای سیستم ۱۳ و ۲۳ و V_m^E برای سیستم ۱۲ و ۱۳ و α^E برای سیستم ۱۲ مثبت می‌باشند.</p> <p>مقادیر ویسکوزیته سیستم‌های دو جزئی با معادلات نیسان - گرونبرگ، هاینده، فرنکل، کندال - مونرو و مک آلیستر همبسته گردید. در هر مورد مقادیر ویسکوزیته در تمام کسر مولی‌ها محاسبه و انحراف استانداردها برای سیستم‌های مورد نظر، مورد محاسبه قرار گرفت. داده‌های تجربی با معادلات نیسان-گرونبرگ و مک آلیستر انطباق خوبی دارد.</p> <p>واژه‌های کلیدی: چگالی، حجم مولی فزونی، تغییرات انتالپی مولی فزونی، ویسکوزیته، انحراف ویسکوزیته، معادله ردلیچ-کیستر، ایزو پروپیل استات، ۲-بوتانول و دی اتیل آمین</p>		

فصل اول مقدمه، تئوری و مروری بر کارهای گذشته (۱-۳۰)

مقدمه.....	۳
۱-۱) ترکیب محلول ها.....	۴
۲-۱) اهمیت محلول ها.....	۵
۳-۱) انواع محلول ها از نظر نیروهای بین ذرات.....	۵
۱-۳-۱) محلول های ایده آل.....	۵
۲-۳-۱) محلول های رقیق ایده آل.....	۶
۳-۳-۱) محلول های غیر ایده آل.....	۶
۴-۱) کمیت های مولی جزئی.....	۷
۱-۴-۱) حجم های مولی جزئی.....	۷
۲-۴-۱) سایر کمیت های مولی جزئی.....	۹
۵-۱) کمیت های امتزاج.....	۱۰
۶-۱) تعیین کمیت های امتزاج به طور تجربی.....	۱۲
۷-۱) محاسبه حجم مولی جزئی.....	۱۲
۸-۱) ترمودینامیک محلول ها.....	۱۳
۱-۸-۱) محلول ایده آل.....	۱۳
۱-۱-۸-۱) حالت های استاندارد محلول ایده آل.....	۱۵
۲-۸-۱) محلول رقیق ایده آل.....	۱۵
۱-۲-۸-۱) حالت های استاندارد محلول رقیق ایده آل.....	۱۵
۳-۸-۱) محلول غیر ایده آل.....	۱۶
۱-۲-۸-۱) حالت های استاندارد برای محلول غیر ایده آل.....	۱۷
۹-۱) توابع اضافی (فزونی).....	۱۸
۱۰-۱) معادلات همبستگی.....	۲۱
۱-۱۰-۱) معادله ردلیچ - کیستر.....	۲۱
۲-۱۰-۱) معادله سیولکا.....	۲۲

۲۲(۱۱-۱) ویسکوزیته
۲۲(۱- ۱۱-۱) تعریف و مفهوم
۲۴(۲- ۱۱-۱) واحدهای ویسکوزیته
۲۵(۳- ۱۱-۱) اندازه گیری ویسکوزیته
۲۶(۴- ۱۱-۱) انحرافات ویسکوزیته و انرژی گیبس فزونی فعالسازی
۲۷(۵- ۱۱-۱) معادلات همبستگی برای ویسکوزیته
۲۷(۱۲-۱) ضریب انبساط حرارتی و تغییرات آنتالپی مولی فزونی
۲۹(۱۳-۱) مروری بر تحقیقات انجام شده

فصل دوم مواد، دستگاه‌ها و روش‌های اندازه‌گیری (۳۱-۴۰)

۳۳(۱-۲) مواد
۳۴(۲-۲) توزین مواد
۳۴(۳-۲) تهیه نمونه
۳۵(۴-۲) چگالی سنج
۳۶(۱-۴-۲) اساس کار چگالی سنج
۳۶(۲-۴-۲) معرفی چگالی سنج Anton Parr
۳۶(۳-۴-۲) کار با چگالی سنج
۳۷(۵-۲) اندازه‌گیری ویسکوزیته
۳۷(۱-۵-۲) ویسکومتر
۳۸(۲-۵-۲) روش اندازه‌گیری ویسکوزیته

فصل سوم نتایج و محاسبات (۴۱-۸۲)

۴۳(۱-۳) سیستم‌های دو و سه جزئی
۴۳(۲-۳) حجم فزونی مولی مخلوط‌های دو جزئی
۴۹(۳-۳) تعیین حجم مولی جزئی فزونی
۵۳(۴-۳) حجم فزونی مولی مخلوط‌های سه جزئی
۵۵(۵-۳) انحراف ویسکوزیته مخلوط‌های دو جزئی

۶-۳	همبسته نمودن داده‌های ویسکوزیته	۶۲
۷-۳	انحراف ویسکوزیته مخلوط‌های سه جزیی	۶۸
۸-۳	محاسبه میزان انرژی آزاد گیبس فزونی فعالسازی، G^{*E} برای سیستم‌های دو جزیی	۷۱
۹-۳	محاسبه میزان انرژی آزاد گیبس فزونی فعالسازی، G^{*E} برای سیستم سه جزیی	۷۵
۱۰-۳	ضریب انبساط حرارتی و تغییرات آنتالپی مولی فزونی برای سیستم‌های دو جزیی	۷۷
فصل چهارم تفسیرها و نتیجه‌گیری‌ها (۸۳-۹۰)		

۱-۴	تفسیر نتایج حجم فزونی مخلوط‌ها:	۸۵
۱-۱-۴	بررسی سیستم دو جزیی ایزو پروپیل استات و ۲- بوتانول	۸۶
۲-۱-۴	بررسی سیستم دو جزیی ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین	۸۶
۳-۱-۴	بررسی سیستم دو جزیی ۲- بوتانول و دی اتیل آمین	۸۷
۲-۴	تفسیر نتایج انحراف ویسکوزیته از حالت ایده‌آل مخلوط‌ها	۸۸
۱-۲-۴	بررسی سیستم دو جزیی ایزو پروپیل استات و ۲- بوتانول	۸۸
۲-۲-۴	بررسی سیستم دو جزیی ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین	۸۸
۳-۲-۴	بررسی سیستم دو جزیی ۲- بوتانول و دی اتیل آمین	۸۸
۳-۴	تفسیر نتایج میزان انرژی آزاد گیبس فزونی، G^{*E}	۸۹
۴-۴	تفسیر نتایج تغییرات آنتالپی مولی فزونی	۸۹
۹۱	منابع و مآخذ	۹۱

۱-۱	انواع محلول‌ها با توجه به حالت فیزیکی حلال و حل‌شونده.....	۳
۲-۱	محلول رقیق ایده‌آل، مولکول‌های سایه‌دار حل‌شونده فقط با مولکول‌های حلال برهم‌کنش دارند.....	۶
۳-۱	حجم محلول، V ، که از مخلوط کردن $V_{Ethanol}$ خالص با $(100 - V_{Ethanol})$ آب خالص در دمای $20^\circ C$ و فشار $1 atm$ حاصل می‌شود.....	۷
۴-۱	کمیت‌های امتزاج ترمودینامیکی برای محلول آب + دی‌اتیل‌آمین در $49^\circ C$ و $1 atm$. توجه کنید که $\Delta_{mix} S$ منفی است و n تعداد کل مول‌های محلول را نشان می‌دهد.....	۱۱
۵-۱	روش دقیق برای تعیین حجم‌های مولی جزئی در محلول دو جزئی.....	۱۳
۶-۱	μ_i بر حسب x_i در T و P ثابت برای محلول ایده‌آل رسم شده است.....	۱۴
۷-۱	پتانسیل شیمیایی برای یک محلول غیرالکترولیت نوعی در T و P ثابت بر حسب $\ln x_i$ رسم شده است. خط بریده بریده برونابی رفتار محلول رقیق ایده‌آل تا $x_i \rightarrow 1$ است.....	۱۶
۸-۱	منحنی‌های نوعی G , G^{ideal} , G^{ideal} , $\Delta_{mix} G$ و G^E در دمای $25^\circ C$ برای دو مایعی که از محلول ایده‌آل انحراف مثبت نشان می‌دهند.....	۲۰
۹-۱	سیالی که بین دو صفحه‌ی مسطح جریان دارد.....	۲۳
۱۰-۱	تغییر ویسکوزیته برای (الف) آب و (ب) گاز آرگون.....	۲۴
۱۱-۱	ویسکومتر استوالد.....	۲۵
۱-۲	ترازو Sartorius مدل AG ۱۲۰۳.....	۳۴
۲-۲	چگالی سنج Anton Parr مدل DMA ۴۵۰۰.....	۳۵
۳-۲	ویسکومتر سه شاخه.....	۳۸
۴-۲	زمان سنج دیجیتال با دقت صدم ثانیه.....	۳۸
۵-۲	ترموستات برای ثابت نگه داشتن دما.....	۳۸
۶-۲	دماسنج برای قرار دادن در حمام.....	۳۸
۷-۲	پوار یا مکنده مایع از داخل ویسکومتر.....	۳۸
۱-۳	نمودار V_m^E نسبت به x_1 مخلوط ایزو پروپیل استات و ۲- بوتانول.....	۴۶
۲-۳	نمودار V_m^E نسبت به x_1 مخلوط ایزو پروپیل استات + دی‌اتیل‌آمین.....	۴۶
۳-۳	نمودار V_m^E نسبت به x_1 مخلوط ۲- بوتانول + دی‌اتیل‌آمین.....	۴۷

۴-۳	نمودار $V_m^E (cm^3.mol^{-1})$ نسبت به x_1 برای ایزو پروپیل استات + ۲-بوتانول (■)، ایزو پروپیل استات + دی اتیل آمین (□) و ۲-بوتانول + دی اتیل آمین (○) در دمای ۲۹۸/۱۵ K	۴۷
۵-۳	نمودار η نسبت به x_1 مخلوط ایزو پروپیل استات و ۲-بوتانول در سه دما.....	۵۸
۶-۳	نمودار $\Delta\eta$ نسبت به x_1 مخلوط ایزو پروپیل استات و ۲-بوتانول در سه دما.....	۵۸
۷-۳	نمودار η نسبت به x_1 مخلوط ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین در سه دما.....	۵۹
۸-۳	نمودار $\Delta\eta$ نسبت به x_1 مخلوط ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین در سه دما.....	۵۹
۹-۳	نمودار η نسبت به x_1 مخلوط ۲-بوتانول و دی اتیل آمین در سه دما.....	۶۰
۱۰-۳	نمودار $\Delta\eta$ نسبت به x_1 مخلوط ۲-بوتانول و دی اتیل آمین در سه دما.....	۶۰
۱۱-۳	نمودار $\Delta\eta (mPa.s)$ نسبت به x_1 برای ایزو پروپیل استات + ۲-بوتانول (■)، ایزو پروپیل استات + دی اتیل آمین (□) و ۲-بوتانول + دی اتیل آمین (○) در دمای ۲۹۸/۱۵ K.....	۶۱
۱۲-۳	نمودار η تجربی و محاسباتی مخلوط ایزو پروپیل استات و ۲-بوتانول با استفاده از معادلات نیسان - گرونبرگ، هایند، فرنکل، کندال - مونرو و مک آلیستر بر حسب x_1	۶۵
۱۳-۳	نمودار η تجربی و محاسباتی مخلوط ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین با استفاده از معادلات نیسان - گرونبرگ، هایند، فرنکل، کندال - مونرو و مک آلیستر بر حسب x_1	۶۵
۱۴-۳	نمودار η تجربی و محاسباتی مخلوط ۲-بوتانول و دی اتیل آمین با استفاده از معادلات نیسان - گرونبرگ، هایند، فرنکل، کندال - مونرو و مک آلیستر بر حسب x_1	۶۶
۱۵-۳	نمودار G^{*E} نسبت به x_1 مخلوط ایزو پروپیل استات و ۲-بوتانول در سه دما.....	۷۳
۱۶-۳	نمودار G^{*E} نسبت به x_1 مخلوط ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین.....	۷۴
۱۷-۳	نمودار G^{*E} نسبت به x_1 مخلوط ۲-بوتانول و دی اتیل آمین.....	۷۴
۱۸-۳	نمودار $G^{*E} (J.mol^{-1})$ نسبت به x_1 برای ایزو پروپیل استات + ۲-بوتانول (■)، ایزو پروپیل استات + دی اتیل آمین (□) و ۲-بوتانول + دی اتیل آمین (○) در دمای ۲۹۸/۱۵ K.....	۷۵
۱۹-۳	نمودار α^E نسبت به x_1 برای ایزو پروپیل استات + ۲-بوتانول (■)، ایزو پروپیل استات + دی اتیل آمین (□) و ۲-بوتانول + دی اتیل آمین (○) در دمای ۲۹۸/۱۵ K.....	۷۸

۲۰-۳	نمودار $(\frac{\partial H_m^E}{\partial P})_{T,x}$ نسبت به x_1 برای ایزو پروپیل استات + ۲-بوتانول (■)، ایزو پروپیل استات + دی اتیل آمین (□) و ۲-بوتانول + دی اتیل آمین (○) در دمای K ۲۹۸/۱۵.....	۷۸
۲۱-۳	نمودار $(\frac{\partial H_m^E}{\partial P})_{T,x}$ نسبت به x_1 مخلوط ایزو پروپیل استات و ۲-بوتانول.....	۸۱
۲۲-۳	نمودار $(\frac{\partial H_m^E}{\partial P})_{T,x}$ نسبت به x_1 مخلوط ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین.....	۸۱
۲۳-۳	نمودار $(\frac{\partial H_m^E}{\partial P})_{T,x}$ نسبت به x_1 مخلوط ۲-بوتانول و دی اتیل آمین.....	۸۲
۱-۴	مدل گلوله و میله مولکول‌های سیستم ۱۲ شامل ایزو پروپیل استات و ۲-بوتانول.....	۸۵
۲-۴	مدل گلوله و میله مولکول‌های سیستم ۱۳ شامل ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین.....	۸۷
۳-۴	مدل گلوله و میله مولکول‌های سیستم ۲۳ شامل ۲-بوتانول و دی اتیل آمین.....	۸۷

ردیف	فهرست جداول	صفحه
۱-۲	درصد خلوص، چگالی و ویسکوزیته مواد خالص در دماهای مختلف	۳۱
۱-۳	مقادیر ρ و V_m^E مخلوط ایزو پروپیل استات و ۲- بوتانول در سه دما	۴۰
۲-۳	مقادیر ρ و V_m^E مخلوط ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین در سه دما	۴۰
۳-۳	مقادیر ρ و V_m^E مخلوط ۲-بوتانول و دی اتیل آمین در سه دما	۴۱
۴-۳	ضرایب ردلیچ - کیستر، $B_{i,j}$ و $\sigma(V_m^E)$ مخلوط‌های دو جزیی در هر سه دما	۴۵
۵-۳	مقادیر \bar{V}_m^E مخلوط ایزو پروپیل استات و ۲- بوتانول در دمای ۲۹۸/۱۵K	۴۷
۶-۳	مقادیر \bar{V}_m^E مخلوط ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین در دمای ۲۹۸/۱۵K	۴۸
۷-۳	مقادیر \bar{V}_m^E مخلوط ۲-بوتانول و دی اتیل آمین در دمای ۲۹۸/۱۵ K	۴۸
۸-۳	برای سیستم سه جزیی، ایزو پروپیل استات + ۲- بوتانول+دی اتیل آمین مقادیر ρ و V_m^E در دمای ۲۹۸/۱۵ K	۵۰
۹-۳	ضرایب معادله سیبولکا و $\sigma(V_m^E)$ محلول سه جزیی در دمای ۲۹۸/۱۵ K	۵۰
۱۰-۳	مقادیر $\Delta\eta$ و η مخلوط ایزو پروپیل استات و ۲- بوتانول در سه دما	۵۲
۱۱-۳	مقادیر $\Delta\eta$ و η مخلوط ایزو پروپیل استات و ۲- بوتانول در سه دما	۵۲
۱۲-۳	مقادیر $\Delta\eta$ و η مخلوط ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین در سه دما	۵۳
۱۳-۳	ضرایب ردلیچ - کیستر، $B_{i,j}$ و $\sigma(\Delta\eta)$ برای هر سه سیستم دو جزیی	۵۸
۱۴-۳	برای سیستم ۱۲- مقادیر η_{exp} و η_{cal} مخلوط ایزو پروپیل استات و ۲- بوتانول با استفاده از معادلات نیسان - گرونبرگ، هاینده، فرنکل، کندال - مونرو و مک آلیستر	۵۹
۱۵-۳	مقادیر η_{exp} و η_{cal} مخلوط ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین با استفاده از معادلات نیسان - گرونبرگ، هاینده، فرنکل، کندال - مونرو و مک آلیستر	۶۰
۱۶-۳	مقادیر η_{exp} و η_{cal} مخلوط ۲-بوتانول و دی اتیل آمین با استفاده از معادلات نیسان - گرونبرگ، هاینده، فرنکل، کندال - مونرو و مک آلیستر	۶۰
۱۷-۳	ضرایب معادلات نیسان و گرونبرگ، هاینده، فرنکل و مک آلیستر برای سیستم ۱۲(ایزو پروپیل استات و ۲- بوتانول)	۶۲
۱۸-۳	ضرایب معادلات نیسان و گرونبرگ، هاینده، فرنکل و مک آلیستر برای سیستم ۱۳(ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین)	۶۳
۱۹-۳	ضرایب معادلات نیسان و گرونبرگ، هاینده، فرنکل و مک آلیستر برای سیستم ۲۳(۲- بوتانول و دی اتیل آمین)	۶۳

۲۰-۳	انحراف استانداردهای ویسکوزیته مربوط به معادلات نیسان - گرونبرگ، هایند، فرنکل، کندال - مونرو و مک آلیستر برای سیستم ۱۲ (ایزو پروپیل استات و ۲- بوتانول).....	۶۳
۲۱-۳	انحراف استانداردهای ویسکوزیته مربوط به معادلات نیسان - گرونبرگ، هایند، فرنکل، کندال - مونرو و مک آلیستر برای سیستم ۱۳ (ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین).....	۶۴
۲۲-۳	انحراف استانداردهای ویسکوزیته مربوط به معادلات نیسان - گرونبرگ، هایند، فرنکل، کندال - مونرو و مک آلیستر برای سیستم ۲۳ (۲-بوتانول و دی اتیل آمین).....	۶۴
۲۳-۳	ضرایب معادله سیولکا و $\sigma(\Delta\eta)$ محلول سه جزئی در دمای $298/15\text{ K}$	۶۵
۲۴-۳	برای سیستم سه جزئی - مقادیر $\rho(\text{g.cm}^{-2})$ ، $\eta(\text{mPa.s})$ و $\Delta\eta$ در دمای K ۲۹۸/۱۵ ایزو پروپیل استات + ۲- بوتانول + دی اتیل آمین.....	۶۶
۲۵-۳	مقادیر ν و G^{*E} مخلوط ایزو پروپیل استات و ۲- بوتانول در سه دما.....	۶۸
۲۶-۳	مقادیر ν و G^{*E} مخلوط ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین در سه دما.....	۶۸
۲۷-۳	مقادیر ν و G^{*E} مخلوط ۲-بوتانول و دی اتیل آمین در سه دما.....	۶۹
۲۸-۳	مقادیر G^{*E} سیستم سه جزئی در دمای ۲۹۸/۱۵.....	۷۲
۲۹-۳	مقادیر α^E و $(\frac{\partial H_m^E}{\partial P})_{T,x}$ مخلوط ایزو پروپیل استات و ۲- بوتانول.....	۷۵
۳۰-۳	مقادیر α^E و $(\frac{\partial H_m^E}{\partial P})_{T,x}$ مخلوط ایزو پروپیل استات و دی اتیل آمین.....	۷۵
۳۱-۳	مقادیر α^E و $(\frac{\partial H_m^E}{\partial P})_{T,x}$ مخلوط ۲- بوتانول و دی اتیل آمین.....	۷۶
۱-۴	مشاهدات حاصل از نمودارهای حجم فزونی مولی.....	۸۰
۲-۴	مشاهدات حاصل از نمودارهای ویسکوزیته.....	۸۳

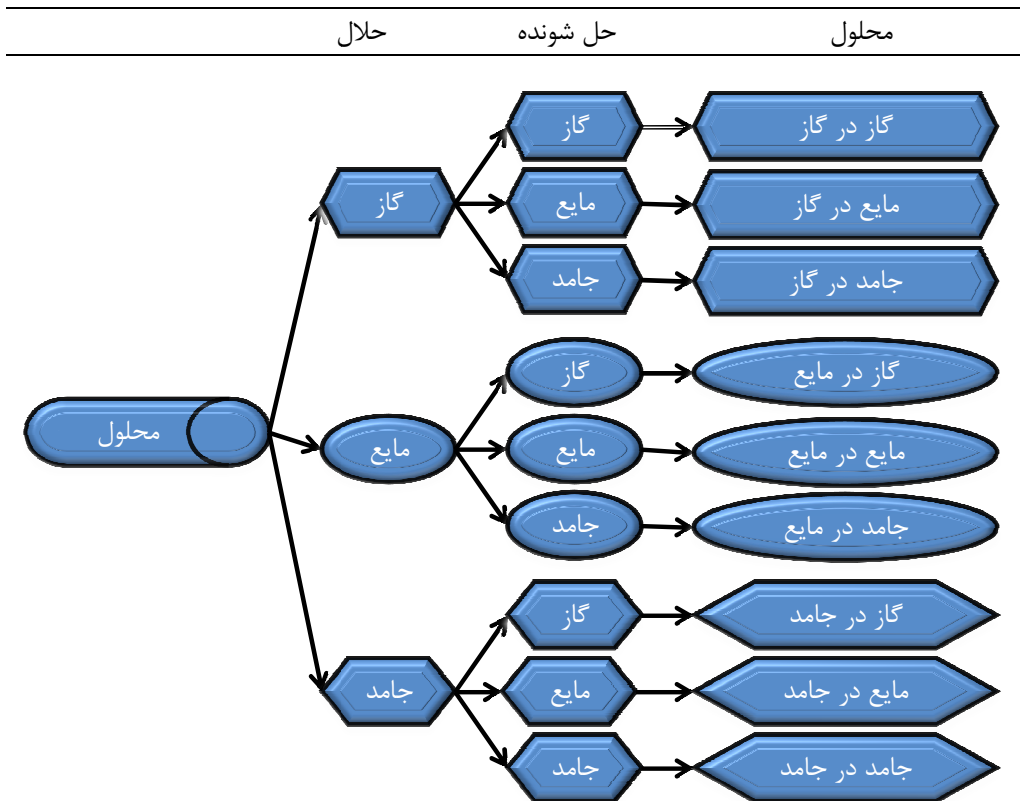
فصل اول

مقدمه، تئوری و مروری بر کارهای گذشته

مقدمه:

در این فصل مباحث نظری محلول‌ها ، شامل انواع محلول‌ها از نظر حالت فیزیکی حلال و حل‌شونده، از نظر برهم‌کنش بین آن‌ها و همچنین کمیات مولی جزئی مورد بحث قرار گرفته است. همچنین در خصوص ترمودینامیک محلول‌ها، حالت‌های ایده‌آل، رقیق ایده‌آل و غیر ایده‌آل مورد بررسی قرار گرفته‌است و در ادامه توابع فزونی و چگونگی محاسبه‌ی آن‌ها توضیح داده شده است. و معادلاتی برای همبسته کردن توابع فزونی حجم، ویسکوزیته، انرژی آزاد و... داده‌های تجربی ارائه‌گردیده است.

اکثر پدیده‌های شیمیایی و بیوشیمیایی در محلول انجام می‌شود. محلول یک مخلوط همگن است. به عبارت دیگر، سیستم یک فازي با بیش از یک جزء است. یک فاز می‌تواند جامد، مایع و یا گاز باشد [۱]. با توجه به حالت فیزیکی حلال و حل‌شونده می‌توان محلول‌ها را به ۹ دسته تقسیم نمود (شکل ۱-۱) که از میان آن‌ها محلول‌های مایع، گاز در گاز و جامد در جامد از اهمیت بیشتری برخوردار است.



شکل ۱-۱ انواع محلول‌ها با توجه به حالت فیزیکی حلال و حل‌شونده

(۱-۱) ترکیب محلول ها [۱]

ترکیب محلول ها را می توان به چند طریق مشخص نمود.

۱- کسر مولی گونه ی i ، x_i ، به صورت معادله (۱-۱) تعریف می شود که n_i تعداد مول های i و n_{tot} تعداد مول های تمام گونه های موجود در محلول است.

$$x_i = \frac{n_i}{n_{tot}} \quad (۱-۱)$$

۲- غلظت مولار یا غلظت حجمی گونه i ، C_i یک گونه، بر مبنای معادله زیر چنین تعریف می شود:

$$C_i = \frac{n_i}{V} \quad (۲-۱)$$

که V حجم محلول است. غلظت مولار یک گونه، یعنی تعداد مول های آن گونه در یک لیتر (یک دسیمتر مکعب) به مولاریته موسوم است.

۳- غلظت جرمی گونه ی i ، ρ_i در محلولی با حجم V از این قرار است. که m_i جرم گونه ی i است

$$\rho_i = \frac{m_i}{V} \quad (۳-۱)$$

۴- غلظت مولال جزء i و m_i به صورت تعداد مول های گونه تقسیم بر جرم حلال تعریف می شود.

$$m_B = \frac{n_B}{w_A} = \frac{n_B}{n_A M_A} \quad (۴-۱)$$

M_A جرم مولی حلال (نه وزن مولکولی) است که باید برحسب واحد مناسب استفاده شود n_B مول حل شونده و n_A مول حلال A در محلول است.

۵- درصد وزنی گونه B در محلول به صورت رابطه (۵-۱) تعریف می شود که در آن w_B جرم B و w جرم محلول را نشان می دهد

$$\% w_B = \frac{w_B}{w} \times 100 \quad (۵-۱)$$

چون V محلول به T و P بستگی دارد، غلظت C_i با تغییر T و P تغییر می کند. کسرهای مولی و مولالیته ها به T و P بستگی ندارند.

(۲-۱) اهمیت محلول ها:

اغلب واکنش های شیمیایی چه در آزمایشگاه و چه در صنعت در حالت محلول انجام می شوند در حالت محلول سرعت واکنش های شیمیایی خیلی بیشتر از حالت جامد می باشد چون در حالت محلول مواد به صورت ذرات سازنده ی خود (مولکول یا یون) در می آیند که در نتیجه برخورد های بیشتری میان ذرات واکنش دهنده رخ داده و فرآورده در مدت زمان کوتاه تری تشکیل می شود..

در محلول های مایع و جامد، اغلب مناسب است که یک جزء (موسوم به حلال) را از سایر اجزا (موسوم به حل شده ها) متمایز ساخت. معمولا کسر مولی حلال بیشتر از کسر مولی هریک از حل شده ها است [۱]. البته اطلاق این اصطلاحات اختیاری است و چندان دقیق نیست. گاهی اوقات آسانتر آن است که جزیی از محلول را با آنکه مقدارش کم است، حلال بنامیم و گاهی اصولا اطلاق نام حلال و حل شونده به اجزای یک محلول (مثلا محلول های گازی)، چندان اهمیتی ندارد [۲].

(۳-۱) انواع محلول ها از نظر نیروهای بین ذرات

در ابتدا محلول ها را به سه گروه تقسیم نموده و تعریف ساده ای از آن ها ارائه می نماییم و در ادامه تعریف ترمودینامیکی آن ها را بررسی می نماییم [۱].

(۱-۳-۱) محلول های ایده آل :

محلولی است که مولکول های گونه های مختلف چنان به هم شباهت دارند که جایگزین کردن یک جزء به جای جزء دیگر در محلول بدون ساختار فضایی محلول و بدون تغییر انرژی برهم کنش بین مولکولی در محلول اتفاق می افتد.

محلول دوتایی از B و C را در نظر بگیرید. برای جلوگیری از تغییر ساختار فضایی مایع (یا جامد) در اثر مخلوط شدن B و C لازم است مولکول های B از لحاظ اندازه و شکل با مولکول های C اساسا یکسان باشند. برای اینکه انرژی های برهم کنش بین مولکولی در اثر امتزاج تغییر نکند، لازم است انرژی برهم کنش جفت های $C-C$ ، $C-B$ و $B-B$ اساسا یکسان باشند.