دانشگاه بیرجند

دانشکده علوم

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی فیزیک

عنوان:

محاسبه خواص حجمی سیالات چگال با استفاده از معادله حالتISM

استاد راهنما:

دکتر بهزاد حقیقی

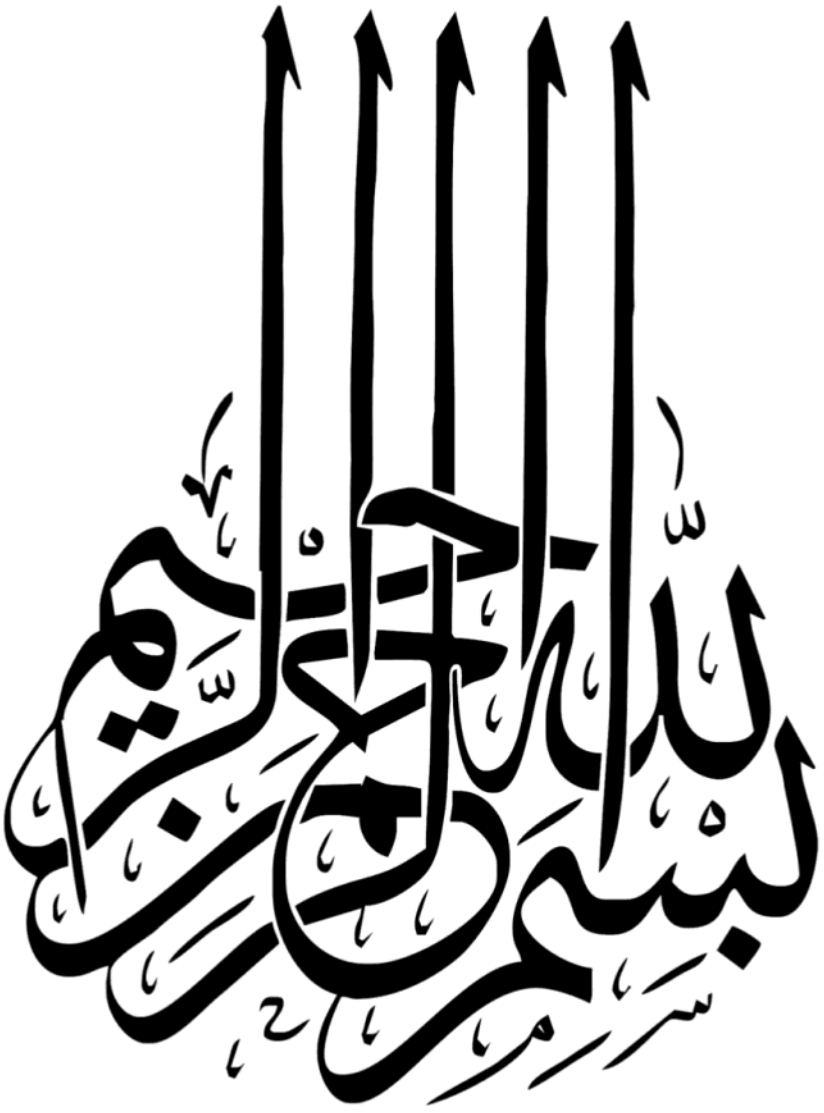
استاد مشاور :

دکتر محمد رضا بزرگمهر

نگارش:

سیدمجتبی آزاده

خرداد ۱۳۹۰



دانشگاه شهرضا
مدیریت تحصیلات تکمیلی

صورتجلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

فرم شماره ۱۰

با تأییدات خداوند متعال جلسه دفاع از پایان نامه تحصیلی کارشناسی ارشد آقای **مجتبی آزاده** دانشجوی کارشناسی ارشد رشته: **شیمی** به شماره دانشجویی: **۸۷۱۳۱۰۹۰۶۱** گرایش: **شیمی فیزیک** دانشکده: **علوم**

تحت عنوان : " **محاسبه خواص مجمی سیالات چگال با استفاده از معادله حالت ISM** "

به ارزش: **۸** واحد درساعت: **۱۰ صبح** روز : **سه شنبه** مورخ : **۹۰/۳/۱۰**

با حضور اعضای محترم جلسه دفاع و نماینده تحصیلات تکمیلی به شرح ذیل تشکیل گردید :

سمت	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضاء
استاد راهنمای اول	**دکتر بهزاد حقیقی**	**دانشیار**	
استاد راهنمای دوم			
استاد مشاور اول			
استاد مشاور دوم			
داور اول	**دکتر حسین فرسی**	**استادیار**	
داور دوم	**دکتر علی نیک اختر**	**استادیار**	
نماینده تحصیلات تکمیلی	**دکتر ابراهیم قیامتی**	**دانشیار**	

نتیجه ارزیابی دفاع که منوط به ارائه اصلاحات پیشنهادی توسط هیئت داوران حداکثر ظرف مدت یکماه پس از تاریخ دفاع می باشد، به شرح زیر مورد تایید قرار گرفت:

☑ قبول (با درجه: عالی و امتیاز: ۱۹/) ☐ دفاع مجدد ☐ غیرقابل قبول

۱- عالی (۲۰-۱۹) ۲- بسیار خوب (۱۸/۹۹ – ۱۸) ۳- خوب (۱۷/۹۹ – ۱۶) ۴- قابل قبول (۱۵/۹۹ -۱۴)

(بدیهی است عواقب آموزشی ناشی از عدم ارائه به موقع اصلاحات مزبور به عهده دانشجو می باشد)

کلیه مزایا اعم از چاپ، تکثیر،نسخه برداری، ترجمه، اقتباس و ... از

پایان نامه کارشناسی ارشد برای دانشگاه بیرجند محفوظ می باشد.

نقل مطالب باذکر منبع بلا مانع است .

تقدیم به:

تمام معلمانی که در راه نجات بشر از جهل و نادانی کوشیده اند.

به پدر بزرگوار و مادر مهربانم، که در فراگیری دروس زندگی همیشه همراه و پشتیبانم بودند.

به همسر و فرزندم، که صبر و شکیبایشان ره توشه راهم و گذشت و ایثارشان، امیدواری و روشنی بخشم بود.

تشکر و قدردانی:

سپاس خداوند منان را که بر من منت نهاد و توانایی آموختن را عنایت فرمود.

تقدیر و تشکر از ارشاد و راهنمایی های استاد ارجمند جناب آقای دکتر بهزاد حقیقی، معلم گرانقدری که نه تنها محضر ایشان جهت کسب علم برایم مغتنم بود، بلکه منش های اخلاقی ایشان به عنوان یک الگوی تمام عیار در تدریس و زندگی برای همیشه در ذهنم باقی خواهد ماند.

با سپاس و تشکر از همکاریهای جناب آقای دکتر محمدرضا بزرگمهر که مشاوره این پایان نامه را به عهده داشتند.

بدینوسیله مراتب تشکر و قدردانی خود را از اساتید گرانقدر آقایان دکتر فرسی و دکتر نیک اختر و دکتر قیامتی ابراز میدارم، که از وجود ایشان در کلاس درس بهره برده و در جلسه دفاع به عنوان داور و نماینده تحصیلات تکمیلی قبول زحمت فرموده بودند.

همچنین تشکر می کنم از زحمات جناب آقای دکتر رئیسی و جناب آقای دکتر اسماعیلی که از وجود ایشان در کلاس های درس کوانتوم و شیمی آلی بهره زیادی بردم.

در پایان بر خود لازم می دانم در سالی که مزین به سال جهانی شیمی می باشد، تشکر خود را از تلاش های تمامی اساتید گرانقدر که در راه نشر علم و دانش مخصوصا در جهت توسعه علم شیمی گام بر می دارند ابراز دارم. هم چنین تشکر می کنم از زحمات همسر و پدر و مادر همسرم که در غیاب بنده مسولیت زندگی بر دوش آنها بود. و نیز تشکر می کنم از مسئولین دانشکده علوم، و دانشگاه بیرجند، دوستان گرامی و تمام کسانی که بنده را یاری و همراهی فرمودند، با تشکر و سپاس آرزوی سلامت و موفقیت برای تمامیشان.

چکیده :

در این پایان نامه صحت معادله حالت سانگ – میسون – ایهیم (ISM) در پیش بینی خواص حجمی سیال های چگال مورد ارزیابی قرار گرفته است. برای این منظور مقادیر چگالی وحجم مولی سیال های پیچیده خانواده آمین ها شامل : ۲- آمینو بوتان ، پنتیل آمین ، هگزیل آمین ، هپتیل آمین و ۲- آمینو اوکتان محاسبه شده وبا مقادیر تجربی مقایسه شده است.

توافق خوبی بین مقادیر تجربی ومقادیر محاسبه شده وجود دارد.

فهرست مطالب

فصل اول : مقدمه ای برروش های آماری درترمودینامیک.....۱

۱-۱مقدمه ۲

۱-۲ مقدمه ای برمطالعات ترمودینامیکی ۲

آ-ترمودینامیک کلاسیک.....۳

ب-ترمودینامیک آماری.....۳

۱-۳ اساس آماری ترمودینامیک.....۴

۱-۴حالت های میکروسکوپی وماکروسکوپی... .....۵

۱-۵ فضای فاز.....۶

۱-۶ مجموعه ها ی آماری.....۷

۱-۷ نظریه هنگرد.....۷

۱-۷-۱هنگرد بنادی(مجموعه کانونی) ۸

۱-۷-۲ هنگرد بنادی کوچک ۹

۱-۷-۳ هنگرد بنادی بزرگ..... .....۱۰

۱-۷-۴هنگرد هم دما- هم فشار.....۱۱

فصل دوم: نگاهی به کاربردهای ترمودینامیک آماری.

۲ -۱مقدمه.....۱۴

۲-۲ تابع های توزیع حالت های مولکولی.....۱۴

۱-۷-۱هنگرد بنادی(مجموعه کانونی) ۸

۱-۷-۲ هنگرد بنادی کوچک ۹

۱-۷-۳ هنگرد بنادی بزرگ..... .....۱۰

۱-۷-۴هنگرد هم دما- هم فشار.....۱۱

فصل دوم: نگاهی به کاربردهای ترمودینامیک آماری

۲-۱مقدمه.....۱۴

۲-۲ تابع های توزیع حالت های مولکولی.....۱۴

۲-۳ تابع پارش مولکولی.....۱۴

۲-۴ کاربرد های ترمودینامیک آماری.....۱۶

۲-۴-۱ محاسبه ی انرژی های میانگین.....۱۶

۲-۴-۲ محاسبه ظرفیت های گرمایی.....۱۸

۲- ۴-۳محاسبه انتروپی های باقیمانده ۱۸

۲-۴-۴محاسبه ی ثابت های تعادل.....۱۹

۲-۴-۵ استخراج معادله حالت.....۲۰

فصل سوم :تئوریهای مکانیک آماری درارایه ی معادله های حالت تحلیلی

۳-۱مقدمه.....۲۲

۳-۲ استنتاج معادله ی حالت به روش مکانیک آماری.....۲۲

۳-۳ تصحیح رابطه.....۲۷.

۳-۴ سیال های مولکولی.....۲۸

۳-۵ برآورد λپارامتر تعدیل.....۲۸

۳-۶ ویژگی های معادله ی حالت ISM ۳۱

۳- ۷ آزمون معادله حالت.....۳۲

۳-۷-۱ استفاده از منحنی های وارونگی ژول – تامسون.....۳۲

۳-۷-۲ استفاده از رفتارهای مشابه در سیالات.....۳۳

۳-۸کاربرد معادله های حالتISM ۳۳

فصل چهارم : پارامتر های وابسته به دمادرمعادله حالت

۴-۱ مقدمه ۳۶
۴-۲محاسبه پارامترهای وابسته به دما..... ۳۶
۴-۳استفاده از ثابت های بحرانی درمحاسبه پارامترهای لنارد-جونز..... ۳۸
آ-مولکول های غیر قطبی..... ۳۸
ب- مولکول های غیر قطبی تنها ۳۸
پ- مولکول های قطبی در کنار مولکول های غیر قطبی ۳۸
ت- مولکول های قطبی بدون پیوند های هیدروژنی..... ۳۹
۴-۴ محاسبه پارامترهای پتانسیل درون مولکولی..... ۴۰
۴-۵ محاسبه (α,b,β) ۴۴
۴ -۶ محاسبه پارامتر تعدیل λ..... ۴۴
۴-۷ محاسبه چگالی..... ۴۴
۴-۸ محاسبه خواص حجمی آمین ها..... ۴۵
۴-۹ ارزیابی معادله حالت..... ۴۵
۴-۱۰ نتیجه گیری:..... ۴۶
نتایج محاسبات انجام شده..... ۴۷

فهرست جدول ها

جدول(۴-۱) مقادیر بحرانی (دما ، فشار، حجم) سری آمین ها ۴۸
جدول (۴-۲) مقدارλ در دما های مختلف (۲-آمینو بوتان)..... ۴۹
جدول (۴-۳) مقدارλ در دما های مختلف (پنتیل آمین)..... ۵۰
جدول (۴-۴) مقدارλ در دما های مختلف (هگزیل آمین)..... ۵۱
جدول (۴-۵) مقدارλ در دما های مختلف (هپتیل آمین)..... ۵۲
جدول (۴-۶) مقدارλ در دما های مختلف (۲-آمینو اوکتان)..... ۵۲
جدول (۴-۷) مقدارλ (پارامتر تعدیل) پذیرفته شده سری آمین ها..... ۵۳
جدول (۴-۸) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم۲- آمینو بوتان نسبت به مقادیر تجربی..... ۵۴
جدول (۴-۹) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم۲- آمینو بوتان نسبت به مقادیر تجربی..... ۵۵
جدول (۴-۱۰) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم۲- آمینو بوتان نسبت به مقادیر تجربی..... ۵۶
جدول (۴-۱۱): میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم۲- آمینو بوتان نسبت به مقادیر تجربی ۵۷
جدول (۴-۱۲): میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم۲- آمینو بوتان نسبت به مقادیرتجربی ۵۸
جدول (۴-۱۳): میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم۲- آمینو بوتان نسبت به مقادیر تجربی..... ۵۹
جدول(۴-۱۴): میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم آمینو پنتان نسبت به مقادیر تجربی..... ۶۰

جدول(۴-۱۵): میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم آمینو پنتان نسبت به مقادیر تجربی ۶۱
جدول(۴-۱۶): میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم آمینو پنتان نسبت به مقادیر تجربی ۶۲
جدول(۴-۱۷): میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم آمینو پنتان نسبت به مقادیر تجربی ۶۳
جدول(۴-۱۸): میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم آمینو هگزان نسبت به مقادیر تجربی ۶۴
جدول(۴-۱۹): میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم آمینو هگزان نسبت به مقادیر تجربی ۶۵
جدول(۴-۲۰): میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم آمینو هگزان نسبت به مقادیر تجربی ۶۶
جدول(۴-۲۱): میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم آمینو هگزان نسبت به مقادیر تجربی ۶۷
جدول(۴-۲۲) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم آمینو هپتان نسبت به مقادیر تجربی ۶۸
جدول(۴-۲۳) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم آمینو هپتان نسبت به مقادیر تجربی ۶۹
جدول(۴-۲۴) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم آمینو هپتان نسبت به مقادیر تجربی ۷۰
جدول(۴-۲۵) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم آمینو هپتان نسبت به مقادیر تجربی ۷۱
جدول(۴-۲۶) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم۲- آمینو اوکتان نسبت به مقادیرتجربی ۷۲

جدول(۴-۲۷) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم۲- آمینو اوکتان نسبت به مقادیرتجربی ۷۳

جدول(۴-۲۸) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم۲- آمینو اوکتان نسبت به مقادیرتجربی ۷۴

جدول(۴-۲۹) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم۲- آمینو اوکتان نسبت به مقادیرتجربی ۷۵

جدول(۴-۳۰) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم۲- آمینو اوکتان نسبت به مقادیرتجربی ۷۶

جدول(۴-۳۱) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجم۲- آمینو اوکتان نسبت به مقادیرتجربی ۷۷

فهرست شکل ها

شکل (۴-۱) شمای درگاه های فشار و دمای بحرانی ۴۱

شکل (۴-۲)درگاه های خروجی برنامه رایانه ای پیوست ۴۲

شکل (۴-۳)نمودار مراحل محاسبه خواص حجمی به وسیله نرم افزار پیوست..... ۴۳

شکل(۴-۴) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی ۲- آمینو بوتان نسبت به مقادیر تجربی..... ۷۸

شکل(۴-۵) : منحنی فشار – حجم مولی ۲ - آمینو بوتان ۷۹

شکل(۴-۶) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی وحجمآمینو پنتان نسبت به مقادیر تجربی. ۸۰

شکل(۴-۷) : منحنی فشار – حجم مولی آمینو پنتان ۸۱

شکل(۴-۸) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی آمینو هگزان نسبت به مقادیر تجربی..... ۸۲

شکل(۴-۹) : منحنی فشار – حجم مولی آمینوهگزان ۸۳

شکل(۴-۱۰) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی آمینو هپتان نسبت به مقادیر تجربی..... ۸۴

شکل(۴-۱۱) : منحنی فشار – حجم مولی آمینوهپتان..... ۸۵

شکل(۴-۱۲) : میزان انحراف مقدارهای محاسبه شده چگالی آمینو اوکتان نسبت به مقادیر تجربی..... ۸۶

شکل(۴-۱۳) : منحنی فشار – حجم مولی آمینو اوکتان ۸۷

پیوست (کدهای برنامه رایانه ای) ۸۸

مرجع ها ۹۷

فصل اول

مقدمه ای بر

روش های آماری

در ترمودینامیک

۱- ۱ مقدمه

فقدان داده های خواص ترمودینامیکی برای مواد مختلف از جمله (چگالی – حجم مولی ...) باعث شده است که دانشمندان در ارایه راه حل های مناسب جهت حل مشکلات با محدودیت همراه شوند. دست یابی به خواص ترمودینامیکی با روش های تجربی به علت هزینه و زمان زیاد ، گزینه ی مناسبی به شمار نمی رود . در مقابل گزینه استفاده از رایانه (شبیه سازی و محاسبه) برای محاسبه خواص ترمودینامیکی سیال ها با توجه به سرعت بالا و صرف هزینه کمتر روش مناسب تری به شمار می رود . برای این منظور در فصل های ابتدایی راه های رسیدن به یک معادله حالت پذیرفته شده بررسی شده، و در فصل های پایانی محاسبه های لازم جهت راست آزمایی این معادله آورده خواهد شد.

۱-۲مقدمه ای برمطالعات ترمودینامیکی

ترمودینامیک: (از کلمات یونانی گرما و توان) دانش مربوط به مطالعه ی گرما، کار، انرژی و تغییرات در حالت های سامانه توسط آنهاست. در یک مفهوم وسیع تر، ترمودینامیک روابط میان خواص ماکروسکوپی سامانه را مطالعه می کند. خاصیت کلیدی در ترمودینامیک دماست و گاهی ترمودینامیک به عنوان مطالعه ی رابطه ی دما با خواص ماکروسکوپی ماده تعریف می شود. ترمودینامیک تعادلی یک علم ماکروسکوپی بوده و مستقل از هر نوع نظریه ی ساختار مولکولی است. [۱]

مطالعه ترمودینامیک را مهندسین در قرن نوزدهم آغاز کردند؛ آنها می خواستند بدانند قوانین ترمودینامیک محدودیت هایی بر عملکرد ماشین های بخار و سایر ماشین های تولید کننده انرژی مکانیکی تحمیل می کنند.

ترمودینامیک درباره تبدیل یک شکل انرژی به شکلی دیگر، به ویژه تبدیل گرما به سایر شکل های انرژی بحث می کند. این کار با مطالعه روابط بین پارامترهای صرفاً ماکروسکوپی صورت می - گیرد که رفتار سامانه های فیزیکی را توصیف می کنند.

این گونه توصیف ماکروسکوپی (در مقیاس بزرگ)، لزوماً تا حدی نا پخته است، چرا که همه جزئیات کوچک مقیاس و میکروسکوپی را نادیده می گیرد. اما در کاربردهای عملی، این جزئیات اغلب مهم نیستند، برای مثال، مهندسی که رفتارهای گاز حاصل از احتراق را در سیلندر یک موتور خودرو بررسی می کند می تواند با کمیت های ماکروسکوپی هم چون دما، فشار، چگالی و ظرفیت حرارتی کار خود را پیش ببرد .

خواص ترمودینامیکی و روابط انرژی را با دو روش می توان بررسی کرد:

آ- ترمودینامیک کلاسیک:

مطالعاتی را که بدون توجه به ماهیت فردی ذرات سازنده ی ماده و تاثیر متقابل آن ها بر یکدیگر انجام می شود در بر می گیرد. بنابراین، قوانین عمومی ترمودینامیک کلاسیک بر پایه اندازه گیریهای ماکروسکوپی بنا شده اند، در نتیجه این قوانین با کشفیات جدیدی که راجع به ماهیت ماده صورت می گیرد، تغییری نمی کند.

ب- ترمودینامیک آماری

براساس رفتار آماری گروه های زیادی از ذرات منفرد بنا شده است. مطابق این روش مقادیر خواص ماکروسکوپی (مثل فشار، دما، چگالی و...) خواه به طور مستقیم اندازه گیری شده باشند و یا از