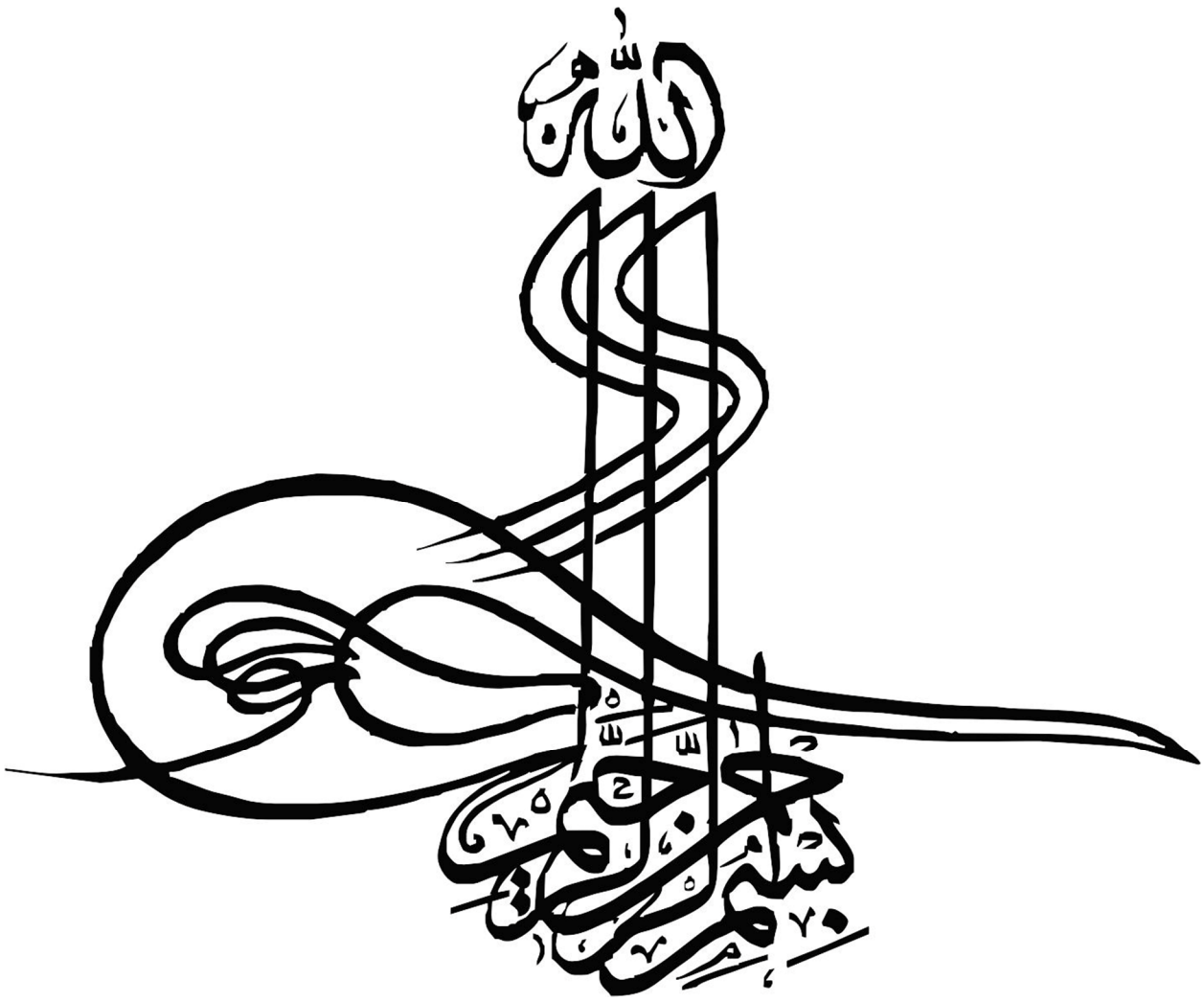
دانشگاه بوعلی سینا
معاونت آموزشی و تحصیلات تکمیلی
مدیریت تحصیلات تکمیلی

کد رهگیری ثبت پروپوزال: 1055944

کد رهگیری ثبت پایان نامه: 2137928


اللهم
بسم الله الرحمن الرحيم

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 و 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.

مقالات خارجی

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

مقالات داخلی

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

دانشکده شیمی

گروه آموزشی شیمی‌فیزیک

پایان نامه ارائه شده به عنوان بخشی از فعالیت‌های تحصیلی لازم جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد در

رشته شیمی (گرایش شیمی فیزیک)

عنوان:

محاسبه آنتالپی فزونی سیستم‌های دوجزئی با استفاده از داده‌های تجربی حجم فزونی

استاد راهنما:

دکتر حسینعلی زارعی

نگارش:

رخساره محمدخانی

30 شهریور 1392

دانشکده شیمی

گروه آموزشی شیمی فیزیک

پایان نامه ارائه شده جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد در رشته شیمی (گرایش شیمی فیزیک)

عنوان:

محاسبه آنتالپی فزونی سیستم‌های دوجزئی با استفاده از داده‌های تجربی حجم فزونی

استاد راهنما:

دکتر حسینعلی زارعی

نگارش:

رخساره محمدخانی

ارزیابی و تصویب شده توسط کمیته پایان‌نامه:

1. استاد راهنما: دکتر حسینعلی زارعی(رئیس کمیته).....استاد شیمی فیزیک
2. استاد مدعو: پروفسور حسین ایلوخانی.....استاد شیمی فیزیک
3. استاد مدعو: دکتر امیر عباس رفعتی.....استاد شیمی فیزیک

ماحصل آموخته هایم را تقدیم می کنم به آنان که مهر آسمانی

شان آرام بخش آلام زمینی ام است

تقدیم به

مادر مهربانم

و

پدر عزیزم

سپاسگزاری

سپاس خدای را که سخنوران، در ستودن او بمانند و شمارندگان، شمردن نعمت های او ندانند و کوشندگان، حق او را گزاردن نتوانند

ازپدر و مادر عزیزم...این دو معلم بزرگوارم... که همواره بر کوتاهی و درشتی من، قلم عفو کشیده و کریمانه از کنار غفلت هایم گذشته اند و در تمام عرصه های زندگی یار و یاوری بی چشم داشت برای من بوده اند.

از **خواهر بسیار عزیزم** که همواره تکیه گاهم بوده و در غم‌ها و شادی‌های زندگی مرا تنها نگذاشته‌اند صمیمانه تشکر می کنم .

بدون شک جایگاه و منزلت معلم، اجّل از آن است که در مقام قدردانی از زحمات بی شائبه ی او، با زبان قاصر و دست ناتوان، چیزی بنگاریم. اما بر حسب وظیفه :

از استاد شایسته؛ **جناب آقای دکتر حسینعلی زارعی** که در کمال سعه صدر، با حسن خلق و فروتنی، از هیچ کمکی در این عرصه بر من دریغ ننمودند و زحمت راهنمایی این رساله را بر عهده گرفتند و با مشاوره‌های ارزشمندشان در هر چه پر بارتر شدن پایان نامه یاری‌ام نمودند صمیمانه تشکر و قدردانی می نمایم.

همچنین از **آقای پرفسورحسین ایلوخانی و آقای دکتر امیرعباس رفعتی** که زحمت قرائت و داوری این پایان نامه را متقبل شدند کمال تشکر و سپاس را دارم.

از تمامی دوستانم در آزمایشگاه تحقیقاتی دکتر زارعی خانم‌ها لطفی، دولتی، اورنگ، حبیبی، نی بند، نهوشیان وآقایان اوستان، معافی، اسکندری و طاهری که در طول پروژه مرا صمیمانه راهنمایی کردند بسیار ممنونم.

و لازم میدانم از دوستان بسیار مهربانم خانم ها **عبادالـه زاده ، دارایی ، حمـه ویسی** و **مرادی پور** که تک تک خاطرات دلچسب دوران تحصیلم را مدیون آنها هستم قدردانی نمایم.

و این

پایان نیست بلکه آغازی است برای تلاشی دیگر

باسمه تعالی

صورت جلسه دفاع از رساله کارشناسی ارشد

رساله کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک

با عنوان:

محاسبه آنتالپی فزونی سیستم‌های دوجزئی با استفاده از داده‌های تجربی حجم فزونی

جلسه دفاع از رساله خانم **رخساره محمدخانی** به ارزش **6** واحد در روز **شنبه** مورخ **1392/06/30** ساعت **14** در محل **آمفی تئاتر2** دانشکده **شیمی** در حضور هیأت داوران برگزار گردید که پس از بررسی‌های لازم، پایان‌نامه نامبرده با نمره به عدد [ ] به حروف [ ] و با درجه [ ] مورد ارزیابی قرار گرفت.

ردیف	نام و نام خانوادگی	سمت	مرتبه علمی	امضاء
1	حسینعلی زارعی	استاد راهنما	استاد	
2	حسین ایلوخانی	داور داخلی	استاد	
3	امیرعباس رفعتی	داور داخلی	استاد	
4	طیبه مدرکیان	★ مسئول تحصیلات تکمیلی دانشکده	استاد	

بدون حق رای★

دانشگاه بوعلی سینا

مشخصات رساله/پایان نامه تحصیلی

عنوان:

محاسبه آنتالپی فزونی سیستم‌های دوجزئی با استفاده از داده‌های تجربی حجم فزونی

نام نویسنده: رخساره محمدخانی

نام استاد/اساتید راهنما: دکتر حسینعلی زارعی

دانشکده: شیمی | **گروه آموزشی: شیمی فیزیک**

رشته تحصیلی: شیمی | **گرایش تحصیلی: شیمی فیزیک** | **مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد**

تاریخ تصویب پروپوزال: 1391/08/28 | **تاریخ دفاع: 1392/6/30** | **تعداد صفحات: 124**

چکیده:

آنتالپی فزونی محلول‌های مایع غیرالکترولیت از اهمیت بسیاری در فرآیندهای جداسازی و صنعت نفت برخوردار است، زیرا حاوی اطلاعات مفیدی در مورد ساختار و برهم‌کنش‌های بین مولکولی اجزا در مخلوط می‌باشد. علاوه براین مقادیر آنتالپی مولی فزونی می‌تواند برای ارزیابی مدل‌های ترمودینامیکی در توصیف رفتار محلول‌ها بکار رود. اگرچه روش‌های آزمایشگاهی بسیاری برای اندازه‌گیری مستقیم آنتالپی فزونی وجود دارد اما منوط به صرف مواد شیمیایی و زمان می‌باشد. علاوه براین اندازه‌گیری آنتالپی فزونی برای سیستم‌هایی که اجزایشان در سایز مولکول، فراریت، ویسکوزیته و مهم‌تر از همه نقطه جوش اختلاف دارند، مشکل است. بنابراین ایجاد روشی برای پیش‌بینی آنتالپی مولی فزونی مخلوط از روی سایر خواص ترمودینامیکی دردسترس مانند حجم مولی فزونی بسیار مطلوب است. در این مرحله، روابط ترمودینامیکی می‌تواند مفید باشد، زیرا هدف اصلی ترمودینامیک ارتباط خواص به یکدیگر است. مهم‌تر از همه داده‌های حجم مولی فزونی بسیاری توسط محققین گزارش شده‌است که می‌تواند در پیش‌بینی مقادیر آنتالپی مولی فزونی بکار رود. به‌منظور دستیابی به نتیجه بهتر، مدل‌های ترمودینامیکی مثل Wilson و NRTL می‌تواند بکار گرفته شود. در این پروژه، این مدل‌ها با وابستگی پارامتر برهم‌کنش به دما و فشار اصلاح شدند. بنابراین ابتدا داده‌های حجم مولی فزونی تجربی موجود در منابع توسط معادله ردلیچ-کیستر اصلاح‌شده با وابستگی دمایی-فشاری پارامتر تنظیم‌پذیر و همچنین مدل‌های Wilson و NRTL اصلاح‌شده برازش شدند. شایان ذکر است که این شکل از اصلاح معادلات و مدل‌ها برای اولین بار مورد بررسی قرار گرفته است. سپس داده‌های برازش شده با قرار گرفتن در روابط ترمودینامیکی جهت پیش‌بینی مقادیر آنتالپی مولی فزونی بکار گرفته شدند. جهت اثبات صحت روابط بکار رفته، این پیش‌بینی در جهت عکس نیز مورد بررسی قرار گرفت یعنی پیش‌بینی مقادیر حجم مولی فزونی از روی داده‌های تجربی آنتالپی مولی فزونی. در آخر این روش روی هشت سیستم دوجزئی ؛ « بوتان + 1-پروپانول » ، « بوتان + 1-بوتانول » ، « بوتان + اتانول» ، «2-متیل پروپان + 2-متیل پروپن» ، « 2-متیل پروپان + 2-پروپانول » ، « 2-متیل پروپن + 2-پروپانول » ، « اتانول + آب» و « پروپان + 1-پروپانول» بررسی شد. با توجه به آنچه که از نمودارها پیداست، نتایجی که از محاسبات بدست آمده توافق بسیار خوبی با داده‌های تجربی که در مقالات گزارش شده دارد که این امر قابلیت پیش‌بینی مدل‌های ترمودینامیکی و قابلیت اجرا و مفید بودن روابط ترمودینامیکی را نشان می‌دهد.

واژه‌های کلیدی: آنتالپی فزونی، سیستم‌های دوجزئی، حجم فزونی، مدل‌های ترمودینامیکی Wilson و NRTL

فصل اول: مقدمه، تئوری و مروری بر کارهای گذشته 2

1-1 ملاحظات اساسی ترمودینامیک 3

2-1 ترمودینامیک محلول‌ها 5

1-2-1 اهمیت مطالعه ترمودینامیک محلول‌ها 7

2-2-1 انواع محلول‌ها 7

1-2-2-1 محلول ایده‌آل 8

2-2-2-1 محلول رقیق ایده‌آل 8

3-2-2-1 محلول حقیقی 9

3-2-1 انواع پیوندهای بین مولکولی 10

4-2-1 کمیت‌های مولی جزئی 12

5-2-1 کمیت‌های امتزاج 13

6-2-1 معادله گیبس-دوهم 15

7-2-1 پتانسیل شیمیایی مایعات 16

8-2-1 توابع فزونی 18

3-1 روش‌ها و دستگاه‌های اندازه‌گیری 22

1-3-1 اندازه‌گیری حجم فزونی 23

2-3-1 اندازه‌گیری آنتالپی فزونی 25

4-1 کمیت‌های محاسبه شده در این تحقیق 26

1-4-1 تغییرات آنتالپی با فشار در دمای ثابت 26

2-4-1 وابستگی دمایی انرژی گیبس 27

3-4-1 وابستگی فشاری انرژی گیبس 28

5-1 مروری بر کارهای انجام شده 30

فصل دوم: مروری بر مدل‌های ترمودینامیکی 34

1-2 مقدمه 35

2-2 اهمیت مطالعه مدل‌های ترمودینامیکی 36

3-2 انواع مدل‌های ترمودینامیکی 37

2-3-1 مدل ضریب فعالیت 39
2-3-2 مدل ترکیب موضعی (LC) 41
2-3-2-1 مدل ویلسون 43
2-3-2-2 مدل دو مایع غیرتصادفی (NRTL) 46
2-3-2-3 مدل UNIQUAC 50
2-4 معادلات همبستگی 53
2-4-1 معادله ردلیچ-کیستر 53
2-4-2 معادلات Wilson و NRTL 54
2-5 محاسبه انحراف استاندارد 55
فصل سوم: محاسبات و نتیجه‌گیری 58
3-1 بخش اول: محاسبات و نتایج مربوط به آنتالپی فزونی 58
3-1-1 مقدمه 59
3-1-2 محاسبات 60
3-1-2-1 همبسته‌سازی داده‌های حجم مولی فزونی 60
3-1-2-1-1 همبسته‌سازی با استفاده از معادله ردلیچ-کیستر اصلاح‌شده 60
3-1-2-1-2 همبسته‌سازی با استفاده از مدل‌های Wilson و NRTL اصلاح‌شده 61
3-1-2-2 محاسبه مقادیر آنتالپی مولی فزونی 67
3-1-3 نتایج حاصل از همبستگی و محاسبات 67
3-1-4 بحث و نتیجه‌گیری 85
3-2 بخش دوم: محاسبات و نتایج مربوط به حجم فزونی 90
3-2-1 مقدمه 91
3-2-2 محاسبات 92
3-2-2-1 همبسته سازی داده‌های آنتالپی مولی فزونی 92
3-2-2-2 محاسبه مقادیر حجم مولی فزونی 95
3-2-3 نتایج حاصل از همبستگی و محاسبات 96
3-2-4 بحث و نتیجه‌گیری 111

3-3 بحث و نتیجه‌گیری کلی 114
3-4 پژوهش‌های پیشنهادی برای آینده 116
منابع 118

شکل (2-1): نظریه ترکیب موضعی 43

شکل (2-2) : دو نوع سلول بر طبق نظریه دو-مایع اسکات برای مخلوطهای دوتایی 47

شکل (3-1): حجم مولی فزونی برای سیستم دوجزئی{بوتان(1)+ 1-پروپانول(2)} در دماها و فشارهای مختلف 69

شکل (3-2): مقایسه مقادیر آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده با مقادیر تجربی در سیستم دوجزئی{بوتان(1)+ 1-پروپانول(2)} 70

شکل (3-3): حجم مولی فزونی برای سیستم دوجزئی{بوتان(1)+ 1-بوتانول(2)} در دماها و فشارهای مختلف 71

شکل (3-4): مقایسه مقادیر آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده با مقادیر تجربی در سیستم دوجزئی{بوتان(1)+ 1-بوتانول(2)}. 72

شکل (3-5): حجم مولی فزونی برای سیستم دوجزئی{بوتان(1)+ اتانول(2)} در دماها و فشارهای مختلف 73

شکل (3-6): مقایسه مقادیر آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده با مقادیر تجربی در سیستم دوجزئی{بوتان(1)+ اتانول(2)} 74

شکل (3-7): حجم مولی فزونی برای سیستم دوجزئی{ 2-متیل پروپان(1) + 2-متیل پروپن(2) } در دماها و فشارهای مختلف 75

شکل (3-8): مقایسه مقادیر آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده با مقادیر تجربی در سیستم دوجزئی{2-متیل پروپان(1) + 2-متیل پروپن(2). 76

شکل (3-9): حجم مولی فزونی برای سیستم دوجزئی{ 2-متیل پروپان(1) + 2-پروپانول(2) } در دماها و فشارهای مختلف 77

شکل (3-10): مقایسه مقادیر آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده با مقادیر تجربی در سیستم دوجزئی{2-متیل پروپان(1) + 2-پروپانول(2)} 78

شکل (3-11): حجم مولی فزونی برای سیستم دوجزئی{ 2-متیل پروپن(1) + 2-پروپانول(2) } در دماها و فشارهای مختلف 79

شکل (3-12): مقایسه مقادیر آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده با مقادیر تجربی در سیستم دوجزئی{2-متیل پروپن(1) + 2-پروپانول(2)} 80

شکل (3-13): حجم مولی فزونی برای سیستم دوجزئی{ اتانول (1) + آب (2) } در دماها و فشارهای مختلف 81

شکل (3-14): مقایسه مقادیر آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده با مقادیر تجربی در سیستم دوجزئی{اتانول (1) + آب (2)} 82

شکل (3-15): حجم مولی فزونی برای سیستم دوجزئی { پروپان (1) + 1-پروپانول (2)} در دمای 348/15 و فشارهای مختلف 83

شکل (3-16): مقایسه مقادیر آنتالپی مولی فزونی محاسبه شده با مقادیر تجربی در سیستم دوجزئی{ پروپان (1) +1-پروپانول (2)}. 84

شکل (3-17): آنتالپی مولی فزونی برای سیستم دوجزئی{بوتان(1)+ 1-پروپانول(2)} در دماها و فشارهای مختلف..97

شکل (3-18): مقایسه مقادیر حجم مولی فزونی محاسبه شده با مقادیر تجربی در سیستم دوجزئی{بوتان(1)+ 1-پروپانول(2)} 98

شکل (3-19): آنتالپی مولی فزونی برای سیستم دوجزئی{بوتان(1)+ 1-بوتانول(2)} در دماها و فشارهای مختلف... 99

شکل (3-20): مقایسه مقادیر حجم مولی فزونی محاسبه شده با مقادیر تجربی در سیستم دوجزئی{بوتان(1)+ 1-بوتانول(2)} 100

شکل (3-21): آنتالپی مولی فزونی برای سیستم دوجزئی{بوتان(1)+ اتانول(2)} در دماها و فشارهای مختلف..... 101

شکل (3-22): مقایسه مقادیر حجم مولی فزونی محاسبه شده با مقادیر تجربی در سیستم دوجزئی{بوتان(1)+ اتانول(2)} 102

شکل (3-23): آنتالپی مولی فزونی برای سیستم دوجزئی{2-متیل پروپان(1) +2-متیل پروپن(2)} در دماها و فشارهای مختلف 103

شکل (3-24): مقایسه مقادیر حجم مولی فزونی محاسبه شده با مقادیر تجربی در سیستم دوجزئی{2-متیل پروپان(1) +2-متیل پروپن(2)} 104

شکل (3-25): آنتالپی مولی فزونی برای سیستم دوجزئی {2-متیل پروپان(1) + 2-پروپانول(2)} در دماها و فشارهای مختلف 105

شکل (3-26): مقایسه مقادیر حجم مولی فزونی محاسبه شده با مقادیر تجربی در سیستم دوجزئی{2-متیل پروپان(1) + 2-پروپانول(2)} 106

شکل (3-27): آنتالپی مولی فزونی برای سیستم دوجزئی {2-متیل پروپن(1) + 2-پروپانول(2)} در دماها و فشارهای مختلف 107

شکل (3-28): مقایسه مقادیر حجم مولی فزونی محاسبه شده با مقادیر تجربی در سیستم دوجزئی{2-متیل پروپن(1) + 2-پروپانول(2)} 108

شکل (3-29): آنتالپی مولی فزونی برای سیستم دوجزئی{ اتانول(1) + آب(2)} در دماها و فشارهای مختلف 109

شکل (3-30): مقایسه مقادیر حجم مولی فزونی محاسبه شده با مقادیر تجربی در سیستم دوجزئی{اتانول (1) + آب (2)} 110

جدول (1-1): معادلات اساسی ترمودینامیک و روابط برگرفته از آن‌ها 4

جدول (1-2): کمیات مولی جزئی 13

جدول (1-3): برخی از کمیت‌های فزونی 22

کسر مولی گونه‌ی i	x_{i}
چگالی	ρ / g . cm^{-3}
دما	T / K
پتانسیل شیمیایی گونه‌ی i	μ_{i} / J . mol^{-1}
پتانسیل شیمیایی استاندارد گونه‌ی i	μ_{i}° / J . mol^{-1}
پتانسیل شیمیایی ماده خالص i	μ_{i}^{*} / J . mol^{-1}
حجم مولی فزونی	$V_{\mathrm{m}}^{\mathrm{E}}$ / cm^3. mol^{-1}
فشار بخار مایع خالص گونه‌ی i	p_{i}^{*} /atm
فشار جزئی گونه‌ی i در مخلوط	p_{i} /atm
فعالیت گونه‌ی i	a_{i}
ضریب فعالیت گونه‌ی i	γ_{i}
ثابت گازها	R / J . mol^{-1}. K^{-1}
انتالپی مولی فزونی	$H_{\mathrm{m}}^{\mathrm{E}}$ / J . mol^{-1}
جرم مولکولی	M / g . mol^{-1}
حجم مولی مخلوط	V_m / cm^3. mol^{-1}
کمیت‌های مولی جزئی	$\bar{M}_{\mathrm{i}}$
جرم گونه‌ی i	m_{i} / g
حجم مولی ماده خالص i	$\mathrm{V}_{\mathrm{m,i}}^{*}$ / cm^3. mol^{-1}
کسر مولی ترکیب i حول مولکول مرکزی j در نظریه ترکیب موضعی	$x_{\mathrm{i}j}$
انرژی برهم‌کنش بین مولکول‌های نامشابه (i و j) و مولکول‌های مشابه در مدل ویلسون	$a_{\mathrm{i}j}$, a_{ii}
پارامترهای تنظیم‌پذیر در مدل ویلسون	$\lambda_{\mathrm{i}j}$, λ_{ji}
انرژی برهم‌کنش بین مولکول‌های نامشابه (i و j) و مولکول‌های مشابه در مدل NRTL	$g_{\mathrm{i}j}$, g_{ji}

پارامترهای تنظیم‌پذیر در مدل NRTL	Δg_{12} , Δg_{21}
پارامتر غیرتصادفی در مدل NRTL	α_{12}
کسر سطحی جزء خالصi	θ_{i}
کسر حجمی جزء خالصi	Φ_{i}
پارامترهای انرژی برهم‌کنش در مدل UNIQUAC	Δu_{12} , Δu_{21}
انحراف استاندارد	σ
پارامتر قابل تنظیم رابطه ردلیچ-کیستر	A_{i}
پارامتر قابل تنظیم در مدل‌های ترمودینامیکی وابسته به دما و فشار	$C_{\mathrm{i},j}$ $D_{i,j}$

پیشگفتار

همه فعالیت‌ها در طبیعت شامل برهم‌کنش انرژی و ماده است، بنابراین سال‌ها است که یک بخش ضروری از آموزش شیمی، ایجاد درک صحیحی از اصول اساسی ترمودینامیک است. ترمودینامیک عموما در بسیاری از سیستم‌های مهندسی و جنبه‌های دیگر زندگی وارد می‌شود. برای دیدن برخی از زمینه‌های کاربرد ترمودینامیک، نیازی نیست خیلی دور برویم. در طراحی بسیاری از اسباب و وسایل خانه از اصول ترمودینامیک استفاده می‌شود؛ به عنوان مثال، سیستم‌های گرم کننده و تهویه هوا، یخچال، دستگاه بخور، زودپز، آبگرمکن و... . در مقیاس وسیع‌تر، ترمودینامیک نقش مهمی را در طراحی موتورهای وسایل نقلیه، موتور جت، موشک‌ها، نیروگاه‌های هسته‌ای، صفحات ذخیره کننده انرژی خورشیدی و غیره را ایفا می‌کند.

علاوه بر این ترمودینامیک نقش مهمی را در طراحی تجهیزات و فرآیندهای جداسازی ایفا می‌کند. به علاوه برای طراحی محصولات شیمیایی و بیوشیمیایی و همچنین در زمینه علم مواد مورد نیاز می‌باشد. صنایع شیمیایی و نفت از مصرف کننده‌های قدیمی داده‌های ترمودینامیکی هستند، اگرچه بخش‌های صنعتی دیگر نظیر پلیمر و دارویی نیز امروزه از داده‌های ترمودینامیکی استفاده می‌کنند.

اغلب برای تمام اهداف ذکر شده، آگاهی از خواص ترمودینامیکی ضروری است که این امر با تئوری‌های مولکولی یا انجام آزمایش میسر می‌گردد و ترمودینامیک با مرتبط ساختن خواص فیزیکی به یکدیگر موجب کاهش میزان کارهای تئوری یا تجربی می‌شود.

خواص فیزیکی هر ماده، مستقیما به ماهیت مولکول‌های ماده بستگی دارد. بنابراین جمع‌بندی نهایی خواص فیزیکی سیالات برای درک کامل رفتار مولکول‌ها مورد نیاز می‌باشد که هنوز به‌طور کامل