





دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده شیمی

گروه شیمی فیزیک

عنوان:

بررسی رفتار فاکتور ساختار در k کم سیال زنون در نواحی مختلف
ترمودینامیکی

دانشجو:

تکتم رضائی

استاد راهنما:

دکتر حسین نیکوفرد

استاد مشاور:

دکتر زهرا کلانتر

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

تابستان ۱۳۸۹

تقدیم به

پدر و مادر عزیزم

که همیشه حامی و پشتیبانم بوده و هستند

و

همسرم

که با مهربانی هایش ادامه مسیر را برایم امکان پذیر ساخت.

ابراز تواضع و قدردانی

اکنون که بیاری پروردگار این پایان نامه به اتمام رسیده است بر خود لازم می دانم از استاد راهنمای

گراقتدر جناب آقای دکتر حسین نیکوفرد که همواره حامی و پشتیبان من بوده اند و همچنین استاد مشاور سرکار

خانم دکتر زهرا کلاستر خاضعانه قدردانی نمایم و در نهایت از تمام دوستانم که با تکیه بر دوستی و محبتشان

توانستم این پروژه را به پایان برسانم کمال تشکر را دارم.

چکیده

اخیراً تلاش‌های زیادی برای محاسبه فاکتور ساختار استاتیک، $S(k)$ ، سیالات چگال انجام گرفته است. در کار حاضر ما برای محاسبه فاکتور ساختار استاتیک سیال زنون در حالت‌های مختلف ترمودینامیکی از تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت استفاده کرده‌ایم. نتایج بررسی رفتار فاکتور ساختار محاسبه شده نشان می‌دهد که مدل ارائه شده برای بررسی سیال زنون می‌تواند به خوبی رفتار $S(k)$ در ناحیه‌ی گسترده‌ای از k را برای حالت‌های ترمودینامیکی با چگالی بالا نشان دهد. اما نتایج به دست آمده برای حالت‌های ترمودینامیکی با چگالی پایین بویژه رفتار $S(k)$ در k کم مطلوب نیست. لذا ما از این مدل برای بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در چگالی‌های بالا و در نواحی k بالا استفاده کردیم. مطالعات انجام شده بر روی سیال آرگون از نتایج مشابهی برخوردار است.

از آنجایی که این مدل برای چگالی‌های پایین و در نواحی k کم مناسب نیست لذا ضروری است تا از مدل دیگری برای محاسبه فاکتور ساختار سیال زنون در این نواحی استفاده شود. مدلی که ما برای این منظور از آن بهره گرفته‌ایم بر اساس تعریفی از تابع همبستگی مستقیم بنا شده است که بر اساس آن توانستیم رفتار فاکتور ساختار سیال زنون را به خوبی برای چگالی‌های پایین و در ناحیه k کم پیش‌بینی نمائیم. نتایج حاصل نشان داد که با افزایش دما در نواحی دور از دمای بحرانی مقدار $S(0)$ کاهش می‌یابد. همچنین مشخص گردید که مقادیر $S(k_{\min})$ به صورت خطی با کاهش چگالی کاهش می‌یابد.

در پایان، نتایج حاصل از مدل ارائه شده با نتایج حاصل از مدل‌های دیگر و همچنین تفاوت‌ها و سازگاری‌های بین این مدل‌ها مقایسه گردیده است.

واژه‌های کلیدی: فاکتور ساختار استاتیک، سیال زنون، تابع توزیع شعاعی، سیال کرات سخت، تابع همبستگی مستقیم، سیال آرگون

فهرست مطالب

فصل اول: مباحث مقدماتی

- ۱-۱- مقدمه ۱
- ۲-۱- طبقه‌بندی حالت‌های مواد ۲
- ۱-۲-۱- حالت‌های کلاسیکی ۳
- ۱-۲-۱-۱- جامد ۳
- ۲-۱-۲-۱- مایع ۴
- ۳-۱-۲-۱- گاز ۴
- ۲-۲-۱- حالت‌های دما-پایین ۵
- ۱-۲-۲-۱- ابر سیال‌ها ۵
- ۲-۲-۲-۱- چگالش بوز- انیشتین ۶
- ۳-۲-۲-۱- مولکول‌های ریدبرگ ۶
- ۳-۲-۱- حالت‌های انرژی- بالا ۶
- ۱-۳-۲-۱- پلاسما (گاز یونیزه شده) ۶
- ۲-۳-۲-۱- پلاسمای کوآرک- گلون ۷
- ۳-۱- سیالات چگال ۷
- ۴-۱- مدل‌های پتانسیل ۱۰
- ۱-۴-۱- پتانسیل کره‌ی سخت ۱۰
- ۲-۴-۱- پتانسیل کره نرم ۱۰
- ۳-۴-۱- پتانسیل چاه مربعی ۱۱
- ۴-۴-۱- پتانسیل لنارد- جونز ۱۱
- ۵-۱- زنون ۱۳
- ۱-۵-۱- خصوصیات ۱۳
- ۲-۵-۱- تولید ۱۳
- ۳-۵-۱- ترکیبات ۱۴
- ۱-۳-۵-۱- هالیدها ۱۴
- ۲-۳-۵-۱- اکسیدها و اکسو هالیدها ۱۴
- ۴-۵-۱- کاربردها ۱۴
- ۱-۴-۵-۱- لامپ‌های تخلیه گازی ۱۴
- ۲-۴-۵-۱- لیزرها ۱۵
- ۳-۴-۵-۱- کاربرد در پزشکی ۱۵

فصل دوم: توابع توزیع

- ۱-۲- سیال کرات سخت ۱۶
- ۱-۱-۲- دینامیک کرات سخت ۱۶
- ۲-۲- توابع توزیع ۱۷
- ۱-۲-۲- تابع توزیع شعاعی ۱۸
- ۱-۱-۲-۲- فرمول بندی تابع توزیع شعاعی ۱۸
- ۲-۱-۲-۲- محاسبه خواص ترمودینامیکی از طریق تابع توزیع شعاعی ۲۶
- ۲-۲-۲- تابع همبستگی مستقیم ۲۹
- ۳-۲- تقریب PY و HNC ۳۲
- ۴-۲- نظریه اختلال ۳۸
- ۵-۲- فاکتور ساختار ۴۱

فصل سوم: ارائه مدل و بررسی رفتار فاکتور ساختار

- ۱-۳- ارائه عبارت تحلیلی برای تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت و ترسیم آن ۴۶
- ۲-۳- استفاده از عبارت تحلیلی بیان شده برای به دست آوردن تابع توزیع شعاعی سیال زنون در چگالی‌های مختلف ۵۲
- ۳-۳- بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال زنون با استفاده از مدل سیال کرات سخت در چگالی‌های مختلف ۵۵
- ۴-۳- بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون با استفاده از مدل سیال کرات سخت در چگالی‌های مختلف ۶۲
- ۵-۳- بررسی نتایج مدل سیال کرات سخت در چگالی‌های پایین ۶۸
- ۶-۳- بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در چگالی‌های پایین ۷۰

فصل چهارم: بحث و نتیجه‌گیری ۸۱

- آینده نگری ۹۶
- مراجع ۹۸

فهرست اشکال

- (۱-۱) - نوعی از جامد کریستالی (استرونیوم تیتانات). اتم‌های روشن‌تر اتم‌های Sr و اتم‌های تیره‌تر اتم‌های Ti هستند. ۳
- (۲-۱) - ساختار نوعی مایع تک اتمی کلاسیکی. ۴
- (۳-۱) - نمودار نوعی مربوط به پتانسیل لنارد-جونز. ۱۲
- (۱-۲) - شکل نوعی $g(r)$ برای حالت گاز. ۲۳
- (۲-۲) - شکل نوعی $g(r)$ برای حالت مایع. ۲۴
- (۳-۲) - شکل نوعی $g(r)$ برای یک کریستال. ۲۵
- (۴-۲) - مقایسه رفتار توابع $c(r)$ و $h(r)$ برای یک سیال نوعی. ۳۰
- (۵-۲) - تغییرات تابع همبستگی مستقیم c_{PY} برای سیال کرات سخت بر حسب چگالی کاهش یافته که با اعداد بر روی نمودارها مشخص شده‌اند. ۳۷
- (۶-۲) - رسم منحنی پتانسیل با استفاده از روش WCA. ۴۱
- (۱-۳) - تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت، $g(x)$ ، بر حسب فاصله کاهش یافته، x ، در چگالی کاهش یافته ۰/۴، ۰/۶، ۰/۸ و ۰/۹. ۵۱
- (۲-۳) - نمودار تغییر سطح زیر اولین پیک تابع توزیع شعاعی در برابر چگالی کاهش یافته. ۵۲
- (۳-۳) - نمودار تابع توزیع شعاعی سیال زنون در چگالی‌های ۸/۳۸ mol/L، ۱۵/۲۱ mol/L و ۱۶/۳۵ mol/L و ۱۸/۴۶ mol/L. ۵۴
- (۴-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون با مدل کرات سخت در چگالی $\rho = ۸/۳۸ \text{ mol/L}$. ۵۹
- (۵-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون با مدل کرات سخت در چگالی $\rho = ۱۶/۳۵ \text{ mol/L}$. ۶۰
- (۶-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون با مدل کرات سخت در چگالی $\rho = ۱۸/۴۶ \text{ mol/L}$. ۶۱
- (۷-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون با مدل کرات سخت در چگالی $\rho = ۱۶/۷۵ \text{ mol/L}$. ۶۵
- (۸-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون با مدل کرات سخت در چگالی $\rho = ۲۴/۵۸ \text{ mol/L}$. ۶۶
- (۹-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون با مدل کرات سخت در چگالی $\rho = ۳۳/۵۱ \text{ mol/L}$. ۶۷
- (۱۰-۳) - تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت، $g(x)$ ، بر حسب فاصله کاهش یافته، x ، در چگالی کاهش یافته ۰/۰۷۳. ۶۸
- (۱۱-۳) - رفتار فاکتور ساختار در چگالی کاهش یافته ۰/۰۷۳ بر حسب بردار موج کاهش یافته، $k\sigma$. ۶۹
- (۱۲-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در k کم بر حسب بردار موج در دمای ۲۶۰ K و چگالی ۰/۳۳ mol/L. ۷۳
- (۱۳-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در k کم بر حسب بردار موج در دمای ۲۸۵ K و چگالی ۰/۳۳ mol/L. ۷۴

- (۳-۱۴) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در k کم بر حسب بردار موج در دمای 300 K و چگالی 0.33 mol/L ۷۵
- (۳-۱۵) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در k کم بر حسب بردار موج در دمای 260 K و چگالی 0.76 mol/L ۷۶
- (۳-۱۶) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در k کم بر حسب بردار موج در دمای 285 K و چگالی 0.76 mol/L ۷۷
- (۳-۱۷) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در k کم بر حسب بردار موج در دمای 300 K و چگالی 0.76 mol/L ۷۸
- (۳-۱۸) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در k کم بر حسب بردار موج در دمای 285 K و چگالی 2.28 mol/L ۷۹
- (۳-۱۹) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در k کم بر حسب بردار موج در دمای 300 K و چگالی 3.04 mol/L ۸۰
- (۴-۱) رفتار تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت و نتایج شبیه‌سازی ورلت در چگالی کاهش یافته 0.75 سیال حقیقی ۸۱
- (۴-۲) رفتار تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت و نتایج شبیه‌سازی ورلت در چگالی کاهش یافته 0.85 سیال حقیقی ۸۲
- (۴-۳) رفتار تابع توزیع شعاعی سیال آرگون با مدل کرات سخت و داده‌های تجربی یارنل در چگالی $35/38\text{ mol/L}$ ۸۴
- (۴-۴) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون با استفاده از مدل سیال کرات سخت در چگالی $8/38\text{ mol/L}$ و چگالی $18/46\text{ mol/L}$ ۸۵
- (۴-۵) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در چگالی $16/35\text{ mol/L}$ با استفاده از مدل سیال کرات و مدل مرجع [۸۶] ۸۶
- (۴-۶) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در چگالی $18/46\text{ mol/L}$ با استفاده از مدل سیال کرات سخت و مدل مرجع [۸۶] ۸۷
- (۴-۷) رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون با استفاده از مدل سیال کرات سخت در چگالی mol/L و چگالی $16/75$ و چگالی $33/51\text{ mol/L}$ ۸۸
- (۴-۸) رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون در چگالی $24/58\text{ mol/L}$ با استفاده از مدل سیال کرات سخت و مدل مرجع [۲۲] ۸۹
- (۴-۹) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون برای چگالی $2/28\text{ mol/L}$ در دماهای 260 K ، 285 K و 300 K ۹۱
- (۴-۱۰) تغییرات $S(0)$ در برابر دما در چگالی ثابت 0.76 mol/L ۹۲
- (۴-۱۱) تغییرات $S(0)$ در برابر دما در چگالی ثابت 0.33 mol/L ۹۲
- (۴-۱۲) تغییرات $S(k_{\min})$ در برابر چگالی در دمای 260 K ۹۳

- ۹۴.....(۱۳-۴) تغییرات $S(k_{\min})$ در برابر چگالی در دمای ۲۸۵ K
- ۹۴.....(۱۴-۴) تغییرات $S(k_{\min})$ در برابر چگالی در دمای ۳۰۰ K
- (۱۵-۴) رفتار فاکتور ساختار بر حسب بردار موج کاهش یافته، k ، در چگالی ۰/۳۳ mol/L بر اساس
- ۹۵..... [۸۷] مدل پیشنهادی و مدل مرجع

فهرست جداول

- ۳۵.....(۱-۲) - طبقه‌بندی انواع خوشه‌های مولکولی در بسط نموداری تابع $c(r)$ معادله (۲-۳۲).....
- ۴۹.....(۱-۳) - داده‌های مربوط به تابع توزیع شعاعی چندین چگالی کاهش یافته.....
- ۵۰.....(۲-۳) - داده‌های مربوط به تابع توزیع شعاعی چندین چگالی کاهش یافته.....
- ۵۳.....(۳-۳) - تابع توزیع شعاعی سیال زنون با مدل کرات سخت در چگالی‌های مختلف.....
- ۵۶.....(۴-۳) - داده‌های $S(k)$ سیال زنون در چگالی $8/38 \text{ mol/L}$
- ۵۷.....(۵-۳) - داده‌های $S(k)$ سیال زنون در چگالی $16/35 \text{ mol/L}$
- ۵۸.....(۶-۳) - داده‌های $S(k)$ سیال زنون در چگالی $18/46 \text{ mol/L}$
- ۶۲.....(۷-۳) - داده‌های $S(k)$ سیال آرگون در چگالی $16/75 \text{ mol/L}$
- ۶۳.....(۸-۳) - داده‌های $S(k)$ سیال آرگون در چگالی $24/58 \text{ mol/L}$
- ۶۴.....(۹-۳) - داده‌های $S(k)$ سیال آرگون در چگالی $33/51 \text{ mol/L}$
- ۷۱.....(۱۰-۳) - پارامتر بهینه شده B در چگالی‌های مختلف در دمای 260 K و قطر مولکولی $3/130 \text{ \AA}^0$
- ۷۲.....(۱۱-۳) - پارامتر بهینه شده B در چگالی‌های مختلف در دمای 285 K و قطر مولکولی $3/037 \text{ \AA}^0$
- ۷۲.....(۱۲-۳) - پارامتر بهینه شده B در چگالی‌های مختلف در دمای 300 K و قطر مولکولی $2/880 \text{ \AA}^0$

۱-۱- مقدمه

حالت‌های ماده شکل‌های مشخصی هستند که فازهای متفاوت یک ماده به خود می‌گیرد. تمایز بین حالت‌های ماده بر اساس تفاوت‌های کیفی در خواص توده آن استوار است. جامد حالتی است که در آن ماده حجم و شکل ثابتی دارد. مایع حالتی است که ماده حجم ثابتی دارد اما شکل ظرفی که در آن قرار گرفته را به خود می‌گیرد و گاز حالتی است که در آن ماده منبسط می‌شود تا هر حجمی که موجود است را اشغال کند. اخیراً تفاوت‌ها میان حالت‌های یک ماده بر اساس تفاوت در وابستگی‌های مولکولی آنها تعبیر می‌شود که در این صورت تعاریف زیر ارائه می‌گردد:

جامد حالتی است که در آن جاذبه‌های بین مولکولی، مولکول‌ها را در پیوندهای فضایی ثابت نگه می‌دارد.

مایع حالتی است که در آن جاذبه‌های بین مولکولی، مولکول‌ها را در مجاورت هم قرار می‌دهد اما در ارتباطات فضایی ثابت نگه نمی‌دارد.

گاز حالتی است که در آن مولکول‌ها دور از هم هستند و جاذبه‌های بین مولکولی اثر نسبتاً کمی بر حرکات آنها دارند.

پلازما^۱، یک گاز یونیزه شده است که در دماهای بالا ایجاد می‌شود. نیروهای بین مولکولی که توسط جاذبه‌ها و دافعه‌های یونی ایجاد می‌شوند به این ترکیبات خواص ویژه‌ای می‌دهند، به همین دلیل پلازما به عنوان چهارمین حالت ماده معرفی می‌شود [۱ و ۲]. شکل‌هایی از ماده که از مولکول‌ها تشکیل نشده و به وسیله نیروهای مختلفی ایجاد گردیده‌اند نیز می‌توانند به عنوان حالت‌های متفاوتی از ماده در نظر گرفته شوند. پلاسمای کوآرک- گلون^۲ [۱۰] و چگالش فرمیونی^۳ [۱۰] از این قبیل هستند.

^۱- Plasma

^۲-Quark-gluon

^۳- Fermionic condensate

همچنین ممکن است حالت‌های ماده تحت عنوان انتقالات فازی^۱ تعریف شوند. یک انتقال فاز، تغییر در ساختار را نشان می‌دهد و به وسیله یک تغییر ناگهانی در خواص مشخص می‌شود. با این تعریف، حالت مشخص ماده شامل مجموعه حالت‌هایی است که از مجموعه حالت‌های دیگر به وسیله یک انتقال فاز متمایز می‌شود. آب می‌تواند چندین حالت جامد مشخص داشته باشد [۳].

پیدایش ابر رسانایی با انتقال فاز همراه است بنابراین حالت‌های ابررسانا^۲ نیز وجود دارند. علاوه بر این، حالت‌های کریستالی مایع و فرومغناطیس^۳ به وسیله انتقالات فازی نشان‌گذاری می‌شود و خواص مشخصی دارند.

۱-۲- طبقه بندی حالت‌های مواد:

چندین حالت مختلف برای مواد تعریف می‌شود که می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

الف) حالت‌های کلاسیکی که خود به سه دسته جامد، مایع و گاز طبقه‌بندی می‌شوند.

ب) حالت‌های غیر کلاسیکی از ماده که می‌توان به شیشه کریستالی^۴، مایع کریستالی و منظم شده توسط نیروی مغناطیسی^۵ اشاره کرد.

پ) حالت‌های دما-پایین از جمله ابر سیال‌ها^۶ و چگالش بوز-اینشتین^۷ [۹] و مولکول‌های ریدبرگ^۸ [۹].

ت) حالت‌های انرژی بالا که شامل پلاسما و پلاسمای کوآرک-گلون [۱۰] می‌باشد.

با توجه به اهمیت حالت‌های کلاسیکی در ادامه به شرح تفصیلی این حالت‌ها پرداخته شده و نیز تعاریف مختصری از حالت‌های دما-پایین و انرژی-بالا بیان شده است.

¹ - Phase transition

² - Super conductor

³ - Ferromagnetic

⁴ - Crystalline. Vs. glassy

⁵ - Magnetically-ordered

⁶ - Super fluids

⁷ - Bose-Einstein condensates

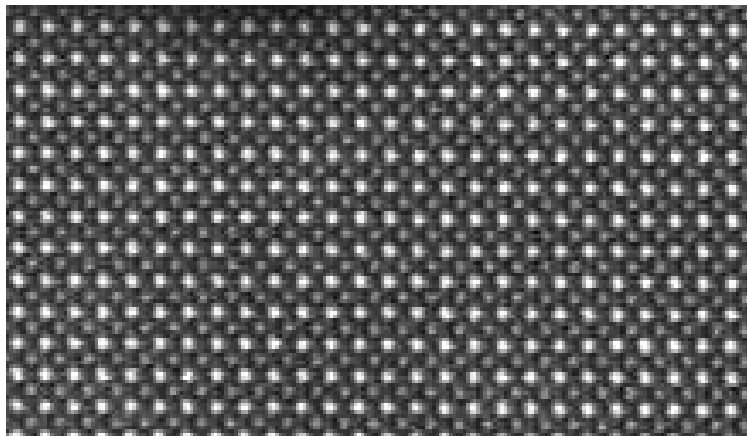
⁸ - Rydberg molecules

۱-۲-۱- حالت‌های کلاسیکی:

۱-۱-۲-۱- جامد

در جامدات ذرات تشکیل دهنده ماده (یون‌ها، اتم‌ها یا مولکول‌ها) نزدیک یکدیگر قرار دارند. نیروهای بین ذرات بسیار قوی است، به همین دلیل ذرات نمی‌توانند آزادانه حرکت کنند و تنها حول موقعیت تعادلی خود ارتعاش می‌کنند.

بنابراین یک جامد شکل پایدار، مشخص و حجم معینی دارد. جامدات زمانی تغییر شکل می‌یابند که نیرویی بر آنها وارد شود مانند زمانی که شکسته می‌شوند یا تراش می‌خورند. در جامدات کریستالی، ذرات (اتم‌ها، مولکول‌ها یا یون‌ها) در ساختار سه بعدی منظم آرایش یافته‌اند. تعداد زیادی ساختارهای کریستالی متفاوت وجود دارد و یک ماده معین می‌تواند بیش از یک ساختار داشته باشد. در شکل (۱-۱) نوعی از جامد کریستالی نشان داده شده است [۴].

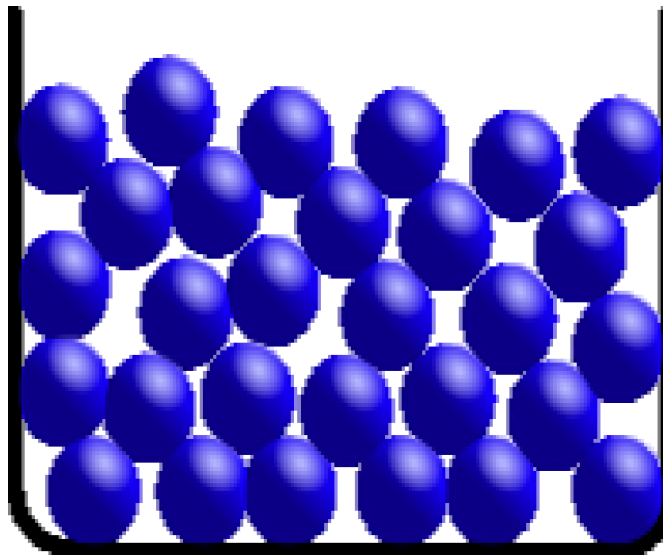


شکل (۱-۱) - نوعی از جامد کریستالی (استرونیوم تیتانات). اتم‌های روشن‌تر اتم‌های Sr و اتم‌های تیره‌تر اتم‌های Ti هستند [۴].

در فرآیند ذوب، جامدات به مایعات تبدیل می‌شوند. همچنین جامدات می‌توانند به طور مستقیم از طریق فرآیند تصعید به گاز تبدیل شوند [۴].

۱-۲-۱-۲-۱- مایع

مایعات در دما و فشار ثابت حجم معینی دارند. زمانی که جامد بیش از نقطه ذوب حرارت داده شود به مایع تبدیل می‌گردد. با وجود اینکه در مایعات نیروهای بین مولکولی (یا بین اتمی یا بین یونی) دارای اهمیت هستند اما مولکول‌ها انرژی کافی برای حرکت کردن دارند و ساختار مایع متحرک است. این بدان معنی است که شکل مایع معین نیست و به وسیله ظرفی که در آن قرار گرفته است تعیین می‌شود. حجم مایع معمولاً از جامد متناظر با آن بیشتر است. تنها استثنائی که در این مورد شناخته شده آب است [۵]. در شکل (۱-۲) ساختار نوعی از مایع تک اتمی کلاسیکی نمایش داده شده است [۵].



شکل (۱-۲) - ساختار نوعی مایع تک اتمی کلاسیکی [۵].

۱-۲-۱-۳-۱- گاز

در یک گاز مولکول‌ها به قدر کافی انرژی جنبشی دارند و اثر نیروهای بین مولکولی اندک است (برای گاز ایده آل صفر است) و فاصله معمول بین مولکول‌های همسایه بزرگتر از اندازه مولکولی

است. یک گاز شکل یا حجم معینی ندارد اما تمام حجم ظرفی که در آن محبوس شده است را اشغال می‌کند.

مایع ممکن است با حرارت دادن تا نقطه جوش در فشار ثابت یا به وسیله کاستن فشار در دمای ثابت به گاز تبدیل شود. گاز در دماهای پایین‌تر از دمای بحرانی^۱، بخار نامیده می‌شود و می‌تواند تنها با متراکم سازی و بدون سرد کردن به مایع تبدیل شود. بخار می‌تواند در تعادل با مایع (یا جامد) وجود داشته باشد، در این مورد فشار گاز با فشار بخار مایع (یا جامد) برابر است [۶].

در گازهای ایده آل، توزیع ذرات کاملاً تصادفی است و مولکول‌ها دارای حرکات انتقالی سریع هستند. در این سیستم‌ها برهم‌کنش بین مولکولی بسیار ضعیف و حجم مولکول‌ها در مقایسه با فاصله بین آنها بسیار کوچک است به طوری که به عنوان یک مدل ساده و قابل قبول می‌توان از برهم‌کنش بین مولکولی صرف نظر کرد و با استفاده از معادله حالت گاز ایده آل، $PV=nRT$ ، خواص ترمودینامیکی گازها را به دست آورد (در این معادله P, V, T, n, R به ترتیب نماد فشار، حجم، دما، تعداد مول و ثابت جهانی گازها است) [۷].

در مهندسی شیمی سیال ابر بحرانی^۲ (SCF) به گازی گفته می‌شود که دما و فشار آن بالای دما و فشار بحرانی قرار دارد. سیال ابر بحرانی خواص فیزیکی یک گاز را دارد اما در بعضی موارد به دلیل چگالی بالا خواص حلال را دارد که این ویژگی منجر به کاربردهای مفیدی برای آن می‌شود [۶].

۱-۲-۲- حالت‌های دما-پایین:

۱-۲-۲-۱ ابرسیال‌ها

بعضی از مایعات در نزدیکی صفر مطلق، حالت دیگری تحت عنوان ابر سیال را تشکیل می‌دهند که گرانبوی صفر یا سیالیت نامحدود^۳ دارد. در سال ۱۹۳۷ کشف شد که هلیوم یک ابر سیال زیر دمای $2/17\text{ K}$ تشکیل می‌دهد [۸].

^۱- Critical temperature

^۲- Super critical fluid

^۳- Infinite fluidity

۱-۲-۲-۲- چگالش بوز-انیشترین

در سال ۱۹۲۴ بوز^۱ و آلبرت انیشترین^۲ [۹] چگالش بوز-انیشترین را پیش‌بینی کردند که بعضی از مواقع به پنجمین حالت ماده اشاره دارد. در فاز گازی، چگالش بوز-انیشترین برای چندین سال یک تئوری اثبات نشده باقی ماند [۹].

۱-۲-۲-۳- مولکول‌های ریدبرگ

یکی از حالت‌های کم‌ثبات پلاسما غیر ایده آل، مولکول‌های ریدبرگ است که به محض تراکم اتم‌های برانگیخته تشکیل می‌شود. این اتم‌ها همچنین اگر به دمای مشخصی برسند می‌توانند به یون-ها و الکترون‌ها تبدیل شوند [۹].

۱-۲-۳- حالت‌های انرژی-بالا:

۱-۳-۲-۱- پلاسما (گاز یونیزه شده)

پلاسما یا گاز یونیزه شده می‌تواند در دماهایی از چندین هزار درجه سانتیگراد وجود داشته باشد. دو مثال از پلاسما، هوای باردار تولید شده توسط آذرخش و یک ستاره مانند خورشید است. به محضی که گاز به اندازه کافی گرم می‌شود، الکترون‌ها از اتم‌ها خارج شده و در حضور الکترون‌های آزاد پلاسما دارای بار الکتریکی می‌شود [۱۰].

بارهای الکتریکی آزاد سبب می‌گردد پلاسما از نظر الکتریکی رسانا شده و به شدت به میدان‌های الکترومغناطیس پاسخ دهد. در دماهای بسیار بالا، فرض می‌شود که تمام الکترون‌ها آزاد هستند و پلاسما دارای انرژی بسیار بالا، به طور کلی به صورت هسته‌های شناور در دریایی از الکترون‌ها آشکار می‌شود. پلاسما معمولترین حالت ماده شفاف در جهان است. پلاسما می‌تواند به عنوان یک گاز با ذرات یونیزه شده در نظر گرفته شود، اما وجود نیروهای بین‌یونی قدرتمند در آن منجر به

^۱- Bose

^۲- Albert Einstein

خصوصیات متفاوتی می‌شود. بنابراین پلازما معمولاً به عنوان یک حالت متفاوت از ماده در نظر گرفته می‌شود [۱۰].

۱-۲-۳-۲- پلاسمای کوآرک-گلون

پلاسمای کوآرک-گلون حالتی از ماده است که در سال ۲۰۰۰ در CERN کشف شد. کوآرک‌ها^۱ که معمولاً تمایل دارند پروتون‌ها و نوترون‌ها را بسازند در این نوع حالت رها هستند و می‌توانند به صورت منفرد مشاهده شوند [۱۰].

در بین حالت‌های مختلف مواد، گازهای حقیقی و مایعات در دسته سیالات چگال قرار می‌گیرند که این سیالات در زیر به تفصیل معرفی می‌شوند.

۱-۳- سیالات چگال

در سیستم‌های چگال، مولکول‌ها به یکدیگر نزدیک‌اند بنابراین برهم‌کنش بین آنها اهمیت زیادی دارد و بسیاری از خواص ماده به چنین برهم‌کنش‌هایی مرتبط است. بررسی سیالات چگال از نقطه نظر مولکولی مشکل است، زیرا توزیع ذرات در سیستم نه مانند گازهای رقیق به صورت تصادفی است و نه مانند جامدات در کل شبکه به صورت منظم توزیع شده‌اند. به عبارت دیگر در سیستم‌های چگال نه بی‌نظمی کامل (توزیع تصادفی) و نه نظم سراسری (حالت بلوری) وجود دارد بلکه یک نظم موضعی^۲ حاکم است. سیالات چگال مانند مایعات دو ویژگی مهم دارند. اول اینکه وجود نیروهای دافعه باعث می‌شود تراکم به‌سختی انجام شود. دوم اینکه به نظر می‌رسد برهم‌کنش مؤثر یکسانی بین جفت‌های تشکیل دهنده سیستم حاکم باشد به طوری که تمام این سیستم‌ها از برخی قاعده بندی-های یکسان تبعیت می‌کنند [۱۱].

هر چند در حال حاضر تلاش‌های زیادی برای بررسی بسیاری از خواص سیالات چگال صورت می‌گیرد ولی تحقیقات در این زمینه به توسعه و شناخت بیشتری احتیاج دارد. به عنوان مثال برخی از

^۱- Quarks

^۲- Local ordering

مسایل در ارتباط با انتقال فازها، پدیده بحرانی، فرآیندهای برگشت ناپذیر و انتقالی هنوز حل نشده باقی مانده است [۱۲و۷].

هدف نهایی در مکانیک آماری^۱، برقراری ارتباط بین خواص ماکروسکوپی قابل مشاهده با جزئیات بین مولکولی ذرات سیستم است [۱۴و۱۳]. مطالعه ساختار سیالات چگال با استفاده از آزمایشات پراکندگی اشعه-X و تابش نوترونی و پی بردن به نظم کوتاه برد در این سیالات موجب ارائه نظریه‌های جدیدی بر اساس توابع توزیع گردیده است [۱۶و۱۵].

یکی از این توابع، تابع همبستگی جفت^۲ یا تابع توزیع شعاعی^۳ (RDF)، با نماد $g(r)$ است. تابع توزیع شعاعی ارتباط اصلی بین خواص ماکروسکوپی و برهم‌کنش‌های بین مولکولی سیالات است [۱۷]. همچنین تابع توزیع شعاعی، مفیدترین خصوصیت در مطالعه ساختار یک ماده است و احتمال یافتن یک مولکول در فاصله مشخصی از یک مولکول مرکزی دلخواه را نشان می‌دهد [۱۸].

تابع همبستگی جفت را می‌توان به طور تجربی از آزمایشات پراکندگی به دست آورد ولی به دلیل محدودیت‌های آزمایشگاهی، تلاش‌های فراوانی برای محاسبه این تابع از طریق روش‌های نظری انجام شده است [۱۹و۲۰]. یکی از این روش‌ها، حل معادله اورنشتین-زرنیک^۴ [۲۱و۱۳و۷]، OZ، است که در این روش سعی می‌شود تابع همبستگی جفت بر اساس مدل پتانسیل محاسبه شود [۲۱و۱۳و۷].

در روش فوق تابع همبستگی کل^۵، $h(r) = g(r) - 1$ ، به دو بخش تقسیم می‌شود:

۱- اثر مستقیم مولکول ۱ بر مولکول ۲ که با تابع همبستگی مستقیم^۶ (DCF)، $c(r)$ ، نشان داده می‌شود و کوتاه برد است.

۲- اثر غیر مستقیم مولکول ۱ که توسط مولکول ۳ تحت تأثیر قرار می‌گیرد و بر ارتباط مولکول ۱ با مولکول ۲ تأثیر می‌گذارد [۲۲].

^۱- Statistical mechanics

^۲- Pair correlation function

^۳- Radial distribution function

^۴-Ornstein-Zernike

^۵- Total correlation function

^۶- Direct correlation function

تابع همبستگی مستقیم در مقایسه با تابع توزیع شعاعی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. بر خلاف تابع توزیع شعاعی که در ناحیه بحرانی بلند برد است، تابع همبستگی مستقیم، DCF، در تمام حالت‌های ترمودینامیکی حتی نزدیک ناحیه بحرانی کوتاه برد است [۷ و ۲۳].

دیگر اینکه تمام خواص ترمودینامیکی سیالات چگال را می‌توان با استفاده از این تابع و بدون در نظر گرفتن تقریب جمع پذیری جفت گونه^۱ که در چگالی‌های بالا اعتبار ندارد، به دست آورد [۲۱ و ۲۴]. همچنین تابع همبستگی مستقیم به‌طور تجربی از اندازه‌گیری فاکتور ساختار^۲ سیال، $S(k)$ ، در آزمایشات پراکندگی قابل تعیین است [۲۵ و ۲۶].

در فیزیک ماده متراکم و کریستالوگرافی^۳، فاکتور ساختار استاتیک، توصیف ریاضی از این موضوع است که یک ماده چگونه پرتو برخوردی را پراکنده می‌سازد. فاکتور ساختار ابزار مفیدی در تفسیر الگوهای تداخلی بدست آمده از آزمایشات پراکندگی اشعه-X و تابش نوترونی و الکترونی است. فاکتور ساختار استاتیک بدون تجزیه کردن انرژی پراکنده شده فوتون‌ها/الکترون‌ها/نوترون‌ها اندازه‌گیری می‌شود. اندازه‌گیری انرژی تجزیه شده فاکتور ساختار دینامیک را بدست می‌دهد [۲۷].

امروزه تلاش‌های فراوانی برای پیش‌بینی فاکتور ساختار صورت می‌گیرد. این کار هم با استفاده از محاسبات شبیه‌سازی^۴ و دینامیک مولکولی^۵ و هم از محاسبه توابع همبستگی بویژه تابع همبستگی مستقیم در نظریه‌های نوین سیالات چگال قابل انجام است [۲۸ و ۲۹].

با داشتن معادله تحلیلی تابع همبستگی مستقیم، $c(r)$ ، و به کمک رابطه OZ می‌توان رفتار $S(k)$ را پیش‌بینی نمود. اما موفقیت هر یک از روش‌ها به انتخاب مدل پتانسیل مناسب برای سیستم چگال بستگی دارد. به همین دلیل در ادامه به معرفی چندین مدل پتانسیل پرداخته شده است.

¹- Pairwise additivity

²- Structure factor

³- Crystallography

⁴- Simulation

⁵- Molecular dynamics